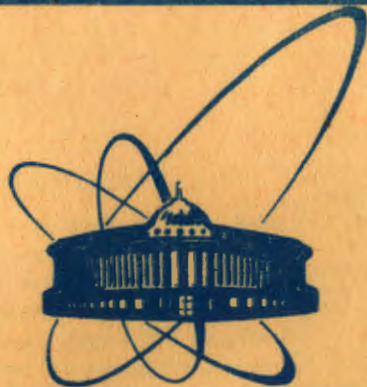


4419/8.2

20/IX-82



**сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна**

**P11-82-428**

**С.И.Виницкий, Т.П.Пузынина, И.В.Пузынин**

**АППРОКСИМАЦИЯ  
СПЛАЙНАМИ ТАБЛИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ  
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА  
ДЛЯ УТОЧНЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ РЕШЕНИЙ**

**1982**

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Некоторые задачи многих тел в квантовой механике могут быть сведены к решению системы одномерных уравнений Шредингера с потенциалами, заданными в виде таблиц. К ним относится, например, задача нахождения энергетических спектров  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода<sup>/1/</sup>, а также молекул водорода<sup>/2/</sup>.

Для нахождения энергий и волновых функций связанных состояний таких квантовомеханических систем, состоящих из трех или четырех частиц с кулоновским взаимодействием, были разработаны алгоритмы, реализующие ньютоновский итерационный процесс решения функционального уравнения<sup>/3/</sup>:

$$\phi(z) = 0, \quad /1/$$

$$\phi(z) = \left\{ \begin{array}{l} D_0 \chi - \lambda \chi \\ (\chi, \chi) - 1 \end{array} \right\} \quad /2/$$

Здесь  $D_0 = I \frac{d^2}{dR^2} + V(R)$  - оператор системы уравнений Шредингера;  $V(R)$  - матрица потенциалов;  $\lambda$  - собственное значение и  $\chi \equiv \chi(R)$  - собственный вектор, характеризующие уровни энергии и волновые функции связанных состояний квантовомеханической системы.

В рассматриваемом классе задач матрица потенциалов задается в виде таблицы с узлами  $R_N \in [R_0, R_{\max}]$ . Такая постановка задачи определяет выбор алгоритма ее решения, основанного на методе конечных разностей<sup>/4/</sup>. Отметим, что выбор разностной сетки, согласованной с узлами таблиц потенциалов, позволяет наиболее точно использовать имеющуюся численную информацию о матрице потенциалов  $V(R)$ .

Теоретические оценки точности решения разностной задачи Штурма-Лиувилля<sup>/4/</sup> /1/, /2/ позволяют построить эффективные алгоритмы повышения точности разностного решения путем его экстраполяции по Ричардсону<sup>/5/</sup> или Паде<sup>/6/</sup> на последовательности сгущающихся сеток. Однако в рассматриваемом случае при уточнении разностного решения возникает задача приближенного продолжения дискретно заданных потенциалов  $V(R_N)$  на все используемые сгущающиеся сетки. Такое продолжение вносит дополнительные погрешности в результаты, и они должны быть согла-

сованы с погрешностями разностного решения задачи. В то же время для уточнения разностного решения желательно использовать какой-либо простой и экономичный способ аппроксимации табличных потенциалов.

В данной работе проведено численное исследование точности разностных решений уравнений Шредингера при аппроксимации табличных потенциалов кубическими сплайнами<sup>/7/</sup>. Исследована зависимость ошибки разностного решения от шага таблиц потенциалов и шага разностной схемы. Проведено уточнение значений энергии некоторых связанных состояний  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода. Расчеты выполнены в адиабатическом представлении задачи трех тел<sup>/1/</sup> с помощью разработанного комплекса программ<sup>/8/</sup>, в которых используется трехточечная разностная схема порядка  $O(h^2)$ ,  $h$  - шаг разностной схемы.

## 2. ОБ ОШИБКЕ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПРИ АППРОКСИМАЦИИ ОПЕРАТОРА СПЛАЙНАМИ

Исследуем ошибки решения задачи на собственные значения /1/, /2/, возникающие при аппроксимации потенциалов  $V(R)$ . Для этого воспользуемся известной теоремой<sup>/8/</sup> о возмущении оператора  $D_0$ . Используя работу<sup>/9/</sup>, данную теорему можно обобщить на задачу /1/, /2/ с достаточно гладкими потенциалами  $V(R)$ .

