ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P11 - 10802

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХСТОРОННЕЙ СХОДИМОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПРОЦЕССА НЬЮТОНА ДЛЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1977

Р11 - 10802

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХСТОРОННЕЙ СХОДИМОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПРОЦЕССА НЬЮТОНА ДЛЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Направлено в "Journal of Computational Physics"

Виницкий С.И., Пузынин И.В. P11 - 10802

Численное исследование двухсторонней сходимости модифицированного процесса Ньютона для собственных значений уравнения Шредингера

Предложены новые итерационные схемы решения задачи Штурма-Лиувилля, дающие двухстороннюю сходимость к собственному значению. Эти схемы получены на основе непрерывного аналога метода Ньютона и использования различных нормировочных условий для собственных функций.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Vinitsky S.I., Puzynin I.V. P11 - 10802

Numerical Study of Two-Sided Convergence of Modified Newton's Process for Eigenvalues of the Sroedinger Equation

New iteration schemes for solution the Stürm-Liouville problem are suggested which provide bilateral convergence to an eigenvalue. These schemes have been obtained on the basis of continuous analogue of Newton's method and by using various normalization conditions for eigenfunction.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

1. ВВЕДЕНИЕ

При решении задач на собственные значения

$$\hat{D}y - \lambda y = 0, \tag{1}$$

где $\hat{D}$ – линейный оператор, определенный на некотором функциональном пространстве Y, Л.В.Канторовичем [1] было предложено присоединять к уравнению (1) условие нормировки собственного элемента y

$$F(y) = 0, \tag{2}$$

где F – функционал. Полученную систему уравнений (1) – (2) можно рассматривать как нелинейное уравнение

$$\phi(\lambda, y) = \begin{pmatrix} \hat{D}y - \lambda y \\ F(y) \end{pmatrix} = 0 \tag{3}$$

относительно пары $z = (\lambda, y)$.

Известно, что для численного решения задач на собственные значения в такой постановке наиболее эффективными являются метод Ньютона [2] и полученные с помощью его непрерывного аналога [3] модифицированные вычислительные схемы [4,5].

Дополнительное условие (2) фиксирует собственный элемент y, который определяется уравнением (1) с точностью до постоянного множителя. Изменение функционала F в (2) приводит к изменению свойств оператора ϕ в уравнении (3), для которого рассматривается непрерывный аналог метода Ньютона

$$\phi_t'(z(t)) = -\phi(z(t)), \tag{4}$$

где $0 \le t < \infty$ и $z(0) = z_0 = (\lambda_0, y_0)$. Это обстоятельство используется в данной работе для построения и численного исследования новых итерационных схем с двухсторонней сходимостью по собственному значению, реализующих процесс (4) в задачах, связанных с решением радиального уравнения Шредингера.

2. ПОСТРОЕНИЕ ИТЕРАЦИОННОГО ПРОЦЕССА

Рассмотрим задачу на собственные значения для дифференциального уравнения второго порядка

$$(\hat{D} - \lambda)y = \left(\frac{d^2}{dx^2} + q(x) - \lambda\right)y(x) = 0, \tag{5}$$

где $x \in [a, b]$ с граничными условиями

$$\begin{aligned} &G_i(\lambda)y = d_i(x_i, \lambda)y'(x_i) + f_i(x_i, \lambda)y(x_i) = 0, \\ &i = 1,2, \quad x_1 = a, \quad x_2 = b. \end{aligned} \tag{6}$$

В качестве дополнительного уравнения для задачи (5)-(6) выберем следующие нормировочные условия:

$$F_a(z) = \int_a^b y^2(x)dx + \int_b^\infty y^2(\lambda, x)dx - 1 = 0, \tag{7а}$$

$$F_б(z) = \int_a^b y(x)(\hat{D} - \lambda)y(x)dx + \int_b^\infty y(\lambda, x)(\hat{D} - \lambda)y(\lambda, x)dx = 0, \tag{7б}$$

где $y(\lambda, x)$ – известная асимптотика собственной функции при $x \to \infty$.

