

Численное решение двумерного уравнения Шредингера в базисе эрмитовых конечных элементов

Е. А. ДЕЙ

Введение

Стационарное двумерное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad -\infty < x < \infty, \quad -\infty < y < \infty \quad (1)$$

является теоретической основой для описания квантовых систем, многие из которых исследуются численными методами [1].

Для численного решения задач квантовой механики широко используется метод конечных элементов, причем как в теории рассеяния [2], так и для нахождения энергетического спектра связанных состояний [3]. В подавляющем большинстве работ применяются конечные элементы, функции формы которых являются интерполяционными полиномами Лагранжа определенного порядка. При этом обеспечивается непрерывность функции численного решения, однако частные производные решения не являются непрерывными. Известен и другой тип конечных элементов, функции формы которых строятся на основе интерполяционных полиномов Эрмита [4]. Их применение приводит к непрерывности первой, а при необходимости, второй и более старших производных в численном решении.

Важность выбора наиболее эффективного базиса для метода конечных элементов объясняется существенным ростом вычислительной сложности задачи при увеличении размерности системы, так как порядок обрабатываемых матриц равен произведению числа функций формы, используемых по каждой переменной.

Данная работа посвящена исследованию практической точности эрмитовых конечных элементов при решении двумерного уравнения Шредингера для связанных состояний. С этой целью выполнена программная реализация метода, получено численное решение ряда тестовых задач и дана оценка практического порядка сходимости при выборе эрмитовых конечных элементов с различным количеством узлов при непрерывности первых производных в каждом узле. Показано, что применение эрмитовых конечных элементов более высокого порядка позволяет получать численное решение стационарного уравнения Шредингера на персональных компьютерах с лучшей точностью при меньшем объеме используемой оперативной памяти.

1 Описание расчетной схемы

Численное решение задачи реализуется в конечной области $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$, $y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$, размеры которой выбираются достаточно большими, чтобы не влиять на вычисляемые собственные значения, так что граничные условия принимают вид

$$\Psi(x_{\min}, y) = 0; \quad \Psi(x_{\max}, y) = 0, \quad \Psi(x, y_{\min}) = 0; \quad \Psi(x, y_{\max}) = 0. \quad (2)$$

Для аппроксимации численного решения уравнения используем прямоугольные конечные элементы, функции формы которых получаются в виде произведения одномерных функций формы по каждой независимой переменной. В локальных координатах $-1 \leq \alpha \leq 1$, $-1 \leq \beta \leq 1$

$$\varphi_{i,j}(\alpha, \beta) = \varphi_i(\alpha) \varphi_j(\beta), \quad (3)$$

причем одномерные функции формы являются полиномами, коэффициенты которых обеспечивают выполнение непрерывности функции и ее производной в узлах. В одномерном случае при выборе U узлов на каждом элементе это означает, что искомую функцию можно представить в виде

$$f(\alpha) = \sum_{k=1}^U (f_k \varphi_k(\alpha) + f'_k \varphi_{U+k}(\alpha)), \quad (4)$$

где эрмитовы базисные функции удовлетворяют следующим условиям интерполяции

$$\varphi_k(\alpha_l) = \delta_{kl}; \quad \left. \frac{d\varphi_{U+k}}{d\alpha} \right|_{\alpha_l} = \delta_{kl}; \quad k, l = 1..U. \quad (5)$$

При этом базисные функции являются полиномами порядка $P=2U-1$.

В подходе Галеркина представим численное решение уравнения (1) в виде суперпозиции функций формы конечных элементов в глобальных координатах

$$\Psi(x, y) = \sum_a \Psi_a \varphi_a(x, y), \quad (6)$$

где a – глобальный номер узла в двумерной области.

Для получения системы расчетных соотношений подставим выражение (6) для искомой волновой функции в уравнение (1). После выполнения стандартного для метода Галеркина умножения на весовые (они же – базисные) функции (3) и перехода к слабой формулировке метода взвешенных невязок получаем обобщенную задачу на собственные значения

$$A\Psi = \varepsilon B\Psi, \quad (7)$$

где матрицы A, B вычисляются суммированием отдельных конечноэлементных матриц

$$A = \sum_{e=1}^E A^{(e)}; \quad B = \sum_{e=1}^E B^{(e)}, \quad (8)$$

элементы которых вычисляются по формулам

$$A_{i,j}^{(e)} = \frac{\hbar^2}{2m} \iint_{(e)} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dx dy + \frac{\hbar^2}{2m} \iint_{(e)} \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} dx dy + \iint_{(e)} \varphi_i \varphi_j V(x, y) dx dy, \quad B_{i,j}^{(e)} = \iint_{(e)} \varphi_i \varphi_j dx dy. \quad (9)$$

Учет граничных условий реализуется присвоением узловым значениям заданных значений и исключением строк и столбцов с соответствующими номерами из разреженных матриц A и B , определяющих обобщенную задачу на собственные значения.

