сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-85-465

Е.П.Жидков, А.В.Сидоров, Н.Б.Скачков,
Б.Н.Хоромский

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО КВАЗИПОТЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

1985

ВВЕДЕНИЕ

Квазипотенциальный подход [1] интенсивно используется для релятивистского описания связанной системы двух частиц. Поэтому представляет интерес как развитие численных методов решения, так и поиск точных аналитических решений для различных видов взаимодействий. Однако точные аналитические решения квазипотенциальных уравнений известны лишь для некоторых простейших потенциалов. Широкое применение квазипотенциального подхода требует разработки численных методов решения квазипотенциальных уравнений с различными потенциалами.

Отметим, что в ряде работ найдены точные аналитические и численные решения квазипотенциальных уравнений в конфигурационном представлении.

Одним из достоинств вычислений в импульсном пространстве является то, что, во-первых, потенциал взаимодействия, который выражается через амплитуду рассеяния, записывается изначально в импульсном пространстве, а во-вторых, в том, что в выражения для формфакторов и структурных функций адронов входят волновые функции именно в импульсном представлении.

В данной работе применяется метод численного исследования квазипотенциальных уравнений непосредственно в импульсном пространстве, который является особенно эффективным, когда ядра интегральных операторов зависят лишь от суммы и разности аргументов.

В общем случае квазипотенциальное уравнение имеет вид /далее мы положим массы составляющих частиц равными единице $m = 1$/:

$$G^{-1}(\vec p, E_n)\Psi_n(\vec p) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int V(\vec p, \vec k)\Psi_n(\vec k)\,d\Omega_{\vec k}, \quad \hbar = m = c = 1, \qquad /B1/$$

где $G(\vec p, E_n)$ - свободная функция Грина, а Ω - элемент объема в импульсном пространстве.

В случае нерелятивистского уравнения Шредингера

$$G^{ш}(\vec p, E_n) = \left(\frac{p^2}{2} - E_n\right)^{-1}, \qquad /B2/$$

$$d\Omega^{ш}_{\vec k} = d^3\vec k. \qquad /B3/$$

В релятивистском квазипотенциальном подходе пространство импульсов является пространством Лобачевского [2,3].

$$d\Omega_{\vec k} = d^3\vec k/\sqrt{1+\vec k^2}. \qquad /B4/$$

Далее будем рассматривать релятивистскую модельную функцию Грина /см.[2] стр.248/:

$$G^k(p, E_n) = (E_p - E_n)^{-1}, \quad E_p = \sqrt{1+\vec p^{\,2}}. \qquad /B5/$$

В нерелятивистском подходе кулоновскому потенциалу

$$V(r) = -\frac{\alpha}{4\pi r} \qquad /B6/$$

в импульсном представлении отвечает потенциал

$$V(\vec p, \vec k) = -\frac{\alpha}{(\vec p - \vec k)^2}. \qquad /B7/$$

Релятивистские расчеты проведем как с потенциалом, являющимся прямым геометрическим обобщением выражения /B7/ [4]

$$V(\vec p, \vec k) = -\alpha/|\vec p(-)\vec k|^2, \qquad /B8/$$

где разность $\vec p(-)\vec k$ есть разность в пространстве Лобачевского[2]:

$$\vec p(-)\vec k = \vec p - \vec k[p_0 - \frac{\vec p\vec k}{1+k_0}], \quad p_0 = \sqrt{1+\vec p^{\,2}}, \quad k_0 = \sqrt{1+\vec k^2}, \qquad /B9/$$

так и с потенциалом, соответствующим амплитуде однобозонного обмена

$$V(\vec p, \vec k) = \frac{\alpha}{(p-k)^2}. \qquad /B10/$$

Здесь $(p-k)^2 = 2-\sqrt{1+(\vec p-\vec k)^2}$ - разность 4-векторов p и k. В дальнейшем рассматривается случай нулевого орбитального квантового числа $\ell = 0$. Представляя волновую функцию в виде $\Psi_{\ell=0}(\vec p) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\phi(p)\cdot p^{-1}$ и интегрируя в /B1/ по угловым переменным, получаем для $\phi(p)$ одномерное интегральное уравнение

$$G^{-1}(p, E_n)\phi_n(p) = \int_0^\infty dk\, V_0(p,k)\phi_n(k). \qquad /B11/$$

где

$$V_0(p,k) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-1}^{+1} V(\vec p, \vec k)\, d\cos\Theta_{\vec p,\vec k}. \qquad /B12/$$

Уравнение /B11/ может быть решено численно.

§1. КЛАСС РЕШАЕМЫХ ЗАДАЧ

В этом параграфе мы рассмотрим спектральную задачу об определении p минимальных собственных чисел /СЧ/ и соответствующих собственных функций /СФ/ для класса интегральных операторов второго рода на полуоси, определяемых равенством /B11/, с ядрами, зависящими от суммы и разности аргументов. В случае потенциалов /B7/, /B8/, /B10/ и функций Грина /B2/, /B5/ уравнение/B11/ заменой переменной и искомой функции сводится к виду

$$\epsilon(p)\phi(p) + \beta\cdot c(p)\int_0^a V(p,k)c(k)\,\phi(k)\,dk = \lambda\phi(p)$$

$$0 < a \le \infty, \quad 0 < p \le a,$$

$$V(p,k) = V_1(|p-k|) + V_2(p+k), \quad \int_0^a \phi^2(k)dk = 1, \qquad /1.1/$$

где функции $\epsilon(p)$ и $c(p)$ заданы и имеют требуемую гладкость, а $V_1(t) = \ln t$, $V_2(t) = -\ln t$.