Пусть задача /1/, /2/ имеет простое решение  $\{\lambda^*, \chi^*\}$  и  $D_1$  - возмущение оператора  $D_0$ . Тогда найдутся такие постоянные  $\epsilon > 0$  и  $\delta > 0$ , что при  $\|D_1\| < \delta$  существует собственное значение  $\tilde{\lambda} = \lambda^* + \lambda_1$  и нормированный собственный элемент  $\tilde{\chi} = \chi^* + \chi_1$  оператора  $D = D_0 + D_1$ , причем  $|\lambda_1| + \|\chi_1\| < \epsilon$ , и такие собственное значение и собственный элемент единственные.

Первые приближения для поправок  $\lambda_1$  и  $\chi_1$  могут быть получены по формулам

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\approx (D_1 \chi^*, \chi^*), \\ \chi_1 &\approx (D_0 - \lambda^* I)^{-1} (\lambda_1 \chi^* - D_1 \chi^*), \end{aligned} \quad /3/$$

которые позволяют судить о величине ошибок решения при возмущении исходного оператора.

Рассмотрим возмущение оператора  $D_0$ , возникающее при замене потенциала  $V(R)$  кубическим сплайном. Известно<sup>/7/</sup>, что если  $V(R)$  принадлежит  $C^3[R_0, R_{\max}]$  и  $\Delta$  - максимальный шаг сетки, на которой заданы значения  $V(R_N)$ , то справедливо соотношение

$$V^{(p)}(R) - S_{\Delta}^{(p)}(R) = o(\Delta^{3-p}), \quad /4/$$

$$p = 0, 1, 2,$$

где  $S_{\Delta}(R)$  - кубический сплайн, построенный на этой сетке по значениям  $V(R_N)$ . В результате замены  $V(R)$  на  $S_{\Delta}(R)$  получается оператор

$$D = I \frac{d^2}{dR^2} + S_{\Delta}(R), \quad /5/$$

определенный на всем отрезке  $[R_0, R_{\max}]$ . Соотношение /4/ позволяет оценить норму оператора возмущения  $D_1$ . Это, в свою очередь, дает возможность с помощью соотношения /3/ судить, какой следует выбрать шаг таблицы потенциалов  $V(R_N)$ , чтобы поправки к решению, обусловленные заменой потенциала  $V(R)$  сплайном, имели требуемый порядок малости.

Задачу на собственные значения

$$D\chi - \lambda\chi = 0,$$

$$(\chi, \chi) - 1 = 0 \quad /6/$$

с решением  $\{\tilde{\lambda}, \tilde{\chi}\}$  можно аппроксимировать методом конечных разностей<sup>/4/</sup>, а для уточнения разностных решений применять экстраполяцию на последовательности сгущающихся сеток.

Отличие разностного решения  $\{\lambda_h, \chi_h\}$  от  $\{\tilde{\lambda}, \tilde{\chi}\}$  оценивается соотношениями<sup>/4,5/</sup>

$$|\tilde{\lambda} - \lambda_h| \leq C_1 h^s,$$

$$\|\tilde{\chi} - \chi_h\| \leq C_2 h^s, \quad /7/$$

где  $C_1, C_2 > 0$  - константы;  $s > 0$  - порядок выбранной экстраполяции. Поэтому разности между искомым решением  $\{\lambda^*, \chi^*\}$  задачи /1/, /2/ и уточненным разностным решением  $\{\lambda_h, \chi_h\}$  характеризуются соотношениями

$$|\lambda^* - \lambda_h| \leq C_3 (h^s + \Delta^{3+\alpha}),$$

$$\|\chi^* - \chi_h\| \leq C_4 (h^s + \Delta^{3+\alpha}), \quad /8/$$

$\alpha, C_3, C_4 > 0$  - константы. Неравенства /8/ позволяют установить соответствие между шагом  $\Delta$  таблицы значений потенциалов  $V(R_N)$  и шагом  $h$  разностной схемы, необходимое для достижения требуемой точности решения исходной задачи /1/, /2/.

