

О методах численного решения одной спектральной задачи

В. И. Зубов, А. Ф. Албу

Федеральный исследовательский центр "Информатика и управление" Российской академии наук,
г. Москва, Россия

Аннотация. В работе проводится сравнительный анализ некоторых методов численного решения спектральных задач, которые могут быть использованы при решении задач оптимизации в наноэлектронике. Одной из целей проводимого анализа является изучение возможности использования вариационных методов при решении спектральных задач. Такой подход представляется предпочтительным при решении многомерных задач. Сравнение методов проводится на примере решения одномерной спектральной задачи. Сделан вывод, что в одномерном случае эффективным является численно-аналитический метод, а в многомерном случае – вариационный метод.

Ключевые слова: спектральные задачи, вариационные методы, преобразование Прюфера, численные алгоритмы.

DOI 10.14357/20718632220404

Введение

При математическом моделировании самых разнообразных процессов нередко приходится сталкиваться с необходимостью решать спектральные задачи. Примерами могут служить всевозможные волновые процессы в физике и технике, процессы в экономике, биологии, экологии.

Особое место спектральные задачи занимают в микроэлектронике. Объясняется это тем, что в последнее время математическое моделирование процессов в полупроводниковых гетероструктурах стало весьма эффективным инструментом для определения ключевых параметров таких структур. Это оказалось возможным благодаря широкому внедрению в материаловедение численных методов. В частности, численные методы активно используются для определения профиля концентрации свободных носителей заряда в полупроводниковых легированных гетероструктурах, содержащих квантовую яму. При этом расчет вольт-фарадной характеристики гетероструктуры с квантовой ямой осуществляется с помощью численного самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера [1].

При нахождении самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера основные вычислительные затраты связаны с решением уравнения Шредингера. Поэтому использование эффективного алгоритма решения спектральной задачи определяет эффективность решения всей задачи в целом. Следует также принять во внимание то, что при математическом моделировании распределения носителей заряда в полупроводниковых наноструктурах основной вклад в распределение вносят первые собственные функции спектральной задачи. При этом погрешность в определении собственного значения на 0.015 эВ приводит к погрешности определения заселенности

уровня на порядок. Отсюда следует, что точность и эффективность определения первых собственных значений и собственных функций является ключевым элементом при математическом моделировании современных наноструктур.

1. Постановка задачи

Пусть на отрезке $x \in [a, b]$ заданы функции $p(x)$ и $q(x)$, обладающие свойствами:

– имеются K точек $\{X_1, X_2, \dots, X_K\}$, в которых функции $p(x)$ и $q(x)$ имеют разрывы первого рода;

– эти точки делят интервал (a, b) на $(K + 1)$ непересекающихся подинтервалов $(X_0, X_1), \dots, (X_K, X_{K+1})$ так, что $[a, b] = \bigcup_{n=0}^K [X_n, X_{n+1}]$, при этом $X_0 = a, X_{K+1} = b$.

– на каждом подотрезке $[X_n, X_{n+1}]$, $(n = 0, \dots, K)$ справедливо

$$p(x) \in C^1([X_n, X_{n+1}]), p(x) \geq p_0 > 0, \quad q(x) \in C([X_n, X_{n+1}]), q(x) \geq 0.$$

Рассматривается следующая спектральная задача: найти число λ и функцию $u(x) \in C([a, b])$, на каждом подотрезке $[X_n, X_{n+1}]$, $(n = 0, \dots, K)$ удовлетворяющую условиям:

$$u(x) \in C^2([X_n, X_{n+1}]),$$

$$-(p(x)u'(x))' + q(x) \cdot u(x) = \lambda \cdot u(x), \quad x \in (X_n, X_{n+1}), \tag{1}$$

$$u(a) = 0, \quad u(b) = 0, \tag{2}$$

$$u(x) \neq 0, \quad x \in [a, b], \tag{3}$$

при этом в точках разрыва должны выполняться условия сопряжения

$$u(x)|_{x=X_n-0} = u(x)|_{x=X_n+0}, \quad [p(x)u'(x)]_{x=X_n-0} = [p(x)u'(x)]_{x=X_n+0}, \quad (n = 1, \dots, K) \tag{4}$$

Сформулированная спектральная задача может быть рассмотрена также в вариационной постановке. Для этого введем в рассмотрение оператор $L(u)$. Область определения $D(L)$ оператора $L(u)$ состоит из функций класса $u(x) \in C^2([X_n, X_{n+1}]) \cap C([a, b])$, $(n = 1, \dots, K)$, удовлетворяющих условиям (2), (4). Каждой функции $u(x) \in D(L)$ оператор $L(u)$ ставит в соответствие кусочно-непрерывную функцию $L(u) = -(p(x)u'(x))' + q(x) \cdot u(x) \in L_2(a, b)$. Этот оператор обладает следующими свойствами [2-3]:

– область определения оператора $L(u)$ плотна в $L_2(a, b)$;

– он самосопряженный относительно скалярного произведения пространства $L_2(a, b)$, т.е. для всех $u \in D(L)$ и $v \in D(L)$ справедливо тождество Лагранжа $(Lu, v) = (u, Lv)$;

– он положительно определенный, т.е. для всех $u \in D(L)$ справедливо неравенство $(Lu, u) \geq \gamma(u, u)$ с $\gamma > 0$.

Учитывая эти свойства оператора $L(u)$, построим энергетическое пространство H_L . Для этого на множестве функций из $D(L)$ введем энергетическое скалярное произведение

$$[u, v] = (Lu, v) = \int_a^b (p(x) \cdot u'(x) \cdot v'(x) + q(x) \cdot u(x) \cdot v(x)) dx$$

и энергетическую норму $\|u\|_* = [u, u]^{1/2}$. Пополним $D(L)$ в норме $\|\cdot\|_*$, т.е. присоединим к $D(L)$ предельные элементы всевозможных фундаментальных по норме $\|\cdot\|_*$ последовательностей $\{u_k\} \in D(L)$. Учитывая свойства оператора $L(u)$, мы можем расширить его на пространство H_L .