В работе получены необходимые условия разрешимости задач вида /1.1/ в зависимости от асимптотики решений при $k \to \infty$, и приведены результаты численных расчетов для ряда моделей, описываемых уравнениями типа /1.1/.

Основным требованием при выполнении этих расчетов является высокая относительная точность СЧ /$10^{-7} \div 10^{-8}$/ и СФ/$10^{-5} \div 10^{-6}$/, позволяющая в будущем обеспечить необходимую точность при описании экспериментальных данных. Например, массы Ψ и Υ -мезонов измеряются с относительной точностью 10^{-5} [5]. Для выполнения указанных требований мы сталкиваемся с проблемой вычисления инвариантного подпространства матриц большой размерности /порядка $n \times n$, где $n \sim 10^3$/, которая практически неразрешима без учета специфики этих матриц. Для решения возникающей алгебраической проблемы в работе используется численный алгоритм, предложенный в [6] и реализованный на FORTRANe в виде программы EVPIM и использующий многосеточную реализацию метода итерирования подпространства, экономичные алгоритмы работы с ганкелевыми и теплицевыми матрицами, возникающими при дискретизации интегрального оператора по методу Галеркина, а также специальные алгоритмы уточнения приближенных решений.

Представленные здесь результаты расчетов получены на ЭВМ CDC-6500 при дискретизации, использующей до $n = 1025$ неизвестных. При этом затраты оперативной памяти составляют $Q = 2(p+1)n + 14n + O(p^2)$, где p - количество вычисляемых СФ. Достигнутая точность СЧ и СФ иллюстрируется на примере точно решаемой модели, и для СЧ достигает $10^{-7} \div 10^{-8}$.

В ряде случаев уравнение /B1/ в исходной формулировке может несколько отличаться от /1.1/, однако сводится к нему заменой переменных.

Например, задача

$$v(p)\,u(p) + \beta D(p) \int_0^a G(p,k)\,u(k)\,dk = \lambda u(p), \quad D(p) > 0 \qquad /1.2/$$

сводится к виду /1.1/ заменой

$$c(p) = D(p)^{1/2}, \quad \phi(p) = D(p)^{-1/2}\, u(p).$$

К уравнению /1.1/ приводится также задача

$$v(p)\,u(p) + \beta \int_0^\infty G(\Phi(p), \Phi(k))\,u(k)\,dk = \lambda u(p), \qquad /1.3/$$

где $\Phi(p) \in \mathbf{C}[0,\infty]$ и строго монотонна при $p \geq 0$, причем $\Phi(p) > 0$, $p > 0$. Пусть $\Phi(0) = 0$, тогда, полагая

$$p^1 = \Phi(p), \quad k^1 = \Phi(k), \quad u(p) = \phi(p^1)\cdot \phi_1(p^1)^{1/2},$$

где $\Phi'(p) = \phi_1(p^1)$, $\phi_1(p^1) > 0$, приходим к уравнению /1,1/, в котором $c(p) = \phi_1(p)^{-1/2}$.

Уравнение

$$v(p)\,u(p) + \beta \int_0^a G(k,p)\,D(k)\,u(k)\,dk = \lambda u(p), \quad D(p) > 0 \qquad /1.4/$$

сводится к /1.1/ заменой $c(p) = D^{1/2}(p)$, $\phi(p) = D^{1/2}(p)\,u(p)$. Отметим, что везде в дальнейшем будет предполагаться существование решений задачи /1.1/. Класс дифференциальных и интегро-дифференциальных операторов, для которых применима процедура EVPIM, указан в /6/.

§2. АСИМПТОТИКА СФ И НЕОБХОДИМЫЕ УСЛОВИЯ РАЗРЕШИМОСТИ

Рассмотрим класс уравнений с логарифмическим ядром вида

$$L\Psi \equiv v(x)\Psi(x) + \beta\cdot c(x) \int_0^a \ln\left|\frac{x-y}{x+y}\right| \Psi(y)\,dy = \lambda\Psi(x), \qquad /2.1/$$

для $a = \infty$. Предположим, что $v(x)$, $c(x) \in \mathbf{C}^N[0,\infty)$, $N \geq 2$, а $\Psi(x) = O(x^{-\alpha})$, $x \to \infty$, $\alpha > 0$. Существование параметра $\alpha > 0$, при котором совпадают асимптотики правой и левой частей /2.1/ при $x \to \infty$, является, очевидно, необходимым условием существования решений этой спектральной задачи. Кроме того, α является важным параметром в численной схеме и подлежит определению до начала расчетов. Нам понадобится следующее представление:

$$\ln\left|\frac{x-t}{x+t}\right| = \begin{cases} -2 \sum\limits_{k=0}^{\infty} \dfrac{1}{2k+1}\left(\dfrac{t}{x}\right)^{2k+1}, & x > t \\ -2 \sum\limits_{k=0}^{\infty} \dfrac{1}{2k+1}\left(\dfrac{x}{t}\right)^{2k+1}, & x < t. \end{cases} \qquad /2.2/$$

Пусть при $x \geq R_0 > 0$ справедливо разложение

$$\Psi(x) = \sum_{i=0}^{L} \frac{b_i}{x^{\alpha+Si}} + O(x^{-\alpha-Ls}), \quad s > 0, \ L \geq 0, \ \alpha > 1 \qquad /2.3/$$

