

1 Metoda Numerova

Równanie Schrödingera jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu i w wielu przypadkach nie zawiera pierwszej pochodnej. Prostą metodą numeryczną rozwiązywania tego typu równań jest metoda Numerova. Metoda ta nosi też nazwę metody Numerova-Cowella-Goodwina-Foxa . . .

Ogólniej, metoda służy ona do rozwiązywania równań typu

$$\frac{d^2y}{dx^2} = U(x) + V(x)y, \quad (1)$$

gdzie $y = y(x)$. Do tej klasy równań, oprócz równania Schrödingera

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

zalicza się też równanie klasycznego, nie tłumionego oscylatora harmonicznego

$$m \frac{d^2y}{dx^2} = f_0 \cos \omega x - ky. \quad (3)$$

Prócz tego należy do niej równanie Poissona opisujące potencjał w przypadku odpowiednio symetrycznego rozkładu ładunku.

Metodę Numerova można zastosować do równań, które nie posiadają pierwszej pochodnej (*patrz jednak 1 Dodatek*), a ich lewa strona jest liniowa w y . Aby otrzymać schemat różnicowy równania drugiego rzędu skorzystamy z definicji różnic centralnych. Jeśli założymy, że współrzędna x została podzielona na małe odcinki h i końce tych odcinków oznaczymy przez x_n , natomiast odpowiadające im wartości $y(x_n)$ oznaczymy przez y_n , wówczas korzystając z rozwinięcia $y(x)$ w szereg Taylora, możemy zapisać

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{dy}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3y}{dx^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4y}{dx^4} + \dots \quad (4)$$

Podobnie

$$y_{n-1} = y_n - h \frac{dy}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{d^3y}{dx^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4y}{dx^4} + \dots \quad (5)$$

Stąd dostaniemy

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} \approx 2 \left(\frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4y}{dx^4} + O(h^6) \right). \quad (6)$$

W celu ułatwienia zapisu oznaczmy prawą stronę równania (1) przez

$$F = U(x) + V(x)y. \quad (7)$$

Składając równanie (1) i równanie (6) otrzymamy

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2 F_n + \frac{h^4}{12} \frac{d^2 F}{dx^2} + O(h^6). \quad (8)$$

Zastąpimy teraz drugą pochodną F równaniem różnicowym podobnym do równania (6), a więc

$$F_{n+1} - 2F_n + F_{n-1} \approx 2 \left(\frac{h^2}{2!} \frac{d^2 F}{dx^2} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4 F}{dx^4} + O(h^6) \right). \quad (9)$$

W ten sposób otrzymamy różnicowy algorytm Numerowa całkowania równania (1)

$$y_{n+1} = \frac{2y_n - y_{n-1} + h^2/12(U_{n+1} + 10F_n + F_{n-1})}{(1 - V_{n+1}h^2/12)} + O(h^6). \quad (10)$$

Wykorzystaliśmy tutaj liniowość prawej strony równania (1) w zmiennej zależnej y .

Na podstawie tego wzoru widzimy, że wykonanie jednego kroku całkowania z dużą dokładnością, równą $O(h^6)$, a więc wyliczenie kolejnego y_n , wymaga tylko jednokrotnego wyznaczenia funkcji U i V . Metoda Rungego-Kutty, w celu osiągnięcia tej samej dokładności, potrzebuje obliczyć sześć wartości U i sześć wartości V na jeden krok całkowania (patrz: Press, Teukolsky, Vetterling, Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge UP, Cambridge, 1992.)

Z równania (10) widać, że dla wyznaczenia wartości y_{n+1} potrzebujemy znać wartość y w dwu punktach poprzednich, a więc y_n i y_{n-1} . Musimy więc zastanowić się jak rozpocząć obliczenia. Zakładamy, że znamy wartość początkową $y_0 = y(x_0)$, kt/ora pozwala obliczyć F_0 i znamy pochodną y'_0 (zagadnienie Cauchy). Chcąc wyznaczyć y_2 z dokładnością $O(h^6)$ musimy z taką dokładnością znać y_1 . Okazuje się jednak, że wystarczy niższa dokładność obliczeń y_1 , równa $O(h^5)$, a to z tego względu, iż błąd końcowy algorytmu jest rzędu h^5 , a y_1 wyznaczamy tylko raz.

Najlepsze co możemy zrobić to obliczyć y_1 z rozwinięcia Taylora

$$y_1 = y_0 + hy'_0 + h^2/2!F_0 + h^3/3!F'_0 + h^4/4!F''_0 + O(h^5). \quad (11)$$

Za pochodną F'_0 wstawiamy

$$F'_0 = \frac{F_1 - F_0}{h} + O(h) \quad (12)$$

i obcinamy tak otrzymany szereg. Daje to

$$y_1 = \frac{y_0 + hy'_0 + h^2/6(U_1 - 2F_0)}{1 - V_1h^2/6} + O(h^4). \quad (13)$$

Użycie tak wyliczonego y_1 z dokładnością $O(h^4)$, może spowodować, wzrost globalnego błędu obliczeń do $O(h^4)$!

