

сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

1380/83

21/3-83

P11-82-842

В.С.Мележик, И.В.Пузынин,  
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ  
ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ,  
ВОЗНИКАЮЩЕЙ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ УРОВНЕЙ  
ЭНЕРГИИ  $\mu$ -МЕЗОМОЛЕКУЛ  
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ  
ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

1982

## I. Введение

Классическая задача квантовой механики о системе трех тел с кулоновским взаимодействием имеет ряд важных физических приложений. Одним из них является применение этой системы как модели для описания характеристик состояний  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода <sup>1,2/</sup>.

Значения полной энергии  $E_{J\nu}$  и волновые функции  $\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R})$  различных  $|n\tau\rangle$  состояний  $\mu$ -мезомолекул находятся из уравнения Шредингера в шестимерном пространстве  $(\vec{r}, \vec{R})$  <sup>3-5/</sup>

$$(\hat{H} - E_{n\tau}) \Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) = 0. \quad (\text{I.1})$$

Здесь  $\vec{R}$  - вектор, соединяющий ядра мезомолекулы  $a$  и  $b$  с массами  $M_a$  и  $M_b$  ( $M_a \geq M_b$ );  $\vec{r}$  - вектор, соединяющий середину отрезка  $R$  и  $\mu^-$ -мезон с массой  $m_\mu$ . Введены величины  $r_a$  и  $r_b$  - расстояния от ядер  $a$  и  $b$  до  $\mu^-$ -мезона. Квантовые числа  $n$  и  $\tau$  характеризуют движение  $\mu^-$ -мезона ( $n$ ) в мезомолекуле и относительное движение ядер ( $\tau$ ). Будем рассматривать уровни энергии мезомолекул, соответствующие основному состоянию по мезонному движению  $n=0$ . Таким образом для состояний с  $n=0$  и заданной четностью волновая функция зависит лишь от квантовых чисел  $\tau = (J, \nu)$ ,  $J$  и  $\nu$  - вращательное и колебательное квантовые числа соответственно. В единицах  $e = \hbar = 1$  оператор  $\hat{H}$  имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T}_a + \hat{h}_a + 1/R, \quad (\text{I.2})$$

$$\hat{T}_a = -\frac{1}{2M} \left[ (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}})^2 + \left( \frac{1+\alpha}{2} \right)^2 \Delta_{\vec{r}} \right],$$

$$\hat{h}_a = -\frac{1}{2m_a} \Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b},$$

$$M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}, \quad m_a^{-1} = m_\mu^{-1} + M_a^{-1}, \quad \alpha = \frac{M_b - M_a}{M_b + M_a}.$$

В настоящее время развиты два подхода к численному решению уравнения (I.1): вариационный /4-5/ и адиабатический /3/. С помощью вариационных расчетов получены значения энергии связи основных и некоторых возбужденных состояний  $\mu$ -мезомолекул. Отметим, что при определении уровней энергии возбужденных состояний такие расчеты весьма сложны и не всегда эффективны, поскольку успех в них во многом зависит от удачного выбора пробных функций.

Интерес к расчетам с высокой точностью уровней энергии и волновых функций слабосвязанных возбужденных состояний  $\mu$ -мезомолекул вызван экспериментами по измерению скорости их образования /6/. Теоретическое предсказание резонансной зависимости скорости образования мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$  от температуры /6/, которое согласуется с проведенными экспериментами /7-8/, основано на предположении о существовании уровней энергии слабосвязанных возбужденных состояний мезомолекул. С помощью вариационных расчетов их пока не удалось обнаружить. Вместе с тем, разработанные в рамках адиабатического подхода вычислительные схемы позволили вычислить уровни энергии всех связанных состояний  $\mu$ -мезомолекул. В том числе были обнаружены слабосвязанные возбужденные состояния мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ . Имеется хорошее согласие /9/ полученных результатов с вариационными расчетами в тех случаях, когда последние выполнены.

Прогресс в создании численных схем решения уравнения (I.1) в рамках адиабатического метода обусловлен разработкой эффективных алгоритмов численного решения квантово-механической задачи двух кулоновских центров /10,11/. Адиабатическое представление задачи трех тел с кулоновским взаимодействием основано на разложении волновой функции  $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$  уравнения (I.1) по набору волновых функций задачи двух центров /3,9/

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_j \phi_j(\vec{r}; R) \psi_j(\vec{R}) + \sum_s \int \phi_s(\vec{r}, k; R) \psi_s(k; R) dk \quad (I.3)$$

Подстановка этого разложения в уравнение (I.1) и последующие усреднения по координатам вектора  $\vec{r}$  и угловым переменным вектора  $\vec{R}$  приводят к бесконечной системе интегро-дифференциальных уравнений ( $m_a=1$ ) /9/:

$$\hat{I} \left[ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2ME_{J\nu} \right] \chi_i(R) - \sum_{j=1}^{\infty} \hat{U}_{ij}(R) \chi_j(R) - \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \hat{U}_{is}(k, R) \chi_s(k, R) dk = 0 \quad (I.4)$$

$$\hat{I} \left[ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2ME_{J\nu} \right] \chi_s(k, R) - \sum_{j=1}^{\infty} \hat{U}_{sj}(k, R) \chi_j(R) - \sum_{s'=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \hat{U}_{ss'}(k, k', R) \chi_{s'}(k', R) dk' = 1$$

с граничными условиями

$$\chi_i(0) = \lim_{R \rightarrow \infty} \chi_i(R) = 0, \quad (I.5)$$

$$\chi_s(k, 0) = \lim_{R \rightarrow \infty} \chi_s(k, R) = 0$$

для радиальных волновых функций, соответствующих значениям  $E_{J\nu}$  уровней энергии связи. Здесь  $m$  - магнитное квантовое число.

Система уравнений (I.4) представлена в "двухкомпонентной форме"

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_i(R) = \begin{pmatrix} \chi_{ia}(R) \\ \chi_{ib}(R) \end{pmatrix}, \quad \chi_s(k, R) = \begin{pmatrix} \chi_{sa}(k, R) \\ \chi_{sb}(k, R) \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты уравнений (I.4) рассматриваемой системы представляют матрицы размерности  $2 \times 2$ , например,

$$\hat{U}_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{iaja}(R), & U_{iajb}(R) \\ U_{ibja}(R), & U_{ibjb}(R) \end{pmatrix},$$

элементы которых выражаются через матричные элементы /12/ и термины /11/ задачи двух кулоновских центров. Их асимптотические свойства при  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$  исследованы в работах /13/ (при  $R \rightarrow \infty$   $U_{iaia}(R) \rightarrow 0$ ). Здесь рассмотрен общий случай  $M_a \neq M_b$ . Для одинаковых ядер можно перейти к однокомпонентной записи, поскольку при этом  $U_{iaja}(R) = U_{ibjb}(R)$ ,  $U_{iajb}(R) = U_{ibja}(R) = 0$  /3/.