## 3. ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве примера рассмотрено одномерное уравнение Шредингера с потенциалом Морзе<sup>/10/</sup>. В работе<sup>/11/</sup> специальный выбор параметров этого потенциала позволил с достаточно хорошей

Таблица 1

$\lambda$	$h = 0,4$	$h = 0,2$	$h = 0,1$	$\zeta_1$	$\zeta_2$	$\zeta_1/\zeta_2$
R/X	0,4376838	0,4358895	0,4354554	$0,1794 \cdot 10^{-2}$	$0,4340 \cdot 10^{-3}$	4,134
0,0	$0,1636059 \cdot 10^{-1}$	$0,1805224 \cdot 10^{-1}$	$0,1861227 \cdot 10^{-1}$	$0,1692 \cdot 10^{-2}$	$0,5600 \cdot 10^{-2}$	3,021
3,2	0,5774980	0,5772630	0,5771911	$-0,2351 \cdot 10^{-3}$	$-0,7184 \cdot 10^{-4}$	3,272
6,4	0,1320313	0,1332752	0,1335800	$0,1244 \cdot 10^{-2}$	$0,3048 \cdot 10^{-3}$	4,081
9,6	$0,1721921 \cdot 10^{-1}$	$0,1740441 \cdot 10^{-1}$	$0,1744948 \cdot 10^{-1}$	$0,1852 \cdot 10^{-3}$	$0,4508 \cdot 10^{-4}$	4,109
12,8	$0,2103833 \cdot 10^{-2}$	$0,2126327 \cdot 10^{-2}$	$0,2131731 \cdot 10^{-2}$	$0,2249 \cdot 10^{-4}$	$0,5404 \cdot 10^{-5}$	4,162
16,0	$0,2550690 \cdot 10^{-3}$	$0,2577525 \cdot 10^{-3}$	$0,2583876 \cdot 10^{-3}$	$0,2684 \cdot 10^{-5}$	$0,6351 \cdot 10^{-6}$	4,225
19,2	$0,3073205 \cdot 10^{-4}$	$0,3117834 \cdot 10^{-4}$	$0,3128140 \cdot 10^{-4}$	$0,4463 \cdot 10^{-6}$	$0,1031 \cdot 10^{-6}$	4,331

Таблица 2

$\lambda$	$h = 0,4$	$h = 0,2$	$h = 0,1$	$\zeta_1$	$\zeta_2$	$\zeta_1/\zeta_2$
R/X	0,4376838	0,4359232	0,4354988	$0,1761 \cdot 10^{-2}$	$0,4243 \cdot 10^{-3}$	4,149
0,0	$0,1636059 \cdot 10^{-1}$	$0,1784208 \cdot 10^{-1}$	$0,1845090 \cdot 10^{-1}$	$0,1481 \cdot 10^{-2}$	$0,6088 \cdot 10^{-3}$	2,433
3,2	0,5774980	0,5772658	0,5771909	$-0,2322 \cdot 10^{-3}$	$-0,7491 \cdot 10^{-4}$	3,100
6,4	0,1320313	0,1332626	0,1335627	$0,1231 \cdot 10^{-2}$	$0,3001 \cdot 10^{-3}$	4,103
9,6	$0,1721921 \cdot 10^{-1}$	$0,1740130 \cdot 10^{-1}$	$0,1744534 \cdot 10^{-1}$	$0,1821 \cdot 10^{-3}$	$0,4404 \cdot 10^{-4}$	4,136
12,8	$0,2103833 \cdot 10^{-2}$	$0,2125774 \cdot 10^{-2}$	$0,2131001 \cdot 10^{-2}$	$0,2194 \cdot 10^{-4}$	$0,5227 \cdot 10^{-5}$	4,198
16,0	$0,2550690 \cdot 10^{-3}$	$0,2576645 \cdot 10^{-3}$	$0,2582719 \cdot 10^{-3}$	$0,2595 \cdot 10^{-5}$	$0,6074 \cdot 10^{-6}$	4,273
19,2	$0,3073205 \cdot 10^{-4}$	$0,3116515 \cdot 10^{-4}$	$0,3126410 \cdot 10^{-4}$	$0,4331 \cdot 10^{-6}$	$0,9895 \cdot 10^{-7}$	4,377

точностью найти энергию связанных состояний  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода.

В настоящей работе расчеты проведены с параметрами потенциала, которые соответствуют мезомолекуле  $pp\mu$  в состоянии с орбитальным моментом  $J=0$ , с вибрационным квантовым числом  $v=0$ . В них для набора  $m$  начальных равномерных сеток с шагами  $\Delta_m$  потенциал Морзе аппроксимировался кубическим сплайном. Численное решение осуществлялось ньютоновскими итерациями<sup>/12/</sup> на последовательности сгущающихся равномерных сеток

$\omega_{m,n}$  с шагами  $h_{m,n} = \frac{\Delta_m}{2^n}$ . Использовалась разностная схема

порядка  $O(h_{m,n}^2)$ . На каждой трех последовательных сетках проводилось уточнение разностного решения экстраполяцией по Ричардсону<sup>/5/</sup>, что позволило повысить точность решения до порядка  $O(\Delta_m^8)$ . Для сравнения находились разностные решения исходной задачи на тех же сетках  $\omega_{m,n}$  и аналогично проводилось их уточнение. Для обоих вариантов расчетов сходимость решений квадратична по шагу разностной сетки, что соответствует порядку используемой разностной схемы<sup>/4/</sup>.

