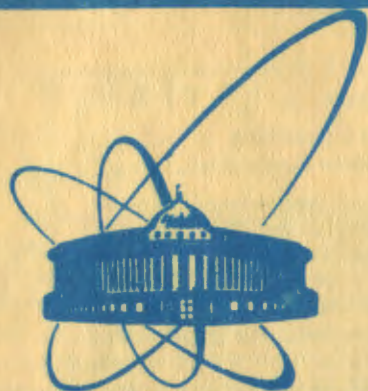


80-751



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

834/2-81

P5-80-751

Л.Александров, М.Дренска, Д.Караджов

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА  
СТЕРЖНЕВЫХ СПЛАЙНОВ  
К РЕШЕНИЮ РАДИАЛЬНОГО  
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1980

## ВВЕДЕНИЕ

Метод стержневых сплайнов<sup>/1/</sup> был предложен для решения задач на собственные значения линейных дифференциальных уравнений высокого порядка, к которым не применимы конечно-разностные методы. Однако он является эффективным вычислительным средством и в применении к дифференциальным уравнениям низкого порядка, не уступая конечно-разностным<sup>/2-4/</sup> и иным<sup>/5/</sup> методам.

В настоящей работе рассматривается решение радиального уравнения Шредингера для связанных состояний. Приводится численное сравнение метода стержневых сплайнов с методами из работ<sup>/4,5/</sup> на примере потенциала Саксона-Вудса /оптического потенциала/. Представлен также пример решения задачи с кулоновским потенциалом.

### §1. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

В методе стержневых сплайнов радиальное уравнение Шредингера

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2\bar{m}[z - v(x)] \right\} y(x, z) = 0, \quad /1.1/$$

$$\int_{x_H}^{x_K} [w(x)y(x, z)]^2 dx = 1. \quad /1.2/$$

рассматривается на некотором конечном интервале  $X = [x_H, x_K]$ , где  $x_H$  выбирается достаточно близким к нулю, а  $x_K$  - достаточно большим числом, и на некотором интервале дискретных энергий  $Z = [z_H, z_K]$ , выбор которого зависит от поведения потенциала  $v(x)$  при  $x \rightarrow \infty$ .

В уравнении /1.1/ используются следующие обозначения:  $\ell$  - квантовое число орбитального момента ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ );  $\bar{m}$  - приведенная масса, которая в системе единиц  $\hbar = 1$  имеет вид  $\bar{m} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ . В уравнении /1.2/  $w(x) \in C(0, \infty)$  - заданная весовая функция.

Применение метода стержневых сплайнов связано с выбором стержневой функции<sup>/1/</sup>. Для этой цели будем рассматривать по-

тенциалы  $v(x) \in C(X_0)$ ,  $X_0 = (0, \infty)$ , поведение которых на концах интервала  $X_0$  определяется как

$$v(x) \sim \frac{v_{00}}{x^r} \quad (v_{00} = \text{const} < 0, r < 2) \quad \text{при} \quad x \rightarrow 0 \quad /1.3/$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{и} \\ v(x) \rightarrow 0 \\ \text{или} \\ v(x) \sim v_0 x^t \quad (v_0, t = \text{const} > 0) \end{array} \right\} \quad \text{при} \quad x \rightarrow \infty. \quad /1.4a/$$

Введенный класс функций  $v(x)$  определяет класс радиальных функций  $y(x, z) \in C^{2,1}(X_0 \times Z)$ , характеризуемый наличием асимптотик:

$$y(x, z) \sim \theta_1 x^{\ell+1} \quad (\theta_1 = \text{const}) \quad \text{при} \quad 1/x \rightarrow \infty, \quad /1.5/$$

$$y(x, z) \sim \theta_2 \exp(-k(z)x^q) \quad (\theta_2 = \text{const}) \quad \text{при} \quad x \rightarrow \infty, \quad /1.6/$$

где в случае /1.4a/

$$q=1; \quad k(z) = \sqrt{-2\bar{m}z}; \quad z \in Z \subset (-\infty, 0],$$

а в случае /1.4б/

$$q = (t+2)/2; \quad k(z) = \sqrt{2\bar{m}v_0}/q; \quad z \in Z \subset [0, \infty).$$

