

2712/2-79



СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

С 172

Л-174

P11 - 12307

Р.Лазаров, М.Касчиев

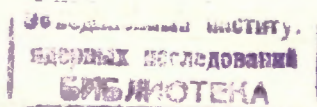
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ  
ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА,  
СООТВЕТСТВУЮЩЕГО ЗАДАЧЕ ДВУХ ЦЕНТРОВ

1979

P11 - 12307

Р.Лазаров,\* М.Касчиев

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ  
ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА,  
СООТВЕТСТВУЮЩЕГО ЗАДАЧЕ ДВУХ ЦЕНТРОВ



---

\* Институт математики Болгарской академии наук.

Лазоров Р.Д., Касчиев М.С.

P11 - 12307

Численное решение двумерного уравнения Шредингера, соответствующего задаче двух центров

Работа посвящена численному решению двумерного уравнения Шредингера. Получены два алгоритма дискретизации задачи. Первый алгоритм разработан на основе метода конечных разностей, а второй - метода конечных элементов. Оба алгоритма использованы для численного решения двумерного уравнения Шредингера, соответствующего задаче двух центров. Получены термы  $1s\sigma$  и  $2p\sigma$  для  $R=5$ , значений зарядов  $z_1=1$ ,  $z_2=1$  и  $z_1=1$ ,  $z_2=2$ , а также волновые функции.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Lasorov R.D., Kaschiev M.S.

P11 - 12307

Numerical Solution of the Two-Dimensional Schroedinger Equation Corresponding to Two-Centre Problem

Numerical solution of the two-dimensional Schroedinger equation is described. Two algorithms for the discretization of the problem are obtained. The first algorithm is worked out on the basis of the finite difference method, the second one is based on the finite element method. Both algorithms are used for numerical solution of the two-dimensional Schroedinger equation, corresponding to the two-centre problem. The terms  $1s\sigma$  and  $2p\sigma$  for  $R=5$ ,  $z_1=1, z_2=1, z_1=1, z_2=2$  are calculated, as well as the corresponding wave functions.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

### Введение

Цель данной работы состоит в разработке алгоритма численного решения уравнения Шредингера на плоскости без предположения о факторизации потенциала этого уравнения.

Разработанные алгоритмы применяются для решения уравнения

$$Lu \equiv -\frac{1}{2} \frac{4}{R^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right\} u + V(\xi, \eta; R) u = E(R) u, \quad (I)$$

описывающего состояние квантовомеханической системы трех тел с кулоновским взаимодействием<sup>/1/</sup>. Здесь  $(\xi, \eta)$  - независимые переменные,  $R > 0$  параметр, а  $V(\xi, \eta; R)$  - заданная функция, называемая потенциалом.

Задача состоит в нахождении дискретного спектра и волновых функций уравнения (I).

При специальном виде потенциала  $V(\xi, \eta; R)$  уравнение (I) можно решить методом разделения переменных<sup>/2-5/</sup>.

В этих работах в численны термы и волновые функции при различных зарядах и для разных  $R$ .

Полученные в настоящей работе результаты позволяют проверить предыдущие расчеты, а разработанные алгоритмы дают возможность решать другие двумерные квантовомеханические задачи.

### Постановка граничных условий

Уравнение (I) будем рассматривать в конечной области  $G = \{1 \leq \xi \leq \ell, -1 \leq \eta \leq 1\}$ ,  $\ell \gg 1$ . Необходимо уделить особое внимание постановке граничных условий на прямых  $\xi=1$ ,  $\eta=1$  и  $\eta=-1$ , так как там уравнение (I) вырождается. Чтобы выделить ограниченные решения, следуя<sup>/6/</sup>, поставим граничные условия в виде

$$\lim_{\xi \rightarrow 1+0} (\xi^2 - 1) \frac{\partial u}{\partial \xi} = 0, \quad (2)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 1+0} (1 - \eta^2) \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0. \quad (3)$$

При  $\xi = \ell$  сформулируем условие

$$u(\ell, \eta; R) = 0. \quad (4)$$

Численное решение задачи (I)-(4) осуществляется двумя этапами. На первом этапе построим разностные схемы, аппроксимирующие задачу (I)-(4). В работе рассмотрены схемы, полученные по методу конечных разностей и по методу конечных элементов. Второй этап - это решение полученной обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения.

Отметим, что нас будут интересовать только нижние собственные значения, что обуславливает выбор алгоритма для решения алгебраической проблемы.

#### Метод конечных разностей

При построении конечно-разностной схемы задачи (I)-(4) особое внимание нужно уделить аппроксимации краевых условий (2)-(3). Хорошее приближение этих условий можно получить путем специального выбора разностной сетки. Впервые такие сетки были предложены Фрязиновым [7] для разностной аппроксимации оператора Лапласа в цилиндрической и сферической системах координат.

В области  $G$  построим разностную равномерную сетку

$$\bar{\omega} = \bar{\omega}_\xi \times \bar{\omega}_\eta, \quad \text{где}$$

$$\bar{\omega}_\xi = \{ \xi_i = 1 + (i - 0.5)h_\xi, \quad i = 1, 2, \dots, N_\xi, \quad h_\xi = (\ell - 1)/(N_\xi - 0.5) \},$$

$$\bar{\omega}_\eta = \{ \eta_j = -1 + (j - 0.5)h_\eta, \quad j = 1, 2, \dots, N_\eta, \quad h_\eta = 2/N_\eta \}.$$

Пусть  $\bar{V}$  - сеточная функция, заданная на  $\bar{\omega}$ . Рассмотрим разностные операторы  $L_\xi$  и  $L_\eta$ , аппроксимирующие операторы

$$L_\xi \equiv \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad L_\eta \equiv \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta},$$

и краевые условия (2)-(3) [8], где

$$L_\xi v = \begin{cases} \frac{1}{h_\xi} a^{(+1)} v_\xi, & \xi = \xi_1, \\ (a v_\xi)_\xi, & \xi_1 < \xi < \xi_{N_\xi}, \end{cases}$$

$$L_\eta v = \begin{cases} \frac{1}{h_\eta} b^{(+1)} v_\eta, & \eta = \eta_1, \\ (b v_\eta)_\eta, & \eta_1 < \eta < \eta_{N_\eta}, \\ -\frac{1}{h_\eta} b v_\eta, & \eta = \eta_{N_\eta}. \end{cases}$$

Здесь введены следующие обозначения

$$a(\xi_i) = (\xi_i - 0.5h_\xi)^2 - 1,$$

$$b(\eta_j) = 1 - (\eta_j - 0.5h_\eta)^2,$$

$$\rho(\xi_i, \eta_j) = \frac{R^3}{8} (\xi_i^2 - \eta_j^2), \quad i = 1, 2, \dots, N_\xi, \quad j = 1, 2, \dots, N_\eta,$$

$$a^{(+1)} = a(\xi_2), \quad b^{(+1)} = b(\eta_2), \quad a$$

$$v_x \equiv (v(x+h) - v(x))/h, \quad v_x \equiv (v(x) - v(x-h))/h$$

- правая и левая разностные производные.

Задаче (I)-(4) сопоставим разностную задачу

$$L_\xi y \equiv -\frac{R}{4} (L_\xi y + L_\eta y) + \rho V y = E^h \rho y, \quad (5)$$

$$y(\xi_{N_\xi}, \eta_j) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N_\eta. \quad (6)$$

Погрешность аппроксимации задачи (I)-(4) схемой (5)-(6) является величиной порядка  $O(h_\xi^2 + h_\eta^2)$ . Введем в рассмотрение вектор  $Y$  с компонентами  $Y_K = y(\xi_i, \eta_j)$ ,  $K = (i-1)N_\eta + j$ ,  $i = 1, 2, \dots, N_\xi - 1$ ,  $j = 1, 2, \dots, N_\eta$ . Система (5)-(6) записывается в виде

$$KY = E^h MY. \quad (7)$$

Система (7) есть матричная задача на собственные значения. Матрица  $K$  является симметричной и имеет ленточную структуру.

При сделанном упорядочении вектора  $\Upsilon$  полулента матрицы  $K$  есть  $N\eta + 1$ . Матрица  $M$  является диагональной и положительно-определенной.

### Метод конечных элементов

Рассмотрим вариационную постановку задачи (I)-(4). Обозначим через  $L_2(G)$  гильбертово пространство функций  $w(\xi, \eta)$ , таких, что

$$\iint_G \rho(\xi, \eta) w^2(\xi, \eta) d\xi d\eta < \infty, \quad \rho(\xi, \eta) = \frac{\rho^3}{8} (\xi^2 - \eta^2).$$

Скалярное произведение между двумя функциями  $v, w \in L_2(G)$  определяется как

$$(v, w) = \iint_G \rho(\xi, \eta) v(\xi, \eta) w(\xi, \eta) d\xi d\eta.$$

Рассмотрим в пространстве  $L_2(G)$  подпространство

$$A = \{v \in C^2(G), v(\ell, \eta) = 0\}.$$

Обозначим через  $H_E^1$  пополнение подпространства  $A$  относительно энергетической нормы:

$$\|v\|_1^2 = \iint_G \frac{\rho}{4} \left[ (\xi^2 - 1) \left( \frac{\partial v}{\partial \xi} \right)^2 + (1 - \eta^2) \left( \frac{\partial v}{\partial \eta} \right)^2 \right] d\xi d\eta.$$

Функции из  $H_E^1$  тоже удовлетворяют главному краевому условию (4)<sup>9/</sup>. Пусть  $R(v)$  - функционал Рэлея-Ритца задачи (I)-(4):

$$R(v) = \frac{\iint_G \left\{ \frac{\rho}{4} \left[ (\xi^2 - 1) \left( \frac{\partial v}{\partial \xi} \right)^2 + (1 - \eta^2) \left( \frac{\partial v}{\partial \eta} \right)^2 \right] + \rho V v^2 \right\} d\xi d\eta}{\iint_G \rho v^2 d\xi d\eta}.$$

Идея метода конечных элементов для задач на собственные значения<sup>9/</sup> заключается в минимизации функционала  $R(v)$  на некотором подпространстве  $S^h$  пространства  $H_E^1$ .  $S^h$  называется пространством метода конечных элементов. Построим  $S^h$ .

Разобьем область  $G$  на прямоугольники  $G^i$  со сторонами  $h_\xi^i$  и  $h_\eta^i$ . В каждом прямоугольнике  $G^i$  выберем в качестве узлов вершины и середины сторон. Узлу  $Z_j$  сопоставим функцию  $\varphi_j(\xi, \eta)$  следующим образом:

$$\varphi_j(\xi, \eta) = a_0^j + a_1^j \xi + a_2^j \eta + a_3^j \xi \eta + a_4^j \xi^2 + a_5^j \eta^2 + a_6^j \xi^2 \eta + a_7^j \xi \eta^2.$$

Потребуем, чтобы она удовлетворяла условиям:

$$\varphi_j(Z_k) = \delta_{jk}, \quad (\xi, \eta) \in G^i,$$

$\varphi_j(\xi, \eta)$  - непрерывна при  $(\xi, \eta) \in G^i$ ,  $\varphi_j(\ell, \eta) = 0$ .

Прямоугольник  $G^i$ , узлы  $Z_j$  и однозначно определяемые функции  $\varphi_j$  называются биквадратичным прямоугольным элементом<sup>9,10/</sup>. Очевидно,  $\varphi_j(\xi, \eta) \in H_E^1$ . Пространство  $S^h$  метода конечных элементов в этом случае определяется как множество всех частично-биквадратичных функций, удовлетворяющих главному краевому условию (4). Ясно, что  $S^h \subset H_E^1$ . Совокупность функций  $\varphi_j(\xi, \eta)$  всех конечных элементов образует  $N$ -мерный базис в  $S^h$ . Обозначим через  $S_N$  подпространство  $S^h$ , натянутое на этот базис. Пусть  $v^h \in S_N$ , т.е.

$$v^h = \sum_{i=1}^N \bar{Y}_i \varphi_i(\xi, \eta).$$

Тогда

$$R(v^h) = \frac{\bar{Y}^T K \bar{Y}}{\bar{Y}^T M \bar{Y}}, \quad \bar{Y} = (\bar{Y}_1, \dots, \bar{Y}_N).$$

Здесь  $K$  - матрица "жесткости" задачи (I)-(4), а  $M$  - матрицы "массы". Элементы  $k_{ij}$  и  $m_{ij}$  матриц  $K$  и  $M$  вычисляются по формулам

$$k_{ij} = \iint_G \left\{ \frac{\rho}{4} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + (1 - \eta^2) \frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta} \right] + \rho V \varphi_i \varphi_j \right\} d\xi d\eta,$$

$$m_{ij} = \iint_G \rho \varphi_i \varphi_j d\xi d\eta.$$

Видно, что матрицы  $K$  и  $M$  симметричны и, благодаря специальному выбору базисных функций, имеют одинаковую ленточную структуру. Матрица  $M$  всегда является положительно-определенной.

