

ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИЙ МАТЬЕ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ПОРЯДКОВ

Белов А.Н.*, Туровцев В.В.**,* , Орлов Ю.Д.*

*Кафедра общей физики

**Тверской государственной медицинской университет, г. Тверь

Поступила в редакцию 25.11.2016, после переработки 10.12.2016.

В статье предложен алгоритм, позволяющий одновременно вычислять функции Матье в широком диапазоне порядков (от 0 до нескольких сотен). Алгоритм основан на аппроксимации с заранее заданной точностью функций Матье рядами Фурье. Показано, что увеличение порядка функции Матье до сотен и более требует высокой точности вычисления цепной дроби, составленной из коэффициентов ряда Фурье. Введены критерии для оценки ошибок аппроксимации. Обсуждены перспективы использования аппроксимации функций Матье высоких порядков единственной высокочастотной гармоникой. Приведены численные примеры.

Ключевые слова: торсионное уравнение Шредингера, функции Матье, ряды Фурье.

Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика. 2016. № 4. С. 45–59.

Введение

Квантово-механическое моделирование занимает значительное место среди методов исследования молекул. При этом наиболее точные модели предполагают решение соответствующих уравнений Шредингера, что является весьма трудоемкой задачей. В этой связи является актуальной разработка способов повышения эффективности подобных численных расчетов.

В [1] предложено и обосновано использование комплекснозначного базиса функций Матье при аппроксимации и численного решения одномерного торсионного уравнения Шредингера. В таком подходе вычисление элементов матрицы гамильтониана предполагает использование рядов, составленных из функций Матье n порядка от 0 до нескольких сотен. Однако эффективные алгоритмы вычисления функций Матье высоких порядков пока не разработаны. Создание таких алгоритмов и является целью настоящей работы.

1. Функции Матье

Задачи внутреннего вращения с простым периодическим потенциалом в квантовой механике сводятся в одномерном случае к уравнению Матье (1):

$$-\frac{d^2}{d\varphi^2}\Psi + 2q \cos(2\varphi)\Psi = a\Psi, \quad (1)$$

где q -параметр, a -собственное значение, при котором решение (1) становится периодичным. Функции $ce_n(q, \varphi)$, $se_n(q, \varphi)$ являются 2π -периодическими решениями уравнения Матье [2]. Здесь и далее нас будет интересовать случай действительного положительного q . Стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (2)$$

где $\hat{H} = -\frac{d}{d\varphi}F(\varphi)\frac{d}{d\varphi} + V(\varphi)$ -гамильтониан, $F(\varphi)$ -структурная функция, $V(\varphi)$ -потенциал вращения.

В [1] был рассмотрен ортонормированный базис

$$U_0 = ce_0, U_n = ce_n(q, \varphi) + ise_n(q, \varphi) \quad (3)$$

с условием нормировки $\langle U_m, U_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} U_m^* U_n d\varphi = \delta_{mn}$. При этом решение (2), структурная функция и потенциал были представлены в виде разложений по базису (3):

$$\Psi = \sum_{n=-N}^N \psi_n U_n, \quad V(\varphi) = \sum_{k=-K}^K v_k(q) U_k(q, \varphi), \quad F(\varphi) = \sum_{k=-L}^L f_k(q) U_k(q, \varphi) \quad (4)$$

с комплекснозначными коэффициентами ψ_n , $f_k(q)$, $v_k(q)$. Было показано [1], что использование базиса (3) позволяет значительно уменьшить количество удерживаемых членов рядов (4) по сравнению с разложением по тригонометрическому базису, не теряя точности решения. При этом элементы матрицы гамильтониана находятся, как [1]:

$$H_{mn} = \sum_{k=-M}^M \{f_k F_{mkn} + v_k V_{mkn}\}, \quad (5)$$

где $F_{mkn} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial U_m^*}{\partial \varphi} U_k \frac{\partial U_n}{\partial \varphi} d\varphi$, $V_{mkn} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} U_m^* U_k U_n d\varphi$, $M = \max L, K$.

2. Теоретические основы построения алгоритмов расчета функций Матье

Особенностью задачи является то, что расчет энергий торсионных уровней при $n \gg 100$ требует построения матрицы гамильтониана большой размерности ($n \times n$). Это, в свою очередь, приводит к вычислению функций Матье в широком диапазоне порядков – от 0 (для se_n от 1) до индекса n , принимающего значения нескольких сотен.

