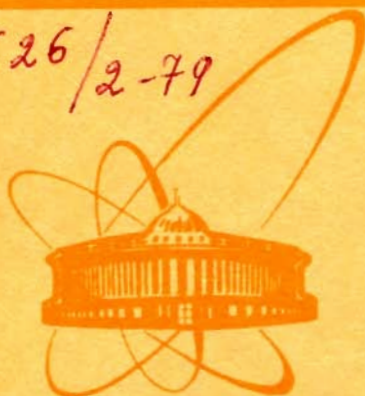


5526/2-79



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

K-289

29/12-79
P4-12671

М. Касчиев, В. С. Мележик

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА
С ПОМОЩЬЮ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА
МЕТОДА НЬЮТОНА
И МЕТОДА ОБРАТНОЙ ИТЕРАЦИИ
В ПОДПРОСТРАНСТВЕ

1979

P4 -12671

М.Касчиев, В.С.Мележик

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА
С ПОМОЩЬЮ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА
МЕТОДА НЬЮТОНА
И МЕТОДА ОБРАТНОЙ ИТЕРАЦИИ
В ПОДПРОСТРАНСТВЕ

Касчиев М., Мележик В.С.

P4 - 12671

Вычисление уровней энергии μ - мезомолекул изотопов водорода с помощью непрерывного аналога метода Ньютона и метода обратной итерации в подпространстве

В адиабатическом представлении задачи трех тел вычислены все 22 уровня энергии μ - мезомолекул изотопов водорода и энергии связи системы в приближении двух и восьми уравнений. Эти результаты получены численным решением задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с помощью двух вычислительных схем: непрерывного аналога метода Ньютона и метода обратной итерации в подпространстве. Показана численная устойчивость алгоритмов во всей области дискретного спектра, включая границу континуума, а также проведен взаимный контроль точности вычислительных схем. Все уровни энергии μ - мезомолекул сравниваются в таблицах. Для мезомолекулы $d\mu$ в состояниях с квантовыми числами J 1.v 0 и J 1.v 1 и энергиями $\epsilon_{10} = 231, 370786$ и $\epsilon_{11} = -0,117342$ соответственно даны таблицы волновых функций.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Kaschiev M., Melezhik V.S.

P4 - 12671

Calculation of Energy Levels of μ - Mesic Molecules of Hydrogen Isotopes Using a Continuous Analog of Newton's Method and Subspace Iteration Method

All 22 binding energies of μ - mesic molecules of hydrogen isotopes are calculated in the adiabatic representation in the approximation of two and eight equations. These results are obtained by numerical solution of the Sturm-Liouville problem for the system of ordinary differential equations of the second order with the help of two computational algorithms—a continuous analog of Newton's method and subspace iteration method. The computational stability of these algorithms is shown in all the region of discrete spectrum, the boundary of continuous spectrum included, and mutual control precision of two computational schemes has been carried out. For mesic molecules in $d\mu$ states with quantum numbers J 1.v 0 and J 1.v 1 and energies $\epsilon_{10} = 231.370786$ and $\epsilon_{11} = -0.117342$ tables of wave functions are given.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1979

I. Введение

Для количественного описания процесса резонансного образования мезомолекул $d d \mu$ и $d t \mu$ необходимо знать их уровни энергии и волновые функции с высокой точностью^{/1/}. Нужная точность вычислений составляет $10^{-5}-10^{-6}$ м.а.е.^{x)}

Резонансный характер образования μ -мезомолекул определяется наличием в них высоковозбужденных слабосвязанных уровней (величина уровня $\sim 10^{-5}$ от глубины эффективных потенциалов). В настоящее время эти состояния вычисляются в адиабатическом представлении задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона^{/2/}.

Задача о нахождении уровня энергии и волновой функции μ -мезомолекулы в адиабатическом представлении сводится к решению задачи на собственные значения для системы интегро-дифференциальных уравнений:

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + E - V_{ij}(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{i+j}^{\infty} \left\{ Q_{ij}(R) \frac{d}{dR} + V_{ij}(R) \right\} \chi_j(R) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\chi_i(0) = \chi_i(\infty) = 0, \quad (2)$$

где \sum_j - суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру, $\sum_j = \sum_{i_1} (\sum_{i_2} + \int d\kappa)$.

$$V_{ij}(R) = U_{ij}(R) + \frac{d}{dR} Q_{ij}(R),$$

$$U_{ij}(R) = U_{ji}(R), \quad (3)$$

$$Q_{ij}(R) = -Q_{ji}(R).$$

x) м.а.е. - мезоатомная единица энергии, равная 5626.33 эВ.

