

P11-2001-120

Е.П.Жидков, Н.Б.Скачков¹, Т.М.Соловьева²

**ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ С ОПЕРАТОРОМ,
ЗАВИСЯЩИМ ОТ СОБСТВЕННОГО ЧИСЛА**

Направлено в журнал «Математическое моделирование»

¹E-mail: skachkov@cv.jinr.dubna.su

²E-mail: tanyusha@cv.jinr.dubna.su

1 Введение

В настоящей работе обсуждается проблема определения точности численных решений нелинейной спектральной задачи, полученных с помощью развитого ранее в работе [1] итерационного метода. Спектральные задачи с оператором, зависящим от собственного числа, в частности, возникают в рамках релятивистских уравнений для составных систем. Так описание спектра двухчастичных связанных состояний приводит к релятивистским вариантам уравнения Шредингера [2, 3, 4], которые в основном формулируются как интегральные уравнения в импульсном пространстве. В таких уравнениях ядро зачастую зависит от полной энергии системы (собственного числа уравнения).

Итерационный метод решения нелинейной спектральной задачи состоит в построении итерационной последовательности линейных спектральных задач, дискретизация которых производится методом Бубнова — Галеркина [5], и собственные числа и собственные функции полученных алгебраических линейных спектральных задач вычисляются с помощью программы F02AGF из стандартной библиотеки NAGLIB, реализующей QR-алгоритм [6]. Этот алгоритм заключается в построении последовательности разложений исходной матрицы на унитарную и правую треугольную, диагональные элементы которой при этом сходятся к собственным значениям исходной матрицы.

Построение итерационной последовательности линейных спектральных задач происходит следующим образом. При вычислении собственного числа с фиксированным номером k на первом итерационном шаге в ядро интегрального оператора подставляется начальное приближение этого числа. Начальное приближение выбирается исходя из физической постановки задачи или произвольно. На каждом последующем итерационном шаге в ядро подставляется собственное число с тем же номером k , выбранное из совокупности собственных чисел, вычисленных на предыдущем шаге процесса итераций. Признаком близости получаемых приближений к искомой величине собственного значения является достижение малой величины разности между двумя приближенными собственными значениями, вычисленными на двух следующих друг за другом итерационных шагах. Как только эта разность становится меньше заранее заданного числа, характеризующего точность решения задачи, итерационный процесс считается законченным. Собственное значение с соответствующей ему собственной функцией, полученные на последнем итерационном шаге, принимаются за искомое решение задачи. Как видно, отличие разработанного нами метода от известных методов решения нелинейных интегральных уравнений заключается в том, что итерируемой величиной здесь является собственное число, а не собственная функция.

2 Уравнения в импульсном пространстве для волновой функции двухчастичной системы

В настоящей работе при описании двухчастичной системы мы ограничимся состоянием с нулевым орбитальным числом и будем считать, что массы частиц, составляющих связанную систему, равны друг другу: $m_1 = m_2 = m$, а масса частицы, переносящей взаимодействие, равна нулю. В этом случае интегральное уравнение для волновой функции в системе центра инерции $|\vec{p}_1| = |\vec{p}_2| = p$ имеет вид [3]:

$$2\sqrt{m^2 + p^2}(M_n - 2\sqrt{m^2 + p^2})\psi_n(p) = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty \frac{m^2 dk}{\sqrt{m^2 + k^2}} V(p, k, M_n) \psi_n(k). \quad (1)$$

Здесь p и k — модули импульсов частиц в начальном и конечном состоянии; $\psi_n(p)$ — волновая функция системы; M_n и E_n — искомые масса системы связанных частиц и ее энергия связи,

$$M_n = 2m + E_n;$$

n — главное квантовое число, определяющее последовательность уровней в спектре энергий связи связанных состояний; а V — квазипотенциал, построенный из матричных элементов амплитуды взаимодействия, рассчитанной в рамках квантовой электродинамики (КЕД); α — постоянная тонкой структуры, $\alpha = 1/137.0359895$ [7].

В работе [8] было получено следующее выражение для релятивистского потенциала взаимодействия двух скалярных частиц в одномерном случае:

$$V(p, k, M_n) = 2 \ln \left| \frac{|p - k| + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n}{p + k + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n} \right|. \quad (2)$$

Релятивистские потенциалы, описывающие взаимодействие двух фермионов в рамках одновременного формализма, были получены в [9]. Если полный спин двухфермионной системы равен нулю, то соответствующая формула для $V(p, k, M_n)$ в приближении однофотонного обмена имеет вид :

$$V(p, k, M_n) = 2(m^2 - 2\sqrt{m^2 + p^2}\sqrt{m^2 + k^2}) \times \ln \left| \frac{p + k + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n}{|p - k| + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n} \right|. \quad (3)$$

В случае, когда полный спин системы равен единице, ядро $V(p, k, M_n)$ задается следующим образом :

$$V(p, k, M_n) = \{4R_1 \ln \left| \frac{p + k + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n}{|p - k| + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n} \right| + R_2 + R_3 + R_4\}pk/2, \quad (4)$$

где:

