2/IV-84

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

11-83-875

Д.Бакалов

ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ РЕЛЯТИВИСТСКОГО ГАМИЛЬТОНИАНА СИСТЕМЫ ТРЕХ ЧАСТИЦ В АДИАБАТИЧЕСКОМ БАЗИСЕ

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди многочастичных проблем квантовой механики задача трех частиц с электромагнитным взаимодействием занимает особое место [1]. Это - кинематически простейшая из многочастичных задач, обладающая высокой динамической симметрией [2], к которой применима теория возмущений; кроме того, эта задача имеет большое практическое значение, так как к ней сводится описание многих явлений атомной и молекулярной физики. Актуальность задач трех частиц особенно возросла в связи с исследованиями мюонного катализа ядерного синтеза в смеси изотопов водорода [3]. Для проведения этих исследований необходимо вычислить энергетический спектр μ-мезомолекул с высокой точностью, для чего следует учесть релятивистские и ряд других эффектов.

Наиболее точные результаты в этом направлении: кулоновские уровни энергии мезомолекул [4], релятивистские и прочие поправки к ним и т.д. [5], получены в рамках адиабатического подхода к задаче трех тел [1], где поиск решения стационарного трехчастичного уравнения Шредингера ведется в виде разложения по собственным функциям $\phi(\xi, \eta; R)$ дискретного и непрерывного спектров квантовой задачи двух фиксированных /на расстоянии R/ кулоновских центров [6]. /Здесь ξ, $1 \le \xi \le \infty$, и η, $-1 \le \eta \le 1$,- вытянутые сфероидальные координаты [6] /. Проблема сходимости адиабатического разложения была исследована в работах [7,1]; в частности, было показано, что при описании релятивистских, спиновых и других эффектов в трехчастичных системах можно пренебречь непрерывным спектром задачи двух центров [5].

Существенным этапом при решении уравнения Шредингера в адиабатическом подходе является вычисление матричных элементов гамильтониана трехчастичной системы в адиабатическом базисе, сводящихся к интегралам следующего вида:

$$I(R) = \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^{1} d\eta \, f(\xi, \nu; R), \qquad /1a/$$

$$f(\xi, \eta; R) = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) \frac{\partial^{\ell_R + \ell_\xi + \ell_\eta} \phi_\ell(\xi, \eta; R)}{\partial R^{\ell_R} \partial \xi^{\ell_\xi} \partial \eta^{\ell_\eta}} \, v(\xi, \eta; R) \times$$

$$\times \frac{\partial^{r_R + r_\xi + r_\eta} \phi_r(\xi, \eta; R)}{\partial R^{r_R} \partial \xi^{r_\xi} \partial \eta^{r_\eta}}, \qquad /1б/$$

где $v(\xi, \eta; R)$ – функция от ξ, η и R, а множитель $\frac{R^3}{8}(\xi^2 - \eta^2)$ соответствует элементу объема $dV = d\xi\, d\eta\, \frac{R^3}{8}(\xi^2 - \eta^2)$ в вытянутых сфероидальных координатах.

Использовавшиеся ранее методы /8,9/ вычисления /1/ основывались на:

1/ возможности факторизации зависимости f от переменных ξ и η, связанной с разделением переменных ξ и η в задаче двух кулоновских центров /6/, а также с явным видом гамильтониана системы трех частиц с кулоновским взаимодействием /1,6/;

2/ отсутствии особенностей у подынтегральной функции $f(\xi, \eta, R)$.

Для операторов, описывающих релятивистские и спиновые эффекты, оба эти условия не выполняются из-за присутствующих у функции $v(\xi, \eta; R)$ /1б/ множителей типа $1/(\xi \pm \eta)^n$, $2 \le n \le 5$. Условие 1 ограничивает возможность модификации адиабатического базиса /10/.

В данной работе описан алгоритм вычисления интегралов типа описанных в /1/ от функций f с интегрируемыми особенностями и неразделяющимися переменными ξ и η, основанный на численном интегрировании с помощью расширенных квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля /РКФГК/ /раздел 2/. В разделе 3 кратко описана программная реализация этого алгоритма, ориентированная на ЭВМ CDC-6500 и предназначенная для вычисления матричных элементов релятивистского гамильтониана системы трех частиц /с одинаковыми зарядами двух ядер/ в дискретном секторе спектра адиабатического базиса.

2. КУБАТУРНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ ИНТЕГРАЛА /1а/

Рассмотрим более подробно интеграл /1а/. Из общих свойств кулоновских сфероидальных функций дискретного спектра /6/ и явных выражений для усредняемых операторов /5/ следует, что:

1/ в общем случае $f(\xi, \eta; R)$ имеют интегрируемые особенности в точках $\xi = 1$, $\eta = \pm 1$;

2/ $f(\xi, \eta; R)$ убывают экспоненциально при $\xi \to \infty$ или $\eta \to 0$;

3/ $f(\xi, \eta; R)$ "достаточно" гладки внутри области $D = \{(\xi, \eta) / \xi \ge 1,\ |\eta| \le 1\}$.

