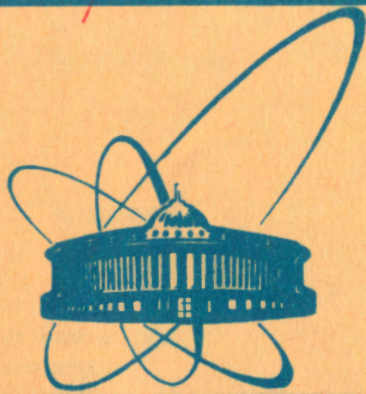


1524/82

3/11-82

⊕  
+



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

P11-81-856

В.С.Мележик, Л.Н.Сомов

РЕШЕНИЕ С ПОВЫШЕННОЙ ТОЧНОСТЬЮ  
ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ  
ДЛЯ СИСТЕМЫ  
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ  
СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

1981

## I. Введение

В последние годы достигнут значительный прогресс в решении квантовомеханической задачи трех тел с кулоновским взаимодействием <sup>/1/</sup>. Эта задача решалась в адиабатическом представлении <sup>/2-5/</sup> с помощью алгоритмов <sup>/6-8/</sup>, построенных на основе метода Ньютона и его модификации <sup>/9/</sup>.

Являясь классической задачей математической физики <sup>/10/</sup>, она имеет также ряд интересных физических приложений: ее решения используются, например, для теоретического описания различных мезомолекулярных процессов (см. обзор <sup>/11/</sup>). В частности, для количественного описания резонансного образования мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$  необходимо знать энергии  $\epsilon$  уровней и волновые функции этих систем с высокой точностью <sup>/12/</sup> \*).

Достигнутая к настоящему времени точность вычисления уровней  $\epsilon$  ( $\Delta \epsilon \approx 0,1-0,05$  эВ при глубине потенциала  $\sim 600$  эВ) недостаточна для количественной интерпретации планируемых экспериментов. С этой целью ее необходимо повысить, по крайней мере, на порядок, т.е. до  $\Delta \epsilon \sim 0,01-0,005$  эВ.

Для реализации этой задачи следует решить ряд проблем <sup>/1/</sup>. Мы рассмотрим одну из них — нахождение численного решения с высоким порядком точности частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений большой размерности, возникающей при вычислении энергии уровней и волновых функций в адиабатическом представлении задачи трех тел.

В работе реализована достаточно простая вычислительная схема высокого порядка точности —  $O(h^4)$  ( $h$  — шаг разностных формул,  $O(h^4)$  — ошибка аппроксимации вычислительной схемы 4-го порядка), идея которой предложена в работе <sup>/13/</sup>. Ее эффективность демонстрируется на примере вычисления энергии уровней мезомолекулы  $pd\mu$ . Проведено сравнение с численным методом теории возмущений <sup>/14/</sup> высокого порядка точности ( $O(h^4)$ ). Рассмотренный алгоритм может быть использован для повышения точности расчетов системы трех тел.

\* )  $\mu^-$  — мезомолекула — два положительно заряженных ядра и  $\mu^-$  — мезон — является примером квантовомеханической задачи трех тел.

## 2. Постановка задачи

Для системы линейных дифференциальных уравнений второго порядка

$$\left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + (\hat{I}E - \hat{U}(R)) \right\} \vec{x}(R) \quad (1)$$

с матрицей коэффициентов специального вида

$$\hat{U}(R) = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & \dots & U_{1N} \\ U_{21} & U_{22} & 0 & \dots & 0 \\ U_{31} & 0 & U_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{N1} & 0 & 0 & \dots & U_{NN} \end{pmatrix} \quad (2)$$

необходимо найти собственное значение  $E^* < 0$  (энергия уровня) и собственный вектор  $\vec{x}^*(R)$  (волновую функцию) на отрезке  $[0, R_m]$ , удовлетворяющие граничным условиям

$$\vec{x}(0) = 0, \quad (3a)$$

$$\vec{x}(R_m) = 0, \quad (3b)$$

если известно начальное приближение  $E^0, \vec{x}^0(R)$ . Здесь каждый элемент  $U_{ij}(R)$  матрицы коэффициентов (2)  $\hat{U}(R)$  системы уравнений - матрица  $2 \times 2$ ,  $\hat{I}$  - единичная матрица, а  $\vec{x}(R)$  - вектор размерности  $2 \cdot N$ .

Задача (1), (3) возникает при вычислении спектра мезомолекулы в адиабатическом представлении  $1/I$ .