$$\begin{aligned}
R_1 &= \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma - \gamma'} \left(\frac{m(2\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2})}{pk} + \gamma \left(\frac{m}{\sqrt{m^2 + p^2} + m} + 2 \right) \right) + \\
&+ \gamma(2\gamma + m^2/(pk)) , \\
R_2 &= 2 \frac{\gamma'^2 - 1}{\gamma' - \gamma} \left(\frac{2\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2}}{pk} + \gamma' \left(\frac{2}{\sqrt{m^2 + p^2} + m} + 2 \right) \right) \times \\
&\times \ln \left| \frac{m^2 + \sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} + pk}{m^2 + \sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} - pk} \right| , \\
R_3 &= 4 \frac{\gamma'^2 - 1}{\gamma' - \gamma} \left(\frac{2\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2}}{pk} + \gamma' \left(\frac{m}{\sqrt{m^2 + p^2} + m} + 2 \right) \right) \times \\
&\times \frac{\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n}{(2\sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} + 2m^2 - p^2 - k^2)^{1/2}} \times \\
&\times \left[\operatorname{arctg} \frac{(2\sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} + 2m^2 - p^2 - k^2)^{1/2}}{p + k} - \right. \\
&\left. - \operatorname{arctg} \frac{(2\sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} + 2m^2 - p^2 - k^2)^{1/2}}{|p - k|} \right] , \\
R_4 &= \frac{|p - k|^3 - (p + k)^3}{3p^2 k^2} \times \frac{\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n}{\sqrt{m^2 + p^2} + m} + \\
&+ \frac{(p + k - |p - k|)(\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n)}{2pk} \left[-4m^2/pk - \right. \\
&- 8 \left(\gamma + \frac{p^2 + k^2}{2pk} \right) + 4m \frac{2\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2}}{pk} + \\
&+ 4 \left(\frac{m}{\sqrt{m^2 + p^2} + m} + 2 \right) \times \\
&\times \left. \left(\gamma + \frac{(\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2})^2}{2pk} \right) \right] + 4m^2/pk + 8\gamma - \\
&- 4m \frac{2\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2}}{pk} - 4 \left(\frac{m}{\sqrt{m^2 + p^2} + m} + 2 \right) (\gamma + \gamma') , \\
\gamma &= (p^2 + k^2 - (\sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M_n)^2)/(2pk) , \\
\gamma' &= (\sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} + m^2)/(pk) , \\
\gamma'' &= (\sqrt{m^2 + p^2} \sqrt{m^2 + k^2} - m^2)/(pk) .
\end{aligned}$$

Собственные значения уравнения (1) в случае квазипотенциала (2) были получены в [10]. Собственные значения уравнения (1) с потенциалами (3) и (4) были использованы при вычислении частот переходов между уровнями позитрония [11] и димьюония.

3 Аппроксимация исходной задачи по методу Бубнова – Галеркина

В операторной формулировке уравнение (1) записывается следующим образом:

$$A(\lambda)\psi - \lambda\psi = 0, \quad (5)$$

где оператор $A(\lambda)$ имеет вид:

$$A(\lambda)\psi(p) = 2\sqrt{m^2 + p^2}\psi(p) + \frac{\alpha}{\pi} \frac{m^2}{\sqrt{m^2 + p^2}} \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{m^2 + k^2}} V(p, k, \lambda)\psi(k). \quad (6)$$

Здесь $\lambda = \{\lambda_n\}$ — искомое множество собственных чисел ($n = 1, 2, 3, \dots$), $\psi = \{\psi_n\}$ — искомое множество собственных функций. Собственное число λ в (5) имеет смысл массы M связанной системы, то есть $\lambda = M$. Задачу (5) рассматриваем в гильбертовом пространстве L_2 на полуоси $[0, \infty)$ с условием нормировки собственных функций:

$$\|\psi\| = \sqrt{\int_0^\infty \psi^2(p) dp} = 1.$$

Для того, чтобы свести задачу (5) к проблеме собственных значений для матриц необходимо перейти от уравнения в пространстве $L_2[0, \infty)$ к системе уравнений в конечномерных пространствах. Одним из возможных способов перехода от непрерывной переменной к дискретной является проекционный метод Бубнова – Галеркина [5, 12].

Возьмем некоторый отрезок дискретизации R . Полагая $h = R \cdot N^{-1}$ (h — шаг дискретизации, N — количество узлов), определим для любого N систему базисных кусочно-линейных функций ϕ_i , где $i = 1, 2, \dots, N$, следующим образом:

$$\phi_i(p) = \begin{cases} 0; & p < (i-1)h; \\ p/h + 1 - i; & (i-1)h \leq p \leq ih; \\ -p/h + 1 + i; & ih \leq p \leq (i+1)h; \\ 0; & p > (i+1)h, \end{cases} \quad (7)$$

для $i = 1, \dots, N-1$ и

$$\phi_N(p) = \begin{cases} 0; & p < R-h; \\ p/h + 1 - N; & R-h \leq p \leq R; \\ 1; & p = R \\ (R/p)^3; & p > R. \end{cases} \quad (8)$$

для $i = N$. При определении функции ϕ_N учитывается известная асимптотика искомой собственной функции $\psi(p) = O(p^{-3})$ при $p \rightarrow \infty$.

Пусть H_N есть N -мерное подпространство гильбертова пространства L_2 , в котором определен базис кусочно-линейных функций $\{\phi_i\}$. Функцию $\psi_N(p) \in H_N$, приближающую решение $\psi(p) \in L_2$ задачи (5), ищем в виде

$$\psi_N(p) = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(p), \quad (9)$$

где $u_h = (u_1, \dots, u_N)^T$ – вектор неизвестных. Согласно методу Бубнова – Галеркина коэффициенты u_j определяются из требования, чтобы после подстановки (9) в левую часть уравнения (5) она оказалась ортогональной к ϕ_1, \dots, ϕ_N . С учетом представления (9) получаем

$$2\sqrt{m^2 + p^2} \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(p) + \frac{\alpha}{\pi} \frac{m^2}{\sqrt{m^2 + p^2}} \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{m^2 + k^2}} V(p, k, \lambda) \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(p) - \lambda \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(p) = 0. \quad (10)$$

Умножим скалярно (10) на вектор $\phi_i(p)$, $i = 1, \dots, N$, тогда

$$\sum_{j=1}^N u_j (\phi_i(p), 2\sqrt{m^2 + p^2} \phi_j(p)) + \sum_{j=1}^N u_j \frac{\alpha}{\pi} (\phi_i(p), \frac{m^2}{\sqrt{m^2 + p^2}} \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{m^2 + k^2}} \times \\ \times V(p, k, \lambda)) \phi_j(p) - \sum_{j=1}^N u_j (\phi_i(p), \lambda \phi_j(p)) = 0, \quad i = 1, \dots, N. \quad (11)$$