Ввиду этого разобьем область D на две подобласти D_1 и D_2:

$$D = D_1 \cup D_2, \quad D_{1,2} = \{(\xi, \eta) / \xi \lessgtr a,\ |\eta| \le 1,\ a > 1\}, \qquad /2/$$

и соответственно представим интеграл /1а/ в виде

$$I = I_1 + I_2, \qquad /3а/$$

где

$$I_1 = \int_0^{a-1} dx \int_0^1 dy \cdot f_1(x, y),$$

$$f_1(x, y) = f(\xi, \eta) + f(\xi, -\eta),\ \xi = x + 1,\ \eta = \operatorname{sgn}\eta \cdot (1 - y) \qquad /3б/$$

и

$$I_2 = \int_0^{\infty} dx e^{-x} \int_0^1 dy \cdot f_2(x, y),$$

$$f_2(x, y) = \frac{e^x}{p_0}[f(\xi, \eta) + f(\xi, -\eta)],\ \xi = a + \frac{x}{p_0},\ \eta = \operatorname{sgn}\eta \cdot (1 - y). \qquad /3в/$$

Здесь $p_0 > 0$ и $a > 1$ – некие /пока неопределенные/ параметры; зависимость I, $I_{1,2}$, f, $f_{1,2}$ от R подразумевается.

Наша цель – построение кубатурных формул для вычисления интегралов /3б, 3в/ в областях $D_{1,2}$ соответственно. Рассмотрим отдельно интегралы I_1 и I_2.

2.1. Для операторов релятивистского взаимодействия подынтегральная функция $f_1(x, y)$ /3б/ имеет вид

$$f_1(x, y) = P_{n-1}(x, y) \cdot \psi_1(x, y)/(x + y)^n, \qquad /4/$$

где P_{n-1} – однородный многочлен степени $n - 1$, компенсирующий при $n > 1$ слишком сильную сингулярность $1/(x + y)^n$ в точке $x = y = 0$, а $\psi_1(x, y)$ – достаточно гладкая функция в D_1. Легко убедиться, что в окрестности $x = 0$ функция

$$F_1(x) = \int_0^1 dy\, f_1(x, y) \qquad /5а/$$

имеет следующий вид /с гладкими $F_{1R}(x)$ и $F_{1S}(x)$/:

$$F_1(x) \underset{x \to 0}{=} F_{1R}(x) + \ln x \cdot F_{1S}(x). \qquad /5б/$$

Для численного интегрирования функций с нефакторизующимися особенностями типа /5б/ Л.Александровым и автором разработан метод построения расширенных квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля /РКФГК/. Пусть x_i и w_i, $i = 1, \ldots, N$, – узлы и веса РКФГК порядка N, обеспечивающие точность вычисления /5а/ $\epsilon > 0$:

$$\int_0^{a-1} dx\, F_1(x) = \sum_{i=1}^{N} w_i F_1(x_i) + R, \quad |R| \le \epsilon |I_1|. \qquad /6/$$

Для применения /6/ нужны значения $F_1(x)$ при $x = x_1, x_2, \ldots, x_N$. Представим $F_1(x_i)$ /5а/ в виде

$$F_1(x_i) = \int_0^1 dy \frac{1}{(x_i + y)^4} \{(x_i + y)^4 f_1(x_i, y)\}. \qquad /7/$$

В силу /4/ и /1б/ множитель в фигурных скобках гладок в D_1. Для вычисления интеграла /7/ воспользуемся квадратурной формулой Гаусса-Кристоффеля /КФГК/ с весом $w^{(i)}(y) = 1/(x_i + y)^4$ порядка $N^{(i)}$. Обозначая ее узлы и веса через $y_j^{(i)}$, $w_j^{(i)}$, $j = 1, \ldots, N^{(i)}$, имеем

$$F_1(x_i) = \sum_{j \le N^{(i)}} \tilde{w}_j^{(i)} f_1(x_i, y_j^{(i)}) + R^{(i)}, \qquad /8/$$

где $\tilde{w}_j^{(i)} = w_j^{(i)} \cdot (x_i + y_j^{(i)})^4$. Таким образом,

$$I_1 = \sum_{i=1}^{N} w_i \sum_{j \le N^{(i)}} \tilde{w}_j^{(i)} f_1(x_i, y_j^{(i)}) + R_1. \qquad /9а/$$

