

# Numerical solution of time-dependent Schrödinger equation by combination of the finite difference method and particle swarm optimization

Mohamad Javad Mahmoodabadi<sup>1,\*</sup>, Fatemeh Sadeghi Googhari<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Mechanical Engineering, Sirjan University of Technology, Sirjan, Iran

<sup>2</sup>Department of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Received: 13.12.2019 Final revised: 04.12.2020 Accepted: 26.04.2021

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16786](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16786)

## Abstract

In this paper, a new numerical method is introduced to solve the time-dependent nonlinear Schrödinger equation. The proposed method is a combination of a novel metaheuristic optimization algorithm with the finite difference method. First, the regarded Schrödinger equation with the related boundary and initial conditions are converted into an unconstrained problem. For this purpose, the boundary and initial conditions are satisfied using the penalty method and a proper objective function is defined through the discretized governing equation. Then, a successful version of the particle swarm optimization is implemented to minimize the identified error function and find the best nodal values. The simulation results for several cases are illustrated to depict the effectiveness and capability of the introduced strategy for solving the time-dependent nonlinear Schrödinger equation.

**Keyword:** time-dependent Schrödinger equation, particle swarm optimization algorithm, finite difference method, penalty method.

---

\*Corresponding Author: mahmoodabadi@sirjantech.ac.ir



## حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان با استفاده از ترکیب روش

### تفاضل محدود و الگوریتم بهینه‌سازی تجمعی ذرات

محمدجواد محمودآبادی<sup>1\*</sup>، فاطمه صادقی گوغری<sup>2</sup>

<sup>1</sup>دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی سیرجان، سیرجان، ایران

<sup>2</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه شهیدباهنر، کرمان، ایران

دریافت: 1398/09/22 ویرایش نهایی: 1399/09/14 پذیرش: 1400/02/06

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16786](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16786)

#### چکیده

در این مقاله، با استفاده از یک روش عددی جدید به حل معادله شرودینگر وابسته به زمان پرداخته شده است. روش ارائه شده، حاصل ترکیب یک الگوریتم فرا ابتکاری قوی با سرعت و دقت بالا و روش تفاضل محدود است. به این منظور، ابتدا فضای حل متغیرهای مسئله مورد نظر با استفاده از روش تفاضل محدود شبکه‌بندی و سپس، معادله شرودینگر با شرایط مرزی مشخص به یک مسئله بدون قید تبدیل شده است. در ادامه، به کمک روش ضریب پنالتی، شرایط مرزی ارضاء و یک تابع هدف مناسب تعریف شده است. در پایان، با استفاده از یک مدل بهبود یافته از الگوریتم تجمعی ذرات به بهینه‌سازی تابع هدف مورد نظر پرداخته شده است. در چندین مثال مختلف مقدار خطای حاصل از مقایسه مقدار دقیق تابع و مقدار عددی محاسبه شده بیانگر موفقیت روش عددی پیشنهادی در حل مسئله شرودینگر وابسته به زمان است.

**کلیدواژه‌گان:** معادله شرودینگر وابسته به زمان، الگوریتم بهینه‌سازی تجمعی ذرات، روش تفاضل محدود، روش ضریب پنالتی

#### مقدمه

ذره را برای تمام زمان‌ها تعیین می‌کند، با داشتن شرایط اولیه مناسب نیز می‌توان معادله موج را در کوآنتوم به وسیله معادله شرودینگر برای همه زمان‌ها محاسبه کرد. معادله شرودینگر در سال 1926 توسط اروین شرودینگر فرمول‌بندی شد که عمومی‌ترین شکل آن به صورت زیر بیان می‌شود:

$$i \hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + v(x,t) \psi(x,t) \quad 1$$

با وجود اینکه چندین سال از فرمول‌بندی معادله شرودینگر می‌گذرد، اما هنوز محققان زیادی در زمینه حل این معادله فعالیت می‌کنند. محاسبه جواب‌های معادله شرودینگر به این دلیل دارای اهمیت است که شامل همه اطلاعات ضروری یک سیستم کوآنتومی می‌باشد. در مقایسه با فیزیک کلاسیک، معادله شرودینگر مانند قانون دوم نیوتون عمل می‌کند، همان‌طور که در فیزیک کلاسیک قانون نیوتون، موقعیت

تاجی‌زاده با استفاده از روش اولین انتگرال [24] و ایدکی با استفاده از روش دیفرانسیل تبدیل بهبود یافته [25] به بررسی پاسخ‌های این معادله پرداخته‌اند. سیادوی معادله شرودینگر غیرخطی را با استفاده از یک تابع تبدیل به معادله شرودینگر خطی تبدیل کرده و حل دقیق آن را به دست آورده است [26]. ویتانوف و دیمیتروا از روش اصلاح شده ساده‌ترین معادله برای تحلیل معادلات غیرخطی شرودینگر بهره برده‌اند [27]. در بخش روش‌های عددی نیز کارهای متعددی انجام شده است که از جمله آنها می‌توان موارد زیر را نام برد. روش بدون المان پتروف-گالرکین محلی برای حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان سه بعدی [28]، و دو بعدی [29]، روش توابع پایه شعاعی [30] و روش بی اسپلاین [31].

در این مقاله، یک روش ترکیبی جدید برای تحلیل معادله شرودینگر یک بعدی وابسته به زمان با استفاده از روش تفاضل محدود و یک مدل بهبودیافته از الگوریتم تجمعی ذرات PSO به نام بهینه‌سازی تجمعی ذرات کاوشگر (HEPSO) ارائه شده است. در بخش اول، به تعریف مسئله و در بخش دوم، به معرفی الگوریتم تجمعی ذرات و نسخه بهبود یافته آن پرداخته می‌شود. سپس، به کمک روش تفاضل محدود، تابع هدف مسئله گسسته‌سازی می‌شود. در بخش بعد، معادله شرودینگر برای سه حالت متفاوت تحلیل و نتایج آن آورده می‌شود. همچنین مسأله معروف ذره در جعبه یک بعدی نیز به عنوان یک مثال واقعی از معادله شرودینگر به کمک روش معرفی شده حل شده است. نهایتاً، نتایج کلی مقاله بحث شده‌اند.

