

Е.А. Дей

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

ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА НУМЕРОВА И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Введение

Изучение связанных состояний в задачах квантовой механики во многих случаях требует численного решения одномерного уравнения Шредингера [1]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

или радиального уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + V(r)\chi(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \chi(r) = E\chi(r), \quad \chi(r) = rR(r). \quad (2)$$

Оба варианта уравнения будем в дальнейшем описывать общей формой

$$\psi'' = f(x) = g(x)\psi(x) - \varepsilon\psi(x) \quad (3)$$

с граничными условиями

$$\psi(x_{\min}) = 0; \quad \psi(x_{\max}) = 0. \quad (4)$$

Для численного решения задачи на собственные значения (3)–(4) область изменения аргумента $[x_{\min}; x_{\max}]$ разделим на N отрезков

с шагом $h = (x_{\max} - x_{\min}) / N$, так что $x_i = x_{\min} + ih$, $i = 0..N$, $\psi_i = \psi(x_i)$, $g_i = g(x_i)$. В граничных точках $\psi_0 = \psi(x_0) = 0$; $\psi_N = \psi(x_N) = 0$. Используя ряд Тейлора в окрестности x_i , для второй производной можно получить выражение

$$\psi''(x_i) = \frac{1}{h^2}(\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}) + \frac{h^2}{12}\psi^{(4)}(x_i) + \frac{h^4}{360}\psi^{(6)}(x_i) + \dots \quad (5)$$

При численном решении учитывается только первое слагаемое (5), что приводит к погрешности порядка $O(h^2)$.

Процедура Нумерова [2–4] заключается в учете второго слагаемого в (5) путем выражения его через ψ'' на основе исходного уравнения. Из (3) для четвертой производной получаем

$$\psi^{(4)}(x_i) = (g\psi - \varepsilon\psi)_{x=x_i}^{(2)} = f^{(2)}(x_i) = \frac{1}{h^2}(f_{i-1} - f_i + f_{i+1}) + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_i) + \dots \quad (6)$$

Подстановка (6) в (5) дает численную аппроксимацию второй производной с локальной погрешностью порядка $O(h^4)$.

На практике метод Нумерова используется в двух различных формах:

а) для реализации поочередного вычисления собственных значений методом пристрелки; б) для получения матричной задачи на собственные значения и приближенного расчета сразу большого числа энергетических уровней.

В данной работе предложено обобщение матричного варианта метода Нумерова, использующее конечно-разностную аппроксимацию второй производной с произвольным четным порядком точности. Получены общие расчетные формулы для произвольного четного порядка P , выполнено численное исследование эффективности метода на примере вычисления спектра одномерного гармонического осциллятора и потенциала Вудса-Саксона, показано, что практический порядок точности соответствует теоретической оценке.

1. Обобщенные соотношения Нумерова для решения одномерного уравнения Шредингера

Для численного решения будем использовать центральные конечно-разностные аппроксимации второй производной волновой функции, имеющие общий вид [5]

$$\psi''(x_i) = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k} + O(h^p), \quad (7)$$

где $C_{-p/2}, C_{-p/2+1}, \dots, C_{-1}, C_0, C_1, \dots, C_{p/2-1}, C_{p/2}$ – неопределенные коэф-

фициенты. Вследствие симметрии центральных конечно-разностных выражений справедливы равенства $C_{-p/2} = C_{p/2}, \dots C_{-1} = C_1$.

Для получения численных значений коэффициентов используем разложение сеточных значений волновой функции, входящих в (7), в ряд Тейлора в форме Лагранжа для узлов x_{i+k} , $k = -p/2..p/2$

$$\begin{aligned} \psi_{i+k} = \psi(x_i + kh) = \psi_i + kh\psi_i' + \frac{(kh)^2}{2!}\psi_i'' + \frac{(kh)^3}{3!}\psi_i^{(3)} + \frac{(kh)^4}{4!}\psi_i^{(4)} + \dots \\ + \frac{(kh)^p}{p!}\psi_i^{(p)} + \frac{(kh)^{p+1}}{p+1!}\psi_i^{(p+1)} + \frac{(kh)^{p+2}}{p+2!}\psi_i^{(p+2)}(\xi_k); \quad \xi_k \in [x_i; x_{i+k}]. \end{aligned} \quad (8)$$

