



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P11-94-435

П.Г.Акишин, И.В.Пузынин, Ю.С.Смирнов

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ПОЛЯРОНА

Направлено в «Журнал вычислительной математики
и математической физики»

1994

Метод численного решения
трехмерных уравнений полярона

Предложен метод численного исследования модели сферически-несимметричного полярона в пределе сильной связи. Для аппроксимации решения используется разложение по сферическим гармоникам. Оригинальность метода заключается в построении итерационной ньютоновской схемы с дополнительной параметризацией исходного уравнения, благодаря которой осуществляется переход от простой линейной задачи к исходной нелинейной. Построена классификация решений задачи в соответствии с нумерацией сферических гармоник. Тестовые расчеты для различных параметров задачи и сравнение полученных результатов с известными подтверждает эффективность разработанных алгоритмов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1994

Перевод авторов

Akishin P.G., Puzynin I.V., Smirnov Yu.S.

P11-94-435

Method for Numerical Solving
of Three-Dimensional Polaron Equations

An iterative method for numerical investigation of the spherically-nonsymmetric polaron in the limit of strong coupling is proposed. An expansion in spherical harmonics is used for an approximation of the solution. An originality of the method consists in creating an iterative Newtonian scheme with an additional parametrization of the initial equation, such that a transition from a simple linear problem to the initial nonlinear one is fulfilled. A classification for solutions of the problem is constructed in accordance with a numeration of the spherical harmonics. The testing calculations for various parameters of the problem and a comparison of obtained results with famous ones confirm the efficiency of the elaborated algorithms.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе предлагается метод численного решения сферически-несимметричной модели полярона [1] в пределе сильной связи, описывающей поведение нерелятивистской частицы (электрона) в поле, создаваемом взаимодействием со средой.

Сформулируем математическую постановку задачи. Волновая функция ψ удовлетворяет следующему интегродифференциальному уравнению

$$\Delta \bar{\psi}(x) + \psi(x) \int_{R^3} \frac{\psi^2(x')}{|x-x'|} dV_{x'} + \lambda \psi(x) = 0, \quad (1)$$

где Δ - оператор Лапласа в пространстве R^3 : $\Delta = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$, $x = (x_1, x_2, x_3)^T$.

Решение уравнения (1) разыскивается в классе функций $\psi(x)$, удовлетворяющих условию

$$\int_{R^3} \psi^2(x) dV_x = 1. \quad (2)$$

Нелинейная краевая задача на собственные значения (1)-(2) допускает альтернативную дифференциальную постановку. Введем потенциал

$$u(x) = \int_{R^3} \frac{\psi^2(x')}{|x-x'|} dV_{x'}.$$

Тогда задачу (1)-(2) можно записать в виде

$$\Delta \psi(x) + u(x)\psi(x) + \lambda \psi(x) = 0, \quad (3)$$

$$\Delta u(x) + 4\pi\psi^2(x) = 0. \quad (4)$$

В сферически-симметричном случае, когда $\psi(x)$ зависит только от $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$, система (3)-(4) редуцируется к краевой задаче на собственные значения для обыкновенных дифференциальных уравнений на полуоси. Эта проблема достаточно хорошо изучена, вопросам

численного исследования модели полярона в сферически-симметричном случае посвящены работы ряда авторов [2-4]. Задача качественно усложняется при переходе к неоднородному случаю. Проблеме поиска сферически-несимметричных решений посвящены работы [5-7].

В данной работе для аппроксимации уравнений (1)-(2) используется подход из [5,6]. Отличие заключается в том, что для решения нелинейной дискретизованной задачи вводится параметризация уравнения по дополнительному непрерывному параметру t [8]. В начальный момент $t = 0$ задача редуцируется к более простой спектральной проблеме для осциллятора, все собственные значения и собственные функции которой могут быть легко найдены. В дальнейшем при движении по непрерывному параметру t мы получаем решение исходной нелинейной задачи (1)-(2). При этом возникает естественная классификация решений, согласованная с классификацией решений по сферическим гармоникам для осциллятора. Предлагаемый метод позволяет определить соответствующие решения исходной нелинейной задачи (1)-(2), выбирая различные решения начальной осцилляторной задачи.

