

P2-2001-121

Н.Б.Скачков¹, Т.М.Соловьева²

**РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ
ДЛЯ СИСТЕМЫ ДВУХ ФЕРМИОНОВ**

Направлено в журнал «Ядерная физика»

¹E-mail: skachkov@cv.jinr.dubna.su

²E-mail: tanyusha@cv.jinr.dubna.su

1 Введение

Описание энергетического спектра двухчастичных связанных состояний является важной физической задачей. Для этой цели широко используются трехмерные релятивистские квазипотенциальные уравнения с ядрами, построенными из фейнмановских матричных элементов амплитуды взаимодействия с помощью операции приравнивания времен двух частиц. Одним из следствий перехода к одновременному формализму является появление зависимости оператора взаимодействия (ядра интегрального уравнения) от полной энергии системы. Таким образом задача нахождения энергетического спектра системы становится нелинейной. В работе [1] был предложен и обоснован итерационный метод решения полученных нелинейных интегральных уравнений. Результаты численных расчетов энергетического спектра системы двух скалярных частиц в случае обмена скалярным фотоном приведены там же. Целью настоящей статьи является выполнение аналогичных вычислений в спиновом случае.

2 Система двух фермионов

Релятивистские интегральные уравнения, описывающие взаимодействие двух фермионов в рамках одновременного формализма, были получены в [2]. Здесь мы ограничимся нулевым орбитальным числом $l = 0$ и будем рассматривать двухчастичную систему с полным спином, равным нулю, $S = 0$ и с полным спином, равным единице, $S = 1$. Мы будем считать, что массы фермионов равны друг другу: $m_1 = m_2 = m$, а масса частицы, переносящей взаимодействие, равна нулю. В этом случае релятивистское интегральное уравнение для волновой функции записывается в системе центра инерции $|\vec{p}_1| = |\vec{p}_2| = p$ следующим образом [3]:

$$2\sqrt{m^2 + p^2}(M - 2\sqrt{m^2 + p^2})\psi(p) = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty \frac{m^2 dk}{\sqrt{m^2 + k^2}} V_l^S(p, k, M)\psi(k). \quad (1)$$

Здесь p и k — модули импульсов фермионов в начальном и конечном состояниях; $\psi(p)$ — волновая функция системы; M и E — искомые масса и энергия связи,

$$M = 2m + E;$$

а V_l^S — квазипотенциал, построенный из матричных элементов амплитуды взаимодействия, рассчитанной в рамках квантовой электродинамики (КЕД); α — постоянная тонкой структуры, $\alpha = 1/137.0359895$ [4].

Соответствующая формула для $V_0^0(p, k, M)$ в приближении однофотонного обмена в случае $S = 0$ имеет вид (см. [2], форм. (2.36)) :

$$V_0^0(p, k, M) = 2(m^2 - 2\sqrt{m^2 + p^2}\sqrt{m^2 + k^2}) \times \\ \times \ln \left| \frac{p + k + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M}{|p - k| + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M} \right|, \quad (2)$$

при $S = 1$ ядро $V_0^1(p, k, M)$ задается следующим образом (см. [2], форм. (3.25)):

$$V_0^1(p, k, M) = \{R_1 \ln \left| \frac{p+k+\sqrt{m^2+p^2}+\sqrt{m^2+k^2}-M}{|p-k|+\sqrt{m^2+p^2}+\sqrt{m^2+k^2}-M} \right| + R_2 + R_3 + R_4\}pk/2, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} R_1 &= 4 \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma - \gamma'} \left(\frac{m(2\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2})}{pk} + \gamma \left(\frac{m}{\sqrt{m^2+p^2} + m} + 2 \right) \right) + \\ &+ \gamma(2\gamma + m^2/(pk)), \\ R_2 &= 2 \frac{\gamma'^2 - 1}{\gamma' - \gamma} \left(\frac{m(2\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2})}{pk} + \gamma' \left(\frac{m}{\sqrt{m^2+p^2} + m} + 2 \right) \right) \times \\ &\times \ln \left| \frac{m^2 + \sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} + pk}{m^2 + \sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} - pk} \right|, \\ R_3 &= 4 \frac{\gamma'^2 - 1}{\gamma' - \gamma} \left(\frac{m(2\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2})}{pk} + \gamma' \left(\frac{m}{\sqrt{m^2+p^2} + m} + 2 \right) \right) \times \\ &\times \frac{\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2} - M}{(2\sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} + 2m^2 - p^2 - k^2)^{1/2}} \times \\ &\times \left[\operatorname{arctg} \frac{(2\sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} + 2m^2 - p^2 - k^2)^{1/2}}{p+k} - \right. \\ &\left. - \operatorname{arctg} \frac{(2\sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} + 2m^2 - p^2 - k^2)^{1/2}}{|p-k|} \right], \\ R_4 &= \frac{|p-k|^3 - (p+k)^3}{3p^2k^2} \times \frac{\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2} - M}{\sqrt{m^2+p^2} + m} + \\ &+ \frac{(p+k - |p-k|)(\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2} - M)}{2pk} \left[-4m^2/pk - \right. \\ &- 8 \left(\gamma + \frac{p^2+k^2}{2pk} \right) + 4m \frac{2\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2}}{pk} + \\ &+ 4 \left(\frac{m}{\sqrt{m^2+p^2} + m} + 2 \right) \times \\ &\times \left(\gamma + \frac{(\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2})^2}{2pk} \right) \left. \right] + 4m^2/pk + 8\gamma - \\ &- 4m \frac{2\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2}}{pk} - 4 \left(\frac{m}{\sqrt{m^2+p^2} + m} + 2 \right) (\gamma + \gamma'), \\ \gamma &= (p^2 + k^2 - (\sqrt{m^2+p^2} + \sqrt{m^2+k^2} - M)^2)/(2pk), \\ \gamma' &= (\sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} + m^2)/(pk), \\ \gamma'' &= (\sqrt{m^2+p^2}\sqrt{m^2+k^2} - m^2)/(pk). \end{aligned}$$