После суммирования всех уравнений (8), умноженных на коэффициенты C_k , получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k} = \frac{1}{h^2} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \right) \psi_i + \frac{1}{h} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k \right) \psi_i' + \frac{1}{2!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^2 \right) \psi_i'' + \\ + \frac{h}{3!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^3 \right) \psi_i^{(3)} + \frac{h^2}{3!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^4 \right) \psi_i^{(4)} + \dots + \frac{h^{p-2}}{p!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^p \right) \psi_i^{(p)} + \\ + \frac{h^{p-1}}{(p+1)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+1} \right) \psi_i^{(p+1)} + \frac{h^p}{(p+2)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+2} \right) \psi_i^{(p+2)} + \\ + \frac{h^{p+2}}{(p+4)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+4} \psi^{(p+4)}(\xi_k) \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Обозначив полученные суммы

$$\sigma_s = \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^s, \quad (10)$$

получаем систему $(p+1)$ линейных уравнений для расчета коэффициентов C_k

$$\sigma_0 = 0; \quad \sigma_1 = 0; \quad \sigma_2 = 2; \quad \sigma_3 = 0; \quad \sigma_4 = 0; \quad \dots \quad \sigma_p = 0. \quad (11)$$

Вычисленные значения коэффициентов приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения коэффициентов для центральных конечно-разностных аппроксимаций второй производной четных порядков $P = 2..12$

P	C_0	$C_{-1} = C_1$	$C_{-2} = C_2$	$C_{-3} = C_3$	$C_{-4} = C_4$	$C_{-5} = C_5$	$C_{-6} = C_6$
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	-5269/1800	5/3	-5/21	5/126	-5/1008	1/3150	
12	-5369/1800	12/7	-15/56	10/189	-1/112	2/1925	-1/16632

С учетом (9) и вычисленных коэффициентов выражение (7) для конечно-разностной аппроксимации второй производной от волновой функции в i -м узле сетки с точностью $O(h^p)$ принимает вид

$$\psi_i^{(2)} = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k} - \frac{h^p}{(p+2)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+2} \right) \psi_i^{(p+2)} - \frac{h^{p+2}}{(p+4)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+4} \psi^{(p+4)}(\xi_k) \right). \quad (12)$$

В предлагаемом методе процедура Нумерова обобщается путем учета слагаемого, содержащего производную $(p+2)$ -го порядка $\psi_i^{(p+2)} = f(x)_i^{(p)}$, с помощью конечно-разностной аппроксимации

$$f^{(p)}(x_i) = \frac{1}{h^p} \sum_{k=-p/2}^{p/2} D_k f_{i+k} + O(h^p), \quad (13)$$

использующей те же узлы сетки, что и (4). Для нахождения неопределенных коэффициентов D_k аналогичным образом получаем систему линейных уравнений

$$\tilde{\sigma}_0 = 0; \quad \tilde{\sigma}_1 = 0; \quad \tilde{\sigma}_2 = 0; \quad \tilde{\sigma}_3 = 0; \quad \dots \quad \tilde{\sigma}_p = p!, \quad (14)$$

где $\tilde{\sigma}_k$ обозначены такие же суммы, что и в (10), но с коэффициентами D_k . Вычисленные значения коэффициентов приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Значения коэффициентов для центральных конечно-разностных аппроксимаций P -й производной

P	D ₀	D ₋₁ = D ₁	D ₋₂ = D ₂	D ₋₃ = D ₃	D ₋₄ = D ₄	D ₋₅ = D ₅	D ₋₆ = D ₆
2	-2	1					
4	6	-4	1				
6	-20	15	-6	1			
8	70	-56	28	-8	1		
10	-252	210	-120	45	-10	1	
12	924	-792	495	-220	66	-12	1

