

VII.
METODA NUMEROVA
Janusz Adamowski

1 Wstęp

Metoda Numerova podaje bardzo dokładny algorytm rozwiązywania równania Poissona i niezależnego od czasu równania Schrödingera. Algorytm ten opiera się na aproksymacji drugiej pochodnej wyższego rzędu niż w przypadku rozwiązywania równań ruchu w mechanice klasycznej.

2 Równanie Poissona

Równanie Poissona służy do wyznaczenia potencjału $\Phi(\mathbf{r})$ pola elektrostatycznego utworzonego przez ładunki elektryczne o zadanej gęstości ładunku $\varrho(\mathbf{r})$.

Ogólna postać równania Poissona

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{\varrho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0}, \quad (1)$$

gdzie ε_0 jest przenikalnością elektryczną próżni.

Równanie Poissona we współrzędnych sferycznych (r, θ, ϕ)

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Phi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -\frac{\varrho(r, \theta, \phi)}{\varepsilon_0}, \quad (2)$$

przy czym $\Phi = \Phi(r, \theta, \phi)$.

Rozważamy rozkład ładunku o symetrii sferycznej

$$\varrho(\mathbf{r}) = \varrho(r), \quad (3)$$

gdzie $r = |\mathbf{r}|$.

Stosujemy metodę separacji zmiennych do przekształcenia równania (2). Zgodnie z tą metodą potencjał elektrostatyczny ma postać iloczynu

$$\Phi(r, \theta, \phi) = \frac{\varphi(r)}{r} Y(\theta, \phi), \quad (4)$$

gdzie $\varphi(r)$ jest funkcją pomocniczą, a $Y(\theta, \phi)$ jest funkcją kulistą.

Kątowa część operatora Laplace'a $\Omega(\theta, \phi)$ działa na funkcję kulistą następująco:

$$\Omega(\theta, \phi) Y(\theta, \phi) = l(l+1)Y(\theta, \phi), \quad (5)$$

gdzie $l = 0, 1, \dots$

W elektrostatyce liczba l oznacza **rzęd tensora momentu multipolowego** w rozwinięciu multipolowym potencjału.

Wartości $l = 0$ odpowiada monopol (skalar), $l = 1$ odpowiada dipol (wektor), $l = 2$ odpowiada kwadrupol (tensor rzędu drugiego), itd.

Zgodnie z (4) i (5) równanie Poissona (2) redukuje się do równania różniczkowego zwyczajnego drugiego stopnia

$$\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \varphi = -\frac{r\varrho}{\varepsilon_0}. \quad (6)$$

Najpierw rozważymy sferycznie symetryczne rozwiązania równania Poissona, czyli rozwiązania dla $l = 0$ (fale kuliste z $l = 0$). Podstawiając $l = 0$ do równania (6) otrzymujemy sferycznie symetryczne równanie Poissona o postaci

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = -\frac{r\rho}{\varepsilon_0}. \quad (7)$$

Rozwiązując to równanie otrzymujemy funkcję pomocniczą $\varphi(r)$, a z niej potencjał elektrostatyczny

$$\Phi(r) = \frac{\varphi(r)}{r}. \quad (8)$$

3 Równanie Schrödingera

Niezależne od czasu równanie Schrödingera dla cząstki o masie m_0 w polu centralnym o energii potencjalnej $U(r)$ ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\Psi + U(r)\Psi = E\Psi. \quad (9)$$

Podobnie jak równanie Poissona (2) równanie Schrödingera (9) można również rozwiązać metodą separacji zmiennych we współrzędnych sferycznych

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \frac{\psi(r)}{r}Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (10)$$

przy czym $\psi(r)$ jest funkcją pomocniczą.

Podstawiamy (10) do (9) i otrzymujemy radialne równanie Schrödingera

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left[E - \frac{l(l+1)}{2m_0r^2} - U(r) \right] \psi = 0 \quad (11)$$

Rozwiązanie równania (11) dla funkcji pomocniczej $\psi(r)$ pozwala nam na wyznaczenie radialnej funkcji falowej według wzoru

$$R(r) = \frac{\psi(r)}{r}. \quad (12)$$

4 Ogólna postać równań Poissona i Schrödingera

Równanie Poissona o postaci (6) i równanie Schrödingera o postaci (11) można zapisać w jednolity sposób za pomocą jednego ogólnego równania. Oba równania na funkcje pomocnicze $\varphi(r)$ (6) i $\psi(r)$ (11) którą można przedstawić w tej samej postaci ogólnej

$$\frac{d^2y}{dx^2} + g(x)y = S(x), \quad (13)$$

gdzie $y = y(x)$ jest szukaną funkcją zmiennej niezależnej x .