Способы построения эффективных потенциалов $U = \{U_{ij}(R)\}$, $Q = \{Q_{ij}(R)\}$ и их структура подробно рассмотрены в ^{3/}. Эти матричные элементы для дискретного и непрерывного спектров задачи двух кулоновских центров вычислены с точностью 10^{-7} в ^{4/}.

Задача (I)-(2) решается следующим образом: бесконечная система (I) аппроксимируется конечной, полубесконечный интервал $[0, \infty)$ заменяется конечным $[0, R_m]$ и полученная система решается численно. Проблемы, связанные с аппроксимацией задачи, частично решены в ^{2/}, где достигнутая точность вычисления собственных значений и собственных функций составляет 10^{-4} м.а.е.

В данной работе рассмотрены две вычислительные схемы решения системы (I) для конечного числа уравнений на отрезке $[0, R_m]$, использующие одинаковую разностную сетку. Целью работы является численное исследование устойчивости предложенных методов для вычисления уровней энергии, находящихся вблизи границы непрерывного спектра, а также взаимный контроль полученных результатов.

2. Постановка задачи и методы решения

Система (I)-(2) для конечного числа уравнений имеет вид

$$\sum_{j=1}^n \left\{ \delta_{ij} \frac{d^2}{dR^2} - 2 Q_{ij}(R) \frac{d}{dR} + [\delta_{ij} E - V_{ij}(R)] \right\} y_j(R) = 0 \quad (1)$$

$$y_i(0) = y_i(R_m) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2)$$

Численные методы, рассмотренные ниже, подробно описаны в работах ^{6/} и ^{9/}. Здесь дадим их краткое описание. Первый (метод А) основан на методе непрерывного аналога метода Ньютона, второй (метод В) - на методе обратной итерации в подпространстве.

2.1. Метод А

Дополнив (I)-(2) условием нормировки

$$\int_0^{R_m} \sum_{i=1}^n y_i^2(R) dR - 1 = 0, \quad \text{получим:}$$

$$\varphi^{(1)}(z) \equiv \left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} - 2 \hat{Q}(R) \frac{d}{dR} + [\hat{I} E - \hat{V}(R)] \right\} \bar{y}(R) = 0,$$

$$\varphi^{(2)}(z) \equiv \bar{y}(0) = 0, \quad (4)$$

$$\Psi^{(3)}(z) \equiv \bar{f}(R_m) = 0,$$

$$\Psi^{(4)}(z) \equiv (\bar{f}, \bar{f}) - 1 = 0.$$

Здесь $\bar{f}(R) = \{f_1(R), f_2(R), \dots, f_n(R)\}$ - n -мерный вектор, \hat{I} - единичная матрица порядка n , $\hat{V}(R) = \{V_{ij}(R)\}_{ij=1}^n$ и $\hat{Q}(R) = \{Q_{ij}(R)\}_{ij=1}^n$ - матрицы потенциалов, $(\bar{f}, \bar{f}) = \int_0^1 \sum_{i=1}^n x_i^2(R) dR$.

Задача (4) является нелинейным функциональным уравнением $\Psi(z) = 0$ относительно пары $z = (E, \bar{f}(R))$. Для решения этого уравнения применяется непрерывный аналог метода Ньютона^{/5/}: вводится непрерывный параметр t , $0 \leq t < \infty$, от которого зависит искомая величина $z(t) = (E(t), \bar{f}(R, t))$, и $\Psi(z) = 0$ заменяется эволюционным уравнением

$$\Psi'(z(t)) \cdot z'(t) = -\Psi(z(t)),$$

$$z(0) = (E_0, \bar{f}_0(R)). \quad (5)$$

Здесь $\Psi'(z(t))$ - производная Фреше оператора Ψ , а $z'(t) = \{ \mu(t), \bar{v}(R, t) \}$, $\mu(t) = \frac{dE(t)}{dt}$, $\bar{v}(R, t) = \frac{d\bar{f}(R, t)}{dt}$.