В такой постановке задачу (5)-(7) можно рассматривать как аппроксимацию задач непрерывного [5] и дискретного [4] спектров для радиального уравнения Шредингера на полуоси $[a, \infty)$.

Итерационный процесс решения задачи (5)-(7) строится с помощью метода Эйлера [6] для непрерывного аналога метода Ньютона. При заданном начальном приближении $(\lambda_0, y_0(x))$ в окрестности искомого решения $(\lambda^*, y^*(x))$ этот итерационный процесс состоит в последовательном нахождении приближений $(\lambda_n, y_n(x))$. Если на n-шаге итерационного процесса известно $(\lambda_n, y_n(x))$ приближение к искомому решению, то для определения следующего приближения необходимо:

1. Решить краевые задачи относительно $v_n^{(1)}(x), v_n^{(2)}(x)$.

$$\begin{aligned} &(\hat{D}-\lambda_n)v_n^{(1)}(x) = -(\hat{D}-\lambda_n)y_n(x), \\ &G_i(\lambda_n)v_n^{(1)}(x) = -G_i(\lambda_n)y_n(x), \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} &(\hat{D}-\lambda_n)v_n^{(2)}(x) = y_n(x), \\ &G_i(\lambda_n)v_n^{(2)}(x) = -\left[\frac{\partial}{\partial\lambda_n} G_i(\lambda_n)\right]y_n(x). \end{aligned} \tag{9}$$

2. Определить μ_n с помощью соотношений

$$\mu_n^{(a)} = \left\{-1/2\left[\int_a^b y_n^2\,dx + \int_b^\infty y^2(\lambda_n)\,dx - 1\right] - \int_a^b y_n v_n^{(1)}dx\right\}\times$$
$$\times\left\{\int_a^b y_n v_n^{(2)}dx + \int_b^\infty y(\lambda_n) y'_{\lambda_n}(\lambda_n)\,dx\right\}^{-1}, \tag{10a}$$

$$\mu_n^{(b)} = \{ -\int_a^b v_n^{(1)}(\hat{D}-\lambda_n) y_n\,dx - \int_b^\infty y(\lambda_n)(\hat{D}-\lambda_n) y(\lambda_n) dx \} \times$$

$$\times \{ \int_a^b v_n^{(2)}(\hat{D}-\lambda_n) y_n dx + \int_b^\infty [y'_{\lambda_n}(\lambda_n)(\hat{D}-\lambda_n) y(\lambda_n) + \qquad (10б)$$

$$+ y(\lambda_n)(\hat{D}-\lambda_n) y'_{\lambda_n}(\lambda_n) - y^2(\lambda_n)] dx \}^{-1},$$

где

$$y_n = y_n(x), \quad v_n^{(1)} = v_n^{(1)}(x) = -y_n(x),$$

$$v_n^{(2)} = v_n^{(2)}(x), \qquad y(\lambda_n) = y(\lambda_n, x).$$

3. С помощью соотношений

$$y_{n+1}(x) = y_n(x) + \tau_n (v_n^{(1)}(x) + \mu_n v_n^{(2)}(x)),$$

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + \tau_n \cdot \mu_n \qquad (11)$$

найти следующее приближение: $(\lambda_{n+1}, y_{n+1}(x))$, где τ_n – дискретный параметр, выбираемый из условия минимума невязки

$$\delta_n = \min_{\tau_n} \| \hat{D}\, y_{n+1} - \lambda_{n+1} y_{n+1} \|_C . \qquad (12)$$

Заметим, что для самосопряженного на отрезке $[a,b]$ оператора $\hat{D}$ выражение для λ_{n+1}, полученное по формулам (10б), (11),(12),