که در آن،  $v(x, t)$  انرژی پتانسیل،  $m$  جرم ذره،  $\psi(x, t)$  تابع موج و  $\hbar$  ثابت پلانک است. این معادله به دو صورت وابسته به زمان و مستقل از زمان و در شکل‌های خطی و غیرخطی در علوم اپتیک، پلاسما، مکانیک کوانتومی و سایر شاخه‌های علم فیزیک کاربرد دارد [1].

روش‌های متعددی برای حل معادله شرودینگر ارائه شده است که از جمله آن‌ها می‌توان به روش فاکتوریزاسیون [2]، روش نیکی فرو-یوارو [3-6]، توابع لژاندر [7]، روش ابرتقارن [8-9]، روش بسط  $1/N$  [10]، روش المان محدود [11] و غیره اشاره کرد. علاوه بر این، در تحقیقاتی دیگر با استفاده از روش‌های مذکور به حل معادله شرودینگر با پتانسیل‌های مختلف نیز پرداخته شده است که از جمله می‌توان به موارد زیر اشاره کرد. جواب‌های تقریبی با یک پتانسیل نمایی [12]، با پتانسیل رزون-مورس تغییر یافته [13]، پتانسیل غیرمرکزی [14]، پتانسیل‌های دوره‌ای در فضای ممنوم [15]، پتانسیل موبوس [16]، مجموعه پتانسیل‌های یوکاوا [17-18]، پتانسیل هولتن [19]، پتانسیل کراتزر [20]، پتانسیل شبه‌هارمونیک [21] و پتانسیل می [22].

همچنین، گروهی از محققان به حل تابع شرودینگر به عنوان یک تابع کاملاً ریاضی، در دو بخش، روش‌های تحلیلی و روش‌های عددی پرداخته‌اند. در روش حل تحلیلی تابع شرودینگر می‌توان به کار صدیقی و گنجی اشاره کرد که با استفاده از تکنیک هموتویی در توپولوژی، توابع مختلف شرودینگر یک بعدی وابسته به زمان را به دست آورده‌اند [23]. علاوه بر این،

## تعریف مسئله

در حالت کلی، معادله شرودینگر یک بعدی وابسته به‌زمان به‌عنوان یک معادله دیفرانسیل با متغیرهای

$$\Omega = [a, b] \times [c, d] \text{ در ناحیه } \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \frac{\partial \psi}{\partial t}, x, t$$

را می‌توان به‌صورت زیر تعریف کرد:

$$f\left(\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}, \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, x, t\right) = \varphi(x, t) \quad 1$$

که شرایط اولیه و مرزی آن را می‌توان به‌ترتیب به‌شکل زیر بیان نمود:

$$g_1(t_j) = \psi(a, t), g_2(t_j) = \psi(b, t) \quad 2$$

$$c < t < d$$

$$f_1(x) = \psi(x, c), f_2(x) = \psi(x, d) \quad 3$$

$$a < x < b$$

با توجه به‌اینکه هر تابع دیفرانسیلی وابسته به‌متغیری مانند  $u(x)$  با شرایط داده شده:

$$Lu(x) = f(x), x \in \Omega \subset R^d \quad 4$$

$$Bu(x) = g(x) \text{ on } \partial\Omega \quad 5$$

دارای یک جواب منحصر بفرد است که در روابط بالا  $B$  و  $L$  عملگرهای دیفرانسیلی در فضای  $x$ ،  $u(x)$  متغیر مورد نظر،  $\Omega$  دامنه و  $\partial\Omega$  به‌معنای مرز هستند، مقدار متغیر  $u(x)$  که در معادلات 5 و 6 صدق کند را می‌توان از طریق تبدیل مسئله شرایط مرزی به‌یک مسئله بهینه‌سازی به‌صورت زیر به‌دست آورد [32]:

Minimize :

$$E_1[u(x_i)] = \sum_{\Omega} [Lu(x_i) - f(x_i)]^2 \quad 6$$

subject to :

$$E_2[u(x_i)] = \sum_{\partial\Omega} [Bu(x_i) - g(x_i)]^2 = 0 \quad 7$$

این مسئله بهینه‌سازی با تبدیل روابط 7 و 8 به‌یک تابع هدف به‌شکل زیر حل می‌شود:

8

$$\text{fitness function : } E_1[u(x_i)] + \lambda E_2[u(x_i)]$$

که در آن  $\lambda$  ضریب پناستی و  $u(x_i)$  جواب معادله در نقطه نام است. هدف در این مقاله، تبدیل معادله شرودینگر به‌کمک تفاضل محدود به‌یک تابع هدف در فضای گسسته و حداقل سازی آن به‌وسیله یک الگوریتم بهینه‌سازی پیشرفته به‌نام HEPSO است.

## الگوریتم بهینه‌سازی تجمعی ذرات

یکی از روش‌های بهینه‌سازی توابع غیرخطی، الگوریتم تجمعی ذرات PSO است که در سال 1995 توسط کندی و ابره‌ارت، بر اساس شبیه‌سازی زندگی طبیعی و رفتار تجمعی ماهی‌ها و پرندگان برای یافتن غذا معرفی شده است [33]. الگوریتم PSO، یک مدل محاسباتی براساس هوشمند جمعی است که در آن هر ذره دارای یک حافظه کوتاه‌مدت بوده که اطلاعاتش را در آن ذخیره می‌کند. در این الگوریتم، هر ذره حرکتش را با حرکت ذرات پیشرو تطبیق می‌دهد. در واقع هر ذره به‌سمت بهترین موقعیت کل جمعیت  $x_{gbest}$  موجود و بهترین موقعیت خودش در گذشته  $x_{best_i}$  حرکت می‌کند. زمانی که ذره یک موقعیت بهتر از موقعیت‌های پیشین پیدا کند آنگاه موقعیتش را با بهترین موقعیت موجود بروزرسانی می‌کند.

