

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P11-85-758

В.В.Гусев*, М.С.Касчиев

МЕТОД ИТЕРАЦИИ
АЛЬТЕРНИРУЮЩИХ ПОДПРОСТРАНСТВ
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ
ТРЕХМЕРНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАДАЧ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

* Институт физики высоких энергий, Серпухов

1985

Введение

Рассмотрим трехмерную спектральную задачу

$$-\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} + qu = \lambda \varepsilon(x) u, \quad x \in \Omega \subset R^3 \quad (1)$$

с граничными условиями первого или второго рода на разных участках границ области Ω ; пусть оператор этой задачи самосопряженный и ограниченный снизу. Уравнением (1) описываются многие процессы электродинамики, квантовой механики и других разделов физики. Как правило, интерес представляют p минимальных собственных значений и соответствующие собственные векторы задачи (1).

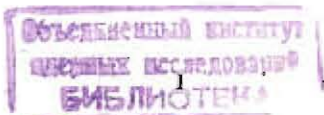
Конечно-разностная или вариационно-разностная аппроксимация задачи (1) приводит к обобщенной алгебраической проблеме на собственные значения:

$$Ax = \lambda Bx. \quad (2)$$

Матрицы A и B размерности $N \gg 1$ симметричны, а B положительно-определенна. В дальнейшем будем предполагать, что A тоже положительно-определенна. В противном случае будем рассматривать задачу (2) с матрицей $\tilde{A} = (A + \alpha B)$, где $\alpha > 0$. Обзор наиболее распространенных и развитых численных методов решения задачи (2) содержится в монографиях Уилкинсона ^{/1/}, Парлетта ^{/2/}, *Bathe* ^{/3,4/} и др. Из этих методов можно выделить две основные группы.

К первой относятся методы, связанные с непосредственной минимизацией функционала Рунд-Ритца, такие, как методы координатной релаксации ^{/5/}, наискорейшего спуска ^{/6/}, сопряженных градиентов, метод Рунд-Ритца. Привлекательной особенностью этих методов является то, что они не требуют обращения матриц и основной трудоемкой операцией является умножение матрицы на вектор. Однако скорость их сходимости существенно зависит от выбора начального приближения к собственным векторам. Определенные трудности возникают и при решении проблемы исчерпывания собственных значений, которые связаны с необходимостью соблюдать ортогональность к полученным собственным векторам.

Вторая группа основана на итерации обратных степеней матрицы A . При этом развиты методы для вычисления как отдельного решения, так и группы собственных значений. К ним относятся непрерывный аналог метода Ньютона ^{/7/}, метод обратной итерации ^{/1/}, итерация функционала Рунд-Ритца ^{/8,9/}, итерация подпространства ^{/3,4/}, метод Ланцоша ^{/2,4/}. Все они характеризуются высокой скоростью сходимости линейной, квадратичной, кубической, но при этом необходимо многократно решать систему алгебраических уравнений:



$$Ax = \varrho. \quad (3)$$

Эффективность этих методов существенно зависит от способа решения задачи (3). При относительно небольших N применяют прямые методы^{/3,4/}. Но с увеличением размерности задачи возрастают потребности в памяти ЭМ, и использование прямых методов становится затруднительным. Поэтому для очень больших задач, когда оперативная память ограничена, приходится применять итерационные методы^{/10,11/}. Суммарные затраты машинного времени в этом случае зависят от числа итераций, необходимых для решения задачи (3) (внутренние итерации), и от того, сколько раз приходится решать систему (3) (внешние итерации). За счет сдвига спектра можно значительно уменьшить число внешних итераций, но при этом число внутренних итераций будет возрастать, что в конечном итоге приводит к снижению эффективности метода в целом.

В данной работе предлагается метод итерации альтернирующих подпространств (МИАП) для одновременного вычисления P минимальных собственных значений и соответствующих собственных векторов задачи (2). В МИАП задача сводится к последовательным вычислениям векторов и чисел Ритца в специальных подпространствах меньшей размерности (альтернирующих подпространствах), а для решения редуцированной задачи применяется метод итерации подпространства (МИП). Таким образом, при реализации метода достаточно решать задачу (3) с некоторой матрицей \bar{A} с размерностью, допускающей использование прямых методов.

В первом параграфе работы изложен алгоритм предлагаемого метода при самом общем выборе альтернирующих подпространств. Далее формулируется трехмерное уравнение Шредингера задачи трех тел с кулоновским взаимодействием, описывающее уровни энергии связи и волновые функции мезомолекул протонов водорода^{/13,14/}, и краевые условия для волновой функции. Приводятся разностная аппроксимация этой задачи методом конечных элементов.

В третьем параграфе обсуждается программная реализация метода, связь с другими методами и на основе конечно-элементной сетки для численного решения указанного выше уравнения Шредингера приводятся возможные конкретные примеры выбора альтернирующих подпространств.

В четвертом параграфе изложены результаты численного решения тестовой задачи для оператора Лапласа. Исследованы сходимость метода и точность аппроксимации. Приведены вычисленные значения энергии связи мезомолекул $d_1 d_2 d_3$, которые сравниваются с другими известными результатами.

