arXiv:2303.08506v1 [physics.atom-ph] 15 Mar 2023

通用径向网格上的薛定谔方程

Christopher Bowen[a] 和 Jean-Christophe Pain[a,b,1]

[a]法国原子能和替代能源委员会，军事应用局，伊尔德夫兰研究中心，法国阿尔帕容 F-91297[b]巴黎-萨克雷大学，法国原子能和替代能源委员会，极端条件下物质实验室，法国布吕耶尔勒沙泰勒 91680`

摘要

本文讨论薛定谔方程数值求解中径向网格的选择。我们详细介绍了对于通用径向网格，由变量和函数的变量替换所导致的方程变换，并分别采用描述变量替换关系的显式形式或隐式形式，再将其应用于 $a\ r + b\ \ln(r)$ 对数线性网格。结果表明，在前一种情况下，需要用到朗伯函数的前三阶导数。若改用隐式关系，则无需进行这项复杂处理。

1 引言

我们希望求解一般的薛定谔型方程

$$P''(r) - q(r)P(r) = \kappa(r). \tag{1}$$

这种形式源自采用原子单位制，并将波函数的径向部分写为$P(r) = rR(r)$的形式，归一化条件为 $\int_0^\infty P^2(r)dr = 1$。$q(r)$的形式为

$$q(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) - E,$$

其中，ℓ 是轨道量子数，$V(r)$是电子势，E 是能量，而非齐次项 $\kappa(r)$通常源自电子结构的哈特里–福克处理 [1]。我们知道如何在均匀径向网格上求解这类方程（例如使用诺梅罗夫方法 [2–5]）。然而，在这种情况下，当 $\ell \geq 10$ [6]时，原点附近的误差会变得与波函数本身一样大。因此，实际的原子物理计算需要采用这样的网格：在原子核附近势变化迅速的区域更精细地解析波函数，而在其他区域则使用较大的步长。两种这样的网格是指数网格 $r = e^x$ 和对数线性网格 $x = ar + b\ln（r）$，其中 x 是一个线性（步长恒定）变量。我们要探讨的问题是，如何变换径向薛定谔方程，使得它在均匀网格上仍保持其初始形式（1）。我们首先注意到，对于指数网格，非均匀变量 r 是线性变量的显式函数；而对于第二种网格，它则以隐式形式表示。正如第3节所讨论的，r 可以用朗伯 W 函数显式表示，但我们将看到，这会使代数处理变得复杂。尽管对数线性网格广为人知，我们尚未在文献中找到关于隐式变量变换所导出的方程的讨论，因此我们认为，下面的分析应具有普遍参考价值。

在第 2 节中，我们展示如何利用变量变换的显式形式和隐式形式来变换 Schr¨odinger 方程，并检验二者的等价性。在第 3 节中，我们将这一形式体系应用于混合（对数-线性）网格，并比较其中涉及的代数运算量，从而说明采用最便捷方法的必要性。

[1]jean-christophe.pain@cea.fr

2 薛定谔方程的变换

2.1 变量和函数的变换

我们先从显式情形开始。设 $r = f(x)$，并寻找一个满足$Y''(x) - p(x)Y(x) = h(x)$ 的新函数 $Y(x)$。对于对应于式 (1) 中 $\kappa(r) = 0$ 的齐次情形，Havlov´a 和 Smr˘cka 给出了 [6] 中的解。作者将 P 因式分解为 $P(r) = g(x)Y(x)$ 的形式，并直接给出 g 的结果，使得 Y 的波动方程具有所需形式： $g^2(x) = f'(x)$，并且

$$p(x) = q(f(x))(f'(x))^2 - \frac{f'(x)}{g(x)}\left(\frac{g'(x)}{f'(x)}\right)'. \tag{2}$$