Соотношения /1.5/, /1.6/ показывают, что в качестве стержня решения можно использовать функцию

$$p_1(x, z) = x^{\ell+1} \exp(-k(z)x^q).$$

При помощи тождества

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 2\bar{m}[z-v(x)] \right\} (x^{\ell+1} y(x, z)) = \\ & = x^{\ell+1} \left\{ \frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{\ell+1}{x} \frac{d}{dx} + 2\bar{m}[z-v(x)] \right\} y(x, z) \end{aligned}$$

осуществляется переход к решению эквивалентного уравнения Шредингера

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{\ell+1}{x} \frac{d}{dx} + 2\bar{m}[z-v(x)] \right\} y(x, z) = 0 \quad (x \in X, z \in Z) \quad /1.1'/$$

с более простым стержнем:

$$p_2(x, z) = \exp(-k(z)x^q). \quad /1.7/$$

Основные величины метода стержневых сплайнов<sup>/1/</sup> в случае задачи /1.1'/, /1.2'/, /1.7/ принимают значения:

$$h_j^{(\mu)} = u_j x_j^{3-\mu} p_j + D_j^{(\mu)}, \quad \mu = 1, 2, 3,$$

$$d_{1j} = qk(z)x_j^{q-2} \{qk(z)x_j^q - [2(\ell+1)+q-1]\} e^{-k(z)x_j^q},$$

$$d_{2j} = -2qk(z)x_j^{q-1} e^{-k(z)x_j^q}, \quad d_{3j} = 0,$$

$$D_j^{(\mu)} = (3-\mu) \sum_{\nu=\mu}^2 a_{3-\nu, j} x_j^{\nu-\mu} p_j + \sum_{\nu=1}^{4-\mu} \frac{d_{\nu j}}{(\nu-1)!} \left. \frac{d^{\nu-1}(x^2)}{dx^{\nu-1}} \right|_{x=x_j},$$

$$p_j = p_2(x_j, z), \quad u_j = 2m[z - v(x_j)], \quad a_{1j} = 2 \frac{\ell+1}{x_j}, \quad a_{2j} = 1,$$

где N - число узлов сетки  $\{\bar{x}_j\}$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  параболического сплайна /1/.

В данном случае в качестве весовой функции в уравнении /1.2/ используется функция  $w(x) = x^{\ell+1}$ .

Пусть пары  $(\bar{z}, \bar{y}(x, \bar{z}))$ ,  $(z, y(x, z))$  обозначают соответственно точное и приближенное /находимое методом стержневых сплайнов/ решения задачи /1.1'/, /1.2'/, а пара  $(\bar{x}, \bar{y}(x, \bar{x}))$  - точное решение задачи /1.1'/, /1.2'/, рассматриваемой на полуоси  $X_0$  ( $\bar{z}, \bar{x}, z \in Z$ ). Пусть также выполнены условия теоремы 2 из работы /1/. Тогда, как и в случае решения уравнений бесконечного порядка /см. /1/, §2/, справедливы оценки:

$$|\bar{z} - z| \leq M_1 M_3 h^2 + |\bar{z} - \bar{z}|, \quad /1.8/$$

$$\max_{X_0} |s_2(x) e^{-k(\bar{z})x^q} - \bar{\phi}(x) e^{-k(\bar{z})x^q}| \leq M_1 (M_2 + M_3 M_4) h^2 + /1.9/$$

$$+ Q(h^4) + \max_x |(\bar{\phi}(x) - \bar{\phi}(x)) e^{-(k(\bar{z}) - k(\bar{z}))x^q}| +$$

$$+ \sup_{(0, x_H]} |\bar{\phi}(x) (e^{-k(\bar{z})x^q} - e^{-k(\bar{z})x^q})| +$$

$$+ \sup_{[x_k, \infty)} |\bar{\phi}(x) (e^{-k(\bar{z})x^q} - e^{-k(\bar{z})x^q})|,$$