3 Итерационный метод решения интегрального уравнения с нелинейной зависимостью от собственного числа

Интегральные уравнения с нелинейной зависимостью от полной энергии системы сводятся к нелинейной спектральной задаче. В нашей предыдущей работе [1] был подробно описан и математически строго обоснован итерационный метод решения подобных спектральных задач с оператором, зависящим от собственного числа. Отличие разработанного нами метода от известных методов решения нелинейных интегральных уравнений заключается в том, что итерируемой величиной здесь является собственное число, а не собственная функция.

Вкратце, идея метода состоит в следующем. На каждом итерационном шаге в ядро интегрального оператора подставляется собственное число с фиксированным номером k , выбранное из совокупности собственных чисел, вычисленных на предыдущем шаге процесса итераций. На первом итерационном шаге в ядро подставляется начальное приближение искомого собственного числа. Если нет каких-либо сведений о характере расположения собственных чисел, начальное приближение приходится выбирать произвольно. Однако, исходя из физической постановки задачи, такие априорные (чаще всего качественные) данные можно определить, и это позволяет удачным выбором начального приближения ускорить итерационный процесс. Незвестные волновые функции вычисляются как обычные собственные функции линейной спектральной задачи. Для этого в наших расчетах мы использовали программу F02AGF из библиотеки NAGLIB, реализующую QR-алгоритм [5]. Признаком близости получаемых приближений к искомой величине собственного значения является достижение малой величины разности ϵ между двумя приближенными собственными значениями, вычисленными на двух следующих друг за другом итерационных шагах. Как только эта разность становится меньше заранее заданного числа, характеризующего точность решения задачи, итерационный процесс считается законченным. Собственное значение с соответствующей ему собственной функцией, полученные на последнем итерационном шаге, принимаются за искомое решение задачи.

4 Результаты вычислений

Описанным выше методом были получены энергетические спектры для связанной системы двух фермионов. Эти спектры представлены в табл.1 в безразмерных единицах. Вопрос оценки погрешностей собственных чисел, вычисленных итерационным методом, будет рассмотрен в приложении. Если умножить данные этой таблицы на массу определенной частицы, то можно получить спектр энергий связи определенной двухчастичной системы, например, e^+e^- , $\mu^+\mu^-$ и других.

Таблица 1: Спектр энергий связи в безразмерных единицах

	S = 0	S = 1
E_1/m	$-0.125837237(1) \cdot 10^{-4}$	$-0.125820738(1) \cdot 10^{-4}$
E_2/m	$-0.025983124(2) \cdot 10^{-4}$	$-0.025981041(2) \cdot 10^{-4}$
E_3/m	$-0.011648115(2) \cdot 10^{-4}$	$-0.011647192(2) \cdot 10^{-4}$
E_4/m	$-0.006613318(3) \cdot 10^{-4}$	$-0.006613126(3) \cdot 10^{-4}$

Таблица 2: Частоты переходов между уровнями позитрония

	Эксперимент, МГц	Значение, полученное с помощью теории возмущений, МГц	Численный расчет, МГц
$1^3S_1 - 1^1S_0$	203389.10(0.74)	203392.12(0.50)	203861(25)
$2^3S_1 - 1^3S_1$	1233607216.4(3.2)	1233607222.6(0.8)	1233609106(37)

Наиболее изученной из всех двухфермионных систем является позитроний — связанное состояние электрона и позитрона. Разность энергий основных состояний орто- и паразитрония, а также разность энергий основного и первого возбужденного состояний ортопозитрония были измерены экспериментально [6, 7]. Полученные значения* для разностей интересующих нас энергетических уровней представлены в четвертой колонке табл.2 в единицах МГц вместе с экспериментальными данными и результатами теоретического расчета других авторов (третья колонка) [8].

Из этой таблицы видно, что в рамках приближения однофотонного обмена получено достаточно хорошее согласие численного расчета с экспериментальными данными. Расхождение с результатами [8] может быть отнесено как на счет различия видов потенциалов в однофотонном приближении, так и на счет использования в [8] поправок на высшие порядки теории возмущений по константе α .

Перейдем теперь к рассмотрению связанного состояния $\mu^+\mu^-$. Будем называть (как и в случае позитрония) синглетное состояние димюония парадимюоном, а триплетное — ортодимюоном. Эксперименты по изучению димюония пока незавершены. Однако в ряде работ [9, 10] при решении уравнения Бете — Солпитера для связанных состояний с помощью теории возмущений были получены значения разности энергий основных состояний орто- и парадимюония, а также разности энергий первых возбужденных состояний орто- и парадимюо-

*Используя значение для постоянной Планка $h = 6.6260755 \cdot 10^{-34}$ Дж·с и соотношение $1 \text{ эВ} = 1.60217733 \cdot 10^{-19}$ Дж [3], получим, что $1 \text{ эВ} = 241798834$ МГц. Масса электрона равна 510999.07 эВ [3].