с нормировкой $b_0 = 1$. Положим для удобства $\alpha = 1 + \mu$, $\mu > 0$. Справедлива следующая

Лемма 1. Пусть существует непрерывное решение $\Psi(x)$, λ уравнения /2.1/, удовлетворяющее условию /2.3/, причем

$$\lim_{x\to\infty} x^{\gamma} c(x) = 1, \ \gamma \geq 0; \quad \lim_{x\to\infty} x^{-\nu} v(x) = 1, \ \nu \geq 0. \qquad /2.4/$$

Тогда имеет место один из следующих трех случаев:

1. $\gamma + \nu > 1$, тогда $\Psi(x) = O(x^{-1-\mu})$, $x \to \infty$, где $\mu = \gamma + \nu$ и выполняется соотношение

$$\lim_{x\to\infty} x^{1+\mu}\,\Psi(x) = \frac{2\beta}{\pi} \int_0^\infty t\,\Psi(t)\,dt. \qquad /2.5/$$

2. $\gamma + \nu = 1$, тогда $\Psi(x) = O(x^{1+\mu})$, $0 \leq \mu < 1$, $x \to \infty$, где число μ удовлетворяет уравнению

$$\mu \operatorname{ctg}\frac{\pi\mu}{2} - \beta = 0, \quad \beta \leq \frac{2}{\pi}. \qquad /2.6/$$

3. Если $\gamma + \nu < 1$, то уравнение /2.1/ не имеет решений из класса /2.3/.

Кроме того, если $\lambda \neq v(0)$, то $\Psi(0) = 0$.

Доказательство. Приравнивая асимптотики правой и левой частей /2.1/ при $x \to \infty$, получаем необходимое условие разрешимости уравнения /2.1/:

$$\lim_{x\to\infty} x^{1-\mu}\left(v(x)\Psi(x) + \beta c(x) \int_0^\infty \ln\left|\frac{x-t}{x+t}\right| \Psi(t)\,dt\right) = \text{const}. \qquad /2.7/$$

Исследуем это условие в каждом из случаев 1/ и 2/. Найдем асимптотику интегрального слагаемого в /2.7/. В первом случае при $x \geq R_0$ имеем

$$\int_0^\infty \ln\left|\frac{x-t}{x+t}\right| \Psi(t)\,dt = -2 \int_0^x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1}\left(\frac{t}{x}\right)^{2k+1} \Psi(t)\,dt -$$

$$-2 \int_x^\infty \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1}\left(\frac{x}{t}\right)^{2k+1} \Psi(t)\,dt = -\frac{2}{x} \int_0^x t\,\Psi(t)\,dt -$$

$$-2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{x^{-2k-1}}{2k+1}\int_0^x t^{2k+1}\Psi(t)\,dt-2\sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^{2k+1}}{2k+1}\int_x^{\infty}\frac{\Psi(t)}{t^{2k+1}}\,dt.$$

Обозначая два последних слагаемых через s_1 и s_2, получим оценки

$$|s_1|\le c_1\Big(\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{2k+1}\cdot\frac{1}{2k+1-\mu}\Big)x^{-\mu},$$

$$|s_2|\le c_2\Big(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{2k+1}\cdot\frac{1}{2k+1+\mu}\Big)x^{-\mu},$$

откуда окончательно находим

$$\int_0^{\infty}\ln\Big|\frac{x-t}{x+t}\Big|\Psi(t)dt=-\frac{2}{x}\int_0^x t\Psi(t)\,dt+O(x^{-\mu}),\quad \mu>1.$$

Отсюда непосредственно вытекают результаты случая 1/, в том числе и /2.5/.

Рассмотрим случай 2/. Согласно предположениям, $\lim\limits_{t\to\infty} t^{1+\mu}\Psi(t)=1$. Определим функции $a_n(x)$ и $b_n(x)$ соотношениями

$$\frac{1}{x^n}\int_0^x t^n\Psi(t)\,dt=\frac{a_n(x)}{n-\mu}x^{-\mu},\quad x\to\infty$$

$$x^n\int_x^{\infty}t^{-n}\Psi(t)\,dt=\frac{b_n(x)}{n+\mu}x^{-\mu},\quad x\to\infty,\quad n\ge 0,$$

причем $\lim\limits_{n\to\infty}a_n(x)=1$, $\lim\limits_{n\to\infty}b_n(x)=1$, $n=0,1,\dots$ Используя эти функции, можем написать

$$\int_0^{\infty}\ln\Big|\frac{x-t}{x+t}\Big|\Psi(t)\,dt=-\frac{2}{x^{\mu}}\Big(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{a_{2k+1}(x)}{(2k+1)(2k+1-\mu)}\Big)-$$
$$-\frac{2}{x^{\mu}}\Big(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{b_{2k+1}(x)}{(2k+1)(2k+1+\mu)}\Big)=-\frac{2}{x^{\mu}}\phi(\mu,x), \qquad /2.8/$$

где

$$\lim_{x\to\infty}\phi(\mu,x)\equiv\phi(\mu)=2\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)^2-\mu^2}=\frac{\pi}{2\mu}\,\mathrm{tg}\frac{\pi\mu}{2}. \qquad /2.9/$$

Из равенств /2.8/, /2.9/ непосредственно вытекает, что $\gamma+\nu=1$, а приравнивая коэффициенты при $x^{-\mu}$, получаем уравнение

$$1-\frac{\beta}{\pi}\,\frac{2}{\mu}\,\phi(\mu)=0,$$

которое эквивалентно /2.6/. Оно разрешимо при $\beta\le 2/\pi$. Легко установить остальную часть леммы. Лемма доказана.

