KFKI – 74 – 34

СОВМЕСТНЫЙ НАУЧНЫЙ СБОРНИК ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ / ДУБНА, СССР/ И ЦЕНТРАЛЬНОГО ИНСТИТУТА ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ /БУДАПЕШТ, ВЕНГРИЯ/

Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики

COLLECTION OF SCIENTIFIC PAPERS IN COLLABORATION OF JOINT INSTITUTE FOR NUCLEAR RESEARCH, DUBNA, USSR AND CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS, BUDAPEST, HUNGARY

Algorithms and programs for solution of some problems in physics

ПРОГРАММА ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ С ПОМОЩЬЮ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА

И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина

Объединенный институт ядерных исследований

АННОТАЦИЯ

В работе дано описание алгоритма численного решения задачи Штурма-Лиувилля, полученного на основе непрерывного аналога метода Ньютона. Приведена подпрограмма на языке FORTRAN, реализующая этот алгоритм.

ABSTRACT

The algorithm of the numerical solution of the Sturm-Liouville problem was described basing on the continuous analog of the Newton method. The program was described realizing this algorithm on FORTRAN too.

Необходимость численного решения задачи Штурма-Лиувилля /1/ часто возникает в связи с решением уравнения Шредингера. В качестве примеров можно указать задачи квантовой механики, мезомолекулярной физики, теории ядра.

Рассматриваемая в данной работе подпрограмма SLIPl предназначена для численного решения частичной проблемы Штурма-Лиувилля, то есть для вычисления некоторого собственного значения линейного дифференциального оператора второго порядка и соответствующей собственной функции, удовлетворяющей однородным граничным условиям. Подпрограмма успешно использовалась при решении некоторых задач /2/, в которых коэффициенты дифференциального оператора задавались в виде таблиц.

I. Постановка задачи

Для линейного дифференциального уравнения

$$\varphi^{(1)}(\lambda, y) \equiv y''(x) + 2p(x)y'(x) + (q(x) - \lambda r(x))y(x) = 0, \tag{1.a}$$

$$a \le x \le b$$

требуется вычислить собственное значение λ и соответствующее собственное решение $y(x)$, удовлетворяющее однородным граничным условиям

$$\varphi^{(2)}(\lambda, y) \equiv d_1(\lambda, a)y'(a) + f_1(\lambda, a)y(a) = 0, \tag{1.b}$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda, y) \equiv d_2(\lambda, b)y'(b) + f_2(\lambda, b)y(b) = 0. \tag{1.c}$$

Функции $p(x)$, $q(x)$ и $r(x)$ заданы на отрезке $[a, b]$ в виде таблиц с равномерным шагом. Предполагается, что решение задачи (1) $\lambda^*, y^*(x)$ существует и известно некоторое начальное приближение $\lambda_0, y_0(x)$ к искомому решению.

2. Метод решения (непрерывный аналог метода Ньютона)

Метод решения задачи (1) является развитием идей работ /3/ и подробно рассмотрен в /2/.

Задача (1) доопределяется условием нормировки

$$\varphi^{(4)}(\lambda, y) \equiv \int\limits_a^b y^2(x)\,dx + c^2 \int\limits_b^\infty \psi^2(\lambda, x)\,dx - 1 = 0. \qquad (1.d)$$

Это условие позволяет также учитывать особенности тех задач, в которых решение задачи (1) находится на полубесконечном интервале $a \le x < \infty$. Здесь $\psi(\lambda, x)$ – асимптотическое выражение при $x \to \infty$ для искомой собственной функции $y(x)$, которое считается известным. Константа c обеспечивает в некоторой достаточно удаленной точке $x = b$ выполнение равенства

$$y(b) = c\psi(\lambda, b).$$

Если задача (1) рассматривается на конечном отрезке $[a, b]$, то в условии (1.d) следует положить $c \equiv 0$.