В результате для $(p+2)$ -й производной в правой части (12) получаем

$$\psi_i^{(p+2)} = f(x)_i^{(p)} = \frac{1}{h^p} \sum_{k=-p/2}^{p/2} D_k f_{i+k} - \frac{h^2}{(p+2)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} D_k k^{p+2} \right) f_i^{(p+2)}(\xi). \quad (15)$$

Подставляя (15) в (12) и рассматривая далее все внутренние узлы $i = 1..N-1$, приходим к системе линейных уравнений относительно

неизвестных значений $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{N-1}$, представляющей собой конечно-разностную аппроксимацию уравнения Шредингера по обобщенному методу Нумерова с порядком точности $(p + 2)$:

$$\sum_{k=-p/2}^{p/2} \left\{ -\frac{C_k}{h^2} + \frac{\sigma_{p+2}}{(p+2)!} D_k g_{i+k} + \delta_{k,0} g_i \right\} \psi_{i+k} =$$

$$= \varepsilon \sum_{k=-p/2}^{p/2} \left\{ \frac{\sigma_{p+2}}{(p+2)!} D_k + \delta_{k,0} \right\} \psi_{i+k} + O(h^{p+2}). \quad (16)$$

Система однородных уравнений (16) образует обобщенную матричную задачу на собственные значения

$$A\psi = \varepsilon B\psi, \quad (17)$$

которая может быть решена стандартными методами вычислительной линейной алгебры [6].

Для случая $P = 2$ (стандартный метод Нумерова) значения коэффициентов $C_{-1} = 1$, $C_0 = -2$, $C_1 = 1$, $D_{-1} = 1$, $D_0 = -2$, $D_1 = 1$ и система (16) принимает вид, совпадающий с известным в литературе [2, 3]

$$\left(-\frac{1}{h^2} + \frac{g_{i-1}}{12} \right) \psi_{i-1} + \left(\frac{2}{h^2} + \frac{10}{12} g_i \right) \psi_i + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{g_{i+1}}{12} \right) \psi_{i+1} = \varepsilon \left(\frac{1}{12} \psi_{i-1} + \frac{10}{12} \psi_i + \frac{1}{12} \psi_{i+1} \right),$$

$$i = 1..N-1. \quad (18)$$

Погрешность аппроксимации в данном случае имеет порядок $O(h^4)$.

Рассмотрим далее случай $P = 4$. При этом на основании (11) и (14) получаем значения коэффициентов $D_{-2} = 1$, $D_{-1} = -4$, $D_0 = 6$, $D_1 = -4$, $D_2 = 1$, $C_{-2} = -1/12$, $C_{-1} = 16/12$, $C_0 = -30/12$, $C_1 = 16/12$, $C_2 = -1/12$, и система сеточных уравнений (16) имеет вид

$$\left(\frac{1}{12h^2} - \frac{g_{i-2}}{90} \right) \psi_{i-2} + \left(-\frac{16}{12h^2} + \frac{4g_{i-1}}{90} \right) \psi_{i-1} + \left(\frac{30}{12h^2} + \frac{84}{90} g_i \right) \psi_i +$$

$$+ \left(-\frac{16}{12h^2} + \frac{4g_{i+1}}{90} \right) \psi_{i+1} + \left(\frac{1}{12h^2} - \frac{g_{i+2}}{90} \right) \psi_{i+2} =$$

$$= \varepsilon \left(-\frac{1}{90} \psi_{i-2} + \frac{4}{90} \psi_{i-1} + \frac{84}{90} \psi_i + \frac{4}{90} \psi_{i+1} - \frac{1}{90} \psi_{i+2} \right). \quad (19)$$

Погрешность аппроксимации в этом случае имеет порядок $O(h^6)$.