Сформулированная выше спектральная задача эквивалентна следующей задаче минимизации функционала [2-4]:

а) первое собственное значение: среди функций $u(x) \in H_L$, $\|u\|_{L_2} > 0$ найти функцию $u_1(x)$, которая минимизирует функционал $\frac{[u, u]}{(u, u)}$, т.е.

$$\lambda_1 = \min_{\substack{u \in H_L \\ \|u\|_{L_2} > 0}} \frac{(Lu, u)}{(u, u)}, \quad (5)$$

б) k -е собственное значение: среди функций $u(x) \in H_L$, удовлетворяющих условиям $(u, u_j) = 0$, $(j = 1, \dots, k-1)$, $\|u\|_{L_2} > 0$, найти функцию $u_k(x)$, которая минимизирует функционал $\frac{[u, u]}{(u, u)}$, т.е.

$$\lambda_k = \min_{\substack{u \in H_L \\ (u, u_j) = 0, j < k, \\ \|u\|_{L_2} > 0}} \frac{(Lu, u)}{(u, u)}. \quad (5^*)$$

2. Вариационный алгоритм решения спектральной задачи

Для численного решения спектральной задачи воспользуемся вариационно-разностным методом (модифицированным процессом Рунге [5]). Будем искать минимум функционала (5) или (5*) в подпространстве H_L^h пространства H_L . Подпространство H_L^h определим как линейную оболочку, натянутую на систему базисных функций $\varphi_i(x) \in H_L$, $(i = 1, \dots, N-1)$. Базисные функции $\varphi_i(x)$ определим следующим образом. Введем пространственную сетку (в общем случае, неравномерную). На отрезке $[a, b]$ выберем систему "опорных" точек $\{x_i\}_{i=0}^N$ так, что $x_0 = a$, $x_N = b$, $x_i < x_{i+1}$ для всех $0 \leq i < N$, причем каждая точка разрыва функций $p(x)$ и $q(x)$ совпадает с одной из опорных точек. Обозначим через $h_{i-1/2}$ расстояние между опорными точками x_{i-1} и x_i , т.е. $h_{i-1/2} = x_i - x_{i-1}$, $i = \overline{1, N}$. На каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, $i = \overline{1, N}$ определим две вспомогательные функции

$$\omega_{i-1/2}^R(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad \omega_{i-1/2}^L(x) = \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}}, \quad x \in [x_{i-1}, x_i].$$

Базисные функции $\varphi_i(x) \in H_L$, $(i = 1, \dots, N-1)$ - непрерывные кусочно-линейные функции вида

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \omega_{i-1/2}^R(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \omega_{i+1/2}^L(x) = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0, & x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}]. \end{cases}$$

Тогда каждая функция $u(x) \in H_L^h \subset H_L$ может быть представлена как $u(x) = \sum_{i=1}^{N-1} c_i \varphi_i(x)$,

при этом условия (2) будут выполнены автоматически. Функционалы $[u, u] = (Lu, u)$ и (u, u) сводятся к функциям $(N-1)$ переменных $\bar{c} = (c_1, \dots, c_{N-1})^T$. Найдем вид этих функций.

$$1). [u, u] = (Lu, u) = \left(L \sum_{i=1}^{N-1} c_i \varphi_i(x), \sum_{j=1}^{N-1} c_j \varphi_j(x) \right) = \sum_{i,j=1}^{N-1} c_i c_j (L\varphi_i, \varphi_j).$$

Принимая во внимание то, что $(L\varphi_i, \varphi_j) = 0$ при $|i-j| \geq 2$, после несложных преобразований получим

$$[u, u] = (Lu, u) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{c_i^2 - 2c_i c_{i-1} + c_{i-1}^2}{h_{i-1/2}^2} p_{i-1/2} + c_{i-1}^2 q_{i-1/2}^{LL} + 2c_{i-1} c_i q_{i-1/2}^{LR} + c_i^2 q_{i-1/2}^{RR} \right). \quad (6)$$

В соотношении (6) следует считать, что $c_0 = c_N = 0$ и используются следующие обозначения:

$$p_{i-1/2} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} p(x) dx, \quad q_{i-1/2}^{\alpha\beta} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} q(x) \cdot \omega_{i-1/2}^\alpha(x) \cdot \omega_{i-1/2}^\beta(x) dx, \quad \alpha, \beta = (L, R) \quad (7)$$

$$2). (u, u) = \left(\sum_{i=1}^{N-1} c_i \varphi_i(x), \sum_{j=1}^{N-1} c_j \varphi_j(x) \right) = \sum_{i,j=1}^{N-1} c_i c_j (\varphi_i, \varphi_j).$$

По аналогии с тем, как это сделано для функционала $[u, u] = (Lu, u)$, получим

$$(u, u) = \sum_{i=1}^N \left(c_{i-1}^2 \tilde{q}_{i-1/2}^{LL} + 2c_{i-1} c_i \tilde{q}_{i-1/2}^{LR} + c_i^2 \tilde{q}_{i-1/2}^{RR} \right), \quad (8)$$

где $\tilde{q}_{i-1/2}^{\alpha\beta} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega_{i-1/2}^\alpha(x) \cdot \omega_{i-1/2}^\beta(x) dx$ - значение $q_{i-1/2}^{\alpha\beta}$, вычисленное при $q(x) \equiv 1$.

Если функции $p(x)$ и $q(x)$ заданы аналитически, то желательно точно вычислить интегралы, встречающиеся в выражениях (7). В общем случае для вычисления констант $p_{i-1/2}$, $q_{i-1/2}^{\alpha\beta}$ и $\tilde{q}_{i-1/2}^{\alpha\beta}$ следует использовать численные методы интегрирования выражений (7). В настоящей работе полагалось, что функции $p(x)$ и $q(x)$ аппроксимируются кусочно-линейными функциями так, что их значения известны в "опорных" точках $\{x_i\}_{i=0}^N$ сетки (векторы $\{p_i\}$ и $\{q_i\}$). При этом следует учесть следующее. Если x_k , ($k = \overline{1, N-1}$) окажется точкой разрыва функций $p(x)$ и/или $q(x)$, то в этой точке указанные функции будут иметь два значения: предельные значения функций в точке x_k слева и справа. В результате функции $p(x)$ и $q(x)$ на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, $i = \overline{1, N}$ определяются соотношениями

$$p(x) = p_{i-1} \cdot \omega_{i-1/2}^L(x) + p_i \cdot \omega_{i-1/2}^R(x), \quad q(x) = q_{i-1} \cdot \omega_{i-1/2}^L(x) + q_i \cdot \omega_{i-1/2}^R(x). \quad (9)$$

В этом случае интегралы вычисляются точно, и константы $p_{i-1/2}$ и $q_{i-1/2}^{\alpha\beta}$ определяются следующими равенствами:

$$\begin{aligned} p_{i-1/2} &= \frac{p_{i-1} + p_i}{2} \cdot h_{i-1/2}, & q_{i-1/2}^{LL} &= \frac{3q_{i-1} + q_i}{12} \cdot h_{i-1/2}, \\ q_{i-1/2}^{RR} &= \frac{q_{i-1} + 3q_i}{12} \cdot h_{i-1/2}, & q_{i-1/2}^{LR} &= \frac{q_{i-1} + q_i}{12} \cdot h_{i-1/2}. \end{aligned}$$