W przypadku równania Poissona

$$g(x) = \frac{l(l+1)}{x^2}, \quad (14)$$

przy czym dla $l = 0$ funkcja $g(x) = 0$, natomiast $S(x)$ jest **funkcją źródła** daną wzorem

$$S(x) = -\frac{xg(x)}{\varepsilon_0}. \quad (15)$$

W przypadku równania Schrödingera

$$g(x) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \left[E - \frac{l(l+1)}{2m_0x^2} - U(x) \right], \quad (16)$$

natomiast

$$S(x) = 0. \quad (17)$$

Rozważmy **lokalne własności** rozwiązań równania jednorodnego, tzn. równania (13) z $S = 0$, czyli równania

$$\frac{d^2y}{dx^2} + g(x)y = 0. \quad (18)$$

Rozwiązania lokalne równania (18) posiadają następujące własności:

- (1) Jeżeli $g(x) > 0$, czyli $g(x) = k^2(x)$, gdzie $k(x)$ jest funkcją rzeczywistą, to

$$y(x) \sim e^{\pm ik(x)x}. \quad (19)$$

Rozwiązania (19) są funkcjami oscylującymi z **lokalną kątową liczbą falową** $k(x)$.

- (2) Jeżeli $g(x) < 0$, czyli $g(x) = -\kappa^2(x)$, gdzie $\kappa(x)$ jest funkcją rzeczywistą, to

$$y(x) \sim e^{\pm \kappa(x)x}. \quad (20)$$

Rozwiązania (20) są funkcjami rosnącymi lub malejącymi wykładniczo z **lokalnym tłumieniem** $\kappa(x)$.

Ogólne własności równań Poissona i Schrödingera

Równanie Poissona jest typowym **równaniem dla problemu z zadanymi warunkami brzegowymi**.

Np. w przypadku jednej zmiennej [równanie (6)] jednoznaczne rozwiązania otrzymamy, jeżeli zadamy wartość funkcji $\varphi(r)$ w dwóch punktach lub wartości funkcji $\varphi(r)$ i jej pierwszej pochodnej $\varphi'(r)$ w jednym punkcie.

Równanie Schrödingera jest typowym **równaniem na wartości własne** E .

Ponadto jego rozwiązanie wymaga zadania warunków brzegowych dla funkcji falowej.

5 Algorytm Numerova

Wprowadzamy sieć węzłów $x_n = nh$, gdzie $n = 1, 2, \dots$, i rozwijamy funkcję $y(x)$ w szereg Taylora funkcji wokół węzła x_n . Otrzymujemy

$$y_{n\pm 1} = y_n \pm hy'_n + \frac{h^2}{2}y'' \pm \frac{h^3}{6}y''' + \frac{h^4}{24}y^{(iv)} \pm \frac{h^5}{120}y^{(v)} + \mathcal{O}(h^6), \quad (21)$$

przy czym $y_{n\pm 1} = y(x_n \pm h)$. W rozwinięciu (21) wszystkie pochodne funkcji $y(x)$ liczone są dla $x = x_n$.

Dodając stronami oba rozwinięcia (21) dla $y_{\pm 1}$ otrzymujemy trójpunktowy wzór różnicowy na drugą pochodną

$$y''_n = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(iv)} + \mathcal{O}(h^4). \quad (22)$$

We wzorze (22) zapisaliśmy w jawny sposób poprawkę rzędu $\mathcal{O}(h^2)$. Poprawkę tę można wyznaczyć z równania różniczkowego (13), które przepisujemy w postaci

$$\frac{d^2y}{dx^2} = S(x) - g(x)y. \quad (23)$$

Na podstawie równania (23) otrzymujemy oszacowanie czwartej pochodnej

$$y_n^{(iv)} = \frac{d^2}{dx^2} (S - gy) \Big|_{x=x_n}. \quad (24)$$

Czwarta pochodna (24) obliczona z dokładnością do $\mathcal{O}(h^2)$ wyrażona jest wzorem

$$y_n^{(iv)} = \frac{S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}}{h^2} - \frac{(gy)_{n+1} - 2(gy)_n + (gy)_{n-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2), \quad (25)$$

gdzie $(gy)_n = g(x_n)y(x_n)$. Podstawiamy (22) i (25) do równania (13) rozważanego dla $x = x_n$

$$y''_n + g_n y_n - S_n = 0. \quad (26)$$

W równaniu (26) przybliżamy drugą pochodną y''_n z dokładnością do $\mathcal{O}(h^4)$ zgodnie z (22).

