УДК 519.6:517.927

Б.М.Ляшенко

ОБЧИСЛЕННЯ ВЛАСНИХ ЗНАЧЕНЬ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА З ПОТЕНЦІАЛОМ $x^2+\lambda x^2/(1+gx^2)$ МЕТОДОМ ДВОСТОРОННЬОЇ АПРОКСИМАЦІЇ

Пропонується метод двосторонньої апроксимації для відшукування з гарантованою точністю власних значень оператора Шредінгера зі згаданим у назві роботи потенціалом.

Ряд актуальних проблем теоретичної фізики потребує ретельного дослідження поведінки власних значень рівняння Шредінгера

$$u'' - (V(x) - E)u = 0 \tag{1}$$

з $V(x) = x^2 + \lambda x^2/(1+gx^2)$ (2)

як функції деяких параметрів λ, g.

Виходячи із виду потенціальної функції (2), маємо сингулярну задачу про власні значення на інтервалі $(-\infty,\infty)$ і необмеженим зростанням потенціальної функції $V(x)$ при $|x| \to \infty$.

Певні дослідження цієї проблеми проведені розвиненням розв’язання рівняння (1) в степеневі ряди по парних і непарних степенях [1] за допомогою варіаційного методу Релея-Рітца [2], з використанням три-, п’яти-, семиточкових різницевих схем [3]. Однак жоден зі згаданих методів розв’язування задач про власні значення, незважаючи на велику кількість наведених значущих цифр в отриманих результатах, не дає гарантованої точності шуканих власних значень поставленої сингулярної задачі.

Для розв’язування сингулярної задачі (1),(2) з умовами обмеженості власної функції в точках сингулярності

$$|u(-\infty)| < \infty, \quad |u(\infty)| < \infty \tag{3}$$

пропонується метод двосторонньої апроксимації [4] власних значень, згідно з яким власні значення сингулярної задачі (1)-(3) апроксимуються відповідними власними значеннями допоміжних несингулярних задач на відрізку $[c,d]$ з виключеними сингулярними точками

$$y'' - (V(x) - \mu)y = 0, \qquad y(c) = 0, \quad y(d) = 0; \tag{4}$$

$$z'' - (V(x) - \nu)z = 0, \qquad z'(c) = 0, \quad z'(d) = 0. \tag{5}$$

При $V(x) - E > 0$ для $x \in R\setminus[c,d]$ мають місце нерівності $\nu < E < \mu$.

Для чисельного розв’язування задач (5) і (4) застосуємо відповідно триточкові різницеву та варіаційно-різницеву схеми, що забезпечують наближення знизу і зверху до власних значень сингулярної задачі. Отже, маємо

$$\nu_k^h \le E_k \le \mu_k^h. \tag{6}$$

Побудуємо розрахункові різницеві схеми для розв’язування задачі (1)-(3). Для цього на відрізку $[c, d]$ введемо різницеву сітку $\omega_h = \{x_0 = c, \quad x_n = d, \quad h = (d-c)/n, \quad x_{i+1} = x_i + h, \quad i = \overline{0,n-1}\}$.

Варіаційно-різницева схема другого порядку точності для задачі (4) має вигляд

$$\left(1 - \frac{h^2}{6}(V_i - \mu^h)\right)y_{i-1} + \left(-2 - \frac{2}{3}h^2(V_i - \mu^h)\right)y_i + \left(1 - \frac{h^2}{6}(V_i - \mu^h)\right)y_{i+1} = 0, \tag{7}$$

$$y_0 = 0, \quad y_n = 0.$$

Різницева схема другого порядку точності для задачі (5) приймає вигляд

$$z_{i-1} + \left(-2 - h^2(V_i - \nu^h)\right)z_i + z_{i+1} = 0, \tag{8}$$

$$. z_1 = z_0\left(1 + \frac{h^2}{2}(V_0 - \nu^h)\right), \quad z_{n-1} = z_n\left(1 + \frac{h^2}{2}(V_n - \nu^h)\right).$$

Точки $x=c$, $x=d$ урізання області означення задачі обираємо так, щоб отримана похибка двосторонньої апроксимації не перевищувала заданої точності ε шуканих власних значень $\mu_k - \nu_k \le \varepsilon$.

Застосуємо побудовані розрахункові схеми (7),(8) до розв’язування задачі (1)-(3). Перш за все, врахвуючи парність потенціальної функції (2), задачу (1)-(3) зводимо до задачі на півінтервалі $[0,\infty)$, ставлячи в точці симетрії $x=0$ крайову умову:

а) $u'(0) = 0$ для парних власних функцій;

б) $u(0) = 0$ для непарних власних функцій.

Оскільки $V'(0) = 0$, то для варіаційно-різницевої схеми крайову умову $y'(0) = 0$ можемо апроксимувати співвідношенням $y_1 = y_0\left(1 + \frac{h^2}{2}(V_0 - \mu^h)\right)$.

Проведемо числові дослідження для вибору точки $x = d$ урізання області означення задачі та величини кроку h скінченнорізницевої сітки ω_h для отримання власних значень сингулярної задачі (1)-(3) із заданою точністю ε =10^{-7}.

