сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P11 - 12908

Д.Баатар, И.В.Пузынин, А.В.Ракитский

О КОМПЛЕКСНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ РАСЧЕТА ПРИ РЕШЕНИИ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1979

Р11 - 12908

Д.Баатар, И.В.Пузынин, А.В.Ракитский

О КОМПЛЕКСНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ РАСЧЕТА ПРИ РЕШЕНИИ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Баатар Д., Пузынин И.В., Ракитский А.В.

P11 - 12908

О комплексной организации расчета при решении радиального уравнения Шредингера

Рассмотрена модификация итерационного процесса для решения радиального уравнения Шредингера, в которой используются разностные сетки, зависящие от номера итерации. Для модельной задачи с потенциалом Морзе приведены некоторые способы выбора сеток, которые сокращают счетное время.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Baatar D., Puzynin I.V., Rakitskyi A.V.

P11 - 12908

On Complex Organisation of Calculation at Solving the Schroeding Radial Equation

The modification of iteration process for solving the Schroedinger radial equation is considered. It uses the difference net-points depending on iteration number. For a model problem with Morse potential some time-consuming ways of net-points choosing are presented.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

При решении итерационными методами нелинейных разностных уравнений, аппроксимирующих дифференциальные, весьма эффективной является комплексная организация расчетов. Идея такой организации, изложенная, например, в монографии Н.Н.Калиткина /1/, состоит в следующем.

На начальных шагах итерационного процесса используются редкие разностные сетки. По мере уточнения решения в процессе итераций переходят на более подробные разностные сетки, обеспечивающие необходимую точность конечного результата. Такая организация позволяет более оптимально реализовать итерационный процесс.

Цель настоящего сообщения состоит в рассмотрении некоторых вариантов такой организации расчета для итерационного процесса, являющегося дискретным представлением непрерывного аналога метода Ньютона для решения радиального уравнения Шредингера:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + E - \frac{L(L+1)}{r^2} - \mathcal{V}(r)\right] U(r) = 0\,, \qquad 0 \leqslant r \leqslant R < \infty\,, \tag{1}$$

с краевыми условиями

$$\left[f_i(E,r)\frac{d}{dr} + g_i(E,r)\right] U(r)\Big|_{r=R_i} = 0, \tag{2}$$

$$i=1,2; \qquad R_1 = 0, \quad R_2 = R.$$

Известно, что задача на собственные значения (I)-(2), где E - собственное число, а $U(r)$ - собственная функция, может аппроксимировать задачу рассеяния и задачу на связанные состояния, описываемые уравнением (I) на полуоси $0 \le r < \infty$ /2,3/.

Рассматриваемая здесь итерационная процедура для нахождения отдельного решения $(E^*, U^*(r))$ задачи (I)-(2) сводится к нахождению на каждом шаге с номером k итерационных поправок:

$$\Delta E_k = \frac{E_{k+1} - E_k}{\tau_k} = \mu_k ,$$

$$\Delta U_k(r) = \frac{U_{k+1}(r) - U_k(r)}{\tau_k} = v_k(r) \quad , \qquad \text{где}$$

$v_k(r) = -U_k(r) + \mu_k w_k(r)$, функция $w_k(r)$ является решением краевой задачи:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + E_k - \frac{L(L+1)}{r^2} - V(r) \right] w_k(r) = - U_k(r), \tag{3}$$

$$\left[f_i(E_k, r)\frac{d}{dr} + g_i(E_k, r) \right] w_k(r) \Big|_{r=R_i} =$$

$$= - \left[\frac{\partial}{\partial E} f_i(E,r) \Big|_{E=E_k} \frac{d}{dr} + \frac{\partial}{\partial E} g_i(E,r) \Big|_{E=E_k} \right] U_k(r) \Big|_{r=R_i} , \tag{4}$$

а значение μ_k определяется по формуле

$$\mu_k = \left(\int_0^R U_k^2(r)dr + 1 \right) / \int_0^R U_k(r)\, w_k(r) dr .$$

