

П-882



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11 - 12016

ПУЗЫНИН
Игорь Викторович

**НЕПРЕРЫВНЫЙ АНАЛОГ МЕТОДА НЬЮТОНА
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ
КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ**

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени доктора физико-математических наук

Дубна 1978

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор ГРЕБНИКОВ Е.А.
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник КАЛЖИКИН Н.Н.
доктор физико-математических наук,
профессор ЛЯШКО А.Д.

Ведущая организация:

Институт физики высоких энергий (г. Серпухов)

Защита состоится "___" _____ 197__ года в ___ часов
на заседании специализированного совета Д047.01.04 при лабора-
тории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ по адресу:
г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "___" _____ 197__ г.

Ученый секретарь специализированного
совета

кандидат физ.-мат. наук

Пузынина

ПУЗЫНИНА Т.П.

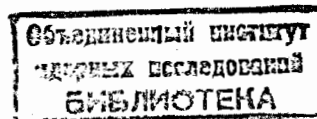
I. Общая характеристика работы

В диссертации разработан метод численного решения задач на собственные значения для систем дифференциальных и интегродифференциальных уравнений, возникающих при исследовании в рамках квантовой механики широкого круга проблем теоретической физики. Представляемый метод, эффективно учитывающий особенности разнообразных физических проблем, позволяет единообразно решать для квантовомеханических систем задачу на связанные состояния и задачу рассеяния в области вещественных значений энергии.

Актуальность проблемы

Решение задач на собственные значения — одна из важнейших проблем, к которой приводят исследования в различных разделах математической и теоретической физики, например, в квантовой механике, квантовой теории поля, мезоатомной физике, квантовой химии, теории ядра. Появление задач, рассматриваемых в диссертации, связано с исследованием квантовомеханических систем, описываемых уравнением Шредингера и подобными ему уравнениями. Полное исследование задач этого класса с помощью аналитических и качественных методов возможно лишь в исключительных случаях. Нередко из-за сложности математической постановки задач единственно возможным является их численное решение. При этом создание обоснованного и эффективного алгоритма численного решения поставленной задачи, обеспечивающего необходимую точность результатов, и его реализация на электронной вычислительной машине (ЭВМ) эквивалентны, в определенном смысле, ее полному решению.

Современные проблемы теоретической физики предъявляют повышенные требования к методам их численного анализа. Особую сложность представляют спектральные задачи, в которых решение является существенно неединственным и требуется обеспечить выделение из множества необходимого решения. Многочисленные подходы к приближенному решению задач для уравнения Шредингера, развитые в различных разделах теоретической физики, в большинстве своем носят частный характер и предназначены для решения узко специальных задач. Поэтому особенно актуальной является проблема разработки единого численного метода решения сингулярной задачи Штурма-



Лиувилля для систем дифференциальных и интегродифференциальных уравнений. Существенно при этом, чтобы метод был применим к задаче с далекодействующими эффективными потенциалами, заданными численно. Важно также, чтобы он был устойчив как при вычислении уровней энергии слабосвязанных систем, так и при решении задачи рассеяния при малых энергиях столкновения.

Работы, положенные в основу реферируемой диссертации, выполнены в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ ОИЯИ.

Цели и задачи исследований

Цель исследований, представленных в диссертации, состоит в разработке численного метода решения сингулярной задачи Штурма-Лиувилля для систем дифференциальных и интегродифференциальных уравнений, предназначенного для решения широкого круга задач теоретической физики, связанных с мезомолекулярными процессами, теорией ядра и составными моделями элементарных частиц.

Для системы дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + 2ME - \frac{L(L+1)}{R^2} \right] f_i(R) - \sum_{j=1}^N [V_{ij}(R) + Q_{ij}(R) \frac{d}{dR}] f_j(R) = \alpha I,$$

где $M > 0$ - эффективная масса задачи, а $L = 0, 1, 2, \dots$ - орбитальный момент состояния квантовомеханической системы, исследуемая задача состоит в нахождении значений энергии E и соответствующих им нетривиальных волновых функций $f_i(R)$, ограниченных на полуоси $0 \leq R < \infty$ и удовлетворяющих системе (I) и условию регулярности

$$f_i(0) = 0. \quad (2)$$

При поведении потенциалов $V_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$, обеспечивающих существование таких решений, в квантовой механике рассматриваются две основные задачи: задача на связанные состояния и задача рассеяния.

В задаче на связанные состояния, при $E < 0$, ограниченные нетривиальные решения задачи (I)-(2) существуют только при дискретных значениях $E^{(\nu)}$ ($\nu = 0, 1, 2, \dots$), каждому из ко-

торых соответствует вектор волновых функций $f^{(\nu)}(R)$ с экспоненциально убывающей асимптотикой при $R \rightarrow \infty$

$$f_i(R) \sim \exp(-\alpha_i R), \quad (3d)$$

где $\alpha_i = [V_{ii}(\infty) - 2ME]^{1/2}$

В задаче рассеяния, при $E > 0$, искомые решения существуют для всех значений E . В N -канальной задаче рассеяния с s ($s \leq N$) открытыми каналами, когда

$$0 \leq V_{33}(\infty) < 2ME < V_{s+1, s+1}(\infty),$$

полный набор волновых функций в открытых каналах ($i = 1, 2, \dots, s$) имеет осциллирующую асимптотику при $R \rightarrow \infty$

$$f_i^{(\nu)}(R) \sim \sin\left(k_i R - \frac{L_i \pi}{2} + \delta_i^{(\nu)}\right), \quad \nu = 1, 2, \dots, s, \quad (3c)$$

где $k_i = [2ME - V_{ii}(\infty)]^{1/2}$, $\delta_i^{(\nu)} = \delta_{i\nu}^{(\nu)}(E) + \frac{\pi}{2}(1 - \delta_{i\nu})$, и экспоненциально убывающую (3d) в закрытых каналах ($i = s+1, \dots, N$). Одним из объектов изучения в задаче рассеяния является функциональная зависимость фазы рассеяния $\delta_{\nu}^{(\nu)}(E)$ от энергии E .