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + \tau_n [\int_a^b y_n (\hat{D}-\lambda_n) y_n dx] \cdot [\int_a^b y^2 dx]^{-1} \qquad (10в)$$

совпадает при $r_n = 1$ и $\int_a^b y_n^2 dx = 1$ с функционалом Релея /2/ . Если считать, что λ_{n+1} на n-шаге итерационного процесса определяется как минимум функционала (10в) на множестве допустимых функций $y(x)$, то рассматриваемый итерационный процесс представляет собой обобщение вариационного метода Релея–Ритца /2/ для рассматриваемой задачи. На самом деле собственные значения λ и собственные функции y находятся в результате решения системы нелинейных уравнений (5)–(7), причём окончанием итерационного процесса служит достижение минимума функционала (12), более сильного, чем минимум функционала (10в).

Особенность данной вычислительной схемы состоит в том, что в ней поочередно используются оба определения, (10а) и (10б), для μ_n , которые представляют собой конечноразностную производную от собственного значения λ по параметру t . Это соответствует изменению в ходе итерационного процесса математической формулировки исходной задачи, что позволяет получить более гибкий итерационный процесс, который, как показывают приведенные в п. 4 данной работы численные расчёты, дает двухстороннюю сходимость к собственному значению λ .

В данной работе полное дискретное представление итерационного процесса осуществляется на основе метода конечных разностей на равномерной сетке узлов с шагом h с точностью порядка h^2 и квадратурной формулы трапеций того же порядка точности.

Согласно оценкам, приведенным в монографии /7/ , решение такой конечноразностной задачи Штурма–Лиувилля отличается от точного решения (λ^*, y^*) на величину $O(h^2)$.

3. СВЯЗЬ С ТЕОРИЕЙ ВОЗМУЩЕНИЙ

В монографии /8/ показана связь метода Ньютона с теорией возмущений.

Мы рассмотрим один из вариантов реализации этого подхода для задачи (5)–(7), в которой проявляются различия в нормировочных условиях а) и б).

В такой схеме потенциал q представляется в виде суммы

$$q(x)=q_0(x)+\Delta q(x). \tag{13}$$

Основная идея модификации схемы 1), 2), 3) п. 2 состоит в том, что в граничных задачах (8), (9) рассматриваемой нами схемы слагаемое $\Delta q v_n = \Delta q (v_n^{(1)} + \mu_n v_n^{(2)})$ заменяется на $\Delta q v_{n-1}$ из предыдущего шага. Это целесообразно при построении вычислительных схем с искусственным усилением свойств потенциала q, обеспечивающих устойчивость вычислительного процесса /9/. Представление (13) для $q(x)$ возможно, например, в форме

$$\begin{aligned} q_0(x) &= (1+G)\cdot q(x), \\ \Delta q(x) &= -G\cdot q(x), \qquad 0 \le G \le 1. \end{aligned} \tag{14}$$

Модифицированная таким образом вычислительная схема отличается от рассмотренной выше тем, что в пункте 1) необходимо решать вместо краевой задачи (8) задачу

$$\begin{aligned} (\hat{D}_0 - \lambda_n) v_n^{(1)}(x) &= -(\hat{D} - \lambda_n) y_n(x) - \Delta q(x) v_{n-1}(x), \\ G_i(\lambda_n) v_n^{(1)}(x) &= -G_i(\lambda_n) y_n(x), \\ \hat{D}_0 &= \frac{d^2}{dx^2} + q_0(x), \end{aligned} \tag{8$'$}$$