Таблиця 1

d	ν_1	μ_1	ν_2	μ_2	ν_3	μ_3
3	0.9991033	1.0009707	4.8956764	5.0827615	8.3355173	9.9092967
4	0.9999989	1.0001891	4.9995487	5.0008740	8.9762065	9.0199300
5	0.9999995	1.0001882	4.9999992	5.0004716	8.9999703	9.0006629
6	1.0000000	1.0001882	4.9999994	5.0004714	8.9999976	9.0006377
7	1.0000000	1.0001882	4.9999994	5.0004714	8.9999976	9.0006377

Точку $x = d$ урізання області означення задачі обираємо так, щоб отримана похибка двосторонньої апроксимації не перевищувала заданої величини ε. На підставі числових досліджень перших трьох власних значень з парними власними функціями для $\lambda = 0, g = 0$ при h=0.001 (див. табл. 1) обираємо d=6.

Таблиця 2

h	ν_1	μ_1	ν_2	μ_2	ν_3	μ_3
0.01	0.9999937	1.0018889	4.9999188	5.0047833	8.9997437	9.0066014
0.005	0.9999984	1.0009424	4.9999797	5/0023714	8.9999359	9.0032377
0.001	1.0000000	1.0001882	4.9999994	5.0004714	8.9999976	9.0006377
0.0005	1.0000000	1.0000941	5.0000000	5.0002359	8.9999976	9.0003190

Результати обчислень при різних значеннях кроку сітки h для $\lambda = 0,\ g = 0,\ d = 6$ дозволяють обрати крок різницевої сітки h=0.001. Відзначимо, що, скориставшись методом екстраполяції кроку h різницевої сітки до нуля[5], неважко встановити аналітичну залежність числових результатів від вибору кроку h, а також уточнені власні значення різницевої задачі.

Таблиця 3

g	λ	0.1	0.5	1	10	100	500
0.1	E_1	1.0431736	1.2030395	1.3805317	3.2502606	9.9761739	22.308399
	E_2	5.1810940	5.8715828	6.6679179	15.729329	49.292614	110.94549
	E_3	9.2728144	10.333500	11.593428	27.214245	87.444481	198.39469
0.5	E_1	1.0312135	1.1515632	1.2929503	3.0168538	9.6921522	22.014922
	E_2	5.0930571	5.4632091	5.9206294	12.948030	45.636515	107.14364
	E_3	9.1147731	9.5732429	10.144720	19.906524	76.252486	186.54230
1	E_1	1.0241095	1.1185459	1.2323506	2.7823301	9.3594131	21.658719
	E_2	5.0589626	5.2948883	5.5897782	10.701024	41.441059	102.55782
	E_3	9.0683694	9.3419379	9.6840395	15.818867	64.187367	172.53162
10	E_1	1.0059428	1.0296850	1.0592968	1.5800222	5.7939412	16.732735
	E_2	5.0082798	5.0414112	5.0828470	5.8327669	13.628770	48.065908
	E_3	9.0087972	9.0440006	9.0880158	9,8822963	17.972083	54.563439
100	E_1	1.0008410	1.0042054	1.0084105	1.0840633	1.8363358	5.0836837
	E_2	5.0009269	5.0046371	5.0092749	5.0927612	5.9283279	9.6603761
	E_3	9.0009462	9.0047406	9.0094836	9.0948623	9.9491586	13.757724
500	E_1	1.0001849	1.0009245	1.0018491	1.0184910	1.1848602	1.9231762
	E_2	5.0001922	5.0009633	5.0019274	5.0192793	5.1928021	5.9640911
	E_3	9.0001924	9.0009714	9.0013452	9.0194734	9.1947585	9.9738815

Власні значення, отримані методом двосторонньої апроксимації при d=6, h=0.001 і наведені в табл.3, добре узгоджуються з результатами, отриманими іншими авторами [1,2].

ЛІТЕРАТУРА

1. Chaudhuri R.N., Mukherjee B. On the Schrodinger equation for the interaction $x^2 + \lambda x^2 / (1 + gx^2)$ // J. Phys. A: Math. Gen. -1983. -Vol. 16, №17. -P. 4031-4038.
2. Fernandez F.M., Meson A.M., Castro E.A. Acurate calculation of the eigenvalue of the $x^2 + \lambda x^2 /(1 + gx^2)$ // J. Comput. Phys. -1983. -Vol. 51, №3. -P. 519-526.
3. Fack V., Vanden Berghe G. A finite difference approach for the calcucation of perturbed oscillator energies// J. Phys. A: Math. Gen. -1985. -Vol. 18, №17. -P. 3357-3363.
4. Ляшенко Б.Н. Методы решения сингулярных задач Штурма-Лиувилля.. -К.:Либідь, 1991. -126 с.
5. Ляшенко Б.Н. Исследование конечноразностного решения сингулярных задач на собственные значения методами статистического анализа//Деп. в УкрНИИНТИ. -№2932-Ук88 от 23.11.88. -9 с.

Ляшенко Борис Миколайович - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри математики Житомирського державного педагогічного інституту ім. І.Франка.

Наукові інтереси:

- математичне моделювання й обчислювальні методи;
- інформатика та методика її викладання.