Учет нелокальных взаимодействий в квантово-механической системе приводит к рассмотрению задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для систем интегродифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} - \lambda(E) \right] f_i(R) + \sum_{j=1}^N [K_{ij}(R) f_j(R) + \int_0^{\infty} D_{ij}(R, R') f_j(R') dR'] = 0. \quad (4)$$

В диссертации разработан единый подход к численному решению этих задач на основе непрерывного аналога метода Ньютона. Для этого было необходимо:

I. Разработать общий подход к приближенной постановке задач непрерывного и дискретного спектра как задачи на собственные значения. В этой постановке асимптотические условия (3d), (3c) аппроксимируются условиями вида

$$\left[d_i(E, R) \frac{d}{dR} + f_i(E, R) \right] f_i(R) = 0 \quad (3)$$

в достаточно удаленной точке $R = R_{max} \gg 1$.

2. Сформулировать перечисленные задачи единообразно в виде нелинейного функционального уравнения

$$\varphi(\lambda, y) \equiv \begin{pmatrix} Ay - \lambda y \\ S(\lambda, y) \end{pmatrix} = 0, \quad (5)$$

где A - линейный оператор в вещественном гильбертовом пространстве, λ - действительное число, S - нормировочный функционал.

Исследовать локальные условия сходимости непрерывного аналога метода Ньютона

$$\begin{aligned} \varphi'(\xi(t)) \frac{d\xi}{dt} &= -\varphi(\xi(t)), & (6) \\ 0 \leq t < \infty, \quad \xi &= (\lambda, y), \\ \xi(0) &= \xi_0 & (7) \end{aligned}$$

при $t \rightarrow \infty$ к изолированному решению (λ^*, y^*) уравнения (5) при условии, если оно существует. При решении физических задач такая постановка оправдана, поскольку в них зачастую имеется априорная информация о существовании искомых решений, спектральных характеристиках исследуемых операторов, качественном поведении волновых функций в области действия потенциалов и их асимптотике. В большинстве существующих численных методов эта априорная информация используется лишь для идентификации полученного математического решения с ожидаемым физическим результатом. Использование этих данных с самого начала вычислительного процесса в качестве начального условия (7) может существенно ускорить получение искомого решения.

3. Осуществить дискретное представление по параметру t непрерывного ньютоновского процесса (6)-(7) на основе метода Эйлера и исследовать особенности полученного итерационного процесса.

4. Разработать модификацию итерационного процесса для оператора, представимого в виде

$$A = \mathcal{D} + \mathcal{Y}, \quad (8)$$

позволяющую решать упрощенные "возмущенные" уравнения для итерационных поправок, и исследовать условия сходимости этого модифицированного процесса. С помощью данного процесса можно единообразно решать задачи для систем дифференциальных и интегродифференциальных уравнений.

Данные исследования предназначены для теоретического обоснования предложенного метода.

Практическое применение этого метода к решению различных физических задач потребовало разработки алгоритмов численного решения частичной задачи Штурме-Лиувилля для систем (1) и (4). Для этого было необходимо:

1. Обосновать в рамках непрерывного аналога метода Ньютона дискретную аппроксимацию решаемых задач с помощью метода конечных разностей. Для рассматриваемого круга физических задач этот подход позволяет наиболее полно использовать числовую информацию, если потенциалы уравнений заданы таблично, и устранить проблему выхода из сингулярной точки $R=0$. Кроме того, теория конечноразностной задачи Штурме-Лиувилля наиболее полно исследована в настоящее время благодаря трудам А.Н.Тихонова, А.А.Самарского и их учеников.

2. Выполнить численные исследования на моделях, близких к реальным задачам, точности предложенных алгоритмов, изучить особенности их конкретной реализации и возможные пути оптимизации.

При численном решении задач, связанных с мезомолекулярными процессами, составными моделями элементарных частиц и теорией ядра были выполнены детальные исследования с целью:

1. Разработать для данного круга задач способы аппроксимации сингулярных задач граничными задачами на конечном интервале.

2. Дать простые алгоритмы построения начальных приближений к искомым решениям.

3. Получить устойчивые вычислительные схемы решения задач на связанные состояния и задач рассеяния для значений энергии, близких к нулю, путем соответствующего выбора нормировочного функционала для волновых функций.

4. Разработать эффективные алгоритмы и программы численного решения конкретных физических задач.

5. Оценить точность полученных результатов.

6. Предложить новые подходы к решению квантовомеханической задачи рассеяния.

Численное решение широкого круга задач теоретической физики с помощью разработанного метода является практическим доказательством его эффективности и универсальности.

Представляемая работа является одной из первых, в которой разработан единый подход к численному решению основных задач квантовой механики: задачи на связанные состояния и задачи рассеяния.

Предложенный метод решения задачи рассеяния как задачи на собственные значения дает возможность получать новые функциональные зависимости для параметров матрицы рассеяния, которые представляют интерес как для чисто теоретических исследований, так и для численного решения конкретных физических задач. Этот метод имеет определенные преимущества перед существующими в особо интересных для физики резонансных областях энергии, а также в задачах рассеяния с учетом закрытых каналов реакций.

