

Е.А. Дей

УО «Гомельский государственный университет  
имени Франциска Скорины», Гомель, Беларусь

## ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ПРИ РЕШЕНИИ ДВУМЕРНОГО СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

### Введение

Развитие и исследование эффективности численных методов играет важную роль при расчете параметров двумерных квантовых систем [1–5].

В работе [6] была исследована вычислительная эффективность метода конечных разностей, основанного на высших порядках аппроксимации второй производной, при решении одномерного уравнения Шредингера и отмечена его высокая точность и удобство программной реализации.

В данной работе исследуются вычислительные свойства метода конечных разностей с высшими порядками аппроксимации частных производных применительно к задаче численного решения двумерного стационарного уравнения Шредингера. Получены расчетные формулы и выполнена их программная реализация в системах Mathcad и Matlab. Для тестовых задач квантовой механики вычислены собственные значения энергии, выполнена оценка их погрешности, построены графики двумерных волновых функций.

### 1. Конечно-разностная аппроксимация двумерного уравнения Шредингера

Рассмотрим задачу на нахождение собственных значений стационарного двумерного уравнения Шредингера [1–5]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} \right) + V(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (1)$$

Для численного решения уравнения будем рассматривать ограниченную область изменения аргументов  $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$ ;  $y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$ , в которой по каждой переменной введем равномерную сетку с шагом  $h$ , так что  $x_i = x_{\min} + i \cdot h$ ,  $y_j = y_{\min} + j \cdot h$ ,  $N_x = (x_{\max} - x_{\min}) / h$ ,  $N_y = (y_{\max} - y_{\min}) / h$ ,  $\psi_{i,j} \equiv \psi(x_i, y_j)$ ,  $V_{i,j} \equiv V(x_i, y_j)$ . Используем далее центральные конечно-разностные аппроксимации для вторых производных волновой функции

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right|_{x_i, y_j} = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k, j} + O(h^p), \quad \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{x_i, y_j} = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i, j+k} + O(h^p), \quad (2)$$

где  $C_{-p/2}, C_{-p/2+1}, \dots, C_{-1}, C_0, C_1, \dots, C_{p/2-1}, C_{p/2}$  – искомые коэффициенты. Вследствие симметрии центральных конечно-разностных выражений справедливы равенства  $C_{-p/2} = C_{p/2}, \dots, C_{-1} = C_1$ .

Для получения коэффициентов рассмотрим разложение сеточных значений волновых функций в ряд Тейлора в форме Лагранжа, например, по переменной  $x$  (по переменной  $y$  выражения аналогичны) [6]:

$$\frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k,j} = \frac{1}{h^2} \sigma_0 \psi_{i,j} + \frac{1}{h} \sigma_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{i,j} + \frac{1}{2!} \sigma_2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{h}{3!} \sigma_3 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \Big|_{i,j} + \frac{h^p}{(p+2)!} \sigma_{p+2} \frac{\partial^{3+2} \psi}{\partial x^{3+2}} \Big|_{i,j} + \frac{h^{p+2}}{(p+4)!} \sigma_{p+4} \frac{\partial^{3+4} \psi}{\partial x^{3+4}} \Big|_{x=\xi_k, y=y_j} ; \quad \sigma_s = \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^s. \quad (3)$$

С учетом (2) приходим к системе  $(P+1)$  линейных уравнений для вычисления коэффициентов  $C_k$

$$\sigma_0 = 0; \quad \sigma_1 = 0; \quad \sigma_2 = 2; \quad \sigma_3 = 0; \quad \sigma_4 = 0; \quad \dots \quad \sigma_p = 0. \quad (4)$$

Решая системы уравнений (4) для различных значений  $P$ , получаем коэффициенты для центральных конечно-разностных аппроксимаций вторых производных (таблица 1).