Многие прикладные задачи используют разложение функций Матье в ряд Фурье [2]:

$$ce_{2n}(\varphi, q) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r, 2n} \cos(2r\varphi), \quad (6)$$

$$ce_{2n+1}(\varphi, q) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r+1, 2n+1} \cos((2r+1)\varphi), \quad (7)$$

$$se_{2n+1}(\varphi, q) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r+1, 2n+1} \sin((2r+1)\varphi), \quad (8)$$

$$se_{2n+2}(\varphi, q) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r+2, 2n+2} \sin((2r+2)\varphi), \quad (9)$$

где $A_{2r, 2n}$, $A_{2r+1, 2n+1}$ – коэффициенты ряда Фурье для ce_{2n} и ce_{2n+1} соответственно, $B_{2r, 2n}$, $B_{2r+1, 2n+1}$ – коэффициенты ряда Фурье для se_{2n} и se_{2n+1} соответственно. Для коэффициентов Фурье-разложения функций $ce_n(\varphi, q)$ и $se_n(\varphi, q)$ имеют место соотношения:

$$Ge_m = \frac{A_{m, n}}{A_{m-2, n}}, \quad (10)$$

$$Go_m = \frac{B_{m, n}}{B_{m-2, n}}, \quad (11)$$

где Ge_m и Go_m являются звеньями цепной дроби. Для описания звеньев вводится

$$k_m = \frac{a - m^2}{q}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (12)$$

где a – собственное число функций Матье. Тогда цепная дробь принимает вид [3]: для $ce_n(\varphi, q)$ четных порядков, m -четное:

$$Ge_m = k_m - \frac{1}{k_{m-2} - \frac{1}{k_{m-4} - \frac{1}{k_{m-6} - \dots - \frac{1}{k_2 - \frac{2}{k_0}}}}}, \quad (13)$$

для $ce_n(\varphi, q)$ нечетных порядков, m -нечетное:

$$Ge_m = k_m - \frac{1}{k_{m-2} - \frac{1}{k_{m-4} - \frac{1}{k_{m-6} - \dots - \frac{1}{k_1 - 1}}}}, \quad (14)$$

для $se_n(\varphi, q)$ четных порядков, m -четное:

$$Go_m = k_m - \frac{1}{k_{m-2} - \frac{1}{k_{m-4} - \frac{1}{k_{m-6} - \dots - \frac{1}{k_2}}}}, \quad (15)$$

для $se_n(\varphi, q)$ нечетных порядков, m -нечетное:

$$Go_m = k_m - \frac{1}{k_{m-2} - \frac{1}{k_{m-4} - \frac{1}{k_{m-6} - \dots \frac{1}{k_1 + 1}}}}. \quad (16)$$

Каждое следующее звено цепной дроби можно выразить через предыдущее, используя рекуррентное соотношение

$$Ge_{m+2} = k_m - \frac{1}{Ge_m}, Go_{m+2} = k_m - \frac{1}{Go_m}, m \geq 3. \quad (17)$$

Условие нормировки примем также как в [2, 3]: для $ce_{2n}(\varphi, q)$

$$2[A_{0,2n}]^2 + \sum_{r=1}^{\infty} [A_{2r,2n}]^2 = 1, \quad (18)$$

и для $ce_{2n+1}(\varphi, q)$, $se_{2n}(\varphi, q)$ и $se_{2n+1}(\varphi, q)$

$$\sum_{r=0}^{\infty} [A_{2r+1,2n+1}]^2 = \sum_{r=0}^{\infty} [B_{2r+1,2n+1}]^2 = \sum_{r=0}^{\infty} [B_{2r+2,2n+2}]^2 = 1. \quad (19)$$

Нормировка 18 и 19 также используется в Maple, что достаточно удобно для совместимости и проверки численных расчетов.

3. Алгоритм вычисления коэффициентов Фурье для функций Матье

В большинстве источников разобраны случаи невысоких порядков функций Матье, как например в [2, 3] порядка не выше 15. На примере функций четных порядков ce_{2n} кратко опишем хорошо известный алгоритм (здесь и далее *алгоритм 1*) вычисления с заданной точностью коэффициентов ряда Фурье (6), математически формализованный в [2, 3]. Здесь и далее порядок n , параметр q а значит и собственное значение a считаются известными.

1. Введем параметр точности ε , определяющий количество учитываемых в численных расчетах звеньев цепной дроби (13).
2. В цикле с параметром j , начиная с $j = 0$, вычисляем k_{2j} согласно (12). На каждом шаге цикла с $j = 1$ рассчитываем параметр

$$d = \left| \frac{k_{2j} - \frac{1}{Ge_{2j}}}{k_{2j}} \right|, \quad (20)$$

который представляет относительную разницу между соседними звеньями цепной дроби. В случае, если d близок к 1, то при вычислении (13) вклад

таких звеньев мал, ими можно пренебречь. Подчеркнем, что индексы звеньев цепной дроби здесь четные. Увеличиваем j до тех пор, пока выполняется условие

$$d \in [1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon]. \quad (21)$$

3. При нарушении (21), т.е. пока выполняется условие $d > 1 + \varepsilon$, либо $d < 1 - \varepsilon$ попадаем в интервал индексов $j \in (j_{min}, j_{max})$. Продолжаем увеличивать j и для каждой из пар k_{2j} и $k_{2(j-1)}$ этого интервала индексов вычисляем звенья цепной дроби в соответствии с (13).