Таблица 3: Частоты переходов между уровнями димюония

	Значение, рассчитанное с помощью теории возмущений, МГц	Численный расчет, МГц
$1^3S_1 - 1^1S_0$	$42333.5(2.7) \cdot 10^3$	$42151.8(5.1) \cdot 10^3$
$2^3S_1 - 2^1S_0$	$5290.07(0.34) \cdot 10^3$	$5321.7(10.2) \cdot 10^3$

ония. В третьей колонке табл.3 приведены результаты, полученные нами с помощью итерационного метода, и данные из работы [10] (средняя колонка). При расчетах использовалось значение массы мюона 105658389 эВ [3]. Полученные нами результаты достаточно близки к результатам расчета авторов работы [10].

5 Ширины распада парапозитрония и парадимюония на два γ -кванта

Вероятность распада парапозитрония на два фотона определяется с помощью следующего выражения [11] :

$$\Gamma(e^+e^- \rightarrow 2\gamma) = \frac{8}{\pi} \alpha^2 m_e \left| \int_0^\infty d\chi \chi \psi(\chi) \right|^2, \quad (4)$$

где $\chi = \ln[(p + \sqrt{p^2 + m_e^2})/m_e]$ — быстрота, сопряженная относительно импульсу частицы, m_e — масса электрона.

Условие нормировки для волновой функции $\psi(p)$ в случае зависящего от энергии потенциала записывается следующим образом [12] :

$$\frac{1}{(2\pi)^6} \int \psi(p) \left\{ \frac{\partial}{\partial M} [G_0^{-1}(p, M) - V_i^S(p, k, M)] \right\} \psi(k) dp dk = 2M,$$

где $G_0(p, M)$ — свободная функция Грина уравнения (1)

$$G_0^{-1}(p, M) = 2\sqrt{m^2 + p^2}(M - 2\sqrt{m^2 + p^2}).$$

Интегрирование первой собственной функции (основное состояние парапозитрония), найденной при численном решении уравнения (1) с потенциалом (2) в формуле (4), приводит к следующему значению вероятности распада парапозитрония на два γ -кванта :

$$\Gamma(e^+e^- \rightarrow 2\gamma) = 7.9843(72) \cdot 10^9 c^{-1}, \quad (5)$$

находящемуся в хорошем согласии с величиной, измеренной в эксперименте [13]:

$$\Gamma(e^+e^- \rightarrow 2\gamma) = 7.9909(17) \cdot 10^9 c^{-1}. \quad (6)$$

Оценка погрешности вычисления собственных функций, определяющей погрешность значения ширины распада, была произведена в приложении.

Ранее с помощью итерационного метода нами было решено релятивистское квазипотенциальное уравнение для двух скалярных частиц. Энергетический спектр, полученный при его решении, представлен в нашей предыдущей работе [14]. Отметим, что в скалярном случае квазипотенциал $V_0(p, k, M)$ имеет вид :

$$V_0(p, k, M) = 2 \ln \left| \frac{|p - k| + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M}{p + k + \sqrt{m^2 + p^2} + \sqrt{m^2 + k^2} - M} \right|. \quad (7)$$

Используя первую собственную функцию, полученную при решении уравнения (1) с потенциалом (7), можно получить ширину распада основного состояния позитрония в скалярном приближении. Численное интегрирование по формуле (4) дает в этом случае следующее значение :

$$\Gamma(e^+e^- \rightarrow 2\gamma) = 7.9782(72) \cdot 10^9 c^{-1}. \quad (8)$$

Если при расчете по формуле (4) использовать первую собственную функцию, полученную при численном решении уравнения Шредингера [15] с кулоновским потенциалом, то можно получить значение ширины распада в нерелятивистском приближении:

$$\Gamma(e^+e^- \rightarrow 2\gamma) = 7.9635(72) \cdot 10^9 c^{-1}. \quad (9)$$

Используя модельную релятивистскую волновую функцию, авторы работы [11] рассчитали ширину распада паразитрония на два γ -кванта по формуле (4). В результате была получена величина $7.97 \cdot 10^9 c^{-1}$, близкая к значению ширины распада, вычисленному нами для случая скалярного приближения. Из сравнения (5), (6), (8) и (9) видно, что учет спиновых и релятивистских поправок при построении квазипотенциала улучшает согласие численного расчета и экспериментально измеренной величины ширины распада. Расчет ширины распада паразитрония проводился также в работах [16], [17] и [18]. Учет вкладов от диаграмм высших порядков теории возмущений приводит к величине $7.9895 \cdot 10^9 c^{-1}$ [18].