В основу дискретного представления эволюционного уравнения положен метод Эйлера^{/5,6/}:

$$t_{k+1} = t_k + \tau_k, \quad t_0 = 0,$$

$$E_{k+1} = E_k + \tau_k \mu_k, \quad (6)$$

$$\bar{f}_{k+1}(R) = (1 - \tau_k) \bar{f}_k(R) + \tau_k \bar{v}_k(R),$$

$$\left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} - 2 \hat{Q}(R) \frac{d}{dR} + [\hat{I} E_k - \hat{V}(R)] \right\} \bar{v}_k(R) = -\bar{f}_k(R), \quad (7)$$

$$\bar{v}_k(0) = \bar{v}_k(R_m) = 0,$$

$$\mu_k = \frac{1}{2} [1 + (\bar{f}_k, \bar{f}_k)]. (\bar{f}_k, \bar{v}_k)^{-1}. \quad (8)$$

Краевая задача (7) аппроксимируется с помощью трехточечных конечно-разностных формул второго порядка точности, а для ее решения применяется алгоритм прогонки^{/7/}. Вычисление интегралов в

(8) ведется по квадратурным формулам того же порядка точности. Итерационный процесс (6) заканчивается по достижении невязки в узлах сетки заданного значения. Начальное приближение берется из /8/.

2.2. Метод В

Перепишем систему (I) в виде

$$\left\{ -\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + \hat{U}(R) \right\} \bar{Y}(R) + \frac{d}{dR} \left[\hat{Q}(R) \bar{Y}(R) \right] + Q(R) \frac{d\bar{Y}(R)}{dR} = E \bar{Y}(R), \quad (9)$$

где \hat{I} - единичная матрица порядка n ; $\hat{U}(R) = \{U_{ij}(R)\}_{i,j=1}^n$ и $\hat{Q}(R) = \{Q_{ij}(R)\}_{i,j=1}^n$ - симметричная и антисимметричная матрицы (см. (3)), $\bar{Y}(R) = \{Y_1(R), Y_2(R), \dots, Y_n(R)\}$. Легко видеть, что система (9) симметрична. На отрезке $[0, R_m]$ вводим неравномерную разностную сетку: $0 = R_0 < R_1 < R_2 < \dots < R_N = R_m$. Обозначив через $h_k^+ = R_{k+1} - R_k$, $h_k^- = R_k - R_{k-1}$, $h_k = 0.5(h_k^+ + h_k^-)$

$$\bar{Y}_k(R) = \bar{Y}(R_k), \quad U_k = \hat{U}(R_k), \quad Q_k = \hat{Q}(R_k), \quad k = 0, 1, \dots, N,$$

задачу (8) заменим симметричной разностной задачей второго порядка точности /9/:

$$-\hat{I} \left(\frac{\bar{Y}_{k+1} - \bar{Y}_k}{h_k^+} - \frac{\bar{Y}_k - \bar{Y}_{k-1}}{h_k^-} \right) + U_k \bar{Y}_k h_k + \quad (10)$$

$$\frac{1}{2} (Q_{k+1} + Q_k) \bar{Y}_{k+1} - \frac{1}{2} (Q_k + Q_{k-1}) \bar{Y}_{k-1} = E^k \bar{Y}_k h_k,$$

$$\bar{Y}_0 = \bar{Y}_N = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N-1. \quad (11)$$

Систему (10) перепишем в виде

$$AY = E^k BY, \quad (12)$$

где Y - $n(N-1)$ - мерный вектор с компонентами

$$Y_e = Y_i(R_k), \quad e = (k-1)N + i, \quad k = 1, 2, \dots, N-1, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Здесь A - квадратная матрица порядка $n(N-1)$, она симметрична и имеет ленточную структуру с максимальной длиной полуденты $2n-1$.

Матрица B - диагональная, с элементами

$$b_{ee} = h_k, \quad l = (k-1)N + i, \quad k=1, 2, \dots, N-1, \quad i=1, 2, \dots, n.$$

Таким образом приходим к алгебраической задаче на собственные значения.

