Доповіді
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

11 • 2015

МАТЕМАТИКА

УДК 519.624.2

Академік НАН України **В. Л. Макаров**

FD-метод у спектральних задачах для оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом на $(-\infty, \infty)$

Особливістю задач, які розглядаються, є необмеженість проміжку інтегрування і необмеженість поліноміального потенціалу в операторі Шрьодінгера, що обумовило відсутність у літературі обгрунтованих наближених методів їх розв'язування. У роботі запропоновано функціонально-дискретний (FD) метод з відповідним обгрунтуванням, який дає можливість одержувати розв'язок із будь-якою наперед заданою точністю. Результати, зокрема, можуть бути використані для знаходження основних та збуджених енергетичних станів, а також щільності ймовірностей квантово-механічних ангармонік і осциляторів із подвійною потенціальною ямою.

Ключові слова: спектральні задачі, власні значення, оператор Шрьодінгера, функції Куммера, експоненціально збіжний метод.

Розглядається задача

$$\begin{gathered} \frac{d^2u(x)}{dx^2} - 2x\frac{du(x)}{dx} + (\lambda - \varphi(x))u(x) = 0, \qquad x \in (-\infty, \infty), \\ \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} u^2(x)\, dx < \infty, \end{gathered} \tag{1}$$

що полягає в знаходженні власних значень λ_n і відповідних їм власних функцій $u_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, де потенціал $\varphi(x)$ є поліномом. Припускаємо, що нумерація власних значень вибрана таким чином, що

$$\lambda_0 < \lambda_1 < \ldots < \lambda_n < \ldots .$$

Інтерес дослідників до побудови ефективних методів знаходження розв'язку цієї задачі не послаблюється до сьогодні (див., наприклад, [1, 2]). Але у всіх авторів попередніх робіт відсутнє теоретичне обгрунтування запропонованих наближених методів, що обумовлено необмеженим проміжком інтегрування та необмеженістю потенціалу на ньому. У даній роботі пропонується новий підхід до розв'язування задачі (1) з його обгрунтуванням.

Застосуємо до задачі (1) найпростіший варіант FD-методу із $\overline{\varphi}(x) \equiv 0$ (див. [3]), який, у певному розумінні, є подібним до методу Адомяна [4], але в запропонованому вигляді (і це є суттєвим, особливо для доведення збіжності методу і для того випадку, коли асимптотична поведінка власних значень базової задачі (2) є еквівалентною $O(n^2)$) він у науковій літературі не зустрічався. Метод полягає в розв'язуванні рекурентної послідовності задач

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2u_n^{(0)}(x)}{dx^2} - 2x\frac{du_n^{(0)}(x)}{dx} + \lambda_n^{(0)}u_n^{(0)}(x) = 0, \qquad x \in (-\infty, \infty),\\
&\lambda_n^{(0)} = 2n, \qquad u_n^{(0)}(x) = H_n(x),
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} - 2x\frac{du_n^{(j+1)}(x)}{dx} + \lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}(x) =\\
&\qquad = -\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j-p+1)}u_n^{(p)}(x) + \varphi(x)u_n^{(j)}(x) \equiv F_n^{(j+1)}(x), \qquad x \in (-\infty, \infty),
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}u_n^{(j+1)}(x)u_n^{(0)}(x)\,dx = 0, \qquad j = 0, 1, \ldots,$$

$$\lambda_n^{(j+1)} = \frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\varphi(x)u_n^{(j)}(x)u_n^{(0)}(x)dx}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}[u_n^{(0)}(x)]^2dx}, \qquad j = 0, 1, \ldots. \tag{4}$$

Тут (2) — базова задача, $H_n(x)$ — поліноми Ерміта. За розв'язками задач (2)–(4) будуються наближення до власних значень і власних функцій m-го рангу

$$\overset{m}{u}_n(x) = \sum_{j=0}^{m}u_n^{(j)}(x), \qquad \overset{m}{\lambda}_n = \sum_{j=0}^{m}\lambda_n^{(j)}.$$