После проведенной аппроксимации минимизация функционала (5) или (5*) сводится к минимизации функции $F(c_1, \dots, c_{N-1})$ вида (здесь также следует считать, что $c_0 = c_N = 0$)

$$F(c_1, \dots, c_{N-1}) = \frac{\sum_{i=1}^N \left(\frac{c_i^2 - 2c_i c_{i-1} + c_{i-1}^2}{h_{i-1/2}^2} p_{i-1/2} + c_{i-1}^2 q_{i-1/2}^{LL} + 2c_{i-1} c_i q_{i-1/2}^{LR} + c_i^2 q_{i-1/2}^{RR} \right)}{\sum_{i=1}^N \left(c_{i-1}^2 \tilde{q}_{i-1/2}^{LL} + 2c_{i-1} c_i \tilde{q}_{i-1/2}^{LR} + c_i^2 \tilde{q}_{i-1/2}^{RR} \right)}. \quad (10)$$

Для минимизации функции (10) использовались как градиентный метод, так и метод Ньютона.

Необходимые для работы этих методов градиент $\left\| \frac{\partial F}{\partial c_i} \right\|_{i=1}^{N-1}$ функции $F(c_1, \dots, c_{N-1})$ и ее матрица

Гессе $\left\| \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial c_j} \right\|_{i,j=1}^{N-1}$ определялись аналитически. При вычислении первого собственного значения и

первой собственной функции решалась задача безусловной минимизации функции (10). При вычислении остальных собственных значений и собственных функций минимизация функции (10) проводилась в подпространстве, ортогональном всем найденным ранее собственным функциям. В дальнейшем будем обозначать этот алгоритм как M1.

3. Решение спектральной задачи с помощью пакета LAPACK

Второй из рассматривавшихся методов решения спектральной задачи состоял из определения собственных значений и собственных функций симметричной квадратной матрицы с помощью программы "dsyev" стандартного пакета LAPACK. Симметричная матрица A , спектральные характеристики которой исследовались, определялась из соотношения (6) по формуле

$$A = \{A_{ij}\}_{i,j=1}^{N-1} = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial ((Lu, u))}{\partial c_i \partial c_j} \right\}_{i,j=1}^{N-1}, \text{ а именно}$$

$$A_{ij} = \begin{cases} q_{i-1/2}^{LR} - \frac{p_{i-1/2}}{h_{i-1/2}^2}, & j = i-1, \\ q_{i+1/2}^{LR} - \frac{p_{i+1/2}}{h_{i+1/2}^2}, & j = i+1, \\ q_{i-1/2}^{RR} - \frac{p_{i-1/2}}{h_{i-1/2}^2} + q_{i+1/2}^{LL} - \frac{p_{i+1/2}}{h_{i+1/2}^2}, & j = i, \\ 0, & |j-i| \geq 2. \end{cases} \quad (11)$$

Этот метод будем обозначать как M2.

Следует отметить, что в работе [6] обсуждается вопрос решения уравнения Шредингера (решение спектральной задачи) с помощью конечно-разностного метода. Показывается, что после дискретизации спектральная задача может быть сформулирована в матричном виде. Если используется равномерная разностная сетка, то получающаяся матрица является симметричной, что позволяет эффективно находить решение задачи. При использовании же неравномерной сетки, что нередко является необходимым для аккуратного воспроизведения волновых функций, симметричность матрицы нарушается. В работе [6] авторы предлагают такое преобразование матрицы, полученной при дискретизации уравнения Шредингера на неравномерной сетке, в результате которого матрица становится симметричной.

Подход, описываемый в данном разделе настоящей работы, также связан с определением собственных значений и собственных функций симметричной матрицы, причем матрица (11) является автоматически симметричной независимо от того, используется равномерная или неравномерная разностная сетка.

4. Алгоритм тригонометрической прогонки

В основе алгоритма тригонометрической прогонки лежит важная замена переменных, предложенная Прюфером [7, 8]. Она состоит в замене дифференциального уравнения (1) эквивалентной нормальной системой дифференциальных уравнений первого порядка

$$u'(x) = \frac{1}{p(x)} \cdot w(x), \quad w'(x) = (q(x) - \lambda) \cdot u(x) \quad (12)$$

и в последующем переходе в фазовой плоскости к полярным координатам. А именно, введем новые функции $\varphi(x)$ и $\rho(x)$ по правилу:

$$u(x) = \rho(x) \cdot \cos \varphi(x), \quad p(x) \cdot u'(x) = \rho(x) \cdot \sin \varphi(x), \quad x \in (a, b). \quad (13)$$

Подстановка выражений (4.2) в систему уравнений (4.1) приводит к следующей нелинейной системе дифференциальных уравнений [7], [8]

$$\varphi'(x) + \frac{1}{p(x)} \cdot \sin^2 \varphi(x) + (\lambda - q(x)) \cdot \cos^2 \varphi(x) = 0, \quad x \in (a, b), \quad (14)$$

$$\varphi(a) = 0.5 \cdot \pi, \quad \varphi(b) = 0.5 \cdot \pi - k\pi, \quad (k = 1, 2, 3, \dots), \quad (15)$$

$$\frac{d \ln \rho(x)}{dx} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{p(x)} + q(x) - \lambda \right) \cdot \sin 2\varphi(x), \quad x \in (a, b). \quad (16)$$

Важность полученной системы дифференциальных уравнений связана с тем, что уравнение (14) содержит только одну неизвестную функцию $\varphi(x)$. Поэтому спектральная задача по существу свелась к интегрированию и исследованию одного нелинейного уравнения первого порядка (14). Если найдено решение краевой задачи (14)-(15), то функцию $\rho(x)$ можно получить путем интегрирования уравнения (16).

Для нахождения k -го собственного значения λ_k следует найти решение уравнения (14), удовлетворяющее условиям (15) при заданном k . Для этого при фиксированном λ решается задача Коши для уравнения (14) и первого из условий (15). В результате получается некоторое значение $\varphi(b, \lambda)$ решения задачи Коши в конечной точке. Условие $\varphi(b, \lambda_k) = 0.5 \cdot \pi - k\pi$ является характеристическим уравнением для определения k -го собственного значения λ_k . Решая это уравнение каким-нибудь методом (например, методом деления отрезка пополам), находим k -е собственное значение λ_k . Для определения соответствующей k -й собственной функции $u_k(x)$ решаем задачу Коши для уравнения (16) с произвольным ненулевым начальным условием, с помощью первого из соотношений (13) и найденных функций $\varphi_k(x)$ и $\rho_k(x)$ строим функцию $u_k(x)$ и затем нормируем ее.