Z równania (11) widzimy, że w celu zmniejszenia błędu, powinniśmy jak najdokładniej obliczyć drugą pochodną F_0'' . Niektórzy autorzy sugerują by zrobić to analitycznie co jednak nie zawsze jest praktyczne. Inni proponują by obliczyć y_1 z równania (11) bez członów F_0' i F_0'' i następnie zastosować standardowy algorytm Numerowa (1) w celu pierwszego oszacowania y_2 . Wartość tę można następnie wykorzystać do wyznaczenia F_0'' . Powtarzając obliczenia, lecz już teraz z wykorzystaniem F_0'' , można uzyskać nowe wartości y_1 i y_2 . Cykl obliczeń trwa do momentu gdy obie wartości y_1 i y_2 przestaną się zmieniać. W tej sytuacji przechodzimy do dalszych obliczeń według algorytmu Numerowa. Jeszcze inna możliwość wyliczenia y_1 polega na wykonaniu jednego kroku całkowania z wykorzystaniem innego, samostartującego algorytmu całkowania i następnie na przejściu do metody Numerowa.

Założmy tymczasem, że mamy pierwsze oszacowanie y_1 , które pozwoli oszacować F_2 . Korzystając z F_0 , F_1 i F_2 możemy oszacować F_0'' i stąd, z żadaną dokładnością, otrzymać y_1 . Można powiedzieć, że poszukujemy y_1 w postaci

$$y_1 = y_0 + hy_0' + h^2(aF_0 + bF_1 + cF_2). \quad (14)$$

Stałe a , b , c powinny być takie, by równania (11) i (14) były ze sobą zgodne. Uzyskamy je rozwijając F_1 i F_2 w szereg Taylora w punkcie x_0 .

$$\begin{aligned} (aF_0 + bF_1 + cF_2) &= aF_0 + b(F_0 + hF_0' + h^2/2F_0'' + \dots) + c(F_1 + hF_1' + h^2/2F_1'' + \dots) \\ &= \dots = \\ &= F_0(a + b + c) + F_0'h(b + 2c) + F_0''h^2/2(b + c + 3c + c) + \dots \end{aligned}$$

Porównując współczynniki tego rozwinięcia z odpowiadającymi im współczynnikami w równaniu (11) dostaniemy

$$\begin{aligned} a + b + c &= 1/2, \\ b + 2c &= 1/6, \\ b + 4c &= 1/12. \end{aligned} \quad (15)$$

Stąd

$$a = 7/24, \quad b = 1/4, \quad c = -1/24. \quad (16)$$

Możemy więc zapisać

$$y_1 = y_0 + hy_0' + h^2/24(7F_0 + 6F_1 - F_2) + O(h^5), \quad (17)$$

$$y_2 = \frac{2y_1 - y_0 + h^2/12(U_2 + 10F_1 + F_0)}{(1 - \nu_2 h^2/12)} + O(h^5). \quad (18)$$

Z dokładnością do członów $O(h^5)$ układ równań (18) jest liniowy względem y_1 i y_2 (uwaga: y_1 i y_2 wchodzą do F_1 , F_2).

$$a_{11}y_1 + a_{12}y_2 = b_1; \quad a_{21}y_1 + a_{22}y_2 = b_2. \quad (19)$$

gdzie

$$a_{11} = 1 - V_1 h^2 / 4, \quad (20)$$

$$a_{12} = V_2 h^2 / 24, \quad (21)$$

$$a_{21} = -2 - 5V_1 h^2 / b, \quad (22)$$

$$a_{22} = -1 - V_2 h^2 / 12, \quad (23)$$

$$b_1 = y_0 + h y'_0 + h^2 (7F_0 + 6U_1 - U_2) / 24, \quad (24)$$

$$b_2 = -y_0 + h^2 (F_0 + 10U_1 + U_2). \quad (25)$$

Stąd dostajemy y_1 z błędem $O(h^5)$.

$$y_1 = \frac{a_{22} b_1 - a_{12} b_2}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}} \quad (26)$$

$$y_1 = \frac{y_0(1 - V_2 h^2 / 24) + h y'_0(1 - V_2 h^2 / 12) + h^2 / 24 (7F_0 + 6U_1 - U_2) - h^4 V_2 / 36 (F_0 + 2U_1)}{1 - V_1 h^2 / 4 + V_1 V_2 h^4 / 18}. \quad (27)$$

W pokazanej, ulepszonej metodzie Numerowa startujemy z równania (27) i dalej korzystamy z równania (10).

Z a d a n i e 1.

Powtórzyć obliczenia prowadzące do wartości współczynników a, b, c pokazanych w równaniu (16).

Z a d a n i e 2.

Napisać podprogram (PASCAL, FORTRAN, C++) rozwiązywania równań różniczkowych metodą Numerowa i wykonać test programu sprawdzając w tym celu zgodność wyników numerycznych z rozwiązaniami analitycznymi kilku znanych równań. Jak krok całkowania h wpływa na wyniki obliczeń? Wykonać rysunki porównawcze rozwiązań dla trzech różnych kroków całkowania.

Z a d a n i e 3.