Разработанный в диссертации общий подход к решению задач квантовой механики на основе непрерывного аналога метода Ньютона, рассмотренного впервые М.К.Гавуриным, представляет интерес для развития методов и алгоритмов численного решения задач на собственные значения. Исследуемые вопросы построения итерационных схем на основе метода Эйлера для дискретного представления непрерывного ньютоновского процесса (6)-(7) и их оптимизации за счет выбора шага интегрирования и нормировочного функционала в уравнении (5) относятся к развитию теории А.А.Самарского для операторно-резонансных схем в рассматриваемом классе задач (5) и являются обобщением метода дополненного вектора, разработанного Н.Н.Калиткиным. Предложенные и реализованные в работе новые вычислительные схемы устойчивы для близких к нулю значений энергии как в задачах рассеяния, так и в задачах на связанные состояния, что весьма важно при решении ряда физических задач.

Представленный в диссертации метод является основой для разработки новых алгоритмов численного решения задач квантовой механики. В частности, на основе данного метода разрабатываются новые итерационные схемы решения уравнения Шредингера по теории возмущений с последовательным включением оператора возмущения в ходе итераций. Метод обобщается и на другие задачи на собственные значения и может найти применение в различных областях физики и техники.

С помощью предложенного метода получен ряд результатов, имеющих самостоятельный физический интерес.

Разработанный метод был положен в основу схемы расчетов состояний квантовомеханической системы трех тел с кулоновским взаимодействием. Полученные результаты доказали эффективность метода и алгоритмов, разработанных на его основе.

Вычислены все уровни энергии состояний μ -мезомолекул водорода, причем некоторые результаты были получены впервые. Согласно оценкам, точность вычислений составляет 10^{-5} ($\sim 0,1$ эВ), и она подтверждена сравнением с результатами, полученными другими методами, в тех случаях, когда такие результаты имелись. Это позволило успешно провести расчеты уровней энергии слабо связанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, которые ранее были неизвестны. Для мезомолекулы $dd\mu$ полученные численные результаты подтверждены экспериментальными данными. Проведенные расчеты позволили впервые количественно объяснить эксперименты по измерению скорости резонансного образования мезомолекул $dd\mu$.

Вычислены все характеристики квазистационарных состояний μ -мезомолекул водорода.

В теории ядра вычисление с высокой точностью уровней энергии и одночастичных волновых функций связанных и квазистационарных состояний дало возможность на новой основе подойти к изучению реакций срыва и подхвата на ядрах в области актинидов и резонансных состояний деформированных ядер. Эффективность предложенного метода позволила значительно уточнить дифференциальные сечения некоторых ядерных реакций.

В составной модели для π -мезонов с помощью разработанного метода впервые были получены количественные результаты, показывающие, что эта модель согласуется с экспериментальными данными.

Разработанные алгоритмы и программы успешно использовались в ряде других исследований, проводимых как в ОИЯИ, так и в других научных центрах (ИЯФ ЧСАН, ИЯН Б.Кидрич СФРЮ).

Основные результаты исследований по численному решению задач квантовой механики включены в программу по математическому практикуму студентов кафедры теоретической ядерной физики физического факультета МГУ.

Апробация работы

Результаты, вошедшие в диссертацию, докладывались на Международном конгрессе математиков (Хельсинки, 1978), Третьем конгрессе болгарских математиков (Варна, 1973), Международных совещаниях по программированию и математическим методам решения физических задач (Дубна, 1973, 1977), Международной конференции по физике высоких энергий и структуре ядра (Санта Фе - Лос Аламос, 1975), Совещании по ядерной спектроскопии и структуре ядра (Баку, 1976), Международном симпозиуме по проблемам мезонной химии и меомолекулярных процессов в веществе (Дубна, 1977), УШ и IX сессиях секции Ученого совета ОИЯИ по теоретической физике (Дубна, 1974, 1975), на научных семинарах Лабораторий вычислительной техники и автоматизации и теоретической физики ОИЯИ, МФТИ, ВЦ АН СССР, Института ядерных наук Б.Кидрич (Белград, СФРЮ), Швейцарского института ядерных исследований (Цюрих, Швейцария).

Основное содержание диссертации отражено в 25 публикациях в виде статей в ЖВМиМФ, ЖЭТФ, ЯФ, J. Comput. Phys., Nucl. Phys., Annals of Phys., докладов в трудах международных совещаний и конференций, препринтов и сообщений ОИЯИ.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения, содержит 251 страницу машинописного текста, 34 рисунка, 42 таблицы и список литературы из 179 наименований.

Согласно сформулированным выше задачам представляемых исследований, материал первых трех глав включает обоснование предлагаемого метода и описание его математических и вычислительных особенностей. IV и V главы содержат описание приложений рассматриваемого численного метода к решению конкретных физических задач. На основе этих результатов получены обобщенные рекомендации по практическому применению метода и подтверждены его эффективность и универсальность.

Личный вклад автора

Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, объединяющем сотрудников Лаборатории вычислительной техники и автоматизации, теоретической физики и ядерных проблем ОИЯИ, был инициатором

данных исследований и руководил разработкой представляемого численного метода. Он непосредственно участвовал в реализации на ЭВМ разработанных алгоритмов, в математической постановке и численном решении конкретных физических задач, а также в анализе полученных результатов. Им самостоятельно разработаны все принципиальные вопросы, относящиеся к данному численному методу и его реализации.

II. Краткое содержание диссертации

Введение к реферируемой диссертации содержит краткое описание постановки сингулярной задачи Штурма-Лиувилля для систем дифференциальных (1) и интегродифференциальных (4) уравнений, возникающей при изучении квантовомеханических задач на связанные состояния и рассеяния. Обосновывается необходимость разработки единого численного метода решения этих задач и формулируются основные идеи построения такого метода на основе непрерывного аналога метода Ньютона. Дано описание структуры диссертации и перечень основных результатов по главам.