Таблица 1 – Коэффициенты конечно-разностных аппроксимаций вторых производных

P	$C_0$	$C_{\pm 1}$	$C_{\pm 2}$	$C_{\pm 3}$	$C_{\pm 4}$	$C_{\pm 5}$	$C_{\pm 6}$	$C_{\pm 7}$	$C_{\pm 8}$
2	-2	1							
4	-5/2	4/3	-1/12						
6	-49/18	3/2	-3/20	1/90					
8	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560				
10	-5 269/1800	5/3	-5/21	5/126	-5/1 008	1/3 150			
12	-5 369/1800	12/7	-15/56	10/189	-1/112	2/1 925	-1/16 632		
14	-266 681/88 200	7/4	-7/24	7/108	-7/528	7/3 300	-7/30 888	1/84 084	
16	-1 077 749/352 800	16/9	-14/45	112/1 485	-7/396	112/32 175	-2/3 861	16/315 315	-1/411 840

Заменяя вторые производные в уравнении Шредингера на конечно-разностные выражения (2), получаем систему линейных однородных уравнений относительно значений волновой функции в узлах сетки, образующую матричную задачу на собственные значения. В системе единиц  $\hbar = 1, m = 1$  уравнения системы имеют вид ( $i = 1..N_x - 1, j = 1..N_y - 1$ )

$$-\frac{1}{2h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k,j} - \frac{1}{2h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i,j+k} + V(x_i, y_j) \psi_{i,j} = E \psi_{i,j}. \quad (5)$$

На основании (7) несложно записать явный вид системы линейных уравнений для любого значения  $P$ .

Так как за пределами области волновую функцию для связанных состояний можно при численном расчете считать равной 0, в точках вблизи границы значения функции с отрицательными номерами узлов и с номерами, превышающими  $N$ , не дают вклада в систему уравнений:  $\psi_{-k} = \psi_{N+k} = 0$ ,  $k = 0..P/2$ .

## 2. Исследование вычислительных свойств метода конечных разностей при решении двумерного уравнения Шредингера

В качестве тестовой задачи рассмотрим двумерное уравнение Шредингера с потенциалом гармонического осциллятора  $V(x) = (x^2 + y^2)/2$  в области  $-L \leq x \leq L$ ,  $-L \leq y \leq L$ . Эта задача позволяет протестировать метод для случая гладкого запирающего потенциала и сравнить результаты с точными значениями  $E_n^{точн} = n + 1$ ,  $n = n_x + n_y$ ,  $n_x, n_y = 0, 1, 2, \dots$ . Для уровня  $E_n$  существует  $(n+1)$ -кратное вырождение. Значения абсолютной погрешности  $|E_n^{числен} - E_n^{точн}|$  первых последовательных  $i=1..50$  вычисленных уровней  $E_n^{числен}$  для значений параметров  $L=6$ ,  $h=0,2$  и различных  $P$  приведены в таблице 2.

Таблица 2 – погрешность вычисленных уровней энергии двумерного гармонического осциллятора для различных порядков ( $L=6$   $h=0,2$   $N=3481$ )

$i$	$n_x$	$n_y$	$n$	$E_n^{точн}$	$P=2$	$P=4$	$P=8$	$P=12$	$P=16$
1	0	0	0	1	2,5063e-003	3,2928e-005	2,2835e-008	4,7322e-011	1,4810e-013
10	3	0	3	4	2,2640e-002	5,2344e-004	8,0743e-007	2,8491e-009	1,3281e-010
20	4	1	5	6	4,7903e-002	1,4335e-003	3,2387e-006	1,4978e-008	1,7892e-008
30	1	6	7	8	1,4531e-001	9,1870e-003	7,2066e-005	2,1428e-007	4,1909e-009
40	3	5	8	9	1,5033e-001	9,2855e-003	7,2227e-005	1,4312e-007	1,8004e-008
50	4	5	9	10	1,6042e-001	9,5806e-003	7,4292e-005	1,5562e-007	1,8681e-007

По результатам трех последовательных расчетов величины шага  $h$ ,  $h/2$ ,  $h/4$  можно определить практический порядок сходимости численного метода [7]

$$\tilde{P} = \log_2 \left( \frac{E_n^{(h)} - E_n^{(h/2)}}{E_n^{(h/2)} - E_n^{(h/4)}} \right). \quad (6)$$

Значения практического порядка сходимости  $\tilde{P}$  для случая  $P=16$  приведены в таблице 3. Результаты показывают, что вычисленный практический порядок сходимости близок к теоретическому значению.

