ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 519.642.2

11-89-248

НИКОНОВ
Эдуард Германович

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КВАЗИПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1989

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, профессор — Е.П.Жидков

кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник — Б.Н.Хоромский

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук — И.Д.Родионов

кандидат физико-математических наук, доцент — Т.И.Савелова

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Институт физики высоких энергий, Протвино Московской области.

Автореферат разослан "21" августа 1989 г.

Защита диссертации состоится "19" октября 1989 г. в 12.00 Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований, Дубна.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Учёный секретарь Совета
кандидат физико-математических наук — Ивог — З.М.Иванченко

Актуальность

В квантовой теории поля для описания элементарных частиц интенсивно используются квазипотенциальные интегральные уравнения в импульсном пространстве. Одним из достоинств вычислений в импульсном пространстве является то, что, во-первых, потенциал взаимодействия, который выражается через амплитуду рассеяния, записывается изначально в импульсном представлении, а, во-вторых, в том, что в выражение для формфакторов и структурных функций частиц входят волновые функции именно в импульсном представлении /8-10/. С помощью квазипотенциальных интегральных уравнений исследуются как скалярные, так и спиновые частицы, а также связанные и квазистационарные уровни систем типа e^+e^-, e^-e^-, e^+e^+ /11/.

Широкое применение квазипотенциального подхода в физике элементарных частиц требует разработки численных методов решения квазипотенциальных интегральных уравнений, поскольку точные аналитические решения этих уравнений известны лишь для некоторых простейших потенциалов.

Квазипотенциальные уравнения в импульсном представлении сводятся к задаче на собственные значения для интегро-дифференциальных операторов, определенных на полуоси. Характерной особенностью численных расчетов при помощи квазипотенциальных интегральных уравнений является то, что требуется с высокой точностью определить первые несколько собственных чисел и собственных функций. При этом накладываются существенные ограничения на время счета и объем оперативной памяти ЭВМ, в связи с тем, что описанную выше задачу на собственные значения необходимо решать многократно для каждой конкретной элементарной частицы, чтобы получить с помощью минимизации соответствующих функционалов подходящие для дальнейших расчетов значения свободных параметров, входящих в квазипотенциальное уравнение.

Все это определяет актуальность разработки и исследования экономичных численных методов решения квазипотенциальных интегральных уравнений.

Работы, положенные в основу диссертации, выполнены в соответствии с Проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ Объединенного института ядерных исследований в Дубне.

Цель работы

Целью диссертационной работы является разработка, теоретическое исследование и практическое применение экономичных численных методов решения квазипотенциальных интегральных уравнений, что включает:

- выбор дискретизации исходного квазипотенциального уравнения,
- теоретическое исследование функциональных свойств гиперсингулярных интегральных операторов, а также погрешности аппроксимации методом Галеркина данных операторов;
- исследование зависимости погрешности приближенных решений от шага дискретизации h и параметра τ, определяющего интервал дискретизации;
- разработка и исследование практической эффективности на ЭВМ методов и алгоритмов уточнения приближенных решений на основе экстраполяции типа Ричардсона по шагу h и параметру τ;
- создание модульного комплекса программ для решения квазипотенциальных интегральных уравнений;
- применение разработанного комплекса программ для численных расчетов спектра масс и ширин лептонных распадов возбужденных состояний для некоторых элементарных частиц.

Научная новизна

Исследованы функциональные свойства класса гиперсингулярных интегро-дифференциальных операторов, определенных на полуоси, которые соответствуют запирающему и кулоновскому потенциалу в соответствующем квазипотенциальном уравнений. Получены асимптотические оценки погрешности приближенных решений на основе метода Бубнова-Галеркина в задаче на собственные значения для указанного класса уравнений в случае локальных базисных функций и в случае базисных функций, определенных на всей оси. При выводе оценок погрешности аппроксимации методом Галеркина изучены свойства собственных функций уравнений с потенциалом запирающего типа в пространствах Соболева H^{γ} с дробным неотрицательным индексом $\gamma \geq 0$.

В диссертации установлены достаточные условия полной непрерывности в пространстве L^2 интегро-дифференциальных операторов на полуоси. Доказана теорема об асимптотическом представлении решений приближенной спектральной задачи, являющейся сужением исходной на отрезок $[0;\tau]$, по параметру τ для класса вполне непрерывных операторов. Указан класс операторов, для которых применима полученная теорема.