Напишем приближенные формулы для решений уравнения /2.6/ при $\beta\to 0$. При этом, очевидно, $\mu=1-\epsilon$, $\epsilon\to 0$, а /2.6/ записывается в виде

$$(1-\epsilon)\,\mathrm{tg}\frac{\epsilon\pi}{2}-\beta=0.$$

Отсюда получаем три первых приближения для ϵ:

$$\epsilon\cdot\frac{\pi}{2}=\beta;\qquad \epsilon-\epsilon^2-\frac{2}{\pi}\beta=0;$$

$$\epsilon-\epsilon^2+\frac{1}{3}\Big(\frac{\pi}{2}\Big)^2\epsilon^3-\frac{2}{\pi}\beta=0.$$

В случае 2/ нет аналога соотношения /2.5/.

Замечание 1. Асимптотика $\Psi(x)=O(x^{-2})$ не имеет места в классе коэффициентов /2.4/, в силу соотношения

$$\int_R^{\infty}t^{-2}\ln\Big|\frac{x-t}{x+t}\Big|\,dt=O\Big(\frac{\ln x}{x}\Big),\quad x\to\infty,\ R>0.$$

§3. СВЕДЕНИЕ ЗАДАЧИ /1.1/ К АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ПРОБЛЕМЕ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

Рассмотрим случай $a=\infty$. Изменения для $a<\infty$ незначительны. Пусть существует СФ $\Psi(x)$ задачи /1.1/ с СЧ λ, причем $\Psi(0)=0$, $\Psi(x)=O(x^{-a})$, $x\to\infty$, где $a>1$ удовлетворяет условиям леммы 1. Предположим, аналогично[6], что

$$\Psi(x)\in \mathbf{C}^N[0,\infty);\quad v(x),\ c(x)\in\mathbf{C}^N[0,\infty),\quad N\ge 2. \qquad /3.1/$$

Задачу /1.1/ сведем, согласно[6], к проблеме отыскания p минимальных СЧ и соответствующих собственных векторов матрицы A размерности $(n+1)\times(n+1)$ вида

$$A=D+C\begin{pmatrix}B & V\\ V^T & 0\end{pmatrix}C,$$

$$B=T+H,\quad V=(a_1,a_2,\dots,a_n)^T, \qquad /3.2/$$

$$D=\mathrm{diag}(d_1,\dots,d_{n+1}),\ C=\mathrm{diag}(c_1,\dots,c_{n+1}),\quad n=2^q,$$

где T - симметрическая теплицева, а H - ганкелева матрицы, т.е.

$T = \{t_{|j-i|}\}$, $H = \{h_{i+j}\}$, $i, j = 0,1,\dots,n-1$. Дискретизацию строим методом Галеркина. Выбираем число $a_x \ge R_0$, полагаем $h = a_x \cdot n^{-1}$, $R = a_x + h$ и ищем решение $\Psi(x)$ в виде

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^{n+1} u_i \phi_i(x), \quad 0 \le x < \infty, \qquad /3.3/$$

где $\phi_i(x)$, $i \le n$ - кусочно-линейные базисные функции: $\phi_i(ih) = 1$; $\phi_i(\xi) = 0$, $\xi = (i-1)h$, $\xi = (i+1)h$. Функция $\phi_{n+1}(x)$ - линейна на отрезке $[a_x, R]$, $\phi_{n+1}(R) = 1$, $\phi_{n+1}(a_x) = 0$, и учитывает асимптотику при $x \to \infty$: $\phi_{n+1}(x) = (R/x)^{\alpha}$, при $x \ge R$. Таким образом, $u_h = (u_1, \dots, u_{n+1})^T$ - вектор неизвестных. Подставляя /3.3/ в уравнение /1.1/, приходим к системе

$$(L\Psi, \phi_k) = \lambda(\Psi, \phi_k), \quad k = 1, \dots, n+1.$$

Вычисляя скалярные произведения на отрезке $[0, R]$ по формуле трапеций с шагом h, приходим к алгебраической системе

$$A u_h = \lambda_h u_h, \qquad /3.4/$$

где $u_h = (u_1, \dots, u_n, z)^T$, $z = c1 \cdot u_{n+1}$, $c1 = a_0 h^{-1/2}$, $a_0^2 = (\phi_{n+1}, \phi_{n+1})$. Матрица A имеет вид /3.2/, причем

$$D = \mathrm{diag}\,(v(p_1), \dots, v(p_n), v_{n+1});$$

$$v_{n+1} = a_0^{-2}[(v\phi_{n+1}, \phi_{n+1}) + \beta(c(x)\phi_{n+1}, \int^{\infty} G(x,y)c(y)\phi_{n+1}(y)dy)];$$

$$C = \mathrm{diag}\,(c(p_1), \dots, c(p_n), 1), \quad p_i = ih,$$

$$a_i = \beta \cdot c1^{-1} \int_0^{\infty} G(p_i, y)c(y)\phi_{n+1}(y)\,dy, \quad i = 1, \dots, n;$$

$$T + H = \{a_{ij}\}, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

$$a_{ij} = \beta \int_0^{\infty} G(p_i, y)\phi_j(y)\,dy, \quad G(x,y) = \ln\left|\frac{x-y}{x+y}\right|.$$

Эта система аппроксимирует исходное уравнение с точностью $O(h^2)$.

