СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

96-130

Р11-96-130

В.И.Кочкин

ПРОГРАММА НА ЯЗЫКЕ ФОРТРАН ВЫЧИСЛЕНИЯ ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ ПОВЕРХНОСТНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ СИСТЕМ ТИПА $ZH\mu$

1996

ВВЕДЕНИЕ

Решение уравнения Шредингера для волновой функции многих переменных было и остается актуальной задачей вычислительной математики и математической физики, к ней также относится и кулоновская задача трех тел квантовой механики.

Существенный прогресс в решении задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, был достигнут, начиная с 1968 года, работой И.Масека [1], в которой был предложен метод поверхностных функций. Этот метод успешно продолжает применяться в последние годы многими авторами [$2 \div 7$] во многих научных центрах.

На его основе с 1991 года в ЛТФ ОИЯИ были предприняты расчеты трехчастичных систем, имеющих приложения в экспериментальных исследованиях, были разработаны алгоритмы и создан ряд программ для ЭВМ, с помощью которых было решено несколько методических и практических вычислительных задач в проблеме малочастичных систем.

Представляемая здесь программа РС9 на алгоритмическом языке ФОРТРАН выполнена на основе работ [9,10], где содержится вариационный метод расчета поверхностных функций в проблеме их построения в случае систем $ZH\mu$, где Z есть легкое ядро с зарядом Z, H — одно из ядер p, d, t и μ есть μ–мезон.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Уравнение Шредингера системы трех заряженных частиц может быть записано в виде [9]

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu_2}\Delta\rho_3 - \frac{h^2}{2\mu_1}\Delta r_3 + e^2\sum_{i\neq j}\frac{Z_iZ_j}{r_{ij}} - E\right)\Psi = 0\ . \tag{1}$$

Используя координаты Якоби, запишем

$$\bar{x}_i = \sqrt{\frac{m_jm_k}{m_1(m_j+m_k)}}\cdot\left(\bar{r}_k - \bar{r}_j\right)\ , \tag{2}$$

$$\bar{y}_i = \sqrt{\frac{m_i(m_j+m_k)}{m_1(m_1+m_2+m_3)}} \cdot \left(\bar{r}_i - \frac{m_j\bar{r}_j + m_k\bar{r}_k}{m_j+m_k}\right) \quad , \qquad (i\ j\ k)$$

тогда уравнение (1) примет вид

$$\left(-\Delta\bar{x}_i - \Delta\bar{y}_i + \sum_{m=1}^{3} \frac{q_m}{|\ \bar{x}_m\ |} - E\right)\Psi = 0 \quad , \tag{3}$$

где

$$q_i = 2Z_jZ_k\sqrt{\frac{m_jm_k}{m_1(m_j+m_k)}} \, .$$

m_i, Z_i, $\bar{r}_i$ есть масса, заряд и радиус–вектор i-й частицы,

$$i = 1,\ 2,\ 3\ ; \quad \mu_1 = \frac{m_3\,(m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}\ ; \quad \mu_2 = \frac{m_1\ m_2}{m_1 + m_2}\, . \tag{4}$$

Различные наборы гиперуглов связаны соотношениями

$$\cos\ \alpha_i = \cos\ \alpha_j \cdot \cos\ \omega_k + \sin\ \alpha_j \cdot \sin\ \omega_k \cdot \cos\ \theta_j\ ,$$

$$\sin\ \alpha_i \cdot \cos\ \theta_i = \sin\ \alpha_j \cdot \cos\ \omega_k \cdot \cos\ \theta_j - \cos\ \alpha_j \cdot \sin\ \omega_k\ .$$

Использованы единицы энергии, длины и массы:

$$E_0 = \frac{\tilde{m}e^4}{2h^2}\ , \quad L_0 = \frac{h^2}{\tilde{m}e^2}\ , \quad \tilde{m} = m_1\ .$$

В гиперсферических координатах ρ , α_i , θ_i

$$|\ \bar{x}_i\ | = \rho \cdot \cos\frac{\alpha_i}{2}; \quad |\ \bar{y}_i\ | = \rho \cdot \sin\frac{\alpha_i}{2}; \quad \cos\theta_i = \frac{(x_iy_i)}{|\ x_i\ | \cdot |\ y_i\ |} \tag{5}$$

уравнение (3) будет иметь вид

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{4}{\rho^2}\,\Box + \frac{1}{\rho}\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos\left(\frac{\alpha_m}{2}\right)} + \frac{2L(L+1)}{\rho^2\cos^2\frac{\alpha_1}{2}} - E\right]\Psi_L = 0\ , \tag{6}$$

$$0 < \rho < \infty\ ; \quad 0 \le \alpha_i\ ; \quad \theta_i \le \pi\ , \tag{7}$$

$$\Box = \frac{1}{\sin^2\alpha} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\, . \tag{8}$$

Уравнение (6) и использованные при его выводе приближения обсуждены в [8].