Решение задачи (7) позволяет получить собственные значения энергии ε_n и соответствующие собственные векторы $\Psi_a^{(n)}$, содержащие значения функции и ее частных производных в узлах прямоугольной сетки.

2 Результаты вычислений

В качестве тестовой задачи рассмотрено уравнение Шредингера для двумерного гармонического осциллятора. Эта задача позволяет протестировать метод для случая гладкого запирающего потенциала. В системе единиц $\hbar=1, m=0.5$ потенциал имеет вид $V(x, y) = 0.5(x^2 + y^2)$, а точные собственные значения $\varepsilon_{k,m} = k + m + 1, k, m = 0, 1, \dots$. Вычисления были выполнены на персональном компьютере с процессором 1,6 ГГц с использованием пакета Matlab v6.5.

В таблице приведены результаты для 1-го и 10-го уровней энергии двумерного гармонического осциллятора (точные значения $\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_{10} = 4$) при использовании в качестве базисных эрмитовых полиномов с U узлами. Указано также количество E элементов по каждой переменной, порядок N матриц в задаче на собственные значения, вычисленные значения энергии ε_i и абсолютные погрешности $\delta_i = \varepsilon_i^{числ} - \varepsilon_i^{точн}$.

| U | E | P | N | ε_i | δ_i |
|---|----|---|------|-----------------|----------------|
| 2 | 10 | 3 | 484 | 1.00015370 | 0.00015370 |
| | | | | 4.01696946 | 0.01696946 |
| 2 | 15 | 3 | 1024 | 1.00003057 | 0.00003057 |
| | | | | 4.00129825 | 0.00129825 |
| 2 | 20 | 3 | 1764 | 1.00000674 | 0.00000674 |
| | | | | 4.00033193 | 0.00033193 |
| 2 | 30 | 3 | 3844 | 1.0000007227 | 0.0000007227 |
| | | | | 4.0000400797 | 0.0000400797 |
| 2 | 40 | 3 | 6724 | 1.0000001398 | 0.0000001398 |
| | | | | 4.0000082274 | 0.0000082274 |
| 3 | 5 | 5 | 484 | 1.0001622005 | 0.0001622005 |
| | | | | 4.0052908329 | 0.0052908329 |
| 3 | 10 | 5 | 1764 | 1.0000000110 | 0.0000000110 |
| | | | | 4.0000233017 | 0.0000233017 |
| 3 | 20 | 5 | 6724 | 1.000000000144 | 0.000000000144 |
| | | | | 4.000000023621 | 0.000000023621 |
| 4 | 5 | 7 | 1024 | 1.000000566056 | 0.000000566056 |
| | | | | 4.000035275875 | 0.000035275875 |
| 4 | 10 | 7 | 3844 | 1.000000000009 | 0.000000000009 |
| | | | | 4.000000009893 | 0.000000009893 |

Сопоставление результатов, соответствующих одинаковому количеству неизвестных при $U=2$ ($E=10, 20, 40$) и при $U=3$ ($E=5, 10, 20$), а также для случаев $U=2$ ($E=15, 30$) и $U=4$ ($E=5, 10$) показывает явное преимущество конечных элементов, содержащих несколько внутренних узлов и, соответственно, использующих для построения функций формы полиномы более высоких порядков.

Метод при $U=4, E=10$ обеспечивает высокую точность и следующих собственных значений. Так, для 55-го уровня энергии (точное значение $\varepsilon_{55} = 10$) получаем величину 10.0000541.

По результатам расчетов можно получить практическую оценку порядка сходимости метода конечных элементов при вычислении спектра двумерного уравнения Шредингера с использованием эрмитовых конечных элементов с двумя степенями свободы в узле. Предполагая, что при достаточно большом количестве N погрешность в вычислении собственного значения пропорциональна N^{-2s} , получаем

$$s = 0,5 \log_2 \left(\frac{\varepsilon^{(N)} - \varepsilon^{(2N)}}{\varepsilon^{(2N)} - \varepsilon^{(4N)}} \right). \quad (10)$$

Применяя эту формулу для оценки 10-го энергетического уровня гармонического осциллятора, получаем для элементов с двумя узлами $s=2,84$ и для элементов с тремя узлами $s=3,91$.