Отметим ее основные особенности. Коэффициенты системы уравнений (1) заданы численно и имеют далекодействующую асимптотику. Они строятся из эффективных потенциалов задачи трех тел  $\hat{K}(R)$  и  $\hat{Q}(R)$ , которые вычислены в работах [15-16], следующим образом:

$$\hat{U}(R) = \hat{K}(R) + 2 \hat{Q}(R) \frac{d}{dR}.$$

Матрица коэффициентов имеет большую размерность и задана на широком интервале  $[0, R_m]$  изменения переменной  $R$ . Для вычисления энергии уровней  $M$ -мезомолекул с точностью  $\Delta E \approx 0,1$  эВ необходимо положить  $2N \sim 250$ ,  $R_m = 60$ , а шаг таблицы коэффициентов  $\hat{U}$  должен быть  $h = 0,1$   $1/I$ . Собственные функции должны удовлетворять условию нормировки

$$\langle \vec{x} | \vec{x} \rangle - 1 = \sum_{i=1}^{2N} \int_0^{R_m} x_i^2(R) dR - 1 = 0, \quad (4)$$

которое следует из условия нормировки волновых функций квантовомеханической системы трех тел.

### 3. Описание алгоритма

Основу вычислительной схемы высокого порядка точности для решения задачи (1), (3), (4) составляет алгоритм, реализованный ранее в работах [5-7] и дающий погрешность  $O(h^2)$ . При ее построении использована разностная схема высокого порядка, рассмотренная в работе [17] для одного уравнения, которая позволяет без существенных изменений повысить точность вычислительного алгоритма [5-7] до величины  $O(h^4)$ .

Для нахождения решения задачи (1), (3), (4) строится ньютоновский процесс [8,9]

$$\vec{X}^{(k+1)}(R) = \vec{X}^{(k)}(R) + (\vec{w}^{(k)}(R) + M_k \vec{v}^{(k)}(R)), \quad (5)$$

$$E_{k+1} = E_k + M_k,$$

где итерационные поправки  $\vec{w}^{(k)}(R)$  и  $\vec{v}^{(k)}(R)$  к волновым функциям  $\vec{X}^{(k)}(R)$  вычисляются при решении краевых задач

$$\begin{cases} [\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + (\hat{I} E_0 - \hat{V}(R))] \vec{w}^{(k)}(R) = - [\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + \hat{I} (E_k - \hat{V}(R))] \vec{X}^{(k)}(R), \\ \vec{w}^{(k)}(0) = - \vec{X}^{(k)}(0), \\ \vec{w}^{(k)}(R_m) = - \vec{X}^{(k)}(R_m), \end{cases} \quad (6a)$$

$$\begin{cases} [\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + (\hat{I} E_0 - \hat{V}(R))] \vec{v}^{(k)}(R) = - \vec{X}^{(k)}(R), \\ \vec{v}^{(k)}(0) = 0, \\ \vec{v}^{(k)}(R_m) = 0, \end{cases} \quad (6b)$$

а поправка  $M_k$  к  $E_k$  находится из условия нормировки функций  $\vec{X}_k(R)$ :

$$M_k = \frac{1 - \langle \vec{X}^{(k)} | \vec{X}^{(k)} \rangle - 2 \langle \vec{w}^{(k)} | \vec{X}^{(k)} \rangle}{2 \langle \vec{v}^{(k)} | \vec{X}^{(k)} \rangle} \quad (7)$$

Очевидно, что наиболее сложным местом при численной реализации ньютоновского процесса является решение краевых задач (6). Для нахождения итерационных поправок  $\vec{v}^{(k)}(R)$  и  $\vec{w}^{(k)}(R)$  применена вычислительная схема [7,8], учитывающая специальный вид матрицы (см. (2)). Например, для решения краевой задачи (6b) строится "внутренний" итерационный процесс:

$$\vec{v}_i^{(0)}(R) = 0, \quad i = 2, 3, \dots, N,$$

$$[\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + (\hat{I} E - \hat{V}_{11}(R))] \vec{v}_1^{(l)}(R) = - \vec{X}_1(R) + \sum_{i=2}^N \hat{V}_{1i}(R) \vec{v}_i^{(l-1)}(R),$$

$$\left[ \dot{I} \frac{d^2}{dR^2} + (\dot{I}E - U_{ii}(R)) \right] \varphi_i^{(\ell)}(R) = -X_i(R) + U_{is} \varphi_s^{(\ell)}(R) \quad (8)$$

На первом шаге по  $\ell$   $\varphi_i^{(\ell-1)}(R) \equiv \varphi_i^{(0)}(R)$  полагается равным "0", решается первая пара уравнений (8), вычисленные функции  $\varphi_s^{(\ell)}(R)$  подставляются в правые части оставшихся  $N-1$  пар незацепляющихся уравнений, каждую из которых можно решать независимо. Определив  $\varphi_i^{(\ell)}(R) \equiv \varphi_i^{(\ell)}(R)$ , переходим к следующему шагу по  $\ell$ . Вычисления прекращаются при достижении необходимой точности.