Задачу (I.4)-(I.5) символически запишем в виде

$$[\mathcal{D}^\infty + S^\infty] \vec{\chi} = \lambda \vec{\chi}, \quad (I.6)$$

где  $\mathcal{D}^\infty$  - дифференциальный оператор, определенный на полуоси  $0 \leq R < \infty$ , а  $S^\infty$  - интегральный оператор на полуоси  $0 \leq k < \infty$ ,  $\lambda = -2ME_{J\nu}$ .

При разработке алгоритмов и программ численного решения системы (I.4) необходимо учитывать ряд особенностей, вытекающих из существа самой исследуемой задачи и специфики используемого адиабатического представления. Эти особенности состоят в следующем:

а) Эффективные потенциалы системы уравнений (I.4) имеют далекодействующий характер, т.е. медленно выходят на асимптотику при  $R \rightarrow \infty$

б) Численный анализ сходимости разложения (I.3) приводит к решению последовательностей конечных систем уравнений (I.4), число которых в системе может быть велико.

в) Эффективные потенциалы системы уравнений (I.4) заданы в виде таблиц на большом числе узловых точек.

г) Уровни энергии слабосвязанных возбужденных состояний мезомолекул являются величиной порядка  $10^{-3}$  от глубины эффективных потенциалов.

В этой работе дано описание двух вычислительных схем, включающих решение частичной спектральной задачи для системы (I.4), содержащей конечное число уравнений и анализ сходимости разложения (I.3). Схемы отличаются выбором эффективных потенциалов системы (I.4), и на примере вычисления уровней энергии мезомолекул  $pdm$  и  $ddm$  демонстрируются особенности их реализации и применения.

Рассматриваемый пример отражает отмеченные выше особенности мезомолекулярных расчетов. Сюда входит вычисление характеристик как основных, так и возбужденных состояний. Для вычисления значений уровней энергии основных состояний этих мезомолекул ранее были проведены вариационные расчеты <sup>5</sup>. В спектре мезомолекулы  $ddm$  имеется

слабосвязанный уровень ( $J=V=1$ ) с энергией связи  $\sim 2$  эВ (глубина эффективной потенциальной ямы  $\sim 600$  эВ)<sup>9</sup>.

## 2. Аппроксимация сингулярной спектральной задачи (I.4)-(I.5)

Численный анализ сходимости разложения (I.3) сводится к решению системы (I.4) с граничными условиями (I.5), в которой индексы  $i$  и  $s$  принимают значения  $1, 2, \dots, N_i$  и  $1, 2, \dots, N_s$  соответственно, при различных  $\{N_i, N_s\}$ , и сравнению полученных результатов. Таким образом для каждой заданной пары  $\{N_i, N_s\}$  необходимо решить сингулярную задачу Штурма-Лиувилля для системы интегро-дифференциальных уравнений при  $0 \leq R < \infty$ ,  $0 \leq k < \infty$ . Приближенное решение будем искать в прямоугольнике  $0 \leq R \leq R_m$ ,  $k_j \leq k \leq k_m$ . Полудискретное представление задачи (I.4)-(I.5) на выбранной сетке узлов по  $k \in \{k_\alpha\}$  получим, аппроксимировав интегралы по  $k$  в системе уравнений (I.4) квадратурными формулами:  $\int_{k_0}^{k_m} f(k) dk \approx \sum_{\alpha} f(k_\alpha) P(k_\alpha) \Delta k_\alpha$ . В результате перейдем к системе дифференциальных уравнений:

$$\hat{I} \left[ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2M \epsilon_{J^2} \right] \chi_i(R) - \sum_{j=1}^{N_i} \hat{U}_{ij}(R) \chi_j(R) - \sum_{s=1}^{N_s} \sum_{\alpha=1}^{N_k} \hat{U}_{is}(k_\alpha, R) P(k_\alpha) \Delta k_\alpha \chi_s(k_\alpha, R) = 0 \quad (2.1)$$

$$\hat{I} \left[ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2M \epsilon_{J^2} \right] \chi_s(k, R) - \sum_{j=1}^{N_i} \hat{U}_{sj}(k_\alpha, R) \chi_j(R) - \sum_{s'=1}^{N_s} \sum_{\alpha'=1}^{N_k} \hat{U}_{ss'}(k_\alpha, k'_\alpha, R) P(k_\alpha) P(k'_\alpha) \Delta k_\alpha \Delta k'_\alpha \chi_{s'}(k'_\alpha, R) = 0.$$

Здесь  $\Delta k_\alpha$  - шаг сетки по  $k$ , а  $P(k_\alpha)$  - вес квадратурной формулы. (В вычислениях используется формула Симпсона порядка точности  $O(\Delta k_\alpha^4)$ ).

Перейдем к матричным обозначениям, для краткости индексы ( $J^2$ ) в дальнейшем опускаем:

$$\left[ \hat{I} \left( \frac{d^2}{dR^2} + 2M \epsilon \right) - \hat{U}(R) \right] \vec{\chi}(R) = 0, \quad (2.2)$$

где  $\hat{U}(R) = \begin{pmatrix} \hat{U}^{dd}(R), \hat{U}^{dc}(R) \\ \hat{U}^{cd}(R), \hat{U}^{cc}(R) \end{pmatrix}$ ,  $\vec{\chi}(R) = \begin{pmatrix} \vec{\chi}^d(R) \\ \vec{\chi}^c(R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_i(R) \\ \chi_s(R) \end{pmatrix}$ ,  $N = N_i + N_s$

Здесь  $\hat{U}^{dd}(R)$  - матрица потенциалов

$$\hat{U}^{dd}(R) = \left[ \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} + \frac{2M}{R} \right] \delta_{ij} \hat{I} + \hat{U}_{ij}(R),$$

связывающих состояния дискретного спектра задачи двух центров;  $\hat{U}^{dc}(R)$  и  $\hat{U}^{cd}(R)$  - матрицы потенциалов, связывающих состояния дискретного и непрерывного спектров задачи двух центров:

$$\hat{U}^{dc}(R) = \hat{U}_{is}(k_\alpha, R) P(k_\alpha) \Delta k_\alpha; \quad \hat{U}^{cd}(R) = \hat{U}_{sj}(k_\alpha, R).$$