2. Результаты численных расчетов по обобщенному методу Нумерова

Программная реализация обобщенного метода Нумерова для $P = 2..12$ выполнена в системе Matlab. В качестве тестовой задачи рассмотрено численное решение одномерного уравнения Шредингера

с потенциалом гармонического осциллятора. В системе единиц $\hbar = 1$, $m = 0,5$ потенциал имеет вид $V(x, y) = x^2/2$, а точные собственные значения энергии $\varepsilon_k = k + 1/2$, $k = 0, 1, \dots$. Значения погрешности численного решения для первых 50 уровней приведены в таблице 3 для классического метода Нумерова ($P=2$) и обобщенного метода с порядком $P = 4..12$ ($x_{\min} = -20$, $x_{\max} = 20$, $h = 0,05$, $N = 800$).

Таблица 3 – Погрешность расчета уровней энергии одномерного гармонического осциллятора для классического метода Нумерова ($P = 2$) и обобщенного метода с порядком $P = 4..12$

k	P = 2	P = 4	P = 6	P = 8	P = 10	P = 12
0	-7.8e-005	-6.5e-008	-9.1e-011	4.7e-013	-7.7e-012	1.7e-010
5	-4.8e-003	-1.5e-005	-6.2e-008	-3.1e-010	-9.5e-012	1.7e-010
10	-1.7e-002	-1.0e-004	-7.6e-007	-6.6e-009	-7.1e-011	1.7e-010
15	-3.8e-002	-3.2e-004	-3.5e-006	-4.4e-008	-6.2e-010	1.7e-010
20	-6.6e-002	-7.4e-004	-1.1e-005	-1.8e-007	-3.2e-009	1.2e-010
25	-1.0e-001	-1.4e-003	-2.5e-005	-5.2e-007	-1.1e-008	-9.3e-011
30	-1.5e-001	-2.4e-003	-5.2e-005	-1.3e-006	-3.3e-008	-7.5e-010
35	-2.0e-001	-3.8e-003	-9.5e-005	-2.7e-006	-8.2e-008	-2.5e-009
40	-2.6e-001	-5.7e-003	-1.6e-004	-5.1e-006	-1.8e-007	-6.4e-009
45	-3.3e-001	-8.0e-003	-2.5e-004	-9.1e-006	-3.6e-007	-1.4e-008
50	-4.0e-001	-1.1e-002	-3.8e-004	-1.5e-005	-6.6e-007	-3.0e-008

По результатам трех последовательных расчетов для количества шагов N , $2N$, $4N$ (то есть, для величины шага h , $h/2$, $h/4$) можно определить практический порядок сходимости численного метода $\tilde{P}$. Предполагая, что при достаточно большом количестве N погрешность в вычислении собственного значения пропорциональна $N-P$, получаем

$$\tilde{P} = \log_2 \left(\frac{\varepsilon^{(N)} - \varepsilon^{(2N)}}{\varepsilon^{(2N)} - \varepsilon^{(4N)}} \right). \quad (20)$$

Применяя эту формулу для оценки энергетических уровней гармонического осциллятора, получаем значения практического порядка сходимости $\tilde{P}$ для различных значений порядка аппроксимации P второй производной в уравнении Шредингера (таблица 4).

Таблица 4 – Практический порядок сходимости обобщенного метода Нумерова при численном решении одномерного уравнения Шредингера с потенциалом гармонического осциллятора

K	P = 2	P = 4	P = 6	P = 8	P = 10	P = 12
1	2	3	4	5	6	7
0	2,01	3,95	5,88	7,79	9,67	11,53

5	2,03	3,94	5,86	7,75	9,62	11,46
10	2,04	3,93	5,83	7,71	9,56	11,39
15	2,05	3,91	5,79	7,66	9,50	11,31

Окончание таблицы 4

1	2	3	4	5	6	7
20	2,07	3,90	5,76	7,60	9,43	11,23
25	2,09	3,89	5,72	7,55	9,35	11,14
30	2,11	3,88	5,69	7,49	9,28	11,04
35	2,13	3,88	5,66	7,44	9,20	10,94
40	2,15	3,87	5,63	7,38	9,12	10,84
45	2,18	3,87	5,60	7,33	9,04	10,74
50	2,20	3,88	5,58	7,28	8,97	10,64

Таким образом, практический порядок сходимости различных вариантов обобщенного метода Нумерова соответствует теоретическому значению.

