УДК 539.184.28, 519.632 Вестник СПбГУ. Сер. 4, 2010, вып. 3

С. И. Виницкий, А. А. Гусев, О. Чулуунбаатар

РЕШЕНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ШРЁДИНГЕРОВСКОГО ТИПА МЕТОДОМ КАНТОРОВИЧА*

В ряде случаев малочастичные квантово-механические задачи сводятся к решению многомерного стационарного уравнения Шрёдингера [1–6]:

$$H(r,\Omega)\Psi(r,\Omega) = E\Psi(r,\Omega),\ H(r,\Omega) = -\frac{1}{f_1(r)}\frac{\partial}{\partial r}f_2(r)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{f_3(r)}\left(-\hat{\Lambda}^2_\Omega + U(r,\Omega)\right). \quad (1)$$

Здесь $\hat{\Lambda}^2_\Omega$ – самосопряжённый дифференциальный оператор эллиптического типа с частными производными в конечной области $\hat{X} \subset \mathbb{R}^{d-1}$, $\Omega = \{\Omega_j\}_{j=1}^{d-1} \in \hat{X}$ – набор независимых переменных, $r \in (r_1, r_2) \in B \subset \mathbb{R}^1$ – независимая переменная, $X = B \otimes \hat{X} \subset \mathbb{R}^d$ – конечная область координатного пространства $\mathbb{R}^d$; E – спектральный параметр, соответствующий энергии квантовой системы. Предполагается, что функции $f_1(r) > 0$, $f_2(r) > 0$, $f_3(r) > 0$, $\partial_r f_2(r)$, $U(r,\Omega)$ и $\partial_r U(r,\Omega)$ – непрерывны и ограничены при всех $(r,\Omega) \in X$. Предполагается также, что самосопряжённый оператор $L(\Omega; r) = -\hat{\Lambda}^2_\Omega + U(r,\Omega)$ имеет только дискретный вещественный спектр $\boldsymbol{\varepsilon}(r)$. Решение $\Psi(r,\Omega) \in \mathbf{L}_2(X)$ уравнения (1) подчиняется краевым условиям третьего рода:

$$\begin{aligned} \mu_l \frac{\partial \Psi(r_l,\Omega)}{\partial r} - \lambda_l \Psi(r,\Omega) = 0,\ \Omega \in \partial\hat{X} \cup \hat{X},\ l = 1,2; \\ a\frac{\partial \Psi(r,\Omega)}{\partial \mathbf{n}} - b(r)\Psi(r,\Omega) = 0,\ \Omega \in \partial\hat{X},\ r \in [r_1, r_2], \end{aligned} \quad (2)$$

где $\mu_1, \lambda_1, \mu_2, a$ – вещественные константы; $\lambda_2 \equiv \lambda_2(r_2)$ – вещественная функция, зависящая от r_2; $\mu_l^2 + \lambda_l^2 \neq 0$; функции $b(r)$, $\partial_r b(r)$ – непрерывны и ограничены; $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали к границе $\partial\hat{X}$ области $\hat{X}$.

В методе Канторовича (МК) решение $\Psi(r,\Omega)$ ищется в виде разложения по однопараметрическому набору базисных функций $\{\psi_j(\Omega; r)\}_{j=1}^{j_{\max}} \in \mathcal{F}_r \sim \mathbf{L}_2(\hat{X})$:

$$\Psi(r,\Omega) = \sum\nolimits_{j=1}^{j_{\max}} \psi_j(\Omega; r)\chi_j(r). \quad (3)$$

В разложении (3) вектор-функция $\boldsymbol{\chi}(r) = (\chi_1(r), \ldots, \chi_{j_{\max}}(r))^T$ – искомая. В качестве базисных функций $\psi_j(\Omega; r)$ выбираем решения параметрической задачи на собственные значения

$$\begin{aligned} L(\Omega; r)\psi_j(\Omega; r) = \varepsilon_j(r)\psi_j(\Omega; r), \\ a\frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial \mathbf{n}} - b(r)\psi_j(\Omega; r) = 0,\ \Omega \in \partial\hat{X},\ r \in [r_1, r_2]. \end{aligned} \quad (4)$$