2. ДИСКРЕТИЗАЦИЯ

Пусть функционал f есть

$$f(\psi, u) = \int_{R^3} (|\nabla\psi|^2 + \frac{1}{8\pi}|\nabla u|^2 - \psi^2 u) dV_x. \quad (5)$$

Тогда система (3)-(4) является уравнением Эйлера для функционала f при дополнительном ограничении на волновую функцию $\int_{R^3} \psi^2(x) dV_x = 1$. Следуя [5], для дискретизации задачи (3)-(4) разложим функции $\psi(x)$ и $u(x)$ по сферическим гармоникам:

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=-k}^k \psi_{kl}(r) Y_{kl}(\theta, \varphi), \quad u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=-k}^k u_{kl}(r) Y_{kl}(\theta, \varphi), \quad (6)$$

где Y_{kl} - тессеральные сферические гармоники [9],

$$Y_{kl}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(2k+1)(k-|l|)!}{\pi(k+|l|)!}} P_k^{|l|}(\cos\theta) e^{il\varphi};$$

$k = 0, 1, 2, \dots; l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm k;$

$P_k^{|l|}$ - присоединенные функции Лежандра первого рода [9], r, θ, φ - переменные полярной системы координат.

Ограничиваясь конечным числом членов K в разложении (6), используя свойства сферических гармоник и подставляя приближенные

значения ψ и u в выражение (5), получим приближение \tilde{f} для функционала f :

$$\begin{aligned} \tilde{f} = & \sum_{k=0}^K \sum_{l=-k}^k \int_0^{\infty} \left(\left(\frac{\partial}{\partial r} \psi_{kl} \right)^2 + \frac{k(k+1)}{r^2} \psi_{kl}^2 \right) r^2 dr + \\ & + \frac{1}{8\pi} \int_0^{\infty} \left(\left(\frac{\partial}{\partial r} u_{kl} \right)^2 + \frac{k(k+1)}{r^2} u_{kl}^2 \right) r^2 dr - \\ & - \sum_{k_1, l_1} \sum_{k_2, l_2} \sum_{k_3, l_3} \int_0^{\infty} W_{k_1 k_2 k_3}^{l_1 l_2 l_3} \psi_{k_1 l_1} \psi_{k_2 l_2} u_{k_3 l_3} r^2 dr, \end{aligned} \quad (7)$$

где коэффициенты $W_{k_1 k_2 k_3}^{l_1 l_2 l_3}$ есть интеграл по единичной сфере от произведения сферических гармоник:

$$W_{k_1 k_2 k_3}^{l_1 l_2 l_3} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{k_1 l_1}(\theta, \varphi) Y_{k_2 l_2}(\theta, \varphi) Y_{k_3 l_3}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (8)$$

Условие нормировки (2) при этом можно записать в виде

$$\sum_{k,l} \int_0^{\infty} \psi_{kl}^2 r^2 dr = 1. \quad (9)$$

Сделаем стандартную замену неизвестных:

$$\psi_{kl} = \frac{\tilde{\psi}_{kl}}{r}, \quad u_{kl} = \frac{\tilde{u}_{kl}}{r} \quad (10)$$

и варьируя (7) при ограничении (9), получаем следующую систему уравнений для функций $\tilde{\psi}_{kl}(r), \tilde{u}_{kl}(r)$:

$$\tilde{\psi}_{kl}'' - \frac{k(k+1)}{r^2} \tilde{\psi}_{kl} + \frac{1}{r} \sum_{k_1, l_1} \sum_{k_2, l_2} W_{k k_1 k_2}^{l l_1 l_2} \tilde{\psi}_{k_1 l_1} \tilde{u}_{k_2 l_2} = \lambda \tilde{\psi}_{kl} \quad (11)$$

$$\tilde{u}_{kl}'' - \frac{k(k+1)}{r^2} \tilde{u}_{kl} + 4\pi \frac{1}{r} \sum_{k_1, l_1} \sum_{k_2, l_2} W_{k k_1 k_2}^{l l_1 l_2} \tilde{\psi}_{k_1 l_1} \tilde{\psi}_{k_2 l_2} = 0, \quad (12)$$

$k = 0, 1, 2, \dots; l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm k.$

Отметим, что приближенную систему уравнений (11)-(12) можно получить непосредственно из (3)-(4) используя метод моментов.