В практических расчетах /где подходящим оказался выбор $a = 2$/ для обеспечения относительной точности I /1а/ $\epsilon = 1.10^{-7}$ достаточными оказались РКФГК порядка $N = 12$[6] и КФГК с весами $w^{(i)}(y) = 1/(x_i + y)^4$ порядка $N^{(i)} = 12$, $i = 1,2,3,4$. КФГК с весом $1/(x_4 + y)^4$ обеспечивает эту точность и при вычислении $F(x_i)$[7] для $i = 5, \ldots, 12$. В силу этого кубатурная формула для вычисления /1б/ приобретает вид

$$I_1 = \sum_{i=1}^{12} w_i \sum_{j=1}^{12} \tilde{w}_j^{(k)} f(x_i, y_j^{(k)}) + R_1, \; |R_1| < \epsilon |I_1|, \quad k = \min(i, 4). \qquad /9б/$$

Узлы и веса для КФГК[6] (x_i, w_i) и КФГК с весами $w^{(i)}(y) = 1/(x_i + y)^4$, $i \le 4$[8] ($y_j^{(i)}$, $\tilde{w}_j^{(i)}$), приведены в табл.1,2.

2.2. В пределе $\xi \to \infty$ базисные функции дискретного спектра $\phi_{\ell,r}(\xi, \eta; R)$ убывают экспоненциально как $e^{-p_{\ell,r}(\xi-1)}$, где p_ℓ, p_r – термы соответствующих решений задачи двух центров[6,8], а коэффициентные функции $v(\xi, \eta; R)$ /1б/ имеют степенной рост. Определим

$$F_2(x) = \int_0^1 dy\, f_2(x, y). \qquad /10/$$

При $x \to \infty$ $F_2(x)$ ведет себя следующим образом:

$$F_2(x) = e^{dx} \psi_2(x), \quad d = 1 - \frac{p_\ell + p_r}{p_0}, \quad x \gg 1, \qquad /11/$$

Таблица 1

Значения узлов x_i и весов w_i, $i = 1, \ldots, N$, РКФГК порядка $N = 12$ с функциями $w(x) = 1$ и $w_1(x) = -\ln x \cdot e^{-px}$, $p = 20$

i	x_i	w_i
1	0,704459890301б-3	0,2611461652455-2
2	0,9083277583517-2	0,1625490188244-1
3	0,3678809310154-1	0,4045823483217-1
4	0,9161994176291-1	0,6958155293886-1
5	0,1759900930544+0	0,9883970652008-1
6	0,2879543058014+0	0,1240449917249+0
7	0,4212501187182+0	0,1407864325066+0
8	0,5654631695992+0	0,1454001012936+0
9	0,7073657231746+0	0,1360304995335+0
10	0,8329124170197+0	0,1128879885498+0
11	0,9292226307032+0	0,7803801992184-1
12	0,9862644710136+0	0,3506610844380-1

где $\psi_2(x)$ растет с x не быстрее некоторой степени x. Для вычисления интеграла

$$I_2 = \int_0^\infty dx\, e^{-x} F_2(x) \qquad /12/$$

целесообразно использовать КФГК с весом e^{-x}[11]. Обозначим через M, x_i и w_i, $i = 13, 14, \ldots 12 + M$, ее порядок, узлы и веса соответственно. Порядок M КФГК с весом e^{-x}, обеспечивающий требуемую точность вычисления I_2 /3в/, зависит от величины d/11/; на практике использовались КФГК порядка $M = 8, 12$ и 15[11]. Поскольку в области D_2 значения $\xi = a + \frac{x_{M+i}}{p_0}$ /3в/ далеки от сингулярных точек $(\xi, \eta) = (1, \pm 1)$, для вычисления $F_2(x)$ /10/ подходящей является КФГК с весом $w^{(4)}(y)$ /см. п.2.1./.Таким образом, для вычисления I_2 получается следующая кубатурная формула:

$$I_2 = \sum_{i=13}^{M+12} w \sum_{j=1}^{12} \tilde{w}_j^{(4)} f_2(x_i, y_j^{(4)}) + R_2, \quad |R_2| < \epsilon |I_2|. \qquad /13/$$

2.3. Объединяя результаты пунктов 2.1 и 2.2, получаем кубатурную формулу для вычисления интеграла I /1а/:

$$I = \sum_{i=1}^{M+12} \sum_{j=1}^{12} w_{ij} f_{ij} + R, \quad |R| < \epsilon \cdot |I|, \qquad /14а/$$

где

$$w_{ij} = w_i \tilde{w}_j^{(k)}, \quad k = \min(i, 4), \qquad /14б/$$

Таблица 2

Значения узлов $y_j^{(i)}$ и весов $w_j^{(i)}$, $j=1,\dots,12$, квадратурных формул /8/ Гаусса-Кристоффеля с $w^{(i)}(y) = 1/(x_i + y)^4$, $i = 1, 2, 3, 4$