§ 1. Метод итерации альтернирующих подпространств

Обозначим через $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_P$ и u^1, u^2, \dots, u^P минимальные собственные значения и соответствующие им собственные векторы задачи (2). Пусть в N -мерном евклидовом пространстве E_N выбран некоторый базис $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $n < N$, индуцирующий подпространство $E_n = \text{span } X$. Рассмотрим задачу о нахождении наилучшего приближения $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_P$, $\bar{x}_i \in E_n$, $i=1, \dots, P$, к собственным векторам u^1, u^2, \dots, u^P в смысле векторов Ритца. Согласно^{/2,3/} векторы $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_P$ являются стационарными точками в E_n функционала Ралея-Ритца:

$$f(x) = P_1(x)/P_2(x), \quad (4)$$

где $P_1 = (x, Ax)$, $P_2 = (x, Bx)$, $x \in E_n$. Для любого вектора $x \in E_n$, $x = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i$ отношение (4) принимает вид

$$f(x) = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j \tilde{a}_{ij}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j \tilde{b}_{ij}}. \quad (5)$$

Здесь $\tilde{a}_{ij} = (x_i, Ax_j)$, $\tilde{b}_{ij} = (x_i, Bx_j)$. Условие стационарности функционала Ралея-Ритца означает, что $\partial f / \partial \alpha_i = 0$, $i=1, 2, \dots, n$. Из представления (5) следует, что

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_i} = (P_2 \sum_{j=1}^n \alpha_j \tilde{a}_{ij} - P_1 \sum_{j=1}^n \alpha_j \tilde{b}_{ij}) / P_2^2, \quad i=1, 2, \dots, n,$$

и условие минимума записывается в виде

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j (\tilde{a}_{ij} - f \tilde{b}_{ij}) = 0, \quad f = P_1 / P_2.$$

Отсюда видно, что коэффициенты $\bar{\alpha}^1, \bar{\alpha}^2, \dots, \bar{\alpha}^P$ векторов Ритца $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_P$ являются собственными векторами редуцированной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений:

$$\tilde{A} \bar{\alpha} = f \tilde{B} \bar{\alpha}, \quad (6)$$

где

$$\tilde{A} = (\tilde{a}_{ij})_{i,j=1}^n, \quad \tilde{B} = (\tilde{b}_{ij})_{i,j=1}^n.$$

Пусть $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_P$ и $\bar{\alpha}_1^1, \bar{\alpha}_1^2, \dots, \bar{\alpha}_1^P$ — минимальные собственные значения и соответствующие собственные векторы задачи (6). Искомые векторы Ритца $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_P$ выражаются как $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^n \bar{\alpha}_i^j x_j$ в числе Ритца $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_P$ удовлетворяют неравенствам^{/2,3/}

$$\lambda_1 \leq \rho_1, \quad \lambda_2 \leq \rho_2, \quad \dots, \quad \lambda_P \leq \rho_P. \quad (7)$$

Из того, что матрицы A и B положительно-определены, следует, что такими являются и матрицы \bar{A} и \bar{B} . Пусть векторы $\bar{x}_1^t, \bar{x}_2^t, \dots, \bar{x}_p^t$ ортонормальны. Нетрудно убедиться, что для векторов Ритца $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_p$ выполняются следующие соотношения:

$$(\bar{x}_i, A \bar{x}_j) = \delta_{ij} \sqrt{\mu_j}, (\bar{x}_i, B \bar{x}_j) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, p. \quad (7a)$$

Пусть через E обозначено подпространство E_N , натянутое на p собственных векторов задачи (2), соответствующих минимальным собственным значениям, а $X_0 = (x^1, \dots, x^p)$ — некоторый базис, имеющий ненулевую проекцию в E^0 , и пусть $E_0 = \text{span } X_0$.

Рассмотрим q базисов $E_{n_i}, X^i = (x^{j_1}, x^{j_2}, \dots, x^{j_{n_i}}), n_i > p, n_i + p < N$, и пусть $E_i \stackrel{\text{def}}{=} E_{n_i} = \text{span } X^i$. Эти базисы выбраны так, что

$$E_N = \bigcup E_i, \quad E_i \cap E^0 = \emptyset, \quad i = 1, 2, \dots, q.$$

Определение. Подпространства

$$\bar{E}_i \stackrel{\text{def}}{=} E_{n_i + p} = \text{span}(x^{j_1}, \dots, x^{j_{n_i}}, x^1, \dots, x^p), \quad i = 1, 2, \dots, q,$$

будем называть альтернирующими подпространствами.

Метод итерации альтернирующих подпространств состоит в переопределении базиса подпространства E_0 в результате последовательного вычисления векторов Ритца в альтернирующих подпространствах $\bar{E}_i, i = 1, 2, \dots, q$.

Изложим алгоритм метода.

1. Выбор базиса X_0 подпространства E_0 .

2. Для $m = 1, 2, \dots$ находим векторы Ритца в альтернирующих подпространствах $\bar{E}_i, i = 1, 2, \dots, q$, следующим образом:

2.1. Определяем базис X_m^i :

$$\bar{X}_m^i = (X^i, X_m^{i-1}), \quad X_m^0 = X_{m-1}.$$

2.2. Находим проекции матриц A и B :

$$A_m^i = (\bar{X}_m^i)^T A \bar{X}_m^i, \quad B_m^i = (\bar{X}_m^i)^T B \bar{X}_m^i.$$

2.3. Вычисляем p минимальных собственных значений и собственных векторов задачи

$$A_m^i \varphi = \mu B_m^i \varphi. \quad (8)$$

Пусть эти значения равны $0 < \mu_1^{m,i} \leq \mu_2^{m,i} \leq \dots \leq \mu_p^{m,i}$, а Φ_m^i — матрица размерности $(p \times p)$ из соответствующих собственных векторов φ задачи (8).