آغاز فرآیند بهینه‌سازی توسط الگوریتم با انتخاب جمعیتی شامل  $n$  ذره تصادفی است. به‌عبارت دیگر، به‌ذره نام یک بردار مکان  $x_i$  و یک بردار سرعت  $v_i$  به‌صورت تصادفی تعلق می‌گیرد. سپس، در هر تکرار از فرآیند بهینه‌سازی، بردارهای سرعت جدید و

موقعیت جدید این ذره به کمک روابط زیر محاسبه می‌شود:

$$v_i^{it+1} = wv_i^{it} + r_1c_1 [x_{gbest} - x_i^{it}] \quad 9$$

$$+ r_2c_2 [x_{pbest_i} - x_i^{it}] \quad 10$$

$$x_i^{it+1} = x_i^{it} + v_i^{it+1}$$

که در آن  $c_1$  و  $c_2$  به ترتیب فاکتورهای یادگیری اجتماعی و شخصی هستند.  $r_1$  و  $r_2$  بردارهای شامل اعداد تصادفی بین صفر و یک می‌باشند. همچنین  $w$  نیز پارامتر وزن است که تأثیر سرعت مرحله قبل را بر سرعت جدید تعیین می‌کند و  $it$  به معنای شماره تکرار است [33].

از آنجا که رفتار الگوریتم مذکور، به شدت به ضرایب  $c_1$  و  $c_2$  و  $w$  و حتی روابط  $v$  و  $x$  وابسته است، لذا در زمینه بهبود عملکرد آن محققان زیادی فعالیت کرده‌اند. الگوریتم HEPSO یک نسخه بهبودیافته از این روش بهینه‌سازی است که از ایده ترکیب الگوریتم‌های دیگر با آن استفاده کرده است [34]. در الگوریتم HEPSO، پارامتر وزن به جای یک مقدار ثابت به صورت یک تابع نمایی در نظر گرفته شده است [34].

$$w(f) = \frac{1}{1 + 1.5 \exp(-2.6f)} \in [0.4, 0.9] \quad 11$$

$$\forall f \in [0, 1] \quad 12$$

$$f = \frac{d_g - d_{\min}}{d_{\max} - d_{\min}} \in [0, 1]$$

$$d_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1, j \neq i}^N \sqrt{\sum_{k=1}^D (x_i^k - x_j^k)^2} \quad 13$$

که  $N$  و  $D$  به ترتیب اندازه جمعیت و تعداد متغیرهای مورد نظر می‌باشد.  $d_g$  فاصله اقلیدسی بهترین موقعیت کل از دیگر ذرات است و  $d_{\min}$  و  $d_{\max}$  بیشترین و کمترین مقدار  $d_i$  در مقایسه با تمام ذرات است.

همچنین، برای بهتر شدن جواب‌ها فاکتورهای یادگیری به این صورت تعریف می‌شوند:

$$c_1 = c_{1i} - (c_{1i} - c_{1f}) \left( \frac{it}{\max iteration} \right) \quad 14$$

$$c_2 = c_{2i} - (c_{2i} - c_{2f}) \left( \frac{it}{\max iteration} \right)$$

که در آن  $c_{1i}$  و  $c_{2i}$  مقادیر اولیه فاکتورهای یادگیری و  $c_{1f}$  و  $c_{2f}$  مقادیر نهایی آنها هستند. همچنین  $it$  به معنای شماره تکرار جاری و  $\max iteration$  به معنای بیشترین تعداد تکرارها است. طبق این تعاریف، مشخص است که  $c_1$  و  $c_2$  به صورت خطی بر حسب تکرار به ترتیب کاهش و افزایش می‌یابند.

همچنین در این الگوریتم، دو عملگر برای بهبود دقت جواب‌ها و افزایش سرعت الگوریتم پیشنهاد شده است. عملگر اول، از الگوریتم ژنتیک الهام گرفته شده است که براساس آن بردار سرعت به صورت زیر تغییر یافته است:

$$v_i^{it+1} = rand \left( \frac{c_2}{2} - x_{gbest}^{it} - x_{pbest_i}^{it} - x_i^{it} \right) \quad 15$$

و عملگر دوم، از بردار بهترین منبع غذایی معرفی شده در الگوریتم کلونی زنبور عسل، برای بهبود نتایج کمک می‌گیرد:

$$x_i^d(it+1) = x_i^d(it) + (2rand - 1) \times (x_i^d(it) - x_j^d(it)) \quad 16$$

که در آن  $d$  یک عدد تصادفی صحیح در بازه  $[1, D]$  و  $j$  نیز یک عدد تصادفی صحیح بین  $[1, N]$  است. در این الگوریتم، برای هر یک از این عملگرها یک احتمال وقوع تعریف شده است که با توجه به آنها موقعیت ذره  $\lambda$ م با استفاده از یکی از روابط بالا بروز رسانی می‌شود.

### روش انجام

در این مقاله، با ترکیب روش‌های تفاضل محدود و الگوریتم HEPSO، به محاسبه تقریبی متغیر  $\Psi(x, t)$

سپس،  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$  نیز در راستای  $t$ ، به وسیله تفاضل محدود پیشرو مرتبه اول تقریب زده می‌شود:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta t} \quad 18$$

معادله شرودینگر به شکل زیر با شرایط مرزی مشخص در نظر گرفته شده است:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = B(x,t) \psi(x,t) \quad 19$$

با جای‌گذاری معادلات 18 و 19 در معادله 20 خواهیم داشت:

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + i \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\Delta t} = 20$$

$$B(x,t) \psi(x,t)$$

در این صورت، تابع هدف گسسته شده به شکل زیر قابل بیان است:

$$E_1[u(x_i)] + \lambda E_2[u(x_i)] = \sum_{i,j \in \Omega} \left( \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + i \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{t} - B(x,t) \psi_{i,j} \right)^2 \quad 21$$

$$+ \mu \sum_{i,j \in \partial \Omega} (\psi_{0,j} - g_1(t_j))^2 + (\psi_{M,j} - g_2(t_j))^2 +$$

$$(\psi_{i,0} - f(x_i))^2$$

در رابطه فوق،  $g_1$  و  $g_2$  مقادیر شرایط مرزی و  $f$  مقادیر شرایط اولیه را برای گره‌های مربوطه مشخص می‌سازند. همچنین،  $\mu$  ضریب پنالتی است که برای ارضای شرایط مرزی و شرایط اولیه در نظر گرفته شده است. نهایتاً، مقادیر  $\psi_{i,j}$  برای گره‌های میانی و مرزها به نحوی یافت می‌شود که مقدار تابع فوق حداقل شود.