Анализ сходимости разностных решений для одного из наборов сеток представлен в табл. 1 и 2 для уравнений с точным потенциалом и его сплайн-аппроксимацией. Приведенные результаты получены на последовательности трех вдвое сгущающихся сеток, величины  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  - последовательные разности.

Уточненные разностные решения для уравнений с потенциалом Морзе и его сплайн-аппроксимацией, полученные на разных наборах сеток, представлены в табл. 3-7. Там же для сравнения приведены значения аналитического решения  $\{\lambda^*, \chi^*\}$  рассматриваемой задачи. Проведенное исследование подтверждает оценку /8/: при решении разностным методом уравнения с потенциалом, приближенным кубическими сплайнами, с помощью разностной схемы  $O(\Delta^s)$ ,  $s > 4$ , основной вклад в ошибку результата вносит погрешность от замены исходного потенциала его сплайн-аппроксимацией. В проведенных нами расчетах  $s=6$ . Из табл. 7 видно, что разность между уточненным разностным собственным значением уравнения с приближенным потенциалом и точным собственным значением  $\lambda^*$  равна  $0,17 \cdot 10^{-6}$ , что согласуется с оценкой /3/. Численное значение поправки  $\lambda_1$ , полученное из /3/ при подстановке известного решения  $\{\lambda^*, \chi^*\}$ , равно  $0,18 \cdot 10^{-6}$ .

При решении реальных задач необходимо для достижения требуемой точности результата оценить с помощью /3/ и /8/ величину  $\Delta$  с тем, чтобы обеспечить точность разностного решения  $O(\Delta^s)$ , где  $s > 4$ . Это может быть достигнуто в результате либо построения разностной схемы порядка  $s \geq 4$ , либо уточне-

Таблица 3

	$\Delta = 0,4$		$h = 0,4; 0,2; 0,1$
	Аналитическое решение	Разностное решение	Сплайн-разностное решение
$\lambda$	0,4353116	0,4353120	0,4353588
$R/\chi$			
0,0	$0,1880934 \cdot 10^{-1}$	$0,1881114 \cdot 10^{-1}$	$0,1867503 \cdot 10^{-1}$
3,2	0,5771668	0,5771660	0,5771644
6,4	0,1336813	0,1336810	0,1336621
9,6	$0,1746445 \cdot 10^{-1}$	$0,1746440 \cdot 10^{-1}$	$0,1745989 \cdot 10^{-1}$
12,8	$0,2133522 \cdot 10^{-2}$	$0,2133513 \cdot 10^{-2}$	$0,2132720 \cdot 10^{-2}$
16,0	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2585961 \cdot 10^{-3}$	$0,2584707 \cdot 10^{-3}$
19,2	$0,3131491 \cdot 10^{-4}$	$0,3131499 \cdot 10^{-4}$	$0,3129626 \cdot 10^{-4}$

Таблица 4

	$\Delta = 0,4$		$h = 0,2; 0,1; 0,05$
	Аналитическое решение	Разностное решение	Сплайн-разностное решение
$\lambda$	0,4353116	0,4353116	0,4353587
$R/\chi$			
0,0	$0,1880934 \cdot 10^{-1}$	$0,1880924 \cdot 10^{-1}$	$0,1867792 \cdot 10^{-1}$
3,2	0,5771668	0,5771663	0,5771644
6,4	0,1336813	0,1336813	0,1336621
9,6	$0,1746445 \cdot 10^{-1}$	$0,1746445 \cdot 10^{-1}$	$0,1745989 \cdot 10^{-1}$
12,8	$0,2133522 \cdot 10^{-2}$	$0,2133522 \cdot 10^{-2}$	$0,2132720 \cdot 10^{-2}$
16,0	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2584707 \cdot 10^{-3}$
19,2	$0,3131491 \cdot 10^{-4}$	$0,3131494 \cdot 10^{-4}$	$0,3129602 \cdot 10^{-4}$

