92-405

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-92-405

В.М.Виноградов

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ЗАДАЧЕ ДВУХ ТЕЛ

Направлено в журнал "Physics Letters A"

1992

I. Введение

В работе [I] в стиле классической методологии сформулировано конструктивное утверждение: строгое сочетание принципов релятивизма и унитарности приводит к эффективной формулировке релятивистской проблемы двух тел на основе дифференциально-разностных уравнений:

$$(H^{\circ} - 2E)\Psi(r) = V(r)\Psi(r)$$

$$H^{\circ} = 2\,\mathrm{ch}(i\partial_r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r(r+i)}\exp(i\partial_r) \qquad (I)$$

$$i\partial_r = i\frac{h}{mc}\frac{d}{dr} \qquad h=m=c=1 \qquad i=\sqrt{-1}\,.$$

Здесь r – координата относительного расстояния; ее квадрат является собственным значением оператора Казимира, в данном случае инвариантом группы Лоренца.

Разработка идеи о релятивистском преобразовании Фурье [2,3], лежащая в основе [I], оказалась чрезвычайно плодотворной: уравнение (I), полевое по своей природе [4,5], локально; к нему применимы аналитические методы нерелятивистской теории [2,6,7], точные решения дают нестандартные результаты в феноменологии [8-I0].

Следующий этап развития новой формулировки, возможно (так подсказывает историческая аналогия), будет связан с численными методами. Результативных алгоритмов нет, что связано с особенностями задачи: величина сдвига разностных операторов $\hbar/mc$ сравнима с эффективной областью потенциала

$$V(r) = \begin{cases} \dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{ch}(\sigma r)}{\mathrm{ch}(\pi r)} & \sigma = \mathrm{Arc}\cos\left(\dfrac{\mu^2-2m^2}{2m^2}\right) \quad \mu^2 \leqslant 4m^2 \\[2ex] \dfrac{1}{r}\dfrac{\cos(\sigma r)}{\mathrm{ch}(\pi r)} & \sigma = \mathrm{Arc}\,\mathrm{ch}\left(\dfrac{\mu^2-2m^2}{2m^2}\right) \quad \mu^2 > 4m^2\,. \end{cases} \qquad (I')$$

В настоящей работе для нового класса релятивистских уравнений предложена формулировка вариационного принципа; построена система базисных полиномов; приведен пример численной реализации метода.

2. Релятивистский функционал

Пусть $\Psi_{1,2}(r)$ – бесконечно дифференцируемые функции со свойствами свободных решений дискретного спектра [2]

$$\Psi_{1,2}(r)\big|_{r\to 0} = (-r)^{(\ell+1)}\sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}^{1,2}\, r^{2\nu} \qquad (-r)^{(\ell+1)} = r(r-i)\ldots(r-i\ell)$$

$$\Psi_{1,2}(r)\big|_{r\sim\infty} \approx \exp(-r\chi) \qquad 2E = 2\cos\chi \qquad 0 \leqslant \chi \leqslant \frac{\pi}{2}\,. \qquad (2)$$

По аналогии с нерелятивистской теорией квадратичный функционал определим соотношением

$$I = \int_0^{\infty}\Psi_1(r)\left[H^{\circ} - 2E - V(r)\right]\Psi_2(r)\,dr\,. \qquad (3)$$

Имея целью упростить задачу минимизации функционала, с помощью новых переменных $x = 2r;\quad W = -|2E - 2|;\quad L = \ell(\ell+1)$

$$I = \int_0^\infty \Psi_1^*(x)\left[4\,\mathrm{sh}^2(i\partial_x) + e^{i\partial_x}\frac{L}{x^2+1}e^{i\partial_x} + \varepsilon - V(x)\right]\Psi_2(x)\,dx$$

преобразуем (3) к симметричной форме. Учитывая граничные условия, выполним интегрирование по частям для операторов

$$\mathrm{sh}\,i \equiv \mathrm{sh}(i\partial_x) \qquad \dot{e} \equiv \exp(i\partial_x) \qquad \mathrm{ch}\,i \equiv \mathrm{ch}(i\partial_x)\,, \tag{4}$$

представленных разложениями по степеням ∂_x

$$I = \int_0^\infty\left[4(\mathrm{sh}\,i\,\Psi_1(x))^*(\mathrm{sh}\,i\,\Psi_2(x)) + \frac{L}{x^2+1}(\dot{e}\Psi_1(x))^*(\dot{e}\Psi_2(x)) + \varepsilon\Psi_1^*(x)\Psi(x) - V(x)\Psi_1^*(x)\Psi_2(x)\right]dx \tag{5}$$

