

ТОЧНІ ТА НАБЛИЖЕНІ РОЗВ'ЯЗКИ СПЕКТРАЛЬНИХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ШРЬОДІНГЕРА НА $(-\infty, \infty)$ З ПОЛІНОМІАЛЬНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ

New exact representations for the solutions of numerous one-dimensional spectral problems for the Schrödinger operator with polynomial potential are obtained by using a technique based on the functional-discrete (FD) method. In cases where the ordinary FD-method is divergent, we propose to use its modification, which proved to be quite efficient. The obtained theoretical results are illustrated by numerical examples.

С помощью функционально-дискретного FD-метода найдены точные решения ряда одномерных спектральных задач для оператора Шредингера с полиномиальным потенциалом. В случаях, когда традиционный FD-метод является расходящимся, предложена его модификация, которая оказалась достаточно эффективной. Теоретические результаты проиллюстрированы на численных примерах.

Вступ. Розглянемо задачу

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - 2x \frac{du(x)}{dx} + (\lambda - \varphi(x))u(x) = 0, \quad x \in (-\infty, \infty),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} u^2(x) dx < \infty, \quad (1)$$

що полягає у знаходженні власних значень λ_n і відповідних їм власних функцій $u_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, де потенціал $\varphi(x)$ є поліномом. Припускаємо, що нумерацію власних значень вибрано таким чином, що

$$\lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n < \dots$$

Інтерес дослідників до побудови точних розв'язків та ефективних методів знаходження наближених розв'язків цієї задачі не послаблюється до сьогодні (див., наприклад, [1–6]). Варто зазначити, що в усіх роботах, які стосуються точних розв'язків, автори не звернули увагу на тісний зв'язок диференціального рівняння (1) з рівнянням Нейп'а. Теоретичні дослідження цього рівняння вже давно інтенсивно проводяться (див. [7]). Результати цих досліджень впроваджено в систему комп'ютерної алгебри Maple, де в розділі меню „Help” містяться умови, за яких функції Нейп'а перетворюються на поліноми. Але в усіх авторів відсутнє теоретичне обґрунтування застосованих наближених методів, що зумовлено необмеженим проміжком інтегрування та необмеженістю потенціалу на ньому. В даній роботі запропоновано новий підхід до розв'язування задачі (1) зі строгим його обґрунтуванням, який в окремих випадках приводить до точних аналітичних розв'язків (див. пп. 1, 2, результати яких частково були анонсовані у [8]). Для тих поліноміальних потенціалів, для яких традиційний FD-метод є розбіжним, запропоновано його модифікацію, що виявилась достатньо ефективною (див. п. 3). Теоретичні результати проілюстровано чисельними прикладами. Вони можуть бути використані для знаходження основних та збуджених енергетичних станів енергії ангармонічних осциляторів і осциляторів з подвійною потенціальною ямою.

1. Знаходження точних розв'язків. Застосуємо до задачі (1) найпростіший варіант FD-методу з $\bar{\varphi}(x) \equiv 0$ (див. [9, 10]), який, фактично, є методом гомотопій та за своєю ідеологією аналогічний методу Адомяна [11]. Він полягає у розв'язуванні рекурентної послідовності задач

$$\frac{d^2 u_n^{(0)}(x)}{dx^2} - 2x \frac{du_n^{(0)}(x)}{dx} + \lambda_n^{(0)} u_n^{(0)}(x) = 0, \quad x \in (-\infty, \infty), \quad (2)$$

$$\lambda_n^{(0)} = 2n, \quad u_n^{(0)}(x) = H_n(x),$$

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

$$x \in (-\infty, \infty), \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} u_n^{(j+1)}(x) u_n^{(0)}(x) dx = 0, \quad j = 0, 1, \dots,$$

$$\lambda_n^{(j+1)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \varphi(x) u_n^{(j)}(x) u_n^{(0)}(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} [u_n^{(0)}(x)]^2 dx}, \quad j = 0, 1, \dots \quad (4)$$

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

$$u_n^m(x) = \sum_{j=0}^m u_n^{(j)}(x), \quad \lambda_n^m = \sum_{j=0}^m \lambda_n^{(j)}.$$

Традиційний підхід до доведення збіжності FD-методу (див. [9, 10]) у даному випадку застосувати не вдалося, тому ми використали інший. З метою спрощення продемонструємо його для конкретного випадку $n = 0$, $\varphi(x) = x^2$. Неважко показати, що розв'язок $(j + 1)$ -го рівняння з (3) має вигляд

$$u_0^{(j+1)}(x) = \sum_{p=1}^{j+1} a_p^{(j+1)} H_{2p}(x), \quad (5)$$

де коефіцієнти повинні бути визначені. Аналогічний вигляд мають розв'язки всіх рівнянь, що входять у (3). Підставимо вираз із (5) у диференціальне рівняння (3) і прирівняємо коефіцієнти при поліномах Ерміта однакового степеня. Тоді одержимо систему рівнянь

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(j+1)} &= 2a_1^{(j)} + \frac{1}{2} \delta_{0,j} = \frac{(-1)^j (2j-1)!}{2^{2j-1} (j-1)! (j+1)!} + \frac{1}{2} \delta_{0,j}, \\ -4p a_p^{(j+1)} &= -\frac{1}{2} a_p^{(j)} - 2 \sum_{s=p}^{j-1} a_1^{(j-s)} a_p^{(s)} + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} a_{p-1}^{(j)} + \right. \\ & \left. + (4p+1) a_p^{(j)} + 4(p+1)(2p+1) a_{p+1}^{(j)} \right], \quad p = 1, 2, \dots, j+1, \quad j = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (6)$$

$$a_p^{(j)} = 0, \quad p > j.$$

Процедура розв'язування алгебраїчної рекурентної системи (6) є алгоритмічною реалізацією FD-методу, у якій використовуються лише елементарні арифметичні операції над символами. На відміну від роботи [12] система (6) не тільки відіграє важливу роль для побудови алгоритму, але й має ключове значення для доведення збіжності методу. Не записуючи окремо розв'язок рекурентної системи рівнянь (6), сформулюємо більш загальний результат.