4. Вычисляем произведения $\widetilde{G}_{2g} = \prod_{\tilde{g}=g_{min}}^{\tilde{g}=g_{max}} G_{2\tilde{g}}$, где

$$g_{min} = \begin{cases} j_{min}, & \text{если } j_{min} = 2, \\ j_{min} + 2, & \text{если } j_{min} > 2, \end{cases} \quad g_{max} = j_{max} - 2.$$

5. Вычисляем сумму квадратов $\widetilde{G}_{2g} = \sum_{\tilde{g}=g_{min}}^{\tilde{g}=g_{max}} \tilde{G}_{2\tilde{g}}$.

6. Используя взаимосвязь (10) и условие нормировки (18), находим коэффициенты Фурье (6).

7. Нормировка (18) приводит к двум наборам коэффициентов ряда (6). Для удобства выберем из них такой, чтобы $ce_{2n}(0, q) > 0$. Это же условие используется при вычислении функций Матье в пакете Maple [4]. Получаем аппроксимацию функции Матье с помощью конечного набора слагаемых в разложении Фурье

$$ce_{2n}(\varphi, q) \approx \tilde{c}e_{2n}(\varphi, q) = \sum_{r=r_{min}}^{r=r_{max}} A_{2r, 2n} \cos(2r\varphi). \quad (22)$$

8. Заключительное действие – проверка решения. В [2] точность решения оценивается с помощью нахождения $\tilde{\varepsilon}$ (23) – относительной разницы значений второй производной функции Матье в заданной точке φ_t , найденных из разложения Фурье с помощью уже известных коэффициентов и из уравнения (1)

$$\tilde{\varepsilon} = \left| \frac{\xi_1 - \xi_2}{\xi_1} \right| \cdot 100\%, \quad (23)$$

где $\xi_1 = ce_{2n}''(\varphi_t, q) \approx \frac{d^2}{d\varphi^2}(\tilde{c}e_{2n}(\varphi, q)) \Big|_{\varphi=\varphi_t}$, $\xi_2 = a\tilde{c}e_{2n}(\varphi_t, q) - 2q \cos(2\varphi_t)$.

В качестве φ_t в [2] выбраны точки, кратные π , что значительно упрощает вычисление (23).

Предложенный алгоритм 1 напрямую использовать в обычном цикле по возрастанию от низких до высоких порядков функций Матье (например, с ce_0 до ce_{200} , как это требуется в квантово-механических расчетах) нельзя. Укажем на две основные причины этого.

Во-первых, ряд проведенных нами численных экспериментов показал, что использование фиксированной точности ε обрыва цепной дроби (пункт №2 в алгоритме 1) одновременно для низких и высоких порядков функций Матье приводит к недопустимым ошибкам.

Во-вторых, предлагаемая в [2] оценка ошибки вида (23) неудобна для нашей задачи – на промежутке $0 \leq \varphi \leq \pi$ количество нулей функции Матье равно ее порядку, т.е. для высоких порядков они являются сильно осциллирующими функциями. Понятно, что вблизи нулей $\xi_1 \approx \xi_2 \approx 0$, что приводит к резкому увеличению ошибки (23), которая в этом случае перестает быть адекватной оценкой. Поэтому мы предлагаем использовать

$$\varepsilon_c = \frac{d^2}{d\varphi^2}(\tilde{c}e_{2n}(\varphi, q)) + (a - 2q \cos(2\varphi)) \tilde{c}e_{2n}(\varphi, q), \tilde{\varepsilon} = \max\{|\varepsilon_c|\}, \quad (24)$$

что позволило бы контролировать абсолютную ошибку (невязку) функции Матье как корня уравнения (1) на всем отрезке $\varphi \in [0, 2\pi]$.

Квантово-механические расчеты включают вычисление определенных интегралов с пределами интегрирования от 0 до 2π от различных комбинаций функций Матье. Поэтому и оценку точности $\tilde{\varepsilon}$ следует представить в виде интегральной характеристики. Например, в качестве альтернативы (23) можно предложить оценку абсолютной ошибки в виде

$$\tilde{\varepsilon} = \int_0^{2\pi} \left| -\frac{d^2}{d\varphi^2}(\tilde{c}e_{2n}(\varphi, q)) + (a - 2q \cos(2\varphi)) \tilde{c}e_{2n}(\varphi, q) \right|, \quad (25)$$

или исходя из условия нормировки (18)

$$\tilde{\varepsilon} = \begin{cases} 2[A_{0,2n}]^2 + \sum_{r=1}^{r=r_{max}} [A_{2r,2n}]^2, & \text{если } r_{min} = 0, \\ \sum_{r=r_{min}}^{r=r_{max}} [A_{2r,2n}]^2, & \text{если } r_{min} \neq 0. \end{cases} \quad (26)$$

При оценке точности решения (23), (24), (25) введем наперед заданную небольшую величину δ . Будем считать, если $\tilde{\varepsilon} < \delta$, то решение удовлетворяет заданной точности. Для (26) введем относительную ошибку для нормировки

$$\varepsilon_r = \frac{\tilde{\varepsilon} - 1}{\tilde{\varepsilon}} \cdot 100\%. \quad (27)$$

Оценка ошибки нормировки вида (27) является способом контроля задания функций Матье высоких порядков, о чем будет сказано ниже.