где  $h = (x_k - x_H) / N$  - шаг сетки параболического сплайна,

$$M_1 = 2,5 \max_x |\bar{\phi}''(x)|, \quad M_2 = \max_x |p_2(x, \bar{z})|,$$

$$M_3 = \frac{\int_{x_H}^{x_k} \bar{\phi}(x) [p_2(x, \bar{z}) w(x)]^2 dx}{\int_{x_H}^{x_k} p_2'(x, \bar{z}) p_2(x, \bar{z}) [w(x) \bar{\phi}(x)]^2 dx}, \quad /1.10/$$

$$M_4 = \max_x |s_2(x) p_2'(x, \bar{z})|.$$

При выполнении пределов  $\lim_{\substack{x_H \rightarrow 0 \\ x_k \rightarrow \infty}} \bar{z} = z, \quad \lim_{\substack{x_H \rightarrow 0 \\ x_k \rightarrow \infty}} \max_x |\bar{\phi}(x) - \phi(x)| = 0$

следует, что второе слагаемое в правой части оценки /1.8/ и последние три слагаемые в правой части оценки /1.9/ можно сделать сколь угодно малыми величинами за счет достаточно малых значений  $x_H$  и  $h$  и достаточно большого значения  $x_k$ .

## §2. ЧИСЛОВОЕ СРАВНЕНИЕ МЕТОДА СТЕРЖНЕВЫХ СПЛАЙНОВ С ДРУГИМИ МЕТОДАМИ

Метод стержневых сплайнов реализуется при помощи подпрограммы SPSOL\* в варианте построения базисного сплайна /1/. Вычисления проводились на ЭВМ IBM-370/145 в режиме с двойной точностью.

Решались следующие две задачи:

### A. Нахождение связанных состояний в случае оптического потенциала /5/:

$$v(x) = \frac{v_1}{1+T} \left[ 1 - \frac{T}{v_3(1+T)} \right], \quad /2.1/$$

где

$$T = \exp((x - v_2) / v_3),$$

$$v_1 = -50, \quad v_2 = 7, \quad v_3 = 0,6.$$

Требуется найти связанные состояния, соответствующие значению  $\ell = 0$  при  $\bar{m} = 1/2$  ( $m_1 = m_2 = m = \bar{h} = 1$ ).

\* Полное описание алгоритма программы SPSOL можно найти в работе /7/.

Таблица 1

$l_x$	$\bar{x}$	$\tilde{x}^{(1)}$	$\tilde{x}^{(2)}$	$x_k$	$N$	$\tilde{x}^{(3)}(h_1)$	$(\Delta \tilde{x}^{(3)})_{\text{н.ч.ж.}}$
0	-49,457 788 728	-49,457 788 728	-49,461	6,5	I0000	-49,457 697 822	0,0000252
I	-48,148 430 420	-48,148 430 419	-48,158	6,5	I0000	-48,148 354 976	0,0000209
2	-46,290 753 954	-46,290 753 955	-46,310	7,2	II086	-46,290 696 520	0,0000159
3	-43,968 318 431	x)	-43,998	7,2	II086	-43,968 281 176	0,0000103
4	-41,232 607 772	x)	-41,274	7,2	II086	-41,232 591 580	0,0000045
5	-38,122 785 096	x)	-38,178	7,2	II086	-38,122 789 293	0,0000012
6	-34,672 313 205	-34,672 313 206	-34,743	8,0	I2268	-34,672 335 569	0,0000062
7	-30,912 247 488	-30,912 247 489	-30,998	8,0	I2268	-30,912 284 284	0,0000102
8	-26,873 448 915	-26,873 448 917	-26,976	8,0	I2268	-26,873 495 043	0,0000128
9	-22,588 602 257	x)	-22,708	8,5	I3110	-22,588 651 438	0,0000137
10	-18,094 688 282	x)	-18,231	8,5	I3110	-18,094 733 390	0,0000125
II	-13,436 869 040	-13,436 869 039	-13,590	8,5	I3110	-13,436 902 606	0,0000093
I2	- 8,676 081 6704	- 8,676 081 6704	-8,884	9,4	I4512	- 8,676 096 775	0,0000042
I3	- 3,908 232 4808	- 3,908 232 4799	-4,086	9,4	I2512	- 3,908 246 487	0,0000051

x/ В этих случаях данные о приближенных энергиях  $\tilde{z}^{(1)}$  в работе /5/ не приводятся.