2.4. Переопределяем базис подпространства E_0 :

$$X_m^i = \bar{X}_m^i \Phi_m^i.$$

2.5. Если $i = q$, то положим

$$X_{m+1} = X_m^q, \quad \lambda_j^{m+1} = \mu_j^{m,q}, \quad j = 1, 2, \dots, p.$$

3. При выполнении условия

$$\max_{1 \leq j \leq p} \left| \frac{\lambda_j^{m+1} - \lambda_j^m}{\lambda_j^{m+1}} \right| < \varepsilon$$

процесс прекращается, в противном случае возвращаемся к пункту 2.

Остановимся более подробно на основном и наиболее трудоемком шаге 2.3 итерационного процесса.

Рассмотрим метод итерации подпространств для решения задачи (2), который в постановке [3,4] имеет следующий вид:

$$A \bar{Y}_k = B Y_k, \quad (9)$$

$$A_{k+1} = \bar{Y}_k^T A Y_k, \quad B_{k+1} = \bar{Y}_k^T B Y_k, \quad (10)$$

$$A_{k+1} \Phi = \lambda B_{k+1} \Phi, \quad (11)$$

$$Y_{k+1} = \bar{Y}_k \Phi. \quad (12)$$

Здесь Y_0 — заданная матрица (N, p) из начальных приближений. Матрица \bar{Y}_k определяется из решений систем линейных алгебраических уравнений (9), а в (10)–(12) осуществляется переопределение базиса подпространства E_0 с помощью процедуры Ритца. Как было отмечено выше, решение (9) является самым трудоемким шагом при реализации ИИП в случае $N \gg 1$. В данной работе этот метод используется для решения редуцированной задачи (8), в которой матрицы A_m^i и B_m^i имеют порядок $n_i + p \ll N$, что позволяет эффективно применить прямые методы для решения задач (9) в ИИП. Матрицы A_m^i и B_m^i можно записать в следующем виде:

$$A_m^i = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad B_m^i = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где

$$A_{11} = (X^i)^T A X^i, \quad B_{11} = (X^i)^T B X^i,$$

$$A_{12} = A_{21}^T = (X^i)^T A X_m^{i-1}, \quad B_{12} = B_{21}^T = (X^i)^T B X_m^{i-1},$$

$$A_{22} = (X_m^{i-1})^T A X_m^{i-1}, \quad B_{22} = (X_m^{i-1})^T B X_m^{i-1}.$$

Отметим, что при $i + m \geq 3$ согласно (7a) имеем

$$A_{22} = \text{diag}(\mu_1^{m,i-1}, \mu_2^{m,i-1}, \dots, \mu_p^{m,i-1}), \quad B_{22} = I_p,$$

где I_p — единичная матрица порядка p . В силу представления (13) на шаге (9) нужно решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Здесь векторы ψ_1 и ψ_2 имеют размерность n_1 , а ψ_1 и ψ_2 - размерность p . Для решения (14) используется прямой метод [10]:

$$\psi_1 = A_{11}^{-1} (\epsilon_1 - A_{12} \psi_2),$$

$$\psi_2 = (A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12})^{-1} (\epsilon_2 - A_{21} A_{11}^{-1} \epsilon_1).$$

Отсюда видно, что вычисление ψ_1 и ψ_2 требует $p+2$ раз решить систему линейных уравнений с матрицей A_{11} и один раз с матрицей размерности p . Кроме того, при реализации шага 2.3, для ускорения сходимости МИП, при $m > 1$ следует производить сдвиг оператора эволюции (8) на величину $-\gamma_m m^{i-1}$, а для начальных приближений к собственным векторам этой задачи выбирать орты $e_{n_i+1}, j=1,2,\dots,p$. Такая реализация позволяет при решении конкретных задач существенно уменьшить число итераций МИП, необходимое для вычисления решения задачи (8) с заданной точностью.

Альтернативные подпространства следует выбирать из условия простоты матриц A_{11} , экономии вычислительных затрат и более быстрой сходимости метода. Эти требования противоречивы, и усиление одного из них существенно зависит от вычислительных возможностей для решения задачи (2) (объем оперативной и внешней памяти, средства распараллеливания, матричный процессор и т.п.), а также от конкретного вида уравнения (1), области его определения и т.д. Эти вопросы будут рассмотрены далее при решении конкретных задач.

§ 2. Уравнение Шредингера задачи трех тел и его аппроксимация методом конечных элементов

Пусть задана система из трех частиц a_1, a_2, a_3 , взаимодействующих по закону Кулона, с массами $M_1, M_2, M_3, M_1 < M_2, M_3 < M_1, M_2 < M_3$ и зарядами z_1, z_2 и $z_3 = -1$. Обозначим расстояния между частицами a_1 и a_2 через R , а через r_1 и r_2 - расстояния от a_1 до a_2 и от a_2 до a_3 . Введем вытянутые сферические координаты $x = (x_1, x_2, x_3)$ как в [12]:

$$x_1 = (r_1 + r_2)/R, \quad x_2 = (r_1 - r_2)/R, \quad x_3 = R.$$

Независимые переменные $x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$, где

$$\Omega = \{ 1 \leq x_1 < \infty, -1 \leq x_2 \leq 1, 0 \leq x_3 < \infty \}.$$

Уравнение Шредингера этой системы в представлении полного момента J при значении $J=0$ в единицах $e = \hbar = m_0 = 1$ имеет вид [13, 14]:

$$(H - E)\Psi = 0, \quad (15)$$

где гамильтониан H определяется выражением

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha\beta}} K_{\alpha\beta}(x) \frac{\partial}{\partial x_{\beta\alpha}} + V.$$