Решения каждой пары уравнений в системе (8) находились численно с помощью алгоритма прогонки для трехточечных уравнений [18], в которые переходит система (8) при разностной аппроксимации функций  $\frac{d^2}{dR^2} \varphi_i^{(\ell)}(R)$ ,  $\frac{d}{dR} \varphi_i^{(\ell)}(R)$  с ошибкой  $O(h^2)$ . В этом случае соответствующая (8) разностная задача принимает вид:

$$N_n \cdot \varphi_{s,n+2}^{(\ell)} + M_n \varphi_{s,n}^{(\ell)} + R_n \varphi_{s,n-2}^{(\ell)} = f_n(X_{s,n}, \varphi_{i,n}^{(\ell-1)}),$$

$$\bar{N}_n \cdot \varphi_{i,n+2}^{(\ell)} + \bar{M}_n \varphi_{i,n}^{(\ell)} + \bar{R}_n \varphi_{i,n-2}^{(\ell)} = \bar{f}_n(X_{i,n}, \varphi_{s,n}^{(\ell)}), \quad (9)$$

где

$$N_n = 1 - Q_{ss,n} \cdot h, \quad M_n = (E \cdot h^2 - 2) - h^2 \cdot H_{ss,n}, \quad R_n = 2 - N_n,$$

$$f_n(X_{s,n}, \varphi_{i,n}^{(\ell-1)}) = -h^2 X_{s,n} + \sum_{i=2}^N h^2 U_{si,n} \cdot \varphi_{i,n}^{(\ell-1)},$$

$$\bar{N}_n = 1 - Q_{ii,n} \cdot h, \quad \bar{M}_n = (E \cdot h^2 - 2) - h^2 \cdot H_{ii,n}, \quad \bar{R}_n = 2 - \bar{N}_n,$$

$$f_n(X_{i,n}, \varphi_{s,n}^{(\ell)}) = -h^2 X_{i,n} + h^2 U_{is,n} \cdot \varphi_{s,n}^{(\ell)}.$$

Здесь индексы  $i$  и  $n$  пробегает значения  $i = 2, \dots, N$  и  $n = 1, \dots, N_R$ ,  $N_R$  - число узлов разностной сетки по  $R$  (шаг разностной сетки совпадает с шагом таблицы потенциалов).

Как известно, повышение порядка точности аппроксимации

$$\frac{d^2}{dR^2} = \Delta_h^2 + O(h^4) =$$

$$= \frac{1}{24h^2} (-2\varphi_{n-2} + 32\varphi_{n-1} - 60\varphi_n + 32\varphi_{n+1} - 2\varphi_{n+2}) + O(h^4), \quad (10)$$

$$\frac{d}{dR} = \Delta_h^1 + O(h^2) = \frac{1}{12h} (\varphi_{n-2} - 8\varphi_{n-1} + 8\varphi_{n+1} - \varphi_{n+2}) + O(h^2)$$

приводит к пятиточечным уравнениям. Однако перехода к значительно более сложной в реализации прогонке для пятиточечных уравнений можно избежать, воспользовавшись приемом, предложенным в работе [13], применявшимся ранее при решении задачи Штурма-Лиувилля для одного уравнения [17].

Таблица . Сходимость ньютоновских процессов в программах ВААР и ВААРН4

К	ВААР				ВААРН4			
	$\delta_k$	$M_k$	$-E_k(\text{е.з.})$	$-E_k(\text{эВ})$	$\delta_k$	$M_k$	$-E_k(\text{е.з.})$	$-E_k(\text{эВ})$
0	0,1065				0,1068		0,516522	220,000
1	0,2393 E-02	0,1286 E-02	0,517808	220,547	0,5207 E-02	0,9533 E-03	0,517476	220,406
2	0,1582 E-04	0,2269 E-02	0,520077	221,514	0,3784 E-02	0,2325 E-02	0,519801	221,396
3	0,3072 E-06	0,5595 E-05	0,520083	221,516	0,2986 E-02	0,4529 E-05	0,519805	221,396
4	0,1991 E-08	0,2838 E-06	0,520092	221,516	0,2340 E-02	0,2844 E-06	0,519805	221,396
5					0,1843 E-02	0,1875 E-08	0,519805	221,396
37					0,1714 E-06	0,1617 E-16	0,519805	221,396

Расчет проведен для мезомолекулы  $pd_m$  ( $J = \tilde{J} = 0$ ). Энергия связи  $\epsilon_{J\tilde{J}}$  находилась при следующих значениях параметров:  $2N = 26$ ;  $h = 0,1$ ;  $R_m = 20$ .