j	$y_j^{(i)}$	$w_j^{(i)}$
1	0,2172671503245-3	0,6464436592859-3
2	0,2358231261626-2	0,5061461415609-2
3	0,1586966873617-1	0,2486310429823-1
4	0,5492095691185-1	0,5358325653046-1
5	0,1229783631059+0	0,8229864694847-1
6	0,2187761568151+0	0,1087842344779+0
7	0,3391797929401+0	0,1311389018478+0
8	0,4767706443149+0	0,1465985051372+0
9	0,6287350549098+0	0,1510843875373+0
10	0,7754939091077+0	0,1392295852441+0
11	0,8999969706692+0	0,1059290851159+0
12	0,9799427525824+0	0,5078238790982-1
I	0,1352097272905-2	0,3667525499450-2
2	0,8930643468613-2	0,1271281849773-1
3	0,2988427741035-1	0,3077748577380-1
4	0,7682452308872-1	0,5588105837243-1
5	0,1422146561358+0	0,8278177864317-1
6	0,2378955768707+0	0,1081115539971+0
7	0,3571000607679+0	0,1294113631013+0
8	0,4944248122354+0	0,1437926574160+0
9	0,6410701951876+0	0,1472877049947+0
IO	0,7836959969665+0	0,1348744187643+0
II	0,9039528682765+0	0,1020062796829+0
I2	0,9807777904393+0	0,4869535517723-1
I	0,2581530151521-2	0,6756032558217-2
2	0,1471919847803-1	0,1820546141553-1
3	0,4067119936515-1	0,3460731298082-1
4	0,8561944606299-1	0,5599101830080-1
5	0,1536354390964+0	0,8030051209976-1
6	0,2462556364222+0	0,1047132974792+0
7	0,3621024361532+0	0,1262338201524+0
8	0,4966282667562+0	0,1414373098830+0
9	0,6414363157169+0	0,1459802400068+0
IO	0,7832591717797+0	0,1345381546756+0
II	0,9035200514949+0	0,1022642991634+0
I2	0,9806607381238+0	0,4897254166958-1
I	0,3909555796529-2	0,1012357191646-1
2	0,2135670649699-1	0,2522626151437-1
3	0,5542618007203-1	0,4346687749701-1
4	0,1092718753069+0	0,6460309060988-1
5	0,1850629587687+0	0,8701077976891-1
6	0,2829543035743+0	0,1083929372727+0
7	0,4006426951187+0	0,1261427355227+0
8	0,5330235457674+0	0,1372198939223+0
9	0,6716274361815+0	0,1379111245994+0
IO	0,8039786042053+0	0,1240238048218+0
II	0,9136854158423+0	0,9230050119876-1
I2	0,9828223140582+0	0,4357842133486-1

$$f_{ij} = \begin{cases} f_1(x_i, y_j^{(k)}), & i \le 12, \quad k = \min(i, 4), \\ f_2(x_i, y_j^{(4)}), & i > 12, \end{cases} \qquad /14в/$$

или в терминах исходной подынтегральной функции $f(\xi, \eta; R)$ /1а/:

$$f_{ij} = \begin{cases} [f(\xi, \eta; R) + f(\xi, -\eta; R)]\,|_{\xi = x_i + 1,\ \eta = 1 - y_j^{(k)}}, \\ \qquad k = \min(i, 4); \quad 1 \le i \le 12; \\ \dfrac{e^{-p_0(\xi - a)}}{p_0}[f(\xi, \eta; R) + f(\xi, -\eta; R)]\,|_{\xi = 2 + \frac{x_i}{p_0},\ \eta = 1 - y_j^{(4)}}. \\ \qquad i > 12. \end{cases}$$

3. ПАКЕТ ФОРТРАННЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ЭВМ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В АДИАБАТИЧЕСКОМ БАЗИСЕ

Пакет программ MAIN на языке фортран предназначен для группового счета любого числа матричных элементов $n_s \ge 1$ операторов в адиабатическом базисе /между первыми $S \le 20$ базисными функциями дискретного спектра задачи фиксированных кулоновских центров для значений параметра R, $R = 0{,}1$ /0,1/ 20,0/. MAIN реализует описанный в разделе 2 алгоритм численного интегрирования интегралов типа /1/ с помощью кубатурной формулы /14/.

3.1. Режим работы MAIN

Предусмотрена возможность выбора режима работы MAIN по нескольким признакам.

А. Задание точности параметром N_{pr}. Минимальный порядок M КФГК /13/, обеспечивающий требуемую точность ϵ вычисления I_2 /12/, зависит от величины d /11/. При групповом вычислении нескольких интегралов типа /12/ с разными p_ℓ и p_r d меняется в пределах $1 - 2 \cdot p_{max}/p_0 \le d \le 1 - 2 \cdot p_{min}/p_0$, где p_{min} и p_{max} - минимальный и максимальный среди встречающихся термов. При подходящем выборе параметра p_0/3в/ можно достичь требуемой точности вычисления I_2 при всех p, $p_{min} \le p \le p_{max}$, с минимальным M. В зависимости от значения управляющего параметра $N_{pr} = 1$ или $N_{pr} = 2$ p_0 и M выбираются так, чтобы обеспечить точность вычисления I /14а/ $\epsilon = 10^{-3}$ или 10^{-7} соответственно. Время счета при $N_{pr} = 1$ в 2 раза меньше, чем при $N_{pr} = 2$.