В Главе I "О некоторых задачах теоретической физики и методах их численного решения" содержится обзор наиболее распространенных численных методов решения квантовомеханических задач и приведена подробная характеристика математических постановок физических задач, являющихся предметом исследования в данной диссертации. Исходя из требований к вычислительным схемам, вытекающим из специфики этих задач, и сравнительного анализа некоторых существующих методов решения задач квантовой механики, дано обоснование выбора предложенного метода.

Сложность решения N -канальных задач обусловлена рядом особенностей их постановок:

1. Эффективные потенциалы систем (1) и (4) могут быть далекодействующими, что при реализации численных методов приводит к сильной зависимости решения от точности аппроксимации асимптотических условий (3d) и (3c) в достаточно удаленной точке

$$R = R_{max} \gg 1.$$

2. В ряде задач необходимо исследовать дискретный и непрерывный спектры уравнений для малых значений энергии (вблизи границы континуума). Такая постановка приводит к проблеме решения некорректных функциональных уравнений.

3. Коэффициенты систем (I) и (4) могут быть заданы в виде таблиц, что выходит за рамки физических моделей, описываемых аналитическими потенциалами.

4. Необходимо обеспечить одинаково высокую относительную точность вычисления как энергии, так и волновых функций систем.

Отмечено, что решение подобных задач с помощью таких распространенных в квантовомеханических расчетах методов, как метод Галаркина, метод кусочно-аналитических решений, метод стрельбы и его модификация - фазовый метод, представляет весьма сложную, а иногда и неразрешимую проблему. Поэтому в качестве основы для разработки численного метода решения задач как дискретного, так и непрерывного спектров для систем (I) и (4), выбран непрерывный аналог метода Ньютона (6)-(7) для уравнения (5). При этом постановка задачи рассеяния как задачи на собственные значения (5) основана на известной теореме о том, что непрерывную часть спектра самосопряженного дифференциального оператора на полуоси $0 \leq R < \infty$ можно рассматривать как множество точек накопления дискретного спектра соответствующего оператора, определенного на отрезке $0 \leq R \leq R_{max}$ при $R_{max} \rightarrow \infty$.

Итерационные процессы, полученные с помощью метода Эйлера для дискретного представления по параметру t непрерывного ньютоновского процесса (6)-(7) для уравнения (5), допускают оптимизацию и позволяют единообразно решать задачи дискретного и непрерывного спектров для систем (I) и (4), сведя их к решению последовательности граничных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. При этом можно эффективно использовать априорную информацию о решении физической задачи для построения начального приближения (7), а при численном исследовании сходимости характеристик квантовомеханической системы в зависимости от числа N уравнений в системах (I) и (4) результаты выполненных расчетов можно последовательно с увеличением N использовать как хорошие начальные приближения для итерационного процесса. Отмечено, что для численного решения граничных задач, возникающих на каждом шаге итерационного процесса, в исследуемом классе задач наиболее целесообразно использовать метод конечных разностей.

Глава II "Решение задач на собственные значения с помощью непрерывного аналога метода Ньютона" посвящена рассмотрению основных особенностей подхода к решению задачи на собственные значения

для линейного оператора. Этот подход позволяет представить исходную задачу как нелинейное функциональное уравнение и решить ее с помощью непрерывного ньютоновского процесса. Основной предпосылкой в этом подходе является предположение о существовании простого изолированного решения задачи на собственные значения. В этих условиях рассматривается локальная сходимость непрерывного ньютоновского процесса к данному решению. Анализируются особенности дискретного представления непрерывного аналога метода Ньютона для решения рассматриваемой задачи на основе метода Эйлера и корректность полученного итерационного процесса. Предложена модификация итерационного процесса, приводящая для операторов сложной структуры (например, интегродифференциальных) к упрощению уравнений для итерационных поправок, и сформулированы достаточные условия локальной сходимости модифицированного процесса.

Для линейного симметричного замкнутого оператора $A \in (H \rightarrow H)$, где H - вещественное гильбертово пространство, задача на собственные значения сформулирована как уравнение (5) с нормировочным функционалом

$$S(\lambda, y) \equiv (y, y) - 1.$$

В предположении о существовании решения уравнения (5) $\lambda^* = (\lambda^*, y^*)$, где λ^* - простое изолированное собственное значение, доказана сходимость решения $\lambda(t)$ задачи (6)-(7) к λ^* при $t \rightarrow \infty$ для всех начальных условий (7), взятых из некоторой окрестности этого решения.

Показано, что итерационный процесс, полученный на основе метода Эйлера решения задачи (6)-(7), сводится к определению на каждом шаге k по известным значениям λ_k, y_k неизвестных итерационных поправок μ_k, v_k , которые находятся из системы уравнений

$$\begin{aligned} (A - \lambda_k I) v_k &= - (A - \lambda_k I) y_k + \mu_k y_k, \\ 2(y_k, v_k) &= - [(y_k, y_k) - 1]. \end{aligned} \quad (10)$$

При этом решение первого уравнения системы (10) можно представить как сумму

$$v_k = -y_k + \mu_k u_k \quad (11)$$

с неизвестными параметром μ_k и элементом u_k , которые находятся из системы

$$\begin{aligned} (A - \lambda_k I) u_k &= y_k, \\ u_k &= \frac{(y_k, y_k) + 1}{2(y_k, u_k)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Определив итерационные поправки u_k и v_k , можно перейти к нахождению следующих приближений λ_{k+1} , y_{k+1} с помощью формул

$$\begin{aligned} \lambda_{k+1} &= \lambda_k + \tau_k u_k, \\ y_{k+1} &= y_k + \tau_k v_k, \end{aligned} \quad (13)$$

получающихся из двухслойной правой разностной аппроксимации производных $\frac{d}{dt} \lambda(t) = u(t)$ и $\frac{d}{dt} y(t) = v(t)$, если задать шаг интегрирования τ_k .