Введем обозначения:

$$M = M_0/m_0, \quad M_0^{-1} = M_1^{-1} + M_2^{-1}, \quad m_a^{-1} = M_1^{-1} + (M_1 + M_2)^{-1}, \quad \alpha = (M_2 - M_1)/(M_1 + M_2).$$

Тогда коэффициенты уравнения (15) записываются в виде

$$K_{11}(x) = \frac{x_3^2}{4} (x_1^2 - 1) \rho(x), \quad K_{22}(x) = \frac{x_3^2}{4} (1 - x_2^2) \rho(x), \quad K_{33} = \frac{x_3^5}{16M} (x_1^2 - x_2^2),$$

$$K_{12} = K_{21} = -\frac{x_3^4}{16M} (x_1^2 - 1)(x_1 - \alpha x_2), \quad K_{23} = K_{32} = -\frac{x_3^4}{16M} (1 - x_2^2)(x_2 - \alpha x_1),$$

$$K_{13} = K_{31} = 0, \quad \rho = 1 + \frac{1}{4M} [x_1^2 + x_2^2 - 2\alpha(x_1 + x_2)],$$

$$V = \frac{1}{x_3} \left[z_1 z_2 / 8 - \frac{(z_1 + z_2)x_1 + (z_2 - z_1)x_2}{4(x_1^2 - x_2^2)} \right], \quad \gamma = \frac{x_3^5}{8} (x_1^2 - x_2^2).$$

Кривые условия для волновой функции Ψ получены в работе [14]:

$$\lim_{x_1 \rightarrow 0} x_3^5 \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} = 0, \quad \lim_{x_1 \rightarrow 1} (x_1^2 - 1) \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} = 0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow \pm 1} (1 - x_2^2) \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} = 0, \quad (16)$$

$$\lim_{x_1 \rightarrow \infty} \Psi(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad \lim_{x_3 \rightarrow \infty} \Psi(x_1, x_2, x_3) = 0. \quad (17)$$

Условия (16) обеспечивают ограниченность волновой функции на плоскостях $\{x_1=0\}, \{x_1=1\}, \{x_2=1\}$ и $\{x_2=-1\}$, где коэффициенты уравнения обращаются в нуль, а условия (17) - исчезновение волновой функции на бесконечности. При численном решении задачи (15)-(17) используется конечная область

$\Omega_{\text{кр}} = \{ 1 \leq x_1 \leq x_1^{\text{max}}, -1 \leq x_2 \leq 1, 0 \leq x_3 \leq x_3^{\text{max}} \}$, где $x_1^{\text{max}} \gg 1, x_3^{\text{max}} \gg 1$, зависимость решения от величин x_1^{max} и x_3^{max} определяется из численного эксперимента, а при $x_1 = x_1^{\text{max}}$ и $x_3 = x_3^{\text{max}}$ ставятся однородные условия Дирихле.

Вариационный функционал Рэлея-Ритца задачи (15)-(17) имеет вид

$$R(\Psi) = a(\Psi, \Psi) / (\Psi, \Psi), \quad (18)$$

$$\text{где } a(\Psi, \Psi) = \int_{\Omega_{\text{кр}}} \left(\sum_{\alpha, \beta=1}^3 K_{\alpha\beta} \frac{\partial \Psi}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_{\beta}} + \tau V \Psi^2 \right) dx, \quad (\Psi, \Psi) = \int_{\Omega_{\text{кр}}} \tau \Psi^2 dx.$$

Разностная аппроксимация задачи (15)–(17) основана на минимизации вариационного функционала (18) методом конечных элементов^{/3,4,15/}. Ввиду того, что область Ω_k является параллелепипедом, удобно использовать прямоугольные линейные и квадратичные лагранжовы элементы. Для линейных элементов имеем 8 степеней свободы, а для квадратичных – 27. Соответствующие пространства L_2 обозначим через S_h^1 и S_h^2 , и пусть $\{\ell_i^j(x)\}_{i=1}^N$, $j=1,2$, – лагранжовый базис этих пространств^{/13/}. Функцию $\Psi(x)$ представим в виде

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^j \ell_i^j(x),$$

где φ_i^j – неизвестные значения функции Ψ в узлах сетки. Подставив это выражение в (18) и минимизируя по неизвестным коэффициентам φ_i^j ^{/13/}, получаем, что значения волновой функции Ψ в узлах сетки и энергии E являются решением обобщенной алгебраической проблемы собственных значений (2). Элементы матрицы A и B определяются как

$$a_{ik} = a(\ell_i^j, \ell_k^j), \quad b_{ik} = (\ell_i^j, \ell_k^j), \quad i, k=1, 2, \dots, N, \quad j=1, 2. \quad (19)$$

Матрица жесткости A и матрица массы B симметричны и имеют ленточную структуру, а B – положительно-определенна. Вид функций $\{\ell_i^j\}$ рассмотрен в монографиях^{/4,13/}, а все интегралы (19) вычислялись аналитически.