Равенство (5) означает эрмитовость H_0. Предельно симметричное выражение получим при $\Psi_{1,2}(x) = \Psi(x)$

$$I = \int_0^\infty\left[4|\mathrm{sh}\,i\,\Psi(x)|^2 + \frac{L}{x^2+1}|\dot{e}\Psi(x)|^2 + \varepsilon|\Psi(x)|^2 - V(x)|\Psi(x)|^2\right]dx\,. \tag{5'}$$

Опуская изложение формальной стороны вариационного метода (процедура минимизации), сосредоточим внимание на построении системы полиномов, соответствующих операторам уравнения (I).

3. Функции разностного исчисления

Логике вариационного метода соответствует выбор системы простейших базисных функций. В нерелятивистской теории это набор функций экспоненциально-степенного типа. В случае уравнения (I) дифференциально-разностным операторам (4) соответствуют функции, построенные с помощью модифицированных полиномов Эйлера и Бернулли.

Пусть в стиле [II] [1)]

$$e_\nu(x) = (x + \tfrac{c}{2})^\nu \qquad B_\nu(x) = (x + B)^\nu\,. \tag{6}$$

Символическая запись (6) предполагает правило бинома; в частности

$$c_\nu = 2^\nu e_\nu(0) \qquad B_\nu = B_\nu(0)\,.$$

Разностные соотношения

$$e_\nu(x+1) + e_\nu(x) = 2x^\nu \qquad B_\nu(x+1) - B_\nu(x) = \nu x^{\nu-1} \tag{7}$$

дают уравнения для реккурентных вычислений P-чисел

$$(c+2)^\nu + c_\nu = 0;\ \nu > 0 \qquad (B+1)^\nu - B_\nu = 0;\ \nu > 1\,, \tag{8}$$

причем вследствие теоремы о дополнительном аргументе [II]

$$P_\nu(1-x) = (-1)^\nu P_\nu(x) \tag{9}$$

имеем

$$c_{2\nu} = B_{2\nu+1} = 0;\quad \nu > 0\,. \tag{9'}$$

Свойства симметрии, содержащиеся в условиях (9,9'), можно использовать для модификации разностных соотношений (7). Выделим функции четности $\nu-1$ и ν

$$e_\nu(x) = x^\nu - e'_\nu(x) \qquad B_\nu(x) = -\tfrac{1}{2}x^{\nu-1} + \bar{B}_\nu(x)\,. \tag{6'}$$

I) Везде, где это не оговорено, $\nu, k = 0, I, 2, \ldots$

С помощью (9) получим следующую версию (7)

$$e_\nu(x+1) - e_\nu(x) = 2e'_\nu(x) \qquad B_\nu(x+1) + B_\nu(x) = 2\bar{B}_\nu(x)\,. \tag{7'}$$

В основе дальнейшего изложения будут полиномы (6) с аргументом $x + \frac{1}{2}$

$$e_\nu(x+\tfrac{1}{2}) = (x + \tfrac{e}{2})^\nu \qquad B_\nu(x+\tfrac{1}{2}) = (x + \tfrac{d}{2})^\nu\,, \tag{I0}$$

где аналогично (8) числа

$$e_\nu = 2^\nu e_\nu(\tfrac{1}{2}) \qquad d_\nu = 2^\nu B_\nu(\tfrac{1}{2})$$

определяются из реккурентных соотношений

$$(e+1)^\nu + (e-1)^\nu = 0;\ \nu > 0 \qquad (d+1)^\nu - (d-1)^\nu = 0;\ \nu > 1 \tag{8'}$$

и, согласно (9),

$$e_{2\nu+1} = d_{2\nu+1} = 0\,. \tag{9''}$$

Первый шаг преобразований – изменение масштаба и нормировки

$$P_\nu(x) = (x + \tfrac{p}{2})^\nu \longrightarrow P_\nu(x') = \frac{2^\nu}{\nu!}P_\nu(x) \qquad x' = 2x$$

позволяет представить полином как свертку по индексам нормированных степеней переменной и нормированных P-чисел.

$$P_\nu(x) = \sum_{k=0}^{k=\nu} P_{(k)}x_{\nu-k} \qquad P_{(k)} = P_k/k! \qquad x_k = x^k/k! \tag{II}$$

