

Применение приближенных формул для интегралов с ядром Коши для численного решения задач рассеяния

Д. Г. Саникидзе

Институт вычислительной математики им. Н.И. Мухелишвили, Грузия

A certain calculating scheme for numerical solution of a known in physics Lippman-Shwinger singular integral equation is offered. The corresponding scheme is based on a Gauss type quadrature formula (constructed by the author) with immovable singularity, which is reached by introducing some numerical parameter. The indicated quadrature formula is used together with Chebishev interpolation formula, whose knots are connected in the known way with the singularity point in the corresponding integral equation.

1. Постановка и актуальность задачи

В данной работе излагаются некоторые практические аспекты численного решения известных сингулярных интегральных уравнений вида (см., напр., [1-3]) теории рассеяния в квантовом поле

$$T(x; x_0) + \lambda \int_0^{+\infty} \frac{N(x, y)T(y; x_0)}{y^2 - x_0^2} dy = N(x, x_0), \quad (1.1)$$

носящих в существующей литературе название уравнений Липпмана-Швингера. x_0 — произвольно фиксированная точка в интервале $(0, +\infty)$ (параметр сингулярности), причем сингулярный интеграл в (1.1) рассматривается в смысле главного значения. Ядро $N(x, y)$ ($0 \leq x < +\infty$) представляет заданную функцию (потенциал), определяемую вместе с λ конкретными характеристиками исходной (физической) задачи, причем, как обычно, считается, что рассматриваемое λ не является характеристическим числом.

С нахождением решения уравнений вида (1.1) непосредственным образом связано определение так называемой фазы нуклон-нуклонного рассеяния через значения параметра x_0 в рассматриваемом интервале $(0, +\infty)$. Более конкретно, искомая фаза при каждом заданном x_0 известным образом определяется через соответствующее значение функции $T(y; x_0)$ при $y = x_0$. Тем самым, основной целью приближенного решения уравнения (1.1) является по возможности более точное определение значений $T(x_0; x_0)$. Следует, однако, отметить, что нередко такая задача, в зависимости от конструкции той или иной применяемой вычислительной схемы может приводить к необходимости выполнения значительно большого объема вычислений, особенно, когда число рассматриваемых значений x_0 относительно велико. Содержание имеющегося ниже в данной заметке изложения во многих мере относится к рассмотрению этого вопроса.

2. Истоки исследования авторов

С точки зрения практической эффективности алгоритмов, построенных с целью приближенного решения уравнений вида (1.1), наиболее удобными следует считать те из них, которые, доставляя более менее приемлемую точность, используют при их реализации возможно меньшее количество значений рассматриваемого ядра $N(x, y)$. Это обстоятельство, помимо общепринятых естественных соображений относительно удобства конструируемых такого рода схем, тесно связано с оптимизацией экспериментального процесса нахождения значений соответствующих потенциалов в той или иной реальной задаче. Вопрос этот, исходя из полученных в ряде работ (см., напр., [4-6]) оценок и обширного вычислительного эксперимента на тестовых примерах, выглядит довольно-таки сложным. Тем самым, представляет определенный интерес дальнейшее рассмотрение этого вопроса. Некоторые аспекты в этом направлении изложены в последующих пунктах данной работы. В частности, предлагается одна конкретная вычислительная схема, в определенной степени отличная от известных ранее и приводящая, на наш взгляд, к более эффективному алгоритму с точки зрения экономичности.

Заметим, что в упомянутых выше заметках [3-6] (как и в ряде других работ) применяемые вычислительные алгоритмы, как правило, были построены исходя из представления уравнения (1.1) в эквивалентной ему форме

$$T(x; x_0) + \lambda \int_0^{+\infty} \frac{N(x, y)T(y; x_0) - N(x, x_0)T(x_0; x_0)}{y^2 - x_0^2} dy = N(x, x_0), \quad (2.1)$$

после чего к входящему в это уравнение интегралу (представляющему фактически регулярный интеграл) после сведения его к интегралу с конечными пределами применялись надлежащим образом выбранные известные квадратурные формулы для регулярных интегралов (в частности, с целью достижения более высокой точности обычно были использованы квадратурные формулы Гаусса). Однако следует заметить, что при применении квадратурных формул к вычислению содержащегося в (2.1) интеграла наряду с другими видами погрешностей возникают ошибки, обусловленные погрешностями в вычислениях значений потенциалов $N(x, y)$. Влияние на окончательный результат таких ошибок, особенно при значениях y сколь угодно близких к x_0 в соответствующей квадратурной сумме, может оказаться ощутимым.