Обозначим через (λ, u) решение задачи (15)–(17), а через (λ^h, u^h) – решение (2). Имеет место следующие оценки для точности разностной задачи^{/13/}:

$$\begin{aligned} |\lambda - \lambda^h| &= O(h^2), \quad \|u - u^h\|_0 = O(h^2) && \text{для линейных элементов,} \\ |\lambda - \lambda^h| &= O(h^3), \quad \|u - u^h\|_0 = O(h^3) && \text{для квадратичных элементов,} \end{aligned} \quad (20)$$

где $\|u\|_0 = (u, u)^{1/2}$, а h – характерный шаг сетки.

§ 3. Программная реализация

Выбор альтернирующих подпространств является основным этапом при реализации метода. В ряде случаев при специальном выборе этих подпространств ММАП можно рассматривать как обобщение некоторых известных методов для одновременного вычисления P минимальных собственных значений.

Пусть сетка ω содержит N незакрепленных узлов и каждому узлу $x \in \omega$ соответствует номер k , $1 \leq k \leq N$. Множество этих номеров обозначим через $N = \{1, 2, \dots, N\}$. Это множество предста-

вим в виде объединения подмножеств $N_i^-, N_i^+ = \bigcup_{j=1}^q N_i^{j\pm}$. Каждому элементу $k \in N_i^+$ поставим в соответствие орт $e_k \in E_N$. Совокупность ортов, соответствующих элементам множества N_i^+ , является базисом в E_N , определяющим подпространство E_i^+ , $i=1, 2, \dots, q$. Свой простой способ выбора подмножеств N_i^+ – это случай, когда $q=N$ и $N_i^+ = \{i\}$. В такой постановке ММАП является обобщением метода координатной релаксации^{/5/} с переортогонализацией 2.4 на каждом шаге итерационного процесса (2.1)–(2.4), а A_{ii} – скалярная величина.

Дальнейшие рассуждения проведем на примере конечно-элементной сетки для численного решения задачи (15)–(17).

Узлу $x \in \omega$ сопоставим целые числа (i_1, i_2, i_3) , определяющие его номер $k = i_2 + (i_1 - 1)N_2 + (i_3 - 1)N_1N_2$, $i_j = 1, 2, \dots, N_j$, $j=1, 2, 3$, где N_j – число незакрепленных узлов сетки по оси x_j . Подмножество N_i^+ определим как $N_i^+ = \{(i_1, i_2, i_3), 1 \leq i_j \leq N_j, j=1, 2, 3, k_i^- \leq i \leq k_i^+\}$, где k_i^\pm такие, что объединение множеств $\{k_i^-, k_i^- + 1, \dots, k_i^+\}$ совпадает с множеством $\{1, 2, \dots, N_3\}$. При выполнении неравенств $k_i^- \leq k_{i+1}^+, k_{i+1}^- \leq k_i^+$ для подпространств E_i^+ имеем $E_{i-1}^+ \cap E_i^+ \neq \emptyset, E_i^+ \cap E_{i+1}^+ \neq \emptyset$. Заметим, что такой выбор подпространств E_i^+ соответствует выбору подпространств в альтернирующем методе Шварца^{/16/}.

Естественно, что при решении конкретной задачи выбор альтернирующих подпространств обуславливается также имеющейся априорной информацией о решении. Так, например, при численном решении задачи (15)–(17) множества N_i^+ выбирались из условия $k_i^- = k_i^+ = k_i$, $k_{i+1}^- = k_i^+ + 1$, $k_i = 1$, $k_q = N_3$. В этом случае матрицы A_{ii} по своей структуре подобны матрице, полученной при численном решении задачи двух кулоновских центров^{/17/}, что позволило задать оптимальные разбиения по переменным x_1 и x_2 . Кроме того, при таком выборе подпространств на каждом шаге 2.1–2.3 требуется только та часть матриц A, B и X_m , которая соответствует элементам множеств $N_{i\pm 1}^+, \ell = 0, 1$ для линейных, и $N_{i\pm 2}^+, \ell = 0, 1, 2$ для квадратичных элементов. Это позволяет активно использовать внешнюю память и работать только с частью исходных матриц и решений. Требуемая оперативная память при этом оценивается величиной

$$\begin{aligned} Q^1 &= N_1 N_2^2 + (5P+1)N_1 N_2 + O(N_1) && \text{для линейных элементов,} \\ Q^2 &= N_1 N_2^2 + (7P+1)N_1 N_2 + O(N_1) && \text{для квадратичных.} \end{aligned}$$

Расчеты проводились на последовательности вложенных сеток $\omega_0 \subset \omega_1 \subset \omega_2 \subset \dots$. При таком способе решения задачи (15)–(17) можно проследить сходимость численных результатов, исследовать оценки (20) и провести соответствующую экстраполяцию

собственных значений с целью их уточнения. На самой крупной сетке ω_0 при достаточно небольшом N задача (2) решалась методом итерации подпространств. Полученные на этой сетке собственные векторы интерполируются на ω_1 и используются в качестве начальных приближений МИАП. После их уточнения проводится интерполяция в узлах следующей сетке и т.д. В такой последовательности численные расчеты показали практически линейную зависимость времени счета от общего числа узлов и довольно быструю сходимость метода на каждой сетке.