Замечание 2. Если область определения уравнения /1.1/ есть конечный отрезок $[0, a]$, $a < \infty$, то получаем аналогичную систему, где $h = a \cdot (n+1)^{-1}$, $R = a - h$, $\phi_k(x)$, $k \le n$ - те же самые, а $\phi_{n+1}(x)$ на отрезке $[R-h, R]$ - линейна, $\phi_{n+1}(R) = 1$, $\phi_{n+1}(x) = \left(\frac{x-a}{R-a}\right)^{\alpha}$, $R \le x \le a$, где число α задает асимптотику решения при $x \to a$.

Процедура EVPIM /6/ сводится к последовательному решению задач /3.4/ для различного числа неизвестных $N_i = n_i + 1$, $n_i = 2^{3+i}$, $i = 1,2,\dots, I$; $I \le 7$ /для ЭВМ CDC-6500/, причем при переходе от i к $i+1$ шаг дискретизации уменьшается вдвое $h_{i+1} = 0.5 \cdot h_i$. Если справедливо представление /2.3/, то используются две возможности для уточнения приближенных решений, основанные на следующих представлениях для погрешности сеточных решений, подтверждаемых с большой точностью численными экспериментами:

$$P_{n+1}u - u_h = P_{n+1}\left[\sum_{i=1}^{N} c_i(x)h^{1+i} + \sum_{i=1}^{L} \frac{g_i(x,h)}{R^{\alpha-1+Si}}\right] + \eta_h,$$

$$\lambda - \lambda_h = \sum_{i=1}^{N} d_i h^{1+i} + \sum_{i=1}^{L} \frac{\nu_i}{R^{\alpha-1+Si}} + \epsilon_h, \qquad /3.5/$$

$$\epsilon_h, \|\eta_h\| = O(R^{-\alpha-LS}) + O(h^{1+N}),$$

$$g_i = g_{i0}(x) + g_{i2}(x)h^2 + g_{i3}(x)h^3 + \dots; \quad \nu_i = \nu_{i0} + \nu_{i2}h^2 + \nu_{i3}h^3 + \dots,$$

g_{ij}, ν_{ij} - не зависят от h.

Проектор P_{n+1} определен согласно разложению /3.3/. Практическое значение представления /3.5/ состоит в том, что, имея несколько решений u_{h_i}, λ_{h_i} для различных h_i, можно с помощью линейной комбинации исключить первые слагаемые в разложении /3.5/ по степеням h, а далее, используя эти уточненные решения для различных R_1, R_2, $R_3, \dots$, также исключить первые слагаемые в разложении по степеням R^{-1}. Такую процедуру называем двухпараметрической экстраполяцией. Изложим результаты численного исследования нескольких моделей, описываемых уравнениями типа /1.1/.

§4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

а/ Сначала проиллюстрируем основные характеристики метода на примере уравнения Шредингера, которое в случае кулоновского потенциала /В7/ и с учетом /В2/ и /В3/ заменой

$$\Psi_{\ell=0}(\bar{p}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\phi(p)}{p}$$

сводится к одномерному уравнению:

$$\frac{x^2}{2}\phi(x) + \frac{\beta}{\pi}\int_0^{\infty} \ln\left|\frac{x-t}{x+t}\right| \phi(t)\,dt = \lambda\phi(x), \quad \alpha/4\pi = \beta. \qquad /4.1/$$

Таблица 1

$n+1$	257	513	1025	$\Delta_2\lambda;\ \Delta_2\Psi$	$\Delta_3\lambda$
$\Delta\lambda_1$	$1,9\cdot10^{-4}$	$4,9\cdot10^{-5}$	$1,43\cdot10^{-5}$	$2,73\cdot10^{-6}$	$2,78\cdot10^{-6}$
$\Delta\Psi_1$	$2,286\cdot10^{-4}$	$5,556\cdot10^{-5}$	$1,13\cdot10^{-5}$	$3,2\cdot10^{-6}$	-
$\Delta\lambda_2$	$7,4\cdot10^{-4}$	$1,9\cdot10^{-4}$	$4,76\cdot10^{-5}$	$9,0\cdot10^{-7}$	$2,9\cdot10^{-7}$
$\Delta\Psi_2$	$3,41\cdot10^{-3}$	$8,96\cdot10^{-4}$	$2,27\cdot10^{-4}$	$3,2\cdot10^{-6}$	-
$\Delta\lambda_3$	$1,6\cdot10^{-3}$	$4,1\cdot10^{-4}$	$1,0\cdot10^{-4}$	$7,6\cdot10^{-6}$	$3,9\cdot10^{-7}$

Таблица 2

R	10,0	12,5	15,0
$\Delta_3\lambda_1$	$2,78\cdot10^{-6}$	$1,08\cdot10^{-6}$	$4,91\cdot10^{-7}$
$\Delta_{R_i,R_j}\lambda_1$	$\Delta_{10.,12.5} = -9,0\cdot10^{-8}$	$\Delta_{12.5,15} = -4,0\cdot10^{-8}$	$\Delta_{10,15} = -7,2\cdot10^{-7}$