Для интегрирования уравнений (14) и (16) можно использовать разные численные алгоритмы. В настоящей работе интегрирование проводилось с использованием двух методов: метода Рунге-Кутты 4-го порядка (метод М3) и численно-аналитического метода (метод М4). В обоих случаях, как и в вариационном алгоритме, отрезок $[a, b]$ разбивался на подотрезки опорными точками

$$\{ x_i \}_{i=0}^N.$$

В случае метода Рунге-Кутты, описанному в [9-10], на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, ($i = \overline{1, N}$) функции $p(x)$ и $q(x)$ аппроксимировались линейными функциями по формулам (9).

Что касается численно-аналитического метода, то здесь на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ эти функции полагались постоянными $p_{i-1/2}$ и $q_{i-1/2}$, значения которых равнялись средним значениям функций $p(x)$ и $q(x)$ на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, т.е.

$$p_{i-1/2} \cdot h_{i-1/2} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} p(x) dx, \quad q_{i-1/2} \cdot h_{i-1/2} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} q(x) dx.$$

Постоянство функций $p(x)$ и $q(x)$ на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ позволяет здесь аналитически определить решение уравнения (14). Действительно, обозначим через φ_i значение искомой функции $\varphi(x)$ в точке x_i , а через $\beta_{i-1/2}$ следующую константу $\beta_{i-1/2} = (\lambda - q_{i-1/2}) \cdot p_{i-1/2}$ (при фиксированном λ). Тогда значение функции $\varphi(x)$ на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ определяется аналитически следующими формулами:

а) если $[1 + (\beta_{i-1/2} - 1) \cdot \cos^2 \varphi_{i-1}] = 0$, то

$$\varphi(x) \equiv \varphi_{i-1}, \quad x \in [x_{i-1}, x_i]; \quad (17)$$

б) если $\beta_{i-1/2} = 0$, то

$$\operatorname{tg} \varphi(x) = \frac{p_{i-1/2} \cdot \operatorname{tg} \varphi_{i-1}}{p_{i-1/2} + (x - x_{i-1}) \cdot \operatorname{tg} \varphi_{i-1}}, \quad x \in [x_{i-1}, x_i]; \quad (18)$$

в) если $\beta_{i-1/2} > 0$, то

$$\operatorname{tg} \varphi(x) = \sqrt{\beta_{i-1/2}} \cdot \operatorname{tg} \left[-\frac{\sqrt{\beta_{i-1/2}} \cdot (x - x_{i-1}) + \operatorname{arctg} \left(\frac{\operatorname{tg} \varphi_{i-1}}{\sqrt{\beta_{i-1/2}}} \right)}{p_{i-1/2}} \right], \quad x \in [x_{i-1}, x_i]; \quad (19)$$

г) если $\beta_{i-1/2} < 0$, то

$$\operatorname{tg} \varphi(x) = \sqrt{-\beta_{i-1/2}} \cdot \frac{1 + A}{1 - A}, \quad x \in [x_{i-1}, x_i], \quad (20)$$

$$A = \frac{\operatorname{tg} \varphi_{i-1} - \sqrt{-\beta_{i-1/2}}}{\operatorname{tg} \varphi_{i-1} + \sqrt{-\beta_{i-1/2}}} \cdot \exp \left(-\frac{2\sqrt{-\beta_{i-1/2}} \cdot (x - x_{i-1})}{p_{i-1/2}} \right).$$

Начинается расчет с интервала $[x_0, x_1]$. С помощью одной из указанных выше формул и условия $\varphi_0 = 0.5 \cdot \pi$ определяется значение φ_1 функции $\varphi(x)$ в точке x_1 . Учитывая непрерывность функции $\varphi(x)$, решаем задачу Коши для уравнения (14) с начальным условием $\varphi(x_1) = \varphi_1$ на отрезке $[x_1, x_2]$ и находим значение φ_2 функции $\varphi(x)$ в точке x_2 , и так далее. В результате получаем значение φ_N функции $\varphi(x)$ в точке $x_N = b$, и подбираем параметр λ таким, чтобы выполнялось условие $\varphi_N = \varphi(x_N) = \varphi(b) = 0.5 \cdot \pi - k\pi$.

После того, как собственное значение λ_k будет найдено, интегрируется уравнение (16) и строится собственная функция $u_k(x)$ с помощью первого из соотношений (13).

5. Результаты численных экспериментов

Было проведено большое количество экспериментов, касающихся численного решения спектральной задачи (1)–(4) с разными входными данными. Одна и та же задача решалась вариационным методом (М1); с помощью стандартного пакета, определяющего собственные числа и собственные векторы матрицы (М2); алгоритмом тригонометрической прогонки с использованием метода Рунге-Кутты 4-го порядка для численного интегрирования уравнения (14) (М3); численно-аналитической версией алгоритма тригонометрической прогонки (М4). Критерием при сравнении алгоритмов выступала точность вычисления первых собственных значений. Наиболее характерные из полученных результатов приводятся в этом разделе и базируются на четырех сериях расчетов. Интерес представляли первые 20 собственных значений.

В первой серии расчетов рассматривалась простейшая спектральная задача:

$$\begin{aligned}
 -u''(x) &= \lambda \cdot u(x), & x &\in (0, \pi), \\
 u(0) &= 0, & u(\pi) &= 0, & u(x) &\neq 0, & x &\in [0, \pi].
 \end{aligned}$$

Решение этой задачи хорошо известно:

$$\lambda_k = k^2, \quad u_k(x) = \sqrt{2} \sin kx, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Отрезок $[0, \pi]$ разбивался равномерно на N подотрезков, и расчеты проводились для $N = 25, 50, 100, 500, 1000, 2000$. Отметим сразу, что численно-аналитический метод М4 позволяет получить первые двадцать собственных значений с относительной точностью $\approx 5 \cdot 10^{-12}\%$ независимо от числа N разбиений отрезка $[0, \pi]$. Что касается других методов, то некоторые из полученных результатов для $N = 50, 100, 500$ представлены в Табл. 1-3. Цифры в таблице указывают на относительное отклонение δ вычисленных собственных значений спектральной задачи от теоретических в процентах.

Анализ результатов показал, что методы М1 и М2 ведут себя практически одинаково (отличие наблюдается в 3-4 значащих цифрах). Для всех рассмотренных N качественная зависимость относительного отклонения собственного значения от его номера для указанных методов сохраняется. Эта зависимость при $N = 100$ представлена на Рис. 1.

Табл. 1. Относительное отклонение собственных значений, $N = 50$ (первая серия).