Б. Выбор множества базисных функций. Кроме полного варианта N20 программы MAIN, в котором матричные элементы операторов вычисляются между первыми 20 базисными функциями, предусмотрены упрощенные варианты, учитывающие вклад только первых 8/ N8/ или 2/ N2/ функций адиабатического базиса. В ряде случаев учет вклада ограниченных множеств базисных функций оправдано [1,5]. Упрощенные варианты MAIN занимают существенно меньшую оперативную память; время счета убывает как S^2. Замена вариантов осуществляется с помощью программы UPDATE.

В. Выбор значений параметра R. Множество значений параметра R, для которых вычисляются матричные элементы [1]

$$R = R_{in},\ R_{in} + \delta R,\ R_{in} + 2\cdot\delta R, \ldots, R_{fin}, \qquad /15/$$

определяется тремя целочисленными управляющими параметрами R_i, ΔR, R_f: $R_{in} = R_i/10$, $R_{fin} = R_f/10$, $\delta R = \Delta R/10$; $1 \le R_{i,f} \le 200$, $\Delta R \ge 1$. В области изменения R, где зависимость вычисляемых матричных элементов I(R) /1/ от R достаточно гладкая, можно использовать $\Delta R > 1$, восстанавливая значения матричных элементов в пропущенных точках R интерполяцией; при этом время счета сократится в ΔR раз.

3.2. Задание явного вида усредняемых операторов

Пакет программ MAIN предназначен для вычисления матричных элементов операторов Y следующего общего вида:

$$Y = a_s \cdot \sum_{i_d=1}^{n_d} Y_{i_d}\,, \qquad /16а/$$

$$Y_{i_d} = \frac{\overleftarrow{\partial}^{\ell_R + \ell_\xi + \ell_\eta}}{\partial R^{\ell_R}\,\partial\xi^{\ell_\xi}\,\partial\eta^{\ell_\eta}} \left\{ a_d \frac{R^{n_R}(\xi^2-1)^{\frac{n_\xi}{2}}(1-\eta^2)^{\frac{n_\eta}{2}}}{(\xi-\eta)^{n_-}(\xi+\eta)^{n_+}}\, v(\xi,\eta;R)\right\} \times$$

$$\times \frac{\overrightarrow{\partial}^{r_R + r_\xi + r_\eta}}{\partial R^{r_R}\,\partial\xi^{r_\xi}\,\partial\eta^{r_\eta}}\,. \qquad /16б/$$

Стрелки над символами дифференциальных операторов в /16б/, направленные налево /направо/, означают, что при вычислении матричных элементов типа /1/ выражение в фигурных скобках должно быть умножено на соответствующие производные от функций в обкладках $\phi_\ell(\xi,\eta;R)$ / $\phi_r(\xi,\eta;R)$ /. a_s и a_d - целочисленные коэффициенты. Множители у функции $v(\xi,\eta;R)$ в скобках выделены для упрощения записи $v(\xi,\eta;R)$. Для большинства Y функция $v(\xi,\eta;R)$ имеет вид

$$v(\xi,\eta;R) = \sum_{i=1}^{n} a_i\, \xi^{j_i}\, \eta^{k_i}\,. \qquad /17/$$

В данном варианте программы MAIN на параметры в формулах /16/ и /17/ наложены следующие ограничения:

$$\begin{gathered} -9999 \le a_s,\ a_d \le 99999;\quad 1 \le n_d \le 36;\quad n_t = 1;\\ 0 \le \ell_R, \ell_\xi, \ell_\eta, r_R, r_\xi, r_\eta \le 2;\quad 0 \le \ell_R + \ell_\xi + \ell_\eta \le 2;\ r_R + r_\xi + r_\eta \le 2;\\ -9 \le n_R \le 10;\quad 0 \le n_\pm \le 5,\quad 1 \le n \le 32,\\ -999 \le a_i \le 9999;\quad 0 \le j_i,\ k_i \le 10. \end{gathered} \qquad /18/$$

Ввод информации о явном виде данного оператора Y /16/ осуществляется с помощью перфокарт.

Карта № 1, содержащая /по формату /1X, A2, 7X, 3I5//

$$N,\ a_s,\ n_d,\ \Delta m. \qquad /19а/$$

Здесь N - "имя" оператора Y из двух буквенных или цифровых символов. При неотрицательном Δm вычисляются матричные элементы оператора Y лишь между функциями ϕ_ℓ и ϕ_r, модуль разности магнитных квантовых чисел [6] m_ℓ и m_r которых равен Δm; при $\Delta m = -1$ правилом отбора по Δm пренебрегают.