Это уравнение имеет точное решение /7/. В частности, при $\beta = 1$

$$\phi_1(x) = x(x^2+1)^{-2},\quad \lambda_1 = -0,5,$$

$$\phi_2(x) = x(1-4x^2)(1+4x^2)^{-3},\quad \lambda_2 = -0,125,\quad \lambda_3 = -1./18,$$

причем $\alpha = 3$, $s = 2$ в разложении /2.3/. В табл.1 приведены величины $\Delta\lambda_3$, $\Delta\lambda_i = \lambda_i - \lambda_{h,i}$ и

$$\Delta\Psi_i = \Big[\sum_{k=1}^{h+1} h\big(u_i(kh) - u_{h,i}(kh)\big)^2\Big]^{1/2},\quad i = 1,2,$$

где i - порядковый номер СФ, для различного числа неизвестных /$n+1 = 257$; 513; 1025/ в системе /3.4/. Отрезок дискретизации полагался $R = 10$. Точность решения системы для первых двух СФ была $\epsilon = 10^{-6}$. Как видно из табл.1, именно с этой точностью получаются СФ после экстраполяции, в то время как точность СЧ значительно выше. Приводятся результаты уточнения по решениям на двух последних сетках $\Delta_2\lambda$ и $\Delta_2\Psi$, а также по трем сеткам $\Delta_3\lambda$. Дальнейшее уточнение величины $\Delta_3\lambda_1$ проводим, используя ее значение для $R_1 = 10$, $R_2 = 12,5$, $R_3 = 15$. В табл.2 приводим результат уточнения $\Delta(R_i, R_j)\lambda_1$ для каждой пары чисел R_i, $i = 1,2,3$. Последняя строка табл.2 характеризует достижимую точность метода для задачи /4.1/ при числе неизвестных $n+1 = 1025$.

Замечание 3. На ЭВМ ЕС-1060 могут быть проведены расчеты с двойной точностью в пределах оперативной памяти для $n = 2048$ и $n = 4096$, что дает возможность для дальнейшего увеличения точности СЧ на 1-2 порядка.

В табл.3 приводим характерное время счета τ /в секундах/ на ЭВМ CDC-6500 при $p = 4$, $n = 1024$ в зависимости от точности ϵ вычисления СФ.

Таблица 3

ϵ	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}
τ	258	420	475	490	690

б/ Рассмотрим уравнение /В1/, которое в релятивистском случае /В4/, /В5/ и /В8/ заменой $\Psi(\bar{x}) = \frac{\phi(x)}{p\sqrt{1+p^2}} Y_{00}(\Theta,\Phi)$ переходит в:

$$\sqrt{m^2+x^2}\,\phi(x) + \frac{\beta}{\pi\sqrt{m^2+x^2}}\int_0^\infty \ln\left|\frac{x-t}{x+t}\right|\phi(t)\,dt = \lambda\phi(x),\quad \beta = \frac{\alpha}{4\pi} \qquad /4.2/$$

$0 \le x < \infty$, m - задано.

Согласно лемме 1, если решение существует, то $\phi(x) = O(x^{-3})$, $x \to \infty$. Численные эксперименты показывают, что решения $\phi(x)$ этого уравнения более "локализованы" в окрестности точки $x = 0$ по сравнению с /4.1/, т.е. зависимость точности решения от длины a_x отрезка дискретизации слабее. Приведем результаты расчетов первых трех СФ и СЧ для $a_x = 10$, $n = 128$ и различных $\beta = 1 \div 6$. В табл.4 приведены СЧ λ_1, λ_2, λ_3 для этих β. По нашим оценкам, точность СЧ $\epsilon = 10^{-5} \div 10^{-6}$. Аналитическое решение для уравнения /4.2/ неизвестно. Однако оно было решено ранее численно методом, предложенным в [8]. В случае $\beta = 1$ этот метод дает для /4.2/ $\lambda_1 = 0{,}6578 \pm 0{,}001$, $\lambda_2 = 0{,}8995 \pm 0{,}001$, что согласуется с полученными здесь результатами.

В табл.6 приведены основные характеристики первых трех СФ $\Psi_i(x)$, при $\beta = 1$, нормированных условием

$$\int_0^{a_x} \phi_i^2(x)\,dx = 1, \quad i = 1, 2, 3. \qquad /4.3/$$

Величины z_i означают положение нулей функции в порядке возрастания, а $\mu_i = (M_i, \phi(M_i))$ - пары чисел, первое из которых есть положение точки экстремума ($\phi'(M_i) = 0$), а второе - значение $\phi(M_i)$. Нумерация нулей и экстремумов соответствует цифрам в верхней строке.