证明过程很直接，我们在此给出证明，因为这也让我们有机会加入非齐次项。全文中，撇号表示一阶导数，双撇号表示二阶导数，依此类推。根据上下文，应该可以清楚地判断我们是对哪个变量求导。为简便起见，且在不存在歧义时，我们常常省略函数对其变量的显式依赖关系。以 x 为自变量，有:

$$\frac{dP}{dr} = \frac{dP}{dx}\frac{dx}{dr} = \frac{g'Y + gY'}{f'}$$

and

$$\frac{d^2P}{dr^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{dP}{dr}\right)\frac{dx}{dr} = \frac{(g''Y + 2g'Y' + gY'')f' - f''(g'Y + gY')}{f'^3}.$$

因此，(1)变为

$$\frac{d^2P}{dr^2} - qP = \frac{(g''Y + 2g'Y' + gY'')f' - f''(g'Y + gY') - qf'^3gY}{f'^3} = \kappa,$$

从而得到

$$Y''(gf') + Y'(2g'f' - f''g) + Y(g''f' - f''g' - qf'^3g) = \kappa f'^3. \tag{3}$$

现在，我们通过要求 Y' 中的项消失来求出 g ,

$$2g'f' = f''g \Rightarrow 2\ln g = \ln f', \quad g^2 = Af'. \tag{4}$$

我们可以设定积分常数 $A = 1$，因为在齐次情形下， g的任意标量倍数都可以提取出来；而在 $\kappa \neq 0$ 时，也可以将其吸收到波函数的整体归一化中。于是，式 (3) 变为

$$Y'' + Y\frac{(g''f' - f''g' - qf'^3g)}{gf'} = \frac{\kappa f'^2}{g}$$

占主导，因为 $Y'' - pY = h$ 到

$$p = qf'^2 - \frac{f'}{g}\left(\frac{g''f' - f''g'}{f'^2}\right) = qf'^2 - \frac{f'}{g}\left(\frac{g'}{f'}\right)'$$

and

$$h = \frac{\kappa f'^2}{g} = \kappa(f')^{3/2}.$$

Havlov´a 和 Smr˘cka 认为，变换 $r = f(x) = x^3$ 是在均匀网格与对数网格之间的一种合理折中。在这种情况下， $f'(x) = 3x^2$, $h(x) = 3\sqrt{3}x^3\kappa(r)$ 和

$$p(x) = 9x^4q(r) + \frac{2}{x^2} = 9x^4(V(r) - E) + \frac{(3\ell + 2)(3\ell + 1)}{x^2}.$$

我们也可以轻易得到指数网格的著名结果， $f(x) = e^x$。然后

$$g(x) = e^{x/2}, \quad \frac{f'(x)}{g(x)} \left(\frac{g'(x)}{f'(x)} \right)' = -1/4$$

and

$$p(x) = \left[V(r) - E + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] e^{2x} + \frac{1}{4} = r^2(V(r) - E) + \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2.$$

现在来看隐式形式，写作 $Y(x) = P(r(x))$。 P关于 r 的前两个导数分别为

$$P'(r) = P'(r(x)) \frac{dx}{dr} = Y'(x) \frac{dx}{dr}$$

and

$$P''(r) = Y''(x) \left(\frac{dx}{dr} \right)^2 + Y'(x) \frac{d^2x}{dr^2}.$$

用变量 x表示时，微分方程变为:

$$Y''(x) + \frac{d^2x}{dr^2} \left(\frac{dr}{dx} \right)^2 Y'(x) - \left(\frac{dr}{dx} \right)^2 q(r(x))\ Y(x) = \left(\frac{dr}{dx} \right)^2 \kappa(r(x)),$$

i.e.