Следуют n_d однотипных групп карт с информацией о Y_{i_d}, $i_d = 1, 2, \ldots, n_d$:

Карта № 2.1, содержащая /по формату /10X, 9I5//

$$k_f,\ a_d,\ c_R,\ \ell_R,\ \ell_\xi,\ \ell_\eta,\ r_R,\ r_\xi,\ r_\eta,\ n_t. \qquad /19б/$$

Если $v(\xi,\eta;R)$ имеет вид /17/, $k_f = 0$; функции $v(\xi,\eta;R)$, которые имеют более сложный вид, нумеруются индексом k_f =1,2,... и определяются в пользовательской подпрограмме F со следующей структурой:

```
   FUNCTION  F (ITYP, X, Y)
   COMMON /TERM/ R, EMPTY (180)
   GOTO (1,2,...), ITYP
1  CONTINUE
   ...
   F=...
2  CONTINUE
   ...
   F=...
   RETURN
   ...
   END
```

При этом подразумевается отождествление $k_f \to$ ITYP, $\xi \to$ X, $\eta \to$ Y, R $\to$ R.

Карта № 2.2, содержащая n, n_ξ, n_η, n_-, n_+, a_1, j_1, k_1, a_2, j_2, k_2, ..., a_n, j_n, k_n по формату (6X,5I2,8(I4,2I2)/(16X,8(I4,2I2)). Если для данного $Y_{i_d}\,|k_f > 0$, следует положить $n = a_1 = 1$, $j_1 = k_1 = 0$.

3.3. Ввод информации в MAIN

А. Для работы MAIN необходимы карты со следующими данными:

1/ значения управляющих параметров /см.п.3.1/ R_i, R_f, ΔR, N_{pr} по формату (10X, 4I5);

2/ число усредняемых операторов n_s /по тому же формату/;

3/ информация о явном виде усредняемых операторов в указанном порядке /см. также п.3.2/.

Б. Необходимо также присоединение /через TAPE 2/ к файлу с численными значениями параболических квантовых чисел π_i, n_{1i}, n_{2i} и m_i всех 20 базисных функций, $i = 1,\dots, 20$ /6/, и со значениями соответствующих им термов $p_i(R)$ констант разделения $\lambda_i(R)$ и нормировочных коэффициентов $N_i(R)$, их первых и вторых производных по R/для всех значений $R = 0{,}1/0{,}1/20{,}0/$. Этот файл состоит из 201 бесформатной записи:

1/ запись из 80 целых чисел π_1, n_{1_1}, n_{2_1}, m_1, π_2, n_{1_2}, n_{2_2}, m_2, ..., m_{20}; $\pi_i = \begin{cases} 0, & p_i = g \\ 1, & p_i = u \end{cases}$;

2/ 200 записей из 181 действительного числа /по одной для каждого R = 0.1, 0.2, ..., 20.0/:

R, $p_1(R)$, $p_1'(R)$, $p_1''(R)$, $\lambda_1(R)$, $\lambda_1'(R)$, $\lambda_1''(R)$, $N_1(R)$, $N_1'(R)$, $N_1''(R)$, $p_2(R)$, $p_2'(R)$,..., $N_2''(R)$, $p_3(R)$,..., $N_{20}''(R)$.

3.4. Вывод информации

Для описания формы, в которой выводятся вычисленные матричные элементы, введем некоторые обозначения.

Матричный элемент $\langle Y\rangle$ оператора Y /16/ является с-числом лишь в случае $\ell_R = r_R = 0$; в общем случае этот матричный элемент - оператор в пространстве функций, зависящих от R:

$$\langle Y\rangle = \sum_{\lambda=0}^{\ell_R}\sum_{\rho=0}^{r_R} \frac{\partial^\lambda}{\partial R^\lambda}\, y_{\lambda\rho}(R)\, \frac{\partial^\rho}{\partial R^\rho}. \qquad /20/$$

Здесь $y_{\lambda\rho}(R)$ - числовая матрица. Определим

$$Q = \begin{cases} r_R + 1, & \ell_R = 0, \\ 3\cdot(\ell_R + 1), & \ell_R > 0. \end{cases}$$

Сопоставим паре индексов (λ, ρ), $0 \le \lambda \le \ell_R$, $0 \le \rho \le r_R$, индекс q, $1 \le q \le Q$, следующим образом: $(\lambda,\rho) \longrightarrow q = 3\cdot\ell_R + r_R + 1$, переобозначим $y_q(R) \equiv y_{\lambda\rho}(R)$ и восстановим у $y_q(R)$ индексы ℓ и r базисных функций ϕ_ℓ и ϕ_r, с помощью которых вычислен матричный элемент $y_q(R)$ /1/: $y_q(R) = y_{q\,\ell\,r}(R)$. Численные результаты, полученные при работе MAIN, выводятся на TAPE 3 в виде /однотипных при всех значениях R / групп бесформатных записей.

