



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

3619/82

9/8-82

P11-82-314

С.И.Виницкий, А.Д.Гочева, И.В.Пузынин

О ПОСТРОЕНИИ НАЧАЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ
МЕТОДОМ ВАРИАЦИИ ПАРАМЕТРА
ДЛЯ НЬЮТОНОВСКОЙ СХЕМЫ
РЕШЕНИЯ ОДНОЙ ЗАДАЧИ
НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

При решении задач на собственные значения итерационными методами важной проблемой является построение начальных условий для итераций. Проблема усложняется, если нужно найти достаточно большое число собственных решений. В этом случае необходимо либо использовать достаточно хорошие начальные приближения, либо построить метод, имеющий более широкую область сходимости и позволяющий выделять требуемые решения из спектра. Комбинация метода вариации параметра и ньютоновских итераций ^{/1/} дает возможность реализации второго подхода. Метод вариации параметра, включенный в ньютоновские итерации, позволяет в качестве начальных приближений использовать решения более простых задач по сравнению с исходной. Выделение требуемого решения можно осуществить введением естественного дополнительного условия ортогональности искомого решения ко всем ранее найденным. В задачах для дифференциальных уравнений это приводит к итерациям для интегродифференциальных уравнений. Итерационная схема ^{/1/} позволяет находить итерационные поправки как решения краевых задач для дифференциальных уравнений.

В этой работе приведена итерационная схема, реализующая данный подход и являющаяся естественным обобщением алгоритмов, предложенных в работах ^{/1,2/}. С помощью этой схемы вычислены характеристики основного и двух возбужденных сферически-симметричных состояний атома водорода. В качестве начальных приближений использованы решения задачи о движении свободной частицы в сферическом ящике. Впервые решение задачи в такой постановке для основного состояния было рассмотрено в работе ^{/3/} в рамках теории возмущений. Интерес к этой проблеме не ослабевает до настоящего времени ^{/4/}. Отметим, что возбужденные состояния найдены в работе ^{/5/} методом теории возмущений по граничным условиям ^{/6/}.

2. ИТЕРАЦИОННАЯ СХЕМА

Рассмотрим задачу на собственные значения для уравнения ^{/1/}

$$[P - \lambda p] u = 0,$$

/1/

где

$$\lambda \in \mathbb{R}, \quad u = u(r), \quad p = p(r), \quad r \in [R_1, R_2],$$

$$P = q_2(r) \frac{d^2}{dr^2} + q_1(r) \frac{d}{dr} + q_0(r) + \xi_1 K_1, \quad \xi_1 \in \mathbb{R},$$

$$K_1 u = \int_{R_1}^{R_2} K_1(r, r') u(r') dr'.$$

Требуется найти собственные значения λ и собственные функции $u(r)$, удовлетворяющие граничным условиям

$$d_j(\lambda) u = [a_j(\lambda, r) u'(r) + b_j(\lambda, r) u(r)]|_{r=R_j} = 0, \quad /2/$$

$$a_j^2 + b_j^2 > 0, \quad j = 1, 2,$$

и условию нормировки

$$(u, u) - 1 = \int_{R_1}^{R_2} u^2(r) dr - 1 = 0. \quad /3/$$

Задача решается в предположении, что существует дискретный спектр оператора P (λ_n^* , $n = 1, 2, \dots$) и собственные значения λ_n^* - простые. Предполагается также, что оператор P и функция $p(r)$ могут быть представлены в виде

$$P = D_0 + (P - D_0), \quad /4/$$

$$p(r) = p_0(r) + (p(r) - p_0(r)),$$

где

$$D_0 = \hat{q}_2(r) \frac{d^2}{dr^2} + \hat{q}_1(r) \frac{d}{dr} + \hat{q}_0(r)$$

и известны решения $\{\lambda_{0n}, u_{0n}(r)\}$ задачи

$$(D_0 - \lambda p_0) u = 0,$$

$$d_{0j}(\lambda) u = 0, \quad /5/$$

$$(u, u) - 1 = 0,$$

где

$$d_{0j}(\lambda) u = [a_{0j}(\lambda, r) u'(r) + b_{0j}(\lambda, r) u(r)]|_{r=R_j} = 0,$$

$$a_{0j}^2 + b_{0j}^2 > 0, \quad j = 1, 2.$$

Для отыскания решения $\{\lambda_n^*, u_n^*\}$, $n > 1$, воспользуемся представлением искомого решения в виде

$$u = \psi_n(y) = y - \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y) u_m^*, \quad /6/$$

