СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

5 - 10992

П.Г.Акишин, И.В.Пузынин

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА НЬЮТОНА
В РАЗНОСТНОЙ ЗАДАЧЕ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ

1977

5 - 10992

П.Г.Акишин, И.В.Пузынин

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА НЬЮТОНА В РАЗНОСТНОЙ ЗАДАЧЕ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ

Акишин П.Г., Пузынин И.В. 5 - 10992

Реализация метода Ньютона в разностной задаче Штурма-Лиувилля

В настоящей работе предлагается способ определения собственных значений разностной задачи Штурма-Лиувилля как корней некоторого полинома при помощи метода Ньютона.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Akishin P.G., Puzynin I.V. 5 - 10992

Realization of Newton's Method in the Sturm-Liouville Difference Problem

A procedure is suggested for determination of eigenvalues of the Sturm-Liouville difference problem as rootes of a certain polynomial using Newton's method.

The investigations has been performed at the Laboratory on Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

I. Рассматривается задача вычисления уровней энергии и соответствующих волновых функций радиального уравнения Шредингера.

$$\frac{d^2}{dr^2}(Y(r))+V(r)Y(r)=\lambda Y(r). \qquad (I)$$

Предполагается, что потенциал $V(r)\to 0$ при $r\to\infty$.

Математическая постановка задачи формулируется следующим образом: для уравнения (I) найти нетривиальное решение $Y(r)$, ограниченное на полуоси $0\leqslant r<\infty$, удовлетворяющее условию регулярности в особой точке $r=0$ $(Y(r)=0)$ и стремящееся к 0 при $r\to\infty$.

Для $\lambda>0$ нетривиальные решения существуют лишь при дискретном наборе значений $\lambda=\lambda_\kappa$. Волновые функции при этом имеют ассимптотику при $r\to\infty$.

$$Y(r)\sim \exp(-\sqrt{\lambda_\kappa}\, r). \qquad (2)$$

Будем предполагать, что свойства $V(r)$ обеспечивают существование таких решений.

Задача нахождения уровней энергии и волновых функций дискретного спектра для уравнения Шредингера известна в математике как задача Штурма-Лиувилля на полуоси $[0,\infty)$.

В ряде работ, посвященных численному решению задачи Штурма-Лиувилля, уравнение (I) заменяется разностным уравнением с двумя граничными условиями на конечном интервале.

Теоретическое обоснование метода конечных разностей в задаче Штурма-Лиувилля дано в работах А.Н.Тихонова, А.А.Самарского /I/,/2/ и других авторов, см. например, /3/,/4/.

Мы остановимся на вычислительных проблемах разностной задачи Штурма-Лиувилля на примере трех работ /5/,/6/,/7/.

В монографии [5] показывается, что λ есть корень детерминанта однородной системы алгебраических уравнений специального вида, который вычисляется для каждого λ по рекуррентной формуле

$$D_{k+1}=\alpha_k D_k + \gamma_k D_{k-1} .$$

Далее на заданном отрезке изменения λ вычисляются значения детерминанта с некоторым шагом $\Delta\lambda$. Выделяются отрезки изменения λ, на которых детерминант меняет знак. После локализации корней они уточняются с помощью процедуры деления отрезка пополам.

В работах [6] применяется похожая процедура, когда при заданном λ одновременно с двух концов решаются две задачи Коши. В некоторой внутренней точке из условия равенства логарифмических производных следует, что существует уравнение для λ, решения которого ищутся с помощью алгоритма деления отрезка пополам.

В работе [7] для локализации собственных значений разностной задачи и определения начальных приближений используется процедура, предложенная в [5], и далее полученные приближения уточняются с помощью итерационной процедуры непрерывного аналога метода Ньютона.

В настоящей работе предлагается способ определения собственных значений разностной задачи Штурма-Лиувилля как корней некоторого полинома при помощи метода Ньютона с последующим уточнением собственных функций с помощью процедуры, изложенной в [7].