Для нахождения первых p собственных значений и собственных функций алгебраической задачи на собственные значения (12) был использован метод обратной итерации в подпространстве (10). Выбор начального приближения к собственным функциям описан в работе^{9/}. Собственные функции получаются ортонормированными.

3. Численные исследования

Рассмотренные алгоритмы применялись для решения задачи (1)-(2) в случаях $n = 2$ и $n = 8$, что соответствует учету первой и первых двух оболочек дискретного спектра задачи двух центров в (1)^{4/}. Для этих n были вычислены уровни энергии и волновые функции μ -мезомолекул изотопов водорода и системы $e^+e^-e^-$. Результаты расчетов приведены для мезомолекул с одинаковыми массами ядер в таблице 1 и с различными массами - в таблице 2. Разностная сетка по переменной R для обеих схем была следующей: 0.1(0.1), 9(0.3), 12(0.6), 19.8(0.2), 20(1), 30(5), 60. Эта сетка является оптимальной для $n = 2$, т.е. численные результаты, полученные методом B , в этом случае полностью совпадают с расчетами на равномерной сетке, содержащей 600 узлов (шаг 0.1). Граничные условия (2) выполнялись точно. Итерационные процессы в A и B начинались от различных начальных приближений (в A начальное приближение бралось из^{8/}, в B - из^{9/}) и заканчивались, когда относительная погрешность невязки в узлах сетки становилась меньше 10^{-6} .

Из сравнения численных результатов видно, что полученные решения системы (1)-(2) совпадают в пределах заданной точности для всей области дискретного спектра μ -мезомолекул. В таблицах 3 и 4 приведены волновые функции мезомолекулы $d^+t\mu^-$ с квантовыми числами $J=1, V=0$ и $J=1, V=1$ для $n=8$.

4. Заключение

Проведенное численное исследование показывает, что оба алгоритма нахождения уровней энергии и волновых функций μ -мезомолекул устойчиво работают во всей области дискретного спектра и мо-

гут быть использованы для прецизионных расчетов слабосвязанных уровней.

Для повышения точности вычислений уровней энергии μ -мезомолекул в рамках данного вычислительного метода необходимо решить следующие вопросы, которые в этой работе не рассматривались:

- а) о полноте системы потенциалов ("насыщение" по n);
 - в) о повышении точности конечно-разностной аппроксимации ("насыщение" по шагу);
 - с) о выборе R_m ("насыщение" по R_m),-
- а также построить, на основе рассмотренных методов, вычислительные схемы решения задачи (I)-(2) для большого числа уравнений ($\sim 200-300$).

В заключение выражаем благодарность Л.И.Пономареву, И.В.Пузынину за интерес к работе и полезные обсуждения, С.И.Виницкому, Л.Н.Сомову за помощь в работе и сотрудничество.

Таблица I
Энергия $-\epsilon_{Jv}$ (эВ) мезомолекул водорода с
равными ядрами

Мезомолекулы	J	v	Двухуровневое приближение		Восьмиуровневое приближение	
			Метод А	Метод В	ние	
					Метод А	Метод В
$pp\mu$	0	0	247.302182	247.307964	250.628220	250.628122
$pp\mu$	1	0	101.476748	101.476651	104.584334	104.587505
$dd\mu$	0	0	322.725742	322.725758	324.069370	324.069371
$dd\mu$	0	1	33.226184	33.226132	34.766752	34.766805
$dd\mu$	1	0	224.116542	224.116542	225.500636	225.500637
$dd\mu$	1	1	0.659163	0.659287	1.388656	1.388722
$dd\mu$	2	0	83.586202	83.586129	85.029754	85.029717
$tt\mu$	0	0	361.616411	361.616413	362.374868	362.374869
$tt\mu$	0	1	81.774271	81.774107	83.016352	83.016365
$tt\mu$	1	0	287.697797	287.697810	288.487423	288.387424
$tt\mu$	1	1	43.343909	43.343851	44.467618	44.467707
$tt\mu$	2	0	170.986062	170.986135	171.844341	171.844324
$tt\mu$	3	0	36.827497	36.827811	47.771861	47.771824
e^+e^-	0	0	0.186035	0.186036	0.255407	0.254814