$N = 50$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
М1	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$3.0 \cdot 10^{-1}$	$5.3 \cdot 10^{-1}$	$8.3 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^0$	$7.6 \cdot 10^0$	$1.4 \cdot 10^{+1}$
М2	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$3.0 \cdot 10^{-1}$	$5.3 \cdot 10^{-1}$	$8.2 \cdot 10^{-1}$	$3.2 \cdot 10^0$	$7.2 \cdot 10^0$	$1.2 \cdot 10^{+1}$
М3	0.0	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$3.7 \cdot 10^{-2}$	$3.0 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^0$	$5.9 \cdot 10^{+1}$	$7.4 \cdot 10^{+1}$	$8.4 \cdot 10^{+1}$

Табл. 2. Относительное отклонение собственных значений, $N = 100$ (первая серия).

$N = 100$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
М1	$8.2 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$7.4 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$8.3 \cdot 10^{-1}$	$1.9 \cdot 10^0$	$3.3 \cdot 10^0$
М2	$8.2 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$7.4 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$8.2 \cdot 10^{-1}$	$1.8 \cdot 10^0$	$3.3 \cdot 10^0$
М3	0.0	$7.8 \cdot 10^{-5}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	$2.3 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$2.7 \cdot 10^{+1}$	$6.4 \cdot 10^{+1}$	$7.7 \cdot 10^{+1}$

Табл. 3. Относительное отклонение собственных значений, $N = 500$ (первая серия).

$N = 500$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
М1	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$3.0 \cdot 10^{-3}$	$5.3 \cdot 10^{-3}$	$8.2 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$7.4 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$
М2	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$3.0 \cdot 10^{-3}$	$5.3 \cdot 10^{-3}$	$8.2 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$7.4 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$
М3	0.0	$1.3 \cdot 10^{-7}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$	$3.8 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$2.9 \cdot 10^{-2}$	$3.0 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{+1}$

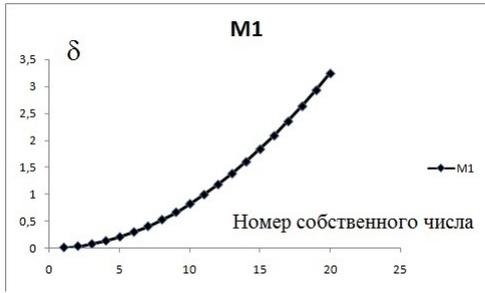


Рис. 1. Зависимость числа δ от номера числа (метод М1, $N = 100$, первая серия)

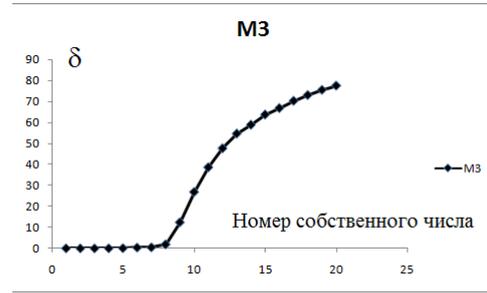


Рис. 2. Зависимость числа δ от номера числа (метод М3, $N = 100$, первая серия)

Табл. 4. Зависимость от числа N максимального δ для первых 20 собственных значений

	$N = 25$	$N = 50$	$N = 100$	$N = 500$	$N = 1000$	$N = 2000$
М1	$4.4 \cdot 10^{+1}$	$1.4 \cdot 10^{+1}$	$3.3 \cdot 10^0$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$8.2 \cdot 10^{-3}$
М2	$4.3 \cdot 10^{+1}$	$1.2 \cdot 10^{+1}$	$3.2 \cdot 10^0$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$8.2 \cdot 10^{-3}$
М3	$8.6 \cdot 10^{+1}$	$8.4 \cdot 10^{+1}$	$7.7 \cdot 10^{+1}$	$1.2 \cdot 10^{+1}$	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$

Что касается метода тригонометрической прогонки М3, то во всех примерах первые собственные значения (их количество зависит от N) вычисляются точнее, чем в случае использования методов М1 и М2, но остальные собственные значения вычисляются заметно грубее. Зависимость относительного отклонения собственного значения при $N = 100$ для метода М3 представлена на Рис. 2.

Наконец, в Табл. 4 представлена зависимость от числа N максимального по 20 первым собственным значениям относительного отклонения (в процентах) вычисленных собственных значений от их теоретических величин.

Судя по последним результатам, можно сказать, что методы М1 и М2 оказываются предпочтительнее, если речь идет об определении первых 20 собственных значений спектральной задачи. В то же время следует напомнить, что численно-аналитический метод тригонометрической прогонки М4 восстанавливает эти собственные значения с точностью $\approx 5 \cdot 10^{-12}\%$.

Во второй серии расчетов рассматривалась более интересная спектральная задача:

$$\begin{aligned}
 & -u''(x) + x \cdot (x - \pi) \cdot u(x) = \lambda \cdot u(x), & x \in (0, \pi), \\
 & u(0) = 0, & u(\pi) = 0, & u(x) \neq 0, & x \in [0, \pi].
 \end{aligned}$$

В качестве "точного" решения этой задачи выбиралось решение, построенное численно-аналитическим вариантом метода тригонометрической прогонки (М4) при $N = 2000$. Значение $N = 2000$ выбрано из тех соображений, что дальнейшее увеличение этого числа приводит к изменению собственных значений в 9-й значащей цифре.

Как и в предыдущем примере, отрезок $[0, \pi]$ разбивался равномерно на N подотрезков, и расчеты проводились для $N = 25, 50, 100, 500, 1000, 2000$ с помощью всех описанных выше методов.

Отметим, что в случае второго примера численно-аналитический метод М4 уже не позволяет получить первые двадцать собственных значений с относительной точностью $\approx 5 \cdot 10^{-12}\%$, как это было в первом примере.

Некоторые из полученных результатов для $N = 50, 100, 500$ представлены в Табл. 5–7.

Как и в первом примере, анализ результатов показал, что методы М1 и М2 ведут себя практически одинаково. Поэтому в Табл. 5–7 представлены результаты использования только вариационного метода М1. Кроме того, в этих таблицах появилась строка с результатами, полученными с помощью метода М4. Цифры в таблицах, как и ранее, указывают на относительное отклонение вычисленных собственных значений спектральной задачи от «теоретических» значений в процентах.

Табл. 5. Относительное отклонение собственных значений, $N = 50$ (вторая серия).

