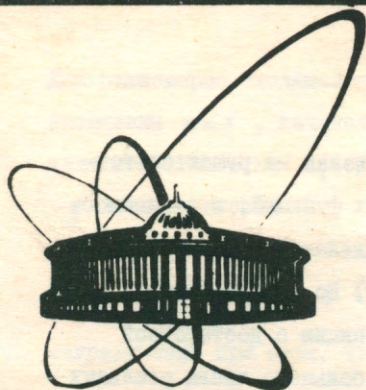


89-205



объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

Ю 233

P5-89-205

В. И. Юкалов

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИЙ  
В МЕТОДЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Направлено в "Журнал вычислительной математики  
и математической физики"

1989

## 1. Введение

Большинство задач математической физики не решаются точно. Для приближенного вычисления искомых функций, в зависимости от того, какими уравнениями они определяются, были разработаны разнообразные методы аппроксимаций. Во многих случаях такие методы позволяют найти искомую функцию с достаточной степенью точности. Однако для гораздо большего числа реальных физических задач математическая формулировка проблемы настолько сложна, что удается определять лишь несколько первых приближений какой-либо итерационной процедуры, о сходимости которой или ничего не известно, или точно известно, что она расходится. Предлагаемый в настоящей статье алгоритм вычисления функций предназначен именно для таких сложных ситуаций. Алгоритм представляет собой вариант метода последовательных приближений, базирующийся на явном использовании условия сходимости и на групповых свойствах рекуррентных соотношений, вытекающих из условия быстрой сходимости.

## 2. Формулировка метода

Допустим, ищется функция  $f(g)$  переменной  $g \in G$ . Эта функция может задаваться каким-либо дифференциальным, интегральным или любым другим уравнением, конкретная природа которого для нас сейчас безразлична. Предполагается только, что это уравнение, дополненное соответствующими граничными и начальными условиями, имеет единственное решение, точное выражение для которого, вследствие сложности задачи, найти невозможно. Для приближенного определения искомой функции хотелось бы построить такой метод, который приводил бы к последовательности  $\{f_n(g)\}$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ), равномерно сходящейся на  $G$ .

Для равномерно сходящейся последовательности имеется точка насыщения  $n = s$ , начиная с которой, приближение  $f_n(g)$  с заданной точностью  $\varepsilon_s$  равно искомой функции  $f(g)$  для всех  $g$  из множества  $G$ . В дальнейшем будем писать

$$(2.1) \quad f_n(g) \cong f(g), \quad (n \geq s),$$

подразумевая при этом, что

$$(2.2) \quad \left| \frac{f_n(g) - f(g)}{f(g)} \right| \leq \varepsilon_s, \quad (n \geq s, g \in G).$$

Кроме того, поскольку по условию уравнение, задающее  $f(g)$ , предполагается настолько сложным, что удастся рассчитать лишь несколько первых приближений  $f_n(g)$ , необходимо потребовать достаточно быстрой сходимости последовательности  $\{f_n(g)\}$ , чтобы уже первые найденные приближения с нужной точностью аппроксимировали искомую функцию. Для каждой заданной последовательности  $\{f_n(g)\}$  максимально быстрая сходимость отвечает минимальной точке насыщения  $s = 0$ . Условие быстрой сходимости можно записать в форме

$$(2.3) \quad f_{m+n}(g) \cong f_m(g), \quad (m, n \geq 0),$$

эквивалентной первому из приведенных выше равенств (2.1) при  $s = 0$ .

Естественно, свойство (2.3) будет выполняться не для произвольной последовательности. Для того, чтобы обеспечить выполнение условия (2.3), введем дополнительную последовательность  $\{z_n(g)\}$ . Функции  $z_n(g)$  будем называть управляющими, поскольку их цель — подправлять на каждом шаге  $n = 0, 1, 2, \dots$