Po pomnożeniu równania (22) stronami przez h^2 i przekształceniu otrzymujemy

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{h^2}{12}g_{n+1}\right) y_{n+1} \\ & - 2 \left(1 - \frac{5h^2}{12}g_n\right) y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}g_{n-1}\right) y_{n-1} \\ & = \frac{h^2}{12} (S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}) + \mathcal{O}(h^6). \end{aligned} \quad (27)$$

Równanie (27) jest **podstawowym równaniem algorytmu Numerova**.

Równanie (27) jest liniowym równaniem algebraicznym na nieznaną wartość y_{n+1} (lub y_{n-1}). Równanie (27) dostarcza wzoru rekurencyjnego na y_{n+1} (lub y_{n-1}). Może służyć do całkowania równania różniczkowego **do przodu**, czyli **w kierunku rosnącego x** , co oznacza następujący schemat rekurencyjny

$$(y_{n-1}, y_n) \longrightarrow y_{n+1} \longrightarrow y_{n+2} \longrightarrow \dots ,$$

lub **do tyłu**, czyli **w kierunku malejącego x** , tzn.

$$(y_{n+1}, y_n) \longrightarrow y_{n-1} \longrightarrow y_{n-2} \longrightarrow \dots .$$

Zgodnie z (27) błąd lokalny całkowania metodą Numerova wynosi $\mathcal{O}(h^6)$.

Dla porównania błąd lokalny metody Rungego-Kutty 2. rzędu wynosi $\mathcal{O}(h^3)$, a metody Rungego-Kutty czwartego rzędu $\mathcal{O}(h^5)$.

Wynika stąd **duża dokładność metody Numerova**.

Formuła rekurencyjna (27) jest trójczłonowa, a więc do jej wystartowania – przy całkowaniu do przodu – wymagana jest znajomość y_{n-1} oraz y_n . Wartości te znajdujemy z zadanych warunków brzegowych w następujący sposób.

Powiedzmy, że całkujemy równanie różniczkowe do przodu w przedziale $[a, b]$. Wtedy zadane warunki brzegowe w punkcie a mają postać

$$y(a) = y_a , \tag{28}$$

$$y'(a) = y'_a . \tag{29}$$

W pierwszym kroku zamiast y_{n-1} podstawiamy y_a , natomiast y_n wyliczamy z rozwinięcia w szereg Taylora z dokładnością $\mathcal{O}(h)$ jako

$$y_n = y_a + hy'_a . \tag{30}$$

6 Zastosowanie algorytmu Numerova do całkowania równania Poissona

Rozważmy równanie (7) na funkcje pomocniczą $\varphi(r)$. Pamiętamy, że potencjał elektrostatyczny obliczamy ze wzoru (8). Jeżeli $\varrho(0) = \varrho_0$ jest skończone, to warunek brzegowy dla $\varphi(r) = r\Phi(r)$ przyjmuje postać

$$\varphi(0) = 0 . \tag{31}$$

Drugim warunkiem brzegowym jest zadana wartość pierwszej pochodnej

$$\varphi'_0 = \left. \frac{d\varphi}{dr} \right|_{r=0} , \tag{32}$$

gdzie φ'_0 jest zadane.

Nasze zadanie polega na całkowaniu równania (7) w przedziale $[0, \infty)$. W praktyce musimy przyjąć przedział skończony $[0, B]$, gdzie B jest odpowiednio duże, lecz skończone ($B < \infty$). Do wystartowania algorytmu Numerova używamy wartości

$$\varphi_0 = \varphi(0) = 0 \quad (33)$$

oraz

$$\varphi_1 = \varphi_0 + h\varphi'_0 = h\varphi'_0. \quad (34)$$

Stosujemy algorytm Numerowa (27) w wersji całkowania do przodu (w tym przypadku całkujemy **na zewnątrz** od centrum w $r = 0$) pamiętając, że $g = 0$ oraz $S = -r\rho(r)/\varepsilon_0$.

Podstawowa formuła algorytmu (27) przyjmuje w tym przypadku postać

$$\varphi_{n+1} = 2\varphi_n - \varphi_{n-1} + \frac{h^2}{12}(S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}) + \mathcal{O}(h^6). \quad (35)$$

Rozwiązania niefizyczne

Pomimo dużej dokładności algorytmu Numerova praktyczne zastosowanie wzoru (35) do całkowania równania Poissona w przedziale $[0, B]$ może prowadzić do pewnego błędu o charakterze systematycznym, który występuje dla dużych wartości r .