Теорема. Нехай $\varphi(x) = x^2$. Тоді FD-метод для задачі (1) є експоненціально збіжним і в границі дає точний розв'язок цієї задачі:

$$\lambda_n = (2n+1)\sqrt{2} - 1, \\ u_n(x) = \frac{(-1)^{\lfloor n/2 \rfloor}}{(n)!} H_n(2^{1/4}x) \exp(-1/2x^2(\sqrt{2} - 1)), \quad n = 0, 1, \dots \quad (7)$$

Дана теорема є уточненням відповідного результату з [1] і посиленням результатів автора з [8]. Доведення проводиться з використанням системи комп'ютерної алгебри Maple. Спочатку покажемо, якого вигляду набирають формули (6). Використовуючи вираз

$$u_{2n}^{(j)}(x) = \sum_{p=-\min(j,n), p \neq 0}^j a_{2n+2p}^{(j)} H_{2n+2p}(x),$$

отримуємо

$$\lambda_{2n}^{(j+1)} = \frac{1}{4} a_{2n-2}^{(j)} + 2(n+1)(2n+1) a_{2n+2}^{(j)}, \\ -4p a_{2n+2p}^{(j+1)} = - \sum_{s=|p|}^j \lambda_{2n}^{(j+1-s)} a_{2n+2p}^{(s)} + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} a_{2n+2p-2}^{(j)} + (4n+4p+1) a_{2n+2p}^{(j)} + 4(n+p+1)(2n+2p+1) a_{2n+2p+2}^{(j)} \right], \quad p = 1, 2, \dots, j+1, \\ j = 0, 1, \dots, \quad a_{2n+2p}^{(j)} = 0, \quad p > j, \quad p = -\overline{\min(j+1, n), j+1}, \quad j = 0, 1, \dots$$

За допомогою математичної індукції доводимо, що

$$\lambda_{2n}^{(j+1)} = (4n+1) \lambda_0^{(j+1)}. \quad (8)$$

Знайти аналітичний вигляд усіх коефіцієнтів $a_{2n,k}$ достатньо складно, тому доведення формул (7) проводимо таким чином. Спочатку, використовуючи (6), (8), знаходимо

$$\lambda_{2n} = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_{2n}^{(j)} = 4n + (4n+1)/(1+\sqrt{2}).$$

Потім підставляємо знайдене λ_{2n} у рівняння (1) і розв'язуємо його за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple для різних фіксованих n при виконанні умов

$$u_{2n}(0) = 1, \quad \frac{du_{2n}(0)}{dx} = 0.$$

Проаналізувавши одержані результати, отримаємо формулу для $u_{2n}(x)$ у (7). Аналогічно доводимо формулу для $u_{2n+1}(x)$ у (7).

Зауваження 1. Враховуючи характер залежності $\lambda_n^{(0)} = 2n$ від n та обґрунтування 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 [9, 10]. Якщо степінь поліноміального потенціалу $\varphi(x)$ більший або дорівнює трьом, то запропонований найпростіший варіант FD-методу буде розбіжним, і застосування загальної схеми методу із наближенням потенціалу кусково-сталю функцією є проблематичним через необмеженість останнього та необмеженість проміжку, на якому він повинен бути наближений. Тому, щоб досягти збіжності методу, якщо він у традиційних підходах є розбіжним, потрібно застосовувати іншу 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 у лінійному випадку, варто будувати символічний алгоритм FD-методу з використанням лише арифметичних операцій.

Зауваження 3. За допомогою нашого методу можна довести, що всі точні власні значення для випадку

$$\varphi(x) = b_1 x$$

мають вигляд

$$\lambda_n = 4n - \frac{b_1^2}{4}, \quad n = 0, 1, \dots,$$

а відповідні точні власні функції можуть бути виражені через поліноми Лагерра [13, 14]

$$u_n(x) = \exp(-x/2) \frac{L_n^{1/2} \left(\left(x + \frac{b_1}{2} \right)^2 \right)}{L_n^{1/2} \left(\left(\frac{b_1}{2} \right)^2 \right)}.$$

Природним чином виникає питання: чи можна було б відразу розглянути загальний випадок $\varphi(x) = b_1 x + b_2 x^2$, з якого, як наслідки, впливали б попередні два випадки? Виявляється, що не можна. Тому цей загальний випадок розглянемо окремо. Враховуючи набутий на попередніх окремих випадках досвід, не застосовуючи FD-метод, лише використовуючи систему комп'ютерної алгебри Maple, знаходимо аналітичний розв'язок

$$\lambda_n = (2n + 1) \sqrt{b_2} - \frac{b_1^2}{4b_2},$$

$$u_{2n}(x) = \exp \left(\frac{-x(b_1 + b_2 x^2)}{2\sqrt{b_2}} \right) \frac{L_n^{-1/2} \left(\frac{(b_1 + 2b_2 x)^2}{4b_2^{3/2}} \right)}{L_n^{-1/2} \left(\frac{(b_1)^2}{4b_2^{3/2}} \right)}, \quad (9)$$

$$u_{2n+1}(x) = \exp \left(\frac{-x(b_1 + b_2 x^2)}{2\sqrt{b_2}} \right) \frac{b_1 + 2b_2 x}{2b_2^{3/4}} \frac{L_n^{1/2} \left(\frac{(b_1 + 2b_2 x)^2}{4b_2^{3/2}} \right)}{L_n^{1/2} \left(\frac{(b_1)^2}{4b_2^{3/2}} \right)}.$$

З вигляду формул (9) видно, що з них не можна одержати, як наслідок, випадок потенціалу $\varphi(x) = b_1 x$, про що зазначалося вище.