Матрица  $\hat{U}^{cc}(R)$  связывает состояния непрерывного спектра задачи двух центров

$$\hat{U}^{cc}(R) = \left[ \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} + \frac{2M}{R} \right] \delta_{ss'} \delta_{\alpha\alpha'} \hat{I} + \hat{U}_{ss'}(k_\alpha, k'_\alpha, R) P(k_\alpha) P(k'_\alpha) \Delta k_\alpha \Delta k'_\alpha.$$

Граничные условия (I.5) заменяются на

$$\vec{\chi}(0) = 0 \\ \left[ \hat{I} \frac{d}{dR} - F(\epsilon, R) \right] \vec{\chi}(R) \Big|_{R=R_m} = 0, \quad R_m \gg 1, \quad (2.3)$$

которые аппроксимируют условия ограниченности вектор-функции  $\vec{X}(R)$  при  $0 \leq R < \infty$  и позволяют учесть асимптотику волновых функций при  $R \rightarrow \infty$ .

Такая замена также вносит ошибку в решение исходной задачи, и она может быть оценена путем сравнения решений при различных значениях  $R_m$ .

### 3. Постановка задачи

После выполненных аппроксимаций задачи (I.4)-(I.5) необходимо найти решение  $\{\varepsilon^*, \vec{X}^*\}$  регулярной задачи Штурма-Лиувилля для системы  $2 \cdot N = 2 \cdot (N_i + N_k + N_s)$  дифференциальных уравнений второго порядка (2.2) с граничными условиями (2.3) на отрезке  $[0, R_m]$ . Отметим, что ошибка решения  $\{\varepsilon^*, \vec{X}^*\}$  приближенной задачи (2.2)-(2.3) зависит от числа уравнений  $- 2N$ , верхнего предела интегрирования  $- k_m$ , шага сетки по  $k - \Delta k$  и границы рассматриваемого отрезка  $- R_m$ .

Рассмотрим две вычислительные схемы для матриц коэффициентов системы (2.2) специального вида (см. рис. на стр. 17). В первом случае матрица потенциалов  $\hat{U}^{dd}(R)$  заполнена полностью,  $\hat{U}^{dc}(R)$  и  $\hat{U}^{cd}(R)$  содержат лишь одну строку, а  $\hat{U}^{cc}(R)$  - только диагональ. Во втором - матрица  $\hat{U}(R)$  содержит первую строку, первый столбец и диагональ, а остальные элементы нулевые. Еще раз напомним, что каждый элемент  $\hat{U}(R)$  - матрица  $2 \times 2$ , а ее размерность  $2N \times 2N$ .

### 4. Итерационный метод решения

Задачу (2.2)-(2.3) будем рассматривать как нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(z) = 0, \quad \varphi = (\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \varphi^{(3)}, \varphi^{(4)})$$

относительно пары  $z = \{\lambda, \vec{X}\} \in R \times \{C^2[0, R_m]\}^{2N}$  ( $\lambda = -2M\varepsilon$ ),

где компоненты  $\varphi^{(j)}$ ,  $j=1-4$  определены следующим образом:

$$\varphi^{(1)}(\lambda, \vec{X}) \equiv [\hat{I} \frac{d}{dR} - (\lambda \hat{I} + \hat{U}(R))] \vec{X}(R) = 0, \quad (4.1a)$$

$$\varphi^{(2)}(\lambda, \vec{X}) \equiv \vec{X}(0) = 0, \quad (4.1b)$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda, \vec{X}) \equiv [\hat{I} \frac{d}{dR} + \hat{F}(\lambda, R)] \vec{X}(R) \Big|_{R=R_m} = 0, \quad (4.1c)$$

четвертая компонента - условие нормировки волновых функций  $\vec{X}(R)$ :

$$\varphi^{(4)}(\lambda, \vec{X}) \equiv (\vec{X}, \vec{X}) - 1 = 0. \quad (4.1d)$$

Здесь

$$(\vec{X}, \vec{X}) = \sum_{i=1}^N \int_0^{R_m} [x_{ia}^2(R) + x_{ib}^2(R)] dR.$$

Предполагаем, что простое изолированное решение уравнения (4.1)  $z = (\lambda^*, \vec{X}^*)$  существует, и известно начальное приближение  $z_0 = (\lambda_0, \vec{X}_0)$  к этому решению.

Для решения функционального уравнения  $\varphi(z) = 0$  применим непрерывный аналог метода Ньютона [14-16]. Введем непрерывный параметр  $0 \leq t < \infty$ , таким образом, что справедливы соотношения:

$$\varphi'(z(t)) z'(t) = -\varphi(z(t)), \quad z(0) = z_0. \quad (4.2)$$

Здесь  $\varphi'$  - производная Фреше оператора  $\varphi$ , а  $z'(t) = (\lambda'(t), \vec{X}'(t)) = (\mu(t), \vec{v}(t))$ . Этот подход относится к классу методов инвариантного погружения [16]. В работе [15] показано, что при выполнении условия гладкости оператора  $\varphi$  в окрестности искомого изолированного решения  $z^*$  выполняется предельное соотношение

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z^* - z(t)\| = 0. \quad (4.3)$$

Эволюционное уравнение (4.2) решается методом Эйлера. Полуось  $0 \leq t < \infty$  разбивается узловыми точками  $t_k$  ( $k = 0, 1, \dots$ ) с переменным шагом

$$t_k = t_k + \tau_k.$$

Процесс решения уравнения (4.2) можно рассматривать и как итерационный процесс. На каждом шаге с номером  $k$  ( $t = t_k$ ) решается линейная задача

$$\varphi'(z_k) \Delta z_k = -\varphi(z_k) \quad (4.4)$$

относительно итерационной поправки  $\Delta z_k = (\lambda'(t_k), \vec{X}'(t_k)) = (\mu_k, \vec{v}_k)$  при известном приближении  $z_k$  к искомому решению. Далее находится новое приближение  $z_{k+1} = (\lambda_{k+1}, \vec{X}_{k+1})$

$$z_{k+1} = z_k + \tau_k \cdot \Delta z_k = (\lambda_k + \tau_k \mu_k, \vec{X}_k + \tau_k \vec{v}_k). \quad (4.5)$$

если шаг  $\tau_k$  задан. При  $\tau_k = 1$  имеем метод Ньютона.