3. Используемый метод аппроксимации сингулярного интеграла в уравнении (1.1)

Хотя бы согласно сказанному выше немалый интерес представляет построение в известном смысле удобных вычислительных алгоритмов, основанных на непосредственной аппроксимации сингулярного интеграла в уравнении (1.1).

В связи с упомянутыми выше сложностями, присущими рассматриваемой здесь задаче, естественно ориентироваться на применение возможно более точных квадратурных формул для приближенного вычисления соответствующего сингулярного интеграла. В существующей в настоящее время

литературе известны методы построения и применения к численному решению ряда прикладных задач квадратурных формул Гаусса для сингулярных интегралов с подвижной особенностью (см., напр., [7]). Такие формулы справедливы в определенной дискретной системе значений параметра сингулярности. В данном здесь случае интеграла с неподвижной особенностью на бесконечном интервале аналогичные формулы могут быть построены путем введения некоторого числового параметра. Для осуществления этого нам понадобится применение ряда преобразований исходного сингулярного интеграла.

В первую очередь сведем рассматриваемый интеграл к интегралу с конечными пределами. В нашем случае это осуществляется подстановкой $y = y(t_0) = c\left(-1 + \frac{1}{t^2}\right)$, где c ($c > 0$) упомянутый параметр. Это приводит к выражению

$$\frac{2}{c+x_0} \int_0^1 \frac{N(x, y(t^2))T(y(t^2); x_0)tdt}{\left(t^2 - \frac{c}{c+x_0}\right)\left[t^2\left(1 - \frac{x_0}{c}\right) - 1\right]} = \frac{1}{c+x_0} \int_{-1}^1 \frac{N(x, y(t^2))T(y(t^2); x_0)|t|dt}{\left(t^2 - \frac{c}{c+x_0}\right)\left[t^2\left(1 - \frac{x_0}{c}\right) - 1\right]}.$$

Последний интеграл с данным множителем может быть преобразован в разность

$$\frac{1}{2(c+x_0)\sqrt{\frac{c}{c+x_0}}} \left\{ \int_{-1}^1 \frac{N(x, y(t^2))T(y(t^2); x_0)|t|dt}{\left(t - \sqrt{\frac{c}{c+x_0}}\right)\left[t^2\left(1 - \frac{x_0}{c}\right) - 1\right]} - \int_{-1}^1 \frac{N(x, y(t^2))T(y(t^2); x_0)|t|dt}{\left(t + \sqrt{\frac{c}{c+x_0}}\right)\left[t^2\left(1 - \frac{x_0}{c}\right) - 1\right]} \right\}.$$

В полученном выражении интегралы в фигурных скобках, очевидно, имеют различные точки сингулярности $\pm\sqrt{\frac{c}{c+x_0}}$ в интервале $(-1, +1)$. Надлежащей подстановкой во втором интеграле мы в конечном счете приходим к интегралу с сингулярностью в точке $\sqrt{\frac{c}{c+x_0}}$. С учетом этого и дальнейшего несложного преобразования исходный интеграл окончательно приводится к выражению

$$\frac{1}{c} \left\{ \int_{-1}^{+1} \frac{N(x, y(t^2))T(y(t^2); x_0)|t|tdt}{\left(t - \sqrt{\frac{c}{c+x_0}}\right)\left[t^2\left(1 - \frac{x_0}{c}\right) - 1\right]} - \int_{-1}^{+1} \frac{N(x, y(t^2))T(y(t^2); x_0)|t|tdt}{t^2\left(1 - \frac{x_0}{c}\right) - 1} \right\}. \quad (3.1)$$