2. Алгоритм чисельного розв'язування задачі Штурма–Ліувілля з поліноміальним потенціалом на $(-\infty, \infty)$. Розглядаємо задачу, що й у п. 1:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + (\lambda - x^2 - q(x))u(x) &= 0, \quad x \in (-\infty, \infty), \\ \|u\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} [u(x)]^2 dx < \infty, \\ q(x) &= \sum_{p=1}^r \alpha_p x^p \geq \kappa > -\infty, \end{aligned} \quad (10)$$

але з таким потенціалом, що для неї FD-метод є розбіжним. Розв'язком задачі (10) є зліченна кількість однократних дійсних власних значень із точкою згущення на нескінченності

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < \dots,$$

яким відповідає послідовність власних функцій $u_k(x)$, $k = 1, 2, \dots$, що утворює ортогональний базис у $L_2(-\infty, \infty)$ (див., наприклад, [15]). Будемо шукати наближення до власної функції $u_k(x)$ у вигляді

$$u_k^{(m)}(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{m,k}^{(j)} H_j(x), \quad a_{m,k}^{(0)} = 1. \quad (11)$$

Підставимо (11) у диференціальне рівняння (10). Тоді замість нуля одержимо такий вираз для нев'язки:

$$r_k^{(m)}(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \left\{ \sum_{j=0}^m a_{m,k}^{(j)} (\lambda_{m,k} - 2j - 1) H_j(x) - \sum_{p=1}^r \alpha_p x^p \sum_{j=0}^m a_{m,k}^{(j)} H_j(x) \right\}. \quad (12)$$

Перетворимо вираз у фігурних дужках формули (12) до вигляду, що містить лише лінійну комбінацію поліномів Ерміта. З цією метою використаємо рекурентне співвідношення для поліномів Ерміта і його наслідки:

$$x^p H_j(x) = \sum_{t=\max(0, j-p)}^{j+p} \beta_{p,j,t} H_t(x).$$

Це дає змогу перетворити (12) до потрібного вигляду

$$\begin{aligned} r_k^{(m)}(x) &= \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{m,k}^{(j)} \left\{ (\lambda_{m,k} - 2j - 1) H_j(x) - \sum_{p=1}^r \alpha_p \sum_{t=\max(0, j-p)}^{j+p} \beta_{p,j,t} H_t(x) \right\} = \\ &= \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{m,k}^{(j)} \left\{ (\lambda_{m,k} - 2j - 1) H_j(x) - \sum_{t=\max(0, j-r)}^{j+r} \omega_{r,j,t} H_t(x) \right\}, \end{aligned}$$

$$\omega_{r,j,t} = \sum_{p=\max(\min(r, |j-t|), 1)}^r \alpha_p \beta_{p,j,t},$$

$$r_k^{(m)}(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \left\{ \sum_{j=0}^m a_{m,k}^{(j)} (\lambda_{m,k} - 2j - 1) H_j(x) - \sum_{t=0}^{m+r} \sum_{j=\max(0, t-r)}^{\min(t+r, m)} a_{m,k}^{(j)} \omega_{r,j,t} H_t(x) \right\}. \quad (13)$$

Знайдемо квадрат норми нев'язки (13), врахувавши ортогональність функцій Ерміта:

$$\begin{aligned} \|r_k^{(m)}\|^2 &= \sum_{j=0}^m \left[a_{m,k}^{(j)} (\lambda_{m,k} - 2j - 1) - \sum_{t=\max(0, j-r)}^{\min(j+r, m)} a_{m,k}^{(t)} \omega_{r,t,j} \right]^2 2^j j! \sqrt{\pi} + \\ &+ \sum_{j=m+1}^{m+r} \left[\sum_{t=\max(0, j-r)}^{\min(j+r, m)} a_{m,k}^{(t)} \omega_{r,t,j} \right]^2 2^j j! \sqrt{\pi}. \end{aligned} \quad (14)$$

Запишемо необхідні умови для мінімуму функціонала (14):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \|r_k^{(m)}\|^2}{\partial a_{m,k}^{(j)}} &= \\ &= \sum_{i=0}^m 2^{(i+1)} i! \left(- \sum_{p=0}^m \left(a_{m,k}^{(p)} \omega_{r,p,i} + (\lambda_{m,k} - 2i - 1) a_{m,k}^{(i)} \right) ((\lambda_{m,k} - 2i - 1) \delta_{i,j} - \omega_{r,j,i}) \right) + \\ &+ \sum_{i=m+1}^{m+j+1} (2^{(i+1)} i! \sum_{p=i-m-1}^m a_{m,k}^{(p)} \omega_{r,p,i}) \omega_{r,j,i} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\frac{\partial \|r_k^{(m)}\|^2}{\partial \lambda_{m,k}} = \sum_{i=0}^m 2^{i+1} i! \left[- \sum_{p=0}^m a_{k,m}^{(p)} \omega_{r,p,i} + (\lambda_{k,m} - 2j - 1) a_{k,m}^{(i)} \right] a_{k,m}^{(i)} = 0. \quad (16)$$