$N = 50$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
M1	$1.6 \cdot 10^{-2}$	$3.5 \cdot 10^{-1}$	$4.6 \cdot 10^{-1}$	$6.8 \cdot 10^{-1}$	$9.7 \cdot 10^{-1}$	$3.4 \cdot 10^0$	$7.3 \cdot 10^0$	$1.3 \cdot 10^{+1}$
M3	$5.7 \cdot 10^{-2}$	$3.2 \cdot 10^{-2}$	$5.7 \cdot 10^{-2}$	$3.5 \cdot 10^{-1}$	$9.9 \cdot 10^{-1}$	$5.9 \cdot 10^{+1}$	$7.9 \cdot 10^{+1}$	$8.5 \cdot 10^{+1}$
M4	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$5.9 \cdot 10^{-2}$	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$9.2 \cdot 10^{-3}$	$5.6 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$6.1 \cdot 10^{-4}$	$3.5 \cdot 10^{-4}$

Табл. 6. Относительное отклонение собственных значений, $N = 100$ (вторая серия).

$N = 100$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
M1	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$8.7 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-1}$	$8.6 \cdot 10^{-1}$	$1.9 \cdot 10^0$	$3.3 \cdot 10^0$
M3	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$7.6 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{+1}$	$6.4 \cdot 10^{+1}$	$7.7 \cdot 10^{+1}$
M4	$2.8 \cdot 10^{-2}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$2.3 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$8.4 \cdot 10^{-5}$

Табл. 7. Относительное отклонение собственных значений, $N = 500$ (вторая серия).

$N = 500$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
M1	$7.3 \cdot 10^{-4}$	$3.7 \cdot 10^{-3}$	$4.4 \cdot 10^{-3}$	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$9.7 \cdot 10^{-3}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$7.5 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$
M3	$5.0 \cdot 10^{-4}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$8.4 \cdot 10^{-5}$	$8.3 \cdot 10^{-5}$	$2.4 \cdot 10^{-4}$	$3.0 \cdot 10^{-2}$	$2.9 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{+1}$
M4	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$5.6 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$8.6 \cdot 10^{-5}$	$5.3 \cdot 10^{-5}$	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-6}$	$3.1 \cdot 10^{-6}$

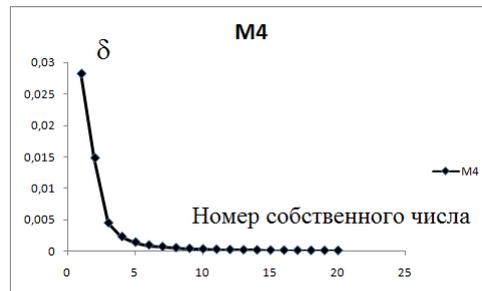


Рис. 3. Зависимость числа δ от номера числа (метод M4, $N = 100$, вторая серия).

Результаты, представленные в Табл. 5–7, позволяют сделать следующие выводы. Во-первых, методы M1 и M2 ведут себя практически одинаково. Качественная зависимость относительного отклонения собственного значения здесь также сохраняется, и она совпадает с той, которая представлена на Рис. 1. Во-вторых, как и в предыдущем примере, при использовании метода M3 первые собственные значения (их количество зависит от N) вычисляются точнее, чем в случае использования методов M1 и M2, но остальные собственные значения вычисляются заметно грубее. Качественное поведение относительного отклонения собственных значений похоже на представленное на Рис. 2. В-третьих, при использовании метода M4 грубее всего вычисляется первое собственное значение (в отличие от других методов). По мере роста номера собственного значения относительная погрешность его вычисления методом M4 падает. Зависимость относительного отклонения собственного значения при $N = 100$ представлена на Рис. 3.

Наконец, в Табл. 8 представлена зависимость от числа N максимального по 20 первым собственным значениям относительного отклонения (в процентах) вычисленных собственных значений от их теоретических величин.

Последние результаты показывают, что методы M1 и M2 оказываются предпочтительнее метода M3, но проигрывают методу M4.

Табл. 8. Зависимость от числа N максимального δ для первых 20 собственных значений.

	$N = 25$	$N = 50$	$N = 100$	$N = 500$	$N = 1000$	$N = 2000$
M1	$4.3 \cdot 10^{+1}$	$1.3 \cdot 10^{+1}$	$3.3 \cdot 10^0$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$8.3 \cdot 10^{-3}$
M3	$8.8 \cdot 10^{+1}$	$8.5 \cdot 10^{+1}$	$7.7 \cdot 10^{+1}$	$1.1 \cdot 10^{+1}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$
M4	$4.5 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{-4}$	0.0

В **третьей серии** расчетов рассматривался пример, заимствованный из работы [6]. В этом примере изучаются стационарные состояния электрона в простейшей прямоугольной квантовой яме, образованной трехслойной гетероструктурой $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$. Изучение состояний электрона сводится к решению спектральной задачи (1)–(4) при следующих значениях обезразмеренных параметров:

$$a = -38.4, \quad b = +38.4,$$

$$p(x) = \begin{cases} 0.414128487, & 2.8 \leq |x| \leq 38.4, \\ 0.568654042, & |x| \leq 2.8, \end{cases} \quad q(x) = \begin{cases} 0.23, & 2.8 \leq |x| \leq 38.4, \\ 0, & |x| \leq 2.8. \end{cases}$$

Так как функции $p(x)$ и $q(x)$ являются кусочно-постоянными, то численно-аналитический вариант метода тригонометрической прогонки M4 позволяет получить точные собственные значения при любом ($N \geq 3$) разбиении отрезка $[a, b]$, лишь бы точки разрыва функций $p(x)$ и $q(x)$ совпадали с опорными точками.

Отрезок $[-38.4, +38.4]$ разбивался равномерно на 768 подотрезков, и расчеты проводились с помощью всех описанных методов.

Некоторые из полученных результатов представлены в Табл. 9. Как и в предыдущих примерах, анализ результатов показал, что методы M1 и M2 ведут себя практически одинаково. Поэтому в Табл. 9 представлены результаты использования только вариационного метода M1. Цифры в таблицах, как и ранее, указывают на относительное отклонение вычисленных собственных значений спектральной задачи от теоретических в процентах.

Результаты, представленные в Табл. 9, позволяют сделать следующие выводы. Во-первых, напомним, что методы M1 и M2 ведут себя практически одинаково. Во-вторых, алгоритм тригонометрической прогонки с использованием метода Рунге-Кутты (метод M3) примерно на два порядка точнее определяет первые 20 собственных значений, чем вариационный метод M1 и матричный метод M2. В-третьих, налицо немонотонность в точности определения собственных значений как методом M1, так и методом M3. Но в целом по мере роста номера собственного значения относительная погрешность его вычисления методами M1, M2 и M3 возрастает.

Пример, рассмотренный в третьей серии расчетов, позволил также выявить одну особенность метода тригонометрической прогонки. При некоторых значениях входных параметров предложенный алгоритм не позволял получить решение спектральной задачи. Используемый в алгоритме метод "стрельбы" расходился: малые ($\approx 10^{-5}$) изменения параметра λ приводили к большим (≈ 1) изменениям величины $\varphi(b)$. Качественная картина происходящего представлена на Рис. 4.