В близкой окрестности искомого решения это обеспечивает минимум невязки [17]

$$\delta_k = \|\varphi(z_k)\|.$$

Выбор  $\tau_k$  можно реализовать таким образом, чтобы это свойство было выполнено на каждом шаге /15/. В операторе  $\mathcal{P}$  для уравнения (4.1) можно выделить две главных компоненты и представить его в виде

$$\mathcal{P}(\lambda, \vec{x}) = \begin{pmatrix} (\mathcal{D} - \lambda \hat{I}) \vec{x} \\ (\vec{x}, \vec{x}) - 1 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

где  $\mathcal{D}$  - дифференциальный оператор (4.1а), включающий и граничные условия (4.1б), (4.1с). Уравнение (4.4) относительно итерационных поправок  $(\mu_k, \vec{V}_k)$  представляет систему уравнений:

$$\begin{aligned} (\mathcal{D} - \lambda_k \hat{I}) \vec{V}_k - \mu_k \vec{x}_k &= -(\mathcal{D} - \lambda_k \hat{I}) \vec{x}_k, \\ 2(\vec{x}_k, \vec{V}_k) &= 1 - (\vec{x}_k, \vec{x}_k). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Известно /18/, что обратный оператор  $[\mathcal{P}'(z_k)]^{-1}$  для этой системы существует и ограничен в окрестности решения  $z_k^*$ . Чтобы упростить нахождение решения системы (4.7), представим  $\vec{V}_k$  в виде

$$\vec{V}_k = -\vec{x}_k + \mu_k \vec{v}_k, \quad (4.8)$$

где  $\vec{v}_k$  - решение краевой задачи:

$$(\mathcal{D} - \lambda_k \hat{I}) \vec{v}_k = -\vec{x}_k. \quad (4.9a)$$

Решив эту задачу и подставляя выражение для  $\vec{V}_k$  (4.8) с неизвестным  $\mu_k$  во второе уравнение системы (4.7), получим

$$\mu_k = \frac{1 + (\vec{x}_k, \vec{x}_k)}{2(\vec{x}_k, \vec{v}_k)}. \quad (4.9b)$$

Формулы (4.9), (4.5) соответствуют при  $\tau_k = 1$  методу обратных итераций /19/. При  $\lambda_k \rightarrow \lambda^*$ , где  $\lambda^*$  - точка спектра оператора  $\mathcal{D}$ , возникает проблема решения плохо обусловленной задачи (4.9а). Чтобы не строить специальных алгоритмов для ее решения, рассмотрим хорошо известную модификацию ньютоновского процесса (4.4)

$$\mathcal{P}'(z_0) \Delta z_k = -\mathcal{P}(z_k) \quad (4.10)$$

$k = 0, 1, \dots$ ,  $z_0$  - заданный элемент. В этом случае вместо формул (4.8)-(4.9) получаем:

$$(\mathcal{D} - \lambda_0 \hat{I}) \vec{v}_0 = -\vec{x}_0, \quad (4.11a)$$

$$(\mathcal{D} - \lambda_0 \hat{I}) \vec{w}_k = -(\mathcal{D} - \lambda_k \hat{I}) \vec{x}_k, \quad (4.11b)$$

$$\mu_k = \frac{1 - (\vec{x}_k, \vec{x}_k) - 2(\vec{x}_0, \vec{w}_k)}{2(\vec{x}_0, \vec{v}_0)} \quad (4.11c)$$

$$\vec{V}_k = \vec{w}_k + \mu_k \vec{v}_0. \quad (4.11d)$$

Здесь вместо плохо обусловленной при  $\lambda_k \rightarrow \lambda^*$  задачи (4.9а) требуется решать две краевые задачи (4.11а) и (4.11б) с неособенным оператором  $(\mathcal{D} - \lambda_0 \hat{I})^{-1}$ . Причем (4.11а) решается один раз на первом шаге итерационного процесса (4.11) при  $\lambda_0 \neq \lambda^*$ .

Важной особенностью данной модификации является то, что оператор  $(\mathcal{D} - \lambda_0 \hat{I})^{-1}$  достаточно определить всего один раз. А это позволяет значительно сократить счетное время благодаря сокращению общего числа вычислений, что особенно существенно в случае большого числа уравнений в системе (4.1а). Некоторое замедление итераций по сравнению с обычным ньютоновским процессом (4.8)-(4.9) можно компенсировать выбором начального приближения.

### 5. Решение краевой задачи для итерационной поправки

Наиболее сложной частью при численной реализации итерационного процесса (4.11) является решение краевых задач (4.11а, б). Рассмотрим задачу (4.11а). Представим ее в виде, аналогичном (2.2):

$$(\mathcal{D} - \lambda \hat{I}) \vec{v} = -\vec{x}, \quad (5.1)$$

где

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}^{dd}(R), \mathcal{D}^{dc}(R) \\ \mathcal{D}^{cd}(R), \mathcal{D}^{cc}(R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} - \hat{U}^{dd}(R), -\hat{U}^{dc}(R) \\ -\hat{U}^{cd}(R), \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} - \hat{U}^{cc}(R) \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

при  $0 < R < R_m$ , а в точках  $R = 0$  и  $R = R_m$  оператор  $\mathcal{D}$  определен формулами (2.3). Здесь и ниже индекс  $k$  опущен.

При решении системы большого числа дифференциальных уравнений \*) важно использовать особенности задачи: разреженность матрицы коэффициентов системы (5.1) (см. рис. ), а также то обстоятельство, что искомое решение  $\vec{v}$  является итерационной поправкой, которую достаточно определить с относительно невысокой точностью. Для сходимости ньютоновского процесса (4.10) требуется относительная точность при вычислении  $\vec{v} \sim 10^{-1} / 20$ .

Рассмотрим две вычислительные схемы решения уравнений для итерационных поправок.

\*) Ниже показано, что для достижения требуемой точности необходимо решать систему  $\sim 300$  уравнений.