Как известно <sup>/6/</sup>, при этих условиях задача /1.1'/, /1.2/, /1.7/ имеет 14 радиальных решений ( $\ell_x = 0, 1, 2, \dots, 13$ ), и они известны в аналитической форме.

Программа SPSQL использовалась при  $x_H = 10^{-6}$ ;  $h_1 = 0,00065$ ;  $h_2 = 0,00043$  /  $h_1$  - основной шаг,  $h_2$  - шаг, используемый при получении "нижней оценки энергии"/;  $C1 = 0,005$ .

Отметим, что при заданных  $h_1$  и  $C1$  величины  $x_k$  и  $N$  вычисляются самой программой таким образом, чтобы шаг  $h_1$  оставался постоянным и чтобы выполнялось неравенство

$$|w'(x_k) \tilde{y}(x_k, \tilde{z}) + w(x_k) \tilde{y}'_x(x_k, \tilde{z})| \leq C1.$$

В табл.1 представлены следующие величины: точные значения энергии  $\tilde{z}^{(5,6)}$ ; приближенные значения  $\tilde{z}^{(1)}$ , найденные по пертурбационному методу <sup>/5/</sup> при  $h = 0,004$ ,  $x_k = 24,2$ ; приближенные энергии  $\tilde{z}^{(2)}$ , полученные на основе конечно-разностного метода <sup>/4/</sup> при  $h = 0,03$ ; приближенные энергии  $\tilde{z}^{(3)}$ , вычисленные по методу стержневых сплайнов при  $h_1 = 0,00065$ , а также используемые программой SPSQL значения  $x_k$  и  $N$ . В табл.1 приведена также нижняя оценка  $(\Delta z^{(3)})_{\text{ниж}}$ , которая вычисляется по формуле

$$(\Delta z^{(3)})_{\text{ниж}} = \frac{1}{2} |\tilde{z}^{(3)}(h_1) - \tilde{z}^{(3)}(h_2)|. \quad /2.2/$$

Очевидно,

$$(\Delta z^{(3)})_{\text{ниж}} \leq |\tilde{z}^{(3)}(h_1) - \tilde{z}|.$$

Коэффициенты  $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ , при помощи которых по формулам /1.4/, /1.8/, /1.11/, /1.15/, /1.17/ и /1.19/ вычисляются приближенные волновые функции  $\tilde{y}^{(3)}(x, \tilde{z}^{(3)})$ , приведены в табл.2.

## Б. Нахождение связанных состояний в случае потенциала Кулона

$$v(x) = -v_0/x, \quad v_0 = 0,7 \quad /2.3/$$

при  $\ell = 0$ ;  $\tilde{m} = 1/2$  ( $m_1 = m_2 = m = \tilde{h} = 1$ ).

Потенциал /2.3/ не ограничен на левом конце полуоси  $X_0$ . Решение уравнения Шредингера с таким потенциалом по пертурбационному методу принципиально невозможно, в равной степени это относится к любому потенциалу с неограниченной вариацией,

Таблица 2

$l_x$	$\alpha_1$	$\beta_1$	$\gamma_1$
0	11,882 651 51	3,381 397 382	0,480 816 146 3
1	19,853 882 29	5,779 754 796	0,832 949 169 4
2	25,630 970 61	7,719 521 811	1,134 601 602
3	29,615 914 70	9,336 398 640	1,408 022 327
4	31,898 559 14	10,667 884 69	1,661 337 814
5	32,495 071 02	11,721 318 79	1,898 384 405
6	31,405 644 87	12,489 588 77	2,121 078 143
7	28,636 617 21	12,955 692 35	2,330 210 855
8	24,213 277 97	13,093 226 24	2,525 717 674
9	18,191 328 20	12,864 099 97	2,706 665 062
10	10,671 999 00	12,212 445 40	2,870 958 012
11	1,827 937 51	11,050 160 72	3,014 527 920
12	-8,041 567 93	9,216 788 04	3,129 086 833
13	-13,663 217 14	7,044 526 79	3,290 166 413

включая и потенциалы, растущие на бесконечности. В случае потенциала /2.3/ программа SP50L применялась при  $x_{11} = 10^{-8}$ ;  $h_1 = 0,025$ ;  $h_2 = 0,017$ ;  $C1=0,001$ .