Запись 1: R, n_s. Далее следуют n_s пар записей со следующим содержанием:

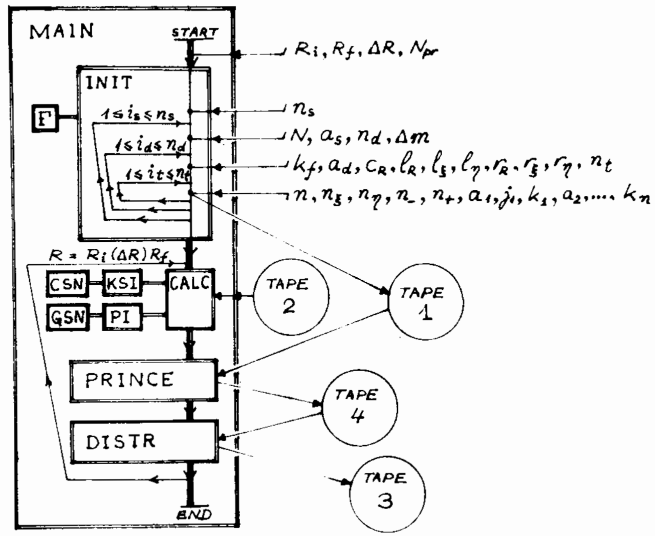
Запись 2.1, состоящая из 6 целых и одной холерической констант: i_s, Q, S, n_s, ℓ_R, r_R, N.

Запись 2.2 - из $Q\cdot S(S+1)/2+1$ действительных чисел:

R, y_{111}, y_{112}, ..., y_{11S}, y_{122}, y_{123}, ..., y_{12S}, y_{133}, ..., y_{1SS}, y_{211}, y_{212}, ..., y_{QSS}. Число записей на TAPE 3 при любом R: $2n_s + 1$.

3.5. Структура пакета программ

Основные функции подпрограмм пакета MAIN, блок-схема которого приведена на рисунке, сводятся к следующему. Главная программа MAIN организует вычисления для последовательности значений R из множества /15/. Подпрограмма INIT обрабатывает вводимую в закодированном виде информацию о явном виде усредняемых операторов. В подпрограмме PRINCE интегралы /1/ вычисляются по кубатурной формуле /14/. Подпрограмма DISTR выводит результаты на TAPE 3. Подпрограмма CALC организует вычисление значений базисных функций в узлах кубатурной формулы /14/.



Блок-схема пакета программ MAIN, предназначенного для вычисления матричных элементов операторов в адиабатическом базисе.

В данном варианте MAIN базисные функции $\phi_{\ell,r}$ вычисляются по формуле[6] $\phi_\ell(\xi,\eta;R) = N_\ell(R)\,\Pi_\ell(\xi;R)\,\Xi_\ell(\eta;R), \ldots,$ где $N_{\ell,r}(R)$, $\Pi_{\ell,r}(\xi;R)$ и $\Xi_{\ell,r}(\eta;R)$ – нормировочные коэффициенты, радиальные и угловые кулоновские сфероидальные функции[6]. Функции $\Pi_{\ell,r}(\xi,R)$ и $\Xi_{\ell,r}(\eta;R)$ вычисляются по подпрограммам GSN, PI, CSN и KSI согласно алгоритмам[6,8] с использованием приведенных в[8] численных значений термов $p_{\ell,r}$ и констант разделения $\lambda_{\ell,r}$[6].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

4.1. Обсуждение результатов

С помощью пакета программ MAIN, реализующего изложенный в разделе 2 алгоритм численного интегрирования сфероидальных интегралов типа /1/, в адиабатическом базисе с единичными зарядами кулоновских центров с точностью 10^{-5} были вычислены матричные элементы операторов, описывающих релятивистские и спиновые эффекты, эффекты электромагнитной структуры ядер и экранировки внешними электронами и взаимодействие с внешними полями, необходимые для расчета поправок к уровням энергии мезомолекул изотопов водорода с точностью 10^{-3} эВ.

Сравнение MAIN с существующими методами вычисления матричных элементов в адиабатическом базисе[2,5,8] показывает, что:

1. Область применения MAIN существенно расширена в результате включения важных с физической точки зрения операторов с интегрируемыми сингулярностями и неразделяющимися переменными.

2. Точность вычисления MAIN совпадает с точностью, полученной в[2] и[8] в тех случаях, где сравнение возможно.

3. Оперативная память ЭВМ, занимаемая MAIN, примерно та же, что и в[2,8]; по быстродействию MAIN превосходит результаты[2,8] в 5-10 раз и данные[5] в $\sim$100 раз.

4.2. Возможности усовершенствования и обобщения метода и перспективы его дальнейшего применения

Алгоритм вычисления интегралов /1/, изложенный в разделе 2, может, вообще говоря, быть усовершенствован с целью сокращения и времени счета, и объема занимаемой оперативной памяти ЭВМ. Интересными являются возможности замены РКФГК /6/ порядка 12 и КФГК /12/ порядка M единой РКФГК порядка $N < M + 12$ и четырех использованных нами для интегрирования по переменной y /7/ КФГК /8/ порядка 12 единой РКФГК несколько высшего порядка. Принципиально новым решением было бы использование кубатурной формулы типа /14/, не связанной с КФГК для одномерных интегралов /5/, /7/, /12/ по переменным x и y.