Считая всюду в дальнейшем n четным, обозначим через $\{t_\nu\}$ ($t_1 < t_2 < \dots < t_n$) множество нулей на $(-1,1)$ многочлена Лежандра степени n . Далее, под $\{t_{k0}\}$ будем подразумевать нули соответствующей функции Лежандра второго рода (см. [7], §§ 4.61, 6.9). Рассматривая в данном случае положительные нули $t_{n/2+10} < t_{n/2+20} < \dots < t_{n0}$, определим для заданных x_0 и t_{k0} параметр c по равенству $\sqrt{\frac{c}{c+x_0}} = t_{k0}$. Учитывая это, при $c = c_k$ мы можем к первому (сингулярному) интегралу в разности (3.1) применить следующую квадратурную формулу для сингулярных интегралов (см., напр., [8])

$$\int_{-1}^{+1} \frac{N(x, y(t))T(y(t); x_0) |t| t dt}{\left(t - \sqrt{\frac{c_k}{c_k + x_0}}\right) \left[t^2 \left(1 - \frac{x_0}{c_k}\right) - 1\right]} \approx \sum_{\nu=1}^n A_\nu \frac{N(x, y(t_\nu))T(y(t_\nu); x_0) |t_\nu| t_\nu}{(t_\nu - t_{k0}) \left[t_\nu^2 \left(1 - \frac{x_0}{c_k}\right) - 1\right]}$$

где A_ν ($\nu = 1, 2, \dots, n$) — известные коэффициенты обычной квадратурной формулы Гаусса. При этом, согласно указанному выше определению, имеем $c_k = \frac{x_0 t_{k0}^2}{(1 - t_{k0}^2)}$.

Теперь положим $x_{0j} = -1 + \frac{1}{\tau_j^2}$, где $\{\tau_j\}$ — нули полинома Чебышева степени n :

$$\tau_j = \cos \frac{2n - 2j + 1}{2n} \pi \quad (j = 1, 2, \dots, n).$$

Рассматривая для j значения $j = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n$, в данные выше выражения c_k вместо x_0 будем подставлять определенные по указанной формуле числа x_{0j} :

$$c_k = \frac{t_{k0}^2 (1 - \tau_k^2)}{\tau_k^2 (1 - t_{k0}^2)}, \tag{3.2}$$

считая при этом $k = j = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n$. Смысл введения узлов Чебышева $\{\tau_j\}$ будет пояснен ниже, а здесь отметим лишь, что в силу известного расположения используемых здесь на рассматриваемом интервале узлов (см., напр., [7]), значения c_k по данным в (3.2) формулам ограничены сверху и снизу при $n \rightarrow \infty$ и не меняются значительно по величине относительно изменения индекса k . Это обстоятельство, учитывая некоторые оценки и численный эксперимент на ряде задач, обычно способствует определенной стабильности по точности численных результатов при произвольном изменении параметра x_0 на интервале $(0, +\infty)$.

Дальнейший этап на пути конструирования интересующей вычислительной схемы заключается в аппроксимации второго (регулярного) интеграла в (3.1). В данном случае это осуществляется применением обычной квадратурной формулы Гаусса с теми же узлами $\{t_v\}$ (и, разумеется, при тех же значениях параметра $c = c_k$). В результате, на основе используемых приближенных формул мы приходим к определенному функциональному уравнению, аппроксимирующему заданное уравнение (1.1).

4. Схема функционирования вычислительного алгоритма

В первую очередь отметим, что основная цель решения уравнения (1.1), считая x_0 заданным, состоит в определении величины $T(x_0; x_0)$, через которую по известным формулам определяется т.н. фаза нуклон-нуклонного распределения при заданном значении параметра $x_0 \in (0, +\infty)$. Обычно определение соответствующей величины в конкретной задаче требуется для ряда значений x_0 , что по сути дела подразумевает многократное решение уравнения (1.1). Так как реализация приближенных схем, основанных на аппроксимации интегралов в (1.1) или (2.1), как правило, сводится к решению определенной линейной алгебраической системы, то при каждом рассматриваемом значении x_0 приходится решать конкретную такую систему.² Тем самым, естественно, что когда количество рассматриваемых значений x_0 достаточно велико, то может потребоваться выполнение значительного объема вычислений.