Систему рівнянь (15) можна перетворити до вигляду

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \mu_{j,i} (\lambda_{m,k}) a_{m,k}^{(i)} &= -\mu_{j,0} (\lambda_{m,k}), \quad j = 0, 1, \dots, m, \\ \mu_{j,i} (\lambda_{m,k}) &= - \sum_{p=0}^{m+1+\min(i,j)} 2^{p+1} p! \omega_{r,i,p} [(\lambda_{m,k} - 2p - 1) \delta_{p,j} - \omega_{r,j,p}] + \\ &+ 2^{i+1} i! (\lambda_{m,k} - 2i - 1) [(\lambda_{m,k} - 2i - 1) \delta_{i,j} - \omega_{r,j,i}]. \end{aligned} \quad (17)$$

З рівняння (16) знаходимо

$$\lambda_{k,m} = \left\{ \sum_{p=0}^m a_{k,m}^{(p)} \sum_{i=0}^m 2^{i+1} i! \omega_{r,p,i} a_{k,m}^{(i)} \right.$$

$$+ \sum_{i=0}^m 2^{i+1} i! (2i+1) [a_{k,m}^{(i)}]^2 \left\{ \sum_{i=0}^m 2^{i+1} i! [a_{k,m}^{(i)}]^2 \right\}^{-1} = G(a_{k,m}^{(1)}, \dots, a_{k,m}^{(m)}). \quad (18)$$

Запропонований підхід до одержання системи нелінійних рівнянь (15), (16) або (15), (17) включно є символьним, але останню систему в аналітичному вигляді не можна розв'язати. Тому для її розв'язання пропонуємо такий алгоритм.

1. Задаємо m і початкове наближення $\lambda_{m,k}^{(0)}$. Після цього організуємо ітераційний процес.
2. Знаходимо розв'язок $a_{k,m}^{(i)} = a_{k,m}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, m$, системи

$$\sum_{i=1}^m \mu_{j,i} \left(\lambda_{m,k}^{(0)} \right) a_{m,k}^{(i)} = -\mu_{j,0} \left(\lambda_{m,k}^{(0)} \right), \quad j = 0, 1, \dots, m.$$

3. Виконуємо обчислення за формулою (18):

$$\lambda_{k,m}^{(1)} = G \left(a_{k,m}^{(1)}, \dots, a_{k,m}^{(m)} \right).$$

4. Змінюємо $\lambda_{m,k}^{(0)}$ на $\lambda_{m,k}^{(1)}$, повертаємось до кроку 2 і т. д.
Загальний блок кроків є таким:

- i. Задаємо наближення $\lambda_{m,k}^{(\nu)} = \lambda_{m,k}^{(\nu)}$.
- ii. Знаходимо розв'язок $a_{k,m}^{(i)} = a_{k,m}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, m$, системи

$$\sum_{i=1}^m \mu_{j,i} \left(\lambda_{m,k}^{(\nu)} \right) a_{m,k}^{(i)} = -\mu_{j,0} \left(\lambda_{m,k}^{(\nu)} \right), \quad j = 0, 1, \dots, m.$$

- iii. Виконуємо обчислення за формулою (18):

$$\lambda_{k,m}^{(\nu+1)} = G \left(a_{k,m}^{(1)}, \dots, a_{k,m}^{(m)} \right), \quad \nu = 1, 2, \dots$$

За критерій зупинки ітераційного процесу вибираємо такий: зупинка відбудеться на ітерації з номером ν , якщо виконується нерівність

$$\left\| \left| \lambda_{k,m}^{(\nu+1)} \right| - \left| \lambda_{k,m}^{(\nu)} \right| \right\| \leq \varepsilon, \quad (19)$$

де ε — наперед задана стала, що характеризує потрібну точність. Якщо нерівність (19) виконується, то на цьому алгоритм завершується. У протилежному випадку змінюємо ν на $\nu + 1$ і повертаємось до кроку (13).

Варто зауважити, що досягнуту точність можна контролювати також за рахунок аналізу величини квадрата норми нев'язки (14), порівнюючи її з наперед заданою сталою ε_R , яка характеризує необхідну точність.

Приклад 1. За вищенаведеним алгоритмом було проведено низку чисельних експериментів і, зокрема, проведено успішне порівняння з розрахунками, викладеними у роботі [1]. Зупинимося лише на тих розрахунках, які пов'язані з результатами, розміщеними у таблиці 2 з [6]. Автори [6] стверджують: „Such potentials $-(a_2 + 1) \gg a_3, a_4, a_i > 0, i = 3, 4$ could not be handled by other methods due to numerical difficulties”. На противагу такому твердженню наш алгоритм добре працює і в цьому випадку. Зокрема, якщо $a_2 = 40, a_3 = a_4 = 2$ і $m = 300, \varepsilon_R = 10^{-13}$, отримуємо

$$\begin{aligned}\lambda_{0,300} &= -266.459743510482353485793799692999615, \\ \frac{\lambda_{0,300}}{2} &= -133.229871755241176742896899846499808, \\ R_{0,300} &= 0.124877094693163387057341633982018535 \cdot 10^{-13}.\end{aligned}$$

У згаданій таблиці 2 мантису числа, що наближає енергію (у наших позначеннях це $\lambda_0/2$), наведено з дев'ятьма значущими цифрами, які повністю збігаються з нашими розрахунками. Хоча з огляду на величину квадрата норми нев'язки в якості критерію зупинки для цього прикладу доцільніше було б використовувати другий критерій. Останнє твердження особливо переконливо продемонстровано для випадку $a_2 = 200, a_3 = 2, a_4 = 8$ і $m = 500, \varepsilon_R = 10^{-8}$:

$$\begin{aligned}\lambda_{0,500} &= -1321.76704522091350321031848821751905, \\ \frac{\lambda_{0,500}}{2} &= -660.883522610456751605159244108759525, \\ R_{0,500} &= 0.251057183276010665635027818092350193 \cdot 10^{-8}.\end{aligned}$$

Якщо ж обмежитись дев'ятьма знаками після мантиси, які повністю збігаються з наведеними у таблиці 2 із [6], то квадрат нев'язки $R_{0,300} = 0.1182112772901364$, що свідчить про суттєву неточність такого наближення.