Обобщенный метод Нумерова использован также для численного решения радиального уравнения Шредингера (2) с потенциалом Вудса-Саксона при $l = 0$

$$V(r) = \frac{a}{1 + D} - \frac{acD}{(1 + D)^2}; \quad D = e^{c(r-b)}; \quad a = -50, \quad b = 7, \quad c = \frac{5}{3}. \quad (21)$$

В таблице 5 приведены значения уровней энергии, вычисленные при $\hbar = 0,02$, $r_{\min} = 0$, $r_{\max} = 16$, а также точные значения из работы [7].

Таблица 5 – Результаты численного решения радиального уравнения Шредингера с потенциалом Вудса-Саксона обобщенным методом Нумерова

k	$E_{k, \text{точн}} [7]$	P = 4	P = 8	P = 12
0	-	-	-	-
1	49.457788728083	49.457788728498	49.457788728080	49.457788728089
2	-	-	-	-
3	48.148430420006	48.148430429375	48.148430420003	48.148430420012
4	-	-	-	-
5	46.290753954466	46.290754022469	46.290753954461	46.290753954471
6	-	-	-	-
7	43.968318431814	43.968318715399	43.968318431808	43.968318431818
8	-	-	-	-
9	41.232607772180	41.232608632046	41.232607772172	41.232607772183
10	-	-	-	-
11	38.122785096728	38.122787218323	38.122785096719	38.122785096730
12	-	-	-	-
13	34.672313205700	34.672317735643	34.672313205691	34.672313205700
	-	-	-	-

30.912247487909	30.912256172372	30.912247487908	30.912247487909
-	-	-	-
26.873448916060	26.873464221039	26.873448916078	26.873448916058
-	-	-	-
22.588602257693	22.588627440000	22.588602257756	22.588602257691
-	-	-	-
18.094688282124	18.094727358668	18.094688282276	18.094688282121
-	-	-	-
13.436869040250	13.436926555547	13.436869040560	13.436869040246
-8.676081670737	-8.676162029944	-8.676081671305	-8.676081670731
-3.908232481206	-3.908338092841	-3.908232482150	-3.908232481201

Заключение

В работе предложен новый эффективный метод численного решения уравнения Шредингера для связанных состояний, основанный на обобщении метода Нумерова с использованием конечно-разностных производных высших порядков точности. Получены расчетные формулы для произвольного четного порядка P , вычислены коэффициенты для $P = 2..12$. Выполнено практическое исследование вычислительной эффективности метода на примере одномерного гармонического осциллятора и потенциала Вудса-Саксона.

Приведенные результаты подтверждают существенное уменьшение погрешности численного решения стационарного уравнения Шредингера при использовании обобщенного метода Нумерова.

Литература

1. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – 2-е изд. – М. : Наука, 1973. – 704 с.
2. González, J.L.M. Getting started with Numerov's method / J.L.M. González, D. Thompson // Computers in Physics – 1997. – Vol. 11. – P. 514–515.
3. Vigo-Aguiar, J. A variable-step Numerov method for numerical solution of the Schrödinger equation / J. Vigo-Aguiar, H.A. Ramos // J.Math.Chem. – 2005. – Vol. 37. – P. 255–262.
4. Bougouffa, S. The study of atomic transitions by use of Numerov technique in schematic model / S. Bougouffa // Fizika A. – 2006. – Vol. 15. – P. 193–208.
5. Турчак, Л.И. Основы численных методов / Л.И. Турчак, П.В. Плотников. – 2-е изд. – М. : Физматлит, 2003. – 304 с.
6. Парлетт, Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы / Б. Парлетт – М. : Мир, 1983. – 384 с.
7. Ledoux, V. Solution of the Schrödinger equation by a high order perturbation method based on a linear reference potential / V. Ledoux, M. Rizea, L. Ixaru, G.Vanden Berghe, M. Van Daele // Comput. Phys.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф.СКОРИНЫ