основную последовательность  $\{f_n(g)\}$  так, чтобы выполнялось условие быстрой сходимости (2.3). Это означает, в частности, что всякое приближение  $f_n(g)$  становится функционалом  $f_n(g, z_n(g))$  относительно управляющей функции  $z_n(g)$ . Следовательно, строящаяся последовательность является последовательностью функционалов  $f_n(g, z_n(g))$ , для которой существует точка насыщения  $z$ , когда в указанном выше смысле (2.1) справедливо равенство

$$(2.4) \quad f_z(g, z_z(g)) \cong f(g),$$

а управляющие функции определяются условием быстрой сходимости (2.3), принимающим вид

$$(2.5) \quad f_{m+n}(g, z_{m+n}(g)) \cong f_m(g, z_m(g)), \quad (m, n \geq 0).$$

Условие быстрой сходимости (2.5) представляет собой рекуррентное соотношение, связывающее различные члены последовательности. Из этого соотношения можно вывести важное групповое свойство, которое мы сейчас установим.

Определим функцию  $g(f)$  уравнением

$$(2.6) \quad f_0(g, z_0(g)) = f.$$

Введем обозначение

$$(2.7) \quad \bar{f}_n(f) \equiv f_n(g(f), z_n(g(f))).$$

Для функции (2.7) условие (2.5) приобретает вид

$$(2.8) \quad \bar{f}_{m+n}(f) \cong \bar{f}_m(f), \quad (m, n \geq 0).$$

Из (2.6) и (2.4) вытекают равенства

$$(2.9) \quad \bar{f}_0(f) = f, \quad \bar{f}_z(f) \cong f(g),$$

играющие роль граничных условий для рекуррентного соотношения (2.8). Полагая в (2.8)  $m=0$ , имеем

$$\bar{f}_n(f) \cong \bar{f}_0(f) = f.$$

Подставляя  $f \cong \bar{f}_n(f)$  обратно в правую часть (2.8), получаем

$$(2.10) \quad \bar{f}_{m+n}(f) \cong \bar{f}_m(\bar{f}_n(f)), \quad (m, n \geq 0).$$

Рекуррентное соотношение (2.10) имеет форму так называемого автомодельного преобразования. Таким образом, условие быстрой сходимости (2.5) оказывается достаточным для свойства автомодельности (2.10), но, конечно, не необходимым.

Построим аналитическое продолжение свойства автомодельности (2.10) на случай непрерывно меняющихся индексов. Для этого введем переменную

$$(2.11) \quad t_n \equiv e^n,$$

управляющую функцию

$$(2.12) \quad z(t_n, g) \equiv z_n(g)$$

и элемент последовательности

$$(2.13) \quad f(t_n, g, z(t_n, g)) \equiv f_n(g, z_n(g)).$$

Продолжим функции (2.12) и (2.13) на область непрерывной переменной  $t \in [1, \infty)$ , проходящей через все дискретные значения (2.11). Аналогом функции (2.7) для непрерывной переменной  $t$  является функция

$$(2.14) \quad \bar{f}(t, f) \equiv f(t, g(f), z(t, g(f))).$$

Граничные условия (2.9) переходят в равенства

$$(2.15) \quad \bar{f}(1, f) = f, \quad \bar{f}(t_3, f) \equiv f(g).$$

Непрерывное представление условия автомодельности (2.10) принимает вид

$$(2.16) \quad \bar{f}(bt, f) \equiv \bar{f}(t, \bar{f}(b, f)), \quad (b, t \geq 1).$$

Соотношению (2.16) нетрудно придать дифференциальную форму

$$(2.17) \quad \frac{\partial \bar{f}(t, f)}{\partial \ln t} \equiv \gamma(\bar{f}(t, f)),$$

в которой

$$(2.18) \quad \gamma(f) \equiv \left. \frac{\partial \bar{f}(t, f)}{\partial t} \right|_{t=1}.$$

Условие автомодельности (2.16) для непрерывного обобщения итерационной процедуры было сформулировано в работе [1]. По своей структуре уравнение (2.17) идентично уравнению ренормализационной группы для инвариантного заряда в квантовой теории поля [2], где (2.18) играет роль функции Гелл-Манна-Лоу. Проинтегрировав (2.17), можно получить

$$(2.19) \quad \int_{f_n(g)}^{f(g)} \frac{dy}{\gamma(y)} \cong g-n.$$

Напомним, что эквивалентные друг другу уравнения (2.16), (2.17) и (2.19) были получены как следствия условия быстрой сходимости (2.5).