Приклад 2. Розглянемо приклад 38 із [16]: close-eigenvalue problem on $(-\infty, \infty)$,

$$q(x) = x^4 - 25x^2, \quad \lambda_0 = \lambda_1 = -149.2194561.$$

Наш алгоритм при $m = 150, \text{Digits} := 180$ і використанні другого критерію дав такий результат:

$$\begin{aligned}\lambda_{0,180} &= -149.21945614219088795634701362627, \\ R_{180} &= 0.470465688 \cdot 10^{-10}.\end{aligned}$$

Зауважимо, що у [16] не надано теоретичне доведення близькості двох точних найменших власних значень і оцінки цієї близькості.

3. Модифікований FD-метод. Кожен із випадків поліноміального потенціалу за умови, коли спектральну задачу

$$\begin{aligned}\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + (\lambda - q(x))u(x) &= 0, \quad x \in (-\infty, \infty), \\ \|u\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} [u(x)]^2 dx < \infty,\end{aligned}\tag{20}$$

$$q(x) = \sum_{p=1}^{2N-1} b_p x^{2p}, \quad b_{2N-1} > 0,$$

можна розв'язати точно (див. [1], систему комп'ютерної алгебри Maple Help для функцій Хоїна, [7]), має таку особливість: точна власна функція, якщо вона існує, має вигляд

$$u(x) = \left(\sum_{m=0}^M c_m^{(s)} x^{2m+s} \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N a_i x^{2i} \right), \quad (21)$$

де $s = 0$ або $s = 1$ залежно від того, парну чи непарну власну функцію ми шукаємо.

Підстановка функції (21) у рівняння (20) і вимога, щоб вона була розв'язком цього рівняння, приводять до того, що всі a_i , $i = 1, 2, \dots, N$, однозначно визначаються через задані коефіцієнти поліноміального потенціалу b_i , $i = N, \dots, 2N - 1$, без жодних для них обмежень. Водночас коефіцієнти b_i , $i = 1, \dots, N - 1$, вже не є довільними та однозначно визначаються через b_i , $i = N, \dots, 2N - 1$. Так, у випадку $N = 4$

$$a_4 = \frac{1}{4} \sqrt{b_7}, \quad a_3 = \frac{b_6}{6\sqrt{b_7}}, \quad a_2 = \frac{b_6^2/4b_7 - b_5}{4\sqrt{b_7}}, \quad a_1 = \frac{(b_6^2/4b_7 - b_5) b_6}{2b_7} + b_4, \quad (22)$$

$$b_3 = -7\sqrt{b_7} + \frac{(b_6^2/4b_7 - b_5) b_6}{2b_7} + b_4 - b_6 + \frac{(b_6^2/4b_7 - b_5)^2}{4b_7},$$

$$b_2 = -\frac{5b_6}{2\sqrt{b_7}} - \frac{(b_6^2/4b_7 - b_5) b_6}{2b_7} + b_4 \left(\frac{b_6^2}{4b_7} - b_5 \right), \quad (23)$$

$$b_1 = \frac{3(b_6^2/4b_7 - b_5)}{2\sqrt{b_7}} + \frac{\left(\frac{(b_6^2/4b_7 - b_5) b_6}{2b_7} + b_4 \right)^2}{4b_7},$$

а у випадку $N = 2$

$$a_2 = \frac{\sqrt{b_3}}{2}, \quad a_1 = \frac{b_2}{2\sqrt{b_3}}, \quad (24)$$

$$b_1 = -3\sqrt{b_3} + \frac{b_2^2}{4b_3}.$$

Аналізуючи наведені випадки, можемо стверджувати, що якщо коефіцієнтні умови (22), (23) або відповідно (24) слабкозбурені, то це можна використати для побудови модифікації FD-методу.

Пояснимо побудову такої модифікації більш конкретно на розглянутих вище випадках.

Нехай розглядається спектральна задача (20) з $N = 2$

$$q(x) = \frac{3}{2}x^2 + 4x^4 + x^6, \quad (25)$$

для якої умова (24) не виконується. Замість „точного” $b_1 = 1$ у нас фігурує $b_1 = 3/2$, але це є невеликим збуренням. Використовуючи даний факт, будемо наступну модифікацію FD-методу. За базову задачу візьмемо

$$\frac{d^2 u_0^{(0)}(x)}{dx^2} + (\lambda_0^{(0)} - x^2 - 4x^4 - x^6) u_0^{(0)}(x) = 0, \quad x \in (-\infty, \infty),$$

$$\lambda_0^{(0)} = 2, \quad u_0^{(0)}(x) = \exp\left(-x^2 - \frac{1}{4}x^4\right), \quad \bar{q}(x) = x^2 + 4x^4 + x^6.$$

Тоді загальний рекурентний процес методу буде таким:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 u_0^{(j+1)}(x)}{dx^2} + (\lambda_0^{(0)} - x^2 - 4x^4 - x^6) u_0^{(j+1)}(x) = \\ & = - \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j-p+1)} u_0^{(p)}(x) + \frac{1}{2} x^2 u_0^{(j)}(x) \equiv F_0^{(j+1)}(x), \quad x \in (-\infty, \infty), \end{aligned} \quad (26)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_0^{(j+1)}(x) u_0^{(0)}(x) dx = 0, \quad j = 0, 1, \dots$$