Табл. 9. Относительное отклонение собственных значений, $N = 768$ (третья серия)

$N = 768$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
M1	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$4.7 \cdot 10^{-5}$	$7.3 \cdot 10^{-4}$	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$4.2 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$3.1 \cdot 10^{-2}$
M3	$1.6 \cdot 10^{-6}$	$9.5 \cdot 10^{-5}$	$4.3 \cdot 10^{-6}$	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$2.1 \cdot 10^{-4}$	$4.7 \cdot 10^{-4}$	$7.1 \cdot 10^{-4}$

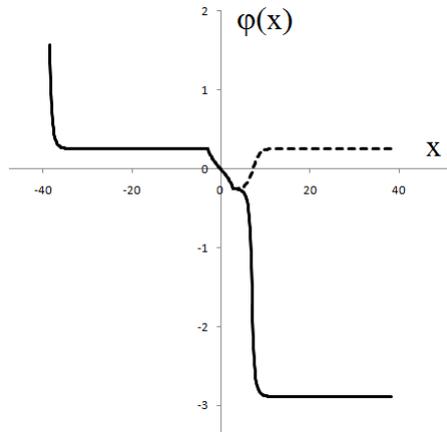


Рис. 4. Иллюстрация одной особенности метода тригонометрической прогонки

После точки $x_* = 2.8$ (точка выхода из потенциальной ямы) функция $\varphi(x)$ из-за машинных ошибок округления в зависимости от вычисленного параметра β (см. соотношения (17)–(20)) продолжается либо по сплошной кривой, либо по штриховой кривой. Для предотвращения подобной ситуации, возникающей при близких к нулю значениях параметра λ , нужно проводить дополнительный анализ и продолжать функцию $\varphi(x)$ так, чтобы она монотонно убывала. При рассмотрении конкретного примера из третьей серии расчетов указанную трудность удалось преодолеть также следующим простым способом. Решалась задача Коши для уравнения (14) и первого из условий (15) слева направо от $x = a$ до $x = x_*$ и задача Коши для уравнения (14) и второго из условий (15) справа налево от $x = b$ до $x = x_*$. Параметр λ выбирался из условия равенства значений функции $\varphi(x)$ в точке $x = x_*$, т.е. $\varphi(x_* - 0) = \varphi(x_* + 0)$.

Пример, рассматривавшийся в **четвертой серии** расчетов, заимствован из работы [11]. В этой работе авторы, в частности, рассчитывали распределение электронной плотности в трехслойной гетероструктуре AlGaIn/GaN/AlGaIn. Толщины слоев составляли 15.2, 8.0 и 30.0 безразмерных единиц. Для вычисления электронной плотности авторы решали систему связанных уравнений Пуассона и Шредингера. Используемая функция $p(x)$ тождественно равнялась 0.1671 во всех слоях гетероструктуры. Расчеты проводились на отрезке $[a, b]$ с границами $a = 0$, $b = 53.2$. Полученное в результате решения указанной системы уравнений распределение потенциальной энергии (функция $q(x)$) представлено в безразмерном виде на Рис. 5.

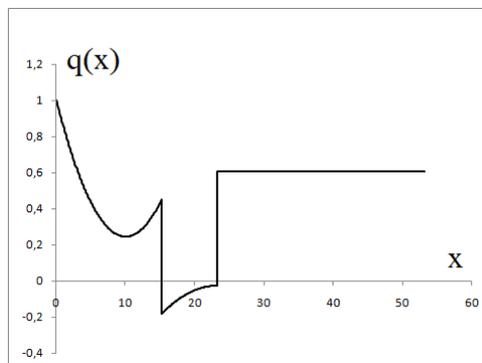


Рис. 5. Распределение потенциальной энергии в структуре

Табл. 10. Относительное отклонение собственных значений, $N = 532$ (четвертая серия)

$N = 532$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_{10}	λ_{15}	λ_{20}
M1	$3.6 \cdot 10^{-2}$	$6.9 \cdot 10^{-1}$	$1.8 \cdot 10^{-1}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$	$7.4 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-1}$	$2.9 \cdot 10^{-2}$	$3.7 \cdot 10^{-2}$
M3	$5.5 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-1}$	$3.8 \cdot 10^{-2}$	$3.9 \cdot 10^{-2}$	$4.7 \cdot 10^{-3}$	$2.6 \cdot 10^{-2}$	$5.1 \cdot 10^{-3}$	$8.9 \cdot 10^{-3}$
M4	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$	$9.3 \cdot 10^{-3}$	$4.1 \cdot 10^{-3}$	$8.7 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$2.4 \cdot 10^{-4}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$

В качестве "точного" решения этой спектральной задачи выбиралось решение, построенное численно-аналитическим вариантом метода тригонометрической прогонки (M4) при $N = 5320$. Значение $N = 5320$ выбрано из тех соображений, что дальнейшее увеличение этого числа приводит к изменению собственных значений в 9-й значащей цифре.

При проведении сравнения отрезок $[0, 53.2]$ разбивался равномерно на 532 подотрезков, и расчеты проводились с помощью всех описанных методов. Некоторые из полученных результатов представлены в Табл. 10. Как и в предыдущих примерах, анализ результатов показал, что методы M1 и M2 ведут себя практически одинаково. Поэтому в Табл. 10 представлены результаты использования только вариационного метода M1. Цифры в таблицах, как и ранее, указывают на относительное отклонение вычисленных собственных значений спектральной задачи от теоретических в процентах.

Результаты, представленные в Табл. 10, позволяют сделать следующие выводы. Во-первых, напомним, что методы M1 и M2 ведут себя практически одинаково. Во-вторых, алгоритм тригонометрической прогонки с использованием метода Рунге-Кутты (метод M3) точнее определяет первые 20 собственных значений, чем вариационный метод M1 и матричный метод M2. В-третьих, налицо немонотонность в точности определения собственных значений у всех методов. В целом по мере роста номера собственного значения относительная погрешность его вычисления методами M1, M2 и M3 возрастает. Что касается метода M4, то здесь наибольшие погрешности наблюдаются при определении первых двух собственных значений, но по мере роста номера собственного значения относительная погрешность его вычисления методом M4 падает.

На примере, рассматривавшемся в четвертой серии расчетов, проявляется также влияние ошибок аппроксимации функций $p(x)$ и $q(x)$ на точность определения собственных значений. На сетке с $N = 532$ (Табл. 10) метод M3 (используется кусочно-линейная аппроксимация функций $p(x)$ и $q(x)$) первые два собственных значения определяет точнее, чем метод M4 (используется кусочно-постоянная аппроксимация функций $p(x)$ и $q(x)$). Но уже увеличение размера сетки в два раза приводит к тому, что все 20 собственных значений определяются методом M4 точнее, чем методом M3.