а вместо определения (10б) использовать формулу

$$\mu_n^{(b)} = \{ \int_a^b [-v_n^{(1)}(\hat{D}-\lambda_n) y_n + y_n \Delta q (v_{n-1} - v_n^{(1)})] dx -$$

$$- \int_b^\infty y(\lambda_n)(\hat{D}-\lambda_n) y(\lambda_n) dx \} \cdot \{ \int_a^b [v_n^{(2)}(\hat{D}-\lambda_n) y_n +$$

$$+y_n \Delta q v_n^{(2)}]dx + \int_b^{\infty} [y'_{\lambda_n}(\lambda_n)(\hat{D}-\lambda_n)y(\lambda_n) +$$

$$+ y(\lambda_n)(\hat{D}-\lambda_n)y'_{\lambda_n}(\lambda_n) - y^2(\lambda_n)]dx\}^{-1}. \qquad (10'б)$$

4. ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве примера рассматривалась задача (5)-(7) с потенциалом Морзе [10](стр. 431)

$$q(x) = -2MD[e^{-2\alpha(x-x_0)} - 2e^{-\alpha(x-x_0)}]. \qquad (15)$$

Этот потенциал, для которого существует аналитическое решение рассматриваемой задачи, при определенном подборе параметров использовался для приближенных расчётов уровней энергии квантово-механической системы трех тел, взаимодействующих по закону Кулона [11]. Частным случаем такой задачи является вычисление энергии связи мезомолекул, причём реальный потенциал мезомолекулы хорошо аппроксимируется потенциалом Морзе (15) путем подбора параметров M, D, α, x_0 [12]. В наших численных исследованиях были выбраны два набора параметров для потенциала (15), соответствующих основному и первому возбужденному состояниям мезомолекул $pp\mu$ и $dd\mu$ соответственно. Их значения приведены в табл.1.

Граничные условия (6) были поставлены с использованием известного аналитического решения задачи с целью исключить ошибку в их аппроксимации.

В расчётах была использована конечноразностная сетка с постоянным шагом $h = 0{,}0125$; $a = 0$; $b = 20$, что дает априорную оценку абсолютной точности результатов порядка $\sim 10^{-4}$. Подстановка начальных приближений в исследуемую конечноразностную задачу давала

Таблица 1

Параметры потенциала Морзе для мезомолекул *

	$pp\mu$ (v=0,J=0)	$dd\mu$ (v=1,J=0)
M	4,69	9,13
α	0,67	0,67
D	0,1055	0,1040
x_0	2,15	2,09

* Состояния мезомолекул характеризуются вибрационным квантовым числом v и орбитальным квантовым числом J .

невязку ~10. В итерационном процессе параметр τ выбирался автоматически в соответствии с условием (12) и на всех шагах был равен 1. Итерации прекращались при уменьшении невязки до величины ~10^{-7}.

Результаты численных исследований сходимости модифицированного итерационного процесса, в котором $\mu_n \to \text{const}$, при различных начальных приближениях приведены в табл. 2 и 3. Проведенное исследование показывает, что двухсторонняя сходимость двух независимых итерационных процессов (а) и (б), соответствующих двум определениям μ_n по формулам (10а) и (10б), получается для области начальных приближений

$$\lambda_0 \geq \lambda^* . \qquad (16)$$

При этом искомое собственное значение λ^* захватывается в вилку, начиная со второго шага исследуемых итерационных процессов.

Для обычного метода Ньютона двухсторонняя сходимость получена в области $\lambda_0 < \lambda^*$.

Особый интерес представляет процесс, предложенный в п.2, в котором поочередно используются формулы

Таблица 2

Сходимость итерационных процессов а) и б) от различных начальных приближений λ_0 к собственному значению $\lambda^* = 0,4353$ задачи (5) - (7) с потенциалом (15) для мезомолекулы $pp\mu$ ($v = 0$, $J = 0$).

n	$\lambda_0 = 0,8$		$\lambda_0 = 0,6$		$\lambda_0 = 0,4$	
	λ(a)	λ(b)	λ(a)	λ(b)	λ(a)	λ(b)
1	0,3724	0,1010	0,4050	0,1340	0,4412	0,1840
2	0,4476	0,4164	0,4449	0,4301	0,4324	0,4350
3	0,4369	0,4328	0,4361	0,4351	0,4352	0,4353
4	0,4354	0,4349	0,4353	0,4353	0,4353	0,4353
5	0,4353	0,4352	0,4353	0,4353	0,4353	-
6	0,4353	0,4353	-	-	-	-