Розв'язок кожної із задач (26) шукаємо у вигляді

$$u_0^{(j+1)}(x) = \exp\left(-x^2 - \frac{1}{4}x^4\right) \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s}^{(j+1)} x^{2s}.$$

Для визначення коефіцієнтів у цьому виразі одержуємо рекурентну послідовність

$$\begin{aligned} a_{2s+2}^{(j+1)} &= \frac{1}{2(s+1)(2s+1)} \times \\ & \times \left[8sa_{2s}^{(j+1)} + 4(s-1)a_{2s-2}^{(j+1)} - \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j+1-p)} a_{2s}^{(p)} + \frac{1}{2} a_{2s-2}^{(j)} \right], \quad s = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (27)$$

з початковою умовою

$$a_2^{(j+1)} = -\frac{1}{2} \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j+1-p)} a_0^{(p)}. \quad (28)$$

З умов розв'язності задачі (26) випливають формули

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(j+1)} &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k}^{(j)} \beta_{2k+2}, \\ \beta_{2k} &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^{2k} [u_0^{(0)}(x)]^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} [u_0^{(0)}(x)]^2 dx}, \end{aligned} \quad (29)$$

де величини β_{2k} для будь-яких значень k можна записати в явному вигляді через модифіковані функції Бесселя другого роду [14]. Зокрема, маємо

$$\beta_2 = \frac{K_{3/4}(1) - K_{1/4}(1)}{K_{1/4}(1)}, \quad \beta_4 = \frac{-4K_{3/4}(1) + 5K_{1/4}(1)}{2K_{1/4}(1)}, \dots$$

Сталі $a_0^{(p)}$, $p = 1, 2, \dots$, знаходимо з умови ортогональності, що випливає з формул (26):

$$a_0^{(j+1)} = - \sum_{p=1}^{\infty} a_{2p}^{(j+1)} \beta_{2p}. \quad (30)$$

Як наслідок вищевикладеного одержано символний алгоритм, результатом дії якого для m -го рангу є

$$\lambda_0 = \sum_{j=0}^m \lambda_0^{(j)}, \quad a_{2s} = \sum_{j=0}^m a_{2s}^{(j)}, \quad s = 0, 1, \dots,$$

$$u_0^m(x) = \sum_{j=0}^m u_0^{(j)}(x) = \exp\left(-x^2 - \frac{1}{4}x^4\right) \sum_{s=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^m a_{2s}^{(j)}\right) x^{2s} = \exp\left(-x^2 - \frac{1}{4}x^4\right) \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s}^m x^{2s}.$$

При імplementації цього алгоритму задаємо натуральне число N замість ∞ як верхню межу підсумовування, а також задаємо m ,

$$a_0^{(0)} = 1, \quad a_{2s}^{(0)} = 0, \quad s = 1, 2, \dots, N, \quad \lambda_0^{(0)} = 2,$$

обчислюємо β_{2k} , $k = 1, 2, \dots, N$, будуємо такий цикл:

для j від 0 з кроком 1 до m виконати:

обчислити $\lambda_0^{(j+1)}$ за скороченою формулою (29)

$$\lambda_0^{(j+1)} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N a_{2k}^{(j)} \beta_{2k+2},$$

знайти $a_{2s}^{(j+1)}$, $s = 1, 2, \dots, N$, за формулами (3), (28),

знайти $a_0^{(j+1)}$ згідно із скороченою формулою (30)

$$a_0^{(j+1)} = - \sum_{p=1}^N a_{2p}^{(j+1)} \beta_{2p},$$

кінець циклу.

Вихід: λ_0 , a_{2s}^m , $s = 0, 1, \dots, N$, $\lambda_0^{(m)}$.

Остання величина характеризує точність імplementації.

Результати розрахунків з використанням системи комп'ютерної алгебри Maple для $N = 24$, Digits = 24, $m = 9$:

$$\lambda_0^9 = 2.09733591557967330172, \quad \lambda_0^{(8)} = -1.86621224162113261253 \cdot 10^{(-15)}.$$

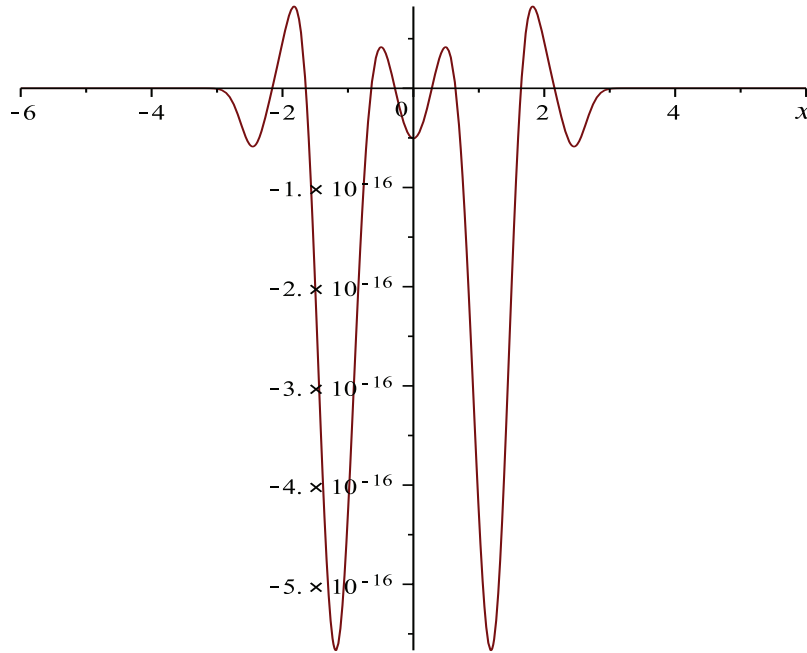


Рис. 1

Перевірку якості одержаного наближення проводимо за допомогою дослідження нев'язки, яку обчислюємо таким чином. Будуємо вираз

$$u_0^{m,N}(x) = \exp\left(-x^2 - \frac{1}{4}x^4\right) \sum_{s=0}^N a_{2s}^m x^{2s},$$