Схема (А). Матрица  $\mathcal{D}^{dd}$  полностью заполнена. Воспользуемся разбиением (5.2) для оператора  $\mathcal{D}$  и перепишем уравнение (5.1) в виде:

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}^{dd} - \lambda \hat{I}) \vec{v}^d &= -\vec{X}^d - \mathcal{D}^{dc} \vec{v}^c, \\ (\mathcal{D}^{cc} - \lambda \hat{I}) \vec{v}^c &= -\vec{X}^c - \mathcal{D}^{cd} \vec{v}^d, \end{aligned} \quad (5.3)$$

где

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} \vec{X}^d \\ \vec{X}^c \end{pmatrix}, \quad \vec{v} = \begin{pmatrix} \vec{v}^d \\ \vec{v}^c \end{pmatrix}.$$

Для решения (5.3) используем метод последовательных приближений. На первом шаге ( $\ell = 1$ ) полагаем  $\vec{v}^c = 0$  и решаем краевую задачу:

$$(\mathcal{D}^{dd} - \lambda \hat{I}) \vec{v}^d = -\vec{X}^d. \quad (5.4)$$

Найденное решение  $\vec{v}^d$  подставляем в правую часть второго матричного уравнения системы (5.3) и решаем краевую задачу

$$(\mathcal{D}^{cc} - \lambda \hat{I}) \vec{v}^c = -\vec{X}^c - \mathcal{D}^{cd} \vec{v}^d. \quad (5.5)$$

После того, как решение  $\vec{v}^c$  найдено, снова повторяем решение задач (5.4) и (5.5) с тем отличием, что в правой части первого матричного уравнения (5.3) стоит не  $\vec{v}^c_{\ell=0} = 0$ , а  $\vec{v}^c_{\ell=1}$ , найденное при решении (5.5).

Таким образом получен итерационный процесс (по  $\ell$ ) для нахождения решения задачи (5.1), который описывается уравнениями

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}^{dd} - \lambda \hat{I}) \vec{v}_\ell^d &= -\vec{X}^d - \mathcal{D}^{dc} \vec{v}_{\ell-1}^c, \quad \vec{v}_0^c = 0 \\ (\mathcal{D}^{cc} - \lambda \hat{I}) \vec{v}_\ell^c &= -\vec{X}^c - \mathcal{D}^{cd} \vec{v}_\ell^d. \end{aligned} \quad (5.7a)$$

Сходимость итерационного процесса (5.7a) исследована численно.

Задача (4.IIa) решается один раз при  $k = 0$ .

Аналогичный "внутренний" итерационный процесс строится на каждом шаге "внешнего" ньютоновского процесса (4.II) и для решения краевой задачи (4.IIb).

Численное решение задачи (5.4) осуществляется с помощью метода конечных разностей. Использовались трехточечная разностная схема  $\sim O(h^2)$  ( $h$  - шаг разностной сетки) и алгоритм матричной прогонки /21/. Численное решение системы (5.5) легко реализуется, поскольку она состоит из  $N_k \cdot N_s$  независимых матричных уравнений (см. рис. ):

$$\left[ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} - (\lambda \hat{I} + \hat{U}_{ii}^{cc}(R)) \right] v_i^c(R) = -X_i^c(R) + \sum_{j=N_i+1}^{N_s} \hat{U}_{ij}^{cd}(R) v_j^d(R). \quad (5.6)$$

Каждая такая система двух уравнений также решается разностным методом с помощью алгоритма прогонки.

Схема (В). В матрице  $\mathcal{D}$  заполнены диагональ, первая строка и первый столбец.

Численные исследования показали, что при замене матрицы эффективных потенциалов (2.2) матрицей специального вида (см. рис. )

$$\hat{U}(R) = \begin{pmatrix} \hat{U}_{11}(R), \hat{U}_{12}(R), \hat{U}_{13}(R), \dots, \hat{U}_{1N}(R) \\ \hat{U}_{21}(R), \hat{U}_{22}(R), 0, \dots, 0 \\ \hat{U}_{31}(R), 0, \hat{U}_{33}(R), \dots, 0 \\ \vdots \\ \hat{U}_{N1}(R), 0, 0, \dots, \hat{U}_{NN}(R) \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

собственные значения полученной задачи незначительно отличаются от собственных значений задачи (2.2) /9/. Это позволяет модифицировать описанную вычислительную схему для специальных матриц (5.8), рассматривая полученную задачу как одно из возможных адиабатических представлений исходной проблемы. Данная модификация приводит к построению итерационной процедуры для решения краевых задач относительно итерационных поправок

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}_{11} - \lambda \hat{I}) v_{i\ell} &= -X_1 - \sum_{i=2}^N \mathcal{D}_{1i} v_{i\ell-1}; \quad v_{i0} = 0; \quad i=2,3,\dots,N \\ (\mathcal{D}_{ii} - \lambda \hat{I}) v_{i\ell} &= -X_i - \mathcal{D}_{i1} v_{i\ell}, \quad i=2,3,\dots,N. \end{aligned} \quad (5.7b)$$

Численная реализация итерационного процесса (5.7b) аналогична (5.7a).

Поправка  $\mu_k$  определяется численно, путем замены интегралов в формуле (4.IIc) соответствующими квадратурными формулами Симпсона, использующими узлы разностной сетки.

## 6. Некоторые детали вычислительной процедуры

Рассмотренные вычислительные схемы реализованы в виде программы на языке Фортран для ЭВМ CDC-6500. Они применялись для расчетов уровней энергии мезомолекул и их волновых функций /9/. Использовались граничные условия  $\vec{X}(0) = \vec{X}(R_m) = 0$ . Численные исследования продемонстрировали достаточно быструю сходимость "внутренних" итерационных процессов (5.7). Относительная точность вычисления итерационных поправок  $\vec{v}_0, \vec{w}_k \sim 10^{-2}$  достигается за две-три итерации по  $\ell$  в вычислительной схеме (А). Сходимость итераций (5.7b) несколько замедлена ( $\ell_{max} \sim 3-4$ ). Однако вычислительная схема (В) существенно проце

в реализации и позволяет сократить время вычислений по сравнению со схемой (А) в пять раз. Сходимость ньютоновского процесса (4.II) контролировалась по уменьшению величины невязки

$$\delta_k = \max_i |(\mathcal{D}_h - \lambda_k \hat{I}) \vec{x}_{h,k}(R_i)|, \quad (6.1)$$

где  $\mathcal{D}_h$  - конечно-разностный аналог дифференциального оператора  $\mathcal{D}$  (5.2),  $i$  - номер узла разностной сетки по  $R$ .

При построении алгоритма учтено, что краевые задачи (5.7) решаются методом прогонки. Для его реализации последовательно используется информация в трех соседних узловых точках по  $R$ :  $R_i - h$ ,  $R_i$ ,  $R_i + h$  [21]. Это дает возможность организовать программу таким образом, что в процессе вычислений в оперативной памяти машины находятся потенциалы  $\hat{U}(R_i)$  и прогоночные коэффициенты лишь трех соседних точек разностной сетки по  $R$ , а остальные хранятся на магнитной ленте. Такая организация программы позволила увеличить число узловых точек, не увеличивая объема оперативной памяти ЭВМ занимаемой программой.

