

3/ix - 79

3397/2-79



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

© 179
K-289

P5 - 12382

М.Касчиев, В.Касчиева

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ ОДНОЙ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
ВТОРОГО ПОРЯДКА

1979

P5 - 12382

М.Касчиев, В.Касчиева

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ ОДНОЙ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
ВТОРОГО ПОРЯДКА

Институт математики
и механики
Уральского государственного
университета
Свердловск
Библиотека

Касчиев М., Касчиева В.

P5 - 12382

Численное решение задачи Штурма-Лиувилля для одной системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка

В работе рассмотрен численный метод вычисления собственных значений и собственных функций системы дифференциальных уравнений второго порядка. Показано, что решение существует при определенных ограничениях на коэффициенты уравнений. Построенные разностные схемы использованы для вычисления уровней энергий и волновых функций мезомолекул водорода $pp\mu$, $dd\mu$ и $tt\mu$ в адиабатическом представлении задачи трех тел /двухуровневое приближение/. Численный метод определения уровней энергий вблизи непрерывного спектра устойчив.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Kaschiev M., Kaschieva V.

P5 - 12382

Numerical Solution of the Sturm-Liouville Problem for a System of Ordinary Differential Equations of the Second Order

A numerical method for calculating the eigenvalues and eigenfunctions of a system of differential equations of the second order is obtained. It is shown that the solution exists under the conditions that there are some constraints for equation coefficients. The difference schemes constructed are used for calculating the binding energies and corresponding wave functions of $pp\mu$, $dd\mu$ and $tt\mu$ mesic molecules in the adiabatic representation of the three body problem (a two-level approximation). The numerical method of calculating binding energies near the continuous spectrum is stable.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

© 1979 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

Введение

В работах /1,2/ построен эффективный метод численного решения задачи Штурма-Лиувилля для одного уравнения.

В настоящей работе рассматривается численное решение задачи Штурма-Лиувилля для системы:

$$L\vec{u} = -E_n \vec{u}'' + V\vec{u} + (Q\vec{u})' + Q\vec{u}' = E_n \vec{u}, \quad (1)$$

$$\vec{u}(0) = \vec{u}(R) = 0. \quad (2)$$

Здесь $\vec{u}(x) = (u_1(x), \dots, u_n(x))$, E_n - единичная матрица n -го порядка, $V(x)$ и $Q(x)$ - квадратичные матрицы порядка n . Показано, что задача (1)-(2), при некоторых предположениях относительно матриц $V(x)$ и $Q(x)$, имеет решение, и построена разностная схема численного решения.

Постановка задачи

Рассмотрим пространство $\bar{L}_2 [0, R]$ вектор-функций $\vec{u}(x) = (u_1(x), \dots, u_n(x))$, таких, что $\sum_{i=1}^n \int_0^R u_i^2(x) dx < \infty$. Скалярное произведение функций $\vec{u}, \vec{v} \in \bar{L}_2 [0, R]$ определяется следующим образом:

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n \int_0^R u_i(x) v_i(x) dx. \quad (3)$$

Обозначим через $A \subset \bar{L}_2 [0, R]$ множество

$$A = \{ \vec{u}(x); u_i(x) \in C^2 [0, R], u_i(0) = u_i(R) = 0, i=1, 2, \dots, n \}.$$

Оператор L в левой части уравнения (1) определен на множестве A . Будем предполагать, что элементы матриц $V(x) = (V_{ij}(x))$,

$Q(x) = (Q_{ij}(x))$ удовлетворяют условиям

$$V_{ij}(x) = v_{ji}(x), \quad v_{ij}(x) \in C[0, R], \quad (4)$$

$$Q_{ij}(x) = -Q_{ji}(x), \quad Q_{ij}(x) \in C^1[0, R], \quad i, j = 1, 2, \dots, n, \quad (5)$$

$$\min_{i,j} \left\{ \min_x [v_{ij}(x), Q_{ij}(x)] \right\} \geq \delta = \text{const.} \quad (6)$$

Пусть выполнены условия (4)–(6). Докажем следующие теоремы.

Теорема 1. Оператор L – симметричен.

Пусть $\vec{u}, \vec{v} \in A$. Тогда

$$(L\vec{u}, \vec{v}) = - \sum_{i=1}^n \int_0^R u_i'' v_i dx + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R v_{ij} u_i' v_j' dx +$$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R [(Q_{ij} u_i)' v_j + Q_{ij} u_i' v_j] dx = - \sum_{j=1}^n \int_0^R u_j'' v_j dx +$$

$$\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \int_0^R v_{ij} u_i' v_j' dx + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R [(Q_{ij} v_j)' u_i + Q_{ij} v_j' u_i] dx = (L\vec{u}, \vec{v}).$$

Здесь использовались условия (4) и (5). Так как множество A плотно в $\bar{L}_2[0, R]$, теорема доказана.