В гильбертовом пространстве H_N скалярное произведение двух векторов определяется как

$$(\phi_i(p), \phi_j(p)) = \int_0^\infty \phi_i(p) \phi_j(p) dp. \quad (12)$$

Тогда коэффициенты u_j определяются из системы уравнений

$$\sum_{j=1}^N (a_{ij} + r_{ij} - \lambda w_{ij}) u_j = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

где

$$a_{ij} = \int_0^\infty \phi_i(p) (2\sqrt{m^2 + p^2}) \phi_j(p) dp, \\ r_{ij} = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty \frac{\phi_i(p) m^2}{\sqrt{m^2 + p^2}} \int_0^\infty V(p, k, \lambda) \frac{\phi_j(k)}{\sqrt{m^2 + k^2}} dk dp, \\ w_{ij} = \int_0^\infty \phi_i(p) \phi_j(p) dp, \\ i = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, N.$$

Таким образом, в этом подходе задача решения интегрального уравнения сводится к нелинейной алгебраической задаче на собственные значения :

$$A_N(\lambda_N)u_h - \lambda_N u_h = 0 . \quad (13)$$

Будем называть λ_N дискретным собственным значением, а ψ_N , определенную выражением (9), с условием нормировки

$$\|\psi_N\| = \sqrt{\sum_{j=1}^N \psi_j^2 h} = 1 .$$

дискретной собственной функцией.

4 Оценки погрешности вычисления собственных чисел и собственных функций

Погрешность вычисления собственных чисел и собственных функций задачи (5) складывается из ошибки δ , вносимой итерационным методом решения нелинейной дискретной задачи (13) и погрешности Δ , обусловленной непосредственно аппроксимацией непрерывного уравнения (1) системой дискретных уравнений (13) по методу Галеркина.

4.1. В работе [1] было показано, что погрешность вычисления собственных чисел задачи (13) описанным выше итерационным методом оценивается неравенством

$$\delta\lambda = |\lambda_N - \lambda_N^{(l)}| \leq \frac{q^l}{1-q} |\lambda_N^{(1)} - \lambda_N^{(0)}| , \quad \lambda_N = \{\lambda_{n,N}\} , \quad (14)$$

где $\lambda_N^{(0)}$ – начальное приближение к дискретному собственному числу задачи (13); $\lambda_N^{(1)}$ – приближенное дискретное собственное число, полученное на 1-м итерационном шаге; $\lambda_N^{(l)}$ – приближенное дискретное собственное число, полученное на l -м итерационном шаге; λ_N – точное дискретное собственное число задачи (13) для данного главного квантового числа n и количества узлов N в сетке дискретизации, которое, вообще говоря, может быть различным для данного значения n ; l – номер итерации, на которой выполняется критерий останова:

$$|\lambda_N^{(l)} - \lambda_N^{(l-1)}| / |\lambda_N^{(l-1)}| < \epsilon .$$

В наших расчетах мы выбирали $\epsilon = 0.1 \cdot 10^{-10}$. При этом итерационный процесс обычно сходил за 6 – 7 итераций.

Коэффициент q , как показано в [1], определяется выражением

$$q = 2 \|\partial A_N(\lambda_N) / \partial(\lambda_N)\| .$$

Таблица 1: Погрешности $\delta\lambda$ собственных чисел ($n = 1, 2, 3, 4$), вносимые итерационным методом

n	Релятивистское уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$0.109 \cdot 10^{-14}$	$0.106 \cdot 10^{-14}$	$0.108 \cdot 10^{-14}$
2	$0.215 \cdot 10^{-14}$	$0.219 \cdot 10^{-14}$	$0.216 \cdot 10^{-14}$
3	$0.558 \cdot 10^{-14}$	$0.475 \cdot 10^{-14}$	$0.511 \cdot 10^{-14}$
4	$0.917 \cdot 10^{-14}$	$0.724 \cdot 10^{-14}$	$0.639 \cdot 10^{-14}$

Из численных экспериментов, результаты которых представлены в [13], а также при вычислении производной оператора $A_N(\lambda_N)$, задаваемого формулой (6), по λ_N для уравнения (1) было получено, что $q \sim 0.02$. В табл.1 приведены погрешности $\delta\lambda$ собственных чисел уравнения (1) с потенциалами (2), (3) и (4), вычисленные по формуле (14). Погрешности $\delta\psi$ собственных функций, вноси-

Таблица 2: Погрешности $\delta\psi$ собственных функций ($n = 1, 2, 3, 4$), вносимые итерационным методом

n	Релятивистское уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$0.315 \cdot 10^{-13}$	$0.322 \cdot 10^{-13}$	$0.324 \cdot 10^{-13}$
2	$0.570 \cdot 10^{-13}$	$0.585 \cdot 10^{-13}$	$0.593 \cdot 10^{-13}$
3	$0.847 \cdot 10^{-13}$	$0.811 \cdot 10^{-13}$	$0.815 \cdot 10^{-13}$
4	$0.125 \cdot 10^{-12}$	$0.121 \cdot 10^{-12}$	$0.131 \cdot 10^{-12}$

мые итерационным методом, как видно из табл.2, на один-два порядка больше погрешностей собственных чисел.

4.2. Оценим погрешность аппроксимации уравнения (1) по Галеркину. Как известно [14], аппроксимация спектральной задачи кусочно-линейными функциями, задаваемыми формулами (7) и (8), приводит к следующему разложению сеточного решения по степеням шага дискретизации h :

$$\begin{aligned}\lambda_N &= \lambda + c_1 h^2 + O(h^4), \\ \psi_N &= \psi + c_2 h + O(h^2),\end{aligned}$$

где c_1 и c_2 – константы, не зависящие от h .

Для оценки точности полученных дискретных собственных чисел и собственных функций мы провели серию численных экспериментов на последовательности расширяющихся интервалов R и последовательности сгущающихся сеток N .