Проведены вычислительные эксперименты по исследованию зависимости погрешности приближенных решений от шага h и параметра τ для некоторых задач, имеющих точное решение.

Предложен многосеточный алгоритм для численного решения класса спектральных задач на полуоси, сочетающий экстраполяцию по шагу h и параметру τ при уточнении приближенных решений.

Предложены и исследованы с помощью численного эксперимента различные алгоритмы уточнения приближенных решений на основе экстраполяции по параметру τ в зависимости от требований на точность решения задачи и ресурсы ЭВМ, а также от объема априорной информации о свойствах решения. Проведены практические оценки времени счета задач, объема занимаемой оперативной памяти в зависимости от требований на точность решения задачи.

Разработан модульный комплекс программ для численного решения частичной проблемы на собственные значения для рассмотренного класса интегро-дифференциальных операторов, определенных на полуоси.

Практическая ценность

Алгоритмы и программы, развитые в диссертации, применялись для численных расчетов характеристик ряда элементарных частиц.

Проведены численные расчеты спектра масс и ширин лептонных распадов возбужденных состояний векторных мезонов, таких, как J/ψ - и Υ -мезоны. Сравнение результатов численных расчетов с данными физического эксперимента и с расчетами, использующими другие методы /I2,I3/, позволяет сделать вывод об эффективности разработанных алгоритмов при решении данного круга задач.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на семинарах по вычислительной и прикладной математике ЛВТА ОИЯИ, на XII Всесоюзной школе по вычислительной математике и математической физике (Одесса, 1986г.), на Всесоюзном симпозиуме "Современные проблемы математической физики" (Тбилиси, 1987г.), на Межвузовской конференции "Вычислительная физика и математическое моделирование" (Волгоград, 1988г.) на X Международной конференции по методу граничных элементов (Англия, Саутгемптон, 1988г.), на конференциях по вычислительной физике факультета физико-математических наук Университета дружбы народов (Москва, 1987, 1988гг.).

Публикации

Основное содержание диссертации опубликовано в семи печатных работах.

Структура и объем работы

Диссертация изложена на 102 страницах машинописного текста и состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы из 107 наименований, девяти таблиц и одного рисунка.

Содержание диссертации

Во введении приводится краткий обзор методов аппроксимации интегро-дифференциальных уравнений, методов решения алгебраической задачи на собственные значения, а также методов уточнения приближенных решений, основанных на экстраполяции типа Ричардсона.

Первая глава посвящена теоретическому исследованию аппроксимации методом Галеркина в задаче на собственные значения для интегральных уравнений, содержащих гиперсингулярный интегральный оператор на полуоси.

В §I сформулирована задача на собственные значения вида

$$A\psi = \mu\psi, \tag{I}$$

где ψ -неизвестная функция, а μ -неизвестный спектральный параметр.

Задача (I) рассматривается в гильбертовом пространстве $L_{2,\infty}$ антисимметричных функций из $L^2(-\infty,\infty)$ с условием нормировки собственных функций

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2(x)\,dx = 1.$$

Оператор A в уравнении (I) имеет вид

$$A = V + \beta^3 R + \alpha L,$$

где α и β - положительные постоянные, R - гиперсингулярный оператор вида

$$(R\psi)(\rho) = \pi^{-1}\frac{d^2}{d\rho^2}\int_{-\infty}^{\infty}\ln|\rho-\kappa|\,\psi(\kappa)\,d\kappa,\ -\infty<\rho<\infty; \tag{2}$$

а операторы L и V определяются из следующих соотношений:

$$(L\psi)(\rho) = \pi^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\ln|\rho-\kappa|\,\psi(\kappa)\,d\kappa,\ -\infty<\rho<\infty; \tag{3}$$

$$(V\psi)(\rho) = v(\rho)\,\psi(\rho),\ -\infty<\rho<\infty. \tag{4}$$

Непрерывная функция $v(\rho)$ обладает свойствами:
1) $v(\rho)\geqslant 0$ для любого $\rho\in(-\infty,\infty)$,
2) $v(\rho)\to\infty$ при $\rho\to\pm\infty$.