Здесь  $k$  - номер итерации ньютоновского процесса,  $M_k$  - итерационная поправка к энергии уровня мезомолекулы,  $E_k$  - энергия системы  $pd_m$  в единицах задачи и в электрон-вольтах.

Его идея состоит в следующем. Итерационная схема (8) строится так, чтобы сохранить трехточечность разностных уравнений (9). Это достигается за счет искажения правых частей уравнений дополнительными слагаемыми  $\Delta h^2 - \Delta h^4$ , содержащими малый параметр  $h^2$ . В этом случае итерационный процесс (9) заменяется на:

$$N_n \tilde{\psi}_{j, n+1}^{(l)} + M_n \tilde{\psi}_{j, n}^{(l)} + R_n \tilde{\psi}_{j, n-1}^{(l)} = f(y_{j, n}, \tilde{\psi}_{i, n}^{(l-1)}) + \mathcal{D}(\tilde{\psi}_{j, n}^{(l-1)}),$$

$$\bar{N}_n \tilde{\psi}_{i, n+1}^{(l)} + M_n \tilde{\psi}_{i, n}^{(l)} + \bar{R}_n \tilde{\psi}_{i, n-1}^{(l)} = f(y_{i, n}, \tilde{\psi}_{j, n}^{(l)}) + \mathcal{D}(\tilde{\psi}_{i, n}^{(l)}). \quad (\text{II})$$

Дополнительные члены  $\mathcal{D}$ , появившиеся вследствие повышения порядка конечно-разностной аппроксимации, выписаны в приложении. Как показали численные исследования, сходимость этого итерационного процесса незначительно замедлена по сравнению с (8) <sup>1/8</sup>.

Итак, мы построили вычислительную схему (5)-(7), (II) для численного решения задачи (I), (3), (4) с точностью  $\sim O(h^4)$ , эффективность которой демонстрируется в следующем параграфе на примере вычисления энергии уровней  $M$ -мезомолекул.

#### 4. Численный пример

В таблице приведены результаты расчетов энергии уровней  $\epsilon_{j, j}$  ( $J = j = 0$ ) мезомолекулы  $pdM$  по данной вычислительной схеме (ВААРН4) и "старой" (ВААР). Этот расчет демонстрирует достаточно быструю сходимость схемы ВААРН4 по сравнению с ВААР (по  $M_k$ ). Вычисления прекращались при достижении  $M_k$  величины  $\sim 10^{-6}$ , при этом уровень невязки  $\delta_k \sim 10^{-2}$ . "Сходимость по невязке"  $\delta_k = \|[ [\hat{i} \frac{d^2}{dr^2} + (\hat{E} - \hat{V}(R))] \tilde{\chi}^{(k)}(R) ]\|$  замедлена. С увеличением числа итераций  $\delta_k$ , которая характеризует точность вычисления волновых функций  $\tilde{\chi}(R)$ , тоже уменьшается до величины  $\sim 10^{-6}$ . Отметим, что в схеме ВААР  $\delta_k \sim M_k$  для любого  $k$ . В программе предусмотрен переход со схемы ВААР на ВААРН4 и наоборот. Вычисления по ВААРН4 начинались с начальных приближений, полученных по схеме ВААР.

Для контроля точности предложенной вычислительной схемы был проведен расчет энергии уровней мезомолекул двумя численными методами одинакового порядка точности  $O(h^4)$ : по данной схеме и численным методом возмущений (программа  $LIVIU$ ), который, как показано в работе /14/, дает погрешность  $\sim 3 \cdot 10^{-3}$  эВ, если коэффициенты системы уравнений (I) заданы шагом  $h = 0,1$ . Результаты расчетов в пределах указанной точности совпадают между собой.

Результаты расчетов по схеме высокого порядка точности (ВААРН4) отличаются от проведенных ранее по программе ВААР на величину  $\sim 0,1$  эВ, а в случае слабосвязанных уровней - на величину  $\sim 0,05$  эВ.

## 5. Заключение

Рассмотренный алгоритм высокого порядка точности был использован для уточнения значений энергии уровней  $M$ -мезомолекул и их волновых функций. Оказалось, что предложенная вычислительная схема устойчиво работает во всей области дискретного спектра мезомолекул, а ее погрешность составляет величину  $\sim 3 \cdot 10^{-3}$  эВ при расчете энергии уровней для крупной сетки задания потенциалов ( $h = 0,1$ ).