پرداخته می‌شود. در گام اول، تعریف معادله شرودینگر به عنوان یک تابع هدف مناسب برای فرآیند بهینه‌سازی تعریف شده می‌شود. بدین منظور فرض می‌شود که بردار  $\Psi(x,t)$  در راستای محورهای  $x \in [a,b]$  و  $t \in [c,d]$  تعریف و این ناحیه دو بعدی به جزءهای یکسان  $\Delta x$  و  $\Delta t$  تقسیم می‌شود. در نتیجه، یک فضای شبکه‌بندی شده دو بعدی بوجود می‌آید که موقعیت هر نقطه یا گره در هر راستا بدین صورت تعریف شده است:

$$x(i) = a + i\Delta x \quad i = 0, 1, 2, \dots, M$$

$$t(j) = c + j\Delta t \quad j = 0, 1, 2, \dots, N$$

از این رو، تعداد گره‌ها در این ناحیه برابر است با

$$\psi(x,t) \quad (M+1) \times (N+1)$$

تخصیص داده شده به هر کدام از این گره‌ها به عنوان متغیر طراحی وارد الگوریتم بهینه‌سازی شده و به نحوی تقریب زده می‌شوند که معادله حاکم حداقل شود. در واقع، ماتریسی برای گره‌ها بوجود می‌آید که مقدار عددی هر عنصر از این ماتریس همان مقدار تابع شرودینگر در نقطه مذکور است.

برای تبدیل تابع شرودینگر به یک تابع هدف مناسب، از روش تفاضل محدود و روابط 5 و 6 به صورت زیر استفاده شده است:

$$\text{ابتدا، عبارت } \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \text{ به وسیله تفاضل محدود مرکزی}$$

مرتبه دوم در راستای  $x$  تخمین زده می‌شود [35]:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad 17$$

## نتایج

در ادامه، در چند حالت مختلف، تابع موج شرودینگر مورد بررسی قرار گرفته و با استفاده از الگوریتم HEPSON مقادیر عددی توابع، در ناحیه مشخص  $\Omega$  و با شرایط مرزی متناظر محاسبه شده است. مقدار خطا برای هر تابع با استفاده از میانگین قدر مطلق اختلاف مقادیر به دست آمده از روش پیشنهادی و حل دقیق در هر نقطه محاسبه شده است. با توجه به اینکه در نظر گرفتن یک مقدار بزرگ برای ضریب پنالیتی باعث می شود که بخش شرایط مرزی تأثیر بیشتری روی تابع هدف داشته و پاسخ های مربوط به آن گره ها زودتر یافت شوند لذا در این مقاله ضریب پنالیتی برابر  $\mu = 100$  در نظر گرفته شده است. بررسی نتایج حاصل نشان می دهند که کمترین خطا مربوط به گره های مرزی است که این نشان دهنده ارضاء شرایط مرزی با دقت بالا است.

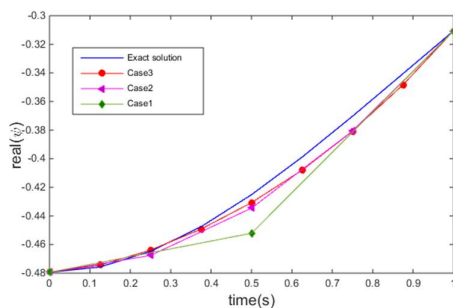
در هر مثال، سه تقسیم بندی متفاوت به صورت حالت اول  $\Delta x = \Delta t = 0.5$  و حالت دوم  $\Delta x = \Delta t = 0.25$  و حالت سوم  $\Delta x = \Delta t = 0.125$  در نظر گرفته شده است. از آنجا که اندازه جمعیت اولیه بر سرعت همگرایی الگوریتم تأثیر به سزایی دارد، جمعیت اولیه الگوریتم برابر 200 ذره در نظر گرفته شده است. اما تعداد تکرارهای الگوریتم، با توجه به پیچیدگی توابع برای هر حالت متفاوت است. در واقع، هر چه تعداد گره ها کمتر باشد، تابع هدف تعداد جملات (مجهولات) کمتری دارد، پس سرعت همگرایی بیشتر شده و به تعداد تکرارهای کمتری در فرایند بهینه سازی لازم است. لذا در حالت اول با 9 گره،

تعداد تکرارها برابر با 60000، در حالت دوم با 36 گره، تعداد تکرارها برابر با 400000 و حالت سوم با 45 گره، تعداد تکرارها برابر با 800000 در نظر گرفته شده است.

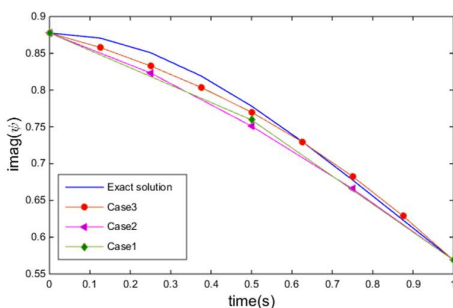
## مثال اول

در این مثال، شرایط اولیه و مرزی به صورت زیر لحاظ شده اند:

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{i}{\cosh x} & t = 0 \\ \psi(0, t) &= \frac{i \exp(it)}{\cosh 0} & x = 0 \\ \psi(1, t) &= \frac{i \exp(it)}{\cosh 1} & x = 1 \\ B &= 2 \tanh^2 x - 2 \end{aligned} \quad 22$$

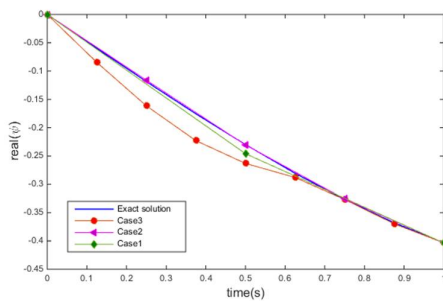


شکل 1. مقدار حقیقی تابع شرودینگر در راستای  $x=0.5$  برای مثال اول.