$$Y''(x) + \alpha(x)\ Y'(x) - \beta^2(x)\ q(r(x))\ Y(x) = \beta^2(x)\ \kappa(r(x))$$

with

$$\beta(x) \equiv \frac{dr}{dx}$$

and

$$\alpha(x) \equiv \left. \frac{d^2x}{dr^2} \right|_x \beta^2(x).$$

现在，我们寻找一种函数变换来消去一阶导数项，从而恢复初始形式（1）。我们尝试将 Y 因式分解为

$$Y(x) = t(x)s(x),$$

其中， s 是待确定的函数， t是变换后的新函数。利用

$$Y' = t's + ts', \quad Y'' = t''s + 2t's' + ts'',$$

t函数满足

$$t''s + 2t's' + ts'' + \alpha t's + \alpha ts' - \beta^2 qts = \beta^2 \kappa$$

or

$$t'' + \left(\frac{2s'}{s} + \alpha \right) t' + \left(\frac{s'' + \alpha s'}{s} - \beta^2 q \right) t = \frac{\beta^2 \kappa}{s}.$$

选择函数 s 以消去一阶导数项，因此

$$\frac{s'}{s} = -\frac{\alpha}{2}$$

其解为

$$s(x) = \exp\left[-\frac{1}{2} \int dx' \alpha(x') \right].$$

我们通过换回变量 r来计算原函数:

$$\int dx'\alpha(x') = \int dx' \left.\frac{d^2x}{dr^2}\right|_{x'} \left(\left.\frac{dx}{dr}\right|_{x'}\right)^{-2} = \int dr' \left.\frac{d^2x}{dr^2}\right|_{r'} \left(\left.\frac{dx}{dr}\right|_{r'}\right)^{-1} = \ln\left(\frac{dx}{dr}\right),$$

得出

$$s(x) = \exp\left[\frac{1}{2}\ln\left(\frac{dr}{dx}\right)\right] = \sqrt{\beta(x)}.$$

零 阶项的系数为，对上述条件关于 x 求导 :

$$\frac{s''s - s'^2}{s^2} = \frac{s''}{s} - \left(\frac{s'}{s}\right)^2 = -\frac{\alpha'}{2}$$

其中 $\alpha'(x) = d\alpha/dx$。可得

$$\frac{s''}{s} = \frac{\alpha^2}{4} - \frac{\alpha'}{2}$$

and

$$\frac{s''}{s} + \alpha\frac{s'}{s} = -\frac{\alpha^2}{4} - \frac{\alpha'}{2}.$$

最后， t 中的微分方程可表示为

$$t'' - \left(\beta^2 q + \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\alpha'}{2}\right)t = \frac{\beta^2\kappa}{s} = \beta^{3/2}\kappa \tag{5}$$

且具有所需的形式

$$t''(x) - p(x)t(x) = h(x)$$

with

$$p = \beta^2 q + \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\alpha'}{2} \tag{6}$$

and

$$h = \beta^{3/2}\kappa. \tag{7}$$

总而言之，对于每个变量变换 $r \to x(r)$，我们都关联相应的函数变换 $P(r) \to t(x)$，其中

$$P(r(x)) = Y(x) = t(x)/\sqrt{\frac{dx}{dr}}.$$

函数 t 因而满足一个关于变量 x 的微分方程，可用 Numerov 方法求解；函数 p 和 h 由上述关系式 (6) 和 (7) 给出。例如，对于三次标度，有

$$\beta(x) = 3x^2, \quad \alpha(x) = -\frac{2}{x}$$

and

$$t'' - \left(9x^4 q + \frac{2}{x^2}\right)t = 3\sqrt{3}x^3\kappa$$

与之前一样。

2.2 等价性

显然　　不难证明，形式（5）与（2）等价。由于我们已定义 $\beta = f'(x)$，前几项相等，因此我们只需证明

$$\frac{\alpha^2}{4} + \frac{\alpha'}{2} = -\frac{f'}{g}\left(\frac{g'}{f'}\right)'. \tag{8}$$

式（8）的右边等于

$$\begin{aligned} -\frac{f'}{g}\left(\frac{g'}{f'}\right)' &= -\sqrt{f'}\left(\frac{f''}{2(f')^{3/2}}\right)' = \frac{-2(f')^2 f''' + 3f'(f'')^2}{4(f')^3} \\ &= -\frac{f'''}{2\beta} + \frac{3(f'')^2}{4\beta^2}. \end{aligned}$$