Краевая задача (3)-(4) решается методом конечных разностей, причем используется сетка с равномерным расположением узлов

$$\omega_h = \{ r_n = hn;\ n = 1,2,\dots,M \}$$

и трехточечная аппроксимация задачи (3)-(4) точности порядка $O(h^2)$

В качестве величины, характеризующей сходимость итерационного процесса, рассматривается невязка

$$\delta_k = \max_{2 \le n \le M-1} \left| \frac{U_{k,n+1} - 2U_{k,n} + U_{k,n-1}}{h^2} + (E_k - Q(r_n))\, U_{k,n} \right| ,$$

$$Q(r) = \frac{L(L+1)}{r^2} + V(r) .$$

Предлагаемая модификация рассматриваемого итерационного процесса заключается в применении для конечно-разностной аппроксимации краевой задачи (3)-(4) сеток с равномерным шагом h_k, зависящим от номера итерации. Такой подход вызван желанием сократить общее время вычислений за счет применения вначале, при больших невязках, более редкой сетки с постепенным переходом при уменьшении невязки $\delta_k(h_k)$ на сетки с шагами, обеспечивающими заданную точность результатов. Начальный шаг h_0 должен быть выбран так, чтобы спектр конечно-разностной задачи, аппроксимирующей дифференциальную задачу (I)-(2), включал в себя собственное значение нужного знака, причем сеточная собственная функция должна иметь при этом требуемое число нулей. При переходе от редкой сетки к более частой возникает задача продолжения сеточной функции U_{h_k} в интервалах длины h_k, $r_{n_k} < r < r_{n_k+1}$ с шагом h_{k+1} $(h_k > h_{k+1})$.

Расчеты на модельных задачах показывают, что применение для этой цели интерполяции приводит к увеличению невязки для продолженной функции на 3-4 порядка, если шаги сеток значительно отличаются, что сводит на нет результаты итераций на предыдущих шагах. Поэтому для продолжения сеточной функции U_{h_k} на сетку с шагом $h_{k+1} \ll h_k$ использовался метод прогонки /I/ для решения разностного уравнения, аппроксимирующего (I) при $E=E_{h_k}$ на сетках

$$\omega_{h_k,n_k} = \left\{ r_{n_k},\ r_{n_k} + h_{k+1}, \dots, r_{n_k} + h_{k+1}(j-1), \dots, r_{n_k+1} \right\}$$

с граничными условиями

$$U_{h_{k+1}}(r_{n_k}) = U_{h_k}(r_{n_k}), \quad U_{h_{k+1}}(r_{n_{k+1}}) = U_{h_k}(r_{n_{k+1}}).$$

При этом невязка для продолженной сеточной функции возрастала на порядок по сравнению с предыдущей, что приемлемо для продолжения итераций на более частой сетке, если достигнут достаточно низкий уровень невязки на редкой сетке.

Рассмотрим некоторые особенности предлагаемой модификации на численном примере.

В качестве модельной задачи возьмем уравнение (I) с потенциалом Морзе: $L=0$,

$$V(r) = 2MD\left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right],$$

$$M = 4{,}69; \quad \alpha = 0{,}67; \quad D = 0{,}1055; \quad r_0 = 2{,}15$$

(параметры которого соответствуют аппроксимации потенциала взаимодействия квантовомеханической системы, описывающей мезомолекулу $pp\mu\ (v=0,\ L=0))$ /4/.

Для уравнения (I) с этим потенциалом на отрезке $0 \leq r \leq 20$ поставим граничные условия:

$$U(0) = 0, \tag{5}$$

$$U'(20) + \sqrt{-E}\ U(20) = 0\ , \tag{6}$$

аппроксимирующие асимптотику экспоненциально убывающих при $r \to \infty$ решений уравнения (I).

Вычислительные особенности предлагаемого алгоритма удобно проследить на примере сходимости итераций с постоянным значением параметра $\tau_k \equiv 0,5$. В расчетах начальное приближение для собственного значения выбиралось равным $E_0 = -0,5$ ($E^* = -0.4332$), а начальное приближение для собственной функции вычислялось по формуле

$$U_0(r) = \begin{cases} r\sin(\frac{\pi}{4} r)\ , & 0 \leq r \leq 2.5 \\ Ce^{-\sqrt{-E_0}\, r}\ , & 2,5 < r \leq 20. \end{cases}$$

Итерации прекращались при выполнении условия $\delta_k \leq \varepsilon$ с $\varepsilon = 10^{-8}$.

Рассмотрим некоторые способы выбора шага сетки в зависимости от изменения невязки. В таблице приведены сравнительные характеристики итераций соответствующих процессов, выполненных на ЭВМ CDC-6500. В колонке 2 приведены данные процесса, в котором итерации начинаются на равномерной сетке с количеством узлов $M = 101$ $(h = 0.2)$. При выполнении условия $\delta < 10^{-2}$ итерации продолжались на сетке с $M = 1001$. Продолжение сеточной функции U_h с одной сетки на другую осуществлялось с помощью прогонки. В колонке 3 даны характеристики процесса, для которого начальная сетка содержит 5I узел $(h=0.4)$. Далее при выполнении условия $\delta < 10^{-1}$ осуществляется с помощью квадратичной интерполяции переход на сетку, содержащую вдвое больше узлов по сравнению с предыдущей. Количество узлов ограничено сверху: $M = 1001$. Колонка 4 таблицы содержит информацию о процессе, в котором на каждой сетке проводятся по две итерации, а количество узлов на следующей сетке вычисляется по формуле