Предполагая такое представление, будем определять только ненулевые P-числа. Например, для (I0) запись $(\nu' = [\frac{\nu-1}{2}]+1;\ \bar{\nu} = [\frac{\nu}{2}]+1)$

$$e^+_\nu(x) = \frac{1}{\nu!}(x + e^+)^{\nu'} \qquad B^+_\nu(x) = \frac{1}{\nu!}(x + B^+)^{\bar{\nu}} \tag{I0'}$$

$$e^+_{2k} = e_{2k} \qquad B^+_{2k} = d_{2k} \qquad k \le \bar{\nu}$$

означает сумму (II), в которой, в соответствии с (9"), отличны от нуля только P-числа с четным индексом. Аналогично для (6')

$$e_\nu(x) = x_\nu - e'_\nu(x) \qquad B_\nu(x) = -x_{\nu-1} + \bar{B}_\nu(x) \tag{6''}$$

$$e'_{2k+1} = -c_{2k+1} \qquad \bar{B}_{2k} = (2B)_{2k}\,.$$

Для полиномов такой модификации разностные соотношения соответствуют операторам (4) с вещественным сдвигом

$$\begin{aligned} &e_\nu(x+2) + e_\nu(x) = 2x_\nu && B_\nu(x+2) + B_\nu(x) = 2\bar{B}_\nu(x) \\ &e_\nu(x+2) - e_\nu(x) = 2e'_\nu(x) && B_\nu(x+2) - B_\nu(x) = 2x_{\nu-1} \\ &\exp(\pm\partial_x)\,e^+_\nu(x) = x_\nu \pm e'_\nu(x) && \exp(\pm\partial_x)\,B^+_\nu(x) = \pm x_{\nu-1} + \bar{B}_\nu(x)\,. \end{aligned} \tag{7''}$$

4. Базисные функции дифференциально-разностного уравнения

Преобразование, устанавливающее связь между функциями (I0,6") и операторами (4), назовем i-преобразованием

$$1)\ P_\nu(x) \longrightarrow i^\nu P_\nu(x) \qquad 2)\ ix \longrightarrow x\,. \tag{I2}$$

Итогом построений будут полиномы

$$\begin{aligned} &e^+_\nu(x) = e_\nu(x+i) && B^+_\nu(x) = B_\nu(x+i) \\ &e^+_{2k} = |e_{2k}| && B^+_{2k} = |d_{2k}| \end{aligned} \tag{I0''}$$

с переменной, нормированной согласно (II), и правилами операторного исчисления

$$c\mathcal{K}(i\partial_x)\, e^+_\nu(x) = x_\nu \qquad\qquad c\mathcal{K}(i\partial_x)\, \mathcal{B}^+_\nu(x) = \overline{\mathcal{B}}_\nu(x) \tag{7''}$$

$$-i\, s\mathcal{K}(i\partial_x)\, e^+_\nu(x) = e'_\nu(x) \qquad\qquad -i\, s\mathcal{K}(i\partial_x)\, \mathcal{B}^+_\nu(x) = x_{\nu-1}\,.$$

Аналитическое представление (I0″) определяется соглашением (II), или, согласно (7″) (см. (I7)),

$$e_\nu(x) = x_\nu - i\, e'_\nu(x) \qquad\qquad \mathcal{B}_\nu(x) = -i x_{\nu-1} + \overline{\mathcal{B}}_\nu(x) \tag{I3}$$

$$e_{2k+1} = |c_{2k+1}| \qquad\qquad \overline{\mathcal{B}}_{2k} = -|(2\mathcal{B})_{2k}|\,;\ \overline{\mathcal{B}}_0 = 1\,.$$

Нормированные $\mathcal{P}$ -числа вычисляются согласно (8,8′). Преобразование ($I2_2$) дает положительно-определенные полиномы (I0″); при разностном дифференцировании это свойство сохраняется лишь у производных полиномов Эйлера (см. Приложение).

Простейший набор базисных функций дискретного спектра, соответствующий условиям (2) и удобный в обращении с разностными операторами (4), дает произведение экспонента $*$ полином (I0″)

$$\varphi_\nu(x) = e^{-x\mathcal{L}_1}\, \mathcal{P}_\nu(x) \qquad \nu = 1, 3, \ldots \tag{I4}$$

Действительно, правила разностного дифференцирования и разностного усреднения произведений являются аналогом формул сложения для гиперболических функций

$$s\mathcal{K}(i\partial_x)(U_x \cdot V_x) = (s\mathcal{K}\, i\, U_x)\cdot(c\mathcal{K}\, i V_x) + (c\mathcal{K}\, i\, U_x)\cdot(s\mathcal{K}\, i V_x) \tag{I5}$$

$$c\mathcal{K}(i\partial_x)(U_x \cdot V_x) = (c\mathcal{K}\, i\, U_x)\cdot(c\mathcal{K}\, i V_x) + (s\mathcal{K}\, i\, U_x)\cdot(s\mathcal{K}\, i V_x)\,. \tag{I6}$$