В §2 проведен фурье-анализ оператора A_1 вида

$$(A_1 z)(\rho) = \rho^2 z(\rho) + \beta^3 (Rz)(\rho);\ z(\rho)\in L_{2,\infty};\ \rho\in(-\infty,\infty). \tag{5}$$

Получены выражения для собственных чисел λ_m и собственных функций $z_m(\rho)$, $m=\overline{1,\infty}$, оператора A_1 .

В §3 исследованы свойства собственных функций $z_m(\rho)$ оператора A_1 при действии операторов дифференцирования и первообразной. В результате доказана следующая

Лемма 3.5.

Для любых φ , $\psi\in D(A)$ (A - оператор из (I)) справедливы утверждения:
1) $(A_1\psi,\varphi) = (\psi, A_1\varphi)$;
2) $(A_1\psi,\psi)\geqslant C_1(\psi,\psi)$, $C_1>0$ не зависит от ψ ,
3) существует вполне непрерывный оператор $T_1\in(L_{2,\infty}\to L_{2,\infty})$, обратный A_1 , где оператор A_1 определен в (5).

Доказана также следующая

Теорема 3.I

Для любого числа $\beta>0$ найдется такое $\alpha_0=\alpha_0(\beta)$, что для всех $\alpha<\alpha_0$ оператор A из (I) имеет вполне непрерывный обратный.

В §4 рассматривается аппроксимация методом Галеркина задачи на собственные значения вида

$$\left.\begin{aligned}\psi &= \mu T\psi\\ (\psi,\psi)-1 &= 0\end{aligned}\right\}, \tag{6}$$

где $T\equiv A^{-1}$, A оператор из (I).

Для проектора P_n вида

$$(P_n\psi)(x) = \sum_{i=1}^{n} f_i(\psi)\,\eta_i(x), \tag{7}$$

где $\eta_i(x)$ - кусочно-линейные базисные функции, и собственных функций оператора A_1 получена оценка

$$\|P^{(n)} z_m\|^2 \leqslant (C_\beta h^2 + C_2\tau^{-4})\,\lambda_m\,\|z_m\|^2 \quad (P^{(n)} = I - P_n).$$

Исследованы свойства проекторов P_n вида (7), действующих на собственные функции $z_m(\rho)$ оператора A_1, в пространствах Соболева H^γ на всей оси с дробным неотрицательным индексом $\gamma \geq 0$ и доказана следующая

Теорема 4.I

Для любого $\gamma \in (0; 1/4)$ справедлива оценка

$$\| P^{(n)} T_1 \|_{L_{2,\infty}} \leq C_h h^\gamma + C_\tau \tau^{-\gamma},$$

где постоянные C_h и C_τ не зависят от h и τ при фиксированном γ.

Получены оценки приближенных решений $\psi_{k,n}$ и $\mu_{k,n}$ приближенной задачи

$$\psi = \mu P_n T \psi ,$$

I) $\| \psi_{k,n} - \psi_k \| \leq (1 + \varepsilon_{k,n}) (a_1(\psi_k) h + a_2(\psi_k) \tau^{-2})$,

$\varepsilon_{k,n} \to 0$ при $n \to \infty$,

2) $| \mu_{k,n} - \mu_k | \leq (1 + l_{k,n}) (f_1(\psi_k) h^2 + f_2(\psi_k) \tau^{-4})$,

$l_{k,n} \to 0$ при $n \to \infty$.

Здесь ψ_k – k-я собственная функция, а μ_k – k-е собственное число задачи (6).

В §5 исследована аппроксимация уравнения (I) методом Галеркина при помощи нелокальных базисных функций $z_m(\rho)$. Получены оценки погрешности приближенных решений.

В §6 приведены результаты модельных расчетов, иллюстрирующих полученные в предыдущих параграфах асимптотические оценки погрешности аппроксимации.

Вторая глава диссертации посвящена теоретическому исследованию условий, при которых решение спектральной задачи для интегро-дифференциального оператора на полуоси может быть представлено в виде степенного ряда по параметру τ^{-1}.

В §I получен признак полной непрерывности в L^2 интегрального оператора, определенного на полуоси.