4. Алгоритм вычисления коэффициентов Фурье для аппроксимации функций Матье в широком диапазоне порядков

На примере $ce_{2n}(\varphi, q)$ рассмотрим предлагаемый нами алгоритм (Алгоритм 2), последовательно аппроксимирующий все функции Матье порядков от 0 до $2n$ рядами Фурье.

Алгоритм 2

Введем обозначение ε_{2n} как точность обрыва цепной дроби для вычисления $ce_{2n}(\varphi, q)$.

1. Задаем цикл по n от нуля до нескольких сотен, как того требует численное решение (1) в квантовомеханических расчетах. При каждом прохождении цикла вычисляем коэффициенты ряда Фурье (6). Задаем точность ε_0 обрыва цепных дробей Ge_m (10). Выполняем *алгоритм 1*.
2. Проверяем решение в соответствии с (24), либо (25). Если $\tilde{\varepsilon} < \delta$ (проверка прошла удовлетворительно), увеличиваем n на 1. Если $\tilde{\varepsilon} > \delta$, уменьшаем $\tilde{\varepsilon}$ на небольшую величину $\Delta\tilde{\varepsilon}$, пока проверка не будет удовлетворительной.

Алгоритм 2 в цикле по возрастанию (с 0 для se_{2n}) до заданного порядка функций Матье позволяет вычислять коэффициенты их Фурье-разложения при фиксированном параметре q . Приведем численный пример работы *алгоритма 2* с $q = 4$. Такой параметр был получен для аппроксимации потенциала комплекснозначным базисом (3) с помощью [5], описывающего внутреннее вращение в молекуле n -бутана (C_4H_{10}) вокруг главной связи $C - C$. Для $se_{200}(\varphi, q)$ при точности обрыва цепной дроби $\varepsilon_{200} = 0,125 \cdot 10^{-4}$ найдена аппроксимация

$$se_{200} \approx 0,5025062496 \cdot 10^{-2} \cos(198\varphi) + 0,9999749982 \cos(200\varphi) - 0,4975063746 \cdot 10^{-2} \cos(202\varphi) + 0,1256601601 \cdot 10^{-4} \cos(204\varphi). \quad (28)$$

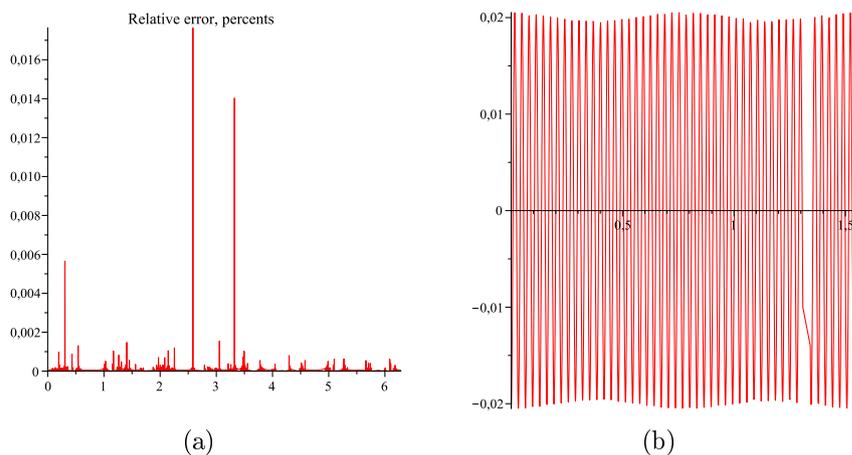


Рис. 1: Ошибки аппроксимации se_{200} рядами Фурье, полученные при реализации алгоритма 2 при $q = 4$, $\varepsilon = 0,125 \cdot 10^{-4}$: (a) относительная ошибка (23) для se_{200} в процентах, (b) проверка решения (24) для se_{200}

Приведенный пример получен в пакете Maple, где при расчетах удерживалось 10 значащих разрядов (процедура *digits*). На Рис. 1 даны графически оценки ошибки аппроксимации (28), вычисленной из (23) и (24). По оси абсцисс Рис. 1(a) отложен аргумент $\varphi \in [0, 2\pi]$, по оси ординат — $\tilde{\varepsilon}$, вычисленная из (23). Видно, что максимум относительной ошибки (23) не превышает 0,018%. Из Рис. 1(b) видно, что ошибка (24) на интервале $\varphi \in [0, \frac{\pi}{4}]$ составляет $\varepsilon_c \approx 0,02$ (этот результат справедлив и для $\varphi \in [0, 2\pi]$). Численное интегрирование показало, что интегральная ошибка (25) составляет менее 10^{-10} . Относительная ошибка (26) суммы квадратов коэффициентов $\approx 0,004\%$. Функция se_{200} сильно осциллирующая, поэтому ее

график здесь не приведен. Полученные результаты вполне удовлетворительны и применимы к решению квантовомеханических задач, о которых говорилось выше.