Now

$$\frac{d^2x}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(\frac{1}{\beta}\right) = -\frac{f''}{\beta^3}$$

利用 α 的定义，我们得到

$$f'' = -\beta^3.\frac{\alpha}{\beta^2} = -\alpha\beta.$$

Thus

$$f''' = -\beta\alpha' - \alpha\beta' = -\beta\alpha' + \alpha^2\beta$$

and

$$-\frac{f'''}{2\beta} + \frac{3(f'')^2}{4\beta^2} = \frac{\beta\alpha' - \alpha^2\beta}{2\beta} + \frac{3(-\alpha\beta)^2}{4\beta^2} = \frac{\alpha'}{2} + \frac{\alpha^2}{4},$$

正如所需。

3 混合径向网格

3.1 $a\ r + b \ln r$ 网格

数值求解方程时，采用自变量上的等距网格很方便。然而，由于势 $V(r)$ 在 $r = 0$ 处有一个极点，因此在 $r = 0$ 附近需要非常密集地布点，而远离原点时则无需设置大量网格点。解决这一问题的一种方法是用经过适当变换得到的新变量取代径向变量 r，确保新变量上的等距网格所对应的网格步长会随着 r 接近原点而减小。在此框架下，一个有趣的选择是采用以下变换（例如参见文献 [7–9]）：

$$x = a\ r + b\ \ln r \tag{9}$$

其中 a 和 b 是常数。与 Herman 和 Skillman 提出的做法相比，这种变换更为方便；他们的方法 [10]，是将积分网格划分为若干区块，并在 r 较大时使后续每个区块的网格间隔加倍。网格 (9) 很适合激发态波函数 $x \approx a\,r$，当 $r \to \infty$ 时尤其如此。实际上，Chernysheva 等人建议取 $x_{\min} \le x \le x_{\max}$，其中

$$x_{\min} = -b\ (10 + \ln Z),$$

且 Z 表示原子序数 [11,12]。这样的下界对应于 $r_{\min} \approx 4.5\ 10^{-5}/Z$。$x$ 中的等距网格为 $x_i = x_0 + i\ h$，其中 $i = 0$、1、 $\cdots$、 N，因此 $x_0 = x_{\min}$ 和 $x_N = x_{\max}$。系数 a 可通过以下方式确定

$$a = \frac{x_{\max} - b \ln r_{\max}}{r_{\max}},$$

而系数 b、步长 h、区间点数量 N以及 $r_{\max}$（r的最大值）均为输入数据 [11, 12]。或者，也可以输入 $r_{\min}$、$r_{\max}$、a、b和 N，并推导出步长 [13, 14]。

此时的变量变换为 x $(r) = ar + b\ln$ (r), $r^{b}e^{ar} = e^{x}$,

$$\frac{dx}{dr} = \frac{1}{\beta} = \frac{b}{r} + a, \quad \frac{d^2x}{dr^2} = -\frac{b}{r^2}$$

从而得到简式

$$\beta(x) = \frac{r}{b+ar}, \quad \alpha(x) = -\frac{b}{(b+ar)^2}.$$

由此可得

$$\alpha'(x) = \frac{d\alpha}{dx} = \frac{2ab}{(b+ar)^3}\frac{dr}{dx} = \frac{2abr}{(b+ar)^4}$$

and

$$s(x) = \sqrt{\beta(x)} = \sqrt{\frac{r}{b+ar}}.$$

因此，t 的微分方程为

$$t'' - \frac{1}{(b+ar)^2}\left[r^2q + b\frac{b+4ar}{4(b+ar)^2}\right]t = \left(\frac{r}{b+ar}\right)^{3/2}\kappa \tag{10}$$