Таблица 5

	$\Delta = 0,4$		$h = 0,1; 0,05; 0,025$
	Аналитическое решение	Разностное решение	Сплайн-разностное решение
$\lambda$	0,4353116	0,4353116	0,4353587
$R/X$			
0,0	$0,1880934 \cdot 10^{-1}$	$0,1880930 \cdot 10^{-1}$	$0,1867827 \cdot 10^{-1}$
3,2	0,5771668	0,5771663	0,5771644
6,4	0,1336813	0,1336813	0,1336621
9,6	$0,1746445 \cdot 10^{-1}$	$0,1746445 \cdot 10^{-1}$	$0,1745989 \cdot 10^{-1}$
12,8	$0,2133522 \cdot 10^{-2}$	$0,2133522 \cdot 10^{-2}$	$0,2132720 \cdot 10^{-2}$
16,0	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2585974 \cdot 10^{-3}$	$0,2584706 \cdot 10^{-3}$
19,2	$0,3131491 \cdot 10^{-4}$	$0,3131491 \cdot 10^{-4}$	$0,3129598 \cdot 10^{-4}$

Таблица 6

	$\Delta = 0,2$		$h = 0,2; 0,1; 0,05$
	Аналитическое решение	Разностное решение	Сплайн-разностное решение
$\lambda$	0,4353116	0,4353116	0,4353131
$R/X$			
0,0	$0,1880934 \cdot 10^{-1}$	$0,1880924 \cdot 10^{-1}$	$0,1879112 \cdot 10^{-1}$
4,0	0,4618111	0,4618110	0,4618109
8,0	$0,4922660 \cdot 10^{-1}$	$0,4922658 \cdot 10^{-1}$	$0,4922631 \cdot 10^{-1}$
12,0	$0,3613805 \cdot 10^{-2}$	$0,3613804 \cdot 10^{-2}$	$0,3613766 \cdot 10^{-2}$
16,0	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2585935 \cdot 10^{-3}$
20,0	$0,1847237 \cdot 10^{-4}$	$0,1847242 \cdot 10^{-4}$	$0,1847205 \cdot 10^{-4}$

Таблица 7

	$\Delta = 0,2$		$h = 0,1; 0,05; 0,025$
	Аналитическое решение	Разностное решение	Сплайн-разностное решение
$\lambda$	0,4353116	0,4353116	0,4353133
$R/X$			
0,0	$0,1880934 \cdot 10^{-1}$	$0,1880930 \cdot 10^{-1}$	$0,1879249 \cdot 10^{-1}$
4,0	0,4618111	0,4618110	0,4618108
8,0	$0,4922660 \cdot 10^{-1}$	$0,4922658 \cdot 10^{-1}$	$0,4922627 \cdot 10^{-1}$
12,0	$0,3613805 \cdot 10^{-2}$	$0,3613804 \cdot 10^{-2}$	$0,3613762 \cdot 10^{-2}$
16,0	$0,2585975 \cdot 10^{-3}$	$0,2585974 \cdot 10^{-3}$	$0,2585931 \cdot 10^{-3}$
20,0	$0,1847237 \cdot 10^{-4}$	$0,1847237 \cdot 10^{-4}$	$0,1847196 \cdot 10^{-4}$

ния разностного решения, полученного по схеме второго порядка на последовательности не менее трех сгущающихся сеток. Отметим, что шаг первой разностной сетки достаточно выбрать равным шагу сетки, используемой при сплайн-аппроксимации потенциала.

#### 4. УТОЧНЕНИЕ ЭНЕРГИИ НЕКОТОРЫХ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ $\mu$ -МЕЗОМОЛЕКУЛ

В работе<sup>/3/</sup> были найдены с точностью  $\sim 0,1$  эВ значения энергии всех 22 связанных состояний  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода. При этом основной вклад в погрешность результата давала разностная аппроксимация краевой задачи для системы 264 обыкновенных дифференциальных уравнений. В данном разделе проведено уточнение разностных решений экстраполяцией по Ричардсону с применением сплайн-аппроксимации табличных потенциалов такой системы уравнений.

Отметим особенности применения рассматриваемого подхода для уточнения разностного решения.

Матрица потенциалов  $V(R)$  для системы первых 18 уравнений известна на сетке с шагами  $h_1=0,025$  на отрезке  $h_1 \leq R \leq 20$  и  $\Delta_2=1$  на отрезке  $20 \leq R \leq 100$ , где потенциалы  $V(R)$  меняются плавно и известна их асимптотика<sup>/13/</sup>. Остальная часть матрицы

$V(R)$  известна на сетке с шагами  $\Delta_1=0,1$  на отрезке  $\Delta_1 \leq R \leq 20$  и  $\Delta_2=1$  на отрезке  $20 \leq R \leq 100$ . Полиномиальный относительно  $R^{-1}$  вид асимптотики потенциалов  $V(R)$  позволяет использовать для их аппроксимации с требуемой точностью шаг, равный единице. Экстраполяция потенциалов при  $R \rightarrow 0$  осуществлялась по известной асимптотике <sup>13/</sup>.