Отметим ряд трудностей, возникающих в случае вычисления функций Матье высоких порядков. Нахождение коэффициентов Фурье-разложения требует вычисления цепной дроби, которая для высоких порядков функций Матье будет состоять из значительного количества звеньев вида (13)-(16). Каждое последующее звено зависит от предыдущего, поэтому при вычислении звеньев высоких порядков будет накапливаться значительная погрешность, которая, в свою очередь, будет увеличиваться при вычислении произведений вида $\widetilde{G}_{2g} = \prod_{\bar{g}=g_{min}}^{\bar{g}=g_{max}} G_{2\bar{g}}$, суммы квадратов таких произведений, а в итоге и коэффициентов Фурье-разложения. При этом уменьшение не всегда может привести к адекватному результату. Дело в том, что для функций Матье высоких порядков относительная разница d (20) соседних звеньев с индексами значительно меньших порядка функции слишком мало отличается от 1 и меняется весьма медленно с ростом индекса j , что никак не влияет на все величины при обычной точности расчета. Поэтому лишь при достаточно малых ε становится возможным учет большего количества звеньев цепной дроби, с помощью которых можно будет найти большее количество коэффициентов Фурье. Однако, большинство таких коэффициентов будут значительно меньше главных гармоник, а значит не внесут весомого вклада в аппроксимацию. Отметим, что для устранения накапливаемой погрешности при малых ε приходится значительно увеличивать количество значащих разрядов в машинном представлении чисел.

Поясним это на примере для εe_{200} при $q = 4$. На Рис. 2-4 показаны графики зависимости звеньев цепной дроби и их относительные разности d от индексов, используемые при получении аппроксимации (28).

По оси абсцисс этих графиков откладывались значения $2j$, что соответствует индексам в (20). Из Рис. 2(b) видно, что на приведенном промежутке индексов относительная разность d мало отличается от 1. При точности обрыва

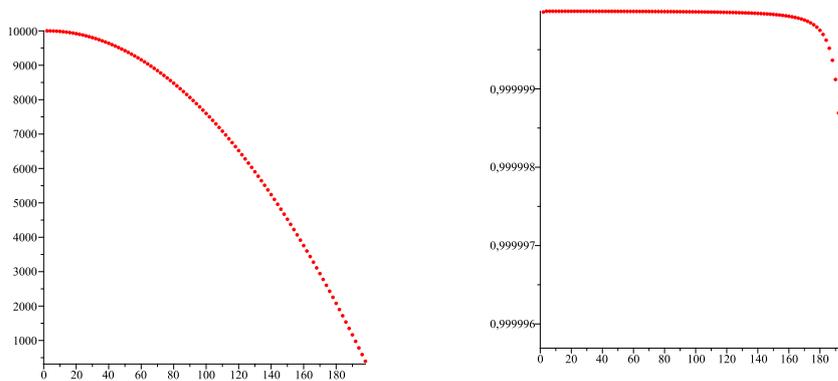


Рис. 2(a): Зависимость звеньев цепной дроби G_{2j} от индексов j на интервале $j \in [0, 99]$

Рис. 2(b): Относительная разность d между звеньями цепной дроби в зависимости от их индексов на интервале $j \in [0, 99]$

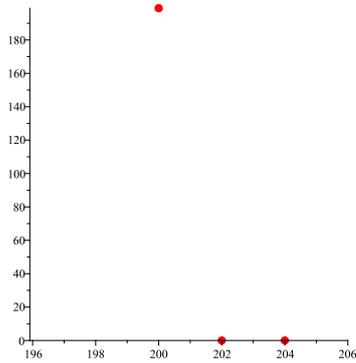


Рис. 3(a): Звенья $G_{200} = 198,9975247$, $G_{202} = -0,4975188135 \cdot 10^{-2}$, $G_{204} = -0,25258 \cdot 10^{-2}$, учитываемые в аппроксимации (28)

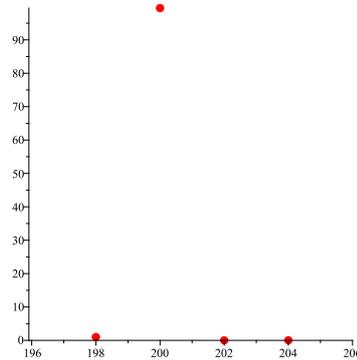


Рис. 3(b): Относительная разность для звеньев G_{200} , G_{202} , G_{204} , учитываемых в аппроксимации (28)

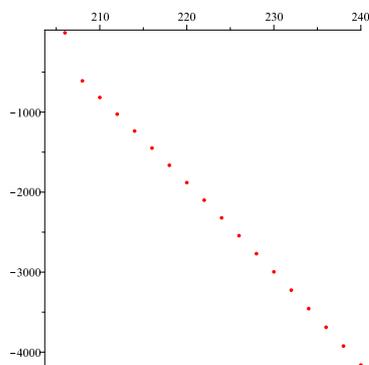


Рис. 4(a): Значения звеньев G_{206} , G_{208} и т.д., относительная разность между которыми не удовлетворяет условию (21) при $\varepsilon = 0,125 \cdot 10^{-4}$.