其中 $r \equiv r(x)$，且

$$t(x) = Y(x)\,\sqrt{\frac{b}{r} + a}. \tag{11}$$

当然，当 $a = 1, b = 0$ 时，可恢复线性网格的关系式：

$$x(r) = r, \quad \beta = 1, \quad t = Y, \quad p = q, \quad h = \kappa$$

而当 $a = 0, b = 1$ 时，则可得到对数网格的关系式：

$$x(r) = \ln(r), \quad \beta = r, \quad t(x) = \frac{Y(x)}{\sqrt{r}}$$

and

$$t'' - \left(r^2q + \frac{1}{4}\right)t = r^{3/2}\kappa.$$

3.2 对数线性情形的显式反演

有 $x = ar + b\ln r$，因此反演公式为

$$r = \exp\left[\frac{x-ar}{b}\right],$$

可将其写成如下形式

$$\frac{a}{b}r\ \exp\left[\frac{ar}{b}\right] = \frac{a}{b}\exp\left[\frac{x}{b}\right]$$

从而得到

$$r = \frac{b}{a}\ W\left(\frac{a}{b}\exp\left[\frac{x}{b}\right]\right), \tag{12}$$

其中 W 是兰伯特函数 [13–15]，满足 $y\ e^{y} = x \Rightarrow y = W(x)$。

显式表述与隐式表述在形式上等价的推导表明，从代数角度看，这两种方法并不等价。对于上述简单的显式关系 $r(x)$，使用 Havlov´a-Smrˇcka 形式很直接，但用于对数线性

网格时则会变得繁琐，因为这涉及 Lambert 函数的三阶导数。根据采用的起点不同，推导微分方程 (10) 时涉及的代数运算很快就会变得繁琐（见 A）。最简单的做法是从以下形式开始

$$W'(x) = \frac{W(x)}{x\,[1+W(x)]}.$$

令 $u = (a/b)\exp(x/b)$ $u_x = du/dx = u/b$。则取 $r = f(x) = (b/a)\,W(u)$，可得

$$f'(x) = \frac{b}{a}W'(u)u_x = \frac{b}{a}\frac{W(u)}{u\,[1+W(u)]}\frac{u}{b} = \frac{1}{a}\frac{W(u)}{[1+W(u)]}$$

$$f''(x) = \frac{1}{a}\frac{[1+W(u)]\,W'(u) - W(u)W'(u)}{[1+W(u)]^2}u_x = \frac{1}{ab}\frac{W(u)}{[1+W(u)]^3}$$

and

$$f'''(x) = \frac{1}{ab}\frac{[1+W(u)]^3\,W'(u) - 3W(u)\,[1+W(u)]^2\,W'(u)}{[1+W(u)]^6}u_x = \frac{1}{ab^2}\frac{W(u)-2W^2(u)}{[1+W(u)]^5}.$$

因此

$$-\frac{f'''}{2f'} + \frac{3(f'')^2}{4(f')^2} = \frac{1+4W(u)}{4b^2(1+W(u))^4} = \frac{1+4ar/b}{4b^2(1+ar/b)^4} = b\frac{b+4ar}{4(b+ar)^4}.$$

类似地,

$$(f')^2 = \frac{1}{a^2}\left[\frac{W(u)}{1+W(u)}\right]^2 = \frac{1}{a^2}\left[\frac{ar/b}{1+ar/b}\right]^2 = \frac{r^2}{(b+ar)^2}$$

经过更多推导，我们便得到所需的形式 (10)。

值得一提的是，上述结果可以推广到形如 $x = a\,r^k + b\ln r$ 的网格情形。事实上，令 $\tilde{r} = r^k$，可得 $x = \tilde{a}\,\tilde{r} + \tilde{b}\ln\tilde{r}$，其中 $\tilde{a} = a$ 且 $\tilde{b} = b/k$。相应的隐式变换和显式变换公式见附录 B。这种网格兼具 Havlov´a 和 Smr˘cka 提出的 $x = r^{1/3}$ 形式，以及通过添加对数项引入的混合特性。然而，我们尚未研究它在实践中的用途。