Таблица 3 – расчет практического порядка сходимости  $\tilde{P}$  для аппроксимации  $P = 16$  при  $L = 5,76$ .

$i$	$h=0,64$	$h=0,32$	$h=0,16$	$\tilde{P}$
1	0,99999589417533	0,9999999975167	1,0000000000213	14,00
10	3,99972097665498	3,9999997775903	4,00000000223164	13,48
20	5,99850624920467	5,9999986047893	6,00000019092883	12,14
30	7,92699287313520	7,99999568810675	7,9999996812922	14,06
40	8,92693945130686	8,99999704658610	9,00000019303501	14,50
50	9,92665837122424	9,99999758764318	10,00000169100347	14,12

Изложенный вариант метода конечных разностей был использован далее для численного решения двумерного уравнения Шредингера с потенциалом Хенона-Хейлеса [2–5]

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + (0.0125)^{1/2} \left( x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) \quad (7)$$

и double-well потенциала [4] при  $\mu=0,01$ .

$$V(x, y) = x^2 - y^2 + \mu y^2 (2y^2 - x^2) + \frac{1}{8\mu}. \quad (8)$$

В таблице 4 приведены значения энергетических уровней в сравнении с результатами работы [4].

Таблица 4 – вычисленные уровни энергии для потенциалов (7) и (8)

Потенциал Хенона-Хейлеса			Double-well потенциал		
$n$	Результаты [4]	МКР, $P=16$ $L=7.5, h=0.25$	$n$	Результаты [4]	МКР, $P=16$ $L=9, h=0.2$
0	0,998 594 772 604 6	0,998594772597	0	2,262 959 796 444 3	2,262959796447
5	2,985 326 428 064 3	2,985326427908	5	4,967 130 461753 8	4,967130461750
10	4,870 144 005 472 4	4,870143997903	10	7,469 353 731 555 3	7,469353731501
15	5,817 019 099 710 6	5,817019072179	15	8,458 314 106 626 8	8,458314106669
20	5,991 326 955 714 6	5,991326941994	20	9,898 300 048 694 0	9,898300050863
25	6,853 430 627 328 4	6,853430575254	25	10,937 895 835 513 1	10,937895834573
30	7,697 721 365 531 4	7,697721273069	30	11,936 552 764 608 6	11,936552764313
35	8,009 424 774 631 4	8,009424683826	35	12,672 302 141 021 8	12,672302138032
40	8,677 928 871 135 3	8,677928880847			
45	9,444 054 615 678 6	9,444055111210			

На рисунке 1 приведены графики нормированных волновых функций состояний  $n = 1$  и  $n = 8$  для случая потенциала (8).