Для того чтобы можно было конструктивно воспользоваться полученными уравнениями, необходимо уметь находить функцию Гелл-Манна-Лоу (2.18). Беря производную по переменной  $t$ , вспомним, что функция (2.14) зависит от  $t$  как прямо, так и через управляющую функцию  $z = z(t, g)$ , поэтому

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} = \left( \frac{\partial \bar{f}}{\partial t} \right)_z + \left( \frac{\partial \bar{f}}{\partial z} \right)_t \frac{\partial z}{\partial t}.$$

Так как в конечном счете мы умеем вычислять только элементы итерационной последовательности (2.13) для дискретных значений  $t = t_n$ , то следует вернуться к дискретному представлению (2.7). При этом производные по  $t$  надо аппроксимировать конечными разностями, выбирая для последних, например, двухточечный шаблон [3]. Таким образом, для функции Гелл-Манна-Лоу (2.18) получаем приближенное выражение

$$(2.20) \quad \gamma_{n3}(f) \approx \frac{f_3(g, z_n) - f_n(g, z_n)}{3-n} + \frac{z_3 - z_n}{3-n} \frac{\partial}{\partial z_n} f_n(g, z_n),$$

в котором  $n < 3$ ,  $g = g(f)$ ,  $z_n = z_n(g(f))$ .

На языке ренормгрупповых преобразований (2.16), или (2.17), искомая функция  $f(g)$ , к которой по построению сходится последовательность  $\{f_n(g, z_n(g))\}$ , называется неподвижной или фиксированной точкой. Уравнение (2.17) показывает, что неподвижной точке соответствует нуль функции (2.18); поэтому равенство

$$\gamma_{ij}(f) = 0, \quad (i, j \leq 3)$$

для выражения (2.20) играет роль уравнения на управляющую функцию  $z_n(g)$ , обеспечивающую наибо́льшую сходимость рассматриваемой последовательности.

Сформулируем общую схему применения предлагаемого алгоритма. Из приближенного решения уравнения на фиксированную точку  $\gamma(f) = 0$  определяем управляющую функцию  $z_n(g)$ , которую подставляем в полное выражение (2.20). Интегрируя, с найденной функцией Гелл-Манна-Лоу, уравнение (2.19), получаем искомую функцию  $f(g)$ .

### 3. Иллюстрация метода

Для того чтобы не только проиллюстрировать, но и оценить погрешность предлагаемого метода, разумно выбрать задачу, имеющую точное решение.

Рассмотрим задачу на собственные значения для оператора

$$(3.1) \quad H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \lambda m^2 x^4,$$

в котором  $m$ ,  $\omega$ ,  $\lambda$  — положительные константы,  $x \in (-\infty, +\infty)$ .

В квантовой механике оператор (3.1) называется гамильтонианом ангармонического осциллятора, а его наименьшее собственное значение — энергией основного состояния. Точное решение для данной задачи было получено численно [4]. Известно также, что теория возмущений по степеням  $\lambda$  для собственных значений оператора (3.1) приводит к рядам, расходящимся при всех значениях  $\lambda > 0$ .

В качестве начального приближения в методе последовательных приближений возьмем оператор

$$(3.2) \quad H_0 = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2.$$

Введем безразмерные величины

$$(3.3) \quad e(g) \equiv \frac{E}{\omega}, \quad g \equiv \frac{\lambda}{\omega^3}, \quad z \equiv \frac{\omega_0}{\omega},$$

подразумевая под  $E$  наименьшее собственное значение оператора (3.1). В дальнейшем именно  $e(g)$  является искомой функцией, а  $z = z(g)$  играет роль управляющей функции, которую надо подобрать так, чтобы получаемая последовательность сходилась максимально быстро, в соответствии с построениями предыдущего пункта.