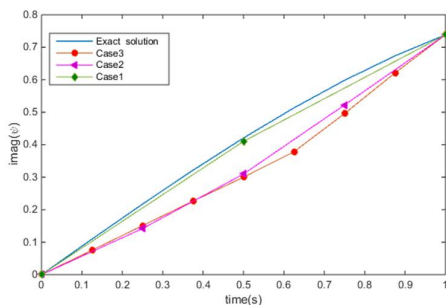


شکل 2. مقدار موهومی تابع شرودینگر در راستای  $x=0.5$  برای مثال اول.

که در این صورت، حل دقیق مسئله به شکل معادله 24 خواهد بود:



شکل 3. مقدار حقیقی تابع شرودینگر در راستای  $x=0.5$  برای مثال دوم



شکل 4. مقدار موهومی تابع شرودینگر در راستای  $x=0.5$  برای مثال دوم.

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= i \sin x & t &= 0 \\ \psi(0, t) &= 0 & x &= 0 \\ \psi(1, t) &= i \sin 1 \exp(it) & x &= 1 \\ B &= -2 \end{aligned} \quad 25$$

در شکل‌های 3 و 4 مقادیر حقیقی و موهومی جواب به‌دست آمده از روش حل پیشنهادی با پاسخ‌های حاصل از حل دقیق مقایسه شده‌اند. همان‌گونه که از نمودارهای این شکل‌ها بر می‌آید، در این حالت نیز شرایط مرزی به‌خوبی ارضاء شده‌اند. همچنین، در حالت  $\Delta x = \Delta t = 0.5$  به‌دلیل کم بودن تعداد متغیرهای طراحی الگوریتم بهینه‌سازی دقیق‌تر عمل کرده است. در حالت‌های دوم و سوم چون تعداد گره‌ها بیشتر شده است خطای ناشی از تفاضل محدود کمتر اما در عوض عملکرد الگوریتم ضعیف‌تر شده و

$$\psi(x, t) = \frac{i \exp(it)}{\cosh x} \quad 23$$

برای سه نوع توزیع گرهی متفاوت که در قبل بیان شد، نتایج حاصل از روش پیشنهادی در شکل‌های 1 و 2 به‌ترتیب برای مقادیر حقیقی و موهومی ترسیم شده‌اند. همان‌طور که در شکل‌های 1 و 2 نشان داده شده است، جواب‌های به‌دست آمده بر روی نقاط مرزی برای هر سه حالت منطبق بر جواب‌هایی هستند، که نشان دهنده ارضاء شرایط مرزی است. در حالت  $\Delta x = \Delta t = 0.5$  به‌دلیل تعداد خیلی کم گره‌ها و فاصله زیاد بین آن‌ها خطای ناشی از تقریب روش تفاضل محدود زیاد شده است. گرچه در این وضعیت الگوریتم بهینه‌سازی به‌دلیل کم بودن تعداد متغیرهای طراحی دقیق‌تر عمل کرده است. اما در حالت‌های دوم و سوم، چون تعداد گره‌ها بیشتر شده است، خطای ناشی از تفاضل محدود کمتر اما در عوض عملکرد الگوریتم کندتر شده و به‌همین دلیل، به‌تعداد تکرارهای بیشتری برای یافتن جواب‌های بهینه نیاز است.

### مثال دوم

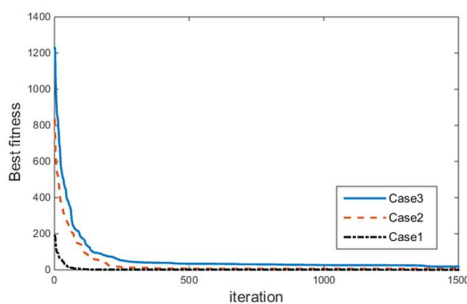
اگر معادله زیر که در رابطه شرودینگر صدق می‌کند، به‌عنوان حل دقیق در نظر گرفته شود:

$$\psi(x, t) = i \sin x \exp(it) \quad 24$$

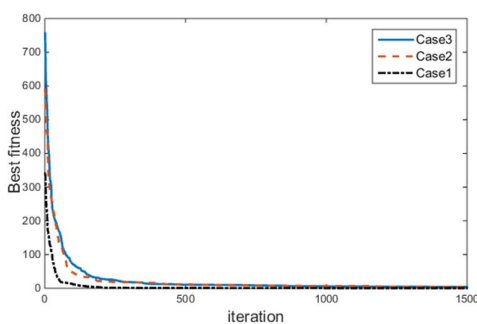
آن‌گاه، شرایط مرزی حاکم می‌توانند به‌صورت معادله 26 بیان شوند.



همان‌طور که در شکل‌های 5 و 6 برای سه نوع توزیع گرهی متفاوت نشان داده شده است، پاسخ‌های مرزی با دقت بسیار بالایی به دست آمده‌اند. در حالت  $\Delta x = \Delta t = 0.5$  به دلیل فاصله زیاد بین گره‌ها، خطای ناشی از روش تفاضل محدود برای گسسته‌سازی معادلات بر دقت الگوریتم بهینه‌سازی غلبه کرده است. اما در حالت  $\Delta x = 0.125$  و  $\Delta t = 0.25$  با آنکه دقت معادلات گسسته شده افزایش یافته است اما به دلیل افزایش تعداد مجهولات، الگوریتم بهینه‌سازی نتوانسته همه آن‌ها را با دقت بالا پیش‌بینی کند. در وضعیتی که  $\Delta x = \Delta t = 0.25$  تعادلی بین دقت روش تفاضل محدود و بهینه‌سازی ذرات کاوشگر برقرار شده که این خود سبب افزایش دقت کلی جواب‌های پیشنهادی شده است.



شکل 7. تغییرات میانگین تابع هدف برحسب تکرار برای مثال اول.



شکل 8. تغییرات میانگین تابع هدف برحسب تکرار برای مثال دوم

به همین دلیل به تعداد تکرارهای بیشتری برای یافتن جواب بهینه نیاز است، اما به هر حال، روش پیشنهادی توانسته است الگوی جواب‌های مسئله را به خوبی پیش‌بینی کند.