Таблица 2
Энергия $-E_{Jv}$ (эВ) мезомолекул водорода с неравными ядрами

Мезо- моле- кулы	J	v	Двухуровневое приближение		Восьмиуровневое приближение	
			Метод А	Метод В	Метод А	Метод В
pd μ	0	0	215.700423	215.700423	218.608090	218.608094
pd μ	1	0	91.361591	91.361501	94.458106	94.458091
dt μ	0	0	317.082618	317.082619	318.203722	318.203718
dt μ	0	1	32.318628	32.318519	33.804321	33.804324
dt μ	1	0	230.146435	230.146435	231.370799	231.370786
dt μ	1	1	-0.380024	-0.463384	0.114669	0.117342
dt μ	2	0	99.927683	99.927652	101.302244	101.295442
pt μ	0	0	207.296267	207.296218	210.203281	210.201512
pt μ	1	0	92.229813	92.229806	95.478491	95.475612

Таблица 3
Волновые функции $\chi_1(R)$ и $\chi_2(R)$ для $n = 8$
мезомолекулы dt μ с квантовыми числами J = 1, v = 0.

R	$\chi_1(R)$		$\chi_2(R)$	
	Метод А	Метод В	Метод А	Метод В
0.	0.	0.	0.	0.
1.	0.089409	0.089410	0.090267	0.090266
2.	0.407204	0.407200	0.399515	0.399518
2.6	0.494084	0.494080	0.475652	0.475656
3.	0.478489	0.478486	0.454268	0.454270
4.	0.310674	0.310674	0.282891	0.282889
5.	0.149892	0.149894	0.129220	0.129219
6.	0.062436	0.062438	0.050234	0.050233
7.	0.024330	0.024330	0.018039	0.018038
8.	0.009227	0.009227	0.006246	0.006246
9.	0.003455	0.003456	0.002122	0.002122
12.	0.000181	0.000181	0.000082	0.000082
15.	0.000010	0.000010	0.000003	0.000003
20.	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

Таблица 4

Волновые функции $f_1(R)$ и $f_2(R)$ для $n = 8$ мезо-молекулы $d_t \mu$ с квантовыми числами $J = I, v = I$.

R	$f_1(R)$		$f_2(R)$	
	Метод А	Метод В	Метод А	Метод В
0.	0.	0.	0.	0.
1.	0.049664	0.048915	0.050047	0.049291
2.I	0.174101	0.171480	0.169339	0.166796
3.	0.060155	0.059264	0.057704	0.056853
4.	-0.158893	-0.156489	-0.133671	-0.131639
5.	-0.283768	-0.279531	-0.213954	-0.210723
6.	-0.312561	-0.307983	-0.198727	-0.195739
7.	-0.298332	-0.294097	-0.150996	-0.148733
8.	-0.272719	-0.269030	-0.104637	-0.103074
9.	-0.247129	-0.244013	-0.069297	-0.068266
12.	-0.187872	-0.186307	-0.018236	-0.017966
15.	-0.148987	-0.148660	-0.004670	-0.004599
20.	-0.108773	-0.108350	-0.000527	-0.000473
30.	-0.061213	-0.061707	-0.000005	-0.000004
55.	-0.009399	-0.009528	0.	0.
60.	0.	0.	0.	0.

Литература

1. Gerstein S.S. and Ponomarev L.I. Phys. Lett., 72B, 80, 1977.
Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ЖЭТФ, 74, 348, 1978.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.
Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 72, 1670, 1977.
3. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 20, 576, 1974.
Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. J. Phys. B, 9, 2255, 1975.
Ponomarev L.I., Vinitsky S.I., J. Phys. B, 12, 567, 1979.

4. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F., J. Phys. B, 11, 3861, 1978.
Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N., J. Phys. B, 10, 1335, 1977.
5. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В., ЭЧАЯ, 4, I, 127, 1973.
6. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОЖЯИ, P5-12385, Дубна, 1979.
7. Годунов С.К. Рябенский С.К. Введение в теорию разностных схем. Физматгиз, Москва, 1962.
8. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сб.: Algorithms and Programs, KFKI-34, Budapest, 1974.
9. Касчиев М., Касчиева В. ОЖЯИ, P5-12787, Дубна, 1979.
10. Klaus-Juryen. Bathe, Ed. Wilson. Numerical Methods in Finite Elements analysis. Engle-wood, Clif. N.J. 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 июля 1979 года.