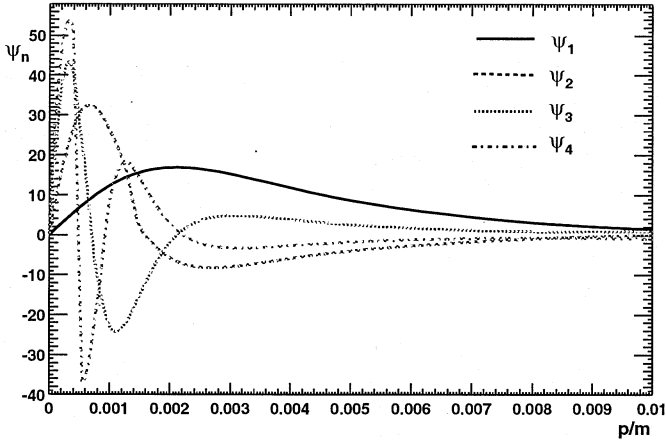


Рис. 1: Собственные функции ψ_n двухчастичного уравнения Шредингера(17)

Для уточнения результатов использовалась экстраполяция Ричардсона [15] относительно шага h , заключающаяся в получении приближенного решения более высокого порядка точности на основе приближенных значений, полученных на сетках с шагом h и $h/2$:

$$\lambda_{N_{1,2}} = -1/3\lambda_{N_1} + 4/3\lambda_{N_2} , \quad (15)$$

$$\psi_{N_{1,2}} = -1/3\psi_{N_1} + 4/3\psi_{N_2} . \quad (16)$$

Уточненное решение $\lambda_{N_{1,2}}, \psi_{N_{1,2}}$, построенное при помощи линейной комбинации из приближенных решений задачи (13) λ_{N_1} и λ_{N_2} (вычисленных с точностью порядка h^2 на сетках с количеством узлов N_1 и N_2 , причем $N_2 = 2N_1$), а также ψ_{N_1} и ψ_{N_2} (вычисленных с точностью порядка h на тех же сетках) аппроксимирует точное решение λ, ψ с порядком h^4 для собственных чисел и с порядком h^2 для собственных функций.

Задача (5) решалась для уравнения (1) с потенциалами (2) – (4), а также для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом [16]. Отрезок R (размерность отрезка дискретизации – p/m) выбирался исходя из требования обеспечить нужное число верных знаков в получаемом приближенном решении. Все представленные в настоящей работе результаты, приведенные в виде таблиц и рисунков, получены при $R = 0.16$ на двух сетках $N_1 = 400, h_1 = 0.0004$ и $N_2 = 800, h_2 = 0.0002$. Относительно малая величина R объясняется тем, что, как видно из рис.1, собственные функции рассматриваемых уравнений сильно локализованы в окрестности точки $p/m = 0$. На рис.1 показаны собственные функции ($n = 1, 2, 3, 4$) уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом, проэкстраполированные по формуле (16).

Таблица 3: Собственные значения двухчастичного уравнения Шредингера

n		E_N/m	$ \Delta E_N/m $	$ \frac{\Delta E_N/m}{E_N/m} $
1	N_1	$-0.1328516822 \cdot 10^{-4}$	$0.2767227 \cdot 10^{-7}$	0.21
	N_2	$-0.1330592236 \cdot 10^{-4}$	$0.691813 \cdot 10^{-8}$	$0.52 \cdot 10^{-1}$
	$N_{1,2}$	$-0.1331284041 \cdot 10^{-4}$	$0.8 \cdot 10^{-13}$	$0.60 \cdot 10^{-6}$
	exact	$-0.1331284049 \cdot 10^{-4}$		
2	N_1	$-0.0330347581 \cdot 10^{-4}$	$0.2473431 \cdot 10^{-7}$	0.74
	N_2	$-0.0332202640 \cdot 10^{-4}$	$0.618372 \cdot 10^{-8}$	0.19
	$N_{1,2}$	$-0.0332820993 \cdot 10^{-4}$	$0.19 \cdot 10^{-12}$	$0.57 \cdot 10^{-5}$
	exact	$-0.0332821012 \cdot 10^{-4}$		
3	N_1	$-0.0145626723 \cdot 10^{-4}$	$0.2293727 \cdot 10^{-7}$	1.6
	N_2	$-0.0147347001 \cdot 10^{-4}$	$0.573449 \cdot 10^{-8}$	0.39
	$N_{1,2}$	$-0.0147920427 \cdot 10^{-4}$	$0.23 \cdot 10^{-12}$	$0.16 \cdot 10^{-4}$
	exact	$-0.0147920450 \cdot 10^{-4}$		
4	N_1	$-0.0081003265 \cdot 10^{-4}$	$0.2201988 \cdot 10^{-7}$	2.6
	N_2	$-0.0082654734 \cdot 10^{-4}$	$0.0550519 \cdot 10^{-8}$	0.66
	$N_{1,2}$	$-0.0083205224 \cdot 10^{-4}$	$0.29 \cdot 10^{-12}$	$0.35 \cdot 10^{-4}$
	exact	$-0.0083205253 \cdot 10^{-4}$		

Как известно [16], уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом

$$(E_n - p^2)\psi_n(p) = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{\infty} \ln \left(\frac{|p-k|}{p+k} \right) \psi_n(k) dk \quad (17)$$

имеет точное решение, представимое в аналитическом виде:

$$E_n = -\alpha^2 m/n^2. \quad (18)$$

Здесь E_n – собственное число. Аналитические выражения первых четырех собственных функций уравнения (17) приведены в приложении. В табл.3 представлены результаты решения уравнения (17) в безразмерных единицах E/m . Здесь E_{N_1}/m – собственное число, вычисленное на сетке $N_1 = 400$; E_{N_2}/m – собственное число, вычисленное на сетке $N_2 = 800$; $E_{N_{1,2}}/m$ – собственное число, полученное с помощью экстраполяции решений E_{N_1}/m и E_{N_2}/m по Ричардсону (15); E_{exact}/m – собственное число, вычисленное по формуле (18). $|\Delta E_N/m|$ – абсолютная погрешность соответствующего собственного числа; $|\frac{\Delta E_N/m}{E_N/m}|$ – относительная погрешность, выраженная в процентах.