Выберем интервал изменения $r : r \in [0, R]$. Будем предполагать, что R достаточно велико, так что функции $\psi_{kl}(r), \tilde{u}_{kl}(r)$ при $r \geq R$ имеют асимптотическое поведение, которое может быть описано аналитически. Для дискретизации системы (11)-(12) по переменной r выберем равномерную сетку узлов $\{r_i; i = \overline{1, N}\}$ ($r_i = (i-1)h, h = \frac{R}{N-1}$). Используем конечноразностную схему второго порядка точности по шагу

h для аппроксимации уравнений (11)-(12). Пусть $\psi_{kl}^i = \tilde{\psi}_{kl}(r_i)$, $u_{kl}^i = \tilde{u}_{kl}(r_i)$. Итоговая дискретизованная система уравнений имеет вид

$$\frac{\psi_{kl}^{i+1} - 2\psi_{kl}^i + \psi_{kl}^{i-1}}{h^2} - \frac{k(k+1)}{r_i^2} \psi_{kl}^i + \frac{1}{r_i} \sum_{k_1, l_1} \sum_{k_2, l_2} W_{kk_1 k_2}^{l_1 l_2} \psi_{k_1 l_1}^i u_{k_2 l_2}^i = \lambda \psi_{kl}^i \quad (13)$$

$$\frac{u_{kl}^{i+1} - 2u_{kl}^i + u_{kl}^{i-1}}{h^2} - \frac{k(k+1)}{r_i^2} u_{kl}^i + 4\pi \frac{1}{r_i} \sum_{k_1, l_1} \sum_{k_2, l_2} W_{kk_1 k_2}^{l_1 l_2} \psi_{k_1 l_1}^i \psi_{k_2 l_2}^i = 0 \quad (14)$$

$k = 0, 1, 2, \dots; l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm k; i = \overline{2, N-1}$.

Из (10) имеем: $\psi_{kl}^1 = 0, u_{kl}^1 = 0$. Учитывая экспоненциальное убывание функции ψ_{kl} на бесконечности, получим следующее граничное условие для ψ_{kl}^i :

$$\frac{\psi_{kl}^N - \psi_{kl}^{N-2}}{2h} = (-\sqrt{\lambda} + \frac{k}{r_{N-1}}) \psi_{kl}^{N-1} \quad (15)$$

Аналогично для u_{kl}^i имеем:

$$\frac{u_{kl}^N - u_{kl}^{N-2}}{2h} = \frac{k}{r_{N-1}} u_{kl}^{N-1} \quad (16)$$

Используя метод средних для аппроксимации (9), из (10) получаем следующее условие нормировки:

$$\sum_{k,l} \sum_{i=1}^N \alpha_i (\psi_{kl}^i)^2 = 1, \quad (17)$$

где α_i - коэффициенты квадратурной формулы для вычисления интегралов.

Таким образом, для нахождения приближенных решений исходной задачи (1)-(2) мы получили нелинейную систему алгебраических уравнений (13)-(17) относительно неизвестных $\psi_{kl}^i, u_{kl}^i, i = \overline{1, N}$ и спектрального параметра λ .