В работе [11] было также отмечено, что в приближении слабосвязанной системы для $\mu^+\mu^-$ -пары (то есть в пределе энергии связи, стремящейся к нулю) выражение для вероятности распада парадимюония на два фотона будет отличаться от (4) заменой $m_e \rightarrow m_\mu$ (m_μ — масса мюона) :

$$\Gamma(\mu^+\mu^- \rightarrow 2\gamma) = \Gamma(e^+e^- \rightarrow 2\gamma)(m_\mu/m_e). \quad (10)$$

Если теперь воспользоваться формулами (4) и (10), то можно получить значение вероятности распада основного состояния связанной системы $\mu^+\mu^-$ для спинорного уравнения (2) :

$$\Gamma(\mu^+\mu^- \rightarrow 2\gamma) = 1650.9(1.5) \cdot 10^9 c^{-1}$$

и для релятивистского скалярного уравнения (7) :

$$\Gamma(\mu^+\mu^- \rightarrow 2\gamma) = 1649.6(1.5) \cdot 10^9 c^{-1}.$$

Сравним значения вероятности распада, полученные при решении нелинейных интегральных уравнений с потенциалами (2) и (7) итерационным методом, с результатами других авторов. В [11] при вычислении ширины распада парадимюония на два фотона по формуле (10) с использованием модельной релятивистской волновой функции была получена величина, близкая к нашему расчету для скалярного случая, а именно $1648 \cdot 10^9 c^{-1}$. Проводя расчет по формуле $\Gamma^{(0)}(n^1S_0) = \alpha^5 m_\mu / 2n^3$, определяющей ширину распада в ведущем порядке теории возмущений [19], получаем для основного состояния величину $1660.8 \cdot 10^9 c^{-1}$. Значение ширины распада $1680.3(0.5) \cdot 10^9 c^{-1}$ получается также из времени жизни парадимюония $\tau(1^1S_0) = 0.59512(18) \cdot 10^{-12}$ с, рассчитанного в работе [10] с учетом поправок высшего порядка по константе α . Таким образом, наши результаты находятся в хорошем согласии с результатами, полученными другими методами.

В табл.4 представлены полученные нами вероятности распада первых трех возбужденных состояний паразитрония и парадимюония. Здесь n – главное квантовое число. В расчетах использовались собственные функции с номерами 2,3 и 4, полученные при решении итерационным методом уравнения (1) с потенциалом (2). Проведение дальнейших экспериментов по изучению позитрония и димюония позволит проверить полученные нами результаты.

Таблица 4: Ширины распада возбужденных состояний (численный расчет)

n	Парапозитроний, c^{-1}	Парадимюоний, c^{-1}
2	$0.94651(55) \cdot 10^9$	$195.71(11) \cdot 10^9$
3	$0.27763(47) \cdot 10^9$	$57.405(97) \cdot 10^9$
4	$0.10467(39) \cdot 10^9$	$21.642(81) \cdot 10^9$

6 Заключение

Разработанным нами ранее методом были решены интегральные уравнения для волновой функции системы двух фермионов равной массы в случае электродинамического взаимодействия (квазипотенциал однофотонного обмена). Совпадение полученных нами результатов с известными экспериментальными данными, а также с результатами, полученными другими методами, показывает высокую эффективность итерационного метода решения интегральных уравнений, оператор которых зависит от собственного числа, в данном случае полной

энергии (или массы) составной системы. Случай КЭД, выбранный нами в данной работе, можно рассматривать как пример тестовой задачи, позволяющей провести сравнение как с результатами других авторов, так и с экспериментальными данными. В дальнейшем возможно применение этого метода для решения подобных интегральных уравнений, описывающих иные физические процессы.

7 Приложение. Оценки точности вычисления собственных чисел и собственных функций нелинейной спектральной задачи

Погрешность вычисления собственных чисел и собственных функций нелинейной спектральной задачи складывается из ошибки Δ , обусловленной аппроксимацией непрерывного уравнения (1) системой дискретных уравнений по методу Бубнова – Галеркина и погрешности δ , вносимой итерационным методом решения нелинейной дискретной спектральной задачи.

7.1. Для того чтобы свести уравнение (1) к проблеме собственных значений для матриц (алгоритмы решения которой хорошо разработаны), необходимо перейти от уравнения с непрерывной переменной к системе уравнений в конечномерных пространствах с дискретной переменной. Одним из возможных способов этого перехода является проекционный метод Бубнова – Галеркина [20]. Аппроксимация уравнения (1) по Бубнову – Галеркину на отрезке дискретизации R и равномерной сетке N ($R = N \cdot h$, h – шаг дискретизации, N – количество узлов), с помощью кусочно-линейных функций ϕ_N , определенных как

$$\phi_i(p) = \begin{cases} 0; & p < (i-1)h; \\ p/h + 1 - i; & (i-1)h \leq p \leq ih; \\ -p/h + 1 + i; & ih \leq p \leq (i+1)h; \\ 0; & p > (i+1)h, \end{cases} \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (11)$$

$$\phi_N(p) = \begin{cases} 0; & p < R-h; \\ p/h + 1 - N; & R-h \leq p \leq R; \\ 1; & p = R \\ (R/p)^3; & p > R, \end{cases} \quad i = N, \quad (12)$$

(при определении функции ϕ_N учитывается известная асимптотика искомой собственной функции $\psi(p) = O(p^{-3})$ при $p \rightarrow \infty$), приводит к следующему разложению сеточного решения (λ_N, ψ_N) по степеням шага дискретизации h :

$$\begin{aligned} \lambda_N &= \lambda + c_1 h^2 + O(h^4), \\ \psi_N &= \psi + c_2 h + O(h^2), \end{aligned}$$

где λ – точное собственное число уравнения (1) (здесь $\lambda = E/m$), ψ_N – точная собственная функция этого уравнения, а c_1 и c_2 – константы, не зависящие от h .