Они образуют ортонормированный базис по набору переменных $\Omega \in \hat{X}$ для каждого значения параметра $r \in [r_1, r_2] \in B$:

$$\int_{\hat{X}} \psi_i(\Omega; r)\psi_j(\Omega; r)d\Omega = \delta_{ij}. \quad (5)$$

* По материалам доклада на юбилейном семинаре «Вычислительная физика» 29–30 октября 2009 г., С.-Петербург.

Авторы благодарят РФФИ (грант 08-01-00604) за финансовую поддержку работы.

Здесь $\varepsilon_1(r) < \cdots < \varepsilon_{j_{\max}}(r) < \cdots \in \boldsymbol{\varepsilon}(r)$ – искомый набор вещественных собственных значений, расположенных в порядке возрастания.

В результате проецирования (3)–(5) задача (1), (2) сводится к задаче на связанные состояния (относительно искомых $E, \boldsymbol{\chi}(r)$) или к многоканальной задаче рассеяния (относительно набора искомых $\{\lambda_{2,i_o}\}_{i_o=1}^{N_o}, \{\boldsymbol{\chi}_{i_o}(r)\}_{i_o=1}^{N_o}$ при фиксированном значении E) для системы из $j_{\max}$ обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\mathbf{H}(r)\boldsymbol{\chi}(r) = E\boldsymbol{\chi}(r),\ r \in (r_1, r_2) \tag{6}$$

с краевыми условиями третьего рода в граничных точках интервала $r \in \bar{\Omega}_r = (r_1, r_2)$:

$$\mu_l \left(\mathbf{I}\frac{d}{dr} - \mathbf{Q}(r)\right)\boldsymbol{\chi}(r) - \lambda_l\boldsymbol{\chi}(r) = 0,\ r = r_l,\ l = 1, 2, \tag{7}$$

где $\mathbf{I}$ – единичная матрица, $\mathbf{H}(r)$ – самосопряжённый матричный оператор:

$$\mathbf{H}(r) = -\frac{1}{f_1(r)}\mathbf{I}\frac{d}{dr}f_2(r)\frac{d}{dr} + \mathbf{V}(r) + \frac{f_2(r)}{f_1(r)}\mathbf{Q}(r)\frac{d}{dr} + \frac{1}{f_1(r)}\frac{d\,f_2(r)\mathbf{Q}(r)}{dr}. \tag{8}$$

Собственная функция $\boldsymbol{\chi}(r)$ задачи на связанные состояния (6)–(8) нормирована:

$$\|\boldsymbol{\chi}(r)\|_0 = 1,\ \|\boldsymbol{\chi}(r)\|_0^2 = \int_{r_1}^{r_2} f_1(r)\boldsymbol{\chi}(r)^T\boldsymbol{\chi}(r)dr. \tag{9}$$

Для многоканальной задачи рассеяния (6)–(8) число открытых каналов $N_o = \max j \leqslant \leqslant j_{\max}$ определяется условием $E \geqslant \lim_{r_2\to\infty} V_{jj}(r_2)$, если $\lim_{r_2\to\infty} f_2(r_2)/f_1(r_2) = \mathrm{const}$, а нормировка ограниченного решения $\boldsymbol{\Phi}(r) = \{\boldsymbol{\chi}_{i_o}(r)\}_{i_o=1}^{N_o}$ – условием:

$$\boldsymbol{\Phi}(r_2) = \boldsymbol{\Phi}_{\mathrm{reg}}(r_2) + \boldsymbol{\Phi}_{\mathrm{irr}}(r_2)\mathbf{K}, \tag{10}$$