Исследован вопрос о возможной потере точности при вычислениях с помощью формул (10)-(13), поскольку в первом уравнении системы (12) величина $\|(A - \lambda_k I)^{-1}\|$ при $\lambda_k \rightarrow \lambda^*$ неограниченно возрастает. Доказано, следуя идеям М.К. Гавурина, что при правильной организации вычислений рассматриваемая итерационная процедура не приводит к потере точности.

Рассмотрен итерационный процесс с дополнительной нормировкой на каждом шаге элемента y_k , в котором следующее приближение к собственному элементу получается с помощью соотношения

$$\tilde{y}_{k+1} = \|y_{k+1}\|^{-1} y_{k+1}, \quad (14)$$

где y_{k+1} задан соотношением (13). Показано, что дополнительная нормировка приводит к ускорению сходимости итераций.

В случае представления оператора A в виде суммы (8) предложена модификация итерационного процесса, описываемого формулами (10)-(13), при которой вместо первого уравнения системы (10) решается уравнение с "возмущенным" оператором

$$(D - \lambda_k I) v_k = -[(A - \lambda_k I) y_k + \tau_k^{-1} J(y_k - y_{k-1})] + u_k y_k, \quad (15)$$

получающееся с помощью двухслойной левой разностной аппроксимации производной $\frac{d}{dt} J y(t)$. Сформулировано достаточное условие сходимости модифицированного итерационного процесса, которое выполняется, в частности, при малости нормы оператора J по сравнению с нормой оператора A . Показано, что уменьшение шага τ_k улучшает сходимость этого процесса.

Результаты данной главы дают качественное представление о процессах, связанных с распространением ошибок и устойчивостью в алгоритмах, построенных на основе непрерывного аналога метода Ньютона. Эти исследования могут служить основой для усовершенствования существующих и разработки новых эффективных алгоритмов.

В Главе III "Алгоритмы численного решения задач на собственные значения для дифференциальных и интегродифференциальных уравнений и вопросы их реализации на ЭВМ" рассмотрено приложение изложенного метода к численному решению задач типа Штурма-Лиувилля для систем (1) и (4). Дискретное представление этого метода в рассматриваемом классе задач получено с помощью метода Эйлера, дающего дискретную аппроксимацию непрерывного ньютоновского процесса по параметру t , а также метода конечных разностей и соответствующих квадратурных формул, аппроксимирующих на равномерных сетках узлов $\omega_h^{(k)} = \{R_n^{(k)} = (n-1)h^{(k)}\}$, $n=1, 2, \dots, M$, $h_k = R_{\max}^{(k)} / (M-1)$ уравнения (12), (15) для итерационных поправок. Выбор таких сеток был обусловлен заданием в виде таблиц с равномерным шагом эффективных потенциалов задачи трех тел с кулоновским взаимодействием, для решения которой первоначально предназначались исследуемые алгоритмы, и не является принципиальным.

В рамках непрерывного ньютоновского процесса обоснована дискретная схема решения задачи Штурма-Лиувилля для радиального уравнения Шредингера, при аппроксимации которой используется трехточечная разностная схема на равномерной сетке узлов ω_h второго порядка точности относительно шага h разностной сетки. Сходимость решения, получаемого с помощью дискретного процесса, к точному доказана при независимом стремлении к нулю шагов по пространственной переменной R и дополнительному параметру t .

Обсуждаются вопросы практической реализации полученных итерационных процессов для решения исследуемых задач. Приводятся алгоритмы выбора параметра τ_k , обеспечивающие на практике устойчивую сходимость итераций. В частности, предложен алгоритм приближенного нахождения значений τ_k , обеспечивающих минимум невязки $\delta_k = \| \varphi_h(\tau_{h,k}) \|$ на каждом шаге. В качестве примера приводится описание структуры программы для численного решения задачи Штурма-Лиувилля, широко используемой в настоящее время при решении различных физических задач.

Сходимость и точность разработанных вычислительных схем иллюстрируются на примерах решения радиального уравнения Шредингера с потенциалами Морзе и Кулона. Выполненные численные исследования сходимости итераций, а также зависимости точности приближенного решения от шага h разностной сетки и границы R_{max} подтверждают теоретические выводы. Возможности рассматриваемого численного метода проверяются также на примере вычисления колебательных уровней энергии и волновых функций молекулы водорода, в котором численные результаты можно сравнить с экспериментальными данными, известными с высокой точностью. При численном решении рассмотренной задачи подтверждены как теоретические оценки точности численного метода, так и практические рекомендации для построения соответствующих алгоритмов и программ.

Предложены способы модификации и оптимизации разработанных алгоритмов, которые иллюстрируются на примерах численного решения радиального уравнения Шредингера с потенциалом Морзе.

Численно исследованы итерационные процессы, в которых уравнения для итерационных поправок (12) аппроксимируются на сетках $\omega_h^{(k)}$, шаг которых зависит от номера итерации. Рассмотрены различные способы выбора шага и продолжения сеточных функций $u_{h,k}$. Численные примеры показывают, что применение такой модификации итерационного процесса, подобной комплексной организации расчета, предложенной Н.Н.Калиткиным, дает существенное сокращение счетного времени.