Стационарные точки  $\Upsilon$  функционала  $R(v^h)$  дают приближенные собственные функции задачи (I)-(4), а значение  $R(v^h)$  в этих точках - приближенные собственные числа. Согласно<sup>9,10/</sup>, стационарные точки  $\Upsilon$  являются решением обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения:

$$K \Upsilon = E^h M \Upsilon. \quad (8)$$

### Сходимость и точность

Предположим, что  $E_e$  и  $u_e = \ell$  - собственная пара задачи (I)-(4), а  $E_e^h, u_e^h$  и  $\bar{E}_e^h$  и  $\bar{u}_e^h$  - соответствующие приближения по схемам (7) и (8).

По теореме 6.2 стр.271<sup>/9/</sup> верны оценки

$$\|u_\ell - \bar{u}_\ell^h\|_0 = O(h^3 |E_\ell|^{3/2}),$$

$$|E_\ell - \bar{E}_\ell^h| = O(h^4 |E_\ell|^3).$$

Для схемы (7), используя результаты работ<sup>/8,II/</sup>, получаем, что соответствующие оценки - величины порядка  $O(h^2 |E_\ell|^2)$ .

Из этих оценок видно, что схемы (7) и (8) гораздо лучше приближают нижние собственные значения и собственные функции задачи (I)-(4). Обе схемы приводят к решению матричных задач на собственные значения. Нужно отметить, что матрицы специального вида  $K$  и  $M$  имеют большую размерность при достаточно мелкой сетке. Для решения таких задач развиты быстрые и экономичные вычислительные методы. Обзор таких методов можно найти в монографии<sup>/10/</sup>. В настоящей работе использован метод обратной итерации в подпространстве /Subspace inverse iteration method-SIIM/ и подпрограмма SSPACE<sup>/10/</sup>.

#### Результаты счета

Рассмотренные алгоритмы применялись для вычисления уровней энергий и волновых функций задач двух центров квантовой механики (задача  $Z_1, e Z_2$ ) при различных величинах зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$ . В этом случае потенциал  $V(\xi, \eta; R)$  в уравнении (I) имеет вид

$$V(\xi, \eta; R) = \frac{1}{2} \frac{4}{R^2} \frac{m^2}{(\xi^2-1)(1-\eta^2)} - \frac{2}{R} \frac{(Z_1+Z_2)\xi + (Z_2-Z_1)\eta}{\xi^2 - \eta^2}.$$

Расчеты выполнены для  $m=0, R=5, Z_1=Z_2=1$  и  $Z_1=1, Z_2=2$ . Вычислены термы  $1\sigma$  и  $2\rho\sigma$ , соответствующие волновые функции, а также матричные элементы  $\langle u_i | \frac{R}{2} \xi, \eta | u_j \rangle, i, j=1, 2$ .

Результаты приведены в табл. I. Полученные величины сравнивались с<sup>/3,4/</sup>. Вычисления подтвердили теоретическую скорость сходимости методов. Результаты получены по схеме (8), которая является схемой повлшенного порядка точности. Проводились также вычисления по схеме (7), и полученные приближения использовались в качестве начального приближения для счета по схеме (8). Элементы матриц  $K$  и  $M$  в методе конечных элементов вычислялись с применением квадратурной формулы Гаусса с тремя узлами.

SIIM позволяет вычислять одновременно несколько первых собственных значений. Условием окончания итераций по SIIM

являлось достижение относительной ошибки между двумя последовательными приближениями величины меньше  $10^{-7}$ . Время на ЭВМ CDC-6500 менялось от 1 мин. до 15 мин. при увеличении числа узлов. При этом увеличение времени происходило, главным образом, за счет использования периферийных устройств.