Застосування традиційного підходу доведення збіжності FD-методу (див. [1], [7]) у розглядуваній ситуації викликає суттєві труднощі. Тому скористаємось іншим підходом. З метою спрощення викладу проілюструємо його для конкретного випадку $n = 0$, $\varphi(x) = x^2$. Неважко показати, що розв'язок $(j+1)$-го рівняння з (3) має таке зображення

$$u_0^{(j+1)}(x) = \sum_{p=1}^{j+1}a_p^{(j+1)}H_{2p}(x),$$

де коефіцієнти потребують визначення. Подібне зображення мають розв'язки всіх рівнянь, що входять у (3). Підставимо ці зображення у диференціальне рівняння (3) і прирівняємо коефіцієнти при поліномах Ерміта з однаковии степенями. Тоді одержимо систему рівнянь

$$
\begin{aligned}
&\lambda_0^{(j+1)} = 2a_1^{(j)} + \frac{1}{2}\delta_{0,j},\\
&-4p\, a_p^{(j+1)} = -\frac{1}{2}a_p^{(j)} - 2\sum_{s=p}^{j-1} a_1^{(j-s)} a_p^{(s)} + \sum_{s=1}^{j} a_s^{(j)} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2} x^2 H_{2s}(x) H_{2p}(x)}{h_{2p}} dx =\\
&\qquad = -\frac{1}{2}a_p^{(j)} - 2\sum_{s=p}^{j-1} a_1^{(j-s)} a_p^{(s)} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}2^{2p}(2p)!} \sum_{s=1}^{j} a_s^{(j)} \times\\
&\qquad\quad \times \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\left[\frac{1}{2}H_{2s+2}(x) + (4s+1)H_{2s}(x) + 4s(2s-1)H_{2s-2}(x)\right] H_{2p}(x)\, dx =\\
&\qquad = -\frac{1}{2}a_p^{(j)} - 2\sum_{s=p}^{j-1} a_1^{(j-s)} a_p^{(s)} + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}a_{p-1}^{(j)} + (4p+1)a_p^{(j)} + 4(p+1)(2p+1)a_{p+1}^{(j)}\right],\\
&j = 1, 2, ..., j+1, \qquad a_p^{(j)} = 0, \qquad p > j.
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Процедура розв'язування алгебраїчної рекурентної системи (5) є алгоритмічною реалізацією FD-методу, яка використовує тільки звичайні алгебраїчні операції. На відміну від роботи [6], система (5) не тільки відіграє важливу роль для побудови алгоритму, а й має ключове значення при доведенні збіжності методу.

Справедливими є твердження.

Лема. *Мають місце співвідношення*

$$1^0.\quad \operatorname{sgn}(a_p^{(j)}) = (-1)^j, \qquad \forall p = \overline{1, j}, \qquad j = 1, 2, ...$$

$$2^0.\quad \operatorname{sgn}(\lambda_0^{(j)}) = (-1)^{j+1}, \qquad j = 1, 2, ...$$

$$3^0.\quad |\lambda_0^{(j+1)}| < |\lambda_0^{(j)}|, \qquad \lim_{j\to\infty} \lambda_0^{(j)} = 0.$$

За допомогою цієї леми і теореми Лейбніца про знакозмінні ряди доводимо нижчесформульоване твердження.

Теорема. *Нехай* $n = 0$, $\phi(x) = x^2$. *Тоді FD-метод для задачі (1) є збіжним відносно власного значення і має місце така оцінка точності:*

$$|\lambda_0 - \overset{m}{\lambda}_0| = \left|\sum_{j=m+1}^{\infty} \lambda_0^{(j)}\right| < |\lambda_0^{(m+1)}|.$$