где u_m^* - найденные решения, а y - решение системы уравнений

$$(P - \lambda p) y + \xi_2 K_2 y = 0,$$

$$d_j(\lambda) y + \xi_2 d_j(\lambda) \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y) u_m^* = 0, \quad /7/$$

$$(y, y) - 1 + \xi_2 \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y)^2 = 0.$$

Здесь

$$K_2 y = \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y) (P - \lambda p) u_m^* = -p \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y) (\lambda_m^* - \lambda) u_m^*, \quad \xi_2 = \begin{cases} -1, & n > 1, \\ 0, & n = 1. \end{cases} \quad /8/$$

В соответствии с методом ^{1,2/} введем непрерывный параметр t , $0 \leq t < \infty$, в операторы системы уравнений ^{7/}, ^{8/} относительно $z = \{\lambda, y\}$:

$$\dot{z}(t, z(t)) = \begin{cases} [D_0 - \lambda(t) p_0 + g(t) (P - D_0 - \lambda(t) (p - p_0) + \xi_2 K_2)] y(t), \\ [d_{0j}(\lambda_{0n}) + g(t) (d_j(\lambda(t)) - d_{0j}(\lambda_{0n}))] y(t) + \\ + \xi_2 g(t) d_j(\lambda(t)) \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y(t)) u_m^*, \quad j = 1, 2, \\ (y(t), y(t)) - 1 + \xi_2 g(t) \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*, y(t))^2. \end{cases} \quad /9/$$

Для оператора ^{9/} составляем эволюционное уравнение непрерывного аналога метода Ньютона ^{7/}, которое решаем методом Эйлера ^{8/} на сетке $\Omega_r = \{t_{k+1} = t_k + \tau_k, k = 0, 1, \dots, t_0 = 0\}$ с начальным условием, являющимся соответствующим n -решением задачи ^{5/}. Полученные таким образом ньютоновские итерации продолжают до достижения требуемой точности решения z , а искомого решения u_n восстанавливается по формуле ^{6/}.

3. ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА

Построим равномерную сетку на отрезке $[R_1, R_2]$ с шагом $h = \frac{R_2 - R_1}{N - 1}$ - число узлов/, $\omega_h = \{r_i = R_1 + (i - 1)h, i = 1, \dots, N, r_1 = R_1, r_N = R_2\}$,

и проведем аппроксимацию системы уравнений /7/, /8/ на сетке таким образом, чтобы иметь возможность получить схему порядка $\sim O(h^4)^{1/2}$. В результате уравнения для итерационных поправок $v_k^{(2)}(r_i)$ и $v_k^{(3)}(r_i)$ при известных $\lambda_k = \lambda(r_k)$, $y_k(r_i) = y(r_k, r_i)$ примут вид

$$(D_0^{(2)} - \lambda_k p_0(r_i)) v_k^{(2)}(r_i) = -(g'_k + g_k)(A_k^h + B_k^h) y_k(r_i) - g_k(A_k^h + B_k^h) v_{k-1}(r_i),$$

/10/

$$(d_{0j}^{(2)}(\lambda_{0n}) + g_k(d_{kj}^{(2)} - d_{0j}^{(2)}(\lambda_{0n}))) v_k^{(2)}(r_i) = -g_k(d_{kj}^{(4)} - d_{kj}^{(2)})(y_k(r_i) + v_{k-1}(r_i)) - g'_k(d_{kj}^{(4)} - d_{0j}^{(2)}(\lambda_{0n})) y_k(r_i) - (g'_k + g_k) d_{kj}^{(4)} [C^h y_k(r_i)] - g_k d_{kj}^{(4)} [C^h v_{k-1}(r_i)],$$

$j = 1, 2,$

$$(D_0^{(2)} - \lambda_k p_0(r_i)) v_k^{(3)}(r_i) = [p_0(r_i) + g_k(p(r_i) - p_0(r_i))] y_k(r_i) +$$

$$+ g_k p(r_i) C^h y_k(r_i),$$

$$(d_{0j}^{(2)}(\lambda_{0n}) + g_k(d_{kj}^{(4)} - d_{0j}^{(2)}(\lambda_{0n}))) v_k^{(3)}(r_i) =$$

$$- g_k d_{\lambda, kj}^{(4)} y_k(r_i) - g_k d'_{\lambda, kj}^{(4)} [C^h y_k(r_i)], \quad j = 1, 2,$$