В соответствии с (7″) все операции (4) для базисных функций (I4) будут выражаться одним набором полиномов, например, $e'_\nu(x)$, если $\mathcal{P}_\nu(x) = e^+_\nu(x)$

$$-i\, s\mathcal{K}(i\partial_x)\, \varphi_\nu(x) = (-\sin\mathcal{L}_1\, x_\nu + \cos\mathcal{L}_1\, e'_\nu(x))\, e^{-x\mathcal{L}_1} \tag{I5′}$$

$$c\mathcal{K}(i\partial_x)\, \varphi_\nu(x) = (\cos\mathcal{L}_1\, x_\nu - \sin\mathcal{L}_1\, e'_\nu(x))\, e^{-x\mathcal{L}_1}\,. \tag{I6′}$$

Следствием (I5′) будет универсальное представление матричных элементов через степени $\mathcal{L}^{-1}$, свойство метода, характерное для обычного уравнения Шредингера

$$\frac{d}{dx}\, \varphi_\nu(x) = (-\mathcal{L}_1\, e^+_\nu(x) + e^+_{\nu-1}(x))\, e^{-x\mathcal{L}_1}\,. \tag{I5''}$$

Учитывая альтернативную запись разностных соотношений (7″)

$$\exp(\pm i\partial_x)\, e^+_\nu(x) = x_\nu \mp i e'_\nu(x) \qquad\qquad \exp(\pm i\partial_x)\, \mathcal{B}^+_\nu(x) = \mp i x_{\nu-1} + \overline{\mathcal{B}}_\nu(x)\,, \tag{I7}$$

приходим к выводу: дифференциально-разностное уравнение допускает универсальную реализацию вариационного метода для полиномов, обладающих свойствами симметрии (I7) относительно разностного сдвига.

Найденный базис требует модификации в двух практически важных случаях. Если потенциал короткодействующий, набор (I4) должен содержать функцию с неискаженной асимптотикой

$$\varphi(x) = e^{-x\mathcal{L}_1}(1 - e^{-x\mathcal{L}}) = e^{-x\mathcal{L}_1}\, I_{\mathcal{L}}(x)\,. \tag{I8}$$

В случае, если используется релятивистская версия потенциала (2), модификация с помощью $I_{\mathcal{L}}(x)$; $\mathcal{L} = 2\pi$ необходима для всех $\varphi_\nu(x)$: тогда матричные элементы суть табличные интегралы. При $\mathcal{L}$, кратном 2π, такая функция является i -периодической константой

$$s\mathcal{K}(i\partial_x)\, I_{\mathcal{L}}(x) = I_{\mathcal{L}}(x)\, s\mathcal{K}(i\partial_x)\,, \tag{I9}$$

следовательно, для измененного базиса правила разностного дифференцирования будут прежними.

5. Результаты

1. Найден функционал, соответствующий новому классу уравнений; тем самым проблема решения сведена к процедуре минимизации.

2. Найдена система полиномов, которая обладает специальными свойствами симметрии и обеспечивает универсальную реализацию вариационного метода.

3. Процесс численного решения задачи о собственном значении сведен до уровня сложности нерелятивистской задачи и дает следующие результаты: релятивистские эффекты достигают 200% в кулоновской задаче (тест) и увеличиваются при переходе к потенциалу Юкавы ($\mu = m$)

$$W^{\text{нерел}}\big|_{Z=3.81} = -m \qquad\qquad W^{\text{рел}}\big|_{Z=3.24} = -2m\,. \tag{20}$$

Приложение. Приведем значения $\mathcal{P}$ -чисел и пример реализации разностных соотношений (7″) для полиномов низшего порядка.