§ 4. Численные результаты

В качестве теста программ, реализующего метод, была рассмотрена задача

$$-\Delta u = \lambda u,$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1} \Big|_{x_1=0} = u \Big|_{x_1=1} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0} = \frac{\partial u}{\partial x_2} \Big|_{x_2=1} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x_3} \Big|_{x_3=0} = u \Big|_{x_3=1} = 0, \quad (21)$$

первое и второе собственные значения которой соответственно равны $\lambda_1^T = \pi^2/2$, $\lambda_2^T = 18\pi^2/2$.

В табл. 1 показана сходимость метода при использовании трех сеток. Через δ_i обозначены относительные ошибки для первого и второго собственных значений. Число итераций при решении задач (21) в каждом подпространстве равнялось в среднем 4. Сначала вычисления проводились посредством линейных элементов, и на той же сетке результаты уточнялись на базисе квадратных элементов. В табл. 2 приведены значения λ_1^k и λ_2^k , полученные с помощью линейных и квадратных элементов на последовательности сеток. Из таблицы видно, что величина $\sigma(\lambda) = |\lambda^k - \lambda^l| / |\lambda^k|$ для различных случаев принимает значения $\sigma(\lambda_1^l) = 4,027$, $\sigma(\lambda_2^l) = 4,09$,

$\sigma(\lambda_1^k) = 15,72$, $\sigma(\lambda_2^k) = 14,97$. Верхний индекс l указывает, что результаты получены на базисе линейных элементов, а индекс k относится к квадратичным элементам. Из таблицы 2 видно, что сходимость результатов соответствует теоретической ($\sigma = 4$ и $\sigma = 16$), и поэтому они могут быть уточнены экстраполяцией по Ричардсону $1/18$. В таблице 3 показаны относительные погрешности $\delta_i^j = 1 - \lambda_i^j / \lambda_i^l$, а также относительная точность экстраполированных собственных значений по двум и трем сеткам. Видно, что правильное применение экстраполяции по Ричардсону на два-три порядка улучшает точность численных результатов.

Рассмотрим теперь результаты численного решения задачи (15)-(17). В табл. 4 показана сходимость метода при вычислении энергии связанных состояний E_{00} и E_{01} мезомолекулы $t\mu$ на базисе линейных элементов. Из таблицы видно, что при переходе ко второй сетке увеличилось общее число итераций. Это связано с тем, что по сравнению с первой

Таблица 1

Сходимость МИАП при решении задачи (19) по трем сеткам с использованием линейных и квадратичных лагранжевых элементов

$$\delta_i = 1 - \lambda_i^{m+1} / \lambda_i^m, \quad i=1,2, \quad m=1,2,3$$

| Линейные лагранжевы элементы | | | | | | |
|------------------------------|------------------------|------------|-------------------------|------------|--------------------------|------------|
| | Сетка $\omega_1, N=80$ | | Сетка $\omega_2, N=576$ | | Сетка $\omega_3, N=4352$ | |
| m | δ_1 | δ_2 | δ_1 | δ_2 | δ_1 | δ_2 |
| 2 | 3,1(-3) | 6,8(-3) | 2,5(-3) | 3,5(-3) | 6,4(-4) | 1,4(-3) |
| 3 | 1,1(-4) | 1,0(-3) | 1,5(-4) | 1,4(-4) | 4,9(-5) | 5,3(-5) |
| 4 | 9,1(-7) | 3,4(-5) | 1,1(-5) | 1,0(-5) | 5,4(-6) | 5,3(-6) |
| 5 | 1,0(-8) | 1,3(-6) | 3,0(-7) | 5,7(-7) | 3,8(-7) | 3,6(-7) |
| 6 | 1,1(-10) | 5,7(-8) | | | | |

| Квадратичные лагранжевы элементы | | | | | | |
|----------------------------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| m | δ_1 | δ_2 | δ_1 | δ_2 | δ_1 | δ_2 |
| 2 | 4,2(-8) | 8,1(-8) | 3,6(-9) | 5,9(-8) | 2,5(-8) | 1,7(-8) |

Таблица 2

Значения λ_1^k и λ_2^k , вычисленные на трех последовательных сетках

| Линейные элементы | | | | Квадратичные элементы | | |
|-------------------|-----|---------------|---------------|-----------------------|---------------|---------------|
| N | m | λ_1^k | λ_2^k | m | λ_1^k | λ_2^k |
| 80 | 6 | 4,9985403 | 15,3851823 | 2 | 4,9373295 | 14,8811763 |
| 576 | 5 | 4,9506769 | 14,9477577 | 2 | 4,93496390 | 14,8096230 |
| 4352 | 5 | 4,9387672 | 14,8401209 | 2 | 4,93481242 | 14,8047402 |

Таблица 3

Относительная погрешность $\delta_i^j = 1 - \lambda_i^j / \lambda_i^l$ при вычислении λ_i^j на трех сетках и при экстраполяции

| Сетка | Линейные элементы | | Квадратичные элементы | |
|--|-------------------|--------------|-----------------------|--------------|
| | δ_1^j | δ_2^j | δ_1^j | δ_2^j |
| ω_1 | 1,27(-2) | 3,9(-2) | 5,06(-4) | 5,18(-3) |
| ω_2 | 3,2(-3) | 9,6(-3) | 3,32(-5) | 3,5(-4) |
| ω_3 | 7,9(-4) | 2,4(-3) | 2,02(-6) | 2,2(-5) |
| Экстраполяция | | | | |
| $\omega_1 \rightarrow \omega_2$ | -1,6(-5) | -2,4(-3) | 8,09(-7) | 3,0(-5) |
| $\omega_2 \rightarrow \omega_3$ | -9,86(-7) | -1,1(-5) | 8,16(-8) | 5,04(-7) |
| $\omega_1 \rightarrow \omega_2 \rightarrow \omega_3$ | 1,8(-8) | -6,2(-8) | | |

сеткой ω_2 более точно аппроксимирует решение задачи (15)-(17) и учитывает практически все его особенности. При переходе к ω_3 происходит только уточнение решения, и число итераций сильно уменьшается. Кроме того, из табл. 4, равно как и из табл. 1, видно, что число итераций, необходимых для достижения заданной точности 10^{-6} , одинаково для первого и второго собственного значения.