Наименьшее собственное значение оператора (3.2) равно  $\omega_0/2$ , следовательно,

$$(3.4) \quad e_0(g, z) = \frac{1}{2} z.$$

Представляя оператор (3.1) в виде

$$H = H_0 + \Delta H, \quad (\Delta H \equiv H - H_0)$$

и применяя теорию возмущений по степеням  $\Delta H$ , в первом порядке имеем

$$(3.5) \quad e_1(g, z) = \frac{3g + z + z^3}{4z^2}$$

Второй порядок теории возмущений дает

$$(3.6) \quad e_2(g, z) = \frac{4z^3(3g + z + z^3) - (6g + z - z^3)^2 - 6g^2}{16z^5}$$

Уравнение на фиксированную точку  $\gamma_{ij}(f) = 0$  можно решать с различной степенью точности и для разных значений индексов  $i, j$ . В свою очередь, функцию (2.20) также можно выбрать при разных индексах  $n, \beta$ . Естественно, при разных выборах получаются и отличающиеся друг от друга аппроксимации искомой функции  $e(g)$ . Ниже будут рассмотрены разные варианты таких аппроксимаций и найдена точность каждого из них.

Вариант I. В данном случае уравнение (2.6), определяющее функцию  $g(f)$ , имеет вид

$$(3.7) \quad e_0(g, z) = f.$$

Уравнение на фиксированную точку возьмем в форме

$$(3.8) \quad \gamma_{0i}(f) = 0.$$

Полагая, что управляющая функция не меняется при изменении номера приближения от  $n=0$  до  $n=1$ , т.е.

$$(3.9) \quad z_n = z, \quad \dot{z}_n = z,$$

из (3.8) и (2.20) находим

$$(3.10) \quad e_1(g, z) - e_0(g, z) = 0.$$

Уравнение (3.8), или (3.10) является уравнением на фиксированную точку и определяет управляющую функцию  $z(g)$  так, чтобы обеспечивалась наиболее быстрая сходимость рассматриваемой последовательности приближений.

Условия наиболее быстрой сходимости типа (3.10) были сформулированы автором [5,6] и позднее рассматривались также в работах [7,8]. Однако в этих работах [5-8] найденная функция  $z(g)$  подставлялась в нулевое приближение, в нашем случае  $e_0(g, z) = e_0(g, z(g))$ , и на этом процедура вычислений заканчивалась. В подходе же, излагаемом в настоящей статье, определение управляющей функции - только первый шаг. Далее точность вычислений может быть существенно улучшена за счет использования ренормализационных уравнений (2.17) или (2.19).

Условие (3.10) при учете (3.4) и (3.5) дает

$$(3.11) \quad z^3 - z - 3g = 0.$$

Это и есть явный вид уравнения на управляющую функцию  $z(g)$ . Подставляя  $z(g)$  в соответствующее приближенное выражение для энергии основного состояния, будем иметь

$$e_n(g) \equiv e_n(g, z(g)).$$

Функция Гелл-Манна-Лоу (2.20) при  $n=1$ ,  $z=2$  и условия (3.9) имеет вид

$$(3.12) \quad \gamma_{12}(f) = e_2(g(f)) - e_1(g(f)),$$

где  $g(f)$  задается уравнением (3.7). Используя (3.5), (3.6) и (3.11), из (3.12) получаем

$$(3.13) \quad \gamma_{12}(f) = - \frac{5(4f^2-1)^2}{384 f^3}.$$

Интегрируя (2.19) с функцией (3.13), приходим к уравнению

$$(3.14) \quad \frac{4e^2(g)-1}{z^2(g)-1} = \exp \left[ \frac{1}{4e^2(g)-1} - \frac{1}{z^2(g)-1} - \frac{5}{12} \right];$$

в котором  $z(g)$  определяется уравнением (3.11). Найденное уравнение (3.14), задающее энергию основного состояния  $e(g)$ , несложно решить численно и сравнить рассчитанные значения с точными результатами [4], полученными при непосредственном решении уравнения Шрёдингера. Проводя такое сравнение, убеждаемся, что при небольших величинах переменной  $g \sim 1$  уравнение (3.14) дает функцию  $e(g)$  с достаточно высокой точностью, около одного процента, но с увеличением  $g$  точность ухудшается. Максимальная ошибка, соответствующая  $g \rightarrow \infty$ , составляет 12%, что, впрочем, тоже не так уж плохо, если вспомнить, что простая теория возмущений вообще не имеет смысла ни при каких  $g \gg 0.1$ .