В таблице I приведены некоторые величины, характеризующие сходимость вычислительной схемы (4.II). Ньютоновский процесс сходится за 3-5 итераций. Время, затрачиваемое на одну итерацию, по схеме (В) ~ 2 мин., при этом число решаемых уравнений ~ 300, а число узловых точек по  $R$  ~ 300. В качестве начального приближения  $\{\lambda_0, \vec{x}_0\}$  использовалось "двухуровневое приближение" адиабатического подхода (два уравнения в системе (2.2)), нахождение которого описано в работе [22]. Шаг  $\tau_k$  при нахождении начального приближения выбирается из условия минимума невязки (6.1), что позволяет расширить область сходимости метода. По мере улучшения приближений к решению с ростом  $N$  целесообразно  $\tau_k$  задать равным 1, то есть реализовать метод Ньютона.

Кратко остановимся на анализе погрешностей, возникающих при численном решении (1.6), считая структуру матрицы коэффициентов системы уравнений (1.4) заданной. В эту ошибку, кроме погрешностей аппроксимации (см. п.2), входит также погрешность численного решения задачи (2.2)-(2.3).

Если разностные сетки, на которых аппроксимируются уравнения (4.IIa-c), не меняются в процессе итераций, то итерационный процесс (4.II), (4.5) в близкой окрестности искомого решения при  $\tau_k = 1$  можно рассматривать как модифицированный метод Ньютона для решения нелинейной системы алгебраических уравнений

$$\varphi_h(z_h) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_h \vec{x}_h - \lambda_h \vec{x}_h \\ (\vec{x}_h, \vec{x}_h) - 1 \end{pmatrix} = 0, \quad z_h = \{\lambda_h, \vec{x}_h\}, \quad (6.2)$$

аппроксимирующей задачу (2.2)-(2.3) с точностью порядка  $O(h^2)$ . Существование решения системы (6.2) для самосопряженного оператора  $\mathcal{D}_h$  с граничным условием (4.Ic), не зависящим от  $\lambda$ , следует из [23]. О точности решения задачи (6.2) модифицированным методом Ньютона можно судить по величине, достигнутой в процессе итераций невязки  $\delta_K$  (6.1), где  $K$  - число итераций, а  $(\vec{x}_{h,K}, \vec{x}_{h,K}) = 1$ .

В случае сходимости итераций справедлива оценка [18]

$$\|z_h^* - z_{h,K}\| \leq C_1 \delta_K, \quad (6.3)$$

где  $z_h^*$  - решение уравнения (6.2). Кроме того, согласно [14], для собственного значения  $\lambda_h^*$  существует оценка

$$|\lambda_h^* - \lambda_{h,K}| \leq C_2 \delta_K, \quad (6.4)$$

где  $C_1 > C_2 = \text{const} > 0$ .

При выбранной разностной схеме с порядком аппроксимации  $O(h^2)$  сходимость разностного решения  $\{\lambda_h^*, \vec{x}_h^*\}$  к решению  $\{\lambda^*, \vec{x}^*\}$  задачи (2.2)-(2.3) является квадратичной по  $h$  [24], то есть

$$\|z^* - z_h^*\| \leq C_3 h^2, \quad C_3 = \text{const} > 0. \quad (6.5)$$

Таким образом,

$$|\lambda^* - \lambda_{h,K}| + \|\vec{x}^* - \vec{x}_{h,K}\| = \|z^* - z_{h,K}\| \leq C_4 (h^2 + \delta_K), \quad C_4 > 0 \quad (6.6)$$

Поскольку в проведенных вычислениях  $\delta_K \ll h^2$ , то основной является ошибка разностной аппроксимации.

Вклад в ошибку аппроксимации задачи (1.6) вносит погрешность  $G(k_m)$ , обусловленная заменой бесконечного интервала интегрирования  $k \in [0, \infty)$  конечным  $k \in [0, k_m]$ , в результате которой оператор  $[\mathcal{D}^\infty + S^\infty]$  заменяется на  $[\mathcal{D}^\infty + S^{k_m}]$ , а также погрешность порядка  $O(\Delta k^2)$ , вносимая при аппроксимации оператора  $S^{k_m}$  квадратурными формулами Симпсона. Численное исследование погрешности  $G(k_m)$  проведено в работе [9], там же описан выбор шага  $\Delta k$  квадратурных формул. Необходимо также учесть ошибку  $G(R_m)$ , вносимую заменой граничных условий (1.5) на (2.3). Известно [25], что при замене оператора  $\mathcal{D}^\infty$  на  $\mathcal{D}^{R_m}$  при  $R_m \rightarrow \infty$  имеется сходимость решений регулярных задач, однако скорость сходимости к решению сингулярной задачи определяется свойствами операторов и для рассматриваемого оператора  $\mathcal{D}^\infty$  неизвестна. Поэтому анализ зависимости ошибки результата от  $R_m$  выполняется численно. Для выбора граничной точки  $R_m$  получена зависимость



Таблица 1. Сходимость вычислительной схемы (4.11).

Мезомолекула	$k$	$\delta_k$	$-\epsilon_{J\nu}^k$ (эВ)	$\lambda_k$
$dd\mu$ $J = \nu = 1$	0	0,48	2,50	$0,880 \times 10^{-2}$
	5	$0,14 \times 10^{-6}$	1,91	$0,671 \times 10^{-2}$
$pd\mu$ $J = \nu = 0$	0	0,18	225,00	0,52826
	3	$0,4 \times 10^{-7}$	221,52	0,52010

Примечание к табл. 1

Здесь  $k$  - номер итерации вычислительного процесса;  $\delta_k$  - определена формулой (6.1);  $\epsilon_{J\nu}^k$  - энергия уровня мезомолекулы на  $k$ -м шаге;  $\lambda_k = -2M\epsilon_{J\nu}^k \nu$  - собственное значение в единицах задачи ( $m_a = \hbar = e = 1$ );  $\nu_k = 1$ . Расчеты проведены по схеме (B) при  $\vec{X}(0) = \vec{X}(R_m) = 0$ ,  $R_m = 60$ ,  $N = 84$  для  $pd\mu$  и  $N = 131$  для  $dd\mu$ . В качестве волновых функций начального приближения ( $k = 0$ ) использовались функции, полученные при решении первых двух уравнений (одного уравнения в случае  $dd\mu$ ) в системе (2.2).