Для оценки точности полученных дискретных собственных чисел и собственных функций была проведена серия численных экспериментов на последовательности расширяющихся интервалов R и последовательности сгущающихся сеток N . Для уточнения результатов мы использовали экстраполяцию Ричардсона [21] относительно шага h , заключающуюся в получении приближенного решения более высокого порядка точности на основе приближенных значений, полученных на сетках с шагом h и $h/2$:

$$\lambda_{N_{1,2}} = -1/3\lambda_{N_1} + 4/3\lambda_{N_2} , \quad (13)$$

$$\psi_{N_{1,2}} = -1/3\psi_{N_1} + 4/3\psi_{N_2} . \quad (14)$$

Уточненное решение $\lambda_{N_{1,2}}, \psi_{N_{1,2}}$, построенное при помощи линейной комбинации из приближенных решений уравнения (1) λ_{N_1} и λ_{N_2} (вычисленных с точностью порядка h^2 на сетках с количеством узлов N_1 и N_2 , причем $N_2 = 2N_1$), а также ψ_{N_1} и ψ_{N_2} (вычисленных с точностью порядка h на тех же сетках) аппроксимирует точное решение λ, ψ с порядком h^4 для собственных чисел и с порядком h^2 для собственных функций.

Мы рассматривали уравнение (1) с потенциалами (2), (3) и (7), а также уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом [15]. Отрезок R (размерность отрезка дискретизации $-p/m$) выбирался исходя из требования обеспечить нужное число верных знаков в получаемом приближенном решении. Все представленные в настоящей работе результаты получены при $R = 0.16$ на двух сетках $N_1 = 400$, $h_1 = 0.0004$ и $N_2 = 800$, $h_2 = 0.0002$. Относительно малая величина R объясняется тем, что, собственные функции рассматриваемых уравнений сильно локализованы в окрестности точки $p/m = 0$.

Как известно [15], уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом

$$(E_n - p^2)\psi_n(p) = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty \ln \left(\frac{|p-k|}{p+k} \right) \psi_n(k) dk \quad (15)$$

имеет точное решение, представимое в аналитическом виде:

$$E_n = -\alpha^2 m/n^2 , \quad (16)$$

где n – главное квантовое число.

В табл.5 приведены абсолютные и относительные, выраженные в процентах, погрешности собственных чисел уравнения (1) с потенциалами (2), (3), (7) и уравнения (15):

$$\begin{aligned} \Delta\lambda_{N_1} &= |\lambda_{N_1} - \lambda_{N_{1,2}}| , & (\Delta\lambda/\lambda)_{N_1} &= |\lambda_{N_1} - \lambda_{N_{1,2}}|/|\lambda_{N_{1,2}}| \cdot 100\% , \\ \Delta\lambda_{N_2} &= |\lambda_{N_2} - \lambda_{N_{1,2}}| , & (\Delta\lambda/\lambda)_{N_2} &= |\lambda_{N_2} - \lambda_{N_{1,2}}|/|\lambda_{N_{1,2}}| \cdot 100\% , \\ \Delta\lambda_{exact} &= |\lambda_{exact} - \lambda_{N_{1,2}}| , & (\Delta\lambda/\lambda)_{exact} &= |\lambda_{exact} - \lambda_{N_{1,2}}|/|\lambda_{exact}| \cdot 100\% . \end{aligned}$$

Здесь λ_{N_1} – собственное число, вычисленное на сетке N_1 ; а λ_{N_2} – собственное число, вычисленное на сетке N_2 ; $\lambda_{N_{1,2}}$ – собственное число, проэкстраполированное по формуле (13); а $\lambda_{exact} = E_{exact}/m$ – точное значение собственного числа (для кулоновского потенциала), вычисленное по формуле (16). Из табл.5

Таблица 5: Абсолютные и относительные (%) погрешности собственных чисел, обусловленные аппроксимацией по Галеркину

n	Вид погрешности	Кулоновское уравнение	Скалярное уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.27672 \cdot 10^{-7}$	$0.236589 \cdot 10^{-7}$	$0.25892 \cdot 10^{-7}$	$0.25249 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	0.208	0.188	0.206	0.201
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.69181 \cdot 10^{-8}$	$0.67546 \cdot 10^{-8}$	$0.64731 \cdot 10^{-8}$	$0.63122 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.052	0.054	0.051	0.050
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.08 \cdot 10^{-12}$ $0.60 \cdot 10^{-6}$			
2	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.24734 \cdot 10^{-7}$	$0.23659 \cdot 10^{-7}$	$0.22956 \cdot 10^{-7}$	$0.23158 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	0.743	0.752	0.883	0.891
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.61835 \cdot 10^{-8}$	$0.60764 \cdot 10^{-8}$	$0.57390 \cdot 10^{-8}$	$0.57896 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.186	0.193	0.221	0.223
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.19 \cdot 10^{-12}$ $0.57 \cdot 10^{-5}$			
3	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.22937 \cdot 10^{-7}$	$0.21075 \cdot 10^{-7}$	$0.21595 \cdot 10^{-7}$	$0.21482 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	1.55	1.51	1.85	1.84
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.57343 \cdot 10^{-8}$	$0.55743 \cdot 10^{-8}$	$0.53987 \cdot 10^{-8}$	$0.53704 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.388	0.400	0.463	0.461
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.23 \cdot 10^{-12}$ $0.16 \cdot 10^{-4}$			
4	$\Delta\lambda_{N_1}$	$0.22030 \cdot 10^{-7}$	$0.21956 \cdot 10^{-7}$	$0.21258 \cdot 10^{-7}$	$0.21358 \cdot 10^{-7}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_1}$	2.65	2.80	3.21	3.23
	$\Delta\lambda_{N_2}$	$0.55049 \cdot 10^{-8}$	$0.53728 \cdot 10^{-8}$	$0.53146 \cdot 10^{-8}$	$0.53396 \cdot 10^{-8}$
	$(\Delta\lambda/\lambda)_{N_2}$	0.662	0.685	0.804	0.807
	$\Delta\lambda_{exact}$ $(\Delta\lambda/\lambda)_{exact}$	$0.29 \cdot 10^{-12}$ $0.35 \cdot 10^{-4}$			