В табл.3 приведены точные энергии  $\bar{z}_l^{(3)}$  ( $l = 0,1,2,3$ ); найденные значения приближенных энергий  $\bar{z}_l^{(3)}$  ( $l = 0,1,2,3$ ) и величин  $x_k$  и  $N$ ; нижняя оценка энергий  $(\Delta z^{(3)}(h_1))_{\text{ниж}}$ , вычисленная по формуле /2.2/; верхняя оценка  $(\Delta z^{(3)}(h_2))_{\text{верх}}$ , которая получена из неравенства /1.8/ при  $\bar{z} - \underline{z} = 0$  и в которой при вычислении постоянных  $M_1$  и  $M_3$  вместо точного значения функции  $\bar{\phi}(x)$  использовалось значение найденного параболического сплайна  $s_2(x)$ . В этом случае  $M_2 = 1$ . В табл.4 приведены значения коэффициентов  $\alpha_1$ ,  $\beta_1$ ,  $\gamma_1$ , при помощи которых можно по-



Таблица 3

$l_x$	$\bar{\bar{z}}_{l_x}$	$x_k$	$N$	$\bar{\bar{z}}_{l_x}^{(3)}(h_1)$	$(\Delta z)_{\text{НИЖ}}$	$(\Delta z)_{\text{ВЕРХ}}$
0	-0,1225(0)	25,0	1000	-0,122 500 000	0,0	$1,5 \cdot 10^{-18}$
1	-0,030625(0)	56,5	2244	-0,030 625 000	0,0	$9,3 \cdot 10^{-8}$
2	-0,0136(1)	92,5	3672	-0,013 611 111	0,0	$9,7 \cdot 10^{-9}$
3	-0,00765625(0)	181,3	7226	-0,007656249929	$2,4 \cdot 10^{-13}$	$3,4 \cdot 10^{-15}$

Таблица 4

$l_x$	$\alpha_l$	$\beta_l$	$\gamma_l$	$(\Delta y)_{\text{ВЕРХ}}$
0	$-0,5 \cdot 10^{-14}$	$0,4 \cdot 10^{-15}$	0,414 208 026	$1,8 \cdot 10^{-16}$
1	$-0,9 \cdot 10^{-15}$	-0,025 660 990	0,146 634 231	$1,8 \cdot 10^{-5}$
2	0,000 949 808	-0,024 423 641	0,104 672 749	$3,8 \cdot 10^{-5}$
3	0,000792 086	-0,013 588 558	0,051 765 347	$7,4 \cdot 10^{-6}$

лучить приближенные волновые функции  $\bar{y}^{(3)}(x, \bar{z}^{(3)})$ . Там же приводится и верхняя оценка  $(\Delta y^{(3)})_{\text{ВЕРХ}}$ , вычисленная по первому члену правой части неравенства /1.9/.

Сравнение метода стержневых сплайнов с методами из работ<sup>/4,5/</sup>, проведенное на основе примеров А и Б, выявляет следующие характерные для метода стержневых сплайнов свойства:

1. По времени счета этот метод сравним с методами из работ<sup>/4,5/</sup>.

2. Метод стержневых сплайнов является более устойчивым по сравнению с конечно-разностным методом из<sup>/4/</sup>. Это свойство выражается в возможности работать с меньшим шагом  $h$  и в конечном счете - в точности находимых приближенных решений /оба метода имеют скорость сходимости  $O(h^2)$  /. Причиной

указанного свойства является применение стержневой функции  $\exp(-k(z)x^q)$ , которая вносит "дополнительную информацию" о решении.