ПЛАН РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Решение уравнения (6) в соответствии с методом "поверхностных" гиперсферических функций находится в два этапа.

1). Сначала решается уравнение для поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$, где ρ есть параметр из области (7) его значений, имеющее вид

$$\left(\Box - \frac{\rho}{4}\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos\frac{\alpha_m}{2}} - \frac{L(L+1)}{2\cos^2\frac{\alpha_1}{2}} + \lambda_n(\rho)\right)\varphi_n(\rho,\Omega) = 0\ , \tag{9}$$

$$\rho = const\ ; \quad 0 < \rho < \infty\ ; \quad 0 \le \alpha_i\ , \quad \theta_i \le \pi\ ; \tag{10}$$

$$\varphi_n\,(0) = \varphi_n\,(\infty) = 0\ . \tag{11}$$

Собственные значения $\lambda_n\ (\rho)$ играют роль термов.

Как предложено в [10,11], решение уравнения (9) будем искать вариационным способом в виде

$$\varphi_n\ (\rho,\ \alpha,\ \theta) = \sum_{k=1}^{N} C_k^{(n)} \cdot \chi_k\ (\alpha,\ \theta)\ , \tag{12}$$

где $\chi_k\ (\alpha,\ \theta)$ — заданные пробные функции, $C_k^{(n)}$ — неизвестные числовые коэффициенты, определяемые в вариационном методе посредством решения обобщенной алгебраической задачи, к которой сводится решение уравнения (9), как собственные векторы при решении уравнения (19) (см. ниже).

Таким образом, для каждого значения ρ как параметра имеем систему поверхностных функций $\varphi_n\ (\rho,\ \Omega)$ и термов $\lambda_n\ (\rho)$.

Ясно, что собственные энергии, или термы, и собственные векторы $C_i^{(n)}$, будучи вычислены однажды для какой–либо конкретной квантовомеханической системы трех тел, могут использоваться в различных физических расчетах для других целей, но прежде всего для нахождения общего решения уравнения Шредингера (6) в конкретной задаче.

2). На втором этапе решение уравнения (6) представляется в виде

$$\Psi_L\ (\rho,\ \Omega) = \rho^{-\frac{5}{2}} \sum_{n=1}^{N} U_n\ (\rho) \cdot \varphi_n\ (\rho,\ \Omega)\ . \tag{13}$$

Для определения неизвестных радиальных функций $U_n(\rho)$ получаем бесконечную систему дифференциальных уравнений. Беря конечное число уравнений, имеем

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{15}{4\rho^2}-\varepsilon_n(\rho)+E\right]U_n(\rho)+\sum_{i=1}^{n}\left[Q_{ni}\frac{d}{d\rho}+\frac{d}{d\rho}Q_{ni}-P_{ni}\right]U_i(\rho)=0\,, \quad (14)$$

$$n=1,2,\cdots,N\,;$$

$$\varepsilon_n(\rho) = \frac{4}{\rho^2}\lambda_n(\rho)\,;\quad Q_{ni}(\rho) = <\varphi_n \mid \frac{\partial}{\partial\rho}\varphi_i>\,; \quad (15)$$

$$P_{ni} = <\frac{\partial}{\partial\rho}\varphi_n \mid \frac{\partial}{\partial\rho}\varphi_i>\,.$$

Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (14) в случае, например, граничных условий

$$U_i(0) = U_i(\infty) = 0 \quad (16)$$

является содержанием второго этапа при решении уравнения (6), представляет из себя самостоятельную задачу вычислительной математики и здесь не рассматривается, но все необходимые для ее решения исходные данные программа PC9 готовит.

ОСНОВА ПРОГРАММЫ PC9: РАСЧЕТНЫЕ ФОРМУЛЫ; БЛОК-СХЕМА ПРОГРАММЫ.

Программа PC9 работает на первом этапе решения уравнения (6) методом поверхностных функций и для каждого значения ρ в зависимости от размерности N базиса в (12) строит ровно N таких функций.