4 结论

我们给出了在径向网格上进行一般变量变换后所得微分方程的一般形式。正如预期，由隐式变量替换得到的变换关系与 Havlov´a 和 Smr˘cka 给出的关系等价；但在对数线性网格的情况下，这些关系在逻辑上最易于使用，而且想必在所有隐式关系能提供最简形式的情况下也是如此。当然，当找不到显式关系时，只有这些关系才可用。请注意，除了 Numerov 算法等射击法之外，还有其他方法，例如朗斯基方法 [16] 或典范函数法 [17]。无论选择哪种数值方法，将变换后的常微分方程写成尽可能简单的形式都至关重要，这样既能简化编码、降低计算成本，也能减少数值误差。我们希望本文中的讨论能对此有所帮助。

Lambert W 函数的导数

Lambert W 函数的一阶导数为

$$W'(x) = \frac{W(x)}{x\,[1+W(x)]} = \frac{1}{x + e^{W(x)}}$$

并且，对于 $n \geq 1$:

$$\frac{d^n W(x)}{dx^n} = \frac{e^{-n\ W(x)}}{[1+W(x)]^{2n-1}} \mathscr{P}_n(W(x)),$$

其中多项式 $\mathscr{P}_n$ 满足递推关系 [15]:

$$\mathscr{P}_{n+1}(y) = -[n(y+3)-1]\mathscr{P}_n(y) + (1+y)\mathscr{P}'_n(y),$$

其中 $\mathscr{P}_1(y) = 1$ 且 $\mathscr{P}_n(0) = (-n)^{n-1}/n!$ 前三个多项式分别为 $\mathscr{P}_1(y) = 1$、$\mathscr{P}_2(y) = -2-y$和 $\mathscr{P}_3(y) = 9+8y+2y^2$。$\mathscr{P}_n(y)$ 的一般表达式为

$$\mathscr{P}_n(y) = (-1)^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} \beta_{n,k}\ y^k,$$

其中

$$\beta_{n,k} = \sum_{m=0}^{k} \frac{1}{m!} \binom{2n-1}{k-m} \sum_{q=0}^{m} \binom{m}{q} (-1)^q (q+m)^{m+n-1}.$$

另一种形式为 [18]:

$$\frac{d^n W(x)}{dx^n} = (-1)^{n-1} \left[W'(x)\right]^n \mathscr{Q}_n\left(\frac{1}{1+W(x)}\right),$$

其中

$$\mathscr{Q}_n(y) = \sum_{k=0}^{n-1} b_{n,k}\ y^k \quad \text{with} \quad b_{n,n-1-k} = \sum_{m=k}^{n-1} (-1)^{m-k} \binom{m}{k} \beta_{n,m}.$$

第三种方法是使用 [19]:

$$\frac{d^n W(x)}{dx^n} = \frac{e^{-n\ W(x)}}{[1+W(x)]^n} \mathscr{R}_n\left(\frac{W(x)}{1+W(x)}\right),$$

其中

$$\mathscr{R}_n(y) = (-1)^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k a_{n,k}\ y^k \quad \text{with} \quad a_{n,k} = \sum_{m=0}^{k} (-1)^m \binom{n-1-m}{n-1-k} \beta_{n,m}.$$

对于，存在 自变量为指数函数的兰伯特函数（这正是公式 (12) 的情形） :

$$\frac{d^n W(e^x)}{dx^n} = \frac{1}{[1+W(e^x)]^{2n-1}} \mathscr{S}_n(W(e^x)),$$

with

$$\mathscr{S}_n(y) = \sum_{k=0}^{n-1} \left\langle\!\!\left\langle {n-1 \atop k} \right\rangle\!\!\right\rangle\ (-1)^k y^{k+1},$$