Задача (1) является нелинейным функциональным уравнением

$$\varphi(z) = 0,$$

где φ - совокупность операторов $\{\varphi^{(j)},\ j = 1, 2, 3, 4\}$, определенных в соотношениях (1), а $z = (\lambda, y(x)) \in R * c^2[a, b]$. Для решения этого уравнения можно применить непрерывный аналог метода Ньютона /4/. Согласно этому подходу вводится непрерывный параметр t $(0 \le t \le \infty)$, от которого зависят искомые величины в задаче (1) $z(t) = (\lambda(t), y(x, t))$, а задача (1) заменяется эволюционным уравнением

$$\varphi'(z(t))z'(t) = -\varphi(z(t)), \qquad z(0) = (\lambda_0, y_0(x)). \qquad (2)$$

Здесь φ' - производная Фреше оператора φ , а $z'(t) = (\mu(t), \vartheta(x, t))$, где

$$\mu(t) = \lambda'(t), \qquad \vartheta(x, t) = y'_t(x, t). \qquad (3)$$

При достаточно общих предположениях /2/,/4/ $\lim_{t\to\infty} ||z(t) - z^*|| = 0$, где $z^* = (\lambda^*, y^*(x))$ – искомое решение задачи (1).

3. Дискретное представление по параметру t

Дискретную аппроксимацию эволюционного уравнения (2) по параметру t можно реализовать на основе метода Эйлера /2/,/4/.

Полуось $0 \leq t < \infty$ разбивается узловыми точками t_k $(k = 0, 1, 2, ...)$ с переменным шагом τ_k

$$t_{k+1} = \tau_k + t_k, \quad t_0 = 0. \tag{4.a}$$

В дальнейшем для краткости будем использовать в обозначении величин, зависящих от t , индекс k при $t = t_k$, опуская запись самого аргумента.

Выражения (3) заменим разностными аналогами

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k \mu_k, \qquad y_{k+1}(x) = y_k(x) + \tau_k \vartheta_k(x). \tag{4b}$$

Схему приближенного решения эволюционного уравнения (2) для задачи (1) методом Эйлера можно описать следующим образом. Предположим, что при $t = t_k$ значения λ_k и $y_k(x)$ известны. Тогда мы приходим к рассмотрению однопараметрического семейства краевых задач с параметром μ_k относительно функции $\vartheta_k(x)$, в которое трансформируется исходная стационарная задача (1a)-(1c).

$$\varphi^{(1)}(\lambda_k, \vartheta_k) = S_{1k}(x) + \mu_k S_{2k}(x),$$
$$\varphi^{(2)}(\lambda_k, \vartheta_k) = a_{1k} + \mu_k a_{2k},$$
$$\varphi^{(3)}(\lambda_k, \vartheta_k) = b_{1k} + \mu_k b_{2k},$$

где

$$\begin{aligned}
&S_{1k}(x) = -\varphi^{(1)}(\lambda_k, y_k),\\
&S_{2k}(x) = r(x) y_k(x),\\
&a_{1k} = -\varphi^{(2)}(\lambda_k, y_k),\\
&a_{2k} = -(d'_{1\lambda_k} y'_k(a) + f'_{1\lambda_k} y_k(a)),\\
&b_{1k} = -\varphi^{(3)}(\lambda_k, y_k),\\
&b_{2k} = -(d'_{2\lambda_k} y'_k(b) + f'_{2\lambda_k} y_k(b)).
\end{aligned} \tag{5}$$

Решение этой краевой задачи можно представить в виде

$$\vartheta_k(x, \mu_k) = \vartheta_{1k}(x) + \mu_k \vartheta_{2k}(x). \tag{6}$$

Здесь функции $\vartheta_{jk}(x)$ $/j=1,2;\ k=0,1,2,\ ...$/ являются решением краевой задачи

$$\begin{aligned}
&\varphi^{(1)}(\lambda_k,\vartheta_{jk})=S_{jk}(x),\\
&\varphi^{(2)}(\lambda_k,\vartheta_{jk})=a_{jk}, \qquad (7)\\
&\varphi^{(3)}(\lambda_k,\vartheta_{jk})=b_{jk}.
\end{aligned}$$

Решив краевые задачи (7) при $j=1,2$, можно определить однопараметрическое семейство функций $\vartheta_k(x)$ (6). Используя условие нормировки (l.d) в эволюционном уравнении (2), получаем следующее выражение для определения μ_k

$$\int_a^b y_k(x)(\vartheta_{1k}(x)+\mu_k\vartheta_{2k}(x))dx+\mu_k\int_b^\infty c_k^2\psi(\lambda_k,x)\psi'_\lambda(\lambda_k,x)dx=$$

$$-\frac{1}{2}(\int_a^b y_k^2(x)dx+\int_b^\infty c_k^2\psi^2(\lambda_k,x)dx-1).$$