где $\mathbf{K}$ – искомая матрица реакции размерностью $N_o{\times}N_o$, а $\boldsymbol{\Phi}_{\mathrm{reg}}(r)$ и $\boldsymbol{\Phi}_{\mathrm{irr}}(r)$ – асимптотики регулярных и нерегулярных решений уравнения (6), построенные в [1, 2]. В системе (8) переменные элементы матриц $\mathbf{V}(r)$ и $\mathbf{Q}(r)$ размерностью $j_{\max} \times j_{\max}$ выражаются через решения задачи (4) и их производные по параметру:

$$\begin{aligned}
V_{ij}(r) &= V_{ji}(r) = \frac{\varepsilon_i(r) + \varepsilon_j(r)}{2f_3(r)}\delta_{ij} + \frac{f_2(r)}{f_1(r)}W_{ij}(r),\\
W_{ij}(r) &= W_{ji}(r) = \int_{\hat{X}} \frac{\partial\psi_i(\Omega; r)}{\partial r}\frac{\partial\psi_j(\Omega; r)}{\partial r}d\Omega,\\
Q_{ij}(r) &= -Q_{ji}(r) = -\int_{\hat{X}} \psi_i(\Omega; r)\frac{\partial\psi_j(\Omega; r)}{\partial r}d\Omega.
\end{aligned} \tag{11}$$

Дифференцирование по параметру задачи (4), (5) приводит к неоднородной краевой задаче относительно искомой производной по параметру $\partial_r\psi_j(\Omega; r) \in \mathcal{F}_r \sim \mathbf{L}_2(\hat{X})$:

$$(L(\Omega; r) - \varepsilon_j(r))\,\frac{\partial\psi_j(\Omega; r)}{\partial r} = \left(\frac{\partial\varepsilon_j(r)}{\partial r} - \frac{\partial L(\Omega; r)}{\partial r}\right)\psi_j(\Omega; r), \tag{12}$$

$$a\frac{\partial^2\psi_j(\Omega; r)}{\partial r\partial\mathbf{n}} - b(r)\frac{\partial\psi_j(\Omega; r)}{\partial r} = \frac{\partial b(r)}{\partial r}\psi_j(\Omega; r),\ \Omega \in \partial\hat{X},\ r \in [r_1, r_2],$$

$$\int_{\hat{X}} \psi_j(\Omega; r)\frac{\partial\psi_j(\Omega; r)}{\partial r}d\Omega = 0.$$

Реализация МК приводит к необходимости разработки эффективных вычислительных схем для решений следующих задач:

1. Вычисление конечного набора собственных значений и собственных функций параметрической краевой задачи (4), (5).

2. Вычисление первой производной собственных функций по параметру из неоднородной краевой задачи (12).

3. Вычисление элементов матриц $\mathbf{Q}(r)$ и $\mathbf{V}(r)$ по формулам (11).

4. Решение задачи на связанные состояния для системы ОДУ (6)–(9).

5. Решение многоканальной задачи рассеяния для системы ОДУ (6)–(8), (10).

Разработаны эффективные вариационно-проекционные вычислительные схемы и экономичные алгоритмы [6, 7] для численного решения задач **1**–**5** на основе теории R-матрицы, асимптотических методов и метода конечных элементов (МКЭ). Созданы проблемно ориентированные комплексы программ KANTBP [8, 9], POTHMF [10] и ODPEVP [11].

Комплекс программ KANTBP предназначен для численного решения задач **4** и **5**. Построенная численная схема обеспечивает известные оценки следующих погрешностей численного решения на неравномерной сетке $\Omega^p_{r_h}[r_1, r_2]$:

$$\left|E_j - E^h_j\right| \leqslant c_1 h^{2p}, \ \left\|\boldsymbol{\chi}_j(r) - \boldsymbol{\chi}^h_j\right\|_0 \leqslant c_2 h^{p+1}, \tag{13}$$

где E_j и $\boldsymbol{\chi}_j(r) \in \mathcal{H}^2$ – искомые собственные значения и соответствующие собственные функции задачи на связанные состояния; E^h_j и $\boldsymbol{\chi}^h_j \in \mathcal{H}^1$ – соответствующие численные решения; h – максимальный шаг конечноэлементной сетки $\Omega^p_{r_h}[r_1, r_2]$; p – порядок аппроксимации; а c_1 и c_2 – положительные константы, не зависящие от h и p. Подобные оценки верны также для численного решения многоканальной задачи рассеяния, где λ^h_j – собственные значения матрицы реакции, а $\boldsymbol{\chi}^h_j$ – соответствующие собственные функции.