за допомогою якого знаходимо поліном

$$\exp\left(x^2 + \frac{1}{4}x^4\right) \left(\frac{d^2 u_0^{m,N}(x)}{dx^2} + (\lambda_0 - x^2 - 4x^4 - x^6) u_0^{m,N}(x) \right) = \sum_{p=0}^{N+1} r_{m,2p} x^{2p}.$$

За нев'язку приймаємо функцію

$$R_m(x) = \exp\left(-x^2 - \frac{1}{4}x^4\right) \sum_{p=0}^{N-1} r_{m,2p} x^{2p}. \quad (31)$$

Графік $R_9(x)$ для потенціалу (25) зображено на рис. 1.

Наведемо деякі пояснення, пов'язані з вибором верхньої межі підсумовування в формулі (31). У припущенні, що верхня межа суми $N = \infty$, повинно бути

$$r_{m,2N+2} = -\left(4N + \frac{1}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{2N}^{(j)} - (8N + 8 + \lambda_0 - \lambda_0) \sum_{j=0}^m a_{2N+2}^{(j)},$$

$$r_{m,2N} = (-8N + \lambda_0 - \lambda_0) \sum_{j=0}^m a_{2N}^{(j)} - \left(4N - \frac{7}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{2N-2}^{(j)} + 2(N+1)(2N+1) \sum_{j=0}^m a_{2N+2}^{(j)}.$$

Замість цих виразів для скінченного N маємо інші:

$$r_{m,2N+2} = -\left(4N + \frac{1}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{2N}^{(j)},$$

$$r_{m,2N} = (-8N + \lambda_0 - \lambda_0^m) \sum_{j=0}^m a_{2N}^{(j)} - \left(4N - \frac{7}{2}\right) \sum_{j=0}^m a_{2N-2}^{(j)}.$$

Всі попередні значення $r_{m,2p}$, $p = 0, 1, \dots, N-1$, є однаковими. Саме ці обставини й зумовили вибір нев'язки у вигляді (31).

Наведемо приклад для випадку, коли $N = 4$. Нехай

$$q(x) = x^2 - 5x^4 - \frac{9}{2}x^6 + 2x^8 + x^{10} + 2x^{12} + x^{14}. \quad (32)$$

Тоді умова (22) не виконується. Замість „точного” $b_3 = -5$ фігурує $b_3 = -9/2$, але це збурення є невеликим і, використовуючи даний факт, будемо наступну модифікацію FD-методу. За базову задачу візьмемо

$$\frac{d^2 u_0^{(0)}(x)}{dx^2} + (\lambda_0^{(0)} - x^2 + 5x^4 + 5x^6 - 2x^8 - x^{10} - 2x^{12} - x^{14})u_0^{(0)}(x) = 0, \quad x \in (-\infty, \infty),$$

$$\lambda_0^{(0)} = 1, \quad u_0^{(0)}(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^6 - \frac{1}{8}x^8\right),$$

$$\bar{q}(x) = x^2 - 5x^4 - 5x^6 + 2x^8 + x^{10} + 2x^{12} + x^{14},$$

при цьому

$$q(x) - \bar{q}(x) = \frac{1}{2}x^6.$$

Загальний рекурентний процес методу має вигляд

$$\frac{d^2 u_0^{(j+1)}(x)}{dx^2} + (\lambda_0^{(0)} - \bar{q}(x))u_0^{(j+1)}(x) =$$

$$= \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j-p+1)} u_0^{(p)}(x) + \frac{1}{2}x^6 u_0^{(j)}(x) \equiv F_0^{(j+1)}(x), \quad x \in (-\infty, \infty), \quad (33)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_0^{(j+1)}(x) u_0^{(0)}(x) dx = 0, \quad j = 0, 1, \dots$$

Розв'язок кожної із задач (33) шукаємо у вигляді

$$u_0^{(j+1)}(x) = u_0^{(0)}(x) \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s}^{(j+1)} x^{2s}.$$

Тоді для визначення коефіцієнтів у цьому виразі одержуємо таку рекурентну послідовність:

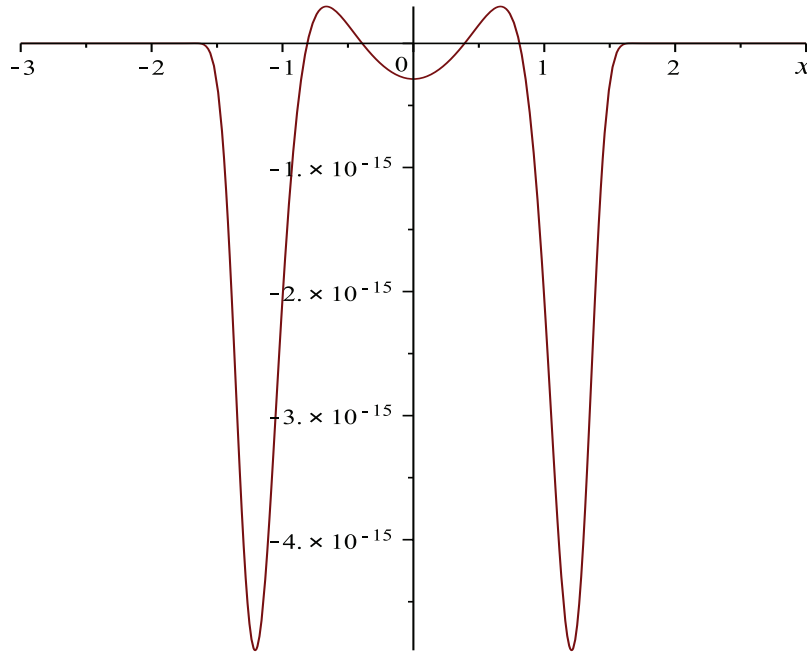


Рис. 2

$$a_{2s+2}^{(j+1)} = \frac{1}{2(s+1)(2s+1)} \left[4s a_{2s}^{(j+1)} + 4(s-1) a_{2s-2}^{(j+1)} + \left(4s - 12 + \frac{1}{2} \right) a_{2s-6}^{(j+1)} - \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j+1-p)} a_{2s}^{(p)} \right],$$

$$s = 0, 1, \dots, N-1, \quad j = 0, 1, \dots, \quad a_{2s}^{(j)} = 0 \quad \forall s < 0, \quad \forall j, \quad a_{2s}^{(0)} = \delta_{s,0}.$$

З умов розв'язності задачі (33) випливає, що

$$\lambda_0^{(j+1)} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k}^{(j)} \beta_{2k+6}.$$

Сталі $a_0^{(p)}$, $p = 1, 2, \dots$, знаходимо з умови ортогональності, яка випливає з формул (33):

$$a_0^{(j+1)} = - \sum_{p=1}^{\infty} a_{2p}^{(j+1)} \beta_{2p}.$$

Як наслідок із вищевикладеного одержано символічний алгоритм, результатом дії якого для m -го рангу є

$$\lambda_0^m = \sum_{j=0}^m \lambda_0^{(j)}, \quad a_{2s}^m = \sum_{j=0}^m a_{2s}^{(j)}, \quad s = 0, 1, \dots,$$

$$u_0^m(x) = \sum_{j=0}^m u_0^{(j)}(x) = u_0^{(0)}(x) \sum_{s=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^m a_{2s}^{(j)} \right) x^{2s} = u_0^{(0)}(x) \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s}^m x^{2s}.$$

Імплементація цього алгоритму цілком подібна до попереднього випадку, за винятком деяких технічних деталей, тому наводити її не будемо. Вкажемо лише результати розрахунків із використанням системи комп'ютерної алгебри Maple для $N = 16$, Digits = 16, $m = 9$:

$$\lambda_0^9 = 1.059751614860599, \quad \lambda_0^{(8)} = -1.213344298472436 \cdot 10^{(-14)}.$$

Графік $R_9(x)$ для потенціалу (32) зображено на рис. 2.

Література

1. *Magyari E.* Exact quantum-mechanical solutions for anharmonic oscillators // *Phys. Lett. A.* – 1981. – **81**, № 2–3. – P. 116–118.
2. *Banerjee K.* General anharmonic oscillators // *Proc. Roy. Soc. London A.* – 1978. – **364**, № 1717. – P. 263–275.
3. *Chaudhuri R. N., Mondal M.* Improved Hill determinant method: general approach to the quantum anharmonic oscillators // *Phys. Rev. A.* – 1991. – **43**, № 7. – P. 3241–3246.
4. *Adhikari R., Dutt R., Varshni Y. P.* Exact solutions for polynomial potentials using supersymmetry inspired factorization method // *Phys. Lett. A.* – 1981. – **141**, № 1–2. – P. 1–8.
5. *Kao Y.-M., Jiang T. F.* Adomian's decomposition method for eigenvalue problems // *Phys. Rev. E.* – 2005.
6. *Roy A. K., Gupta N., Deb B. M.* Time-dependent quantum-mechanical calculation of ground an states of anharmonic and double-well oscillators // *Phys. Rev. A.* – 2001.
7. *Ronveaux A.* (editor). *Heun's differential equations.* – Oxford Univ. Press, 1995. – 354 p.
8. *Макаров В. Л.* FD-метод у спектральних задачах для оператора Шррьодінгера з поліноміальним потенціалом на $(-\infty, +\infty)$ // *Доп. НАН України.* – 2015. – № 11. – С. 5–11.
9. *Макаров В. Л.* О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма–Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами // *Докл. АН СССР.* – 1991. – **1** (320). – С. 34–39.
10. *Макаров В. Л.* FD-метод – експоненціальна швидкість збіжності // *Журн. обчислюв. та прикл. математики.* – 1997. – № 82. – С. 69–74.
11. *Adomian G.* *Solving frontier problems of physics: the decomposition method.* – Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1994. – xiv + 352 p.
12. *Макаров В. Л., Романюк Н. М.* Нові властивості FD-методу при його застосуваннях до задач Штурма–Лиувілля // *Доп. НАН України.* – 2014. – № 2. – С. 26–31.
13. *Olver F. W. J., Lozier D. W., Boisvert R. F., Clark C. W.* *NIST digital library of mathematical functions.* – Cambridge Univ. Press, 2010. – xvii + 951 p.
14. *Бейтмен Г., Эрдейи Ф.* *Высшие трансцендентные функции. Т. 2. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены.* – 2-е изд. – М.: Наука, 1974. – 296 с.
15. *Zettl A.* Sturm–Liouville theory // *Amer. Math. Soc. Ser. Math. Surv. and Monogr.* – 2005. – **121**. – 328 p.
16. *Pryce J. D.* *Numerical solution of Sturm–Liouville problems.* – Oxford Univ. Press, 1993. – 336 p.

Одержано 09.10.17