Использование оценок <sup>3/</sup>, <sup>8/</sup> в данном случае невозможно, так как аналитическое решение неизвестно. Поэтому вместо точного решения  $\{\lambda^*, \chi^*\}$  в оценках <sup>3/</sup>, <sup>8/</sup> использовалось уточненное решение, полученное из последовательности трех сгущающихся сеток на луче  $0 < R \leq R_{\max}$ ,  $R_{\max}=20$  и  $100$ , для сильносвязанных и слабосвязанных состояний  $\mu$ -мезомолекул соответственно.

Основная задача состояла в том, чтобы убедиться, что шаг таблицы потенциалов  $\Delta_1=0,1$ , с которым известна большая часть матрицы потенциалов в области их действия, достаточен для уточнения разностного решения до порядка  $O(\Delta_1^4)$ . Предлагаемый метод уточнения разностных решений, в отличие от <sup>14/</sup>, позволяет избежать каких-либо изменений структуры разработанного комплекса программ **SYSTEM** <sup>15/</sup> и **BAAP** <sup>16/</sup>.

В работах <sup>8,17/</sup> показано, что отличие энергии связи  $-\epsilon_{J\nu} = (2M)^{-1} \lambda$ , где  $M = M_a M_b / (M_a + M_b)$  - приведенная масса ядер  $a$  и  $b$   $\mu$ -мезомолекулы, от ее значения, полученного в приближении первых двух уравнений, является величиной порядка  $\sim 1/2M^{-2}$ . Это позволяет реально повысить точность вычисления энергии связи  $-\epsilon_{J\nu}$  до порядка  $\sim 1/2M^{-2} \Lambda^4$  при аппроксимации сплайнами части матрицы потенциалов  $V(R)$ , которая задана на сетке с шагом  $\Delta_1=0,1$  на интервале  $0 < R \leq 20$ .

Были выполнены расчеты по программе **BAAP** системы 18 уравнений на трех сетках с шагами  $h_1=0,1; 0,05; 0,025$  на интервале  $0 < R \leq 20$  и  $h_2=1; 0,5, 0,25$  на интервале  $20 \leq R \leq 100$ . Аналогичные расчеты были выполнены со сплайн-аппроксимацией потенциалов на сетке с шагами  $\Delta_1=0,1$  на интервале  $0 < R \leq 20$  и  $\Delta_2=1$  на интервале  $20 \leq R \leq 100$ . Собственные значения  $\lambda$ , полученные на трех указанных сетках, были экстраполированы по Ричардсону. Результаты вычислений для исходных потенциалов и их сплайн-аппроксимации показали квадратичную сходимость по шагу разностной сетки. Разность между уточненным собственным значением исходной разностной задачи и аналогичным собственным значением задачи с потенциалами, приближенными сплайнами, является величиной порядка  $\sim 10^{-6}$ . Принимая во внимание оценки <sup>3/</sup>, <sup>8/</sup> и то, что фактическая ошибка собственного значения от сплайн-аппроксимации потенциалов умножается на величину  $1/2M^{-1}$ , где  $M=10$  для  $\mu$ -мезомолекул, можно сделать вывод: фактическая точность вычисления энергии связи  $-\epsilon_{J\nu}$  для  $\mu$ -мезомолекул составляет  $\sim 10^{-6}$ , что согласуется с численно

Таблица 8

Собственные значения  $\lambda = -2M\epsilon_{J\nu}$  задачи <sup>11/</sup>, <sup>12/</sup> в единицах  $\theta = \hbar = m_a = 1/8/$ , характеризующие энергию  $\epsilon_{J\nu}$  состояния  $i$  ( $J\nu$ ) мезомолекул  $p\phi_\mu$ ,  $d\phi_\mu$  и  $d^2\phi_\mu$ , для которых приведенные массы и единицы равны:  $M(p\phi_\mu) = 6,25260$ ;  $M(d\phi_\mu) = 9,37580$ ;  $M(d^2\phi_\mu) = 11,0445$ ;  $\epsilon(p\phi_\mu) = \epsilon(d\phi_\mu) = 5326,28$  эВ;  $\epsilon(d^2\phi_\mu) = 5422,36$  эВ