Анализируя теперь предложенную здесь схему, можно, по-видимому, утверждать ее определенную эффективность с указанной точки зрения. В первую очередь отметим, что соответствующая линейная алгебраическая система в данном случае строится, придавая переменному τ и параметру c в выражении $x = c \left(-1 + \frac{1}{\tau^2} \right)$ при каждом заданном $k = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n$ соответственно значения $c = c_k$, $\tau = t_\mu$ ($\mu = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n$). Учитывая в соответствующих квадратурных суммах $y(t_\lambda) = y(-t_\lambda)$, при каждом заданном k получаем систему линейных алгебраических уравнений $\frac{n}{2} \times \frac{n}{2}$ относительно приближенных значений $\{\hat{T}(y(t_v); x_{0k})\}$ искомой функции $T(y; x_0)$. Далее, в результате процесса решения непосредственным образом находится приближенное значение $\{\hat{T}(x_{0k}; x_{0k})\}$ при данном k . Тем самым, путем решения соответствующих систем при $k = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n$ мы получим

² Ради полноты изложения отметим, что за исключением ряда работ (см., напр., [4-6]) применение квадратурных формул с n узлами обычно приводит к линейной системе размерности $(n+1) \times (n+1)$ (включая определяемое из данной системы приближенное значение неизвестной $T(x_0; x_0)$ при заданном x_0)

приближенные значения $T(x_0; x_0)$ в узлах $x_{0j} = -1 + \frac{1}{\tau_j^2}$ ($j=1, 2, \dots, n$), где, как прежде, $\{\tau_j\}$ представляют нули полинома Чебышева на указанном интервале. Подразумеваемая $x_0 = -1 + \frac{1}{t_0^2}$ ($t_0 \neq 0$), любые другие (приближенные) значения $T(x_0; x_0)$ могут быть найдены применением чебышевской интерполяции (по переменной t_0) через найденные уже значения $\{\hat{T}(x_{0j}; x_{0j})\}$. Заметим, что применение в некоторой степени аналогичного процесса интерполирования совместимо и с некоторыми другими схемами, основанными на приведении исходного уравнения к виду (2.1). Однако, особая эффективность данного здесь подхода заключается в сочетании соответствующего процесса с конструированием гауссовских квадратурных формул для сингулярных интегралов с неподвижной особенностью вместе с указанным выше автоматическим определением значений параметра c через чебышевские узлы. Этим изложенная схема в значительной мере отличается от ранее известных (при этом, как уже было отмечено выше, относительно устойчивое изменение по данной схеме указанного параметра имеет определенное значение с точки зрения точности получаемых результатов).

5. Об оценке точности аппроксимации уравнения (1.1)

Построение изложенной выше схемы для численного решения уравнения (1.1) основывалось на определенной аппроксимации интегралов в (3.1). Формальное применение известных в соответствующей литературе оценок погрешности рассматриваемых здесь замен интегралов квадратурными суммами не представляет принципиального труда и в данном случае. Тем не менее, непосредственное применение таких оценок в рассматриваемых здесь случаях не приводит к желательному результату по ряду причин, обусловленных, обычно, сложностью характера поведения обычно рассматриваемых в соответствующих задачах ядер $N(x, y)$. С этой точки зрения было бы достаточно проследить, полагая $\lambda = 1$, за поведением одного из простейших потенциалов — т.н. потенциала Юкавы (являющегося в некоторых отношениях модельным)

$$N(x, y) = \frac{v_0}{4} \ln \frac{(y+x)^2 + \eta^2}{(y-x)^2 + \eta^2} \left(v_0 = -\frac{50}{41.47}, \eta = 0.7 \right), \quad (5.1)$$

когда переменные x, y одновременно, причем каждое из них произвольно, стремятся к $+\infty$. Из-за влияния подобных факторов, связанных со свойствами встречающихся в рассмотрении ядер, получение более-менее приемлемых оценок, а иногда утверждения даже одной лишь сходимости процесса, в общем случае оказывается затруднительным. Непосредственное применение известных классических оценок погрешности аппроксимации интегралов в (3.1) с потенциалами указанного здесь типа также в определенной мере затруднительно. Тем не менее, на основе определенных дополнительных исследований, применяемых в [4], могут быть и в данном случае применительно

к обоим интегралам получены оценки, не отличающиеся по существу от указанных в той же работе. К исследованию разрешимости, основанного на изложенной здесь схеме, аппроксимирующего уравнения, применимы установленные в [9] утверждения.