в/ Примером задачи, принадлежащей классу /1.2/, служит уравнение /В1/ с функцией Грина /В5/, элементом объема /В4/ и потенциалом /В10/, которое заменой $\Psi(\bar p) = \frac{\phi(p)}{p\sqrt{1+p^2}} Y_{00}(\Theta, \Phi)$, $p = \mathrm{sh}\,\chi_p$, $k = \mathrm{sh}\,\chi_k$ сводится к уравнению:

$$\left(2\,\mathrm{sh}^2\frac{\chi_p}{2} + 1\right)\left(2\,\mathrm{sh}^2\frac{\chi_p}{2} + 1 - \lambda\right)\phi(\chi_p) = \frac{2\beta}{\pi}\int_0^\infty \ln\left(\frac{\mathrm{sh}\left(\frac{\chi_p + \chi_k}{2}\right)}{\mathrm{sh}\left(\frac{\chi_p - \chi_k}{2}\right)}\right)\phi(\chi_k)\,d\chi_k, \quad 0 \le \chi_p < \infty. \qquad /4.4/$$

Снова делая замену $x = \mathrm{th}\,\chi_p/2$, $t = \mathrm{th}\,\chi_k/2$, $u(x) = \frac{\phi(\chi_p)}{1 - x^2}$, приходим к уравнению со стандартным ядром на отрезке $[0,1]$

$$(1 + x^2)\left(\frac{1 + x^2}{1 - x^2} - \lambda\right)u(x) = \frac{4\beta}{\pi}\int_0^1 \ln\left|\frac{x + t}{x - t}\right| u(t)\,dt, \qquad /4.5/$$

которое решаем по изложенной в §§ 2-3 схеме, используя асимптотики

$$u(x) = c \cdot (1 - x) + O(1 - x)^2, \quad x \to 1. \qquad /4.6/$$

Таблица 4

β	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
λ_1	$6{,}5789 \cdot 10^{-1}$	$2{,}9030 \cdot 10^{-5}$	$-7{,}879 \cdot 10^{-1}$	$-1{,}652$	$-2{,}568$	$-3{,}523$
λ_2	$9{,}0039 \cdot 10^{-1}$	$6{,}7106 \cdot 10^{-1}$	$3{,}636 \cdot 10^{-1}$	$2{,}694 \cdot 10^{-4}$	$-4{,}063 \cdot 10^{-1}$	$-8{,}478 \cdot 10^{-1}$
λ_3	$9{,}5240 \cdot 10^{-1}$	$8{,}3849 \cdot 10^{-1}$	$6{,}752 \cdot 10^{-1}$	$4{,}770 \cdot 10^{-1}$	$2{,}509 \cdot 10^{-1}$	$1{,}031 \cdot 10^{-3}$

Таблица 5

β	1.0	2.0	4.0	5.0	7.0	10.0
λ_1	$9{,}0316 \cdot 10^{-1}$	$7{,}0457 \cdot 10^{-1}$	$1{,}9802 \cdot 10^{-1}$	$-8{,}2409 \cdot 10^{-2}$	$-0{,}67276$	$-1{,}6030$
λ_2	$9{,}7377 \cdot 10^{-1}$	$9{,}1436 \cdot 10^{-1}$	$7{,}4887 \cdot 10^{-1}$	$6{,}5264 \cdot 10^{-1}$	$0{,}44381$	$0{,}10383$
λ_3	$9{,}8801 \cdot 10^{-1}$	$9{,}5845 \cdot 10^{-1}$	$8{,}7147 \cdot 10^{-1}$	$8{,}1910 \cdot 10^{-1}$	$0{,}70311$	$0{,}50984$

Таблица 6

	1	2	3	$\phi(a_x)$
z_1	0	∞	-	$7,4\cdot 10^{-4}$
μ_1	0,391;1,169	-	-	
z_2	0	0,391	∞	$3,2\cdot 10^{-4}$
μ_2	0,156;2,098	0,625;-0,598		
z_3	0	0,172	0,477	$1,9\cdot 10^{-4}$
μ_3	0,078;2,65	0,273;-1,60	0,703;0,364	

Численные расчеты показывают, что уравнения /4.4/ и /4.2/ имеют качественно близкие решения. В табл.5,7 приводятся характеристики решений /4.5/, аналогичные приведенным в табл.4,6. При этом СФ нормированы условием

$$\int_0^1 u_i^2(x)\,dx = 1, \quad i = 1, 2, 3.$$

Оценки показывают, что точность СЧ есть $\epsilon = 10^{-5} \div 10^{-6}$.

г/ Приведем далее результаты численных исследований двух квазипотенциальных уравнений с медленным убыванием СФ при $x \to \infty$, что относится к пункту 2/ леммы 1.

Первое из них соответствует случаю, рассмотренному в пункте б/, § 4, однако элемент объема выбирается в виде /В3/:

$$\sqrt{m^2 + x^2}\,\phi(x) + \frac{\beta}{\pi}\int_0^\infty \ln\left|\frac{x-t}{x+t}\right|\phi(t)\,dt = \lambda\phi(x), \quad m = 1. \qquad /4.7/$$

Эта задача разрешима, согласно лемме 1, только при условии $\beta \le 2/\pi$. При этом $\phi(x) = O(x^{-1-\mu})$, $x \to \infty$, где число $\mu < 1$ определяется из уравнения /2.6/. Для уравнения /4.7/ известно точное представление для СЧ [9], сравнение с которыми показывает, что точность численных расчетов в данном случае составляет около 10^{-5} /т.е. пять значащих цифр/. Например, при $\beta = 0,1$, $\lambda_{1,T} = 0,995037$, а $\lambda_{1,\text{числ}} = 0,995072$. Определенные трудности в численных расчетах связаны как с медленным убыванием СФ при $x \to \infty$, так и с быстрым ростом решения в окрестности точки $x = 0$.