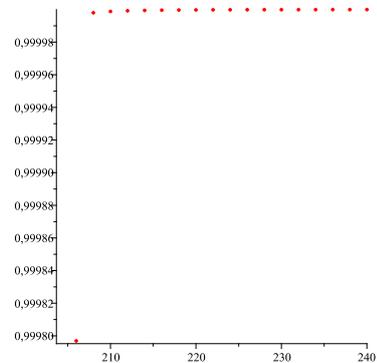


Рис. 4(b): Относительная разность для звеньев G_{206} , G_{208} и т.д., не удовлетворяющая условию (21) при $\varepsilon = 0,125 \cdot 10^{-4}$. Пренебрегаем их влиянием на аппроксимацию (28)

$\varepsilon = 0,125 \cdot 10^{-4}$ в аппроксимации (28) вкладом этих звеньев пренебрегаем. Условию (21) при $\varepsilon = 0,125 \cdot 10^{-4}$ не удовлетворяют относительные разности значений для звеньев G_{200} , G_{202} , G_{204} приведенные на Рис. 3(a). Относительная разность между следующими звеньями G_{206} , G_{208} и т.д. уже станет удовлетворять условию (21) при заданном $\varepsilon = 0,125 \cdot 10^{-4}$ поэтому их влиянием в аппроксимации (28) пренебрегаем. Для такой ε достаточно удерживать (процедура *digits* в пакете Maple) 10 знаков после запятой. Чтобы учесть большее количество звеньев, а не только G_{200} , G_{202} , G_{204} , как это сделано в аппроксимации (28), необходимо уменьшить ε , и притом значительно. Например, чтобы учесть G_{198} (а значит и коэффициент A_{196} в аппроксимации) надо установить ε порядка $\approx 0,4 \cdot 10^{-5}$, что в 3 раза меньше порядка ε , используемого в (28). При этом коэффициенты, полученные при

учете таких звеньев, как это следует из (10) и Рис. 2(а), Рис. 4(а), будут весьма незначительны.

Дальнейшее уменьшение ошибок аппроксимации связано с большим количеством значащих разрядов и значительными вычислительными трудностями, несопоставимыми с приростом точности. Ниже приведены результаты аппроксимации коэффициентов ряда Фурье для ce_{200} при $q = 4$, $\varepsilon = 10^{-6}$ с учетом 33 значащих цифр.

$$\begin{aligned} A_{192} &= 0,27387095721900759214914848835361 \cdot 10^{-10} \\ A_{194} &= 0,21471456326006964778248454374176784 \cdot 10^{-7} \\ A_{196} &= 0,12689604375174053930560859583961019 \cdot 10^{-4} \\ A_{198} &= 0,50250624956086824934361703716776380 \cdot 10^{-2} \\ A_{200} &= 0,99997499828115969306156015312674453 \\ A_{202} &= -0,49750624955383477465413448296656427 \cdot 10^{-2} \\ A_{204} &= 0,12314562703665965062596701488957590 \cdot 10^{-4} \\ A_{206} &= -0,20220999171442675617459610940192746 \cdot 10^{-7} \\ A_{208} &= 0,24780667385775221358169862055341871 \cdot 10^{-10} \\ A_{210} &= -0,2417628555240605957823657211221426 \cdot 10^{-13} \\ A_{212} &= 0,24099501897095759186324442359443072 \cdot 10^{-16} \end{aligned}$$

Видно, что по сравнению с (28) появились коэффициенты A_{192} , A_{194} , A_{196} , A_{206} , A_{208} , A_{210} , A_{212} , не вносящие, однако, значительного вклада.

5. Аппроксимация функций Матье высоких порядков единственной синусоидой

Как уже отмечалось выше, количество нулей функции Матье на промежутке $0 \leq \varphi \leq \pi$ совпадает с ее порядком [3], поэтому функции Матье высоких порядков являются сильно осциллирующими. Ряд проведенных нами численных экспериментов работы алгоритма 2 показал, что в этом случае амплитуда одной из синусоид ряда Фурье-аппроксимации значительно (на несколько порядков величины) превосходит амплитуды остальных слагаемых ряда. Тогда, функцию Матье высокого порядка можно аппроксимировать этой синусоидой, при этом незначительно теряя в точности. Проиллюстрируем это, как было сделано выше, на примере ce_{200} при том же значении параметра $q = 4$. Так из (28) видно, что коэффициент $A_{200} = 0,9999749982$ по порядку величины значительно превосходит $A_{198} = 0,5025062496 \cdot 10^{-2}$, $A_{202} = 0,4975063746 \cdot 10^{-2}$, $A_{204} = 0,1256601601 \cdot 10^{-4}$. Синусоиды $0,5025062496 \cdot 10^{-2} \cos(198\varphi)$, $0,4975063746 \cdot 10^{-2} \cos(202\varphi)$, $0,1256601601 \cdot 10^{-4} \cos(204\varphi)$ вносят незначительный вклад в аппроксимацию (28), поэтому для ряда задач допустима аппроксимация