Итак, при фиксированном ρ имеем уравнение на гиперсфере

$$\left(\Box-\frac{1}{4}\rho\sum_{m=1}^{3}q_m U^{(m)}-W-\lambda_n\right)\varphi_n=0\,, \quad (17)$$

$$U^{(m)} = \left(\cos\frac{\alpha_m}{2}\right)^{-1},\quad \lambda_n = \frac{\rho^2}{4}\varepsilon_n(\rho)\,; \quad (18)$$

$$W = \frac{L(L+1)}{2\cos^2\frac{\alpha_1}{2}}\,.$$

Ограничиваясь конечным базисом в (12), получаем систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^{N}\left(D_{ki}-\frac{\rho}{4}\sum_{m=1}^{3}q_m U_{ki}^{(m)}-W_{ki}+\lambda_n S_{ki}\right)C_i^{(n)} = 0\,, \quad (19)$$

$$S_{ki} =<\chi_k \mid \chi_i>,\quad D_{ki} =<\chi_k \mid \Box \mid \chi_i>; \quad (20)$$

$$U_{ki}^{(m)} =<\chi_k \mid U^{(m)} \mid \chi_i>;\quad W_{ki} =<\chi_k \mid \frac{1}{\cos^2\frac{\alpha_1}{2}} \mid \chi_i>$$

или в матричном виде

$$(D-U-W+\lambda\hat{S}) = 0\,, \quad (21)$$

$$D = (D_{ki})\,;\quad U = (\sum_{m=1}^{3}U_{ki}^{(m)})\,; \quad (22)$$

$$W = (W_{ki})\,;\quad \hat{S} = (S_{ki})\,.$$

Обозначая

$$A = D-U-W\,;\quad \hat{S} = -S\,, \quad (23)$$

получаем обобщенную алгебраическую задачу на собственные значения

$$A\,\bar{c} = \lambda\,S\,\bar{c}\,. \quad (24)$$

Систему (24) решаем одним из известных методов с помощью стандартных подпрограмм QTV (EQZQF, EQZTF, EQZVF) из библиотеки ст.п/п IMSL [13].

Матрицы в уравнениях (21), (24) являются действительными и симметричными.

Символическая запись в выражениях (20) расписывается в виде многомерных интегралов, которые находятся численно с помощью ст.п/п DSIMPS [14] с двойной машинной точностью и с относительной точностью в программе $\varepsilon_{отн.} = 10^{-8}$. Так, матричные элементы S_{ki}, D_{ki} записываются в обычной математической нотации:

$$S_{ki} = \int_0^{\pi}\sin^2\alpha d\alpha\int_{-1}^{1}dx\chi_k(\alpha,\,x)\,\chi_i(\alpha,\,x)\,; \quad (25)$$

$$D_{ki} = -\int_0^{\pi}d\alpha\int_{-1}^{1}dx\left[sin^2\alpha\frac{\partial\chi_k}{\partial\alpha}\cdot\frac{\partial\chi_i}{\partial\alpha}+(1-x^2)\frac{\partial\chi_k}{\partial x}\cdot\frac{\partial\chi_i}{\partial x}\right]$$

и т.п.

Отметим, что величины P_{ni}, Q_{ni} вычисляются в соответствии с предложенным в [10] методом:

$$Q_{ni} = -\frac{1}{4}(\lambda_i - \lambda_n)^{-1} V_{ni} ; \qquad (26)$$

$$P_{ni} = -Q_{ni}^2 , \qquad (27)$$

где

$$V_{ni} = < \varphi_n \mid \sum_{m=1}^{3} \frac{q_m}{\cos\frac{\alpha_m}{2}} \mid \varphi_i > . \qquad (28)$$

В качестве набора пробных функций использован набор, обеспечивающий правильное асимптотическое поведение решения при $\rho \rightarrow 0$ и $\rho \rightarrow \infty$:

а) $\chi_i = \Phi^{(3)}_{n_i l_i}(\alpha_3) \cdot P_{l_i}(\cos\theta_3)$, $1 \leq i \leq N_1$;

б) $\chi_i = \Phi^{(2)}_{n_i l_i}(\alpha_2) \cdot P_{l_i}(\cos\theta_2)$, $N_1 < i \leq N_1 + N_2$; (29)

в) $\chi_i = \sin^{l_i}\alpha_3 \, C^{l_i+1}_{n_i-l_i-1}(\cos\alpha_3) P_{l_i}(\cos\theta_3)$, $N_1 + N_2 < i \leq N$;

$$N = N_1 + N_2 + N_3 , \quad N_1 \leq N_1 + N_2 \leq N .$$

Существенной особенностью является возможность адаптировать набор (29) для различных значений ρ. В формуле (29)

$$\Phi^m_{ne}(\alpha) = \Phi_{ne}\left(\frac{q_m}{n}\rho \cos\frac{\alpha}{2}\right) ,$$

$$\Phi_{ne}(t) = e^{-\frac{t}{2}} \cdot t^l \cdot L^{2l+1}_{n-l-1}(t)$$

и $P_l(x)$, $L^k_m(t)$, $C^m_n(x)$ есть многочлены Лежандра, Лагерра и Гегенбауэра.