На тех же примерах выполнено численное моделирование модифицированного итерационного процесса, в котором для нахождения итерационных поправок используется "возмущенное" уравнение (15), и исследовано влияние различных условий нормировки собственной функции на сходимость итерационных процессов.

Предложенные модификации вычислительных схем, проверенные при решении задачи с потенциалом, близким к используемому в ряде физических задач, могут служить основой для дальнейшего развития рассматриваемого метода.

Приведено подробное описание вычислительных схем для решения задач типа Штурма-Лиувилля для систем (I) и (4), используемых при решении ряда физических задач.

Глава IV "Численное решение задач дискретного спектра" содержит описание математических постановок и решения с помощью раз-

работанных вычислительных схем ряда задач, относящихся к мезомолекулярной физике, теории ядра и квантовой теории поля, а также анализ точности полученных результатов. Эти результаты представляют самостоятельный физический интерес. Некоторые из них получены впервые, и с их помощью можно не только объяснить экспериментальные факты, но и предсказать новые физические явления.

Рассматривается численное решение \mathcal{N} -уровневого приближения для адиабатического представления задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Расчеты этой системы представляют особый интерес в квантовой механике, поскольку они относятся к потенциалу взаимодействия, справедливость и границы применимости которого в атомной физике не вызывает сомнений.

На примере двухуровневого приближения рассматриваемой задачи, сводящейся к сингулярной задаче Штурма-Лиувилля для системы (I) при $\mathcal{N} = 2$, рассмотрены особенности применения разработанной вычислительной схемы для нахождения уровней энергии связи μ -мезомолекул водорода.

Уточнена асимптотика (3d) для волновых функций $\chi_i(R)$ дискретного спектра, исходя из асимптотики дальнодействующих эффективных потенциалов $V_{ij}(R)$ системы (I). Уточненная асимптотика волновых функций

$$\tilde{\chi}_i(E, R) \sim \exp(-\alpha_i R) \sum_n a_{in} R^{-n}, \quad R \rightarrow \infty \quad (16)$$

позволяет поставить граничные условия (3) в точке $R = R_{max}$, относительно близкой к точке $R = 0$ даже при вычислении слабосвязанных состояний. Эта асимптотика используется также и при построении нормировочного функционала в уравнении (5).

Исследуются различные способы построения начальных приближений к искомым значениям энергии и волновым функциям. В частности, в качестве начальных приближений используются аналитические решения для потенциала Морзе, который достаточно хорошо аппроксимирует эффективные потенциалы рассматриваемой задачи при специальном выборе его параметров.

Для оценки вычислительных погрешностей исследована зависимость результатов от параметров h и R_{max} разностной сетки, а также от числа членов в асимптотическом разложении (16).

Выполненное сравнение результатов с лучшими вариационными расчетами подтверждает корректность адиабатических вычислений. В

случае возбужденных состояний мезомолекул, для которых соответствующие вариационные расчеты большей частью не проведены, получены новые результаты. В двухуровневом приближении достигнута точность вычисления уровней энергии связи мезомолекул водорода порядка $10^{-2}-10^{-3}$ от глубины $D \sim 500$ эВ эффективных потенциалов $V_{\text{eff}}(R)$.

Для уточнения результатов, полученных в двухуровневом приближении, решена задача на собственные значения для системы (I) относительно большого числа уравнений ($N \sim 20$), а также исследована точность результатов в зависимости от N . При этом результаты вычислений в двухуровневом приближении использовались как начальные условия в итерационном процессе. Анализ точности полученных результатов и сопоставление с лучшими вариационными расчетами показывают, что точность адиабатических расчетов, в основе которых лежат разработанные вычислительные схемы, не уступает вариационным даже при вычислении основных состояний мезомолекул.

Особо следует отметить вычисление с высокой точностью характеристик возбужденных слабосвязанных состояний мезомолекул, которые с помощью вариационных расчетов не удалось даже обнаружить. Расчет в многоуровневом приближении энергии связи и волновых функций слабосвязанного состояния ($L = I, \nu = I$) мезомолекулы $d\bar{d}\mu$ представляет самостоятельный интерес как пример расчета системы трех заряженных частиц, подтвержденный экспериментом. Качественно новым результатом, полученным с помощью разработанных вычислительных схем, является обнаружение и вычисление характеристик слабосвязанного состояния ($L = I, \nu = I$) мезомолекулы $d\bar{t}\mu$.

Рассмотрено применение исследуемых алгоритмов к вычислению одночастичных волновых функций и уровней энергии деформированных ядер. Показано, что короткодействующий характер потенциала Саксона-Вудса, применяемого в моделях теории ядра, позволяет упростить постановку граничных условий (3), используя для этого асимптотику (3d) или решения для свободного радиального уравнения Шредингера. Обсуждаются выбор параметров разностной сетки, обеспечивающий необходимую точность результатов, и выбор начальных приближений для итерационного процесса. Рассмотрены особенности применения модифицированного итерационного процесса, использующего уравнение (15) и дополнительную нормировку (14), к расчету

формфакторов реакций одноуклонных передач на сферических ядрах, описываемых системой интегродифференциальных уравнений (4). В этих задачах применение нового численного метода дало возможность значительно уточнить имеющиеся расчеты и улучшить теоретическое описание экспериментальных сечений некоторых реакций.