W celu znalezienia źródła tego błędu rozważmy rozwiązanie równania Poissona (7) w obszarze asymptotycznym, tzn. dla dużych r . W tym obszarze $\rho(r) \rightarrow 0$ i równanie (7) przechodzi w równanie jednorodne

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = 0. \quad (36)$$

Równanie (36) posiada dwa liniowo niezależne rozwiązania

$$\varphi_1(r) = C_1 r \quad (37)$$

oraz

$$\varphi_2(r) = C_2, \quad (38)$$

gdzie C_1 i C_2 są stałymi.

Rozwiązanie ogólne równania (36) jest kombinacją liniową rozwiązań (37) i (38), czyli

$$\varphi(r) = C_1 r + C_2. \quad (39)$$

Wzór (39) podaje równocześnie rozwiązanie równania niejednorodnego (7), które jest słuszne w obszarze asymptotycznym, czyli dla $r \rightarrow \infty$.

Zastanówmy się teraz nad sensem fizycznym rozwiązań (37) i (38). W tym celu rozważamy otrzymane z nich potencjały elektrostatyczne

$$\Phi_1(r) = C_1 = \text{const} \quad (40)$$

oraz

$$\Phi_2(r) = \frac{C_2}{r}. \quad (41)$$

Sens fizyczny posiada wyłącznie potencjał $\Phi_2(r)$, ponieważ dla $r \rightarrow \infty$ dowolny ograniczony przestrzennie rozkład ładunku $\rho(r)$ można traktować jako ładunek punktowy wytwarzający potencjał kulombowski o postaci (41). A zatem dla $r \rightarrow \infty$ poprawne fizycznie rozwiązanie musi mieć postać asymptotyczną

$$\Phi(r) \sim \frac{1}{r}. \quad (42)$$

Zastosowanie algorytmu Numerova (z całkowaniem na zewnątrz) generuje **poprawne matematycznie (dokładne) rozwiązanie** problemu, które w obszarze dużych r ma postać

$$\varphi(r) = C_1 r + C_2.$$

Jednakże pierwszy wyraz w tym rozwiązaniu **nie posiada sensu fizycznego**, ponieważ prowadzi do niefizycznego potencjału

$$\Phi_1 = \text{const} \neq 0.$$

7 Poprawa działania algorytmu Numerova

Istnieją dwie metody usunięcia niefizycznych rozwiązań otrzymanych za pomocą algorytmu Numerova.

7.1 (1) Odjęcie niefizycznego rozwiązania

W obszarze $r \geq r_c$, gdzie r_c jest odpowiednio duże, **poprawne fizycznie rozwiązanie** otrzymujemy odejmując od rozwiązania numerycznego $\varphi_{num}(r)$ część niefizyczną, która w tym obszarze asymptotycznym jest znana. Jest to funkcja liniowa $C_1 r$. Otrzymujemy prosty sposób poprawy działania algorytmu Numerova

$$\varphi(r) = \varphi_{num}(r) - C_1 r, \quad (43)$$

gdzie C_1 jest tangensem kąta nachylenia wykresu funkcji $\varphi_{num}(r)$, który wyznaczamy z dokładnego rozwiązania numerycznego.

7.2 (2) Całkowanie do środka

Algorytm Numerova może być wystartowany w odpowiednio dużej odległości $r = B$ od centrum. Wtedy całkowanie będzie przebiegać **do wnętrza (do środka)** rozkładu ładunku. Przy tym sposobie całkowania ulegają zmianie warunki brzegowe.

Dla odpowiednio dużego r dowolny rozkład ładunku zawarty w skończonej objętości wytwarza potencjał kulombowski

$$\Phi(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (44)$$

gdzie Q jest całkowitym ładunkiem, który obliczamy całkując analitycznie lub numerycznie znaną gęstość ładunku

$$Q = \int d^3r \varrho(r). \quad (45)$$

Z postaci analitycznej potencjału (44) obliczamy asymptotyczną postać funkcji pomocniczej, czyli

$$\varphi(r) = Q/4\pi\epsilon_0. \quad (46)$$

A zatem warunek brzegowy dla odpowiednio dużego B ma postać

$$\varphi(B) = \varphi(B+h) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0}. \quad (47)$$

Znamy więc φ_{n+1} oraz φ_n i możemy zastosować algorytm Numerova do wyznaczenia $\varphi_{n-1}, \varphi_{n-2}, \dots$. W ten sposób całkujemy równanie Poissona w kierunku malejącego r , czyli do wnętrza (do środka) obszaru całkowania.

Należy zauważyć, że optymalne zastosowanie algorytmu powinno obejmować zarówno całkowanie na zewnątrz jak i do wewnątrz. Rozwiązania otrzymane za pomocą obu sposobów całkowania należy "skleić" z sobą w pewnym punkcie pośrednim r_s , przy czym $0 < r_s < B$.