Если в уравнении /В1/ вместо элемента объема /В4/ использовать /В3/, то в релятивистском случае /В5/, /В10/ получим вместо /4.4/ уравнение:

$$\left(2\,\mathrm{sh}^2\frac{\chi_p}{2} + 1 - \lambda\right)\phi(\chi_p) = \frac{2\beta}{\pi}\int_0^\infty \ln\left(\frac{\mathrm{sh}\,\frac{\chi_p+\chi_k}{2}}{\mathrm{sh}\,\frac{\chi_p-\chi_k}{2}}\right)\phi(\chi_k)\,d\chi_k, \quad 0 \le \chi_p < \infty,$$

которое приводится к виду

$$(1 - x^2)\left(\frac{1 + x^2}{1 - x^2} - \lambda\right)u(x) = \frac{4\beta}{\pi}\int_0^1 \ln\left|\frac{x+t}{x-t}\right| u(t)\,dt, \quad 0 \le x \le 1 \qquad /4.8/$$

заменой $x = \mathrm{th}\frac{\chi_p}{2}$, $t = \mathrm{th}\frac{\chi_k}{2}$, $u(x) = \frac{\phi(\chi_p)}{1 - x^2}$ и решается с использованием асимптотики /4.6/. Таблица 8 содержит СЧ для различных $\beta = 0,1 \div 0,7$, где число неизвестных $n = 128$. Таблица 9 имеет тот же смысл, что и табл.6, причем $\beta = 0,2$.

Таблица 7

	1	2	3	$\phi(a_x)$
z_1	0	0,1	-	$3,2\cdot 10^{-4}$
μ_1	0,116;2,888	-		
z_2	0	0,101	1,0	$-1,2\cdot 10^{-4}$
μ_2	0,039;4,209	0,163;-1,256	-	
z_3	0	0,042	0,116	$-7,9\cdot 10^{-4}$
μ_3	0,019;-4,76	0,070;3,398	0,17;-0,812	

Таблица 8

β	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
λ_1	0,9989	0,9950	0,9887	0,9798	0,9684	0,9544	0,9377	0,9186
λ_2	1,004	1,0005	0,9977	0,9950	0,9922	0,9888	0,9847	0,9805
λ_3	1,013	1,009	1,004	1,000	0,9982	0,9954	0,9937	0,9924

Таблица 9

	1	2	3	$\phi(a_x)$
z_1	0	1,0	-	$1,7\cdot 10^{-8}$
μ_1	0,031;4,6	-		
z_2	0	0,041	1,0	$2,1\cdot 10^{-8}$
μ_2	0,017;-4,56	0,062;4,83	-	
z_3	0	0,022	0,066	$1,2\cdot 10^{-8}$
μ_3	0,008;1,96	0,038;-2,1	0,093;4,59	

В заключение отметим, что предлагаемый в данной работе подход открывает возможность эффективного численного исследования широкого класса квазипотенциальных уравнений вида /1.1/, а также более общих задач с интегродифференциальным оператором вида

$$P\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)\Psi(x) + v(x)\Psi(x) + c(x)\int_0^a G(x,t)\,c(t)\,\Psi(t)\,dt = \lambda\Psi(x),$$

где P - полином. Численный алгоритм является экономичным по памяти ЭВМ и быстродействию и позволяет достигнуть высокой относительной точности СЧ и СФ, используемых для вычисления спектров позитрония, мюония, кваркония и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

1. Logunov A.A., Tavkhelidze A.N. Nuovo Cim., 1963, 29, p.380.
2. Kadyshevsky V.G., Mir-Kasimov R.M., Skachkov N.B. Nuovo Cim., 1968, 55A, p.233.
3. Kadyshevsky V.G., Mateev M.D. Muovo Cim., 1968, 55A, p.275.
4. Kapskay V.N., Skachkov N.B. JINR, E2-81-618, Dubna, 1981.
5. Review of Particle Properties. Phys.Lett., 1982, 111B.
6. Жидков Е.П., Хоромский Б.Н. ОИЯИ, Р11-84-740, Дубна, 1984.
7. Fock V.A. Zc.Phys., 1953, 98, p.145.
8. Сидоров А.В., Скачков Н.Б. ОИЯИ, Р2-84-502, Дубна, 1984.
9. Durand B., Durand L. Phys.Rev., 1983, D28, No.3, p.396.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 июня 1985 года.

Жидков Е.П. и др. Р11-85-465

Численное исследование
интегрального квазипотенциального уравнения
для связанных состояний

Предложен подход к численному исследованию квазипотенциальных интегральных уравнений в импульсном представлении, сводящий исходную задачу к решению частичной проблемы на собственные значения для класса матриц, близких к теплицевым. Существенным является то, что ядра интегральных операторов зависят лишь от суммы и разности аргументов. Получены необходимые условия разрешимости широкого класса квазипотенциальных уравнений в зависимости от асимптотики собственных волновых функций на бесконечности. Приведены результаты численных расчетов для ряда модельных потенциалов. Точность нахождения собственных чисел для модельной задачи достигает 7-8 значащих цифр. Используемый численный алгоритм экономичен как по памяти ЭВМ, так и по быстродействию.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Zhidkov E.P. et al. P11-85-465

Numerical Investigation of Quasipotential Integral Equation
for Eigenvalue Problem

The approach to the numerical investigation of quasipotential integral equation in the momentum space is proposed. It transfers the initial problem to several eigenvalue problem solution for the class of matrices close to Toeplitz ones. The necessary conditions for solving a wide class of quasipotential equations are obtained. The results of numerical calculations for some model potentials are given. The accuracy of finding eigenvalues for the model problem is as high as 7-8 digits. Proposed numerical algorithm is economical both on computer memory, and on execution time.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985