В отличие от работы [7], где алгоритм поиска начальных приближений не гарантирует нахождения всех собственных значений, в настоящей работе методом Ньютона решается полная проблема нахождения собственных значений и собственных функций для разностной задачи Штурма-Лиувилля. Это особенно важно для ряда задач квантовой механики (например, для задач теории ядра), в которых дискретный спектр уравнения Шредингера имеет много уровней энергии и для которых процедура определения всех начальных приближений особенно актуальна.

2. Уравнение (I) на полуоси $[0,\infty)$ заменяется уравнением

$$Y''+V(x)Y-\lambda Y=0, \qquad (3)$$

где x изменяется на отрезке $[0,R]$, с граничными условиями

$$Y(0)=0,$$
$$Y'(R)=-\sqrt{\lambda}\,Y(R). \qquad (4)$$

Рассмотрим разностную аппроксимацию задачи (3),(4).

Пусть $\lambda=k^2$, тогда разностная задача

$$\frac{Y_{n+1}-2Y_n+Y_{n-1}}{H^2}+V_nY_n-k^2Y_n=0, \qquad (5)$$

$$Y_0=0, \qquad (6)$$

$$\frac{Y_N-Y_{N-2}}{2H}-kY_{N-1}=0, \qquad (7)$$

где $Y_n=Y(H\cdot n)$,

$V_n=V(H\cdot n)$, $n=0,1,2,\ldots,N$,

аппроксимирует исходную задачу (3), (4) на равномерной сетке с шагом H с точностью порядка H^2.

Зададим $k=k_0$, $Y_0=0$, $Y_1=1$. Тогда из (5) мы можем определить последовательно все Y_n, $n=2,3,\ldots,N$.

Нетрудно заметить, что все Y_n будут полиномами конечной степени от k_0 с действительными коэффициентами.

Отсюда $\mathring{Q}(k_0)=\frac{Y_N-Y_{N-2}}{2H}-k_0Y_{N-1}$ будет полином конечной степени с действительными коэффициентами. И для того, чтобы найти k_0, удовлетворяющее условию (7), необходимо найти корень полинома $\mathring{Q}(k)$.

<u>Лемма</u>

Пусть полином $P(t)$ с действительными коэффициентами в области $Re(t)\le A$ имеет только действительные корни

$$X_1<X_2< \ldots\ldots <X_L\leqslant A .$$

Пусть $Z_1,Z_2,\ldots,Z_N$ - действительные корни $P(t)$, большие A, и $\alpha_1\pm i\beta_1, \ldots, \alpha_M\pm i\beta_M$ - комплексные корни $P(t)$ ($\alpha_i\geqslant A$ $i=1,2,\ldots,M$).

Пусть λ_0 - действительное,

$$\lambda_0\leqslant X_1 .$$

Тогда процесс Ньютона

$$t_{k+1}=t_k-\frac{P(t_k)}{\frac{d}{dt}(P(t))/_{t=t_k}}, \qquad (8)$$

$$t_0=\lambda_0,$$

определен для всех k и существует

$$\lim_{k\to\infty} t_k = X_1 .$$

Доказательство леммы основывается на представлении $P(t)=d_0\prod_{k=1}^{L}(t-X_k)\times\prod_{n=1}^{N}(t-Z_N)\times\prod_{\ell=1}^{M}((t-\alpha_\ell)^2+\beta_\ell^2)$ и детальном рассмотрении формулы (8).

При достаточно малом шаге H $Q(k)$ в нашем случае удовлетворяет условию леммы с $A=0$.

Выберем начальное приближение k_o, меньшее минимального корня. Тогда процесс Ньютона от этого приближения сойдется к минимальному корню (обозначим его k_1 ; остальные корни - $k_2,\ldots,k_L$) .

Для того, чтобы построить процесс Ньютона, нам необходимо знать производную $Q'(k)$.