Таблица 4

Сходимость метода при вычислении E_{00} и E_{01} для мезомолекулы $tt\mu$ при использовании линейных элементов, $\delta_i = \lambda_i^{\text{теор}} / \lambda_i^{\text{числ}} - 1, i=1,2$

| m | $\omega_1, N = 405$ | | $\omega_2, N = 2916$ | | $\omega_3, N = 22032$ | |
|---|---------------------|------------|----------------------|------------|-----------------------|------------|
| | δ_1 | δ_2 | δ_1 | δ_2 | δ_1 | δ_2 |
| 2 | 1,6(-5) | 1,0(-3) | 8,6(-4) | 1,4(-3) | 3,0(-5) | 6,7(-4) |
| 3 | 9,7(-5) | 4,6(-5) | 5,7(-5) | 1,8(-4) | 1,1(-6) | 2,6(-6) |
| 4 | 1,1(-6) | 1,0(-6) | 7,3(-6) | 4,0(-5) | 5,6(-6) | 2,3(-7) |
| 5 | 4,1(-6) | 6,6(-6) | 1,1(-6) | 1,4(-5) | | |
| 6 | | | 2,0(-7) | 5,0(-6) | | |
| 7 | | | 2,1(-8) | 1,6(-6) | | |
| 8 | | | 2,4(-9) | 3,7(-7) | | |

В табл. 5 приведены результаты расчетов в единицах ma при вычислении E_{00} и E_{01} для мезомолекул $dd\mu$ и $tt\mu$, полученные по трем сеткам. Через L_i обозначено число элементов по оси $X_i, i=1,2,3$. В первой части таблицы находятся значения E_{00} и E_{01} для $tt\mu$, вычисленные на основе линейных элементов, и значения, проэкстраполированные по последним двум и трем сеткам, во второй части приведены результаты расчетов для E_{00} и E_{01} на основе квадратичной аппроксимации и результаты экстраполяции по последним двум сеткам.

Обсудим более внимательно значения E_{00} и E_{01} из четвертой и восьмой строки таблицы. Результаты в четвертой строке получены при помощи экстраполяции, и их точность теоретически оценивается величиной $O(h^2)$, а значения в восьмой строке получены на квадратичных элементах, имеющих ту же точность. Сравнение чисел этих двух строк находится в полном соответствии с оценками h^2 . В таблице 6 показаны значения энергии связи ϵ_{00} и ϵ_{01} для мезомолекул $tt\mu$ и $dd\mu$ в электронвольтах и проведены сравнения с результатами работ /13,19,20/. Перевод в электронвольты производился по формуле $\epsilon(\text{эВ}) = 2R_y (E + 0,5) ma$, а для E использованы значения из последней строки табл. 5. Из табл. 6 видно, что полученные в данной работе значения ϵ_{00} и ϵ_{01} с точностью 10^{-2} эВ согласуются с известными расчетами. Наконец, в табл. 7 показана зависимость решения от величин X_1^{max} и X_2^{max} .

Таблица 5

Значения $-E_{00}$ и $-E_{01}$ для мезомолекул $tt\mu$ и $dd\mu$ в единицах ma

| Мезомолекула | L_1 | L_2 | L_3 | N | $-E_{00}$ | $-E_{01}$ |
|-----------------------|--|-------|-------|-------|-----------|-----------|
| Линейные элементы | 9 | 4 | 9 | 405 | 0,532137 | 0,470145 |
| | 18 | 8 | 18 | 2916 | 0,557046 | 0,502535 |
| | 36 | 16 | 36 | 22032 | 0,564405 | 0,512132 |
| $tt\mu$ | экстраполяция $\omega_2 \rightarrow \omega_3$ | | | | 0,566858 | 0,515331 |
| | экстраполяция $\omega_1 \rightarrow \omega_2 \rightarrow \omega_3$ | | | | 0,566960 | 0,515464 |
| Квадратичные элементы | 5 | 2 | 5 | 500 | 0,554893 | 0,496766 |
| | 9 | 4 | 9 | 2916 | 0,565773 | 0,513802 |
| | 18 | 8 | 18 | 22032 | 0,566828 | 0,515292 |
| $tt\mu$ | экстраполяция $\omega_1 \rightarrow \omega_3$ | | | | 0,566929 | 0,515437 |
| $dd\mu$ | 5 | 2 | 5 | 500 | 0,543815 | 0,476656 |
| | 9 | 4 | 9 | 2916 | 0,559413 | 0,504297 |
| | 18 | 8 | 18 | 22032 | 0,560878 | 0,506524 |
| | экстраполяция $\omega_2 \rightarrow \omega_3$ | | | | 0,561029 | 0,506719 |