Таблица 2. Зависимость энергии уровня  $-\epsilon_{J\nu}$  от  $R_m$ .

$R_m$	$pd\mu$ $J = \nu = 0$	$dd\mu$ $J = \nu = 1$
20	221,515	1,393
40	221,520	1,908
60	221,520	1,906

Примечание к табл. 2

$-\epsilon_{J\nu}$  приведены в эВ,  $R_m$  - в единицах задачи. Энергии уровней вычислены при  $N = 84$  для мезомолекулы  $pd\mu$  и  $N = 131$  для  $dd\mu$ . Расчет проведен по схеме (B) при  $\vec{X}(0) = \vec{X}(R_m) = 0$ .

$\epsilon = \epsilon(R_m)$ . Как следует из таблицы 2, для вычисления энергий уровней мезомолекул с точностью порядка 0,1 эВ достаточно положить  $R_m = 20$ . Отметим более сильную зависимость  $\epsilon$  от  $R_m$  в случае слабосвязанного состояния  $J = \nu = 1$  мезомолекулы  $dd\mu$ .

В результате численных исследований [9] параметры аппроксимации исходной задачи  $h$ ,  $\Delta k$ ,  $R_m$  и  $k_m$  были определены таким образом, чтобы внесенная при этом абсолютная погрешность

значения уровня энергии не превосходила 0,1 эВ. Из тех же соображений был выбран уровень невязки ( $\delta_k < \epsilon = 10^{-6}$ ).

Погрешность  $G(N)$ , вносимая аппроксимацией исходной бесконечной системы уравнений (1.4) конечной (2.2), ниже анализируется численно.

7. Численное исследование сходимости адиабатического разложения

Анализ сходимости разложения (1.3) выполнен путем численного решения последовательности задач (2.2)-(2.3) для различных  $N$  при выбранных  $h$ ,  $\Delta k$ ,  $R_m$ ,  $k_m$  по схеме (B). В таблице 3 представлена зависимость значений энергий связи  $\epsilon$  мезомолекулы от

Таблица 3. Зависимость энергии уровня  $\epsilon_{J\nu}$  от числа решаемых уравнений  $N$ .

	Число пар уравнений $N$	$pd\mu$ ( $J = \nu = 0$ )		Число уравнений $N$	$dd\mu$ ( $J = \nu = 1$ )	
		$-\epsilon_{J\nu}(N)$	$\Delta \epsilon_N = \frac{\epsilon(N) - \epsilon(N-1)}{\epsilon(N-1)}$		$-\epsilon_{J\nu}(N)$	$\Delta \epsilon_N = \frac{\epsilon(N) - \epsilon(N-1)}{\epsilon(N-1)}$
Состояния дискретного спектра задачи двух центров	1	215,680		1	0,640	
	3	218,598	2,918	4	1,392	0,752
	6	219,114	0,516	8	1,522	0,130
	9	219,302	0,188	12	1,562	0,040
Состояния непрерывного спектра задачи двух центров	27	220,140	0,838	30	1,678	0,117
	49	221,227	1,087	52	1,769	0,090
	71	221,447	0,260	74	1,812	0,043
	84	221,520	0,033	87	1,824	0,012
				109	1,881	0,057
				131	1,906	0,025

Примечание к табл. 3

Значения  $\epsilon_{J\nu}$  приведены в эВ для различного числа уравнений в системе (1.4).  $N$  соответствует последовательному заполнению состояний трех оболочек  $n = n_1 + n_2 + m$  и частично четвертой  $n = 4$  (состояния  $n = [n_1, n_2, m] = [300], [210], [120]$ ) дискретного спектра и шести оболочек непрерывного ( $n = [n_2, m] = [00], [10], [20], [30], [01], [11]$ ) спектра задачи двух центров.  $N$  различаются для  $J = 0$  и  $J = 1$ , т.к. при  $J = 1$  в собственное значение дают вклад матричные элементы  $U_{ij}(R)$  ( $i, j = \begin{Bmatrix} [n_1, n_2, m] \\ k [n_2, m] \end{Bmatrix}$ ) с  $m = 1$ . Расчет проведен для нулевых граничных условий  $\vec{X}(0) = \vec{X}(R_m) = 0$  при  $R_m = 60$  по схеме (B).

числа решаемых уравнений системы (2.2), то есть от числа учитываемых в разложении (1.3) состояний задачи двух центров. Из таблицы следует, что вклад дискретного и непрерывного спектров задачи двух центров в энергию связи учтен при данных  $N$  с точностью  $\sim 0,1$  эВ. Расчет был проведен по схеме (B), поскольку задача (2.2)-(2.3) с матрицей потенциалов (5.8) с большой абсолютной точностью  $\sim 10^{-2}$  эВ аппроксимирует исходную задачу, как следует из таблицы 4. Отметим, что проведенное исследование согласуется с результатами работы /9/, в которой сходимость разложения (1.3) исследовалась по формулам, аналогичным ряду теории возмущений /26/. Там приведены значения уровней энергии всех мезомолекул, а также сравнение адиабатических расчетов с вариационными /5/.

В настоящее время найден регулярный способ учета вклада в энергию уровня  $\mathcal{E}_{J\psi}$  отброшенных состояний дискретного  $[N, \infty)$  и низших состояний непрерывного  $[0, k_0]$  спектров задачи двух центров /27/. Показано, что он не превышает величины  $\sim 0,1$  эВ для глубоких и  $\sim 0,05$  эВ для слабосвязанных уровней.

Таблица 4. Уровни энергии  $\mathcal{E}_{J\psi}$  мезомолекул  $pd\mu$  и  $dd\mu$ .

Мезомолекулы	Квантовые числа		Энергия связи $-\mathcal{E}_{J\psi}$ в эВ	
	J	$\psi$	Схема (A)	Схема (B)
$dd\mu$	0	0	325,046	325,043
	0	1	35,808	35,813
	1	0	226,605	226,607
	1	1	1,392	1,393 *
	2	0	86,314	86,324
$pd\mu$	0	0	221,515	221,516
	1	0	97,357	97,399

Примечание к табл. 4

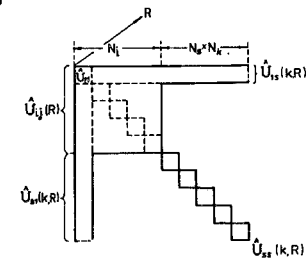
При вычислениях были использованы следующие значения масс частиц (в единицах массы электрона  $m_e$ ) и значение  $R_y$  /28/:

$m_\mu = 206,769$ ;  $M_p = 1836,152$ ;  $M_d = 3670,481$ ;  $R_y = 13,6058$  эВ.