3. МЕТОД РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИСКРЕТИЗОВАННЫХ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ

Пусть $\vec{\Psi}_i$ есть вектор, составленный из неизвестных ψ_{kl}^i , \vec{U}_i - вектор из компонент u_{kl}^i . Аналогично обозначим $\vec{F}_i = \vec{F}_i(\vec{\Psi}_i, \vec{U}_i)$, $\vec{G}_i = \vec{G}_i(\vec{U}_i)$ векторы, соответствующие нелинейным членам (двойным суммам) в уравнениях (13) и (14). Тогда систему (13)-(14) можно записать в матрично-векторном виде:

$$\frac{\vec{\Psi}_{i+1} - 2\vec{\Psi}_i + \vec{\Psi}_{i-1}}{h^2} + D_i \vec{\Psi}_i + \vec{F}_i(\vec{\Psi}_i, \vec{U}_i) = \lambda \vec{\Psi}_i, \quad (18)$$

$$\frac{\vec{U}_{i+1} - 2\vec{U}_i + \vec{U}_{i-1}}{h^2} + D_i \vec{U}_i + \vec{G}_i(\vec{U}_i) = 0, \quad (19)$$

где $i = \overline{2, N-1}$; D_i - диагональные матрицы с коэффициентами на главной диагонали, зависящими от номера i соответствующей гармоники. Нормировочное условие (17) в новых обозначениях примет вид

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i |\vec{\Psi}_i|^2 - 1 = 0, \quad (20)$$

Граничные условия на левом конце можно записать в виде

$$\vec{\Psi}_1 = 0, \quad (21)$$

$$\vec{U}_1 = 0. \quad (22)$$

Аналогично перепишем граничные условия на правом конце:

$$\frac{\vec{U}_N - \vec{U}_{N-2}}{2h} = B_1 \vec{U}_{N-1}, \quad (23)$$

$$\frac{\vec{\Psi}_N - \vec{\Psi}_{N-2}}{2h} = (-\sqrt{\lambda} E + B_2) \vec{\Psi}_{N-1}, \quad (24)$$

где E - единичная матрица, B_1 и B_2 - диагональные матрицы.

Рассмотрим вспомогательную задачу. Запишем граничное условие на правом конце для волновых функций в виде

$$\vec{\Psi}_N = 0. \quad (24')$$

Тогда система уравнений (18)-(23), (24') также аппроксимирует непрерывную задачу (7)-(12), но с меньшим порядком точности по h . Для решения нелинейной системы (18)-(23), (24') будем использовать метод продолжения по параметру [10]. В уравнениях (18)-(19) введем параметрическую зависимость векторов \vec{F}_i, \vec{G}_i от t ($t \in [0, 1]$) следующим образом:

$$\vec{F}_i(t) = t \vec{F}_i(\vec{\Psi}_i, \vec{U}_i),$$

$$\vec{G}_i(t) = t \vec{G}_i(\vec{U}_i).$$

При такой замене система (18)-(19) трансформируется к следующим уравнениям:

$$\frac{\bar{\Psi}_{i+1} - 2\bar{\Psi}_i + \bar{\Psi}_{i-1}}{h^2} + D_i \bar{\Psi}_i + t \bar{F}_i(\bar{\Psi}_i, \bar{U}_i) = \lambda \bar{\Psi}_i \quad (25)$$

$$\frac{\bar{U}_{i+1} - 2\bar{U}_i + \bar{U}_{i-1}}{h^2} + D_i \bar{U}_i + t \bar{G}_i(\bar{U}_i, \bar{U}_i) = 0, \quad (26)$$

с граничными условиями (21)-(23), (24'). При этом при каждом значении параметра $t \in [0, 1]$ решения $\bar{\Psi}_i, \bar{U}_i, \lambda$ задачи (25)-(26), (20)-(23), (24') будут функциями t . Очевидно, что при $t = 1$ мы имеем исходную систему уравнений (18)-(23), (24'), а при $t = 0$ мы получим более простую не связанную линейную спектральную задачу для каждой гармоники отдельно.