Для этого продифференцируем (5),(7) по k . Имеем:

$$\frac{Y'_{n+1}-2Y'_n+Y'_{n-1}}{H^2}+V_nY'_n-2kY_n-k^2Y'_n=0, \tag{9}$$

$$Q'=\frac{Y'_N-Y'_{N-2}}{2H}-kY'_{N-1}-Y_{N-1}, \tag{10}$$

$$Y'_o=0, \tag{11}$$

$$Y'_1=0. \tag{12}$$

Зная Y_n, из (9), (12), (11) можно найти все Y'_n .

Далее, подставив значения Y_n , Y'_n в (10), получим Q' .

Для того, чтобы найти следующий корень, мы вместо полинома $Q(k)$ рассмотрим полином $Q_1(k)=Q(k)/(k-k_1)$ и k_o выберем меньше k_1 .

Тогда процесс Ньютона для $Q_1(k)$ будет расписываться следующим образом:

$$t_{k+1}=t_k-\frac{\left(\dfrac{Q(t_k)}{(t_k-k_1)}\right)}{\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{Q(t)}{t-k_1}\right)_{/t=t_k}},$$

или

$$t_{k+1}=t_k-\frac{Q(t_k)}{Q'(t_k)-Q(t_k)\times 1/(t_k-k_1)}.$$

В общем случае, когда известны первые ℓ корней $k_1,k_2,\ldots,k_\ell$, процесс расписывается следующим образом:

$$t_{k+1}=t_k-\frac{Q(t_k)}{Q'(t_k)-Q(t_k)\cdot R},$$

где

$$R=\sum_{m=1}^{\ell}\frac{1}{(t_k-k_m)},$$

t_o выбирается меньше k_ℓ .

Аналогично нахождению первой производной от Q можно найти вторую производную от Q . Следовательно, можно легко построить процесс более высокого порядка. Для того, чтобы уменьшить ошибки, накапливающиеся при счете по рекуррентным формулам, можно применить прием из /6/, т.е. решать две начальные задачи для рекуррентных соотношений с разных концов отрезка $[0,R]$ и приравнять логарифмические производные во внутренней точке.

Для этого случая все сказанное выше остается в силе. Этим методом удается достаточно точно определить собственные значения, но собственные функции определяются существенно хуже. Для уточнения их применяется процедура, предложенная в /7/.

В качестве начального приближения берутся полученные собственные значения и собственные функции. За одну - две итерации с шагом, по времени равным единице, удается получить собственные значения и собственные функции с заданной точностью. С помощью этого метода находятся последовательно все решения, при этом не пропускается ни одно собственное решение.

3. Рассмотренный метод применяется в задачах определения колебательных уровней энергий и волновых функций молекулы водорода /8/.

Результаты расчетов приведены в таблице I.

Как видно из таблицы, вычисленные значения уровней энергии хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В случае более редкой разностной сетки метод применялся для вычисления энергетических уровней оптического потенциала (сумма потенциала Саксона-Вудсона и его производной) и потенциала Морзе.

Уровни энергии для оптического потенциала вычислены другим методом /9/.

Уровни энергии для потенциала Морзе находятся аналитически. Параметры потенциалов и данные для сравнения взяты из работы /I0/.

С точностью аппроксимации дифференциальной задачи при помощи конечноразностной найдены все уровни энергии для обоих потенциалов.

Результаты расчетов приведены в таблицах 2,3.

4. Изложенный метод можно применять в тех линейных и нелинейных задачах на собственные значения, которые при их конечноразностной аппроксимации сводятся к нахождению корней полиномов.

Метод может быть обобщен на случай комплексного потенциала и комплексных собственных значений.

Для этого необходимо расширить область применения метода для нахождения комплексных корней полиномов. При этом был опробован следующий алгоритм:

I) Выбирается z_0 -начальное приближение, const, ρ.

2) Строится последовательность z_k.