Наведемо декілька перших поправок до власної функції і власного значення при $n = 0$:

$$u_0^{(0)}(x) = 1, \qquad \lambda_0^{(0)} = 0,$$

$$u_0^{(1)} = -\frac{1}{16}H_2(x), \qquad \lambda_0^{(1)} = \frac{1}{2},$$

$$u_0^{(2)}(x) = \frac{1}{32}H_2(x) + \frac{1}{512}H_4(x), \qquad \lambda_0^{(2)} = -\frac{1}{8},$$

$$u_0^{(3)}(x) = -\frac{5}{256}H_2(x) - \frac{1}{512}H_4(x) - \frac{1}{24576}H_6(x), \qquad \lambda_0^{(3)} = \frac{1}{16},$$

$$u_0^{(4)}(x) = \frac{7}{512}H_2(x) + \frac{7}{4096}H_4(x) + \frac{1}{16384}H_6(x) + \frac{1}{1572864}H_8(x), \qquad \lambda_0^{(4)} = -\frac{5}{128},$$

а також результати обчислень, що відображені в табл. 1. Як видно з цієї таблиці, наближення до точного власного значення з $n = 0$ за FD-методом парного рангу наближають його знизу, і їх послідовність є монотонно зростаючою, а непарного рангу — зверху, і їх послідовність є монотонно спадною.

Ілюстрацією збіжності FD-методу для $n = 0$ є табл. 2, у якій наведені квадрати норм нев'язок наближень за FD-методом від 1-го до 20-го рангів при $n = 0$:

$$\| \overset{m}{R}_0 \|^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} (\overset{m}{R}_0(x))^2 dx, \qquad m = 1, 2, \ldots, 20,$$

$$\overset{m}{R}_0(x) = \frac{d^2 \overset{m}{u}_0(x)}{dx^2} - 2x \frac{d\, \overset{m}{u}_0(x)}{dx} + (\overset{m}{\lambda}_0 - x^2)\, \overset{m}{u}_0(x).$$

Зауважимо, що збіжність є повільною. Для прискорення швидкості збіжності скористаємося загальною схемою FD-методу. Наблизимо коефіцієнт x^2 кусково-сталою функцією

$$\overline{\varphi}(x) = \begin{cases} a, & \leqslant c \\ b, & > c, \end{cases}$$

вибираючи сталі в такий спосіб: $a = 0{,}2711970183$, $b = 1{,}925341686$, $c = 1{,}047983469$. Даний вибір є наслідком мінімізації функціонала

$$\Phi(a, b, c) = \int\limits_{0}^{c} e^{-x^2} (x^2 - a)^2 dx + \int\limits_{c}^{\infty} e^{-x^2} (x^2 - b)^2 dx.$$

Таблиця 1

$\overset{(0)}{\lambda}_0 = 0$	$\overset{(10)}{\lambda}_0 = 0{,}4099311829$	$\overset{(20)}{\lambda}_0 = 0{,}4126671860$
$\overset{(1)}{\lambda}_0 = 0{,}5$	$\overset{(11)}{\lambda}_0 = 0{,}4179401398$	$\overset{(21)}{\lambda}_0 = 0{,}4156522024$
$\overset{(30)}{\lambda}_0 = 0{,}4133661557$	$\overset{(40)}{\lambda}_0 = 0{,}4136613430$	$\overset{(50)}{\lambda}_0 = 0{,}4138176548$
$\overset{(31)}{\lambda}_0 = 0{,}4150206423$	$\overset{(41)}{\lambda}_0 = 0{,}4147458294$	$\overset{(51)}{\lambda}_0 = 0{,}4145979414$
$\overset{(60)}{\lambda}_0 = 0{,}4139119961$	$\overset{(70)}{\lambda}_0 = 0{,}4139740317$	$\overset{(80)}{\lambda}_0 = 0{,}4140173749$
$\overset{(61)}{\lambda}_0 = 0{,}4145077746$	$\overset{(71)}{\lambda}_0 = 0{,}4144480686$	$\overset{(81)}{\lambda}_0 = 0{,}4144061393$