Теорема 2. Оператор L полуограничен снизу.

Пусть $\vec{u} \in A$. Тогда

$$(L\vec{u}, \vec{u}) = \sum_{i=1}^n \int_0^R u_i'^2 dx + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R v_{ij} u_i u_j dx + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R Q_{ij} (u_i u_j' - u_i' u_j) dx \geq$$

$$\sum_{i=1}^n \int_0^R u_i'^2 dx + \delta \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R u_i u_j dx + 2\delta \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R (u_i u_j' - u_i' u_j) dx.$$

Рассмотрим два случая.

1) $\delta > 0$.

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_0^R u_i u_j dx = \int_0^R (\sum_{i=1}^n u_i)^2 dx \geq 0,$$

$$\int_0^R (u_i u_j' - u_i' u_j) dx = -2 \int_0^R u_i' u_j dx \geq -2(\epsilon_i \int_0^R u_i'^2 dx + \frac{1}{4\epsilon_i} \int_0^R u_j^2 dx).$$

При доказательстве использовано ϵ -неравенство /2/.
 Выберем $\epsilon_i = \frac{1}{8\delta}$ и ко всем членам, содержащим $(1-4\delta\epsilon_i) \int_0^R u_i'^2 dx$, применим неравенство Фридрихса /2/: $\int_0^R u_i'^2(x) dx \geq \frac{4}{R\pi} \int_0^R u_i^2(x) dx$, где $u(x)$ – любая дифференцируемая функция, удовлетворяющая $u(0) = u(R) = 0$. В результате получим

$$(L\vec{u}, \vec{u}) \geq m(\delta) (\vec{u}, \vec{u}).$$

2) $\delta < 0$. Используем снова ϵ -неравенство

$$\delta \int_0^R (u_i' u_j - u_i u_j') dx = 2\delta \int_0^R u_i u_j' dx \geq 2\delta (\epsilon_j \int_0^R u_j'^2 dx + \frac{1}{4\epsilon_j} \int_0^R u_i^2 dx),$$

$$\delta \int_0^R u_i u_j dx \geq \delta (\epsilon \int_0^R u_i^2 dx + \frac{1}{4\epsilon} \int_0^R u_j^2 dx).$$

Пусть $\epsilon_j = \frac{1}{8|\delta|}$ и $\epsilon = 1$. Из неравенства Фридрихса следует, что $(L\vec{u}, \vec{u}) \geq m(\delta) (\vec{u}, \vec{u})$.

Случай $\delta = 0$ очевиден.

Замечание. Условие (6), которому должны удовлетворять функции $v_{ij}(x)$, можно ослабить: потребовать, чтобы

$$\min_x \left[\min_i \sum_{j=1}^n v_{ij}(x) \right] \geq \delta.$$

В этом случае теорема 2 опять верна и доказательство проводится так же, как в /4/.

Согласно принципу минимума /5/ задача (I)–(2) эквивалентна нахождению минимума функционала Ралей–Ритца $R(\vec{v})$, где

$$R(\vec{v}) = (L\vec{v}, \vec{v}) / (\vec{v}, \vec{v}).$$

Из теоремы 2 следует, что $\min R(\vec{v})$ существует и функция \vec{u}_1 , для которой достигается этот минимум, является первой собственной функцией задачи (I)–(2), а значение $R(\vec{u}_1)$ – первым собственным значением. Следующие собственные функции реализуют минимум $R(\vec{v})$ на множестве, ортогональном к первым собственным функциям.

Разностная схема

На отрезке $[0, R]$ построим равномерную сетку:

$$\bar{\omega} = \{x_i = ih, i=0, 1, \dots, N, h=R/N\}.$$

Пусть $r(x)$ - сеточная функция на $\bar{\omega}$. Введем обозначения /2/:

$$r_{\bar{x}} \equiv (r(x) - r(x-h))/h, \quad r_x \equiv (r(x+h) - r(x))/h,$$

$$r_{\bar{x}} \equiv (r(x+h) - r(x-h))/2h, \quad x \pm h \in \bar{\omega}.$$

Следуя работе /2/, рассмотрим разностный оператор $L_h^{\sigma_1, \sigma_2}$, аппроксимирующий оператор L . Пусть $\vec{y}(x) = (y_1(x), \dots, y_n(x))$ - сеточная вектор-функция, определенная на $\bar{\omega}$ и $\vec{y}(0) = \vec{y}(R) = 0$, $0 < \sigma_1, \sigma_2 < 1$,