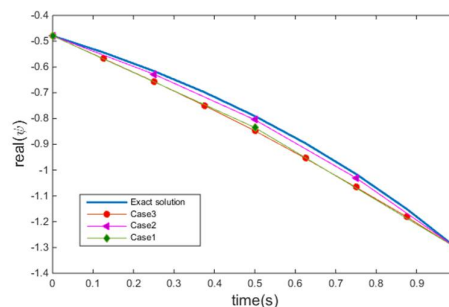
### مثال سوم

در این مثال، شرایط اولیه و مرزی به صورت توابع نمایی در نظر گرفته شده‌اند:

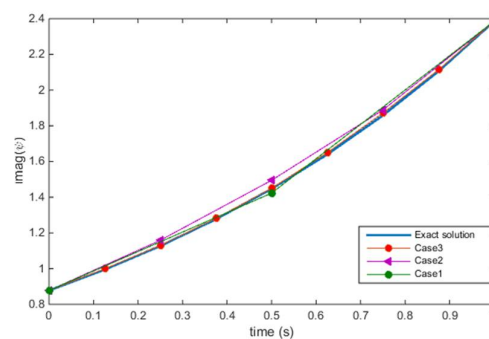
$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= i \exp(x) & t = 0 \\ \psi(0, t) &= i \exp(it) & x = 0 \\ \psi(1, t) &= i \exp(it + 1) & x = 1 \\ B &= 0 \end{aligned} \quad 26$$

که در این صورت، حل دقیق مسئله به شکل معادله 28 خواهد بود.

$$\psi(x, t) = i \exp(it + x) \quad 28$$



شکل 5. مقدار حقیقی تابع شرودینگر در راستای  $x=0.5$  برای مثال سوم.



شکل 6. مقدار موهومی تابع شرودینگر در راستای  $x=0.5$  برای مثال سوم.

است که نشان دهنده عملکرد دقیق الگوریتم بهینه‌سازی است در این وضعیت است. در مجموع نتایج موجود در این جدول نشان‌دهنده موفقیت روش پیشنهادی در این مقاله برای پیدا کردن جواب‌های مسئله است.

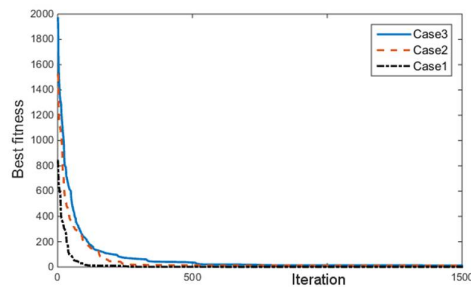
جدول 1. خطای حاصل از پاسخ‌های به‌دست آمده از روش پیشنهادی برای سه نوع تقسیمات گرهی در سه مثال معرفی شده.

مثال	حالت	کمترین خطا	میانگین خطا
اول	$\Delta x = 0.5$ $\Delta t = 0.5$	0.00	$7.249 \times 10^{-3}$
	$\Delta x = 0.25$ $\Delta t = 0.25$	$1.289 \times 10^{-12}$	$1.227 \times 10^{-2}$
	$\Delta x = 0.25$ $\Delta t = 0.125$	$2.006 \times 10^{-11}$	$8.910 \times 10^{-2}$
دوم	$\Delta x = 0.5$ $\Delta t = 0.5$	0.00	$4.26 \times 10^{-3}$
	$\Delta x = 0.25$ $\Delta t = 0.25$	$4.768 \times 10^{-13}$	$9.991 \times 10^{-2}$
	$\Delta x = 0.25$ $\Delta t = 0.125$	$3.058 \times 10^{-14}$	$9.210 \times 10^{-2}$
سوم	$\Delta x = 0.5$ $\Delta t = 0.5$	0.00	$1.106 \times 10^{-2}$
	$\Delta x = 0.25$ $\Delta t = 0.25$	$7.039 \times 10^{-13}$	$2.831 \times 10^{-2}$
	$\Delta x = 0.25$ $\Delta t = 0.125$	$2.553 \times 10^{-11}$	$1.693 \times 10^{-1}$

### بررسی عملکرد و مقایسه برای یک مسأله

#### واقعی

در این بخش، مسأله واقعی ذره در جعبه یک بعدی به وسیله روش عددی پیشنهادی در این تحقیق حل شده و نتایج حاصل با پاسخ‌های به‌دست آمده از روش تفاضل محدود مقایسه شده‌اند. در این حالت، فرض می‌شود ذره در ناحیه  $[0,1]$  به صورت آزاد و دارای پتانسیل صفر است و بیرون از این ناحیه، پتانسیل مقدار بی‌نهایت دارد. در این صورت شرایط مرزی و شرایط اولیه به صورت زیر در نظر گرفته می‌شوند [36]:



شکل 9. تغییرات میانگین تابع هدف برحسب تکرار برای مثال سوم

همچنین، تغییرات تابع هدف برای بهترین ذره برحسب تکرار در شکل‌های 7 و 8 و 9 به ترتیب برای مثال‌های 1، 2 و 3 نشان داده‌اند.

همان‌طور که از نمودارهای تغییرات تابع هدف برحسب تکرار مشخص است برای تمامی حالت‌ها در تکرارهای اولیه اختلاف بین مقدار واقعی و مقدار عددی بسیار زیاد است و با افزایش تعداد تکرار، پارامتر وزن و فاکتورهای یادگیری باعث همگرایی به سمت جواب‌های بهتر شده و در نتیجه، این اختلاف نیز کمتر می‌شود. همچنین، در حالتی که تعداد گره‌ها کمتر است الگوریتم با سرعت بیشتری به سمت نقطه بهینه حرکت می‌کند و برای یافتن بهترین جواب به تعداد تکرار کمتری احتیاج است.