Соотношения (17) $\div$ (29) представляют собой основу для программы PC9 расчета поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \alpha, \theta)$ вариационным методом в квантово-механической задаче трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона.

Принципиальная блок–схема программы PC9 представлена на рис. 1. В программе PC9 для $i \leq N_1$, $i \leq N_1 + N_2$ матричные элементы A_{ik}, S_{ik} нелинейно зависят от ρ и для каждого ρ должны вычисляться заново, эти же матричные элементы при $N_1 + N_2 < i \leq N$ имеют линейную зависимость от ρ и могут быть вычислены заранее и использоваться в конкретном расчете при всех ρ.

Многочлены Лежандра, Лагерра, Гегенбауэра вычисляются с помощью подпрограмм–функций с идентификаторами ALGN , PLAG , CGEG по рекуррентным формулам.

Индексы n_i, l_i, зависящие от i, вычисляются предварительно с помощью п/п INDEX.

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ РАБОТЫ С ПРОГРАММОЙ РС9 И НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ СЧЕТА

Для расчета должны быть заданы:

1. Массы частиц m_1, m_2, m_3; их заряды Z_1, Z_2, Z_3;
2. Целые числа N_1, N_2, N_3; причем, если n_1, n_2, n_3 — число пробных функций вида а, б, в, то $N_1 = n_1$, $N_2 = n_1 + n_2$ и $N_3 = N_2 + n$;
3. Параметры цикла по ρ и ρ_0;
4. Относительная точность вычисления интегралов по ст.п/п DSIMPS REPS = 10^{-8}.

Для различных интервалов ρ использовались такие комбинации (n_1, n_2, n_3):

$$\begin{array}{rcl}
\rho \le 5\ , & & (1,\ 1,\ 105)\ , \\
5 < \rho \le 15\ , & & (3,\ 3,\ 105)\ , \\
15 < \rho\ , & & (6,\ 6,\ 78)\ .
\end{array}$$

Использовались массы:

$$\begin{array}{lcl}
m_\mu & = & 206.769\ m_e\ , \\
m_d & = & 3670.481\ m_e\ , \\
m^4He & = & 7294.295\ m_e\ , \\
m_3He & = & 5495.881\ m_e\ , \\
m_p & = & 1836.151\ m_e\ .
\end{array}$$

По программе РС9 вычислены потенциальные кривые для систем $dt\mu$, $\alpha d\mu$, $^3He d\mu$, $\alpha p\mu$, $^3He p\mu$, e^+H, H^-. Выполнены расчеты энергий связи и вероятностей безызлучательного распада $Hed\mu$ — молекулярных ионов; процессов радиационного распада $HeH\mu$ — молекулярных ионов; дипольных моментов для молекул $^{3,4}Hed\mu$, $^{3,4}Hep\mu$ [8 ÷ 10, 12].

Программа РС9 занимает 450 килобайт памяти и находит значения потенциальных кривых для одного значения ρ при $L = 0, 1, 2$ за 100 – 550 с, на ЭВМ CONVEX 220 та же программа считает в пять раз быстрее. Программа написана на подмножестве языка ФОРТРАН, совместимом с языком ФОРТРАН для ЕС системы и для системы UNIX ЭВМ CONVEX как объектно–ориентированный модуль.

В заключение автор сообщения выражает благодарность с.н.с. ЛТФ ОИЯИ Картавцеву О.И. за неоценимую помощь и участие в процессе

построения алгоритма программы, проф. Беляеву В.Б. за постоянную поддержку всей работы, дирекции ЛВТА ОИЯИ за внимание к работе и предоставление всех необходимых ресурсов и условий для отладки программы и производственного счета по программе, а также группе консультации для пользователей ЭВМ в ЛВТА, группе операторов и инженеров вычислительного центра ЛВТА ОИЯИ.