Здесь значение c_k определяется из соотношения

$$y_k(b)=c_k\psi(\lambda_k,b). \qquad (8a)$$

Таким образом,

$$\mu_k=-\frac{1}{2}(\int_a^b y_k^2(x)dx+\int_b^\infty c_k^2\psi^2(\lambda_k,x)dx-1+2\int_a^b y_k(x)\vartheta_{1k}(x)dx)\times$$

$$\times(\int_a^b y_k(x)\vartheta_{2k}(x)dx+\int_b^\infty c_k^2\psi(\lambda_k,x)\psi'_\lambda(\lambda_k,x)dx)^{-1}. \qquad (8b)$$

Следовательно, при заданных λ_k и $y_k(x)$ функция $\vartheta_k(x)$ полностью определена соотношениями (6)-(8). Далее, пользуясь формулами (4), можно вычислить при $t=t_{k+1}$ значения λ_{k+1} и $y_{k+1}(x)$. Поскольку начальные значения λ_0 и $y_0(x)$ при $t=t_0=0$ известны, процесс вычисления $\lambda_k, y_k(x)$ с помощью формул (4)-(8) полностью определен для всех k.

4. Дискретная схема

Дискретное представление по переменной x рассматриваемой вычислительной схемы может быть получено в результате конечноразностной аппроксимации краевых задач (7) и применения квадратурных формул того же порядка точности для вычисления интегралов в формуле (8). Шаг конечноразностных и квадратурных формул совпадает с шагом таблиц коэффициентов уравнения (1a). В данной подпрограмме используются трехточечные конечноразностные формулы, аппроксимирующие краевую задачу (7) с точностью порядка $0(h^2)$, где h - шаг по оси x, и квадратурные формулы трапеций того же порядка точности. Для численного решения дискретных краевых задач применяется алгоритм прогонки /5/.

5. Описание параметров подпрограммы SLIP1

Программный пакет написан на языке FORTRAN.

Обращение к подпрограмме SLIP1 осуществляется с помощью оператора
CALL SLIP1 (A, B, N, P, Q, R, EV0, Y0, EV, Y, EPS, NT, LST, LPR, LX, T0, X),
где

A, B - границы отрезка изменения x,

N - количество узлов равномерной сетки на отрезке изменения x, включая граничные точки,

P, Q, R - массивы размерности N , соответствующие таблицам коэффициентов дифференциального оператора (1a),

EV0 - начальное приближение к искомому собственному значению,

Y0 - массив размерности N , соответствующий таблице начального приближения к вычисляемой собственной функции,

EPS - параметр, характеризующий точность вычисления собственного значения и собственной функции задачи (1).

В качестве меры точности пары (λ_k, y_k) выбрана величина

$$\delta_k = \max_{2\leqslant i\leqslant N-1} |h^{-2}(y_k(x_{i+1}) - 2y_k(x_i) + y_k(x_{i-1}))+$$

$$+p(x_i)h^{-1}(y_k(x_{i+1})-y_k(x_{i-1}))+(q(x_i)-\lambda_k r(x_i))y_k(x_i)|. \tag{9}$$

При выполнении условия $\delta_k \leq$ EPS происходит выход из подпрограммы.

NT - максимальное число шагов по оси t .

LST - параметр, задающий режим выбора шага τ_k в формуле (4а). Этот параметр может принимать значения 1, 2 или 3.

При LST $=1$ $\tau_k \equiv \tau_0$ $(T0)$.

При LST $=2$ для вычисления τ_k применяется формула

$$\tau_k = \begin{cases} \min(1, 2\tau_{k-1}), & \delta_k \leq \delta_{k-1}, \\ \max(\tau_0, \tau_{k-1}/2), & \delta_k \geq \delta_{k-1}. \end{cases}$$

При LST $=3$ τ_k вычисляется по формуле

$$\tau_k = \begin{cases} \min(1, \tau_{k-1}\dfrac{\delta_{k-1}}{\delta_k}), & \delta_k \leq \delta_{k-1}, \\ \max(\tau_0, \tau_{k-1}\dfrac{\delta_{k-1}}{\delta_k}), & \delta_k \geq \delta_{k-1}. \end{cases}$$

Как показала практика, этот режим обеспечивает наибольшую устойчивость вычислений.

LPR - параметр, определяющий периодичность выдачи на печать промежуточных итераций (λ_k, y_k).