В качестве теста для решения двумерного уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом рассмотрена S-волновая модель атоме гелия, в которой все угловые моменты полагаются равными нулю [5]. В пренебрежении взаимодействием электронов уравнение Шредингера имеет вид

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{x} + \frac{1}{y} + E \right) \Psi(x, y) = 0 \quad (11)$$

Точное значение для основного уровня энергии в этой модели равно $\varepsilon_1 = -4$. В ходе численного решения интегралы вычислялись в локальных координатах методом Гаусса по 24 узлам. При $x_{\min}=y_{\min}=0, x_{\max}=y_{\max}=7$ получены следующие численные результаты

| U | E | P | N | ε_i |
|---|----|---|------|-----------------|
| 2 | 10 | 3 | 484 | -3.9935085227 |
| 2 | 20 | 3 | 1764 | -3.9998149211 |
| 3 | 5 | 5 | 484 | -3.9997670506 |
| 3 | 10 | 5 | 1764 | -3.9999993908 |
| 3 | 20 | 5 | 6724 | -3.9999999952 |

Описанная реализация метода конечных элементов была использована далее для численного решения двумерного уравнения Шредингера с потенциалом Хенона-Хейлеса

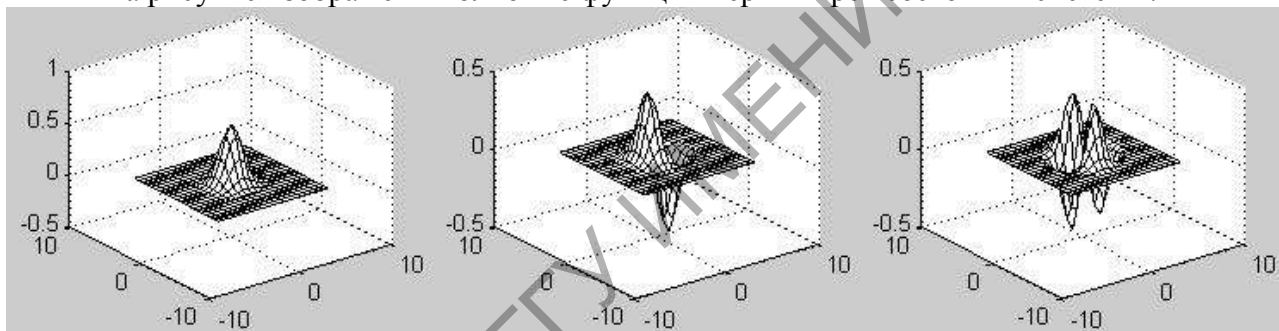
$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + (0.0125)^{1/2} \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right). \quad (12)$$

Вычисления были проведены для следующих значений параметров: $-7.5 < x < 7.5$; $-7.5 < y < 7.5$; $U=4$; $P=7$; $E=10$; $N=3844$.

В таблице приведены значения первых пяти энергетических уровней

| ε_1 | ε_2 | ε_3 | ε_4 | ε_5 |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 0.998594772 | 1.990076764 | 1.990076764 | 2.956243020 | 2.985326438 |

На рисунке изображены волновые функции первых трех состояний системы.



Заключение

Существенную сложность при реализации метода конечных элементов при решении двумерного уравнения Шредингера представляет высокий порядок глобальной матрицы жесткости. При заданном объеме оперативной памяти компьютера это ставит ограничение на количество реально используемых конечных элементов. Один из способов уменьшения порядка матрицы и получения достаточно точных результатов на обычном персональном компьютере – использование эрмитовых конечных элементов и повышение их порядка.

Использование эрмитовых конечных элементов является эффективным и экономичным вариантом численного решения уравнения Шредингера. Важным преимуществом является возможность прямого получения в ходе численного решения производной от волновой функции, без дополнительной операции численного дифференцирования.

Применение эрмитовых конечных элементов приводит к уменьшению размера матриц, для которых решается обобщенная задача на собственные значения, по сравнению с полиномами Лагранжа такого же порядка. Это связано с большим «перекрытием» элементных матриц при построении глобальных матриц. Эрмитовы конечные элементы, содержащие дополнительные узлы, обеспечивают более высокую точность результатов при том же размере обрабатываемых матриц.

Численное решение ряда задач для двумерного уравнения Шредингера позволило исследовать вычислительные свойства эрмитовых конечных элементов различного порядка для задач с двумя переменными. Разработанная структура программы будет обобщена на случай решения трехмерного уравнения Шредингера.

Abstract. Numeric solution of the two-dimensional Schrödinger equation in the basis of Hermitian finite elements is presented in the paper. Hermitian finite elements have been used for numerical solution of the two-dimensional Schrödinger equation. Eigenvalues for two-dimensional harmonic oscillator and for S-wave model of the helium atom are calculated. Wave-functions of the Henon-Heiles potential are plotted.

Литература

1. El-Moghraby D., Johnson R.G., Harrison P. Calculating modes of quantum wire and dot systems using a finite differencing technique //Computer Physics Communications 150 (2003) 235–246.
2. Shertzer J., Botero J. Finite-element analysis of electron-hydrogen scattering //Phys.Rev. 49A (1994) 3673-3679.
3. Pask J.E. Finite-element methods in electronic-structure theory //Computer Physics Communications 135 (2001) 1–34.
4. Стрэнг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов: Пер. с англ. - М.: Мир, 1977.
5. Draeger W.I.M., Handke G., Friedrich H. One- and two-electron excitation of helium in the S-wave model. / Phys.Rev.A, 1994. V.50, p.3793-3808.

Гомельский государственный
университет им. Ф. Скорины

Поступило 15.10.08

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