$h_1$	$p\phi_\mu^*$	$d\phi_\mu^*$	$d^2\phi_\mu^*$	$d^2\phi_\mu^*$	$d^2\phi_\mu^*$	$d^2\phi_\mu^*$	$d^2\phi_\mu^*$
	$J=0, \nu=0$	$\delta_1/\delta_2$	$\delta_1/\delta_2$	$\delta_1/\delta_2$	$J=1, \nu=0$	$J=1, \nu=1$	$J=1, \nu=1$
0,1	0,520380	248	0,798055	272	0,947162	0,0069024	0,0028584
0,05	0,520132	66	0,797783	68	0,946883	0,0067794	0,0026762
0,025	0,520066		0,797715		-	-	0,0026309
Экстра- поляция	0,520044		0,797692		0,946723	0,0067385	0,0026158

\* Вместо диагональных потенциалов  $U_{ss}(k, R) = Mk^2 - k^2/2^{1/8}$  использованы  $U_{ss}(k, R) = Mk^2 - (1+2k)k^2/2$ , где  $M_a$  и  $M_b$  - массы ядер;  $M = M_0/m_a$ ,  $M_0 = M_a M_b / (M_a + M_b)$ ;  $\kappa = (M_b - M_a) / (M_b + M_a)$ ;  $k$  - импульс  $\mu$ -мезона при движении с положительной энергией в поле фиксированных зарядов ядер  $Z_a$  и  $Z_b$  ( $Z_a = Z_b = 1$ ).

\*\* В  $\lambda$  включен вклад непрерывного спектра задачи двух центров от  $k=0$  до  $k=0,2$ .

Таблица 9

Энергии  $\epsilon_{J\nu}$  /эВ/, поправки  $\delta\epsilon_{J\nu}$  от высших состояний задачи двух центров /18/ и поправки  $\delta\epsilon_{J\nu}^2$  возникающие при аппроксимации задачи /1/, /2/ разностной задачей с точностью  $O(h^2)$ , где  $h = 0,1$  - шаг разностной схемы

	$p, d\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$	$ddd\mu$	$d^2t\mu$
	$J=0, \nu=0$	$J=1, \nu=1$	$J=1, \nu=0$	$J=1, \nu=1$	$J=1, \nu=1$
$\epsilon_{J\nu}$	-221,691	-226,683	-232,512	-1,9420	-0,6845
$\delta\epsilon_{J\nu}$	-0,221	-0,104	-0,095	-0,0585	-0,0544
$\delta\epsilon_{J\nu}^2$	0,143	0,103	0,108	0,0466	0,0596

Таблица 10

Зависимость энергии  $\epsilon_{J\nu}$  /эВ/ слабосвязанных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $d^2t\mu$  от границы  $R_m$  при решении задачи /1/, /2/ для первых 8 уравнений, в которых использовались эффективные массы:  $M(dd\mu) = 9,46$ ,  $M(d^2t\mu) = 11,105$

	$dd\mu$		$d^2t\mu$	
$R_m/h_1$	0,1	0,05	0,025	0,1
60	-1,96070	-1,92482	-1,91589	0,634222
80	-1,96093	-1,92507	-1,91614	0,635828
100	-1,96094	-1,92508	-1,91615	0,636000
				0,588594
				0,590403
				0,590610
				0,577347
				0,579211
				0,579429



полученной оценкой. При увеличении числа уравнений найденная оценка остается справедливой, так как их вклад в энергию связи составляет величину  $\sim 0,45 / 2M / -2/17/$ .

Собственные значения  $\lambda$  некоторых состояний  $\mu$ -мезомолекул, вычисленные на различных разностных сетках, и их уточненные значения, полученные в рамках данного подхода с помощью программы ВААР для системы 284 уравнений с матрицей потенциалов, приведенной в работе<sup>/18/</sup>, представлены в табл.8.

В табл.9 даны значения  $\epsilon_{jv}$  энергии  $\mu$ -мезомолекул в эВ, вычисленные на первой сетке, и поправки к ним  $\delta\epsilon_{jv}$  от высших состояний задачи двух центров<sup>/18/</sup>, а также поправки  $\delta\epsilon_{jv}^h$ , полученные на основе уточнения разностных решений. Последние являются разностями между уточненными значениями энергии и значениями энергии, вычисленными на первой сетке. Они положительны и составляют величину порядка  $\sim 0,1$  эВ для сильносвязанных и величину порядка  $\sim 0,05$  эВ для слабосвязанных состояний  $\mu$ -мезомолекул.