а) $z_{k+1}=z_k - \dfrac{f(z_k)}{f'(z_k)-f(z_k)\cdot R}$, если $|f'(z_k)| > \text{const}$;

б) $z_{k+1}=z_k+\rho \times \xi_k$, если $|f'(z_k)| < \text{const}$;

где ξ_k -случайный комплексный вектор на единичной окружности;

$$R = \begin{cases} 0, & \text{если не найден ни один корень.} \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{(z_k-\lambda_i)}, & \text{если } \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N \text{ -первые найденные } N \text{ корней полинома.} \end{cases}$$

Алгоритм был проверен при решении трех уравнений:

I) $z^{20} - 1 = 0$,

2) $z^{200} - 10000z + 1 = 0$,

3) $z^{400} - 10000z + 1 = 0$.

Во всех случаях были найдены все корни уравнений. Время счета на машине СДС-6500 в первом случае составило 0,7 сек, во втором - I04 сек, в третьем - 270 сек.

Таблица I

Колебательные уровни молекулы водорода

№№	Настоящая работа	Данные /8/
I	0,5I602	0,5I59
2	I,00287	I,0025
3	I,46II7	I,4606
4	I,89I2	I,8906
5	2,293I4	2,2925
6	2,6668I	2,6662
7	3,0II73	3,0II2
8	3,32685	3,3266
9	3,6I053	3,6I09
I0	3,86I7	3,8622
II	4,0776	4,0774
I2	4,2528	4,2530
I3	4,3829	4,383I

Таблица 2

Уровни энергии связанных состояний для оптического потенциала

№№	Данные /I0/	Настоящая работа
I	49,457	49,46I
2	48,I48	48,I58
3	46,290	46,3I0
4	43,968	43,998
5	4I,232	4I,274
6	38,I22	38,I78
7	34,672	34,743
8	30,9I2	30,998
9	26,873	26,976
I0	22,588	22,708
II	I8,094	I8,23I
I2	I3,436	I3,590
I3	8,676	8,844
I4	3,908	4,086

Таблица 3

Уровни энергии связанных состояний для потенциала Морзе

№№	Данные /10/	Настоящая работа H = 0,015	Настоящая работа H = 0,03
I	I78,798	I78,799	I78,803
2	I60,283	I60,289	I60,32I
3	I42,780	I42,794	I42,835
4	I26,288	I26,3I2	I26,384
5	II0,808	II0,844	II0,95I
6	96,340	96,387	96,530
7	82,884	82,942	82,II9
8	70,439	70,508	70,7I5
9	59,006	59,083	59,3I6
I0	48,585	48,668	48,9I9
II	39,I76	39,262	39,529
I2	30,778	30,865	3I,I28
I3	23,392	23,476	23,735
I4	I7,0I8	I7,097	I7,336
I5	II,655	II,726	II,94I
I6	7,305	7,364	7,546
I7	3,966	4,0I2	4,I93
I8	I,639	I,669	I,764
I9	0,323	0,337	0,382

ЛИТЕРАТУРА

I. А.Н.Тихонов, А.А.Самарский. ЖВМ и МФ, I, с.784, I96I.

2. А.А.Самарский. Введение в теорию разностных схем. "Наука", М., I97I.

3. Г.И.Багмут. ЖВМ и МФ, I2, с.776, I972.

4. В.Г.Приказчиков. ЖВМ и МФ, 9, с.3I5, I969.

5. Г.И.Марчук, В.Е.Колесов. Применение численных методов для

расчета нейтронных сечений. Атомиздат, М., I970.

6. Ф.А.Гареев. ОИЯИ, Р4-5639, Дубна, I97I.

7. М.Х.Гизаткулов, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев. ОИЯИ, РII-I0029, Дубна, I976.

8. T.E.Sharp.Atomic Data, 1971,2,p.119.

9. Gy.Bencze. Comm. Phys. Math.,1966,31,p.1.

I0. Gh. Adam, L.Gk.Ixary,A. Corciovei. J.Comput. Phys., 1976, 22,p.1.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 октября I977 года.