Для нахождения значений функций $\bar{U}(t), \bar{\Psi}(t), \lambda(t)$ при $t = 0$ и при фиксированном орбитальном моменте k_0 решается спектральная задача для одного уравнения:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{k_0(k_0 + 1)}{r_i^2} y_i = \lambda y_i, \quad i = \overline{2, N-1} \quad (27)$$

с граничными условиями:

$$y_1 = 0, \quad (28)$$

$$y_N = 0 \quad (29)$$

и с условием нормировки:

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i^2 = 1. \quad (30)$$

Пусть $\{y_i^*\}, \lambda_i^*$ есть решение задачи (27)-(30). Для фиксированного номера $l_0: -k_0 \leq l_0 \leq k_0$ положим

$$\psi_{ki}^*(t)|_{t=0} = \begin{cases} y_i^*/\sqrt{2}, & l = l_0, k = k_0 \\ y_i^*/\sqrt{2}, & l = -l_0, k = k_0 \\ 0, & l \neq l_0 \\ 0, & k \neq k_0 \end{cases} \quad (31)$$

Этот случай соответствует действительным четным по углу φ начальным приближениям. Случай, когда начальное приближение определяется по формуле

$$\psi_{ki}^*(t)|_{t=0} = \begin{cases} y_i^*/\sqrt{2}, & l = l_0, k = k_0, \\ -y_i^*/\sqrt{2}, & l = -l_0, k = k_0, \\ 0, & l \neq l_0, \\ 0, & k \neq k_0, \end{cases} \quad (32)$$

соответствует нечетным по φ начальным приближениям. Соответственно $\lambda(t) = \lambda^*$ при $t = 0$.

Таким образом для каждого $t \in [0, 1]$ мы получили нелинейную краевую задачу с начальными условиями при $t = 0$. Введем дискретизацию по $t: \{t_j; j = \overline{0, M}\} (t_0 = 0, t_M = 1)$. Зная решение задачи $\psi_{ki}(t_j), u_{ki}(t_j), \lambda(t_j)$ для определения решения задачи (27)-(30) в узле t_{j+1} используют метод Ньютона. При этом предполагается, что разность $|t_{j+1} - t_j|$ достаточно мала, и мы имеем хорошее начальное приближение для метода Ньютона.

Пусть $\bar{\Psi}_i^m$ есть вектор с компонентами ψ_{ki}^i на m -ом шаге ньютоновского итерационного процесса; соответственно \bar{U}_i^m - вектор из компонент u_{ki}^i . Тогда для векторов поправок $\delta \bar{\Psi}_i^m = \bar{\Psi}_i^{m+1} - \bar{\Psi}_i^m, \delta \bar{U}_i^m = \bar{U}_i^{m+1} - \bar{U}_i^m$ имеем следующую краевую задачу:

$$\frac{\delta \bar{\Psi}_{i+1}^m - 2\delta \bar{\Psi}_i^m + \delta \bar{\Psi}_{i-1}^m}{h^2} + D_i \delta \bar{\Psi}_i^m + A_{11}(\bar{u}_i^m) \delta \bar{\Psi}_i^m + A_{22}(\bar{\Psi}_i^m) \delta \bar{U}_i^m - \lambda_m \delta \bar{\Psi}_i^m +$$

$$+ \delta \lambda_m \bar{\Psi}_i^m = - \left(\frac{\bar{\Psi}_{i-1}^m - 2\bar{\Psi}_i^m + \bar{\Psi}_{i+1}^m}{h^2} + D_i \bar{\Psi}_i^m + \bar{F}_i(\bar{\Psi}_i^m, \bar{U}_i^m) - \lambda_m \bar{\Psi}_i^m \right),$$

$$\frac{\delta \bar{U}_{i+1}^m - 2\delta \bar{U}_i^m + \delta \bar{U}_{i-1}^m}{h^2} + D_i \delta \bar{U}_i^m + A_{21}(\bar{U}_i^m) \delta \bar{\Psi}_i^m + A_{22}(\bar{U}_i^m) \delta \bar{U}_i^m =$$

$$= - \left(\frac{\bar{U}_{i-1}^m - 2\bar{U}_i^m + \bar{U}_{i+1}^m}{h^2} + D_i \bar{U}_i^m + \bar{G}_i(\bar{U}_i^m, \bar{U}_i^m) \right),$$