Задача о π -мезоне как системе кварк-антикварк, рассмотренная в данной главе, сводится к вычислению собственных функций сингулярного дифференциального оператора второго порядка, осциллирующих на бесконечности. Эта задача является хорошей моделью для исследования особенностей новой постановки задачи рассеяния. При численном решении этой задачи с помощью предложенного метода исследуется постановка граничного условия (3) для осциллирующей собственной функции, а также точность результатов в зависимости от параметров h и R_{max} разностной сетки. Вычисление с требуемой точностью релятивистских волновых функций π -мезона, подтвержденной сравнением с результатами, полученными ЛКВ-методом в области его применимости, позволило определить константу связи системы пион-кварк.

При численном решении рассмотренных задач в качестве начальных приближений использовались решения для упрощенных физических моделей. Поэтому данный численный метод можно рассматривать как математический аппарат уточнения существующих и проверки новых физических моделей.

В Главе V "Задача рассеяния в квантовой механике как задача на собственные значения" предлагается новый подход к решению задачи рассеяния, позволяющий применить для ее решения исследуемый численный метод. В отличие от традиционных подходов, в которых фазы рассеяния $\delta_{\nu}(E)$ определяются из асимптотики (3c) при заданном значении энергии E , в рассматриваемом подходе необходимо задать фазы δ_{ν} в каждом из открытых каналов реакции. Это позволяет рассматривать систему (I) (или (4)) вместе с условием регулярности (2) и асимптотическими условиями (3d) и (3c), зависящими только от энергии E , как задачу на собственные значения. Решая эту задачу, можно найти энергию $E = E(\delta_{\nu})$ и волновые функции $\chi_i^{(v)}(R)$, соответствующие заданным фазам рассеяния. Поскольку функция $E = E(\delta_{\nu})$, вообще говоря, неоднозначна, область применимости сформулированного подхода ограничивается областью значений δ_{ν} , каждому из которых соответствует конечное множество изо-

лированных значений E . Эта область физически наиболее интересна, а выход на "плато" функции $\delta_\nu(E)$ происходит обычно в асимптотических областях, где численные методы применяются редко. В задачах рассеяния с учетом закрытых каналов данный подход представляется более естественным, чем обычные, поскольку в нем асимптотика закрытых (3d) и открытых (3c) каналов аппроксимируется единообразно (3).

При численной реализации изложенного подхода к решению задачи рассеяния необходима корректная постановка граничных условий (3). Кроме того, особое значение приобретает задание условий нормировки волновых функций. Отметим, что единая формулировка задач непрерывного и дискретного спектра в области вещественных значений энергии позволяет проследить процесс перехода энергии состояния системы из непрерывного спектра в дискретный при изменении глубины эффективных потенциалов. При численном решении таких задач с собственными значениями вблизи нуля необходимо задание таких условий нормировки, которые повышают устойчивость вычислительного процесса.

Исследование особенностей и возможностей излагаемого метода выполнено на примере двухканальной задачи рассеяния с эффективными потенциалами, соответствующими двухуровневому приближению адiabатического представления задачи трех тел с кулоновским взаимодействием.

Для постановки граничного условия (3) в открытых каналах используется асимптотика волновых функций при $R \rightarrow \infty$ в виде

$$\tilde{\chi}_i^{(\nu)}(E, R) \sim \left(1 + \sum_n d_{in} \tilde{z}_i^{-2n}\right) \sin\left(\tilde{z}_i - \frac{L\pi}{2} + \delta_i^{(\nu)}\right) + \sum_n b_{in} \tilde{z}_i^{-2n+1} \cos\left(\tilde{z}_i - \frac{L\pi}{2} + \delta_i^{(\nu)}\right), \quad \tilde{z}_i = k_i R, \quad (17)$$

которая так же, как и асимптотика (16), позволяет сузить отрезок $0 < R \leq R_{max}$.

Предложено условие нормировки для волновой функции в последнем открытом канале с номером s

$$S(E, \chi) \equiv \int_{R_{as}}^{R_{max}} [\chi_s^{(\nu)}(R) - \tilde{\chi}_s^{(\nu)}(E, R)]^2 dR = 0,$$

которое можно рассматривать как интегральное граничное условие, выполняющее роль стабилизирующего функционала для малых значений

E . Применение этого условия повышает устойчивость вычислительных схем.

При решении рассматриваемой задачи с помощью разработанного численного метода были построены функциональные зависимости $E_1 = E(\delta_1)$ и $E_2 = E(\delta_2)$, а также соответствующие им параметры смешивания для T -матрицы реакции. Показано, что с помощью этих зависимостей можно упростить процедуру определения параметров матрицы реакции. Рассмотрено обобщение изложенной процедуры на случай $s > 2$ открытых каналов.

Развитый подход позволил в рамках единой вычислительной схемы выполнить сравнение некоторых определений резонанса в квантовой механике и показать, что в подбарьерной области при малых значениях E для определения энергии резонанса можно использовать условие

$$\delta_\nu(E) = \pi\left(n_i + \frac{1}{2}\right),$$

где n_i - число нулей волновой функции $\chi_i(R)$ в области действия потенциала $V_{ii}(R)$.

На основе этого условия в двухуровневом приближении вычислены характеристики всех квазистационарных состояний μ -мезомолекул водорода. Сравнение с другими результатами показывает высокую точность расчетов. Проведено моделирование процесса перехода квазистационарного состояния системы в стационарное при увеличении глубины эффективных потенциалов, который представляет интерес при изучении слабосвязанных состояний.

Дано описание численного решения задачи о нахождении одночастичных квазистационарных состояний сферических и деформированных ядер. Рассмотрены условия для определения энергии резонанса в задачах с ядерными потенциалами, применимые в области подбарьерных значений энергии. Проведено исследование зависимости результатов от параметров h и R_{max} разностной сетки и от числа N уравнений системы (1). Сравнение полученных результатов с ранее выполненными расчетами для сферических ядер свидетельствует о точности разработанного метода и о возможности его применения в других задачах теории ядра.