LX - параметр, определяющий шаг таблицы $y_k(x)$ при печати промежуточных итераций $(h_{tabl.} = h * LX)$.

T0 - начальное значение шага по оси t. Хорошие результаты достигнуты при T0=0.01, 0.05, 0.1.

Фактические значения этих параметров должны быть заданы перед обращением к подпрограмме.

Результаты вычислений присваиваются параметрам EV (значение λ) и Y (массив размерности N , соответствующий таблице вычисленной собственной функции).

Кроме задания фактических значений исходных параметров, необходимо составить подпрограммы вычисления некоторых величин, используемых при работе подпрограммы SLIP1.

SUBROUTINE D1F1(EV, A, Dl, DDl, Fl, DFl)

Данная подпрограмма должна обеспечить вычисление величин $d_1(\lambda_k, a)$, ${d_1}'_\lambda(\lambda_k, a), f_1(\lambda_k, a), {f_1}'_\lambda(\lambda_k, a)$ из граничного условия (1в) при заданных значениях λ_k и a, которые присваиваются параметрам EV и A . Числовые значения этих величин присваиваются параметрам D1, DD1, F1, DF1 соответственно.

SUBROUTINE D2F2(EV, B, D2, DD2, F2, DF2)

Эта подпрограмма должна вычислять коэффициенты и их производные по λ в граничном условии (1с).

SUBROUTINE ASIM(A, B, EV, Y, SYA2, SYDYA)

По входной информации $a, b, \lambda_k, y_k(b)$, которая присваивается параметрам A,B, EV и $Y = Y(N)$ в подпрограмме ASIM должны быть вычислены интегралы

$$\int\limits_b^\infty c_k^2 \psi^2(\lambda_k, x) dx \quad \text{и} \int\limits_b^\infty c_k^2 \psi(\lambda_k, x) \psi'_\lambda(\lambda_k, x) dx$$

из формул (8) и их значения присвоены параметрам SYA2 и SYDYA соответственно.

SUBROUTINE CONTR(EV, EV1, EV0, RES, ISW)

Данная подпрограмма служит для контроля и корректировки промежуточных результатов, а также для перевода их в физические единицы (RES). Необходимость в этом может возникнуть при решении конкретных физических задач, исходя из априорной информации об интересующем решении.

Подпрограмма SLIP1 использует библиотечные функции DABS, DMIN1, DMAX1. В подпрограмме SLIP1 предусмотрен анализ вычислительных ситуаций, при которых невозможно продолжение счёта. При их возникновении печатается соответствующая диагностика и осуществляется выход из подпрограммы.

6. Пример использования подпрограммы SLIP1

Для численного контроля точности изложенного метода задача (1) была решена для случая потенциала Морзе /6/

$$p(x) \equiv 0,\ r(x) \equiv 1,\ q(x) = -2MD(e^{-2a_1(x-x_0)} - 2e^{-a_1(x-x_0)}),\ x \geq 0. \tag{10}$$

В этом случае задача (1) имеет аналитическое решение

$$\lambda = 2MD[1 - \frac{a_1}{\sqrt{2MD}}(\vartheta + \frac{1}{2})]^2, \qquad \vartheta = 0, 1, \tag{11a}$$

$$y^{(0)}(x) = c_0 \xi^\rho e^{-\xi/2}, \tag{11b}$$

$$y^{(1)}(x) = c_1 \xi^\rho (1 - \frac{\xi}{2\rho + 1}) e^{-\xi/2}, \tag{11c}$$

где

$\xi = 2\delta e^{-a_1(x-x_0)}$,

$\delta = \frac{\sqrt{2MD}}{a_1}$,

$\rho = \frac{\sqrt{\lambda}}{a_1}$,

а константы M, a_1, x_0, D – заданы.

Перед обращением к подпрограмме SLIP1 параметрам были присвоены значения: A= 0, B = 20, N = 1601 (то есть $h = 0.0125$), EV0=0.6, EPS=10^{-4}, NT=200, LST=3, LPR=10, LX=20, T0=0.01.

Были вычислены таблицы коэффициентов дифференциального уравнения (1) на отрезке $0 \leq x \leq 20$ с шагом $h = 0.0125$ по формулам (10).