Ее достоинством является относительная простота в реализации: вычислительный алгоритм построен на основе схемы ВААР ( $\Delta E \sim O(h^2)$ ) без существенного усложнения существующих программ <sup>7,8,9/</sup>.

Использование предложенного алгоритма высокого порядка точности в рамках адиабатического метода позволяет повысить точность расчетов энергии уровней мезомолекул до  $10^{-2}-10^{-3}$  эВ при условии, что решены остальные проблемы адиабатического подхода: "исчерпана" матрица потенциалов, учтен вклад в энергию уровня высших состояний дискретного спектра ( $N \rightarrow \infty$ ) и низших состояний ( $k \rightarrow 0$ ) непрерывного спектра задачи двух кулоновских центров, а также получено насыщение по границе  $R_m$  и шагу интегрирования по  $k$  в непрерывном спектре <sup>1/</sup>.

В заключении авторы выражают благодарность Л.И. Пономареву за интерес к работе.

### Приложение

Дополнительные слагаемые  $D(\vartheta_{i,n})$  ( $i = 1, \dots, N$ ) в правых частях уравнений (II) при  $n = 1, \dots, N_R$  равны:

$$D(\vartheta_{i,n}) = \frac{1}{12} (\vartheta_{i,n-2} - 4\vartheta_{i,n-1} + 6\vartheta_{i,n} - 4\vartheta_{i,n+1} + \vartheta_{i,n+2}) + \frac{1}{6} Q_{ii,n} \cdot h \cdot (\vartheta_{i,n-2} - 2\vartheta_{i,n-1} + 2\vartheta_{i,n+1} - \vartheta_{i,n+2}).$$

При  $n = 1$

$$D(\vartheta_{i,1}) = -\frac{5}{12} \vartheta_{i,0} + \frac{1}{3} \vartheta_{i,1} - \frac{3}{2} \vartheta_{i,2} + \frac{2}{3} \vartheta_{i,3} - \frac{1}{12} \vartheta_{i,4} + Q_{ii,1} \cdot h \cdot \left( \frac{1}{2} \vartheta_{i,0} - \frac{5}{3} \vartheta_{i,1} + 2\vartheta_{i,2} - \vartheta_{i,3} + \frac{1}{6} \vartheta_{i,4} \right),$$

при  $n = N_R$

$$D(\vartheta_{i,N_R}) = -\frac{1}{12} \vartheta_{i,N_R-3} + \frac{2}{3} \vartheta_{i,N_R-2} - \frac{3}{2} \vartheta_{i,N_R-1} + \frac{1}{3} \vartheta_{i,N_R} - \frac{5}{12} \vartheta_{i,N_R+1} + Q_{ii,N_R} \cdot h \cdot \left( \frac{1}{6} \vartheta_{i,N_R-3} - \vartheta_{i,N_R-2} + 2\vartheta_{i,N_R-1} - \frac{5}{3} \vartheta_{i,N_R} + \frac{1}{2} \vartheta_{i,N_R+1} \right).$$



### Граничные условия

$$J_i(0) = J_i(R_m) = 0$$

аппроксимируются следующим образом:

$$J_{i,0} = J_{i,N_{2+1}} = 0.$$

### Литература

1. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Трускова Н.Ф. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
2. Ponomarev L.I. and Vinitsky S.I. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1979, 12, p.567-584.
3. Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. and Vucaylovic F.R. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1980, 13, p.847-867.
4. Ponomarev L.I., Somov L.N. and Vucaylovic F.R. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1981, 14, p.591-601.
5. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ОИЯИ, P4-80-775, Дубна, 1980.
6. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12787, Дубна, 1979.
7. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12789, Дубна, 1979.
8. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12790, Дубна, 1979.
9. Бидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, с.127.
10. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферорядальные и кулоновские сферорядальные функции. "Наука", М., 1976.
11. Gerstein S.S. and Ponomarev L.I. In Muon Physics, v.III, Eds. V.Hughes and C.S.Wu, 1975, p.141.
12. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849.
13. Волков Е.А. Высшая математика, 1957, I, с.62.
14. Иксару Л.Г., Мележик В.С. ОИЯИ, P4-80-749, Дубна, 1980.
15. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. and Truskova N.F. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1978, p.3861.
16. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. and Somov L.N. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1977, p.1336.
17. Сомов Л.Н. ОИЯИ, P4-81-85I, Дубна, 1981.
18. Самарский А.А. Теория разностных схем. "Наука", М., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел  
30 декабря 1981 года.