(10а) и (10б) для определения $\mu_n \to \mathrm{const}$, что соответствует определениям (7а) и (7б) для нормировочного функционала. Пример сходимости по собственному значению λ такого процесса представлен в табл. 4. При выполнении того же условия (16) собственное значение λ^* захватывается в вилку, начиная со второй итерации.

Сходимость рассмотренных модифицированных итерационных процессов была исследована также в схеме теории возмущений, которая была промоделирована для основного состояния мезомолекулы $pp\mu$ с теми же параметрами Морзе (табл. 1) при $G = 0,1(0,1)0,6$, определенном соотношением (14). При этом проявились различия в характере сходимости этих итерационных процессов а) и б). В частности, при малых G процесс а) сходится быстрее, что иллюстрируется табл. 5. Однако при больших G этот процесс расходится, в то время как процесс б) сходится, что видно из табл. 6. Отметим, что некоторые качественные исследования условий сходимости итерационного процесса а) для возмущенного оператора приведены в [13].

Т а б л и ц а 3

Сходимость итерационных процессов а) и б) от различных начальных приближений λ_0 к собственному значению $\lambda^* = 0{,}1389$ задачи (5) - (7) с потенциалом (15) для мезомолекулы $dd\mu$ ($v = 1$, $J = 0$).

n	$\lambda_0 = 2 \cdot 10^{-1}$		$\lambda_0 = 1{,}8 \cdot 10^{-1}$	
	λ(a)	λ(b)	λ(a)	λ(b)
1	0,0989	0,0192	0,1110	0,0173
2	0,1495	0,1248	0,1465	0,1311
3	0,1406	0,1387	0,1401	0,1388
4	0,1390	0,1389	0,1389	0,1389
5	0,1389	0,1389	0,1389	0,1389

n	$\lambda_0 = 1{,}6 \cdot 10^{-1}$		$\lambda_0 = 1{,}4 \cdot 10^{-1}$	
	λ(a)	λ(b)	λ(a)	λ(b)
1	0,1239	0,0158	0,1381	0,0146
2	0,1431	0,1363	0,1391	0,1389
3	0,1396	0,1389	0,1390	0,1389
4	0,1389	0,1389	0,1389	0,1389
5	0,1389	0,1389	0,1389	0,1389

n	$\lambda_0 = 1{,}2 \cdot 10^{-1}$		$\lambda_0 = 1 \cdot 10^{-1}$	
	λ(a)	λ(b)	λ(a)	λ(b)
1	0,1544	0,0140	0,1748	0,1383
2	0,1345	0,1349	0,1291	0,1127
3	0,1380	0,1389	0,1361	0,1382
4	0,1389	0,1389	0,1387	0,1389
5	0,1389	0,1389	0,1389	0,1389

Таблица 4

Двухсторонняя сходимость модифицированного итерационного процесса с поочередным использованием формул (10а) и (10б) от начального приближения $\lambda_0 = 0,6$ к собственному значению $\lambda^* = 0,4353$ задачи (5) – (7) с потенциалом (15) для мезомолекулы $pp\mu$ ($v=0$, $J=0$).

n	$\lambda_0 = 0,6$ λ_n
1	0,4050
2	0,4301
3	0,4497
4	0,4353
5	0,4361
6	0,4353
7	0,4353

Таблица 5

Сходимость итерационных процессов а) и б) от начального приближения $\lambda_0 = 0,6$ к собственному значению $\lambda^* = 0,4353$ при константе $C=0,2$ в потенциале (14),(15), где q – потенциал Морзе мезомолекулы $pp\mu$ ($v=0$, $J=0$).