$$ce_{200} \approx 0,9999749982 \cos(200\varphi). \quad (29)$$

В нашем случае аппроксимация (29) удовлетворяет лишь двум критериям проверки. Так, относительная ошибка (26) для суммы квадратов коэффициентов составляет $\approx 5 \cdot 10^{-3}\%$.

На Рис. 5(а) приведена относительная ошибка (23). Численные значения этих критериев проверки вполне удовлетворяют точности, требуемой для квантовомеханических расчетов. На Рис. 5(б) видно, что аппроксимация одной синусоидой

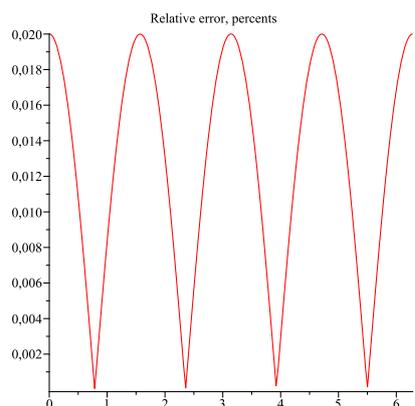


Рис. 5(a): Относительная ошибка (23) в случае аппроксимации se_{200} одной синусоидой. Максимальная величина составляет порядка 0,02%

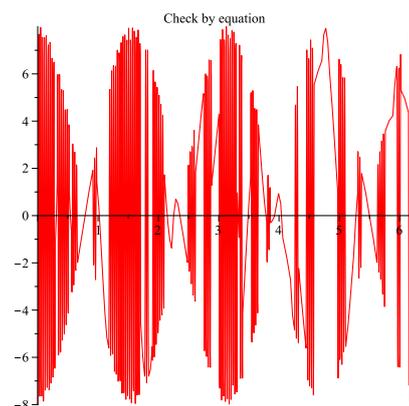


Рис. 5(b): Проверка (24) на интервале $\varphi \in [0, \frac{\pi}{2}]$ уравнением Матье для аппроксимации se_{200} одной синусоидой. Неудовлетворительный результат.

приводит к значительному расхождению с корнями (1). Интегральный критерий ошибки (25) $\tilde{\varepsilon} \approx 20,37099834$ также приводит к неудовлетворительному результату.

Поведение функций Матье существенно зависит от значения параметра q , который, в свою очередь, рассчитывается из аппроксимации структурной функции $F(\varphi)$ и потенциала $V(\varphi)$. Однако с превышением собственными значениями решений (1) и (2) потенциального барьера, влияние потенциала ослабевает. Поэтому при использовании алгоритма 2 возникает вопрос – с какого порядка становится возможной аппроксимация функций Матье единственной высокочастотной гармоникой. Наиболее просто это можно сделать, используя критерий проверки с помощью нормировки (26). Поясним это, как и выше, на примере se_{200} . В наборе коэффициентов аппроксимации (28) выбираем синусоиду с максимальной по абсолютной величине амплитудой A_{max} . Затем вычисляем относительную ошибку нормировки (26). В случае если $\varepsilon_r < \delta$, где δ – небольшая наперед заданная величина, то аппроксимация единственной высокочастотной гармоникой удовлетворяет нашим требованиям. Можно проверять выполнение этого условия в цикле для каждого порядка функции Матье. Функции Матье порядком выше, чем функция, для которой это условие выполняется, можно также аппроксимировать одной высокочастотной гармоникой. В нашем примере se_{202} , se_{204} и т.д. также можно аппроксимировать одной синусоидой с максимальной амплитудой.

Приемлемость аппроксимации функций Матье высоких порядков одной синусоидой для квантово-механических расчетов в вариационных процедурах требует отдельного исследования, которое будет продолжено в следующих работах. Отметим очевидное – такая аппроксимация значительно сокращает количество операций при вычислении элементов матрицы гамильтониана и может пригодится, по крайней мере, при быстрой приблизительной оценке результатов численного решения квантово-механических задач.