В табл.4 приведены собственные значения уравнения (1) с потенциалами (2), (3) и (4), вычисленные на двух сетках N_1 и N_2 и проэкстраполированные по Ричардсону. Для удобства сравнения результатов решения уравнения (1) с потенциалами (2) – (4) и уравнения (17) примем $\lambda_n = E_n/m$. Здесь λ_{N_1} – собствен-

Таблица 4: Собственные значения $\lambda_n = E_n/m$

n		Скалярное уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	λ_{N_1}	$-0.125596681 \cdot 10^{-4}$	$-0.125578313 \cdot 10^{-4}$	$-0.125568251 \cdot 10^{-4}$
	λ_{N_2}	$-0.125783960 \cdot 10^{-4}$	$-0.125772506 \cdot 10^{-4}$	$-0.125757616 \cdot 10^{-4}$
	$\lambda_{N_{1,2}}$	$-0.125846413 \cdot 10^{-4}$	$-0.125837237 \cdot 10^{-4}$	$-0.125820738 \cdot 10^{-4}$
2	λ_{N_1}	$-0.031227891 \cdot 10^{-4}$	$-0.025753563 \cdot 10^{-4}$	$-0.025749458 \cdot 10^{-4}$
	λ_{N_2}	$-0.031401487 \cdot 10^{-4}$	$-0.025925734 \cdot 10^{-4}$	$-0.025923145 \cdot 10^{-4}$
	$\lambda_{N_{1,2}}$	$-0.031459328 \cdot 10^{-4}$	$-0.025983124 \cdot 10^{-4}$	$-0.025981041 \cdot 10^{-4}$
3	λ_{N_1}	$-0.013747364 \cdot 10^{-4}$	$-0.011432167 \cdot 10^{-4}$	$-0.011432376 \cdot 10^{-4}$
	λ_{N_2}	$-0.013912034 \cdot 10^{-4}$	$-0.011594128 \cdot 10^{-4}$	$-0.011593488 \cdot 10^{-4}$
	$\lambda_{N_{1,2}}$	$-0.013966924 \cdot 10^{-4}$	$-0.011648115 \cdot 10^{-4}$	$-0.011647192 \cdot 10^{-4}$
4	λ_{N_1}	$-0.007633084 \cdot 10^{-4}$	$-0.006400734 \cdot 10^{-4}$	$-0.006399542 \cdot 10^{-4}$
	λ_{N_2}	$-0.007791145 \cdot 10^{-4}$	$-0.006560172 \cdot 10^{-4}$	$-0.006559730 \cdot 10^{-4}$
	$\lambda_{N_{1,2}}$	$-0.007843832 \cdot 10^{-4}$	$-0.006613318 \cdot 10^{-4}$	$-0.006613126 \cdot 10^{-4}$

ное число, вычисленное на сетке N_1 ; а λ_{N_2} – собственное число, вычисленное на сетке N_2 ; $\lambda_{N_{1,2}}$ – собственное число, проэкстраполированное по формуле (15).

В табл.5 приведены абсолютные и относительные погрешности собственных чисел уравнения (1) с потенциалами (2), (3), (4) и уравнения (17):

$$\begin{aligned} \Delta\lambda_{N_1} &= |\lambda_{N_1} - \lambda_{N_{1,2}}|, & (\Delta\lambda/\lambda)_{N_1} &= |\lambda_{N_1} - \lambda_{N_{1,2}}|/|\lambda_{N_{1,2}}| \cdot 100\%, \\ \Delta\lambda_{N_2} &= |\lambda_{N_2} - \lambda_{N_{1,2}}|, & (\Delta\lambda/\lambda)_{N_2} &= |\lambda_{N_2} - \lambda_{N_{1,2}}|/|\lambda_{N_{1,2}}| \cdot 100\%, \\ \Delta\lambda_{exact} &= |\lambda_{exact} - \lambda_{N_{1,2}}|, & (\Delta\lambda/\lambda)_{exact} &= |\lambda_{exact} - \lambda_{N_{1,2}}|/|\lambda_{exact}| \cdot 100\%. \end{aligned}$$

Величины λ_{N_1} , λ_{N_1} и $\lambda_{N_{1,2}}$ определены выше, а $\lambda_{exact} = E_{exact}/m$ – точное значение собственного числа (для кулоновского потенциала), вычисленное по формуле (18). Из табл.5 видно, что погрешности $\Delta\lambda_{N_1}$ и $\Delta\lambda_{N_2}$ собственных чисел всех четырех рассмотренных уравнений достаточно близки между собой. Поэтому можно ожидать, что погрешность $\Delta\lambda_{exact}$ экстраполированных собственных чисел уравнений (2), (3), (4) имеет такой же порядок величины, как и погрешность $\Delta\lambda_{exact}$ экстраполированных собственных чисел уравнения (17) с кулоновским потенциалом: $\Delta\lambda_{exact}^R \sim \Delta\lambda_{exact}^{S=0} \sim \Delta\lambda_{exact}^{S=1} \sim \Delta\lambda_{exact}^K$ – по крайней мере для первых четырех главных квантовых чисел.

Перейдем теперь к оценке погрешности собственных функций рассматриваемых уравнений. Как показали расчеты, собственные функции уравнения (1) с потенциалами (2) – (4) и уравнения (17) достаточно близки между собой. Так для первой ($n = 1$) собственной функции $\max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_{1,2}}^R - \psi(p)_{N_{1,2}}^K| \sim 0.30$,

$$\max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=0} - \psi(p)_{N_{1,2}}^K| \sim 0.44, \quad \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=1} - \psi(p)_{N_{1,2}}^K| \sim 0.57.$$