Метод стержневых сплайнов снабжен эффективными верхними оценками  $(\Delta z)_{\text{верх}}$  и  $(\Delta y)_{\text{верх}}$  /см. табл.3 и 4/, в отличие от методов из 4,5/. В связи с этим отметим, что в общем случае существующая теория сходимости разностных схем /см., например, 3/ не дает возможности использовать факт сходимости и порядка сходимости для практической оценки решения.

3. Ошибки собственных значений  $|\bar{z} - \tilde{z}^{(3)}|$  не нарастают при возрастании числа  $\ell_x$  /см. табл.1/. В то же время ошибки  $|\bar{z} - \tilde{z}^{(1)}|$  и  $|\bar{z} - \tilde{z}^{(2)}|$  нарастают с увеличением числа  $\ell_x$  /для первой ошибки см. табл. V из работы 5/, а для второй - см. табл.1/. В случае пертурбационного метода 5/ этот недостаток связан с отсутствием "сшивания" приближенной функции  $\tilde{y}^{(1)}(x, \bar{z}^{(1)})$  на узлах сетки, что приводит к ухудшению точности приближенного решения "глобальной задачи Коши" 5/ при увеличении  $\ell_x$ .

4. В отличие от метода 5/ метод стержневых сплайнов применим как для сингулярных в нуле потенциалов, так и для потенциалов, растущих при  $x \rightarrow \infty$ .

О методе стержневых сплайнов сделаем еще несколько замечаний:

5. Метод легко обобщается на интерполяционных сплайнах более высокой степени /кубических, 4-й степени и т.д./. Метод стержневых сплайнов, использующий сплайны 4-й степени /вместо параболических 1/, будет иметь порядок сходимости  $O(h^4)$ , равный порядку сходимости метода 5/.

6. В случае растущих потенциалов /1.4б/ оценки  $(\Delta z)_{\text{верх}}$  и  $(\Delta y)_{\text{верх}}$  не имеют места, так как предположение теоремы 2/1/ о том, что

$$\int_H^{x_k} p'_z(x, \bar{z}) p(x, \bar{z}) [w(x) \bar{\phi}(x)]^2 dx \neq 0$$

в этом случае нарушается.

7. На практике могут иметь место затруднения при вычислении интегралов, входящих в  $M_3$ . Это может случиться, например, при слишком больших значениях коэффициентов  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  параболического сплайна для некоторых  $i \in \{1, \dots, N\}$ . Примером этого может служить решение задачи А, где  $\alpha_N \sim 10^{15}$ ,  $\beta_N \sim 10^{16}$  и  $\gamma_N \sim 10^{17}$ . Это является результатом быстрого затухания стержня  $\exp(-k(z)x^q)$  около значений  $x_k$ . Преодоление этого затруднения возможно при помощи изменения масштаба переменной  $x$ .

8. Нижняя оценка  $(\Delta z)_{\text{ниж}}$  /см. формулу /2.2/ и табл.1,3/ в принципе применима и к конечно-разностным методам. Она имеет важное практическое значение, так как при использовании достаточно малых  $h_1$  и  $h_2$  /или при вторичной реализации метода

с новыми, уменьшенными  $h_1$  и  $h_2$  / она дает верное представление о настоящей ошибке  $|\bar{z} - \bar{z}^{(3)}|$  / см. табл.1,3/. Однако, как отмечалось в свойстве 2, использование мелкого шага сетки в большей степени присуще методу стержневых сплайнов, чем конечно-разностным методам.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Александров Л., Караджов Д. ЖВМ и МФ, 1980, 20, №4, с.923-938
2. Тихонов А.Н., Самарский А.А. ЖВМ и МФ, 1961, 1, №5, с.784-805
3. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. "Наука", М., 1971.
4. Акишин А.Т., Лузынин И.В. ОИЯИ, 5-10992, Дубна, 1977.
5. Adam Gh., Ixaru L.Gr., Corciovei A. Journ. of Compt.Phys., 1976, 22, p.1-33.
6. Bencze Gy. Comm.Phys.Math., 1966, 31, p.1-17.
7. Александров Л. и др. ОИЯИ, P11-80-752, Дубна, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел  
21 ноября 1980 года.