$$L_h^{\sigma_1, \sigma_2} \vec{y} \equiv -E_n \vec{y}_{\bar{x}\bar{x}} + V \vec{y} + \sigma_1 (Q \vec{y})_{\bar{x}} + (1 - \sigma_1) (Q \vec{y})_{\bar{x}} + \sigma_2 Q \vec{y}_x + (1 - \sigma_2) Q \vec{y}_x.$$

Потребуем, чтобы оператор $L_h^{\sigma_1, \sigma_2}$ был симметричным и чтобы погрешность аппроксимации была величиной $O(h^2)$. Тогда получаем, что $\sigma_1 = \sigma_2 = 0,5$ и

$$L_h \vec{y} \equiv L_h^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \vec{y} \equiv -E_n \vec{y}_{\bar{x}\bar{x}} + V \vec{y} + (Q \vec{y})_{\bar{x}} + Q \vec{y}_x. \quad (7)$$

Задаче (I)-(2) сопоставим разностную задачу

$$L_h \vec{y} = E^h \vec{y}, \quad \vec{y}(0) \equiv \vec{y}^0 = 0, \quad \vec{y}(R) \equiv \vec{y}^N = 0. \quad (8)$$

Схему (8) преобразуем к виду

$$KY = E^h MY. \quad (9)$$

Здесь Y $n(N-1)$ -мерный вектор с компонентами $Y_k = y_i(x_j)$, $k = (j-1)N + i, j=1, 2, \dots, N-1, i=1, 2, \dots, n$, а K - квадратная матрица порядка $n(N-1)$. Она симметрична и имеет ленточную структуру с максимальной длиной "полуленты" $2n$ (ширина ленты по строке $4n-1$). M - единичная матрица того же порядка.

Рассмотрим теперь случай неравномерной сетки

$$\bar{\omega} = \{0 = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_N = R\}. \quad \text{Введем обозначения /2/:$$

$$h_i^- = x_i - x_{i-1}, \quad h_i^+ = x_{i+1} - x_i, \quad \bar{h}_i = 0.5(h_i^- + h_i^+),$$

$$i=1, 2, \dots, N-1.$$

Если r - сеточная функция на $\bar{\omega}$, то

$$r_{\bar{x}} \equiv (r(x) - r(x-h^-))/h^-, \quad r_x \equiv (r(x+h^+) - r(x))/h^+,$$

$$r_{\bar{x}} \equiv (r(x+h^+) - r(x-h^-))/2h.$$

По аналогии с (7) рассмотрим разностный оператор

$$\hat{L}_h \vec{y} \equiv -E_n \vec{y}_{\bar{x}\bar{x}} + V \vec{y} + (Q \vec{y})_{\bar{x}} + Q \vec{y}_x$$

и разностную задачу на собственные значения

$$\hat{L}_h \vec{y} = E^h \vec{y}, \quad \vec{y}(0) \equiv \vec{y}^0 = 0, \quad \vec{y}(R) \equiv \vec{y}^N = 0. \quad (10)$$

Схему (10) запишем в виде

$$\bar{K}Y = E^h \bar{M}Y. \quad (11)$$

K и \bar{K} - матрицы одинаковой структуры. Матрица \bar{M} - диагональная с элементами $m_{kk} = \bar{h}_j$, $k = (j-1)N + i, j=1, 2, \dots, N-1, i=1, 2, \dots, n$. В обоих случаях мы приходим к решению задачи на собственные значения:

$$AX = \lambda BX. \quad (12)$$

Матрица A - симметрична и имеет ленточную структуру, а B - единична или диагональна. Будем предполагать, что обе матрицы положительны. Для одновременного нахождения первых p собственных значений и векторов (12) применим метод обратной итерации в подпространстве /6/ (Subspace Inverse Iteration Method-SIIM). Задача (12) по SIIM решается следующим способом. Пусть X_k - матрица ($N \times p$). Находим матрицу \bar{X}_{k+1} ($N \times p$) по формуле

$$\bar{A} \bar{X}_{k+1} = B X_k.$$

Получаем квадратные матрицы A_{k+1} и B_{k+1} следующим способом:

$$A_{k+1} = \bar{X}_{k+1} A \bar{X}_{k+1}, \quad B_{k+1} = \bar{X}_{k+1}^T B \bar{X}_{k+1}.$$