$$N_{m+1} = \left[N_m \cdot (\delta_1 / \delta_2) \right] \quad ,$$ где

δ_1 и δ_2 – невязки, полученные для двух итераций на предыду-

Таблица. Сравнительные характеристики итераций с постоянной (I) и переменными (2)-(4) сетками

k	1			2			3			4		
	M	λ	δ	M	λ	δ	M	λ	δ	M	λ	δ
1	1001	.454953	26.0	101	.455239	2.5	51	.456157	1.2	51	.456157	1.2
2	–	.443565	13.0	–	.444003	1.2	–	.445379	.6	–	.445379	.6
3	–	.438398	6.5	–	.438905	.6	–	.440491	.3	101	.439595	.5
4	–	.435808	3.6	–	.436349	.3	–	.438038	.15	–	.436698	.25
5	–	.434493	1.6	–	.435051	.16	–	.436792	.73E-1	201	.435011	.21
6	–	.433828	.8	–	.434395	.78E-1	101	.435269	.77E-1	–	.434157	.10
7	–	.433493	.4	–	.434065	.39E-1	201	.434285	.78E-1	401	.433674	.85E-1
8	–	.433325	.2	–	.433820	.19E-1	401	.433737	.84E-1	–	.433431	.43E-1
9	–	.433241	.1	–	.433816	.97E-2	801	.433449	.79E-1	801	.433296	.35E-1
10	–	.433199	.51E-1	1001	.433487	.51E-1	1001	.433303	.47E-1	–	.433228	.18E-1
15	–	.433158	.16E-2	–	.433167	.16E-2	–	.433162	.15E-2	1001	.433159	.64E-3
20	–	.433157	.50E-4	–	.433157	.50E-4	–	.433157	.45E-4	–	.433157	.20E-4
25	–	–	.16E-5	–	–	.16E-5	–	–	.14E-5	–	–	.63E-6
30	–	–	.48E-7	–	–	.48E-7	–	–	.44E-7	–	–	.19E-7
31	–	–	.23E-7	–	–	.24E-7	–	–	.22E-7	–	–	.90E-8
32	–	–	.11E-7	–	–	.11E-7	–	–	.11E-7	–	–	
33	–	–	.52E-8	–	–	.52E-8	–	–	.56E-8			

щей сетке. Переход от одной сетки к другой осуществляется с помощью квадратичной интерполяции. Счет на сетке с $M = 1001$ начинается при таком способе с одиннадцатой итерации.

Отметим, что по сравнению с итерационным процессом на постоянной сетке ($M = 1001$, колонка I таблицы), который использует 33 033 узла (время счета 21.70 сек), процесс 2 использует 24 639 узлов (время счета 18.58 сек), процесс 3 использует 25 783 узла (время счета 19.79 сек) и процесс 4 использует 24 131 узел (время счета 19.57 сек).

Рассмотренный пример показывает, что применение итерационного процесса с переменными сетками может дать при решении некоторых задач довольно существенное сокращение счетного времени. Использование таких модификаций может быть особенно выгодно при решении задач на собственные значения для систем дифференциальных уравнений. Кроме того, в них можно эффективно реализовать автоматический контроль точности вычислений путем использования правила Рунге-Ромберга /1/ или экстраполяции по Ричардсону /5/. Следует также отметить, что предложенная модификация предназначена для задач, в которых коэффициенты дифференциального оператора задаются в виде таблиц с равномерным шагом. Для задач с потенциалами, заданными в любой точке полуоси $0 \leq r < \infty$ или отрезка $a \leq r \leq b$, целесообразно использовать разностные сетки с оптимальным расположением узлов /6/.

Авторы благодарны Акишину П.Г. за полезные дискуссии.

Литература

1. Калиткин Н.Н. Численные методы. М., Наука , 1978.
2. Ponomarev L.I.,Puzynin I.V., Puzynina T.P. J. Comp. Phys., 1973,13,1,p.1.
3. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Somov I.N. Annals of Phys., 1978, 110, 2, p. 274.
4. Беляев В.Б. и др. ЖЭТФ, 1959, 37, с.1652.
5. Сальвадори М. Дж.,Численные методы в технике. М., ИЛ, 1955, с.79.
6. Sloan D.M. J.Comp. Phys., 1977, 24, p. 320.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 ноября 1979 года.