$\left\langle\!\!\left\langle {a \atop b} \right\rangle\!\!\right\rangle$ 为二阶欧拉数 [20]。朗伯函数的一阶导数也可以通过以下方法求得

$$W''(x) = -\frac{f''(W(x))}{[f'(W(x))]^3}$$

and

$$W'''(x) = 3\frac{[f''(W(x))]^2}{[f'(W(x))]^5} - \frac{[f'''(W(x))]}{[f'(W(x))]^4},$$

其中 $f(y) = y\ e^y$，这是拉格朗日反演定理 [21–23] 的推论。

B $a\ r^k + b \ln r$ 网格的代数

B.1 隐式情形

求导

$$x = a\ r^k + b\ \ln r \tag{13}$$

对 r 求两次导数，得到

$$\frac{dx}{dr} = \frac{1}{\beta} = \frac{b}{r} + akr^{k-1}, \quad \frac{d^2x}{dr^2} = -\frac{b}{r^2} + ak(k-1)r^{k-2}$$

以及简式

$$\beta(x) = \frac{r}{b + akr^k}, \quad \alpha(x) = \frac{ak(k-1)r^k - b}{(b + akr^k)^2}$$

由此得到

$$\alpha'(x) = \frac{d\alpha}{dx} = \frac{ak^2r^{k-1}\left[b(1+k) - a(k-1)kr^k\right]}{(b + akr^k)^3}\frac{dr}{dx} = \frac{ak^2r^k\left[b(1+k) - a(k-1)kr^k\right]}{(b + akr^k)^4}$$

and

$$s(x) = \sqrt{\beta(x)} = \sqrt{\frac{r}{b + akr^k}}.$$

因此， t 的微分方程为

$$t'' - \frac{1}{(b + akr^k)^2}\left[r^2q + \frac{b^2 + 2abk(1+k^2)r^k - a^2k^2(k^2-1)r^{2k}}{4(b + akr^k)^2}\right]t = \left(\frac{r}{b + akr^k}\right)^{3/2} k$$

其中 $r \equiv r(x)$ 和

$$t(x) = Y(x)\ \sqrt{\frac{b}{r} + akr^{k-1}}.$$

当然，当 $k \to 1$ 时，可恢复方程（10）和（11）。

B.2 显式情形

按照与第 3.2 节相同的步骤对方程（13）求逆，可得:

$$r = f(x) = \left(\frac{b}{ak}\right)^{1/k}\ \left[W\left(\frac{ka}{b}e^{kx/b}\right)\right]^{1/k}. \tag{14}$$

f 关于 x 的三个一阶导数依次为（我们将 $u = (ka/b)e^{kx/b}$ 设为中间变量）：

$$f'(x) = \left(\frac{b}{ak}\right)^{1/k}\frac{[W(u)]^{1/k}}{b}\frac{1}{1+W(u)}, \tag{15}$$

$$f''(x) = \left(\frac{b}{ak}\right)^{1/k}\frac{[W(u)]^{1/k}}{b^2}\frac{[1+(1-k)W(u)]}{[1+W(u)]^3} \tag{16}$$

and

$$f'''(x) = \left(\frac{b}{ak}\right)^{1/k}\frac{[W(u)]^{1/k}}{b^3}\frac{\left\{1+[2-k(k+3)]\,W(u) + (2k-1)(k-1)W^2(u)\right\}}{[1+W(u)]^5}, \tag{17}$$

从而得到

$$-\frac{f'''}{2f'}+\frac{3(f'')^2}{4(f')^2}=\frac{1+2(1+k^2)W(u)-(k^2-1)W^2(u)}{4b^2\left[1+W(u)\right]^4}=\frac{b^2+2(1+k^2)abkr^k-(k^2-1)a^2k^2r^{2k}}{4b^2(b+akr^k)^4},\quad(18)$$

以及

$$(f')^2=\frac{1}{b^2}\frac{\left[\dfrac{b}{ak}W(u)\right]^{2/k}}{\left[1+W(u)\right]^2}=\frac{r^2/b^2}{(1+akr^k/b)^2}=\frac{r^2}{(b+akr^k)^2}.\quad(19)$$