در ادامه، جدول 1 برای مقایسه جواب‌های دقیق با نتایج عددی آورده شده و کمترین خطا و میانگین خطا برای هر حالت در آن ثبت شده است. همان‌طور که انتظار می‌رفت بیشترین مقدار خطای میانگین در حالت  $\Delta x = \Delta t = 0.5$  و کمترین آن در حالت  $\Delta x = \Delta t = 0.25$  است. لذا، در حالتی که تعداد گره‌ها مناسب باشد نتایج دقیق‌تر هستند. همچنین کمترین خطا مربوط به حالت  $\Delta x = \Delta t = 0.5$  و نقاط مرزی

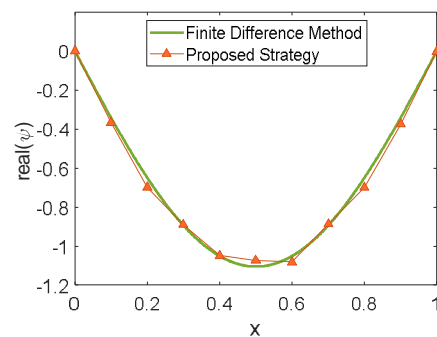
جعبه یک بعدی) پرداخته شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که اگر تعداد گره‌ها کم و فاصله بین آن‌ها زیاد باشد، آنگاه خطای حاصل از معادله گسسته شده به‌روش تفاضل محدود بالا می‌رود. از طرف دیگر، با افزایش تعداد گره‌ها، تعداد مجهولات دامنه حل مسئله زیاد می‌شوند و لذا الگوریتم بهینه‌سازی به تعداد بسیار زیادی تکرار نیاز دارد تا بتواند خطای پاسخ‌ها را کاهش دهد. بنابراین، لازم است جهت دستیابی به پاسخ‌های با دقت بالا، بین گره‌های ایجاد شده در دامنه حل مسئله یک مصالحه برقرار شود. به‌طور کلی، مقایسه جواب‌های به‌دست آمده با حالت دقیق و سایر روش‌های عددی بیانگر موفقیت این روش در حل مسئله شرودینگر وابسته به‌زمان است.

## مرجع‌ها

- [1] D.J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, Pearson Prentice Hall, (2010).
- [2] S.H. Dong, *Factorization method in quantum mechanics*, Springer, (2007).
- [3] M. Aktas, R. Sever, Exact supersymmetric solution of Schrodinger equation for central confining potentials by using the Nikiforov-Uvarov method, *Journal of Molecular Structure* **710** (2004) 223-228.  
<https://doi.org/10.1016/j.theochem.2004.09.011>
- [4] B.J. Falaye, K.J. Oyewumi, M. Abbas, Exact solution of Schrödinger equation with q-deformed quantum potentials using Nikiforov-Uvarov method, *Chinese Physics B* **22** (2013) 110301.
- [5] H. Karayer, D. Demirhan, F. Büyükkılıç, Solution of Schrödinger equation for two different potentials using extended Nikiforov-Uvarov method and polynomial

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \sqrt{2} \sin(\pi x) \\ \psi(0, t) &= 0 \\ \psi(1, t) &= 0 \\ B &= \begin{cases} 0 & \in [0, 1] \\ \infty & \text{Otherwise} \end{cases} \end{aligned} \quad 27$$

در شکل 10، نتایج حاصل از حل این مسئله به‌کمک استراتژی پیشنهادی در این تحقیق با پاسخ‌های به‌دست آمده از روش تفاضل محدود معرفی شده در مرجع [36] مقایسه شده‌اند. این نمودارها نزدیکی پاسخ‌های ارائه شده به‌دو روش مذکور را نشان داده و توانایی روش عددی ترکیبی جدید را به‌اثبات می‌رساند.



شکل 10. مقدار حقیقی تابع شرودینگر در زمان  $t=0.5$  برای مسئله ذره در جعبه.

## نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک روش ترکیبی جدید بر پایه روش تفاضل محدود و الگوریتم بهبود یافته PSO برای حل عددی تابع شرودینگر وابسته به‌زمان ارائه شده است. به‌این منظور، در ابتدا، معادله شرودینگر با استفاده از روش تفاضل محدود و با کمک ضریب پنالتی گسسته‌سازی و به‌عنوان یک تابع هدف مناسب در فضای شبکه‌بندی معرفی شده است. سپس، از یک الگوریتم بهینه‌سازی به‌نام تجمعی ذرات کاوشگر (HEPSO) به‌تحلیل مسئله موردنظر در سه مثال با سه نوع تقسیم‌بندی متفاوت و یک مثال واقعی (ذره در

- surface by the finite element method, *Computer Physics Communications* **180** (2009) 2079-2094. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.06.010>
- [12] S. Dong, J. Garcia-Ravelo, S.H. Dong, Analytical approximations to the 1-wave solutions of the Schrödinger equation with an exponential-type potential, *Physica Scripta* **76** (2007) 393. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/76/4/019>
- [13] H. Egrifes, D. Demirhan, F. Büyükkılıç, Exact Solutions of the Schrödinger Equation for Two Deformed Hyperbolic Molecular Potentials, *Physica Scripta* **60** (1999) 195-198. <https://doi.org/10.1238/PHYSICA.REGUL.AR.060A00195>
- [14] F. Yaşuk, C. Berkdemir, A. Berkdemir, Exact solutions of the Schrödinger equation with non-central potential by the Nikiforov–Uvarov method, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **38** (2005) 6579. <https://doi.org/10.1088/0305-470/38/29/012>
- [15] L. Chai, S. Jin, P.A. Markowich, A hybrid method for computing the Schrödinger equations with periodic potential with band-crossings in the momentum space, *Communications in Computational Physics* **24** (2018) 989-1020. <https://doi.org/10.4208/cicp.2018.hh80.01>
- [16] U.S. Okorie, A.N. Ikot, M.C. Onyeaju, E.O. Chukwuocha, Bound state solutions of Schrödinger equation with modified Mobius square potential (MMSP) and its thermodynamic properties, *Journal of molecular modeling* **24** (2018) 289. <https://doi.org/10.1007/s00894-018-3811-8>
- [17] C.A. Onate, J.O. Ojonubah, Eigensolutions of the Schrödinger equation with a class of Yukawa potentials via solutions of biconfluent Heun equation, *Journal of Mathematical Physics* **59** (2018) 053501. <https://doi.org/10.1063/1.5022008>
- [6] C.O. Edet, P.O. Okoi, Any 1-State Solutions of the Schrodinger Equation for q-Deformed Hulthen Plus Generalized Inverse Quadratic Yukawa Potential in Arbitrary Dimension, *Revista Mexicana de Física* **65** (2019) 333-344. <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.65.333>
- [7] E.E. Perepelkin, B.I. Sadovnikov, N.G. Inozemtseva, A.A. Tarelkin, A new class of exact solutions of the Schrödinger equation, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* **31** (2019) 639-667. <https://doi.org/10.1007/s00161-018-0716-9>
- [8] C.A. Onate, K.J. Oyewumi, B.J. Falaye, Approximate solutions of the Schrödinger equation with the hyperbolic potential: supersymmetric approach, *Few-Body Systems* **55** (2014) 61-67. <http://dx.doi.org/10.1007/s00601-013-0731-0>
- [9] H. Hassanabadi, B.H. Yazarloo, S. Zarrinkamar, M. Solaimani, Approximate analytical versus numerical solutions of Schrödinger equation under molecular Hua potential, *International Journal of Quantum Chemistry* **112** (2012) 3706-3710. <https://doi.org/10.1002/qua.24064>
- [10] R.H. Hamed, Approximate Solution of Schrödinger Equation With Manning–Rosen Potential in Two Dimensions by using the shifted 1/N expansion method, *Journal of Basrah Researches (Sciences)* **38** (2012) 51-59.
- [11] D. Xu, J. Stare, A.L. Cooksy, Solving the vibrational Schrödinger equation on an arbitrary multidimensional potential energy