Таблица 5: Абсолютные и относительные (%) погрешности собственных чисел, полученных аппроксимацией по Галеркину

n	Вид погрешности	Кулоновское уравнение	Скалярное уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.2767219 \cdot 10^{-7}$	$0.236587 \cdot 10^{-7}$	$0.258924 \cdot 10^{-7}$	$0.252487 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	0.208	0.188	0.206	0.201
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.691805 \cdot 10^{-8}$	$0.67546 \cdot 10^{-8}$	$0.64731 \cdot 10^{-8}$	$0.63122 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.052	0.054	0.051	0.050
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.08 \cdot 10^{-12}$ $0.60 \cdot 10^{-6}$			
2	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.2473412 \cdot 10^{-7}$	$0.236586 \cdot 10^{-7}$	$0.229561 \cdot 10^{-7}$	$0.231583 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	0.743	0.752	0.883	0.891
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.618353 \cdot 10^{-8}$	$0.60764 \cdot 10^{-8}$	$0.57390 \cdot 10^{-8}$	$0.57896 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.186	0.193	0.221	0.223
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.19 \cdot 10^{-12}$ $0.57 \cdot 10^{-5}$			
3	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.2293704 \cdot 10^{-7}$	$0.210749 \cdot 10^{-7}$	$0.215948 \cdot 10^{-7}$	$0.214816 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	1.55	1.51	1.85	1.84
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.573426 \cdot 10^{-8}$	$0.55743 \cdot 10^{-8}$	$0.53987 \cdot 10^{-8}$	$0.53704 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.388	0.400	0.463	0.461
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.23 \cdot 10^{-12}$ $0.16 \cdot 10^{-4}$			
4	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.2202959 \cdot 10^{-7}$	$0.219564 \cdot 10^{-7}$	$0.212584 \cdot 10^{-7}$	$0.213584 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	2.65	2.80	3.21	3.23
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.550490 \cdot 10^{-8}$	$0.53728 \cdot 10^{-8}$	$0.53146 \cdot 10^{-8}$	$0.53396 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.662	0.685	0.804	0.807
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.29 \cdot 10^{-12}$ $0.35 \cdot 10^{-4}$			

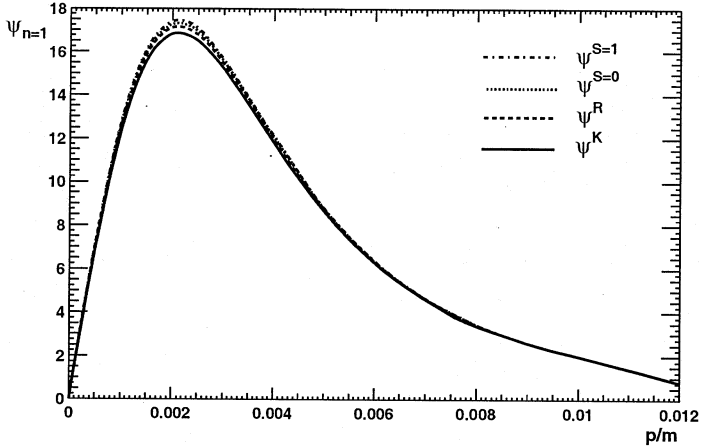


Рис. 2: Первая ($n=1$) собственная функция уравнения (1) с потенциалами ψ^R – (2), $\psi^{S=0}$ – (3), $\psi^{S=1}$ – (4) и ψ^K – уравнения (17)

Здесь $\psi(p)_{N_{1,2}}^R$ – собственная функция релятивистского скалярного уравнения (2); $\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=0}$ – собственная функция спинорного уравнения (3) с полным спином, равным нулю; $\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=1}$ – собственная функция спинорного уравнения (4) с полным спином, равным единице; $\psi(p)_{N_{1,2}}^K$ – собственная функция уравнения (17) с кулоновским потенциалом. На примере первой ($n = 1$) собственной функции рис.2 иллюстрирует тот факт, что различия между собственными функциями уравнения (1) с потенциалами (2), (3) и (4) и уравнения (17) весьма малы и проявляются на очень малом интервале p/m , приблизительно $[0.001, 0.005]$. Для остальных собственных функций ($n = 2, 3, \dots$) получены аналогичные результаты. На рис.2 $\psi^R = \psi(p)_{N_{1,2}}^R$, $\psi^{S=0} = \psi(p)_{N_{1,2}}^{S=0}$, $\psi^{S=1} = \psi(p)_{N_{1,2}}^{S=1}$ и $\psi^K = \psi(p)_{N_{1,2}}^K$.

В табл.6 приведены максимальные абсолютные и относительные погрешности собственных функций уравнения (1) с потенциалами (2) – (4) и уравнения (17):

$$\Delta\psi_{N_1} = \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_1} - \psi(p)_{N_{1,2}}| ,$$

$$(\Delta\psi/\psi)_{N_1} = \max_{0 \leq p/m \leq R} \{|\psi(p)_{N_1} - \psi(p)_{N_{1,2}}|/|\psi(p)_{N_{1,2}}|\} \cdot 100\% ,$$

$$\Delta\psi_{N_2} = \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_2} - \psi(p)_{N_{1,2}}| ,$$

$$(\Delta\psi/\psi)_{N_2} = \max_{0 \leq p/m \leq R} \{|\psi(p)_{N_2} - \psi(p)_{N_{1,2}}|/|\psi(p)_{N_{1,2}}|\} \cdot 100\%$$

$$\Delta\psi_{exact} = \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{exact} - \psi(p)_{N_{1,2}}| ,$$

$$(\Delta\psi/\psi)_{exact} = \max_{0 \leq p/m \leq R} \{|\psi(p)_{exact} - \psi(p)_{N_{1,2}}|/|\psi(p)_{exact}|\} \cdot 100\% .$$