**Вариант 2.** Рассмотрим функцию  $\gamma_{12}(f)$ , задаваемую выражением (2.20). Обозначим  $z, \bar{z}$ . Приближенное значение

для неподвижной точки найдем, зануляя не всю функцию  $\gamma_{12}(f)$ , а только ее второе слагаемое, то есть полагая

$$(3.15) \quad \frac{\partial}{\partial z} e_1(g, z) = 0.$$

Согласно (3.5), это дает уравнение

$$(3.16) \quad z^3 - z - 6g = 0,$$

определяющее управляющую функцию  $z(g)$ . В качестве функции Гелл-Манна-Лоу возьмем

$$(3.17) \quad \gamma_{01}(f) = e_1(g(f)) - e_0(g(f)),$$

где  $g(f)$  задается уравнением (3.7). Подставляя в (3.17) выражения (3.4) и (3.5), получаем

$$(3.18) \quad \gamma_{01}(f) = - \frac{4f^2-1}{16f^2}.$$

Интегрируя (2.19) с функцией (3.18), находим

$$(3.19) \quad e(g) = \left[ \frac{z^2(g) + \exp(1/2) - 1}{4 \exp(1/2)} \right]^{1/2},$$

где  $z(g)$  определяется уравнением (3.16). Сравнивая численные значения  $e(g)$  при разных  $g$ , рассчитанные по формуле (3.19), с точными значениями [4], убеждаемся, что максимальная ошибка приближения (3.19) составляет 6% при любых  $g \in [0, \infty)$ .

Уравнения типа (3.15) использовались Касуэллом [9] и Стевенсоном [10] и были названы условием минимальной чувстви-

тельности. В их работах функция  $z(g)$ , найденная из (3.15), подставлялась в  $e_1(g, z(g))$ , на чем вычисления и заканчивались. В нашем же подходе, во-первых, дается обоснование разумности такого приближения, поскольку показано, что условие минимальной чувствительности (3.15) является частным случаем уравнения на неподвижную точку, во-вторых, найденное приближенное выражение для неподвижной точки далее ренормируется с помощью уравнений ренормализационной группы (2.17), (2.19). Такая дополнительная перенормировка позволяет существенно улучшить точность вычислений.

Вариант 3. Управляющую функцию будем снова определять из условия (3.15), а за функцию Гелл-Манна-Лоу примем

$$(3.20) \quad \gamma_{02}(f) = \frac{e_2(g(f)) - e_0(g(f))}{a},$$

где  $g(f)$  задается уравнением (3.8). С учетом (3.5) и (3.6) функция (3.20) принимает вид

$$(3.21) \quad \gamma_{02}(f) = - \frac{13(4f^2-1)^2 + 12(4f^2-1)}{1536 f^3}$$

Интеграл (2.19) при функции (3.21) дает

$$(3.22) \quad \left[ 4e^2(g) - 1 \right]^{13} \exp\left(\frac{13}{2}\right) \left\{ 12 + 13 \left[ z^2(g) - 1 \right] \right\} = \\ = \left[ z^2(g) - 1 \right]^{13} \left\{ 12 + 13 \left[ 4e^2(g) - 1 \right] \right\}.$$

Сравнение численных значений  $e(g)$  с точными результатами [4] показывает, что максимальная ошибка для приближения (3.22) равна 4%.

Вариант 4. Возьмем функцию (2.20) при  $n = 1$ ,  $g = 2$ . Управляющую функцию найдем, зануляя второе слагаемое в  $\gamma_{12}(f)$ , то есть из условия (3.15). При этом

$$(3.23) \quad \gamma_{12}(f) = e_2(g(f)) - e_1(g(f)),$$

где  $g(f)$  зададим уравнением

$$(3.24) \quad e_1(g) = f.$$

Отсюда, учитывая (3.6) и (3.16), имеем

$$(3.25) \quad \gamma_{12}(f) = - \frac{(32f^2 + 8f\sqrt{16f^2-3} - 12)^2}{288(4f + \sqrt{16f^2-3})^3}.$$

Интегрируя (2.19) с функцией (3.25), находим

$$(3.26) \quad \frac{32e^2(g) + 8e(g)\sqrt{16e^2(g)-3} - 12}{9[z^2(g)-1]} = \\ = \exp \left\{ \frac{6}{32e^2(g) + 8e(g)\sqrt{16e^2(g)-3} - 12} - \frac{2/3}{z^2(g)-1} - \frac{1}{18} \right\}.$$

Численное решение уравнения (3.26) дает  $e(g)$  с точностью не хуже 0,8% для всех  $g$ .