- [24] N. Taghizadeh, M. Mirzazadeh, F. Farahrooz, Exact solutions of the nonlinear Schrödinger equation by the first integral method, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* **374** (2011) 549-553. <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2010.08.050>
- [25] S.O. Edeki, G.O. Akinlabi, S.A. Adeosun, On a modified transformation method for exact and approximate solutions of linear Schrödinger equations, *In AIP Conference proceedings* **1705** (2016). <https://doi.org/10.1063/1.4940296>
- [26] A.R. Seadawy, Exact solutions of a two-dimensional nonlinear Schrödinger equation, *Applied Mathematics Letters* **25** (2012) 687-691. <https://doi.org/10.1016/j.aml.2011.09.030>
- [27] N.K. Vitanov, Z.I. Dimitrova, Modified Method of Simplest Equation Applied to the Nonlinear Schrödinger Equation, *Journal of Theoretical and Applied Mechanics* **48** (2018) 59-68. <https://doi.org/10.2478/jtam-2018-0005>
- [28] M.J. Mahmoodabadi, F. Shojaei, Z. Arasteh, Analysis of the Three-dimensional time-dependent Schrödinger equation by the meshless local Petrov- Galerkin method, *Journal of Research on Many-Body Systems* **8** 17 (2018) 51-58. <https://doi.org/10.22055/JRMBS.2018.13884>
- [29] M. Dehghan, D. Mirzaei, The meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method for the generalized two-dimensional non-linear Schrödinger equation, *Engineering Analysis with Boundary Elements* **32** (2008) 747-756. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2007.11.005>
- [30] M. Dehghan, A. Shokri, A numerical method for two-dimensional Schrödinger equation using collocation and radial basis supersymmetric approach, *Journal of Theoretical and Applied Physics* **10** (2016) 21-26. <https://doi.org/10.1007/s40094-015-0196-2>
- [18] S.M. Ikhdaïr, R. Sever, Bound states of a more general exponential screened Coulomb potential, *Journal of mathematical chemistry* **41** (2007) 343-353. <https://doi.org/10.1007/s10773-008-9806-y>
- [19] C. Tezcan, R. Sever, A general approach for the exact solution of the Schrödinger equation, *International Journal of Theoretical Physics* **48** (2009) 337-350.
- [20] S.M. Ikhdaïr, R. Sever, Exact solutions of the modified Kratzer potential plus ring-shaped potential in the D-dimensional Schrödinger equation by the Nikiforov-Uvarov method, *International Journal of Modern Physics C* **19** (2008) 221-235. <https://doi.org/10.1142/S0129183108012030>
- [21] S.M. Ikhdaïr, R. Sever, Exact solutions of the D-dimensional Schrödinger equation for a ring-shaped pseudoharmonic potential, *Central European Journal of Physics* **6** (2008) 685-696. <https://doi.org/10.2478/s11534-008-0024-2>
- [22] S.M. Ikhdaïr, R. Sever, Polynomial solutions of the Mie-type potential in the D-dimensional Schrödinger equation, *Journal of Molecular Structure* **855** (2008) 13-17. <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2007.12.044>
- [23] A. Sadighi, D.D. Ganji, Analytic treatment of linear and nonlinear Schrödinger equations: a study with homotopy-perturbation and Adomian decomposition methods, *Physics Letters A* **372** (2008) 465-469. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2007.07.065>

- [33] J. Kennedy, R. Eberhart, Particle Swarm Optimization. In *Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks* **4** (1995) 1942-1948. <https://doi.org/10.1109/ICNN.1995.488968>
- [34] M.J. Mahmoodabadi, Z.S. Mottaghi, A. Bagheri, HEP SO: high exploration particle swarm optimization, *Information Sciences* **273** (2014) 101-111. <https://doi.org/10.1016/j.ins.2014.02.150>
- [35] D.M. Causon, C.G. Mingham *Introductory finite difference methods for PDEs*. Ventus Publishing ApS (2010).
- [36] R. Becerril, F.S. Guzmán, A. Rendón-Romero, & S. Valdez-Alvarado, Solving the time-dependent Schrödinger equation using finite difference methods, *Revista mexicana de física E* **54** 2 (2008) 120-132.
- functions, *Computers & Mathematics with Applications* **54** (2007) 136-146. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2007.01.038>
- [31] A. Bashan, N.M. Yagmurlu, Y. Ucar, A. Esen, An effective approach to numerical soliton solutions for the Schrödinger equation via modified cubic B-spline differential quadrature method, *Chaos, Solitons & Fractals* **100** (2017) 45-56. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2017.04.038>
- [32] A. Sóbester, P.B. Nair, A.J. Keane, Genetic programming approaches for solving elliptic partial differential equations, *IEEE transactions on evolutionary computation* **12** (2008) 469-478. <https://doi.org/10.1109/TEVC.2007.908467>