видно, что погрешности $\Delta\lambda_{N_1}$ и $\Delta\lambda_{N_2}$ собственных чисел всех четырех рассмотренных уравнений достаточно близки между собой. Поэтому можно ожидать, что погрешность $\Delta\lambda_{exact}$ экстраполированных собственных чисел уравнений (2), (3), (7) имеет такой же порядок величины, как и погрешность $\Delta\lambda_{exact}$ экстраполированных собственных чисел уравнения (15) с кулоновским потенциалом: $\Delta\lambda_{exact}^R \sim \Delta\lambda_{exact}^{S=0} \sim \Delta\lambda_{exact}^{S=1} \sim \Delta\lambda_{exact}^K$ – по крайней мере для первых четырех главных квантовых чисел.

Перейдем теперь к оценке погрешности собственных функций рассматриваемых уравнений. Как показали расчеты, собственные функции уравнения (1) с потенциалами (2), (3), (7) и уравнения (15) достаточно близки между собой. Так, для первой ($n = 1$) собственной функции $\max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_{1,2}}^R - \psi(p)_{N_{1,2}}^K| \sim 0.30$, $\max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=0} - \psi(p)_{N_{1,2}}^K| \sim 0.44$, $\max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=1} - \psi(p)_{N_{1,2}}^K| \sim 0.57$. Здесь $\psi(p)_{N_{1,2}}^R$ – собственная функция релятивистского скалярного уравнения (7); $\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=0}$ – собственная функция спинорного уравнения (2) с полным спином, равным нулю; $\psi(p)_{N_{1,2}}^{S=1}$ – собственная функция спинорного уравнения (3) с полным спином, равным единице; $\psi(p)_{N_{1,2}}^K$ – собственная функция уравнения (15) с кулоновским потенциалом.

В табл.6 приведены максимальные абсолютные и относительные, выраженные в процентах, погрешности собственных функций уравнения (1) с потенциалами (2), (3), (7) и уравнения (15):

$$\begin{aligned} \Delta\psi_{N_1} &= \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_1} - \psi(p)_{N_{1,2}}|, \\ (\Delta\psi/\psi)_{N_1} &= \max_{0 \leq p/m \leq R} \{|\psi(p)_{N_1} - \psi(p)_{N_{1,2}}|/|\psi(p)_{N_{1,2}}|\} \cdot 100\%, \\ \Delta\psi_{N_2} &= \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{N_2} - \psi(p)_{N_{1,2}}|, \\ (\Delta\psi/\psi)_{N_2} &= \max_{0 \leq p/m \leq R} \{|\psi(p)_{N_2} - \psi(p)_{N_{1,2}}|/|\psi(p)_{N_{1,2}}|\} \cdot 100\%, \\ \Delta\psi_{exact} &= \max_{0 \leq p/m \leq R} |\psi(p)_{exact} - \psi(p)_{N_{1,2}}|, \\ (\Delta\psi/\psi)_{exact} &= \max_{0 \leq p/m \leq R} \{|\psi(p)_{exact} - \psi(p)_{N_{1,2}}|/|\psi(p)_{exact}|\} \cdot 100\%. \end{aligned}$$

Здесь $\psi(p)_{N_1}$ – собственная функция, вычисленная на первой сетке; $\psi(p)_{N_2}$ – собственная функция, вычисленная на второй сетке; $\psi(p)_{N_{1,2}}$ – собственная функция, проэкстраполированная по Ричадсону (14); $\psi(p)_{exact}$ – точные значения собственной функции (для кулоновского потенциала). Из табл.6 видно, что для погрешности собственных функций, так же, как и для погрешности собственных чисел, справедливо приближенное равенство $\Delta\psi_{exact}^R \sim \Delta\psi_{exact}^{S=0} \sim \Delta\psi_{exact}^{S=1} \sim \Delta\psi_{exact}^K$. Следует отметить, что абсолютные и относительные погрешности собственных функций достигают своего максимума при разных значениях p .

7.2. В работе [1] было показано, что погрешность вычисления собственных чисел нелинейной спектральной задачи описанным выше итерационным методом

Таблица 6: Максимальные абсолютные и относительные (%) погрешности собственных функций, обусловленные аппроксимацией по Галеркину

n	Вид погрешности	Кулоновское уравнение	Скалярное уравнение	Спиновое (S = 0) уравнение	Спиновое (S = 1) уравнение
1	$\Delta\psi_{N_1}$	0.135764	0.132987	0.131651	0.130436
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	1.11	1.09	1.08	1.07
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.033941	0.033537	0.033141	0.033086
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	0.278	0.265	0.254	0.253
	$\Delta\psi_{exact}$	0.001123			
	$(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.008			
2	$\Delta\psi_{N_1}$	0.648656	0.641843	0.638245	0.637634
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	6.83	6.79	6.61	6.59
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.162164	0.158749	0.153193	0.149587
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	1.73	1.69	1.65	1.62
	$\Delta\psi_{exact}$	0.001532			
	$(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.031			
3	$\Delta\psi_{N_1}$	1.388104	1.396723	1.381349	1.382153
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	16.34	17.11	15.86	15.93
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.347026	0.357630	0.342337	0.340538
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	4.29	4.36	4.22	4.18
	$\Delta\psi_{exact}$	0.001921			
	$(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.039			
4	$\Delta\psi_{N_1}$	2.527396	2.584620	2.569854	2.559875
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_1}$	18.67	19.98	19.66	19.63
	$\Delta\psi_{N_2}$	0.631849	0.639653	0.625783	0.625929
	$(\Delta\psi/\psi)_{N_2}$	5.43	5.47	5.38	5.39
	$\Delta\psi_{exact}$	0.002217			
	$(\Delta\psi/\psi)_{exact}$	0.047			

оценивается неравенством

$$\delta\lambda = |\lambda_N - \lambda_N^{(l)}| \leq \frac{q^l}{1-q} |\lambda_N^{(1)} - \lambda_N^{(0)}|, \quad \lambda_N = \{\lambda_{n,N}\}, \quad (17)$$

где $\lambda_N^{(0)}$ – начальное приближение к дискретному собственному числу уравнения (1); $\lambda_N^{(1)}$ – приближенное дискретное собственное число, полученное на 1-м итерационном шаге; $\lambda_N^{(l)}$ – приближенное дискретное собственное число, полученное на l -м итерационном шаге; λ_N – точное дискретное собственное число нелинейной спектральной задачи для данного главного квантового числа n и количества узлов N в сетке дискретизации; l – номер итерации, на которой выполняется критерий остановки:

$$|\lambda_N^{(l)} - \lambda_N^{(l-1)}| / |\lambda_N^{(l-1)}| < \epsilon.$$

В наших расчетах мы выбирали $\epsilon = 0.1 \cdot 10^{-10}$. При этом итерационный процесс обычно сходился за 6 – 7 итераций.

Коэффициент q , как показано в [1], определяется выражением

$$q = 2 \|\partial A_N(\lambda_N) / \partial(\lambda_N)\|.$$

Из численных экспериментов, результаты которых представлены в [22], а также при вычислении производной оператора $A_N(\lambda_N)$ по λ_N для уравнения (1) было получено, что $q \sim 0.02$. В табл.7 приведены погрешности $\delta\lambda$ собственных чисел уравнения (1) с потенциалами (7), (2) и (3), вычисленные по формуле (17).

Таблица 7: Погрешности $\delta\lambda$ собственных чисел ($n = 1, 2, 3, 4$), вносимые итерационным методом

n	Релятивистское уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$0.109 \cdot 10^{-14}$	$0.106 \cdot 10^{-14}$	$0.108 \cdot 10^{-14}$
2	$0.215 \cdot 10^{-14}$	$0.219 \cdot 10^{-14}$	$0.216 \cdot 10^{-14}$
3	$0.558 \cdot 10^{-14}$	$0.475 \cdot 10^{-14}$	$0.511 \cdot 10^{-14}$
4	$0.917 \cdot 10^{-14}$	$0.724 \cdot 10^{-14}$	$0.639 \cdot 10^{-14}$

Погрешности $\delta\psi$ собственных функций, вносимые итерационным методом, как видно из табл.8, на один-два порядка больше погрешностей собственных чисел.

7.3. Сравнивая данные табл.5 и табл.7 можно видеть, что погрешности собственных чисел, вносимые итерационным методом на один-два порядка меньше погрешностей аппроксимации. Поэтому при оценке погрешностей частот переходов между уровнями энергии позитрония и димюония можно принимать во внимание только погрешности, обусловленные аппроксимацией. Собственные функции, полученные с помощью итерационного метода, мы использовали

Таблица 8: Погрешности $\delta\psi$ собственных функций ($n = 1, 2, 3, 4$), вносимые итерационным методом

n	Релятивистское уравнение	Спинорное (S = 0) уравнение	Спинорное (S = 1) уравнение
1	$0.315 \cdot 10^{-13}$	$0.322 \cdot 10^{-13}$	$0.324 \cdot 10^{-13}$
2	$0.570 \cdot 10^{-13}$	$0.585 \cdot 10^{-13}$	$0.593 \cdot 10^{-13}$
3	$0.847 \cdot 10^{-13}$	$0.811 \cdot 10^{-13}$	$0.815 \cdot 10^{-13}$
4	$0.125 \cdot 10^{-12}$	$0.121 \cdot 10^{-12}$	$0.131 \cdot 10^{-12}$

при расчете ширины распада парапозитрония и парадимюния. При вычислении ширины распада по методике, представленной в [11], дополнительная погрешность возникает при операции численного интегрирования. Остаточный член в формуле Симпсона, с помощью которой мы проводим интегрирование, равен $\psi^{(IV)}h^5/90$. Следовательно, погрешность, вносимая численным интегрированием $O(h^4)$, существенно меньше погрешности аппроксимации $O(h^2)$. Сравнение табл.6 и табл.8 показывает, что погрешности аппроксимации собственных функций больше, чем погрешности, обусловленные итерационным методом. Поэтому, рассчитывая погрешности ширины распада позитрония и димюния, мы использовали значения погрешностей собственных функций, вносимые аппроксимацией по Бубнову – Галеркину.

Список литературы

1. Т.М.Solov'eva, Е.Р Zhidkov, *Comp.Phys.Comm.* **126** (2000) 168 – 177.
2. В.В.Двоглазов и др., *ЯФ* **54** (1991) 658 – 668.
3. V.G.Kadyshevsky, R.M.Mir-Kasimov, N.B.Skachkov, *Nuovo Cim.* **55A** (1968) 232 – 257.
4. R.M.Barnett et al., *Phys. Rev. D* **54** (1997) 21, 65.
5. Дж.Х.Уилкинсон, *Алгебраическая проблема собственных значений*. (Наука, Москва, 1970).
6. M.W.Ritter et al., *Phys.Rev.A* **30** (1984) 1331 – 1338.
7. M.S.Fee et al., *Phys.Rev.Lett.* **70** (1993) 1397 – 1400.
8. S.G.Karshenboim, К.Рачуки, *Phys.Rev.Lett.* **80** (1998) 2101 – 2108.
9. S.G.Karshenboim et al., *Phys.Rev.A* **56** (1997) 4483 – 4495.
10. S.G.Karshenboim et al., *Phys.Lett.B* **424** (1998) 397 – 404.
11. Г.А.Козлов и др., *ТМФ* **60** (1984) 24 – 36.
12. Р.Н.Фаустов, А.А.Хелашвили, *ЯФ* **10** (1969) 1085 – 1089.
13. А.Н.Аl-Ramadhan and D.W.Gidley, *Phys.Rev.Lett.* **72** (1994) 1632 – 1635.

14. М.М.Грегуш, Е.П.Жидков, Т.М.Макаренко и др., *Решение релятивистской задачи двух тел с нелинейной зависимостью от спектрального параметра*. Сообщение ОИЯИ **P11-92-142**, Дубна, 1992.
15. V.A.Fock, *Zs. Phys.* **98** (1935) 145 – 159.
16. V.V.Dvoeglazov, R.N.Faustov, Y.N.Tyukhyaev, *Decay rate of a positronium. Review of theory and experiment*. Preprint, **hep-ph/9306227** (1993).
17. R.N.Faustov, A.P.Martynenko, *Self-energy $O(\alpha^2)$ correction to the positronium decay rate*. Preprint, **hep-ph/0002281** (2000).
18. A.Czarnecki, K.Melnikov, A.Yelkhovsky, *α^2 corrections to parapositronium decay: a detailed description*. Preprint, **hep-ph/9910488** (1999).
19. J.Malenfant, *Phys.Rev.D* **36** (1987) 863 – 869.
20. Красносельский М.А., Вайникко Г.М., Забрейко П.П. и др., *Приближенное решение операторных уравнений*. (Наука, Москва, 1969).
21. Г.И.Марчук, В.В.Шайдуров, *Повышение точности решений разностных схем*. (Наука, Москва, 1979).
22. В.Н.Khoromskij, Т.М.Макаренко, Е.Г.Nikonov et al., in *Proceedings of the International Conference on Programming and Mathematical Methods for Solving Physical Problems, Dubna, 1993*, Ed. by Yu.Yu. Lobanov et al. (World Sci., Publ. 1994), p. 210 - 214.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июня 2001 года.

Скачков Н.Б., Соловьева Т.М.

P2-2001-121

Результаты численного решения интегрального уравнения для системы двух фермионов

Двухчастичная система описывается интегральными уравнениями с ядрами, зависящими от полной энергии системы. Такие уравнения можно свести к задаче на собственные значения с оператором, зависящим от собственного значения. Эта линейная задача на собственные значения была решена с помощью разработанного нами итерационного метода. Были получены энергетические спектры двухфермионной системы с частицами равной массы для двух случаев, во-первых, когда полный спин системы равен нулю и, во-вторых, когда полный спин системы равен единице. Были рассчитаны расщепления основных уровней позитрония и димюония, а также частота перехода из основного состояния в первое возбужденное состояние ортопозитрония, вычислены вероятности распада парапозитрония и парадимюония. Сравнение с известными экспериментальными данными показало хорошее согласие полученных нами результатов с экспериментом.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем им. В.П.Джелепова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2001

Перевод авторов

Skachkov N.B., Solovieva T.M.

P2-2001-121

The Numerical Calculation Results of the Integral Equations for a Two-Fermion System

The two-particle system is described by integral equations with a kernel depending on the total system energy. These equations are reduced to the eigenvalue problem with the operator depending on the eigenvalue. This nonlinear eigenvalue problem is solved with the help of an iteration method we have proposed previously. The energy spectrum of the two-fermion equal mass system is obtained for two cases, firstly total spin equal 0, and secondly total spin equal 1. The hyperfine structure interval in the ground state of positronium and dimuonium, the frequency of the transition from the 1S ground state to the 2S metastable state in orthopositronium, the decay rate of positronium and dimuonium are calculated. The comparison with the experimental data shows the good agreement with the experiment.

The investigation has been performed at the Dzhelepov Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2001

Редактор М.И.Зарубина. Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 27.06.2001

Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. л. 1,45

Тираж 425. Заказ 52746. Цена 1 р. 45 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области