где

$$A_k^h y_k(r_i) = (P^{(4)} - D_0^{(2)} - \lambda_k(p(r_i) - p_0(r_i))) y_k(r_i),$$

$$B_k^h y_k(r_i) = \xi_2 p(r_i) \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*(r_i), y_k(r_i))_{(4)} (\lambda_m^* - \lambda_k) u_m^*(r_i),$$

$$C^h \cdot y_k(r_i) = \xi_2 \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*(r_i), y_k(r_i))_{(4)} u_m^*(r_i).$$

Операторы $P^{(4)}$, $d_{kj}^{(4)}$ аппроксимируют соответствующие P , $d_{kj} = d_j(\lambda_k)$ с точностью $\sim O(h^4)$; $D_0^{(2)}$, $d_{kj}^{(2)}$, $d_{0j}^{(2)}(\lambda_{0n})$ аппроксимируют D_0 , d_{kj} , $d_{0j}(\lambda_{0n})$ с точностью $\sim O(h^2)$. Интегралы вычисляются по обобщенной квадратурной формуле Симпсона с узлами разностной сетки. $d'_{\lambda, kj}^{(4)}$ - разностный оператор, аппроксимирующий с точностью $\sim O(h^4)$ оператор

$$d'_{\lambda, kj} = a'_{\lambda, j}(\lambda_k, r) \frac{d}{dr} + b'_{\lambda, j}(\lambda_k, r), \quad j = 1, 2.$$

Итерационные поправки μ_k и $v_k(r_i)$ имеют вид

$$\mu = \frac{1 + (y_k(r_i), y_k(r_i) - 2v_k^{(2)}(r_i))_{(4)} + (g_k - g'_k)(y_k(r_i), C^h y_k(r_i))_{(4)} - 2g_k(y_k(r_i), C^h v_k^{(3)}(r_i))_{(4)}}{2(y_k(r_i), v_k^{(3)}(r_i))_{(4)} + 2g_k(y_k(r_i), C^h v_k^{(3)}(r_i))_{(4)}}$$

$$v_k(r_i) = -y_k(r_i) + v_k^{(2)}(r_i) + \mu_k v_k^{(3)}(r_i). \quad /12/$$

Новые значения λ_{k+1} , $y_{k+1}(r_i)$ определяются из соотношений

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + r_k \mu_k, \quad /13/$$

$$y_{k+1}(r_i) = y_k(r_i) + r_k v_k(r_i).$$

Сеточные функции $v_k^{(2)}(r_i)$ и $v_k^{(3)}(r_i)$ являются решениями разностных краевых задач и находятся методом прогонки /9/.

Так как начальные приближения известны: λ_{0n} , $y_{0n}(r_i)$, то процесс вычислений $\{\lambda_k, y_k(r_i)\}$, $k=1, 2, \dots$, полностью определен и прекращается на k -том шаге при выполнении условий:

$$\max_{1 \leq i \leq N-1} |(P^{(4)} - \lambda_k p(r_i)) u_k(r_i)| \leq \epsilon,$$

$$\max_{j=1, 2} |d_{kj}^{(4)} u_k(R_j)| \leq \epsilon, \quad /14/$$

$$|(u_k(r_i), u_k(r_i))_{(4)} - 1| \leq \epsilon,$$

где $\epsilon > 0$ достаточно мало, функция $u_k(r_i)$ определяется из соотношения /6/

$$u_k(r_i) = y_k(r_i) - \sum_{m=1}^{n-1} (u_m^*(r_i), y_k(r_i))_{(4)} u_m^*(r_i). \quad /15/$$

В силу теорем /7, 9/ выполняются соотношения

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k = \lambda_n^* + O(h^4), \quad /16/$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} u_k(r_i) = u_n^*(r_i) + O(h^4). \quad /17/$$

4. НАХОЖДЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ЗАДАЧЕ ОБ АТОМЕ ВОДОРОДА