Таблиця 2

m	$\| \overset{m}{R}_0 \|^2$	m	$\| \overset{m}{R}_0 \|^2$	m	$\| \overset{m}{R}_0 \|^2$	m	$\| \overset{m}{R}_0 \|^2$
1	0,4154188713	6	0,1464031517	11	0,09623214440	16	0,07371339637
2	0,2932137821	7	0,1316623440	12	0,09054007513	17	0,07054482678
3	0,2279949337	8	0,1202924759	13	0,08549258634	18	0,06771056832
4	0,1913308915	9	0,1107495254	14	0,08112353060	19	0,06509892492
5	0,1564407586	10	0,1029744601	15	0,07718570942	20	0,06273609780

Розв'язок базової задачі

$$\frac{d^2u_0^{(0)}(x)}{dx^2} - 2x\frac{du_0^{(0)}(x)}{dx} + (\lambda_0^{(0)} - \overline{\varphi}(x)) = 0, \qquad x \in (-\infty, \infty),$$

$$u_0^{(0)}(0) = 1, \qquad \frac{du_0^{(0)}(0)}{dx} = 0$$

шукаємо у вигляді

$$u_0^{(0)}(x) = C_1 M\left(\frac{22711970183}{40000000000} - \frac{1}{4}\lambda_0^{(0)}, \frac{3}{2}, x^2\right)x +$$
$$+ \Gamma\left(\frac{22711970183}{40000000000} - \frac{1}{4}\lambda_0^{(0)}\right)\Big/\pi^{(1/2)}U\left(\frac{22711970183}{40000000000} - \frac{1}{4}\lambda_0^{(0)}, \frac{3}{2}, x^2\right)x,$$

якщо $|x| \leqslant c$, і

$$u_0^{(0)}(x) = C_3 U\left(\frac{22711970183}{40000000000} - \frac{1}{4}\lambda_0^{(0)}, \frac{3}{2}, x^2\right)x,$$

якщо $|x| > c$. Тут $U(\mu, \nu, z)$, $M(\mu, \nu, z)$ — функції Куммера (див. [5]). Для знаходження сталих C_1, C_3 та власного значення базової задачі $\lambda_0^{(0)}$ скористаємося початковою умовою $\dfrac{du_0^{(0)}(0)}{dx} = 0$ та умовами зшивки

$$u_0^{(0)}(c-0) = u_0^{(0)}(c+0), \qquad \frac{du_0^{(0)}(c-0)}{dx} = \frac{du_0^{(0)}(c+0)}{dx}.$$

У результаті прийдемо до трансцендентного рівняння відносно $\lambda_0^{(0)}$. Найменшим додатним його коренем буде

$$\lambda_0^{(0)} = 0{,}454062492636.$$

Використавши умову розв'язності рівняння для $u_0^{(1)}(x)$, одержимо

$$\lambda_0^{(1)} = -0{,}025360087746,$$

отже, застосувавши FD-метод першого рангу, отримаємо такий результат:

$$\overset{(1)}{\lambda_0} = \lambda_0^{(0)} + \lambda_0^{(1)} = 0{,}425507433067,$$

що з точки зору точності, як показують обчислення, є еквівалентними найпростішому варіанту FD-методу 5-го рангу.

Зауваження 1. Враховуючи характер залежності $\lambda_n^{(0)} = 2n$ від n та обгрунтування FD-методу, робимо висновок, що при його застосуванні до задач типу (1) він втрачає свою чудову властивість: чим більший порядковий номер шуканого власного значення, тим вища швидкість збіжності методу (див. [3, 7]). Тому, щоб досягти збіжності методу, якщо він є розбіжним, або досягти прискорення його швидкості збіжності, треба застосовувати загальну схему FD-методу.

Зауваження 2. Для випадку, коли потенціал у рівнянні (1) є сумою полінома та автономної нелінійності (типу Gross–Pitaevskii), так само, як і в лінійному випадку, будуємо алгоритм FD-методу, де використовуються тільки звичайні алгебраїчні операції.