Rozwiązać równanie $-0.5y'' + y + x = 0, y(0) = 1, y'(0) = 0$, stosując metodę Numerowa.

Dodatek. Użyteczna transformacja

LITERATURA: Stephen B. Haley, An Underrated entanglement: Riccati and Schrödinger equations, Am. J. Phys., 65, March 1997, pp237–243.

W takich sytuacjach jak np. elektron w polu magnetycznym, równanie Schrödingera zawiera pierwszą pochodną. Zdarza się to również w innych przypadkach, które prowadzą do równań drugiego rzędu. Rozpatrzmy równanie

$$\frac{d^2 Z}{dx^2} - 2a(x) \frac{dZ}{dx} + b(x)Z(x) = 0, \quad (28)$$

w którym $Z(x)$ jest nieznaną funkcją, a współczynniki $a(x)$ i $b(x)$ są funkcjami x . Pierwszą pochodną można wyeliminować wykonując transformację (patrz np. Kamke)

$$Z(x) = Y(x) \exp \left[\int^x a(x') dx' \right]. \quad (29)$$

Prowadzi to do następującego równania dla $Y(x)$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + f(x)Y(x) = 0, \quad (30)$$

gdzie

$$f(x) = \frac{da}{dx} - a^2(x) + b(x). \quad (31)$$

Podana transformacja jest częścią złożonej transformacji Liouville'a używanej przez Berezina i Shubina do wyznaczenia asymptotycznych własności funkcji własnych równania Schrödingera (patrz: F.A. Berezin, M.A. Shubin, Urownienie Schrödingera, Moscow, 1983.)

Postać (30) nosi nazwę *postaci kanonicznej* równania różniczkowego drugiego rzędu (patrz następny rozdział).

Znalezienie transformacji odwrotnej, która pozwala otrzymać Z z zadanych funkcji Y i $f(x)$ wymaga rozwiązania równania Riccatiego

$$\frac{da}{dx} - a^2(x) = f(x) - b(x). \quad (32)$$

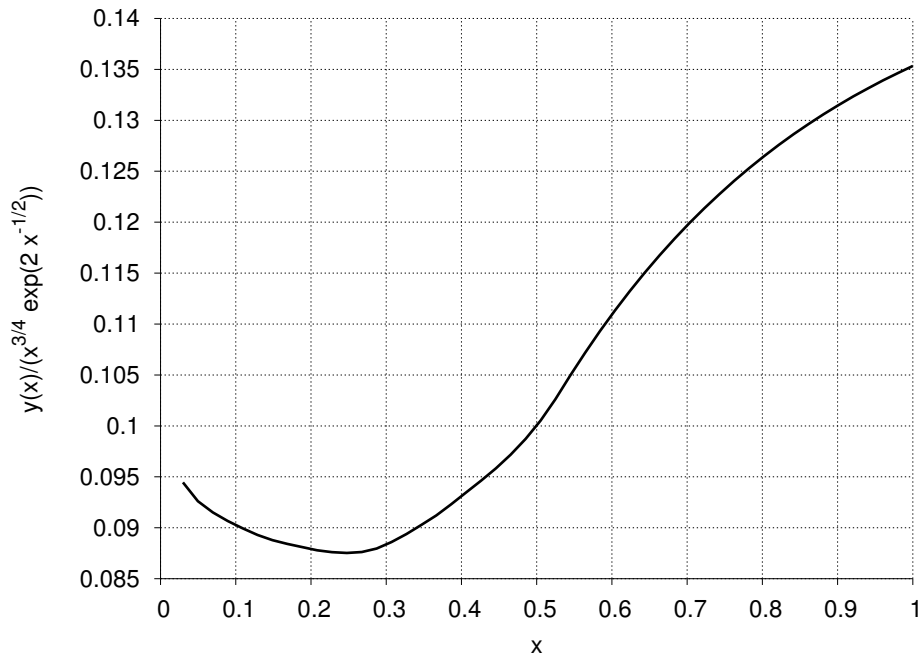
Szczególnym rozwiązaniem równania (32), które jest transformacją odwrotną jest

$$a(x) = i\sqrt{f(x)}, \quad b(x) = -\frac{da}{dx}. \quad (33)$$

Ponieważ znamy zazwyczaj postać analityczną obu współczynników (chyba, że mamy ich wartości numeryczne) to wykonanie podanej transformacji (29) jest rzeczą prostą i możemy bezpośrednio stosować metodę Numerowa do otrzymanego równania (30).

Z a d a n i e 4.

Rozwiązać równanie $x^3 y'' = y[y(1) = 1, y'(1) = 0]$ na odcinku $(0, 1)$. Narysować wykres funkcji $f(x) = y(x)/(x^{3/4} \exp(2x^{-1/2}))$. Wynik powinien być podobny do przedstawionego na rysunku.



Wykres zależności $y(x)/(x^{3/4} \exp(2x^{-1/2}))$ gdzie y jest rozwiązaniem równania $x^3 y'' = y$ [$y(1) = 1, y'(1) = 0$]. Równanie rozwiązano metodą Numerova-Cowella, z krokiem $h=0.0002$.