Задача определения уровней энергии и волновых функций атома водорода с орбитальным моментом $\ell=0$ имеет вид

$$\frac{1}{2} u''(r) + \frac{1}{r} u(r) + \lambda u(r) = 0, \quad 0 < r < \infty, \quad /18/$$

$$u(0) = u(\infty) = 0.$$

Таблица 1

r	u_1^h	u_1
0	0	0
0,6	0,6585682	0,6585653
1,2	0,7228595	0,7228566
1,8	0,5950694	0,5950682
2,4	0,4354400	0,4354405
3,0	0,2987170	0,2987185
9,0	$0,2221128 \cdot 10^{-2}$	$0,2221247 \cdot 10^{-2}$
18,0	$0,5480388 \cdot 10^{-6}$	$0,5482721 \cdot 10^{-6}$

Таблица 2

r	u_2^h	u_2
0	0	0
0,6	-0,2199892	0,2200114
1,2	-0,1862535	0,1862725
1,8	$-0,5174106 \cdot 10^{-1}$	$0,5174778 \cdot 10^{-1}$
2,4	0,1022227	-0,1022285
3,0	0,2366502	-0,2366649
3,6	0,3366067	-0,3366253
4,2	0,4000260	-0,4000441
9,0	0,2474586	-0,2474399
27,0	$0,3274266 \cdot 10^{-3}$	$-0,3271768 \cdot 10^{-3}$
39,0	$0,1735980 \cdot 10^{-5}$	$-0,1733717 \cdot 10^{-5}$

В качестве начального приближения для нахождения n -решения $\{\lambda_n, u_n(r_i)\}$ с помощью итерационной схемы /10/-/15/ возьмем решение задачи

$$\frac{1}{2}u''(r) + \lambda u(r) = 0, \quad 0 < r < R, \quad /19/$$

$$u(0) = u(R) = 0,$$

имеющее явный вид

$$\lambda_{0n} = \frac{n^2 \pi^2}{2R}, \quad /20/$$

$$u_{0n}(r) = \frac{\sin(n\pi r)}{R},$$

где $[0, R]$ - отрезок, на котором осуществляется аппроксимация задачи /18/.

Численное решение задачи выполнялось для $n=1,2,3$ на отрезке $[0, 60]$ при следующих параметрах итерационной схемы:

$$h = 0,1, \quad \epsilon = 10^{-6}, \quad g(t) = 1 - e^{-t}, \quad r = 0,5.$$

Точные решения рассматриваемой задачи /18/ известны:

$$\lambda = -\frac{1}{2n^2}, \quad /21/$$

Таблица 3

r	u_3^h	u_3
0	0	0
0,6	-0,1184916	0,1184887
1,2	$-0,9494728 \cdot 10^{-1}$	$0,9494627 \cdot 10^{-1}$
1,8	$-0,1520746 \cdot 10^{-1}$	$0,1520911 \cdot 10^{-1}$
2,4	$0,7195005 \cdot 10^{-1}$	$-0,7194583 \cdot 10^{-1}$
3,0	0,1416036	-0,1415968
3,6	0,1836422	-0,1836326
4,2	0,1966769	-0,1966642
4,8	0,1840329	-0,1840172
5,4	0,1511879	-0,1511695
6,0	0,1042017	-0,1041811
6,6	$0,4881168 \cdot 10^{-1}$	$-0,4878947 \cdot 10^{-1}$
7,2	$-0,1003316 \cdot 10^{-1}$	$0,1005619 \cdot 10^{-1}$
13,2	-0,3185360	0,3185397
14,4	-0,3083504	0,3083497
55,0	$-0,3824873 \cdot 10^{-4}$	$0,4119161 \cdot 10^{-4}$

Таблица 4

k	$\lambda_k (n=2)$	δ_k
0	$0,1370778 \cdot 10^{-2}$	$0,918 \cdot 10^{-2}$
1	$-0,1858043 \cdot 10^{-2}$	0,488 · 10
2	$-0,6979888 \cdot 10^{-1}$	0,664 · 10
6	-0,1404968	0,930
10	-0,1183980	$0,890 \cdot 10^{-1}$
14	-0,1206178	$0,723 \cdot 10^{-2}$
19	-0,1251983	$0,812 \cdot 10^{-3}$
22	-0,1254628	$0,176 \cdot 10^{-2}$
24	-0,1250965	$0,477 \cdot 10^{-3}$
26	-0,1249982	$0,644 \cdot 10^{-4}$
28	-0,1249018	$0,358 \cdot 10^{-3}$
33	-0,12499248	$0,296 \cdot 10^{-4}$
42	-0,1249994	$0,445 \cdot 10^{-5}$