Решаем полную проблему на собственные значения:

$$A_{k+1} C_{k+1} = B_{k+1} C_{k+1} \Lambda_{k+1}^T. \quad (13)$$

Пусть C_{k+1} ($p \times p$) и $\Lambda_{k+1} = (\Lambda_{k+1}^1, \dots, \Lambda_{k+1}^p)$ - собственные векторы и собственные значения задачи (13). Находим $k+1$ при-

ближение к первым p собственным векторам задачи (I2) по формуле

$$X_{k+1} = \bar{X}_{k+1} C_{k+1}.$$

Если через x обозначим матрицу из первых p собственных векторов задачи (I2), а через $\Lambda = (\Lambda^1, \dots, \Lambda^p)$ - соответствующие собственные значения, то

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X_{k+1} = X, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \Lambda_{k+1} = \Lambda.$$

Сходимости нет только в случае, когда $X_0^T B X_0$ является нулевой матрицей.

Если матрицы K и \bar{K} в (8) и (I0) не являются положительно определенными, обе схемы приводим к виду

$$A Y = \Lambda B Y, \quad (I4)$$

где $A = K + \alpha M$ для схемы (8) и $A = \bar{K} + \alpha \bar{M}$ для схемы (I0), $B = M$ или $B = \bar{M}$. Число $\alpha > 0$ выбирается так, чтобы матрица A была положительной. Собственные векторы задачи (I4) и соответственно (8) и (I0) одинаковы, а $E_i^h = \Lambda_i - \alpha$, $i=1, 2, \dots, p$ для обеих схем.

Численные результаты

Рассмотренные алгоритмы использовались для вычисления уровней энергий и волновых функций мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел. Эта задача решалась в работе /7/ с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. Разработанная нами вычислительная схема позволяет решить эту и другие задачи физики независимым методом. В таблице приведены полученные нами энергии двухуровневого приближения ($n=2$) для мезомолекул $tt\mu$, $dd\mu$, $pp\mu$ с уточненными эффективными потенциалами, а также соответствующие результаты, полученные в /7/. Численный метод определения уровней энергий вблизи непрерывного спектра устойчив. Начальное приближение во всех случаях выбиралось по методу, предложенному в /6/.

В заключение авторы благодарят И.В.Пузынина, Л.И.Пономарева, а также С.И.Виницкого и Л.Н.Сомова за ценные советы и внимательное отношение к работе.

Таблица

$-E_{Jv}(\text{эВ})$ для мезомолекул $pp\mu$, $dd\mu$, $tt\mu$

Мезомолекула	J	v	Результаты, полученные в /6/	Схема (8) $h=0,1, NN=1200$		Схема (I0) $NN=360$		Схема (I0) $NN=260$		R=60
ppμ	0	0	248	247,3083	247,3082	247,3079				
	1	0	I01	I01,4784	I01,4784	I01,4766				
	0	0	323	322,7257	322,7257	322,7257				
ddμ	0	I	329	33,2164	33,2168	33,2261				
	1	0	224,0	224,1166	224,1166	224,1165				
	1	I	0,7	0,65972	0,65970	0,65999				
	2	0	83,5	83,5872	83,5868	83,5861				
	0	0	361	361,6164	361,6164	361,6164				
ttμ	0	I	81,4	81,7717	81,7735	81,7741				
	1	0	288	287,6978	287,6978	287,6978				
	1	I	43,1	43,3350	43,3425	43,3438				
	2	0	I71	I70,9861	I70,9862	I70,9862				
	3	0	46,7	46,8283	46,8283	46,8278				

NN - размерность матрицы K или \bar{K} . Максимальная длина "полуплутты" равна 4.

Литература

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. ЖВМ и МФ, т. I, № 5, 1961, с.784-805.
2. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М., "Наука", 1971.
3. Вулих Б.З. Введение в функциональный анализ. М., "Наука", 1967.
4. Ляшенко Б.Н. Вычислительная и прикладная математика, т. 23. Изд-во Киевского ун-та, 1974, с.71-78.
5. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики, т. I, Гостехиздат, 1953.
6. Klaus-Jurgen Bathe, Ed. Wilson, Numerical Methods in Finite Element Analysis, Prentice-Hall, Englewood, Clif. N.J., 1976.
7. Ponomarev L.I., Puzinin I.V., Puzinina T.I. J.Compt.Phys., 1973, vol. 13, No 1(1-14).

Рукопись поступила в издательский отдел
13 апреля 1979 года.