Комплекс программ ODPEVP в рамках задач **1**–**3** предназначен для численного решения однопараметрической задачи Штурма–Лиувилля на конечном интервале $z \in \bar{\Omega}_z = (z_1, z_2)$:

$$\left(-\frac{1}{g_1(z)}\frac{d}{dz}g_2(z)\frac{d}{dz} + U(r, z)\right)\psi_j(z; r) = \epsilon_j(r)\psi_j(z; r). \tag{14}$$

Здесь $r \in \Omega_r = [r_1, r_2]$ – вещественный параметр, $\epsilon_j(r)$ – собственные значения, зависящие от параметра r. Предполагается, что функции $g_1(z) > 0$, $g_2(z) > 0$, $d_z g_2(z)$, $U(r, z)$ и $\partial_r U(r, z)$ – непрерывны и ограничены при всех $z \in \bar{\Omega}_z$ и $r \in \Omega_r$. Параметрические собственные функции $\psi_j(z; r)$ подчиняются краевым условиям третьего рода в граничных точках интервала $z \in \bar{\Omega}_z$:

$$a_l g_2(z)\frac{d\psi_j(z; r)}{dz} + b_l(r)\psi_j(z; r) = 0, \ z = z_l, \ l = 1, 2, \tag{15}$$

и удовлетворяют условию нормировки

$$\|\psi_j(z; r)\|_0 = 1, \ \|v(z)\|^2_0 = \int_{z_1}^{z_2} g_1(z)v(z)^2 dz. \tag{16}$$

Здесь $a_1 \geqslant 0$, $a_2 \geqslant 0$ – вещественные константы, функции $b_1(r) \leqslant 0$, $b_2(r) \geqslant 0$, $\partial_r b_1(r)$ и $\partial_r b_2(r)$ – непрерывны и ограничены при $r \in \Omega_r$, $a^2_l + b^2_l(r) \neq 0$.

Представлен экономичный алгоритм вычисления с заданной точностью набора $j_{\max}$ собственных значений, собственных функций и их первых производных по параметру r и интегралов

$$W_{ij}(r) = \int_{z_1}^{z_2} g_1(z) \frac{\partial \psi_i(z;r)}{\partial r} \frac{\partial \psi_j(z;r)}{\partial r} dz, \;\; Q_{ij}(r) = -\int_{z_1}^{z_2} g_1(z) \psi_i(z;r) \frac{\partial \psi_j(z;r)}{\partial r} dz. \quad (17)$$

В МКЭ для численного решения ϵ_j^h и $\boldsymbol{\psi}_j^h$ доказаны следующие оценки погрешностей:

$$\left|\epsilon_j(r) - \epsilon_j^h\right| \leqslant c_1 h^{2p}, \;\; \left\|\psi_j(z;r) - \boldsymbol{\psi}_j^h\right\|_0 \leqslant c_2 h^{p+1}, \quad (18)$$

где $\epsilon_j(r)$ и $\psi_j(z;r) \in \mathcal{H}^2$ – точные решения; ϵ_j^h и $\boldsymbol{\psi}_j^h \in \mathcal{H}^1$ – соответствующие численные решения; h – максимальный шаг конечноэлементной сетки $\Omega_{z_h}^p[z_{\min}, z_{\max}]$; p – порядок аппроксимации; c_1 и c_2 – положительные константы, не зависящие от h и p.