Для подынтегральной функции $f_1(x,y)$ /5а/ с особенностями отличного от /4/ типа необходимо только заменить /8/ и /6/ на КФГК и РКФГК, соответствующие новому типу сингулярностей. Таким именно способом были вычислены эффективные потенциалы поляризации вакуума в адиабатическом представлении, для которых /см. /4/[12]: $f_1(x,y) = \psi_{1A}(x,y) + \ln(x+y)\cdot\phi_{1B}(x,y)$, $0 < |\psi_{1A,B}(0,0)| < \infty$.

Вычисление уровней энергии мезомолекул изотопов водорода далеко не исчерпывает круга актуальных физических задач, решаемых в адиабатическом подходе с использованием кулоновского сфероидального базиса[1]: достаточно упомянуть роль мезомолекулярных ионов $\mathrm{He}d\mu$, $\mathrm{He}p\mu$ в мюонном катализе ядерного синтеза[3]. Адаптация MAIN для ядер с неравными зарядами не составляет труда.

Интерес вызывает использование различных модификаций адиабатического базиса[10] для решения широкого класса проблем квантовой электродинамики и хромодинамики. При соответствующих изменениях в подпрограмме CALC /см. пункт 3.5/, а также в КФГК /8/ и РКФГК /6/ пакет программ MAIN может быть с успехом применен для вычисления матричных элементов гамильтониана и в этих случаях.

В заключение автор выражает глубокую благодарность Л.Александрову, С.И.Виницкому, Д.Караджову, В.С.Мележику, Л.И.Пономареву, Т.П.Пузыниной, И.В.Пузынину, Л.Н.Сомову и М.П.Файфману за содействие и помощь на всех этапах работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т.13, вып.6, с.1336.
2. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1978, т.28, с.850.
3. Ponomarev L.I. Proc.of the X European Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics. Moscow, 1981, vol.11,p.66.
4. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, т.74, с.698.
5. Бакалов Д.Д., Виницкий С.И., Мележик В.С. ЖЭТФ, 1980, т.79, с.1629
6. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
7. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1982, т.82, с.670.
8. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-5040, Дубна, 1970.
9. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р11-11218, Дубна, 1978.
10. Matveenko A.V. Phys.Lett., 1983, vol.129B, p.11.
11. Справочник по специальным функциям /под ред. М.Абрамовича и И.Стиган/. "Наука", М., 1979.
12. Fullerton L.W., Rinker G.A. Phys.Rev., 1976, vol.A13,p.1283.

Рукопись поступила в издательский отдел
22 декабря 1983 года

Бакалов Д. 11-83-875

Вычисление матричных элементов релятивистского гамильтониана системы трех частиц в адиабатическом базисе

Матричные элементы релятивистского гамильтониана системы трех частиц в адиабатическом базисе сводятся к двумерным интегралам от функций с интегрируемыми особенностями в полюсах сфероидальной координатной системы. Для вычисления таких интегралов построена кубатурная формула, обеспечивающая относительную точность $\epsilon \leq 10^{-5}$ вычисления матричных элементов по волновым функциям дискретного спектра задачи двух центров. Приведена таблица со значениями узлов и весов кубатурной формулы, дано подробное описание пакета программ MAIN для вычисления матричных элементов операторов в адиабатическом базисе, соответствующем единичным зарядам кулоновских центров. Программа MAIN написана на языке фортран и ориентирована на ЭВМ CDC-6500. С помощью пакета программ MAIN с относительной точностью $\epsilon \leq 10^{-5}$ вычислены матричные элементы операторов, описывающих релятивистские эффекты в мезомолекулах изотопов водорода.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Bakalov D. 11-83-875

Calculation of Matrix Elements of the Three-Body System Relativistic Hamiltonian in Adiabatic Representation

Matrix elements of the three-body relativistic hamiltonian in adiabatic representation reduce to two-dimensional integrals of functions with integrable singularities in poles of the spheroidal coordinate system. A cubature formula for calculating the integrals is obtained, which provides relative accuracy $\epsilon \leq 10^{-5}$ for calculating matrix elements over wave functions of discrete spectrum of two-centre problem. The table is given which presents points and weights of cubature formula. A detailed description of MAIN program for calculation of matrix elements of operators in adiabatic representation is given. MAIN program is written in FORTRAN language and is oriented for CDC-6500 computer. Matrix elements of operators describing relativistic effects in mesic molecules of hydrogen isotopes are calculated by means of MAIN program with $\epsilon \leq 10^{-5}$ relative accuracy.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой