ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 519.632.6:519.635.8:530.145.61

11-87-857

КАСЧИЕВ
Михаил Стефанов

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ МНОГОМЕРНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ И КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ СЕТОЧНЫМИ МЕТОДАМИ

Специальность:
05.13.16 - применение вычислительной техники,
математического моделирования
и математических методов для научных исследований

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени доктора физико-математических наук

Дубна 1987

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор Алексей Владимирович Гулин

доктор физико-математических наук,
профессор Петр Никанорович Заикин

доктор физико-математических наук,
профессор Юрий Алексеевич Кузнецов

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Ленинградский государственный университет им.А.А.Жданова.

Автореферат разослан "___" ____________ 1988г.

Защита диссертации состоится "____" ____________ 1988г. в "____" часов на заседании Ученого совета Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна Московской области, Д047.01.04.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук Ивах З.М.Иванченко

I. Общая характеристика работы

В диссертации разработан единый подход численного анализа задач на собственные значения в двух- и трехмерных областях, возникающих при изучении уравнений, описывающих физические процессы в электродинамике и квантовой механике. Данный подход заключается в аппроксимации исходных уравнений сеточными методами и сведений их к обобщенной алгебраической проблеме собственных значений большой размерности. Для решения частичной задачи используется разработанный в диссертации итерационный метод минимизации функционала Рэлея-Ритца. Предложенный подход позволяет развить класс новых методов для решения этой задачи, а также получать параллельные и многосеточные алгоритмы.

Актуальность проблемы

Задачи, рассматриваемые в диссертации, связаны с проектированием резонаторной части линейных ускорителей заряженных частиц и с исследованием квантовомеханической системы трех заряженных частиц, описываемой трехмерным уравнением Шредингера. Сложность математической постановки этих задач, например область изменения независимых переменных, граничные условия, обеспечивающие ограниченность соответствующих решений, переменные коэффициенты, наличие особых точек, по существу, исключает возможность их решения аналитическими и качественными методами. Поэтому практически единственным путем получения решения является проведение вычислительного эксперимента на основе теории, развитой в работах А.А.Самарского, Г.И.Марчука и других авторов. Для этого необходима разработка эффективных методов и алгоритмов численного решения поставленных задач, обеспечивающих необходимую точность результатов, создание на их основе замкнутых программных систем для ЭВМ. Все это в определенном смысле эквивалентно полному решению этих задач.

Проектируемые в настоящее время физические установки и эксперименты ставят повышенные требования к точности расчетов соответствующих математических моделей. Одним из возможных способов достижения требуемой точности вычислений является разработка схем высокого порядка точности. В этом смысле наиболее эффективным способом вывода таких схем представляется метод конечных элементов, который позволяет единообразно получать схемы четвертого, шестого и т.д. порядка точности. Основная трудность, возникающая при этом, связана с решением полученной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений, размерности в несколько десятков тысяч. Отметим, что для решения системы линейных алгебраических уравнений в последние годы разработано множество быстрых и экономичных итерационных методов. В то же время существует сравнительно небольшое число работ, посвещенных созданию аналогичных методов в задачах на собственные значения.

В связи с этим актуальным представляется вопрос разработки методов решения таких задач, позволяющих получить оптимальные декомпозиции участвующих матриц, допускающих использование параллельных вычислительных систем, реализующихся на последовательностях вложенных сеток. Последнее позволяет не только увеличить скорость сходимости этих итерационных методов, но и провести уточнение полученных результатов.

Работы, положенные в основу реферируемой диссертации, выполнены в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ ОИЯИ.

Цель и задачи исследований

Цель исследований, представленных в диссертации, состоит в разработке численных методов и соответствующего программного обеспечения для одновременного вычисления $p \geq 1$ минимальных собственных значений и соответствующих им собственных функций задач

$$[L + V(x)]\, u(x) = \lambda u(x), \tag{I}$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} L & L_1 \\ L_1^* & L \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_c & V_1 \\ V_1 & V_2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где $x \in \Omega$ – ограниченная область пространства R^m, $m = 2,3$. Эллиптический дифференциальный оператор L имеет вид

$$L \equiv -\frac{1}{\rho(x)} \sum_{i,j=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_i} k_{ij}(x) \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad L_1 \equiv -\frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{m-1} b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad L_1^* \equiv -\frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial}{\partial x_i} b_i(x).$$

Потенциалы V, V_c, V_1, V_2 такие, что обеспечивают существование решения поставленных задач, $\rho(x) \geq 0$ – весовая функция. Существенная особенность задач (I) и (2) состоит в том, что коэффициенты обращаются в нуль на некоторых частях границы области Ω. Поэтому при постановке граничных условий, обеспечивающих ограниченность собственных функций, необходимо исследовать поведение потенциалов вблизи этих границ. В случае уравнения Шредингера, когда область Ω неограниченная по одной или двум переменным, необходимо правильно поставить граничные условия в достаточно большой конечной области Ω_R, $diam\, \Omega_R \gg 1$.

Разрабатываемые в диссертации методы численного решения указанных задач основываются на аппроксимации уравнений методом конечных

элементов. В качестве базового метода решения частичной обобщенной проблемы собственных значений для небольшой размерности участвующих матриц ($\sim$ I500) использован метод итераций подпространства.

Для достижения поставленной цели требуется:

I. Сформулировать спектральные задачи, описывающие физические процессы электродинамики и квантовой механики, используя при этом наиболее естественные координатные системы. Вывести соответствующую вариационную постановку этих задач, необходимую для получения вариационно-разностных схем их численного решения.

2. Сформулировать модификацию метода Канторовича для решения задач (I) и (2) при $m = 3$, исследовать поведение эффективных потенциалов и скорость сходимости метода на основе численного эксперимента.

3. Разработать метод численного решения частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений

$$A_h x = \lambda^h B_h x, \quad A_h = A_h^T > 0, \quad B_h = B_h^T > 0 \tag{3}$$

с ленточными матрицами A_h и B_h размерности $N \gg 1$ и доказать его сходимость.

Практическое применение исследований к конкретным задачам потребовало разработки алгоритмов, позволяющих единообразно проводить численное решение задачи (I) и (2). Для этого было необходимо:

I. Провести аппроксимацию решаемых задач при помощи квадратичных изопараметрических сирендиповых конечных элементов. Такой способ дискретизации позволяет единообразно учитывать криволинейные границы области и граничные условия второго рода на этих границах. Кроме того, общая теория метода конечных элементов, развитая в работах Зенкевича, Стренга, Фикса, Марчука, Оганесяна, Руховца и др., позволяет оценить точность получаемых результатов.

2. Выполнить численные исследования на модельных задачах с целью анализа точности разработанных алгоритмов, изучения их особенностей при реализации на ЭВМ и возможных путей оптимизации.

Реализация этих пунктов потребовала:

– разработать эффективные алгоритмы автоматического построения конечно-элементной сетки;

– разработать алгоритмы для единообразного построения матриц A_h и B_h для одномерных, двумерных и трехмерных задач;

– разработать экономичные быстродействующие программы;

– провести численный анализ точности путем использования вложенных сеток или на основе сравнения с известными результатами.

Численное решение широкого круга задач электродинамики и квантовой механики показало высокую эффективность и универсальность разработанных методов.

Научная новизна и значимость работы

В представляемой диссертации разработан единый подход к численному анализу многомерных спектральных задач теоретической физики на основе их аппроксимации методом конечных элементов.

Разработанные методы и алгоритмы позволили создать вычислительные схемы четвертого порядка точности для решения спектральных задач с переменными коэффициентами в сложных областях изменения независимых переменных. Программы, реализующие эти методы, объединены в специализированный пакет MULTIMODE , для решения основных задач, возникающих при проектировании резонаторной части линейных ускорителей. Пакет по своим возможностям превосходит все известные пакеты аналогичного назначения.

Поставлены спектральные задачи для определения значений энергии и волновых функций связанных состояний квантовомеханической системы трех заряженных частиц в сфероидальных (ξ, η, R) и гиперсферических ($\alpha, \theta, \hat{R}$) координатах и получены их вариационные функционалы.

Предложена модификация метода Канторовича для решения этой задачи путем разложения ее решения по собственным функциям двумерного гиперсферического базиса.

Обобщение метода групповой релаксации, предложенного Хестинесом, и его адаптация на классе многомерных спектральных задач математической физики в дискретном представлении привели к созданию метода итерации альтернирующих подпространств на последовательностях вложенных сеток. Метод итерации альтернирующих подпространств (МИАП) дал возможность впервые применить к решению уравнения Шредингера сеточные методы. Вычислительные схемы получены в рамках метода конечных элементов. Разработанные многосеточные алгоритмы позволили существенно повысить скорость сходимости метода и оценить полученные результаты на основе общей теории метода конечных элементов.

Реализация метода Канторовича выполнена при помощи функционального наполнения пакета программ MULTIMODE , что позволяет продемонстрировать более широкие его возможности.

Представленные в диссертации методы послужили основой для разработки новых алгоритмов решения как спектральных задач, так и нелинейных задач в теории джозефсоновских переходов, конденсированных сред, в нелинейных полевых теориях, в теории кварцевых резонаторов.

Практическая полезность работы

С помощью предложенных методов получен ряд результатов, имеющих самостоятельный физический интерес.

Разработанный в диссертации пакет прикладных программ MULTIMODE для расчета азимутально-однородных видов колебаний в осесимметричных резонаторах и в периодических структурах получил широкое распространение и внедрен в ряде организаций, таких,как ОИЯИ, ИФВЭ,ИЯИ АН СССР, ИЯФ СО АН СССР, ВЦ СО АН СССР, ФТИ им.Векуа - Сухуми, ИАЭ АН УзССР, МФТИ, ВНИИТВЧ - Ленинград, НИИЭФА им.Ефремова - Ленинград, ОВМ АН СССР.

Пакет активно используется для проведения прецизионных расчетов ряда существующих и проектируемых линейных ускорителей. Кроме этого, пакет MULTIMODE стал основой для развития аналогичных пакетов в ИФВЭ, ИТЭФ.

Вычислены с точностью 10^{-4}-10^{-5} а.е. значения энергии основного и некоторых высоковозбужденных состояний квантовомеханической системы $Ps^- = e^+e^-e^-$.

Получены, с учетом конечных размерностей ядер, термы и волновые функции задачи двух центров, необходимые для вычисления вероятности распределения мюона по осколкам мгновенного деления мезоатомов урана и плутония.

Путем решения МКЭ и МИАП уравнения Шредингера в сфероидальных координатах получены с точностью 10^{-2} эВ.значения энергии основного и возбужденного состояний мезомолекул изотопов водорода $dd\mu$ и $tt\mu$ при значении полного орбитального момента $J = 0$, а также значение энергии основного состояния мезомолекулы $dt\mu$ при $J = 1$. В рассматриваемых случаях решались МИАП алгебраические проблемы собственных значений порядка от 2000 до 40000. Получена модификация МИАП для решения линейных алгебраических систем.

Разработанные алгоритмы и программы успешно использовались в ряде других исследований в математическом институте Болгарской академии наук, ЛГУ, ИФВЭ и в других научных центрах.

Апробация работы

Результаты, вошедшие в диссертацию, докладывались на УШ Всесоюзной конференции по физике электронных и атомных столкновений (Ленинград, 1981), УШ и IX Всесоюзном совещании по ускорителям заряженных частиц (Протвино, 1982), (Дубна, 1984), Международной конференции "Современные проблемы численного анализа" (Москва, 1986), Международном симпозиуме по оптимальным алгоритмам (Благоевград, 1986), Международной конференции по численным методам и приложениям (София, I984), Международном совещании по программированию и математическим методам решения физических задач (Дубна, I985), на научных семинарах Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, ВЦ СО АН СССР, ОВМ АН СССР, Математического института БАН.

Основное содержание диссертации отражено в публикациях в виде статей в ЯФ, в Вестнике ЛГУ, NIM ,"Алгоритмы и алгоритмические языки", докладов в трудах международных конференций и совещаний, препринтов ОИЯИ, ИФВЭ, ИЯИ АН СССР.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, содержит I87 страниц машинописного текста, 4I рисунок, 28 таблиц, список литературы из I26 наименований.

Согласно сформулированным выше задачам представляемых исследований, материал первой главы содержит математическую постановку спектральных задач, моделирующих электромагнитных полей в осесимметрических структурах, методы их численного решения, структуру и описание ППП MULTIMODE . II, Ш, IУ главы посвящены постановке спектральной задачи для уравнения Шредингера квантовомеханической задачи трех заряженных частиц и развитию методов ее численного решения.

Личный вклад автора

Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, объединяющих сотрудников Лаборатории вычислительной техники и автоматизации, теоретической физики ОИЯИ, ИФВЭ и ИЯИ АН СССР, был инициатором данных исследований и руководил разработкой представляемых численных методов. Он непосредственно участвовал в математической постановке рассматриваемых задач, их аппроксимации по МКЭ, в разработке соответствующего программного обеспечения, в проведении численного решения и в анализе полученных результатов. Им самостоятельно разработаны все принципиальные вопросы, относящиеся к обоснованию численных методов, доказательству сходимости, а также к возможным обобщениям их реализации. По всем этим вопросам его вклад является определяющим, хотя некоторые детальные разработки выполнялись соавторами.

II. Краткое содержание диссертации

Введение к реферируемой диссертации содержит краткое описание постановок спектральных задач, возникающих при математическом моделировании ускоряющих структур в осесимметричных резонаторах и при исследованиях некоторых процессов квантовой механики. Обосновываются необходимость разработки единого численного метода и создание эффективного программного обеспечения для решения этих задач на основе их аппроксимации сеточными методами.

Даны описание структуры диссертации и перечень основных результатов по главам.

В главе I "Численное моделирование спектра частот и электромагнитных полей в осесимметричных резонаторах и продольно-однородных волноводах" содержится постановка спектральных задач, которые приходится решать для получения всех спектральных характеристик, необходимых при проектировании резонаторной части линейных ускорителей заряженных частиц. В диссертации изучаются вопросы о вычислении азимутально-однородных видов колебаний в резонаторах и периодических структурах.

В предположении о бесконечной проводимости металлических поверхностей резонатора Г эта задача имеет вид

$$L_\alpha u = \lambda u, \quad L_\alpha \equiv - x_1^{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_1} x_1^{-\alpha} \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}, \quad (x_1, x_2) \in \Omega . \qquad (4)$$

Значение α = I соответствует осесимметричному случаю, а α = 0 – продольно-однородному. Граничные условия для функции u записываются

$$\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_\Gamma = 0 \text{ для } E(H) \text{ волн}, \quad u|_\Gamma = 0 \text{ для } H(E) \text{ волн}. \qquad (5)$$

На границах симметрии области ставятся условия, соответствующие симметрии функции u . При $x_1 = 0$ в случае α = I имеем $u(0, x_2) = 0$,

В периодических с симметричным периодом структурах необходимо определить зависимость частоты от сдвига фазы поля θ на длину периода структуры D . В этом случае возникает следующая спектральная задача (напр., при α = I):

$$L_1 u_i = \lambda u_i, \quad \left.\frac{\partial u_i}{\partial n}\right|_\Gamma = 0, \ \left(u_i|_\Gamma = 0\right), \quad u_i(0, x_2) = 0, \ i = 1, 2 \qquad (6)$$

$$\left.\frac{\partial u_1}{\partial x_2}\right|_{x_2=0} = 0, \quad u_2|_{x_2=0} = 0, \quad \left.\begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2}\frac{\partial}{\partial x_2} & \sin\frac{\theta}{2}\frac{\partial}{\partial x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}\right|_{x_2 = D/2} = 0 . \qquad (7)$$

Интерес представляют минимальные p собственных значений и соответствующие им собственных функций задач (4)-(5) и (6)-(7). Исходя из требований к точности вычислений и сравнительного анализа существующих методов решения этих задач, дано обоснование выбора предложенных методов.

Сложность решения задач (4)-(5),(6)-(7) обусловлена следующим:

I. Наличие криволинейных участков границы Г области Ω и условие Неймана на этой границе.

2. В ряде случаев существуют кратные или близкие собственные значения.

3. Для вычисления спектральных характеристик, таких,как добротность, мощность потерь в проводящих поверхностях, запасенная энергия и др.,необходимо обеспечить высокую точность вычислений как собственных значений, так и собственных функций.

Отмечено, что при численном решении этих задач нужно построить вычислительные схемы высокого порядка точности и выбрать эффективный метод решения алгебраической задачи (3). На основе тщательно проведенного анализа ряда существующих методов и программ в диссертации предложено аппроксимировать эти задачи восьмиузловыми изопараметрическими конечными элементами, а для решения задачи (3) использовать метод итерации подпространств (МИП), развитый в работах Рутисхаузера, Баса, Парлетта. Основным шагом МИП является решение на каждой итерации системы линейных алгебраических уравнений с матрицей A_h. Для небольшой размерности этой матрицы ($\sim$I500) удобно воспользоваться прямым методом решения, основанным на ее декомпозиции $A_h = L_h^T D_h L_h$, L_h – верхняя треугольная матрица с единицами на диагонали, D_h – диагональная матрица. Реализация этого разложения требует хранения только верхней половины профиля матрицы A_h, что приводит к существенному уменьшению требуемой памяти ЭВМ.

Выбор такого способа решения поставленных задач предполагает разработку алгоритмов для автоматического построения сетки, перенумерации узлов сетки с целью минимизации длины профиля матриц жесткости A_h и массы B_h, их восстановление из локальных (на каждом элементе) матриц жесткости и массы и т.д. Все разработанные алгоритмы реализованы в пакете прикладных программ MULTIMODE. При этом особое внимание уделено мобильности программ, осуществлению динамического распределения памяти, проведению вычислений с двойной точностью при использовании ЭВМ серии ЕС. Кроме этого, обеспечен (при наличии соответствующих устройств) графический вывод результатов работы программ автоматического построения сетки и программ, обрабатывающих полученные результаты с целью вычисления необходимых вторичных величин.

Численные эксперименты при решении задач, имеющих аналитическое решение, проведены на последовательностях вдвое вложенных сеток.Они подтвердили теоретическую точность вычислительных схем, которая является величиной четвертого порядка от шага сетки. При расчете резонаторов,для которых существуют экспериментальные измерения, получено

совпадение расчетных и экспериментальных результатов с точностью 10^{-4} МГц. Сравнение результатов вычислений по ППП MULTIMODE с результатами существующих программ при использовании одинаковых ЭВМ для расчета одного и того же резонатора, показало, что достижение одинаковой точности осуществляется представляемым пакетом в 10–100 раз быстрее. Отметим, что ППП MULTIMODE, в отличие от ранее разработанных пакетов аналогичного назначения,позволяет рассчитывать периодические структуры (задача (6)-(7)), что дает принципиально новые возможности проектировщикам резонаторной части линейных ускорителей.

Вторая часть диссертации посвящена разработке методов численного решения спектральной задачи для трехмерного уравнения Шредингера, соответствующего квантовомеханической системе трех заряженных частиц.

В главе II "Уравнение Шредингера системы трех частиц с кулоновским взаимодействием" выводится спектральная задача для определения значений энергии связанных состояний квантовомеханической системы трех частиц. Соответствующее уравнение Шредингера в представлении полного момента J получено в сфероидальных (ξ, η, R) и гиперсферических $(\alpha, \theta, \mathcal{R})$ координатах. Рассмотрены случаи $J = 0$ и $J = 1$, наиболее важные при изучении процессов мюонного катализа ядерных реакций изотопов водорода, а также и для исследования гелиевоподобных систем. В гиперсферических координатах при $J = 1$ необходимо найти число $\varepsilon < 0$ и вектор-функцию $F(\alpha, \theta, \mathcal{R}) = (F_0(\alpha, \theta, \mathcal{R}), F_1(\alpha, \theta, \mathcal{R}))$, удовлетворяющие системе уравнений

$$\left\{ \begin{pmatrix} T & T_{01} \\ T_{01}^* & T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_0 & V_1 \\ V_1 & V_2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \end{pmatrix}, \qquad (8)$$

где $T \equiv -\frac{1}{\mathcal{R}^2 \tau} \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} \frac{1}{2} \mathcal{R}^2 \tau \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} + t$, $t \equiv -\frac{1}{\tau} \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\mathcal{R}}{4} \sin^2\alpha \sin\theta \frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\mathcal{R}}{4} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$,

$$T_{01} \equiv -\frac{1}{\tau} \frac{1}{2} \mathcal{R} \cos^2\frac{\alpha}{2} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \alpha}, \quad \tau = \frac{\mathcal{R}^3}{8} \sin^2\alpha \sin\theta,$$

$$V_0 = \frac{1}{\mathcal{R}} V + \frac{1}{\mathcal{R}^2 \sin^2\frac{\alpha}{2}}, \quad V_1 = -\frac{\operatorname{cotg}\theta}{\mathcal{R}^2 \sin^2\frac{\alpha}{2}}, \quad V_2 = \frac{1}{\mathcal{R}} V + \frac{2}{\mathcal{R}^2 \sin^2\alpha \sin\theta},$$

$$V=\frac{\sqrt{M}}{\sin\frac{\alpha}{2}}\left\{-\sum_{j=a,b} Z_j\left[\frac{M}{m}\cot^2\frac{\alpha}{2}+2\rho_j\cot\frac{\alpha}{2}\cos\theta+\rho_j^2\right]^{-1/2}+Z_a Z_b\right\}.$$

Здесь Z_a и Z_b – заряды тяжелых частиц, (Z_c = -I), а константы M, m, ρ_a, ρ_b определяются через массы M_a, M_b и M_c рассматриваемых частиц. Независимые переменные изменяются в области $\Omega=\{0\le\alpha\le\pi,\ 0\le\theta\le\pi,\ 0\le R<\infty\}$, R – гиперрадиус системы. Граничные условия, учитывающие корректное поведение волновой функции F, получены из исследования поведения функций τV_i, i = 0,I,2 вблизи границы области Ω и имеют вид

$$\lim_{\alpha\to 0,\pi}\sin^2\alpha\frac{\partial F_i}{\partial\alpha}=0,\quad \lim_{\theta\to 0,\pi}\sin\theta\frac{\partial F_0}{\partial\theta}=0,\quad F_1(\alpha,0,R)=F_1(\alpha,\pi,R)=0, \qquad (9)$$

$$\lim_{R\to 0}R^5\frac{\partial F_i}{\partial R}=0,\quad F_i\big|_{R=R_{max}\gg 1}=0,\quad i=0,1. \qquad (I0)$$

Получено также уравнение Шредингера системы трех частиц в сфероидальных координатах (ξ,η,R), R – расстояние между частицами a и b. В отличие от (8), соответствующий оператор T содержит смешанные производные по переменным ξ, R и η, R. При помощи перехода от координат (ξ,η,R) к координатам ($\xi,\eta,\mathcal{R}$), $\mathcal{R}$ – гиперрадиус системы трех частиц, получен канонический вид этого уравнения. Показано, что во всех рассмотренных случаях соответствующий дифференциальный оператор является самосопряженным и выведена вариационная постановка этих задач.

Глава III "Численные методы решения трехмерного уравнения Шредингера путем его редукции к системе обыкновенных дифференциальных уравнений" посвящена разработке одной модификации метода Канторовича. В данном подходе предлагается решение задачи (8)-(I0) $F(\alpha,\theta,R)$ разложить в ряд по собственным функциям спектральной задачи

$$\left\{\begin{pmatrix} t & T_{01}\\ T_{01}^{*} & t\end{pmatrix}+\begin{pmatrix} V_0 & V_1\\ V_1 & V_2\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\Phi_0\\ \Phi_1\end{pmatrix}=E(R)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Phi_0\\ \Phi_1\end{pmatrix}. \qquad (II)$$

Здесь собственная функция $\Phi(\alpha,\theta;R)=(\Phi_0,\Phi_1)$ удовлетворяет граничным условиям (9), условию ортонормированности $\int_{\Omega_1}\tau(\Phi_0^i\Phi_0^j+\Phi_1^i\Phi_1^j)\,d\alpha\,d\theta=\delta_{ij}$, $\Omega_1=\{0\le\alpha\le\pi,\ 0\le\theta\le\pi\}$ и зависит от гиперрадиуса R как от параметра. Подстановка формального разложения решения задачи (8)-(I0)

$$F_0(\alpha,\theta,R)=\sum_i\chi_i(R)\Phi_0(\alpha,\theta;R),\quad F_1(\alpha,\theta,R)=\sum_i\chi_i(R)\Phi_1(\alpha,\theta;R) \qquad (I2)$$

в соответствующий вариационный функционал и его минимизация приводят к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений для определения значения энергии ε и коэффициентов $\chi=\{\chi_i(R)\}$ разложения (I2). Эта задача записывается в виде

$$-\frac{1}{2}I\frac{1}{R^2}\frac{d}{dR}R\frac{d}{dR}\chi+U\chi+Q\frac{d\chi}{dR}+\frac{1}{R^2}\frac{d}{dR}R^2Q\chi=\varepsilon I\chi, \qquad (I3)$$

$$\lim_{R\to 0}R^2\frac{d\chi}{dR}=0,\quad \chi\big|_{R=R_{max}}=0. \qquad (I4)$$

Эффективные потенциалы U и Q вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} U_{ij}(R)&=\frac{1}{2}\int_{\Omega_1}\tau\left(\frac{\partial\Phi_0^i}{\partial R}\frac{\partial\Phi_0^j}{\partial R}+\frac{\partial\Phi_1^i}{\partial R}\frac{\partial\Phi_1^j}{\partial R}\right)d\alpha\,d\theta+\frac{1}{2}\left(E_j+E_i+\frac{3}{2}\right)\delta_{ij},\\ Q_{ij}&=(1-\delta_{ij})\tilde{Q}_{ij},\quad \tilde{Q}_{ij}=-\frac{1}{2}\int_{\Omega_1}\tau\left(\Phi_0^i\frac{\partial\Phi_0^j}{\partial R}+\Phi_1^i\frac{\partial\Phi_1^j}{\partial R}\right)d\alpha\,d\theta,\\ I_{ij}&=\delta_{ij}. \end{aligned} \qquad (I5)$$

При этом выполняются условия $U_{ij}(R)=U_{ji}(R)$, $Q_{ij}(R)=-Q_{ji}(R)$. В отличие от используемого ранее разложения решения в сфероидальных координатах (ξ,η,R) по волновым функциям задачи двух центров, задача (8)-(I0) имеет только дискретный спектр, что позволяет ожидать быструю сходимость рядов (I2).

Реализация этой модификации метода Канторовича требует разработки методов вычисления термов $E_i(R)$ и соответствующих волновых функций $\Phi_i(\alpha,\theta;R)$, эффективных потенциалов $U_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$ и решения задачи (I3), (I4).

Решение задачи (9)-(II) и вычисление матричных элементов $U_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$ осуществлялось путем развития заложенных в ППП MULTIMODE методов, что позволило проиллюстрировать более широкие возможности пакета. К решению задачи (I3)-(I4) применены квадратичные одномерные элементы, что обеспечило высокую точность вычисления значения энергии ε.

Подробно исследована система $Ps^-=e^+e^-e^-$ при J = 0. Вычислены первые десять термов задачи (9)-(II), обнаружены точки квазипересечения термов. Показано, что при решении задачи (I3)-(I4) достаточно использовать 3-5 уравнений, чтобы получить значение энергий основного состояния и некоторых высоковозбужденных состояний с точностью 10^{-4} а.е. Тем самым подтвержден факт быстрой сходимости рядов (I2).

Естественным применением предложенного базиса является расчет процессов рассеяния мезоатомов в высоковозбужденных состояниях, если движение по гиперрадиусу (радиусу) считать классическим.

В этом случае значение термов E_i, E_j и матричного элемента Q_{ij} в окрестности точки квазипересечения термов достаточно для вычисления вероятностей перехода $P(i\to j)$.

В последнем параграфе данной главы развиты способы вычисления вероятности распределения мюонов по осколкам мгновенного деления ядра мезоатома урана и плутония. Новым моментом здесь является вычисление термов $E_i(R)$ задачи двух центров и матричного элемента Q_{ij} в потенциале, учитывающем конечные размеры ядра.

Эта задача сугубо двумерная, и к ее решению успешно применены разработанные ранее методы.

В главе IУ "Численное решение трехмерного уравнений Шредингера сеточными методами" предлагается новый подход к вычислению значений энергии и волновых функций связанных состояний квантовомеханической системы трех заряженных частиц. В отличие от существующих методов ее решения (различные модификации метода Канторовича и вариационные методы) в диссертации предложено решать эту задачу в некоторой специально выбранной конечной области Ω_k изменения независимых переменных, такой, что $\operatorname{diam} \Omega_k \gg 1$, а численное решение этой проблемы проводить по методу конечных элементов. В этом случае точность полученного решения можно оценить при помощи общей теории МКЭ. В результате аппроксимации приходим к обобщенной алгебраической проблеме собственных значений (3) для матриц A_h и B_h , размерности несколько десятков тысяч. Основная трудность реализации этого подхода состоит в разработке эффективного метода решения частичной проблемы (3).

В диссертации для решения этой задачи используется метод итерации альтернирующих подпространств (МИАП). МИАП - это метод для одновременного вычисления минимальных p собственных значений и соответствующих им собственных векторов задачи (3) при помощи минимизации функционала Рэлея-Ритца в специально выбранных подпространствах (альтернирующие подпространства) на последовательностях вложенных сеток. В предположении о простоте собственных значений задачи (3) доказана теорема о сходимости МИАП.

Рассмотрены различные способы построения альтернирующих подпространств. В частности, при их построении на единичных ортах предложены вычислительные схемы, допускающие решение задачи при использовании параллельных вычислительных систем. Особое внимание уделено вопросам оптимизации вычислительных затрат. На примере модельной задачи показано, что при использовании вложенных сеток необходимое время ЭВМ для решения задачи на каждой сетке линейно зависит от числа узлов сетки. Отметим, что максимальное число узлов в расчетах равнялось 33792.

Разработанный метод применен к вычислению значения энергии и волновых функций связанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $tt\mu$ при значении полного орбитального момента $J = 0$ и значении энергии основного состояния мезомолекулы $dt\mu$ при $J = 1$. При аппроксимации уравнения Шредингера, записанного в сфероидальных координатах (ξ, η, R), использовались трилинейные, триквадратичные лагранжевые элементы и 20-узловые сирендиповые элементы. В таблице приведены результаты вычисления значения энергии ε_{10} основного состояния мезомолекулы $dt\mu$ при $J = 1$. Решалась задача (8)-(I0) в сфероидальных координатах. В таблице L_1, L_2, L_3 означают число интервалов в направлении ξ, η, R , N_e - число элементов, N - число узлов сетки, NN - число неизвестных, m - число итераций МИАП на каждой сетке.

Таблица

L_1	L_2	L_3	N_e	N	NN	m	$-\varepsilon_{10}$
5	2	6	60	330	456	4	0,523950
I0	4	I2	480	2280	3720	5	0,541444
20	8	24	3840	I6800	3II92	5	0,5427I98

$$\alpha = \ln \frac{\varepsilon_{10}^{h} - \varepsilon_{10}^{h/2}}{\varepsilon_{10}^{h/2} - \varepsilon_{10}^{h/4}} / \ln 2 = 3.8 \qquad -\varepsilon_{10}^{\text{экстр.}} = 0{,}5428202$$

Анализ результатов показывает, что точность вычислений оценивается величиной $3\cdot 10^{-5}$ а.е., что соответствует точности $5\cdot 10^{-2}$ эВ. Сравнение значения $\varepsilon_{10}(\text{эВ}) = -232{,}38$ с другими известными результатами подтверждает эту точность.

В конце главы приведена модификация МИАП для решения системы линейных алгебраических уравнений с матрицей A_h .

В заключении диссертации формулируются результаты представленных исследований.

Ш. Основные результаты и выводы

I. Получены вычислительные схемы четвертого порядка точности для решения спектральных задач с переменными коэффициентами в сложных двумерных областях изменения независимых переменных. На основе разработанных методов и алгоритмов создан специализированный пакет прикладных программ MULTIMODE для определения с высокой точностью азимутально однородных спектральных характеристик осесимметричных резонаторов и периодических ускоряющих структур.

2. Сформулированы спектральные задачи для определения значений энергии и волновых функций связанных состояний системы трех заряженных частиц в сфероидальных (ξ, η, R) и в гиперсферических (α, θ, R) координатах. Получены вариационные функционалы и на их основе выведен канонический вид соответствующего уравнения Шредингера.

3. Предложена и реализована модификация метода Канторовича для численного решения этой задачи путем разложения ее решения по двумерному гиперсферическому базису, определенному в конечной области изменения переменных α и θ .

4. На основе метода групповой релаксации и его адаптации на классе многомерных спектральных задач математической физики в дискретном представлении разработан новый метод решения частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений для симметричных положительно определенных ленточных матриц большой размерности. Доказана сходимость метода и исследованы вопросы его оптимальной реализации.

5. На основе единой аппроксимации возникающих задач по методу конечных элементов и с помощью разработанных методов, алгоритмов и программ получен ряд новых физических результатов.

6. Предложенный единый подход к численному решению многомерных задач на собственные значения является основой для разработки новых методов решения спектральных и нелинейных задач математической физики.

Публикации по теме диссертации:

I. Касчиева В.А., Касчиев М.С., Федосеев А.И. Численное моделирование аксиально-симметричных резонаторов методом конечных элементов, ОИЯИ, II-8I-695, Дубна, I98I.
2. Касчиева В.А., Касчиев М.С., Кочин В.Н., Федосеев А.И. Пакет программ MULTIMODE для расчета спектров частот осесимметричных и продольно-однородных электромагнитных резонаторов методом конечных элементов. Препринт ИФВЭ 82-92, Серпухов, I982.

3. Гусев В.В., Игошин В.В., Касчиева В.А., Касчиев М.С., Кочин В.Н., Федосеев А.И. Расчет спектров частот электромагнитных резонаторов в пакете программ MULTIMODE. Труды УШ ВСУЗЧ. Дубна: ОИЯИ, I983, с.I53.
4. Касчиев М.С., Касчиева В.А., Штрайт Э., Гусев В.В., Федосеев А.И. Пакет прикладных программ MULTIMODE для численного моделирования осесимметричных и продольно-однородных электромагнитных резонаторов. Алгоритмы и реализация в ОС ЕС. В сб.: Пакеты прикладных программ. Системное наполнение. М., Наука. Сер.Алгоритмы и алгоритмические языки, с.I04, I984. Препринт ОИЯИ, РII-83-I46, Дубна, I983.
5. Касчиев М.С., Пузынин И.В., Парамонов В.В. Вычисление электромагнитных полей в периодических структурах, ОИЯИ, PII-83-724, Дубна, I983.
6. Fedoseyev A.I.,Gusev V.V.,Kaschiev M.S.,Kaschieva V.A.,Paramonov V.V. MULTIMODE - A Powerful Code for Frequensy Spectrum Computation of Electromagnetic Fields in Axially Simmetric Cavities and Longitudinally Homogeneous Waveguides of Arbitrary Shape. NIM, Section A, v.227, N3, 1984, p.411.
7. Аникеева В.А., Гонин И.В., Касчиев М.С., Парамонов В.В., Федосеев А.И. Численное моделирование полей с вариациями по азимуту в осесимметричных резонаторах. Формулировка задачи и метод решения. Препринт ИФВЭ, 84-92, Серпухов, I984.
8. Касчиев М.С. Численное решение спектральных задач электродинамики. Международная конференция по численным методам и приложениям. Тезисы докладов, София, БАН, I984, с.II8.
9. Касчиев М.С., Касчиева В.А. Пузынин И.В., Гонин И.В., Парамонов В.В. Вычисление дисперсионных характеристик периодических ускоряющих структур. Труды У Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. ОИЯИ, ДIO,II-84-8I8, I985, Дубна, с.I8I.
IO. Гонин И.В., Гусев В.В., Касчиев М.С., Парамонов В.В., Федосеев А.И. Вычисление характеристик периодических структур с помощью пакета программ MULTIMODE . Препринт ИЯИ АН СССР, М., П-04I2, I985.
II. Гусев В.В., Гонин И.В., Касчиев М.С., Касчиева В.А., Пузынин И.В., Парамонов В.В., Федосеев А.И. Расчет полного спектра колебаний в осесимметричных, продольно-однородных резонаторах, волноводах и в периодических ускоряющих структурах в режимах бегущих и стоячих волн. Труды IX ВСУЗЧ.Дубна:ОИЯИ,I985,с.I37.

12. Касчиев М.С., Мамонов В.Н., Обухов Ю.Л., Решетникова К.А., Рубин С.Б. Расчет высокочастотных характеристик диафрагмированных волноводов. ОИЯИ, Р9-87-268, Дубна, 1987.
13. Гусев В.В., Касчиев М.С., Пузынин В.И. Автоматическая генерация сетки в пакете программ MULTIMODE . ОИЯИ, Р11-87-421, Дубна, 1987.
14. Виницкий С.И., Касчиев М.С. Уравнение Шредингера трех частиц в сфероидальной системе координат. ЯФ, т.44, вып.2,8, 1986, с. 386. Препринт ОИЯИ Е4-85-467, Дубна, 1985.
15. Виницкий С.И., Касчиев М.С., Пузынин И.В. Уравнение Шредингера системы трех частиц в гиперсферических координатах. ОИЯИ, Р5-87-231, Дубна, 1987.
16. Карпешин Ф.Ф., Касчиев М.С., Касчиева В.А., Листенгартен М. Вероятность увлечения мюона легким осколком деления мезоплутония. УШ ВКФЭАС, тезисы докладов, 1981. Л.: Изд-во ЛГУ, с.237.
17. Карпешин Ф.Ф., Касчиев М.С., Касчиева В.А. Распределение мюона по осколкам мгновенного деления мезоплутония. ЯФ, т.36, вып.6,8, 1982, с.336.
18. Карпешин Ф.Ф., Касчиев М.С., Касчиева В.А. Распределение мюонов по осколкам мгновенного деления ядра в μ -мезоатомах урана и плутония. Вестник ЛГУ, сер.4, 1986, вып. 2 , с.71.
19. Абрашкевич А.Г., Виницкий С.И., Касчиев М.С., Пузынин И.В. Двумерный базис для задачи трех тел в гиперсферических координатах. ОИЯИ, Р11-87-749, Дубна, 1987.
20. Гусев В.В., Касчиев М.С. Метод итерации альтернирующих подпространств для численного решения некоторых трехмерных спектральных задач математической физики. ОИЯИ, Р11-85-758, Дубна, 1985.
21. Гусев В.В., Касчиев М.С. Сходимость метода итераций альтернирующих подпространств для решения частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений. ОИЯИ, Р11-87-965, Дубна, 1987.
22. Касчиев М.С. Об одном итерационном методе минимизации функционала Рэлея-Ритца. Труды Международной конференции по современным проблемам численного анализа. Москва, ОВМ АН СССР, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 декабря 1987 года.