БЛОК–СХЕМА ПРОГРАММЫ PC9

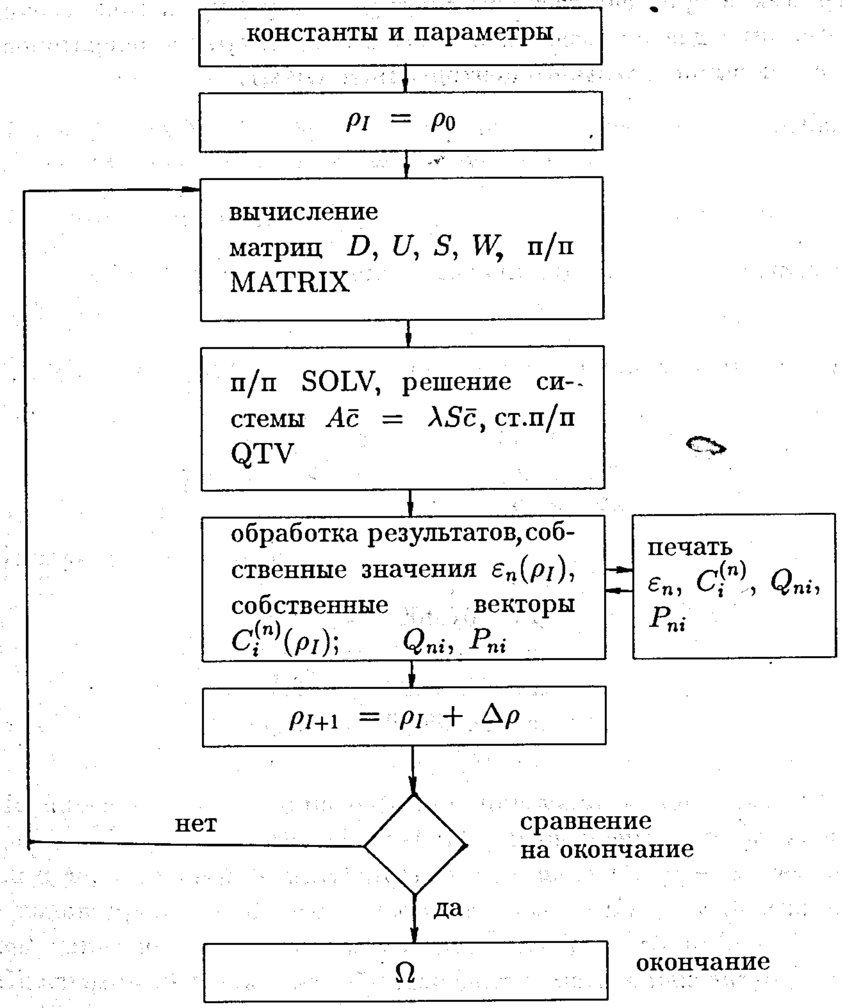

Рис. 1

ЛИТЕРАТУРА

1. J.H.Macek, J.Phys. b 1, 831 (1968).
2. C.D.Lin, Adv. At. Mol. Phys. 22, 77 (1986).
3. B.J.Archer, G.A.Parker, and R.T.Pack, Phys. Rew. A. 41. 1303 (1990).
4. V.V.Gusev at al., Few Body Syst. 9, 137 (1990).
5. V.B.Belyaev at al., Few Body Syst. Suppl. 6, 332 (1992).
6. S.S.Gershtein and V.V.Gusev, Hyperfine Int. 82, 185 (1993).
7. A.V.Kravtsov at al., Hyperfine Int. 82, 205 (1993).
8. V.B.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin and E.A.Kolganova. Phys. Rew. A, 52, 1765 (1995).
   То же ОИЯИ, E4-94-414, Дубна, 1994.
9. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И., ОИЯИ, Р4-92-297, Дубна, 1992.
10. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И., ОИЯИ, Р4-93-460, Дубна, 1993.
11. V.B.Belyaev at al., Phys. Rew., v 53, N 2, Febryary, 1996.
12. V.B.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kolganova, Internation symposium on muon catalyzed fusion, Dubna, June 19-24, 1995. Book of abstracts, JINR, Dubna, 1995, p. 69.
13. IMSL LCD-0007, Library contents document, Houston, Texas, 1979, January.
14. Бобылева Л.В., Лукстиня Л.А., Федорова Р.Н., Широкова А.И. Информационно–справочная система для библиотеки программ на ФОРТРАНЕ. ОИЯИ, Дубна, 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 апреля 1996 года.