В §2 теоретически исследована зависимость погрешности приближенных решений спектральной задачи для класса интегро-дифференциальных операторов на полуоси от параметра τ. Получены условия, при которых погрешность приближенных решений может быть представлена в виде степенного ряда по параметру τ^{-1} вида

$$z_\tau^* - P_\tau z^* = P_\tau \sum_{k=1}^{N} c_k(z^*) \tau^{-k m_0} + \Omega_\tau , \|\Omega_\tau\| = o(\tau^{-N m_0}).$$

Здесь $z^* = (\psi^*, \lambda^*)$ – точное решение задачи (6), где $\lambda = \mu^{-1}$, z_τ^* – точное решение приближенной задачи

$$\left. \begin{aligned} P_\tau A P_\tau \psi &= \lambda \psi \\ (P_\tau \psi, P_\tau \psi) - 1 &= 0 \end{aligned} \right\} ,$$

а проектор P_τ определен следующим образом

$$P_\tau \psi(t) = \begin{cases} \psi(t), & t \leq \tau ; \\ 0 , & t > \tau ; \end{cases}$$

$\psi(t) \in L^2 [0; \infty)$, а коэффициенты $c_k(z^*)$ не зависят от τ. Установлены условия применимости теоремы для указанного класса квазипотенциальных уравнений.

В §3 приведены результаты вычислительных экспериментов по исследованию зависимости погрешности приближенных решений модельной задачи от шага h и параметра τ. На основе этих результатов предложены практические методы уточнения приближенных решений посредством экстраполяции решений по параметру τ, которая особенно эффективна в случаях достаточно медленного, степенного убывания решений при $t \to \infty$. Предложен многосеточный алгоритм решения задач типа (I), включающий в себя алгоритмы уточнения приближенных решений при помощи одновременной экстраполяции по параметрам h и τ^{-1}. Проведены исследования практической эффективности двухпараметрической экстраполяции. Результаты этих исследований дают возможность сделать вывод, что при использовании двухпараметрической экстраполяции для получения заданной точности требуется, как правило, на один-два порядка меньше счетного времени, а в ряде случаев на порядок меньше оперативной памяти, чем при расчетах на одной сетке без использования двухпараметрической экстраполяции.

Третья глава диссертации посвящена физическим приложениям. Приведенные в главе I и главе II результаты исследований квазипотенциальных интегральных уравнений применены при разработке программ для численного решения задач описания некоторых элементарных частиц.

В §I приведено описание модульного комплекса прикладных программ, предназначенного для решения рассмотренного класса квазипотенциальных уравнений и систем таких уравнений.

Основа разработанного комплекса программ – подпрограмма, которая предназначена для решения алгебраической частичной проблемы собственных значений методом итерирования подпространства и является модификацией программы RITZIT /14/. Комплекс включает также модуль программ для экономичного умножения теплицевых или ганкелевых матриц на вектор, использующий алгоритм быстрого преобразования Фурье. В комплекс входит модуль, формирующий необходимые для расчетов матрицы дискретизованных при помощи метода Галеркина квазипотенциальных интегральных уравнений. Перечисленные выше модули программ организованы в многосеточную процедуру, которая решает частичную алгебраическую проблему собственных значений методом итерирования подпространства, причем начальное приближение на каждой сетке, начиная со второй, выбирается при помощи специальных алгоритмов интерполяции решений на предыдущих сетках. Наконец, в комплекс входит модуль программ, предназначенных для уточнения приближенных решений на основе экстраполяции типа Ричардсона по шагу h и параметру τ^{-1}.

В §2 приведены результаты численных расчетов спектра масс и ширин лептонных распадов возбужденных состояний J/ψ – и Υ – мезонов. Причем свободные параметры, такие, как α, β из уравнения (I) и некоторые другие, выбирались с помощью минимизации функционала (программа MINUIT из библиотеки программ LIBCERN), для вычисления которого требуется однократное решение рассмотренной спектральной задачи. При этом требовалось, чтобы уравнение (I) описывало первые несколько состояний частицы с точностью, согласованной с точностью данных физического эксперимента. Проведено сравнение результатов численных расчетов остальных возбужденных состояний с данными физического эксперимента.

В §3 предложен алгоритм решения квазипотенциальных интегральных уравнений в пространстве с весом на отрезке $[-1;1]$.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

Основные результаты

I.Исследованы функциональные свойства квазипотенциальных гиперсингулярных интегральных уравнений, асимптотики собственных чисел и собственных функций соответствующих операторов.