первые три радиальные функции имеют вид

$$u_1(r) = re^{-r},$$

$$u_2(r) = (2r - r^2)e^{-r/2}, \quad /22/$$

$$u_3(r) = (6r - 4r^2 + \frac{4}{9}r^3)e^{-r/3}.$$

Найденные нами первые три собственных значения равны

$$\lambda_1^h = -0,500001, \quad \lambda_2^h = -0,124999, \quad \lambda_3^h = -0,055554. \quad /23/$$

Соответствующие им радиальные функции u_n^h ($n=1,2,3$) представлены в табл.1-3, где они сравниваются с точными решениями /22/, нормированными условием /3/. В табл.4 показана сходимость итераций при нахождении второго собственного значения.

В заключение отметим, что в отличие от схем теории возмущений, использующих малый параметр, представленная итерационная схема имеет более широкую область применимости. Существуют эффективные способы уточнения разностных решений /10/, позволяющие повысить точность результата. Схема без труда может быть обобщена на многопараметрические спектральные задачи /11/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий С.И. и др. ОИЯИ, P11-81-837, Дубна, 1981.
2. Виницкий С.И. и др. ОИЯИ, P11-82-315, Дубна, 1982.
3. Wigner E.P. Phys.Rev., 1954, 94, p.77.
4. Tress E.R. Phys.Rev., 1956, 102, p.1553; Gray V.F. J.Chem.Phys., 1962, 36, p.1801; J.Chem.Phys., 1971, 55, p.2848; Gray V.F., Gonda I. J.Chem.Phys., 1975, 62, p.2007.
5. Gonda I., Gray V.F. J.Chem.Soc.Farad. Trans.11, 1975, 11, p.2016.
6. Wassermann G.D. Proc. Cambridge Phil.Soc., 1948, 44, p.251.
7. Гавурин М.Е. Изв. вузов. Математика, 1958, 5/6/, с.18.
8. Жидков Е.П. и др. ЭЧАЯ, 1973, 4, 1, с.127.
9. Самарский А.Д. Теория разностных схем. "Наука", М., 1977.
10. Марчук Г.И., Шайдуров В.В. Повышение точности решений разностных схем. "Наука", М., 1979.
11. Баатар Д. и др. ОИЯИ, P11-82-97, Дубна, 1982.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 мая 1982 года.

Виницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. P11-82-314
О построении начальных приближений методом вариации параметра для ньютоновской схемы решения одной задачи на собственные значения

Для нахождения нескольких собственных решений интегродифференциального уравнения построен алгоритм, использующий ньютоновские итерации с дополнительным условием ортогональности собственных функций и метод вариации параметра. Начальное условие для итераций получается как решение более простой задачи для дифференциального уравнения. С помощью алгоритма решена задача о нахождении уровней энергии и радиальных функций атома водорода, а в качестве начальных приближений использованы решения задачи о движении частицы в сферическом ящике. В итерациях обращается оператор задачи о движении свободной частицы, а разность между полным оператором и обрабатываемым, включающая кулоновский потенциал, рассматривалась как возмущение. По сравнению со схемами теории возмущений, применяемыми для решения такой задачи, предложенная вычислительная схема имеет более широкую область сходимости.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Vinitsky S.I., Gocheva A.D., Puzynin I.V. P11-82-314
On Construction of Initial Approximations by Parameter-Variation Method for Newton Calculation Scheme for Eigenvalue Problem

The algorithm for solving eigenvalue problem for the integro-differential operator is constructed. It is based on the parameter-variation method and the Newton iterations with the additional orthogonality condition for eigenfunctions. The initial condition for the iterations is obtained by solving a simpler problem of a differential equation. The algorithm is applied to calculate energy levels and radial functions of the hydrogen atom. The solution of the problem of a particle moving in a spherical box is used as zeroth order approximation. In the iterations the zeroth order operator is inverted, and the difference between it and the original operator, that contains the Coulomb potential, is further considered as a perturbation. The present approach is convergent in a wider range of problems than the perturbation theory scheme.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод авторов.