$\mathcal{E}_{J\psi}$  приведены с тремя цифрами после запятой для сравнения схем (A) и (B), хотя достигнутая абсолютная точность вычислений  $\sim 0,1$  эВ, а для слабосвязанного уровня  $dd\mu$  ( $J = \psi = 1$ )  $\sim 0,05$  эВ.

Расчет проведен при  $\vec{J}(0) = \vec{J}(R_m) = 0$ ,  $R_m = 20$ ,  $N = 84$  для  $pd\mu$  и  $N = 131$  для  $dd\mu$ .

ж) При  $R_m = 60$ ,  $\mathcal{E}_{11} = -1,906$ .



Заключение

В работе представлена схема численного решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для систем интегро-дифференциальных уравнений, возникающих при вычислении уровней энергии и волновых функций  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода в адиабатическом представлении задачи трех тел. Численно исследована сходимость адиабатического разложения.

Особенность метода заключается в том, что уровни энергии и волновые функции вычисляются с точностью одного и того же порядка (6.6). Абсолютная точность вычислений уровней энергии достигает величины  $\sim 0,1$  эВ и может быть повышена при расширении системы уравнений выбором  $R_m$ ,  $k_m$  и повышением точности конечно-разностной вычислительной схемы.

В заключение авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву за постановку задачи и интерес к работе, С.И.Виницкому за многочисленные обсуждения и помощь в работе.

Литература

1. Gerstein S.S. and Ponomarev L.I. Phys.Lett., (1977) 72B, p. 80; Ponomarev L.I. The Talk at the X European Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics, September 14-19, Moscow, 1981; ОИЯИ, P4-81-800, Дубна, 1981.
2. Gerstein S.S. and Ponomarev L.I. Mesomolecular Process Induced by  $\pi^-$  and  $\mu^-$  Mesons. In: "Muon Physics", v. III, Eds. V. Hughes and C.S.Wu. Academic Press, New York and London, 1975.
3. Born M. Gott. Nachr., 1951, p. 1; Mott H.F., Massey H.S.W. Theory of Atomic Collisions. 3-rd ed. Oxford Univ. Press.

- London and New York, 1965; Ponomarev L.I., Vinitzky S.I., J.Phys., 1979, B12, p. 567; Ponomarev L.I., Somov L.N., Vucajlovic F.R. J.Phys., 1981, B14, p. 591.
4. Carter B.P. J.Comp.Phys., 1969, 4, p. 54; J.Comp.Phys., 1969, 4, p. 325.  
Accad Y., Pekeris C.L., Schiff B. Phys.Rev., 1971, A4, p. 516.
5. Carter B.P. Phys.Rev., 1966, 141, p. 863; Halpern A. Phys.Rev. Lett., 1964, 13, p. 660.
6. Виноцкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с. 849.
7. Быстрицкий В.М. и др. ЖЭТФ, 1979, 76, с. 460.
8. Быстрицкий В.М. и др. ЖЭТФ, 1981, 80, с. 1700.
9. Виноцкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с. 698.
10. Bates D.R., Ledsham K., Stewart A.L. Phil.Trans.Roy.Soc. (London), 1953, A246, p. 215; Power J.D. Phil.Trans.Roy.Soc. (London), 1973, A274, p. 663.
11. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферические и кулоновские сферические функции. М., "Наука", 1976.
12. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J.Phys. 1978, B11, p. 3861; Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J.Phys., 1977, B10, p. 1335; Ponomarev L.I., Slavjanov S.Yu., Somov L.N. J.Phys., 1980, B13, p. 3797.
13. Falfman M.P., Ponomarev L.I., Vinitzky S.I. J.Phys., 1976, B9, p. 2255; Abramov D.I., Slavjanov S.Yu., Somov L.N. J.Phys., 1980, B13, p. 4717.
14. Гавурин М.К. Изв. вузов. Математика, 1958, 5, с.18, УМН, 1957, 12, 173.
15. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В., ЭЧАЛ, 1973, 4, с. 127.
16. Bellman R.E. and Kalaba R.E. Quasilinearization and Nonlinear Boundary-Value Problems. American Elsevier, New York, 1965.
17. Кивистик Л.А. ДАН СССР, 1961, 136, с. 22.
18. Люстерник Л.А., Соболев В.И. Элементы функционального анализа. М., "Наука", 1965.
19. Blum E.K., Chang A.F. J.Inst.Maths.Applics., 1978, 22, p. 29
20. Мележик В.С. и др. Сообщение ОИЯИ, P5-12789, Дубна, 1979.
21. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М., "Наука", 1971.
22. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. J.Comp.Phys., 1973, 13, p. 1.
23. Калиткин Н.Н. ЖВМ и МО, 1965, 5, с.1107.
24. Сальвадори М.Е. Численные методы в технике. М., ИЛ, 1955.
25. Глазман И.М. Прямые методы качественного спектрального анализа сингулярных дифференциальных операторов. Москва, "Наука", М., 1963.
26. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., ЖЭТФ, 1977, 72, с. 1670.
27. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1982, 82, с. 670.
28. Cohen E.R., Taylor V.N. J.Phys.Chem.Ref.Data., 1973, 2, p. 663.

Рукопись поступила в издательский отдел  
10 декабря 1982 года.

## НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

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

ДЗ-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	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.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	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.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Д1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
ДЗ,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.

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

Мележик В.С. и др. P11-82-842  
Решение системы интегро-дифференциальных уравнений, возникающей при вычислении уровней энергии  $\mu$ -мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел

Предложены две итерационные схемы численного решения задачи на собственные значения для системы большого числа интегро-дифференциальных уравнений, которая возникает в адиабатическом представлении квантово-механической задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Итерационные поправки определяются с помощью решения хорошо обусловленных граничных задач для систем дифференциальных уравнений.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Melezchik V.S. et al. P11-82-842  
Numerical Solution of a System of Integrodifferential Equations Arising at the Calculation of  $\mu$ -Mesomolecule Energy Levels in the Adiabatic Representation of Three-Body Problem

Two iteration schemes are proposed for the numerical solution of the eigenvalue problem for a system of a large number of integrodifferential equations, arising from the quantum mechanical three-body problem with Coulomb interaction. The iteration corrections are determined by solving a set of well conditioned boundary problems for a system of differential equations.

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.