Цитована література

1. *Kao Y.-M., Jiang T.-F.* Adomian's decomposition method for eigenvalue problems // Phys. Rev. E. – 2005. – **71**, No 3. – 036702, 7 p.
2. *Roy A. K., Gupta N., Deb B. M.* Time-dependent quantum-mechanical calculation of ground and excited states of anharmonic and double-well oscillators // Phys. Rev. A. – 2001. – **65**, No 1. – 012109, 7 p.
3. *Макаров В. Л.* О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма–Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами // Докл. АН СССР. – 1991. – **320**, № 1. – С. 34–39.
4. *Adomian G.* Solving frontier problems of physics: the Decomposition method. – Dordrecht: Kluwer, 1994. – 352 p.
5. *NIST* Handbook of Mathematical Functions / Eds. F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, C. W. Clarc. – New York: Cambridge Univ. Press, 2010. – http://dlmf.nist.gov.
6. *Макаров В. Л., Романюк Н. М.* Нові властивості FD-методу при його застосуванні до задач Штурма–Ліувілля // Доп. НАН України. – 2014. – № 2. – С. 26–31.
7. *Макаров В. Л.* FD-метод – експоненціальна швидкість збіжності // Журн. обчисл. та прикл. матем. – 1997. – № 82. – С. 69–74.

References

1. *Kao Y.-M., Jiang T.-F.* Phys. Rev. E, 2005, **71**, No 3: 036702, 7 p.
2. *Roy A. K., Gupta N., Deb B. M.* Phys. Rev. A, 2001, **65**, No 1: 012109, 7 p.
3. *Makarov V. L.* Dokl. AN SSSR, 1991, **320**, No 1: 34–39 (in Russian).
4. *Adomian G.* Solving frontier problems of physics: the Decomposition method, Dordrecht: Kluwer, 1994.
5. *Olver F. W. J., Lozier D. W., Boisvert R. F., Clarc C. W.,* editors. NIST Handbook of Mathematical Functions, New York: Cambridge University Press, 2010, http://dlmf.nist.gov.
6. *Makarov V. L., Romanyuk N. M.* Dop. NAN Ukraine, 2014, No 2: 26–31 (in Ukrainian).
7. *Makarov V. L.* J. Comp. and Appl. Math., 1997, No 82: 69–74 (in Ukrainian).

Інститут математики НАН України, Київ
Надійшло до редакції 25.06.2015

Академик НАН Украины **В. Л. Макаров**

FD-метод в спектральных задачах для оператора Шрёдингера с полиномиальным потенциалом на $(-\infty, \infty)$

Институт математики НАН Украины, Киев

Особенностью рассматриваемых задач является неограниченность интервала интегрирования и неограниченность полиномиального потенциала в операторе Шрёдингера, что обусловило отсутствие в литературе обоснованных приближенных методов их решения. В работе предложен функционально-дискретный (FD) метод с соответствующим обоснованием, дающий возможность получать решение с любой предварительно заданной точностью. Результаты, в частности, могут быть использованы для нахождения основных и возбужденных энергетических состояний, а также плотности вероятностей квантово-механических ангармоник и осцилляторов с двойной потенциальной ямой.

Ключевые слова: спектральные задачи, собственные значения, оператор Шрёдингера, функции Куммера, экспоненциально сходящийся метод.

Academician of the NAS of Ukraine **V. L. Makarov**

The FD-method in spectral problems for the Schrödinger operator with polynomial potential on $(-\infty, \infty)$

Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev

The boundary-value problem under study has two distinctive features: its integration interval is infinite, and the polynomial potential is unbounded. As a consequence, there is no justified numerical solution methodology available in the literature. This article offers one. We apply the Functionally-Discrete (FD) method to the mentioned problem and supply the justification of its convergence. The proposed method enables one to obtain the numerical solution to the problem with an arbitrarily prescribed precision. Among other areas, the results of this work can be applied to calculate the quantum anharmonic oscillator energy states (ground and excited), as well as the energy states of the oscillators with double-well potential.

Keywords: spectral problems, eigenvalues, Schrödinger operator, Kummer's functions, exponentially convergent method.