где $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}$ есть дифференциальные операторы для функций F и G , представляющих нелинейные (квадратичные по неизвестным) части в уравнениях (18)-(19). Граничные условия при этом приобретут следующий вид:

$$\begin{aligned} \delta \bar{\Psi}_0^m &= 0, & \delta \bar{\Psi}_N^m &= 0, \\ \delta \bar{U}_0^m &= 0, & \delta \bar{U}_N^m &= 0. \end{aligned}$$

Для определения $\delta \lambda_m$ имеем уравнение

$$(\delta \bar{\Psi}^m, \bar{\Psi}^m) = 0.$$

Для решения этой краевой задачи использовался метод матричной прогонки [11]. Найденные решения $\{\bar{\Psi}_i^*(t_M), \bar{U}_i^*(t_M)\}, \lambda^*(t_M)$ использовались в качестве начального приближения для ньютоновского итерационного процесса, примененного для решения задачи (18)-(23) с ненулевыми краевыми условиями (24). Начальные приближения $\{y_i^*\}, \lambda^*$ из (27)-(30) находились с помощью метода Ньютона с исключением найденных корней [12].

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

На основе изложенной в параграфах 2,3 методики создан комплекс фортрановских программ для расчета трехмерных собственных функций и собственных значений в модели полярона. Данный комплекс позволяет находить как сферически-симметричные решения и решения, имеющие осевую симметрию, так и существенно трехмерные состояния.

Расчеты проводились на ЭВМ SUN и CONVEX-220. Число неизвестных варьировалось в зависимости от количества учитываемых членов в разложении (6) в диапазоне от 1800 до 168000. Время центрального процессора на ЭВМ CONVEX-220, необходимое для решения нелинейной дискретизованной задачи, менялось в интервале от нескольких десятков секунд до 15 часов в зависимости от количества неизвестных.

Предложенный метод решения нелинейной проблемы с введением параметризации позволяет вести классификацию найденных решений согласно диаграмме, изображенной на рисунке 1. Первый класс решений получается, когда мы в качестве начального приближения для параметрической задачи в (31) берем вершину пирамиды, т.е. при орбитальном моменте $k_0 = 0$ и $l_0 = 0$. В зависимости от количества нулей в начальном приближении y^* мы получаем целый спектр решений. Этот случай соответствует сферически-симметричным решениям задачи полярона. Обозначим этот класс решений Ω_{00} . Далее, в зависимости от выбора k_0, l_0 из пирамиды на рис.1 и приближений из (31) или (32), мы получаем классы решений $\Omega_{k_0 l_0}^c, \Omega_{k_0 l_0}^s$. Случай $l_0 = 0$ соответствует осевой симметрии задачи.

Отметим, что выбор начального приближения для параметрической задачи допускает некоторый произвол. Пусть $\{\beta_i, i = 0, k_0; \gamma_i, i = 1, k_0\}$ есть набор некоторых констант, удовлетворяющих следующим условиям:

$$\gamma_0^2 + \sum_{j=1}^{k_0} (\gamma_j^2 + \beta_j^2) = 1,$$

тогда в качестве начальных приближений для параметрической задачи можно взять следующий набор:

$$\psi_{kl}^i(t)|_{t=0} = \begin{cases} \gamma_0 y_i^*, & l = 0, k = k_0, \\ (\gamma_l + \beta_l) y_i^*, & l > 0, k = k_0, \\ (\gamma_l - \beta_l) y_i^*, & l < 0, k = k_0, \\ 0, & k \neq k_0. \end{cases} \quad (33)$$

Однако использование начальных приближений для параметрической задачи из (33) в практических расчетах приводило к решениям одного из классов Ω_{kl} , определенных ранее.