2.Исследованы свойства некоторых проекторов для системы собственных функций уравнений с потенциалом запирающего типа на всей действительной оси в пространстве Соболева с дробным неотрицательным индексом.

3.На основе свойств асимптотик собственных функций и собственных чисел получены оценки погрешности аппроксимации по методу Галеркина в случае кусочно-линейных базисных функций,учитывающих асимптотику решения на бесконечности, а также в случае нелокальных базисных функций. Исследован метод решения класса гиперсингулярных интегро-дифференциальных уравнений на всей оси, основанный на сведении их к уравнению на отрезке $[-1;1]$ в пространстве с весом.

4.На основе полученных теоретических результатов о представлении погрешности приближенных решений в виде степенного ряда по параметру τ^{-1}, а также на основе результатов вычислительного эксперимента предложены алгоритмы уточнения приближенных решений посредством экстраполяции типа Ричардсона по параметру τ с учетом экстраполяции по шагу h.

5.Разработан комплекс программ для решения квазипотенциальных интегральных уравнений на полуоси для ряда потенциалов. Исследованы основные вычислительные характеристики разработанных алгоритмов.

6.При помощи разработанного комплекса программ проведены численные расчеты спектра масс и ширин лептонных распадов возбужденных состояний для J/ψ – и Υ – мезонов. Получено хорошее согласие результатов численных расчетов с известными данными физического эксперимента.

Работы, положенные в основу диссертации:

I. Жидков Е.П.,Никонов Э.Г.,Хоромский Б.Н.Оценки эффективности двухпараметрической экстраполяции для одного класса спектральных задач с интегральным оператором на полуоси.ОИЯИ.PII-85-970. Дубна,I985.

2. Жидков Е.П.,Никонов Э.Г.,Хоромский Б.Н.Асимптотическое представление решений спектральной задачи для интегро-дифференциального оператора на полуоси.ОИЯИ.PII-87-375.Дубна,I987.

3. Zhydkov E.P.,Nikonov E.G.,Sidorov A.V.,Skachkov N.B., Khoromskiy B.N.Numerical solution of integral equations, describing mass spectrum of vector mesons.JINR.E11-88-494.Dubna,1988.

4. Жидков Е.П.,Никонов Э.Г.,Хоромский Б.Н.Численное решение спектральных задач, содержащих интегро-дифференциальный оператор с ядром вида $\partial^2 \ln|s-t|/\partial s\,\partial t$.В сб.Труды Университета дружбы народов М.:Изд-во УДН,1989,с.15.
5. Жидков Е.П.,Никонов Э.Г.,Хоромский Б.Н.В сб.Труды Всесоюзного симпозиума "Современные проблемы математической физики", Тбилиси, Изд-во ТГУ, 1987, с.232.
6. Жидков Е.П.,Никонов Э.Г.,Хоромский Б.Н.Решение проблемы собственных значений для одного класса гиперсингулярных квазипотенциальных интегральных уравнений.ОИЯИ.Р11-89-188.Дубна,1989.
7. Жидков Е.П.,Никонов Э.Г.,Хоромский Б.Н.Асимптотические оценки погрешности аппроксимации методом Галеркина для одного класса квазипотенциальных уравнений.ОИЯИ.Р11-89-191.Дубна,1989.

Цитированные работы:

8. Logunov A.A.,Tavkhelidze A.N.Nuovo Cim.,1963,v.29,p.380.
9. Logunov A.A.,Tavkhelidze A.N.,Khrustalev O.A.Phys.Lett.,1963, v.4,p.325.
10. Kadyshevsky V.G.,Mir-Kasimov R.M.,Skachkov N.B.Nuovo Cim.,1968, 55A,p.223.
11. Арбузов Б.А.,Боос Э.Э.,Саврин В.И.,Шичанин С.А.Препринт НИИЯФ МГУ - 89 - 1/78.М.:1989.
12. Сидоров А.В.,Скачков Н.Б.ОИЯИ.Р2-80-45.Дубна,1980.
13. Сидоров А.В.,Скачков Н.Б.ОИЯИ.Р2-84-502.Дубна,1984.
14. Уилкинсон Дж.,Райнш С.Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра.М.:Машиностроение,1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 апреля 1989 года.