Подпрограмма SSPACE требует, чтобы матрица  $K$  была положительной. Поэтому схемы (7) и (8) приводились к виду  $K\bar{Y} = \lambda \bar{M}Y$ , где  $\bar{K} = K + \alpha M, \bar{M} = M$ . Число  $\alpha > 0$  выбиралось из требования положительности матрицы  $\bar{K}$ . Энергии  $E$  получались по формуле  $E = \lambda - \alpha$ , а волновые функции в этом случае не меняются. Положительность матрицы  $\bar{K}$  обеспечивает устойчивость вычислений.

До сих пор обсуждались вопросы, связанные с решением задачи  $Z_1, e Z_2$  на конечной области  $G$ . Между тем, реальная физическая задача определена на бесконечной области  $\{1 \leq \xi < \infty, -1 \leq \eta \leq 1\}$ . Необходимо выяснить вопрос, сколь велико должно быть число  $\ell$ , чтобы была обеспечена хорошая аппроксимация условия (4). Численные эксперименты, проведенные для разных  $\ell$ , показали, что, когда  $\ell > 20$  и  $R < 10$ , результаты счета различаются на величину порядка  $10^{-6}-10^{-7}$ . Поэтому в таблице приведены только результаты, полученные при  $R=20$ . При  $R > 10$  обнаружена следующая зависимость решения от величины  $\ell$ :  $\ell > 3R$ .

#### Заключение

Рассмотренные алгоритмы позволяют в короткое время (10-15 мин. на CDC-6500) с большой точностью решать двумерные задачи на собственные значения, возникающие как в квантовой механике, так и в других разделах физики и техники. Они отличаются высокой скоростью сходимости и обеспечивают устойчивость вычислений.

Авторы благодарят И.В.Пузынина и Л.И.Пономарева за ценные советы и внимательное отношение к работе.

Таблица I

E		R=5			z <sub>1</sub> =1		z <sub>2</sub> =1	
15σ	2pσ	N	NWK	t	$\langle u_1   \frac{p}{2} \sigma   u_1 \rangle$	$\langle u_1   \frac{p}{2} \sigma   u_2 \rangle$	$\langle u_2   \frac{p}{2} \sigma   u_2 \rangle$	
-0.7244203	-0.6772916/3/				0.0.	2.361584	0.0/4/	
-0.7234874	-0.6764388	448	12348	50				
-0.7243556	-0.6772175	640	17928	400				
-0.7244062	-0.6772699	800	22578	800	0.0	2.360712	0.0	
		R=5	z <sub>1</sub> =1	z <sub>2</sub> =2				
-2.2002350	-0.9225425/2/							
-2.1993794	-0.9224699	800	22578	800	2.488057	0.110905	-1.83228	

N - число узлов

NWK - число элементов матриц K и M, хранимых в памяти ЭВМ. Матрицы записаны в компактной форме/10/.

t - машинное время

## Литература

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
2. D.R.Bates, T.G.Carson, Exact wave function of  $HeH^{2+}$ , Proc. Roy. Soc., London A234, 1956, 207-217.
3. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. Задача двух центров квантовой механики, II, Математическая часть, ЖВМ и МФ, т.8, № 6, 1968, 1256-1268.
4. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. Задача двух центров квантовой механики, V, Алгоритм, ОИЯИ, 5040, 1970.
5. J.K.Cayford, W.R.Fimple, D.G.Unger, S.P.White, A Finite-Difference Newton-Raphson Solution of the Two-Center Electronic Schrödinger Equation, J. Comput. Phys., vol. 16, N3, 1974.
6. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. "Наука", М., 1966.
7. Фрязинов И.В. О разностных схемах для уравнения Пуассона в полярной, цилиндрической и сферической системах координат. ЖВМ и МФ, т.11, № 5, 1219-1228, 1971.
8. Касчиев М. Разностная схема для смешанной задачи для эллиптического уравнения в сфероидальной системе координат. Болг.матем.журнал "Сердика", т.4, № 4, 1978.
9. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. "Мир", М., 1977.
10. Klaus-Jurgen Bathe, Ed. Wilson, Numerical Methods in Finite Elements Analysis, Prentice-Hall, Englewood Clif. N.J., 1976.
11. Валицкий Ю.Н. О сходимости метода конечных разностей в проблеме собственных значений дифференциальных операторов. Вопросы корректности задач математической физики". Сборник научных трудов, Новосибирск, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 марта 1979 года.