Ввиду того, что непрерывная задача определена на полуоси: $r \in [0, +\infty)$, решение дискретизованной задачи зависит от длины отрезка интегрирования R . В таблице 1 приведена зависимость найденных собственных значений λ от величины R для i -го решения в классах $\Omega_{10}, \Omega_{21}, \Omega_{00}$. Как видно из таблицы, для основного состояния происходит быстрая сходимость спектрального параметра λ по величине R . С другой стороны, для следующих собственных значений необходимо проводить расчеты на большем интервале, чтобы получить достоверные значения искомых величин.

В таблице 2 приводится сравнительная характеристика найденных собственных значений λ в зависимости от шага дискретизации h при фиксированном значении R . В этой же таблице приведены разностные отношения

$$\sigma = \frac{\lambda_h - \lambda_{h/2}}{\lambda_{h/2} - \lambda_{h/4}},$$

вычисленные по правилу Рунге. Анализ результатов, приведенных в таблице, показывает, что при использовании изложенной выше методики мы имеем квадратичную сходимость решения по шагу h разностной сетки.

В таблице 3 представлены результаты расчетов в зависимости от числа членов в разложении (6) для четных по углу φ решений. Как видно из таблицы, для близких к основному состоянию собственных мод имеет место быстрое насыщение по числу гармоник, а для низкоэнергетических состояний имеет место динамика результатов в зависимости от числа используемых в разложении гармоник. Для того, чтобы получить достоверные результаты в последнем случае, необходимо увеличить число учитываемых в разложении (6) членов. Однако это приводит к резкому увеличению сложности задачи, повышенным запросам к оперативной, дисковой памяти и производительности используемой для расчетов ЭВМ. Если оперативная (дисковая) память растет квадратично в зависимости от числа используемых гармоник, то число операций, необходимых для проведения расчетов, растет кубически. Одним из возможных способов уменьшения требований к ресурсам и производительности ЭВМ может быть разработка параллельных алгоритмов решения задачи и использование ЭВМ с векторной или распределенной архитектурой. В таблице 3 также приводится сравнение результатов с расчетами, проведенными в работе [5]. Как видно из таблицы, имеет место хорошее согласие полученных результатов для высокоэнергетических состояний.

Предлагаемый итерационный метод решения нелинейной дискретизованной проблемы с введением искусственной параметризации задачи

Таблица 1. Сходимость собственных значений λ_r по правой границе сетки R

Соб.зн.	Класс	R, λ	R, λ	R, λ	R, λ
λ_0	Ω_{10}	$R=30$ 0.0324495	$R=60$ 0.0274252	$R=100$ 0.0270540	$R=200$ 0.0270540
λ_1	Ω_{10}	$R=100$ 0.0101424	$R=200$ 0.00879965	$R=300$ 0.00879906	$R=400$ 0.00879906
λ_2	Ω_{10}	$R=200$ 0.00501009	$R=320$ 0.00432531	$R=480$ 0.00431568	$R=600$ 0.00431568
λ_3	Ω_{10}	-	$R=480$ 0.00297998	$R=640$ 0.00255441	$R=800$ 0.00255440
λ_0	Ω_{21}	$R=30$ 0.0179359	$R=90$ 0.0151350	$R=200$ 0.0148978	$R=400$ 0.0148973
λ_3	Ω_{00}	$R=320$ 0.00355768	$R=480$ 0.00337391	$R=600$ 0.00337386	$R=800$ 0.00337386

Таблица 2. Сходимость собственных значений λ_h по шагу разностной сетки h

Собст.знач.	Класс	h	$h/2$	$h/4$	σ
λ_{0h}	Ω_{00}	0.0814261702	0.0813949843	0.0813871983	4.0054
λ_{1h}	Ω_{10}	0.0879965121	0.0879908039	0.0879893772	4.0009
λ_{0h}	Ω_{21}	0.0148977932	0.0148970803	0.0148969020	4.0075

Таблица 3. Собственные значения λ в зависимости от числа гармоник $K = k_0$ и их сравнение с результатами работы [5]