容易验证，当 $k\to 1$ 时，方程（18）趋于方程（3.2），而方程（19）也趋于方程（3.2）。

参考文献

[1] D. R. Hartree，《原子结构计算》（Wiley，纽约，1957年）。[2] B. Numerov，考虑扰动时确定轨道并计算星历的新方法，俄罗斯中央天体物理观测站出版物 2，188-288（1933年）。[3] J. W. Cooley，求解中心场薛定谔方程的改进型本征值校正公式，《数学计算》15，363-374（1961年）。[4] F. Y. Hajj、H. Kobeisse 和 N. R. Nassif，关于薛定谔径向方程的数值解，《计算物理学杂志》16，150-159（1974年）。[5] A. F. Nikiforov、V. G. Novikov 和 V. B. Uvarov，《高温高密物质的量子统计模型：不透明度与状态方程计算方法》（Birkhäuser，2005年）。[6] H. Havlová 和 L. Smrˇcka，反立方尺度下径向薛定谔方程的数值解，《捷克物理学杂志 B》34，961-968（1984年）。[7] V. F. Bratcev，《原子波函数表》（Nauka，莫斯科，1965年）[俄文]。[8] C. Froese-Fischer，《原子的 Hartree-Fock 方法：一种数值方法》（Wiley-Interscience，1977年）。[9] J.-C. Pain、G. Dejonghe 和 T. Blenski，超组态近似下研究高温高密等离子体电子性质的自洽模型，《定量光谱学与辐射传递杂志》99，451-468（2006年）。[10] F. Herman 和 S. Skillman，《原子结构计算》（Prentice-Hall，恩格尔伍德克利夫斯，新泽西州，1963年）。[11] L. V. Chernysheva、N. A. Cherepkov 和 V. Radojević，原子自洽场 Hartree-Fock 程序，《计算物理通讯》11，57-73（1976年）。[12] L. V. Chernysheva 和 V. L. Yakhontov，用于在 Hartree-Fock-Dirac 近似下计算基态和激发态波函数的双程序包，《计算物理通讯》119，232-255（1999年）。[13] B. G. Wilson 和 V. Sonnad，关于等离子体电子结构的广义径向网格生成的注记，《高能量密度物理》7，161-162（2011年）。[14] J.-Ch. Pain，对“关于等离子体电子结构的广义径向网格生成的注记”的评论，《高能量密度物理》7，224（2011年）。

[15] R. M. Corless、G. H. Gonnet、D. E. G. Hare、D. J. Jeffrey 和 D. E. Knuth，关于 Lambert W 函数，《计算数学进展》5，329-359（1996年）。[16] F. M. Fernández，束缚态的朗斯基方法，《欧洲物理学杂志》32，723-732（2011年）。[17] C. Tannous、K. Fakhreddine 和 J. Langlois，典范函数法及其在量子物理中的应用，《物理学报告》467，173-204（2008年）。[18] D. Dumont 和 A. Ramamonjisoa，Ramanujan 语法与 Cayley 树，《电子组合学杂志》3，R17（1996年） [法文]。[19] D. E. Knuth，《计算机程序设计艺术》第4卷，分册3：生成所有组合与划分，第7.2.1.5节（第3版）（马萨诸塞州雷丁：Addison-Wesley，2005年）。[20] R. L. Graham、D. E. Knuth 和 O. Patashnik，《具体数学》（Addison-Wesley，1994年）。[21] T. M. Apostol，计算反函数的高阶导数，《美国数学月刊》107，738–741（2000年）。[22] W. P. Johnson，反函数高阶导数的组合学，《美国数学月刊》109，273-277（2002年）。[23] D. J. Jeffrey、G. A. Kalugin 和 N. Murdoch，《拉格朗日反演与 Lambert W》，载于《2015年第17届科学计算符号与数值算法国际研讨会论文集》（SYNASC ’15）。IEEE计算机学会，美国，42–46（2015年）。