Для исследования зависимости энергии  $\epsilon_{jv}$  слабосвязанных состояний  $\mu$ -мезомолекул от границы  $R_m$  при различных значениях шага  $h_1$  были выполнены расчеты для системы 8 уравнений с приведенной эффективной массой  $M$ , позволяющей учесть вклад высших состояний задачи двух центров<sup>/19/</sup>. Результаты приведены в табл.10. При  $R_m=60$  погрешность составляет  $\sim 10^{-8}$  эВ. Отметим, что если использовать результаты табл.10 для нахождения поправок  $\delta\epsilon_{jv}^h$  слабосвязанного состояния мезомолекул  $\psi_{jd}$  и  $\psi_{jd}$ , то с точностью  $\sim 10^{-8}$  эВ получаются значения  $\delta\epsilon_{11}^h$ , приведенные в табл.9.

Таким образом, в данной работе показано, что использование сплайн-аппроксимации матрицы потенциалов, заданных таблично на сетке  $R=0,1/0,1/20/1/100$ , и экстраполяции по Ричардсону разностных решений позволяет вычислить энергии состояний мезомолекул с абсолютной точностью  $< 5 \cdot 10^{-3}$  эВ.

В заключение авторы благодарят Л.И.Пономареву за неослабевающий интерес к данной проблеме и В.С.Мележика за помощь в работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
2. Sharp T.E. Atomic Data, 1971, 2, p. 119.
3. Виноцкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. "Наука", М., 1977.
5. Марчук Г.И., Шайдуров В.В. Повышение точности решений разностных схем. "Наука", М., 1979.

6. Crater H.W., Reddien G.W. J.Comput.Phys., 1975, 19, p. 236.
7. Алберг Дж. и др. Теория сплайнов и ее приложения. "Мир", М., 1972, с. 33.
8. Люстерник Л.А., Соболев В.И. Элементы функционального анализа. "Наука", М., 1965, с. 474.
9. Гареев Ф.А. и др. ЖВМ и МФ, 1977, 17, с. 407.
10. Функциональный анализ /под ред. Крайна С.Г./ "Наука", М., 1972, с. 432.
11. Беляев В.Б. и др. ЖЭТФ, 1959, 37, с. 1652.
12. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сб.: Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики. КФК1-74-34, Будапешт, 1974, с. 93.
13. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. J.Phys.B., Atom. Molec.Phys., 1976, 9, p. 2255.
14. Сомов Л.Н. ОИЯИ, P11-82-6, Дубна, 1982.
15. Виноцкий С.И. и др. ОИЯИ, P5-12787, Дубна, 1979.
16. Мележик В.С. и др. ОИЯИ, P5-12790, Дубна, 1979.
17. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1977, 72, с. 160.
18. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1982, 82, с. 670.
19. Пономарев Л.И., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ЯФ, 1979, 29, с. 133.

Рукопись поступила в издательский отдел  
8 июня 1982 года.

## НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
D17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
D6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
D3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
D13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
D1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
D1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Виницкий С.И., Пузынина Т.П., Пузынин И.В. P11-82-428  
Аппроксимация сплайнами табличных потенциалов уравнения Шредингера для уточнения разностных решений

Для уточнения разностных решений системы уравнений Шредингера с потенциалами, заданными в виде таблиц, используется экстраполяция разностных решений на последовательности сгущающихся сеток с продолжением потенциалов на эти сетки с помощью кубических сплайнов. Показано, что разностное решение можно получить с точностью  $O(\Delta^4)$ , где  $\Delta$  - шаг таблицы потенциалов. Теоретическая оценка подтверждена расчетами для уравнения Шредингера с потенциалом Морзе. Проведено уточнение энергии некоторых состояний  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода с точностью  $\sim 5 \cdot 10^{-8}$  эВ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Vinitsky S.I., Puzynina T.P., Puzynin I.V. P11-82-428  
Improving Difference Solutions by Cubic-Spline-Approximation of Table Potentials of the Schrödinger Equation

A higher accuracy of difference solutions to system of the Schrödinger equations with potentials given by tables is achieved by their extrapolation to a sequence of difference nodes. To this end the potentials are extended onto these nodes by cubic splines. The difference solution is shown to be of an order of  $O(\Delta^4)$ , where  $\Delta$  is a step of the potential table. The theoretical estimate has been verified by numerical solution to the Schrödinger equation with the Morse potential. The improvement achieved in the energy value for some states of  $\mu$ -mesic molecules of hydrogen isotopes is of an order of  $\sim 5 \cdot 10^{-8}$  eV.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.