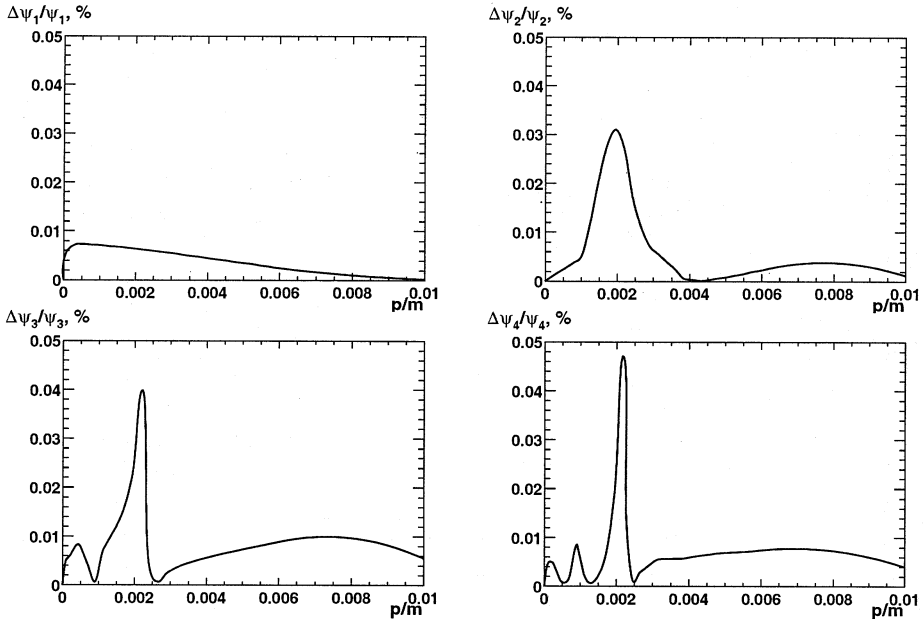


Рис. 3: Относительные погрешности $(\Delta\psi/\psi)_{exact}$ первых четырех ($n = 1, 2, 3, 4$) собственных функций уравнения Шредингера (17), выраженные в процентах

Здесь $\psi(p)_{N_1}$ – собственная функция, вычисленная на первой сетке; $\psi(p)_{N_2}$ – собственная функция, вычисленная на второй сетке; $\psi(p)_{N_{1,2}}$ – собственная функция, проэкстраполированная по Ричадсону (16); $\psi(p)_{exact}$ – точные значения собственной функции (для кулоновского потенциала). Из табл.6 видно, что для погрешности собственных функций, так же, как и для погрешности собственных чисел, справедливо приближенное равенство $\Delta\psi_{exact}^R \sim \Delta\psi_{exact}^{S=0} \sim \Delta\psi_{exact}^{S=1} \sim \Delta\psi_{exact}^K$.

На рис.3 приведены относительные погрешности $(\Delta\psi/\psi)_{exact}$ первых четырех ($n = 1, 2, 3, 4$) собственных функций уравнения (17), выраженные в процентах. Следует отметить, что абсолютные и относительные погрешности собственных функций достигают своего максимума при разных значениях p .

4.3. Сравнивая данные табл.1 и табл.5, можно видеть, что погрешности собственных чисел, вносимые итерационным методом, на один-два порядка меньше погрешностей аппроксимации. Поэтому при оценке погрешностей частот переходов между уровнями энергии позитрония и димюония можно принимать во внимание только погрешности, обусловленные аппроксимацией. Величины погрешностей $\delta\lambda + \Delta\lambda$ приведены во втором столбце табл.7. Собственные функции, полученные с помощью итерационного метода, мы использовали при расчете ширины распада парапозитрония и парадимюония. При вычислении ширины распада по методике, представленной в [17], дополнительная погрешность возника-

Таблица 6: Максимальные абсолютные и относительные (%) погрешности собственных функций, полученных аппроксимацией по Галеркину

n	Вид погрешности	Кулоновское уравнение	Скалярное уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$\Delta\psi_{N_1}$	0.135764	0.132987	0.131651	0.130436
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	1.11	1.09	1.08	1.07
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.033941	0.033537	0.033141	0.033086
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	0.278	0.265	0.254	0.253
	$\Delta\psi_{exact}$ $(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.001123 0.008			
2	$\Delta\psi_{N_1}$	0.648656	0.641843	0.638245	0.637634
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	6.83	6.79	6.61	6.59
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.162164	0.158749	0.153193	0.149587
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	1.73	1.69	1.65	1.62
	$\Delta\psi_{exact}$ $(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.001532 0.031			
3	$\Delta\psi_{N_1}$	1.388104	1.396723	1.381349	1.382153
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	16.34	17.11	15.86	15.93
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.347026	0.357630	0.342337	0.340538
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	4.29	4.36	4.22	4.18
	$\Delta\psi_{exact}$ $(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.001921 0.039			
4	$\Delta\psi_{N_1}$	2.527396	2.584620	2.569854	2.559875
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	18.67	19.98	19.66	19.63
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.631849	0.639653	0.625783	0.625929
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	5.43	5.47	5.38	5.39
	$\Delta\psi_{exact}$ $(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.002217 0.047			

Таблица 7: Погрешности $\delta + \Delta$ численного решения спектральной задачи с оператором, зависящим от собственного числа

n	$(\delta + \Delta)\lambda_{exact}$	$(\delta + \Delta)\psi_{exact}$
1	$0.1 \cdot 10^{-12}$	$0.12 \cdot 10^{-2}$
2	$0.2 \cdot 10^{-12}$	$0.16 \cdot 10^{-2}$
3	$0.2 \cdot 10^{-12}$	$0.20 \cdot 10^{-2}$
4	$0.3 \cdot 10^{-12}$	$0.23 \cdot 10^{-2}$

ет при операции численного интегрирования. Остаточный член в формуле Симпсона, с помощью которой мы проводим интегрирование, равен $\psi^{(IV)}h^5/90$. Следовательно, погрешность, вносимая численным интегрированием $O(h^4)$, существенно меньше погрешности аппроксимации $O(h^2)$. Поэтому, рассчитывая погрешности ширины распада позитрония и димюония, мы использовали значения погрешностей $\delta + \Delta$ собственных функций, вносимые аппроксимацией и итерационным методом. Они приведены в третьем столбце табл.7. Данные, приведенные в этой таблице, будут использоваться нами в наших дальнейших расчетах.

5 Заключение

В настоящей работе при оценке точности численного решения спектральной задачи с оператором, зависящим от собственного числа, получено, что погрешность, вносимая итерационным методом, на один-два порядка меньше, чем погрешность аппроксимации задачи методом Бубнова – Галеркина. Следовательно, точность вычисления собственных чисел и собственных функций спектральной задачи с оператором, зависящим от собственного числа, не уступает точности, с которой решается линейная спектральная задача.