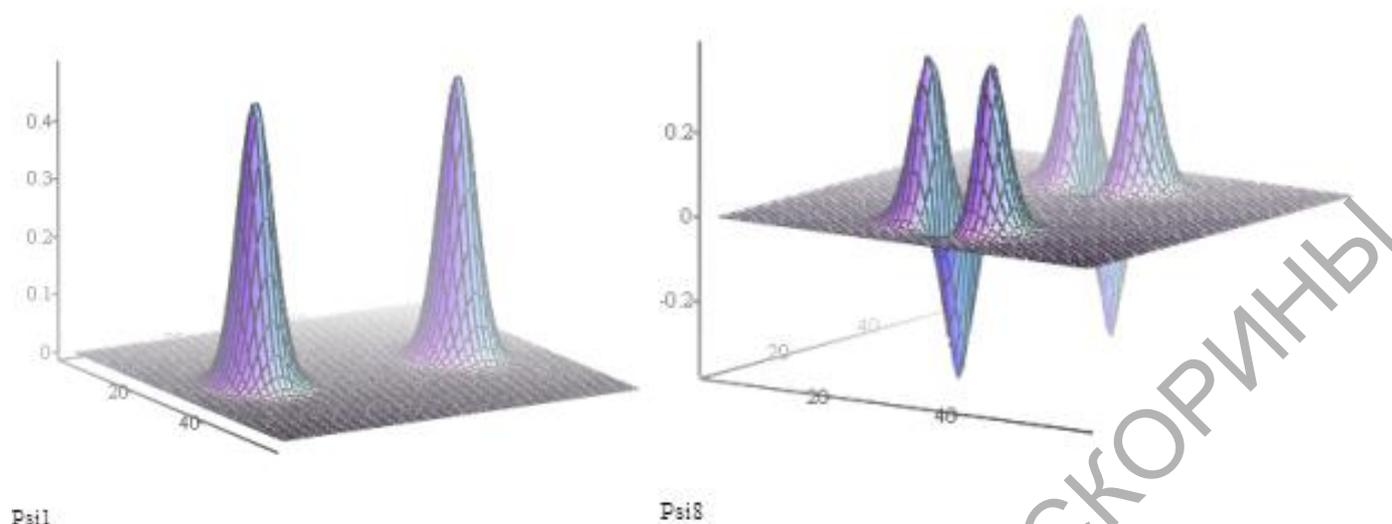


Рисунок 1 – График нормированных волновых функций для случая потенциала (8) при  $n = 1$  и  $n = 8$

Нормировка двумерной волновой функции выполнялась с применением кубатурной формулы Симпсона, которую, с учетом нулевых граничных условий, можно представить в виде

$$\iint_D \psi^2(x, y) dx dy = \frac{4h^2}{9} \sum_{i=1}^{N_x-1} \sum_{j=1}^{N_y-1} (1 + \text{mod}(i, 2))(1 + \text{mod}(j, 2)) \psi^2(x_i, y_j). \quad (9)$$

### Заключение

В работе выполнено исследование вычислительной эффективности высших порядков метода конечных разностей при решении двумерного уравнения Шредингера. На практических примерах показано существенное уменьшение погрешности вычисления энергетических уровней при увеличении порядка конечно-разностной аппроксимации вторых производных волновой функции.

Результаты расчетов показывают, что точность метода конечных разностей сопоставима с возможностями таких методов как спектральный [4] и метод конечных элементов [5]. При этом метод конечных разностей в матричной форме, в отличие от метода конечных элементов, не требует вычисления интегралов и приводит к стандартной, а не обобщенной задаче на собственные значения.

### Литература

1. Liu, X.S. Numerical solution of a two-dimensional time-independent Schrödinger equation by using symplectic schemes / X.S. Liu, L.W. Su, X.Y. Liu, P.Z. Ding // Int. J. Quantum Chem. – 2001. – Vol. 83. – P. 303–309.

2. Monovasilis, Th. Numerical solution of the two-dimensional time independent Schrödinger equation by third order symplectic schemes / Th. Monovasilis, T.E. Simos // Chem. Phys. – 2005. – Vol. 313. – P. 293–298.

3. Ixaru, L.Gr. New numerical method for the eigenvalue problem of 2D Schrödinger equation / L.Gr. Ixaru // Comput.Phys.Commun. – 2010. – Vol. 181. – P. 1738–1742.

4. Alici, H. The Hermite pseudospectral method for the two-dimensional Schrödinger equation with nonseparable potentials / H. Alici // Computers and Mathematics with Applications – 2015. – Vol. 69. – P. 466–476.

5. Дей, Е.А. Численное решение двумерного уравнения Шредингера в базе эрмитовых конечных элементов / Е.А. Дей // Известия ГГУ – 2009. – № 4(55), часть 2. – С. 102–106.

6. Дей, Е.А. Эффективность высших порядков метода конечных разностей при решении стационарного уравнения Шредингера / Е.А. Дей // Известия ГГУ – 2013. – № 6. – С. 178–183.

7. Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин – М. : Наука, 1978. – 512 с.