Заключение

Данная работа является частью реализации перспективного предложения об использовании функций Матье в качестве базиса для численного решения уравнения Шредингера. Решены ряд задач, связанных с вычислением значений функций Матье. Алгоритм, разработанный нами для аппроксимации функций Матье рядами Фурье, ляжет в основу одного из модулей создаваемого программного комплекса квантово-механических расчетов. Особенность такого алгоритма – изменяющаяся точность обрыва цепной дроби при увеличении в цикле порядка функции Матье. Особый интерес представляет аппроксимация функций Матье высоких порядков одной синусоидой. Такое приближение незначительно уступает в точности, но заметно может сократить число операций при вычислении элементов матрицы гамильтониана. Все это позволит повысить эффективность квантовых расчетов и моделирования свойств сложных молекулярных соединений.

Список литературы

- [1] Орлов Ю.Д., Туровцев В.В., Цирулев А.Н. Потенциал и матричные элементы гамильтониана внутреннего вращения в молекулах в базе функций Матье // Оптика и спектроскопия. 2015. Т. 119, № 2. С. 199–203.
- [2] McLachlan N. W. Theory and application of Mathieu functions. 2-d edition. Oxford University Press, 1951.
- [3] Abramowitz M., Stegun I. A. Handbook of Mathematical Functions. NY: Dover, 1965.
- [4] Официальная страница Maple на сайте разработчика [Электронный ресурс]. URL: <http://www.maplesoft.com/products/Maple/> (дата обращения: 17.08.2016)
- [5] Цирулев А.Н., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В., Белов А.Н. Программа аппроксимации значений энергий функциями Матье для квантовомеханического расчета сложных молекулярных соединений. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015613106 от 04.03.2015 г.

Библиографическая ссылка

Белов А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Особенности вычисления функций Матье произвольных порядков // Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика. 2016. № 4. С. 45–59.

Сведения об авторах

1. Белов Александр Николаевич

старший преподаватель кафедры общей физики физико-технического факультета Тверского государственного университета.

Россия, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33, ТвГУ, ФТФ.

E-mail: abelov@tversu.ru

2. Туровцев Владимир Владимирович

доцент кафедры физики, математики и медицинской информатики Тверского государственного медицинского университета.

Россия, 170100, г. Тверь, ул. Советская, д. 4, ТГМУ.

E-mail: Turovcev.VV@tversu.ru

3. Орлов Юрий Дмитриевич

профессор кафедры общей физики физико-технического факультета Тверского государственного университета.

Россия, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33, ФТФ. E-mail: Orlov.YD@tversu.ru

COMPUTATION FEATURES FOR MATHIEU FUNCTIONS OF ARBITRARY ORDERS

Belov Alexander Nikolaevich

Assistant at General Physics department, Tver State University
Russia, 170100, Tver, 33 Zhelyabova str., TSU.
E-mail: abelov@tversu.ru

Turovtsev Vladimir Vladimirovich

Associate Professor at Mathematics and Medical Informatics department,
Tver State Medical University
Russia, 170100, Tver, 4 Sovetskaya av., TSMU.
E-mail: Turovcev.VV@tversu.ru

Orlov Yuriy Dimitrievich

Professor at General Physics department, Tver State University
Russia, 170100, Tver, 33 Zhelyabova str., TSU.
E-mail: Orlov.YD@tversu.ru

Received 25.11.2016, revised 10.12.2016.

An algorithm for successive computation of wide-ranging order Mathieu functions (from 0 to several hundreds) is proposed. The algorithm is based on approximation by Fourier series with beforehand accuracy. It is shown, that the increasing in order of Mathieu function up to hundreds and more requires the high precision calculation of the continued fraction consisting of Fourier coefficients. The criteria for evaluating of accuracy are introduced. Perspective of using of high-order Mathieu function approximation for single high-frequency harmonic is discussed. Numerical examples are given.

Keywords: Schrodinger torsion equation, Mathieu functions, Fourier series.

Bibliographic citation

Belov A.N., Turovtsev V.V., Orlov Yu.D. Computation features for Mathieu functions of arbitrary orders. *Vestnik TvGU. Seriya: Prikladnaya Matematika* [Herald of Tver State University. Series: Applied Mathematics], 2016, no. 4, pp. 45–59.

References

- [1] Turovtsev V.V., Orlov Y.D., Tsirulev A.N. Potential and matrix elements of the hamiltonian of internal rotation in molecules in the basis set of Mathieu functions. *Optics And Spectroscopy*, 2015, vol. 119(2), pp. 191–194.

-
- [2] McLachlan N.W. *Theory and Application of Mathieu Functions*. 2-d edition. Oxford University Press, 1951.
- [3] Abramowitz M., Stegun I.A. *Handbook of Mathematical Functions*. NY: Dover, 1965.
- [4] Maple's official page on the developer's website [Electronic resource]. URL: <http://www.maplesoft.com/products/Maple/> (access date: 17.08.2016)
- [5] Tsirulev A.N., Orlov Yu.D., Turovtsev V.V., Belov A.N. *Program for approximation of Mathieu functions energy values for quantum-mechanical calculation of complex molecular compounds*. Certificate of State registration of computer programs № 2015613106 from 04.03.2015.