6 Приложение

Приведем здесь аналитические выражения первых четырех собственных функций уравнения (17).

$$\psi_1(p) = p(2/\alpha)^{3/2} 4\sqrt{2/\pi} \frac{1}{((2p/\alpha)^2 + 1)^2},$$

$$\psi_2(p) = p(2/\alpha)^{3/2} 32/\sqrt{\pi} \frac{1 - 4(2p/\alpha)^2}{(1 + 4(2p/\alpha)^2)^3},$$

$$\psi_3(p) = p(2/\alpha)^{3/2} \sqrt{2/3\pi} \frac{36}{(9(2p/\alpha)^2 + 1)^2} \left(4 \left(\frac{9(2p/\alpha)^2 - 1}{9(2p/\alpha)^2 + 1} \right)^2 - 1 \right),$$

$$\psi_4(p) = p(2/\alpha)^{3/2} 64/\sqrt{2\pi} \frac{1}{(16(2p/\alpha)^2 + 1)^2} \times$$

$$\times \left(8 \left(\frac{16(2p/\alpha)^2 - 1}{16(2p/\alpha)^2 + 1} \right)^3 - \frac{16(2p/\alpha)^2 - 1}{16(2p/\alpha)^2 + 1} \right). \quad (19)$$

Формулы (19) при $\alpha = 2$ совпадают с формулами для собственных функций $\Psi(p) = \psi(p)/p$ одночастичного уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом, приведенными в ([18], стр.66).

Литература

1. *T.M.Solov'eva, E.P.Zhidkov.* Comp.Phys.Comm. **126** (2000) 168 – 177.
2. *A.A.Logunov, A.N.Tavkhelidze.* Nuovo Cim. **29** (1963) 380 – 399.
3. *V.G.Kadyshevsky, R.M.Mir-Kasimov, N.B.Skachkov.* Nuovo Cim. **55A** 2 (1968) 232 – 257.
4. *Р.Н.Фаустов.* // В кн.:Межд. зимняя школа теор. физики при ОИЯИ. 2 (Дубна, 1964) 108 – 116.
5. *Красносельский М.А., Вайникко Г.М., Забрейко П.П. и др.* Приближенное решение операторных уравнений. (Наука, Москва, 1969).
6. *Дж.Х.Уилкинсон.* Алгебраическая проблема собственных значений. (Наука, Москва, 1970).
7. *R.M.Barnett et al.* PDG. Phys. Rev. D **54** (1997) 21, 65.
8. *Б.А.Арбузов и др.* ТМФ **83** (1990) 175 – 185.
9. *В.В.Двоеглазов и др.* ЯФ **54** (1991) 658 – 668.
10. *М.М.Грегуш, Е.П.Жидков, Т.М.Макаренко и др.* Решение релятивистской задачи двух тел с нелинейной зависимостью от спектрального параметра. Сообщение ОИЯИ **P11-92-142**, (Дубна, 1992).
11. *T.M.Solov'eva.* Comp.Phys.Comm. **136** (2001) 208 – 211.
12. *А.А.Самарский.* Теория разностных схем. (Наука, Москва, 1983).
13. *B.N.Khoromskij, T.M.Makarenko, E.G.Nikonov et al.* //Proceedings of the International Conference on Programming and Mathematical Methods for Solving Physical Problems, Dubna, 1993. Ed. by Yu.Yu. Lobanov et al., (World Scientific Publ. 1994), pp. 210 - 214.
14. *Г.Стренг, Д.Фикс.* Теория метода конечных элементов. (Мир, Москва, 1977).
15. *Г.И.Марчук, В.В.Шайдуров.* Повышение точности решений разностных схем. (Наука, Москва, 1979).
16. *Fock V.A.* Zs. Phys. **98** (1935) 145 – 159.
17. *Г.А.Козлов и др.* ТМФ **60** (1984) 24 – 36.
18. *Г.Бете, Э.Солпитер.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. (Физматлит, Москва, 1960).

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июня 2001 года.

Жидков Е.П., Скачков Н.Б., Соловьева Т.М.
Оценка точности численного решения спектральной задачи
с оператором, зависящим от собственного числа

P11-2001-120

Спектральные задачи с оператором, зависящим от собственного числа, обычно возникают при рассмотрении релятивистских вариантов уравнения Шредингера в импульсном пространстве. Погрешность вычисления собственных чисел и собственных функций при численном решении таких уравнений складывается из ошибки, вносимой аппроксимацией непрерывного уравнения системой дискретных уравнений по методу Бубнова—Галеркина, и погрешности итерационного метода. В работе показано, что погрешность, обусловленная итерационным методом, на один-два порядка меньше, чем погрешность дискретизации задачи. Следовательно, точность вычисления собственных чисел и собственных функций спектральной задачи с оператором, зависящим от собственного числа, не уступает точности, с которой решается линейная спектральная задача.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем им. В.П.Джелепова и в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2001

Перевод авторов

Zhidkov E.P., Skachkov N.B., Solovieva T.M.
The Accuracy Estimation of the Numerical Solution of the Spectra
Problem with the Operator Depending on the Eigenvalue

P11-2001-120

The spectral problems with the eigenvalue-depending operator usually appear when the relative variants of the Schroedinger equation are considered in the impulse space. The eigenvalues and eigenfunctions calculation error caused by the numerical solving of such equations is the sum of the error entering the approximation of a continuous equation by the discrete equations systems with the help of the Bubnov—Galerkine method and the iterative method one. It is shown that the iterative method error is one-two order smaller than the problem of the discretisation one. Hence, the eigenvalues and eigenfunctions calculation accuracy of the spectral problem with the eigenvalue-depending operator is not worse than the linear spectral problem solution accuracy.

The investigation has been performed at the Dzhelepov Laboratory of Nuclear Problems and at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2001

Редактор М.И.Зарубина. Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 27.06.2001
Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. л. 1,7
Тираж 320. Заказ 52745. Цена 1 р. 70 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области