$e^+_\nu(x)$	$c\mathcal{K}(i\partial_x)\, e^+_\nu(x)$	$-i s\mathcal{K}(i\partial_x)\, e^+_\nu(x)$	$\mathcal{B}^+_\nu(x)$	$c\mathcal{K}(i\partial_x)\, \mathcal{B}^+_\nu(x)$	$-i s\mathcal{K}(i\partial_x)\, \mathcal{B}^+_\nu(x)$
x	x	1	x	x	1
$\frac{x^2}{2!} + \frac{1}{2}$	$\frac{x^2}{2!}$	$\frac{x}{1}$	$\frac{x^2}{2!} + \frac{1}{6}$	$\frac{x^2}{2!} - \frac{1}{3}$	$\frac{x}{1}$
$\frac{x^3}{3!} + \frac{1}{2}\frac{x}{1}$	$\frac{x^3}{3!}$	$\frac{x^2}{2!} + \frac{1}{3}$	$\frac{x^3}{3!} + \frac{1}{6}\frac{x}{1}$	$\frac{x^3}{3!} - \frac{1}{3}\frac{x}{1}$	$\frac{x^2}{2!}$
$\frac{x^4}{4!} + \frac{1}{2}\frac{x^2}{2!} + \frac{1}{24}$	$\frac{x^4}{4!}$	$\frac{x^3}{3!} + \frac{1}{3}\frac{x}{1}$	$\frac{x^4}{4!} + \frac{1}{6}\frac{x^2}{2!} + \frac{7}{120}$	$\frac{x^4}{4!} - \frac{1}{3}\frac{x^2}{2!} - \frac{1}{45}$	$\frac{x^3}{3!}$
$\frac{x^5}{5!} + \frac{1}{2}\frac{x^3}{3!} + \frac{1}{24}\frac{x}{1}$	$\frac{x^5}{5!}$	$\frac{x^4}{4!} + \frac{1}{3}\frac{x^2}{2!} + \frac{2}{15}$	$\frac{x^5}{5!} + \frac{1}{6}\frac{x^3}{3!} + \frac{7}{120}\frac{x}{1}$	$\frac{x^5}{5!} - \frac{1}{3}\frac{x^3}{3!} - \frac{1}{45}\frac{x}{1}$	$\frac{x^4}{4!}$

(ПI)

$$\mathcal{B}_{2k} = \left\{1; \tfrac{1}{6}; -\tfrac{1}{30}; \tfrac{1}{42}; -\tfrac{1}{30}; \tfrac{5}{61}\right\}; \quad d_{2k} = \left\{1; -\tfrac{1}{3}; \tfrac{7}{5}; -\tfrac{31}{21}; \tfrac{127}{15}; -\tfrac{2555}{33}\right\}; \quad \mathcal{B}_1 = -\tfrac{1}{2}\,;$$

$$c_{2k+1} = \{-1; 2; -16; 272; 7936; 353792\}; \quad e_{2k} = \{1; -1; 5; -61; 1385; -5052\}; \quad 0 \leqslant k \leqslant 5\,. \tag{П2}$$

Процесс минимизации квадратичного функционала сводится к решению обобщенной проблемы собственных значений и выполнен с помощью программы JACOBI [12] . Набор из трех функций дает при фиксированной энергии значение константы связи с точностью до третьего знака. Подробно исследовать сходимость вариационных решений можно на основе программ, пригодных для обращения вырожденных матриц.

Литература

I. Kadyshevsky V.G., Mir-Kasimov R.M., Skachkov N.B.- Nuovo Cim.,1968, 55A, p. 233.
2. Кадышевский В.Г., Мир-Касимов Р.М., Скачков Н.Б.- ЭЧАЯ, 1972, т. 2, вып. 3, с. 635.
3. Шапиро И.С.- ДАН СССР, 1956, т. 106, с. 647.
4. Кадышевский В.Г.- ЖЭТФ, 1964, т. 46, с. 654, с. 872.- ДАН СССР, 1965, т. 160, с. 573.
5. Kadyshevsky V.G.- Nucl. Phys., 1968, B6, p. 125
6. Freeman M., Mateev M.D., Mir-Kasimov R.M.- Nucl.Phys., 1969, B12, p. 197.
7. Донков А.Д., Кадышевский В.Г., Матеев М.Д., Мир-Касимов Р.М.- ТМФ, 1971, т. 8, вып. 1, с. 61.
8. Скачков Н.Б., Соловцов И.Л.- ЭЧАЯ, 1978, т. 9, вып. 1, с. 5.
9. Дренска С.Б., Мавродиев С.П.- ЭЧАЯ. 1983. т. 15. вып. 1. с. 94.
10. Виноградов В.М. - ОИЯИ Р4-92-404, Дубна, 1992. 992.
11. Milne-Thompson L.M., The Calculus of Finite Differences. McMillan and Co., London, 1951.
12. Bathe K.J. and Wilson E. 1976. Numerical Methods in Finite Element Analysis. Englewood Cliff, N.J.: Prentice-Hall.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 сентября 1992 года.