Предложены алгоритмы решения задачи рассеяния, сформулированной в рамках метода фазовых функций и как нелинейная краевая задача. Эти алгоритмы представляют интерес для развития на основе непрерывного аналога метода Ньютона численных методов решения

задач квантовой механики, сформулированных как нелинейные функциональные уравнения. Их возможности проверены на примере решения радиального уравнения Шредингера со сферически симметричным потенциалом Саксона-Вудса.

В закл^ючении к диссертации формулируются результаты представленных исследований.

III. Основные результаты и выводы

1. Разработан метод численного решения задач на собственные значения для систем обыкновенных дифференциальных и интегродифференциальных уравнений, позволяющий единообразно решать для квантовомеханических систем, описываемых этими уравнениями, задачи на связанные состояния и рассеяния. Исследованы вопросы теоретического обоснования разработанного метода.

2. Предложен новый подход к решению задачи рассеяния как задачи на собственные значения. Благодаря этому достигнута общность математических постановок исследуемых в диссертации задач квантовой механики и единство методов численного решения этих задач на основе развития непрерывного аналога метода Ньютона. Разработанный метод решения задачи рассеяния особенно эффективен в задачах об определении квазистационарных состояний, а также в задачах рассеяния с учетом закрытых каналов и представляет самостоятельный теоретический интерес.

3. На основе предложенного метода разработаны и реализованы на ЭВМ алгоритмы численного решения ряда задач мезомолекулярной физики, теории ядра и квантовой теории поля. С помощью разработанных алгоритмов получен ряд новых важных физических результатов.

4. Предложенный метод является основой для разработки новых алгоритмов решения задач квантовой механики и других задач математической физики на собственные значения.

Литература, отражающая содержание диссертации:

1. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. Препринт ОИЯИ Р4-6256, Дубна, 1972.

2. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, 1973, 65, I(7), 28; препринт ОИЯИ, Р4-6919, Дубна, 1973.

3. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J. Comput. Phys., 1973, 13, 1, 1.

4. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. В сб.: "Программирование и математические методы решения физических задач", (Совещание..., Дубна, 30 окт. - 4 ноября 1973), ОИЯИ, ДИО-7707, Дубна, 1974, стр. 131.

5. Ф.А.Гареев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Р.М.Ямалеев. В сб.: "Программирование и математические методы решения физических задач", (Совещание..., Дубна, 30 окт. - 4 ноября 1973), ОИЯИ, ДИО-7707, Дубна 1974, стр. 152.

6. И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. В сб.: "Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики" (Совместный научный сб. ОИЯИ (Дубна, СССР) и ЦИФИ (Будапешт, Венгрия)), КГКГ -74-34, Будапешт 1974, стр. 93.

7. Ф.А.Гареев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Р.М.Ямалеев. Сообщение ОИЯИ, II-8081, Дубна; 1974.

8. Ф.А.Гареев, Г.Шульц, Р.М.Ямалеев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, И.Н.Кухтина. ЯФ, 1975, 22, 6, II36; препринт ОИЯИ Р4-8394, Дубна 1974.

9. Ф.А.Гареев, С.А.Гончаров, Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Б.Н.Хоромский, Р.М.Ямалеев. Препринт ОИЯИ, Р4-8751, Дубна 1975.

10. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. Препринт ОИЯИ Р4-8884, Дубна 1975.

11. Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев. Сообщение ОИЯИ PII-8701, Дубна 1975.

12. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. Препринт ОИЯИ, Р4-9183, Дубна 1975.

13. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. In: International Conference on High Energy Physics and Nuclear Structure, 6th. Santa Fe-Los Alamos. 1975. Abstracts of Contributed Papers. Los Alamos, 1975, p. 163.

14. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J. Comput. Phys., 1976, 22, 1, 125.

15. J.Bang, F.A.Gareev, I.V.Puzynin, R.M.Jamalejev. Nucl.Phys., 1976, A261, 1, 59; препринт ОИЯИ, Р4-9054, Дубна 1975.

16. A.T.Filippov, I.V.Puzynin, D.P.Mavlo. J. Comput. Phys., 1976, 22, 2, 150; препринт ОИЯИ, Р2-8689, Дубна, 1975.

17. Ф.А.Гареев, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев. В кн.: "XXVI Совещание по ядерной спектроскопии и структуре ядра. Баку, 1976" Тезисы докладов... "Наука", Л., 1976, стр. 308.

18. Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Б.Н.Хоромский. Сообщение ОИЯИ Р5-9512, Дубна 1976.

19. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов. Препринт ОИЯИ, Р4-9915, Дубна 1976.
20. М.Х.Гиззаткулов, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев. Сообщение ОИЯИ, Р11-10029, Дубна 1976.
21. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов. Препринт ОИЯИ, Р4-10336, Дубна 1976.
22. С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, Препринт ОИЯИ, Р11-10802, Дубна 1977; также в сб.: "Программирование и математические методы решения физических задач". (Совещание..., Дубна, 20-23 сент. 1977 г.) ОИЯИ, Д10, II-II264, Дубна 1978, стр. 227.
23. Ф.А.Гареев, С.А.Гончаров, Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Б.Н.Хоромский, Р.М.Ямалеев. ЖВМиМФ, 1977, 17, 2, 407.
24. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов. В сб.: "Мезоны в веществе", Труды международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе. Дубна, 7-10 июня 1977 г. ОИЯИ, Д1, 2, 14-10908, Дубна 1978, стр. 178.
25. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina, L.N.Somov. Annals of Phys., 1978, 110, 2, 274.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 октября 1978 года.