Заключение

Анализ результатов проведенных вычислительных экспериментов, часть из которых представлена выше, позволяет сделать следующие выводы. При решении спектральной задачи (1)–(4) в случае, когда необходимо получить несколько первых собственных значений и собственных функций, целесообразно воспользоваться численно-аналитической версией метода тригонометрической прогонки. При этом для получения собственных значений часто можно использовать не слишком подробное разбиение отрезка $[a, b]$, так как для $N \approx 25 \div 50$ относительная погрешность вычисленных собственных значений не превосходит 1%. После нахождения нужных собственных значений определение соответствующих собственных функций проводится безытерационно путем решения уравнения (3.5) методом Рунге-Кутты на достаточно подробной сетке ($N \approx 500 \div 1000$). Если же речь идет о многомерном случае, то здесь представляется разумным использовать описанный выше вариационный метод.

Литература

1. Zubkov V.I. Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона // Физика и техника полупроводников. 2006. 40(10): 1236–1240.
2. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. - 416 С.
3. К. Ректорис. Вариационные методы в математической физике и технике. М.: Мир, 1985. - 590 С.
4. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. Учеб. пособие. - 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 608 С. — ISBN 978-5-8114-0892-4.
5. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1970. - 512 С.
6. Tan I-H., Snider, G.L., Chang, L.D., and Hu E.L. 1990. A self-consistent solution of Schrodinger-Poisson equations using a nonuniform mesh // Journal of Applied Physics. 68(8): 4071–4076.
7. Трикоми Ф. Дифференциальные уравнения. М.: Издательство иностранной литературы, 1962. - 352 С.
8. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. М.: Издательство Московского физико-технического института, 1994. — 528 С.
9. Петров И.Б. Вычислительная математика для физиков. Учеб. пособие. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2021. — 376 С. — ISBN 978-5-9221-1887-3.
10. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. — 9-е изд. — Москва: Лаборатория знаний, 2020. — 636 С. — ISBN 978-5-00101-836-0.
11. Yazar Z., and Ozdemir B., 2005. Ozdemir M. Mobility of electrons in a AlGaIn/GaN QW: Effect of temperature, applied field, surface roughness and well width // Physica status solidi (b), 242(14): 2872–2884.

Албу Алла Филипповна. Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, г. Москва, Россия. Ведущий научный сотрудник, доктор физико-математических наук. Количество печатных работ: 97 (в т.ч. 4 монографии). Область научных интересов: вычислительная математика, теория оптимизации, быстрое автоматическое дифференцирование, обратные задачи. E-mail: alla.albu@mail.ru

Зубов Владимир Иванович. Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, г. Москва, Россия. Главный научный сотрудник, доктор физико-математических наук, профессор. Количество печатных работ: 149 (в т.ч. 4 монографии). Область научных интересов: вычислительная математика, теория оптимизации, механика сплошных сред, быстрое автоматическое дифференцирование, обратные задачи. E-mail: vladimir.zubov@mail.ru

On Methods for the Numerical Solution of one Spectral Problem

V. I. Zubov, A. F. Albu

Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences

Abstract. In the paper a comparative analysis of some methods for numerical solution of spectral problems that can be used to solve optimization problems in nanoelectronics is used. One of the goals of the analysis is to study the possibility of using variational methods to solve spectral problems. This approach seems preferable when solving multidimensional problems. Comparison of methods is carried out on the example of solving a one-dimensional spectral problem. It is concluded that the numerical-analytical method is effective in the one-dimensional case, and the variational method is effective in the multidimensional case.

Keywords: spectral problems, variational methods, Prufer transformation, numerical algorithms.

DOI 10.14357/20718632220404

References

1. Zubkov, V.I. 2006. Modelirovanie vol't-faradnykh karakteristik geterostruktur s kvantovymi yamami s pomoshch'yu samosoglasovannogo resheniya uravnenij Shredingera i Puassona [Modeling capacitance-voltage characteristics of heterostructures with quantum wells using self-consistent solution of Schrodinger and Poisson equations] // Fizika i tekhnika poluprovodnikov. 40(10): 1236–1240.
2. Marchuk, G.I., and Agoshkov, V.I. 1981. Vvedenie v proekcionno-setochnye metody [Introduction to projection-grid methods]. Moscow: Nauka. The main editorial office of the physical and mathematical literature, 416 p.
3. K. Rektoris. 1985. Variacionnye metody v matematicheskoy fizike i tekhnike [Variational methods in mathematical physics and engineering]. Moscow: Mir, 590 p.

4. Marchuk, G.I. 2022. Metody vychislitel'noj matematiki [Methods of computational mathematics]. Study guide. 4-rd eddition, Saint Petersburg: Lan, 608p.
5. Mihlin, S.G. 1970. Variacionnye metody v matematicheskoy fizike [Variational methods in mathematical physics]. Moscow: Nauka. The main editorial office of the physical and mathematical literature, 512 p.
6. Tan I-H., Snider, G.L., Chang, L.D., and Hu E.L. 1990. A self-consistent solution of Schrodinger-Poisson equations using a nonuniform mesh // Journal of Applied Physics. 68(8): 4071–4076.
7. Triкоми F. 1962. Differencial'nye uravneniya [Differential equations]. Moscow: Publishing House of Foreign Literature, 352 p.
8. Fedorenko R.P. 1994. Vvedenie v vychislitel'nuyu fiziku [Introduction to Computational Physics]. Moscow: Publishing House of the Moscow Institute of Physics and Technology, 528 p.
9. Petrov I.B. 2021. Vychislitel'naya matematika dlya fizikov [Computational mathematics for physicists]. Ucheb. posobie. Moscow: FIZMATLIT, 376 p. — ISBN 978-5-9221-1887-3.
10. Bahvalov N.S., ZHidkov N.P., and Kobel'kov G.M. 2020. CHislennye metody [Numerical methods]. — 9-e izd. Moscow: Laboratoriya znaniy, 636 p. — ISBN 978-5-00101-836-0.
11. Yarar Z., and Ozdemir B., 2005. Ozdemir M. Mobility of electrons in a AlGa_N/Ga_N QW: Effect of temperature, applied field, surface roughness and well width // Physica status solidi (b), 242(14): 2872–2884.

Albu A. F. Doctor of science, leading scientific researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, Vavilov str., 40, Moscow, 119333, Russia, e-mail: alla.albu@mail.ru

Zubov V. I. Professor, main scientific researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, Vavilov str., 40, Moscow, 119333, Russia, vladimir.zubov@mail.ru