n	а)		б)	
	λ_n	δ_n	λ_n	δ_n
1	0,4097	$4,3\cdot10^{-2}$	0,3797	$9,2\cdot10^{-2}$
4	0,4377	$4,5\cdot10^{-3}$	0,4435	$1,2\cdot10^{-2}$
7	0,4353	$1,0\cdot10^{-4}$	0,4344	$1,7\cdot10^{-3}$
10	0,4353	$7,3\cdot10^{-6}$	0,4352	$1,6\cdot10^{-4}$
11	0,4353	$5,8\cdot10^{-7}$	0,4353	$7,5\cdot10^{-5}$
14	–	–	0,4353	$7,2\cdot10^{-6}$
17	–	–	0,4353	$6,9\cdot10^{-7}$

Таблица 6

Сравнение итерационных процессов а) и б) с начальным приближением λ_0 =0,6 к собственному значению λ^* = = 0,4353 при константе G =0,6 в потенциале (14),(15), где q – потенциал Морзе мезомолекулы $pp\mu$ (v=0,J=0).

n	а)		б)	
	λ_n	δ_n	λ_n	δ_n
1	0,4252	$9,8\cdot10^{-2}$	0,58243	$2,2\cdot10^{-1}$
10	0,4516	$4,3\cdot10^{-2}$	0,43256	$1,9\cdot10^{-2}$
20	0,4504	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43587	$1,7\cdot10^{-2}$
30	0,4507	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43582	$1,2\cdot10^{-2}$
40	0,4504	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43569	$9,1\cdot10^{-3}$
50	0,4507	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43560	$6,6\cdot10^{-3}$
60	0,4503	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43552	$4,6\cdot10^{-3}$
70	0,4507	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43547	$3,4\cdot10^{-3}$
80	0,4503	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43543	$2,5\cdot10^{-3}$
90	0,4507	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43540	$1,8\cdot10^{-3}$
100	0,4503	$4,1\cdot10^{-2}$	0,43537	$1,3\cdot10^{-3}$

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в данной работе численные исследования сходимости построенных итерационных процессов демонстрируют новые возможности применения непрерывного аналога метода Ньютона для получения двухсторонних оценок собственных значений в задачах типа Штурма–Лиувилля. Предлагаемый итерационный процесс второго порядка обладает определенными преимуществами по сравнению с известными (см., например, /14/), в которых получаются лишь односторонние оценки для собственных значений.

Кроме того, в результате выполненных в данной работе исследований появилась возможность разработки новых вычислительных схем на основе непрерывного аналога метода Ньютона в теории возмущений.

Авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву и П.Г.Акишину за полезные обсуждения и Т.П.Пузыниной за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Канторович Л.В. УМН, 1956, 11, 99.
2. Коллатц Л. Функциональный анализ и вычислительная математика. Мир, Москва, 1969.
3. Гавурин М.К. Изв. ВУЗов, Математика, 1958, 5, 18.
4. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. J.Comput.Phys., 1973, 13, 1.
5. Пономарев Л.И. и др. ОИЯИ, Р4-9915, Дубна, 1976.
6. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, 125.
7. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. Наука, Москва, 1971.
8. Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ в нормированных пространствах. Физматгиз, Москва, 1959.
9. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-8884, Дубна, 1975.
10. Функциональный анализ. Под редакцией Крейна С.Г. Справочная математическая библиотека. Наука, Москва, 1964.
11. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, Наука, Москва, 1976.
12. Беляев В.Б. и др. ЖЭТФ, 1959, 37, 1652.
13. Жидков Е.П., Пузынин И.В., Хоромский Б.Н. ОИЯИ, Р5-9512, Дубна, 1976.
14. Lowdin P.O. J.Math.Phys., 1965, 6, 1341; Perturbation Theory and Its Applications. Ed. by M.Wilcox Wiley, New York, 1966.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 июня 1977 года.