Таблица 6

Значения энергии связи $-\epsilon_{00}$ и $-\epsilon_{01}$ в эВ для $tt\mu$ и $dd\mu$, полученные в работе в сравнении с результатами других работ

| Мезомолекула | Работа/13/ | Работа/19/ | Работа/20/ | Данная работа |
|--------------|------------|------------|------------|---------------|
| $tt\mu$ | 362,95 | 362,9 | 362,94 | 362,93 |
| | 83,87 | 83,78 | 83,67 | 83,71 |
| $dd\mu$ | 325,04 | 325,07 | 325,08 | 325,07 |
| | 35,80 | 35,9 | 35,84 | 35,79 |

Таблица 7

Зависимость значений E_{00} и E_{01} для $dd\mu$ от величин X_1^{max} и X_2^{max} при сетке с числом узлов 22032

| X_1^{max} | X_2^{max} | $-E_{00}$ | $-E_{01}$ |
|--------------------|--------------------|-----------|-----------|
| 10 | 10 | 0,560769 | 0,50505 |
| 20 | 20 | 0,560878 | 0,506524 |
| 25 | 25 | 0,560878 | 0,506525 |

Видно, что при $\chi_1^{\max} \geq 20$, $\chi_2^{\max} \geq 20$ наступает насыщение; все результаты в табл. 4,5,6 получены при $\chi_1^{\max} = \chi_2^{\max} = 25$. В работе использованы следующие константы: $M_d = 3670,481$, $M_z = 5496,918$, $M_p = 206,769$, $R_y = 13,6058$ эВ. Общее время для расчета энергии двух состояний каждой мезомолекулы с использованием двух видов элементов на ЭВМ ЕС-1060 составляет около 150 мин, а все вычисления велись с двойной точностью.

Заключение

В работе предложен метод численного решения частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений, полученной в результате разностной аппроксимации трехмерных спектральных задач математической физики. Показано, что при некоем специальном выборе альтернирующих подпространств метод является обобщением некоторых известных методов решения рассматриваемой задачи. Исходная задача сводится к последовательным вычислениям векторов и чисел Рунца в этих подпространствах, где решается частичная проблема для задач, порядок которых на много меньше порядка основной задачи.

Наиболее перспективным путем численного решения трехмерных спектральных задач нам представляется сведение этих задач к алгебраической проблеме на собственные значения (2) конечно-разностным или конечно-элементным методом. В этом случае точность результатов можно оценить при помощи общей теории соответствующих методов, что позволяет провести корректное уточнение результатов.

Отметим, что оценки (20) для вариационных постановок известны только для очень простого одномерного случая /16/. Метод итерации альтернирующих подпространств позволяет эффективно решать задачу (2) при достаточно больших размерностях матриц A и B .

Численные эксперименты показали, что скорость сходимости МИАП при его реализации на последовательности вложенных сеток существенно превосходит скорость сходимости методов типа обратной итерации.

Вычислены энергии связи ϵ_{α} и ϵ_{β} мезомолекул $dd\mu$ и $tt\mu$ с точностью 10^{-2} эВ.

Метод может быть применен к решению других задач квантовой механики, электродинамики, при решении спектральных задач реакторной физики.

Авторы особенно признательны Л.И.Пономареву, И.В.Цузынину и С.С.Герштейну за инициирование этих исследований и постоянный интерес, Д.А.Кузнецову за полезные обсуждения и С.В.Клименко за поддержку на протяжении всей работы.

Литература

1. Уилкинсон Дж.Х. Алгебраическая проблема собственных значений. М., "Наука", 1970.
2. Парлетт Б. Симметричная проблема собственных значений. М., "Мир", 1983.
3. Bathe K.L.- J., Wilson Ed. Numerical Methods in Finite Elements Analysis. Prentice-Hall, Clif. N.J., Englewood, 1976.
4. Bathe K.L.- J. Finite Element Procedures in Engineering Analysis, Prentice-Hall, Clif. N.S., Englewood, 1982.
5. Schwarz H.R. Numer. Math., 23, N 2, 1974, p. B5.
6. Ruhe A. Int.Scr.Numer.Nath., 1974, v.24, Basel-Stuttgart, 1974, p.97.
7. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. J.Comput.Phys., 1976, 22, 1, p.125.
8. Crandall D. Proc. Roy. Soc., 1951, A207, N1090, p. 416.
9. Kikuta T. Progr.Theoret.Phys., 1953, 10, N6, p.653.
10. Кузнецов Д.А. В книге: Вычислительные процессы и системы. М., "Наука", 1983, стр.267.
11. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М., "Наука", 1978.
12. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., "Наука", 1976.
13. Ваницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 13, 6, 1982, стр.1336.
14. Kaschiev M., Vinitaky S.I. E4-85-467, JINR, 1985, Dubna.
15. Стрэнг Г., Фико Дж. Теория метода конечных элементов. М., "Наука", 1976.
16. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. Л., Гостехтеориздат, 1952.
17. Kaschiev M.S. et al. Phys. Rev. A., v.22, 1980, p. 557.
18. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М., "Наука", 1977.
19. Фролов А.М., Эфрос В.Д. Письма в ЖЭТФ, 39, вып.9, 1984, с.449.
20. Bhatia A.K., Drachman R.J. Phys. Rev. A, vol. 30, N4, 1984, p. 2138.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 октября 1985 года.