Вариант 5. Зададим функцию  $g(f)$  уравнением

$$(3.27) \quad e_0(g) = f,$$



а управляющую функцию  $\varepsilon(g)$  — условием (3.15), то есть уравнением (3.16). Тогда для функции (2.20) при  $n = 1$ ,  $s = 2$  имеем

$$(3.28) \quad \chi_{12}(f) = e_2(g(f)) - e_1(g(f)).$$

Подставляя сюда (3.5) и (3.6), находим

$$(3.29) \quad \chi_{12}(f) = - \frac{(4f^2 - 1)^2}{768 f^3}.$$

Беря интеграл (2.19) с функцией (3.29), получаем

$$(3.30) \quad \frac{4e^2(g) - 1}{4e_1^2(g) - 1} = \exp \left[ \frac{1}{4e^2(g) - 1} - \frac{1}{4e_1^2(g) - 1} - \frac{1}{24} \right],$$

где  $e_1(g)$  определяется выражением (3.5). Решая численно уравнение (3.30) и сравнивая найденные значения  $e(g)$  с известными точными решениями [4], приходим к выводу, что максимальная ошибка приближения (3.30) не превышает 0,09 % при любых  $g \in [0, \infty)$ .

#### 4. Заключение

Разобранные примеры показывают, что, как и следовало ожидать, точность предлагаемого подхода зависит от того, насколько удачно выбрана функция Гелл-Манна-Лоу. Впрочем, ситуация вполне естественна и хорошо известна для различных применений метода ренормгруппы [1, 2], где указанная функция практически всегда может быть определена лишь приближенно. Рассмотренные выше варианты позволяют сформулировать эвристическое правило: точность метода при одной и той же управляющей функции тем выше, чем больше сумма индексов  $n+s$  в функции Гелл-Манна-Лоу (2.20).

Однако важно, что как бы грубо ни была аппроксимирована функция (2.20), тем не менее наилучшая точность составляет около 10 %, что для многих физических задач вполне достаточно. При удачном выборе функции Гелл-Манна-Лоу точность метода достигает 0,1 %.

Наряду с хорошей точностью ценность предложенного алгоритма состоит и в его простоте. Для его реализации достаточно иметь кроме выбранного нулевого приближения искомой функции еще только два других последовательных приближения.

#### Литература

1. Юкалов В.И. Ренормгруппа в статистической физике — полевая и итерационная формулировки // Сообщ. ОИЯИ, Р17-88-893, Дубна, 1988.
2. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. М.: Наука, 1973.
3. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972.
4. Hioe F., MacMillen D., Montroll E. Quantum theory of anharmonic oscillators // Phys.Rep. 1976, V.43. N7. P.305-335.
5. Юкалов В.И. Теория возмущений при сильном взаимодействии // Вестн. моск. унив. 1976, Т.17. №3. С.270-276.
6. Юкалов В.И. Модель гибридного кристалла // Теор. мат. физ. 1976, Т.28. № 1. С.92-103.
7. Seznec R., Zinn-Justin J. Summation of divergent series by order dependent mappings // J.Math.Phys. 1979, V.20. N6. P.1398-1407.

8. Halliday I., Suranyi P. Anharmonic oscillator: a new approach // Phys.Rev. 1980, V. D21, N3. P.1529-1536.
9. Caswell W.E. Accurate energy levels for the anharmonic oscillator and a summable series for the double-well potential in perturbation theory // Ann.Phys. 1979, V.123. N1. P.153-162.
10. Stevenson P.M. Optimized perturbation theory // Phys.Rev. 1981, V.D23. N6. P.2916-2931.

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 марта 1989 года.