Продолжая суждение по вопросу точности аппроксимации уравнения (1.1), заметим кроме сказанного, что в обоих интегралах в (3.1) подинтегральные выражения содержат в числителе разность вида $t^2 \left(1 - \frac{x_0}{c_k}\right) - 1$. Последнее не обращается в нуль на заданном отрезке $[-1, +1]$. Однако, подставляя в нем при заданном k вместо c_k значение $\frac{x_0 t_{k_0}^2}{(1 - t_{k_0}^2)}$, рассматриваемое выражение принимает вид $\frac{(2t_{k_0}^2 - 1)t^2}{t_{k_0}^2} - 1$. Для k таких, что $t_{k_0} \rightarrow 1$ при увеличении n , соответствующее выражение становится достаточно малым при приближении t к ± 1 , что в общем случае может оказывать отрицательное влияние на точность результата. Разумеется, в конечном счете определенное значение в этом вопросе имеет поведение выражения $N(x, y(t))T(y(t); x_0)$ при условии $t \rightarrow \pm 1$. Не вдаваясь в подробности исследования в этом направлении, мы ниже остановимся на одной возможности модификации изложенной здесь схемы, которая в зависимости от расположения рассматриваемых в конкретной задаче значений x_0 на интервале $(0, +\infty)$ может оказаться в некоторой степени более эффективной с указанной выше точки зрения. Для этого, полагая, что рассматриваемые значения параметра x_0 ограничены снизу некоторым $\varepsilon > 0$, то, согласно принятому выше представлению $x_0 = -1 + \frac{1}{t_0^2}$ будем иметь $t_0 \in (-\delta, +\delta)$ ($t_0 \neq 0$), где $\delta = \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon}}$. В данном случае в качестве узлов x_{j_0} мы будем рассматривать $x_{j_0} = -1 + \frac{1}{\tau_{j_0}^2}$, где $\tau_{j_0} = \delta \tau_j$ ($j = 1, 2, \dots, n$), где $\{\tau_j\}$ — указанные выше узлы Чебышева. При этом, рассматривая в данном случае значения $k = \frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, \bar{k}$, где \bar{k} — наибольший номер, для которого $t_{\bar{k}_0}$ не превосходит δ , то, могут быть указаны определенные алгоритмы нахождения значений параметра c , при которых соответствующее выражение $t^2 \left(1 - \frac{x_0}{c_k}\right) - 1$ ограничено на рассматриваемом отрезке снизу фиксированным положительным числом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Браун Дж.Е., Джексон Э.Д. Нуклон-нуклонные взаимодействия, - М.: Атомиздат, 1979. — 248с.
2. Тейлор Дж. Теория рассеяния, - М.: Мир, 1975. — 566с.

3. Hartel M.I., Tabakin F. Nuclear Saturation and Smoothness of Nucleon-Nucleon Potentials. // Nuclear Physics, A158, Holland, Amsterdam, –1970. – Pp.1-42.
4. Sanikidze J. On the Problem of Quadrature Approximation of One Singular Integral Operator. // Comput. Meth. in Appl. Math. –2001. v.1,N2. – Pp.199-210.
5. О некоторых схемах аппроксимации сингулярных интегралов с ядром Коши и некоторых их применениях. Труды XII международного симпозиума «Методы дискретных особенностей в задачах математической физики», Харьков-Херсон, 13-18 июня –2005. с. 314-317.
6. К вопросу численного решения интегральных уравнений теории рассеяния. Вісник Харківського національного університету. Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». –2005. № 661, с. 213-221.
7. Сеге Г. Ортогональные многочлены, - М.: Физматгиз, 1962. – 500с.
8. Панасюк В.В., Саврук М.П., Дацьшин А.П. Распределение напряжений около трещин в пластинах и оболочках. - Киев: “Наукова Думка”, 1976. – 443с.
9. О численном решении одного класса сингулярных интегральных уравнений на бесконечном интервале.// Дифференц. уравнения, –2005. т.41, № 9, с. 1280-1285.