Начальная функция $y_0(x)$ была вычислена по формуле

$$y_0(x) = \begin{cases} x \sin px, & 0 \leq x \leq x_{ac}, \\ Ce^{-\sqrt{\lambda_0}x}, & x_{ac} \leq x \leq 20, \end{cases}$$

где

$$p = \pi(\vartheta + 1)x_{ac}^{-1}, \quad c = x_{ac} \sin p x_{ac}, \; x_{ac} = \begin{cases} 4\,, & \vartheta = 0, \\ 9\,, & \vartheta = 1. \end{cases}$$

Затем она была отнормирована таким образом, чтобы

$$\int_0^{20} y_0^2(x)dx = 1.$$

В подпрограмме ASIM вычисления велись по формулам (11в,с).

В подпрограммах DIF1 и D2F2 были использованы формулы

$d_1 = d_2 = 1,$

$f_1 = \sqrt{\lambda} - \sqrt{2MD}e^{ax_0},$

$f_2 = \sqrt{\lambda} - \sqrt{2MD}e^{-a(20-x_0)}.$

В подпрограмме CONTR контролировался знак λ_k(EV) и осуществлялся перевод λ_k в электронвольты (RES) . При перечисленных значениях параметров подпрограмма SLIP1 при $k = 1, 11, 21....$ печатает значения величин δ_k(DELTA), τ_k(TK), λ_k(EIGENVALUE), RES(PHYSICAL VALUE) и таблицу $y_k(x)$ (Y(X)) с шагом 0.25.

Сравнение результатов расчётов с помощью SLIP1 для потенциала Морзе (10) с аналитическим решением этой задачи позволяет судить о точности рассматриваемого метода.

При значениях параметров $a_1 = 0.67, D = 0.1055, x_0 = 2.15, M = 4.69$ форма потенциала (10) близка к форме потенциала для мезомолекулы $\rho\rho\mu$ в состоянии с орбитальным моментом $L = 0$ /2/.

Результаты сравнения приближенного и аналитического решения для основного состояния $\vartheta = 0$ приведены в таблице 1. Из нее видно, что относительная погрешность вычислений при $h = 0.0125$ не превосходит $5 * 10^{-4}$ как для собственного значения λ , так и для собственной функции $y(x)$. Это хорошо согласуется с теоретическими исследованиями сходимости /7/ для разностной задачи Штурма-Лиувилля.

Таблица 1

	Аналитическое решение (11)	Приближенное решение (SLIP1)
λ	4.353116E-1	4.353138E-1
x	$y_0(x)$ (11b)	$y_k(x), k = 101$
0	1.880934E-2	1.880620E-2
1	2.076937E-1	2.076925E-1
2	5.143351E-1	5.143384E-1
3	5.927258E-1	5.927270E-1
4	4.618110E-1	4.618091E-1
5	2.945003E-1	2.944977E-1
6	1.695095E-1	1.695076E-1
7	9.258160E-2	9.258044E-2
8	4.922659E-2	4.922594E-2
9	2.581728E-2	2.581694E-2
10	1.344527E-2	1.344509E-2
11	6.976966E-3	6.976873E-3
12	3.6I3804E-3	3.6I3756E-3
13	1.870052E-3	1.870028E-3
14	9.672385E-4	9.672260E-4
15	5.001570E-4	5.001506E-4
16	2.585975E-4	2.585942E-4
17	1.336947E-4	1.336930E-4
18	6.911779E-5	6.911688E-5
δ	1.34E-5	9.35E-11

Литература

1. *Г.Е. Шилов.* Математический анализ. Специальный курс. Физматгиз. Москва. I960.

2. *Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина.* ОИЯИ, Р4-6256, Дубна, 1972; ОИЯИ, Р4-6919, Дубна, 1973; ЖЭТФ, **65**, 28 (1973).

3. *Л.В. Канторович.* УМН, **11**, 99 (1956). *Н.Н. Калиткин.* ЖВМ и МФ, **5**, 1107 (1965).

4. *Е.П. Жидков, Г.И. Макаренко, И.В. Пузынин.* Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, **4**, 1, 127 (1973).

5. *С.К. Годунов, В.С. Рябенький.* Введение в теорию разностных схем. Физматгиз. Москва. 1962.

6. *А. Зоммерфельд.* Строение атома и спектры. ГТТИ, Москва, 1956.

7. *А.Н. Тихонов, А.А. Самарский.* ЖВМ и МФ, **1**, 784 (1961).