Собст.знач.	Класс	$K = 1$	$K = 3$	$K = 5$	[5]
λ_0	Ω_{00}	0.08139	0.08139	0.08139	0.0814
λ_1	Ω_{00}	0.01540	0.01540	0.01540	0.0154
λ_2	Ω_{00}	0.00626	0.00626	0.00626	0.0062
λ_3	Ω_{00}	0.00337	0.00337	0.00337	-
λ_0	Ω_{10}	0.02705	0.03392	0.03443	0.0343
λ_1	Ω_{10}	0.00880	0.00833	0.01327	0.0126
λ_2	Ω_{10}	0.00432	0.00407	0.00415	-
λ_3	Ω_{10}	0.00255	0.00263	0.00276	-
λ_0	Ω_{21}	-	0.01490	0.01642	0.0159
λ_1	Ω_{21}	-	0.00618	0.00573	-
λ_2	Ω_{21}	-	0.00342	-	-

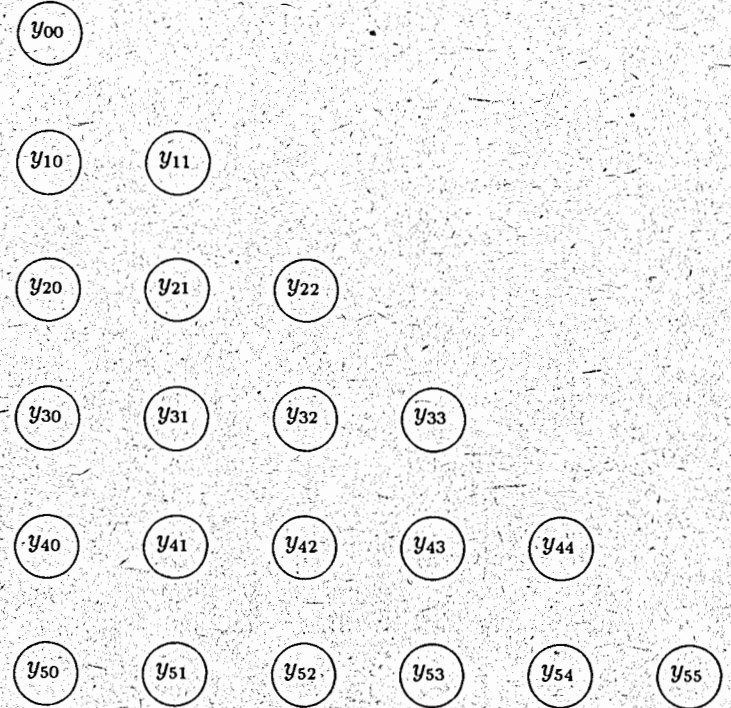


Рис.1 Расположение решений в соответствии с нумерацией сферических гармоник для $k_0 = 5$.

может быть использован и для нахождения собственных состояний в модели полярона с конечной константой связи [13].

Представленное исследование было поддержано Российским фондом фундаментальных исследований, грант N94 - 01 - 01119.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. М.: Гостехиздат, 1951.
2. Амирханов И.В. и др. Препринт НЦБИ АН СССР, Пущино, 1988.
3. Амирханов И.В. и др. Препринт НЦБИ АН СССР, Пущино, 1990.
4. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П. Сообщения ОИЯИ, P-11-91-139, Дубна, 1991.
5. Габдуллин Р.Р. Препринт НЦБИ АН СССР, Пущино, 1991.
6. Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V. Preprint of JINR, E-11-92-205, Dubna, 1992.
7. Габдуллин Р.Р. - ДАН России, 1993, т.333, 1, с.23.
8. Ортега Дж. Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными, М: Мир, 1975.
9. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров, М.: Наука, 1970.
10. Давиденко Д.Ф. - Укр.Матем.Журнал, 1955, 7, 1, с.18.
11. Самарский А.А. Теория разностных схем, М.: Наука, 1977.
12. Акишин П.Г., Пузынин И.В. Сообщения ОИЯИ, 5-10992, Дубна, 1977.
13. Luttinger J.M., Lu C.Y. - Phys.Rev.B, v.21, 10, pp.4251.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 ноября 1994 года.