Доказано, что имеет место следующая оценка [7]:

Теорема 1. *При заданном значении параметра r погрешности аппроксимаций первой производной по параметру от собственных значений, собственных функций краевой задачи (14), (15) и интегралов (17) ограничены неравенствами:*

$$\left|\frac{\partial \epsilon_j(r)}{\partial r} - \frac{\partial \epsilon_j^h}{\partial r}\right| \leqslant c_3 h^{2p}, \;\; \left\|\frac{\partial \psi_j(z;r)}{\partial r} - \frac{\partial \boldsymbol{\psi}_j^h}{\partial r}\right\|_0 \leqslant c_4 h^{p+1}, \quad (19)$$
$$\left|Q_{ij}(r) - Q_{ij}^h\right| \leqslant c_5 h^{2p}, \;\; \left|W_{ij}(r) - W_{ij}^h\right| \leqslant c_6 h^{2p},$$

где $\partial_r \epsilon_j(r)$ и $\partial_r \psi_j(z;r) \in \mathcal{H}^2$, $Q_{ij}(r)$ и $W_{ij}(r)$ – точные функции; $\partial_r \epsilon_j^h$ и $\partial_r \boldsymbol{\psi}_j^h \in \mathcal{H}^1$, Q_{ij}^h и W_{ij}^h – соответствующие численные значения; c_3, c_4, c_5 и c_6 – положительные константы, не зависящие от h и p.

Вышеназванные комплексы программ KANTBP и ODPEVP позволяют решать с заданной точностью краевую задачу для двумерного уравнения эллиптического типа в рамках МК с дискретизацией последовательности краевых задач МКЭ. Комплекс программ POTHMF предназначен для численного решения задач **1–3** для угловых сплюснутых сфероидальных функций.

Эффективность разработанных методов, алгоритмов и созданных комплексов программ KANTBP [8, 9], POTHMF [10] и ODPEVP [11] подтверждена результатами численного анализа полученных теоретических оценок погрешности решений краевых задач и результатами моделирования следующих физических процессов в малочастичных квантовых системах.

Проведено численное исследование модели резонансного механизма фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле $\gamma = H/H_0$. Впервые предсказаны эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноимённо заряженных частиц в однородном магнитном поле [1, 3].

Выполнено численное исследование модели осевого каналирования одноименно заряженных частиц в осцилляторном приближении непрерывного потенциала взаимодействия каналируемых частиц с цепочками ионов канала кристалла. Выявлен немонотонный характер зависимости от энергии E столкновения коэффициента усиления скорости ядерной реакции $K(E)$, обусловленный впервые предсказанными резонансными эффектами отражения и прохождения встречных каналированных ионов [4, 5].

Литература

1. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Derbov V. L.* et al. Calculation of a hydrogen atom photoionization in a strong magnetic field by using the angular oblate spheroidal functions // J. Phys. (A). 2007. Vol. 40. P. 11485–11524.

2. *Vinitsky S. I., Chuluunbaatar O., Gerdt V. P.* et al. Symbolic-Numerical Algorithms for Solving Parabolic Quantum Well Problem with Hydrogen-Like Impurity // Lecture Notes in Computer Sci. 2009. Vol. 5743. P. 334–349.

3. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Derbov V. L.* et al. Adiabatic representation for a hydrogen atom photoionization in an uniform magnetic field // ЯФ. 2008. Т. 71. С. 871–878.

4. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L.* et al. Channeling Problem for Charged Particles Produced by Confining Environment // ЯФ. 2009. Т. 72. С. 768–778.

5. *Виницкий С. И., Гусев А. А., Чулуунбаатар О.* и др. Эффекты резонансного прохождения и отражения каналированных ионов при наличии поперечного осцилляторного потенциала, // Материалы международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», под ред. Л. А. Уваровой, ГОУ ВПО МГТУ "Станкин 2009", М., 2009. Т. 12. С. 402–422.

6. *Чулуунбаатар О.* Вариационно-итерационные алгоритмы численного решения задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для систем связанных радиальных уравнений // Вестн. РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. 2008. № 2. С. 40–56.

7. *Чулуунбаатар О.* Алгоритм численного решения параметрической задачи Штурма–Лиувилля и вычисления производных от решения по параметру методом конечных элементов // Вестн. РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. 2009. № 2. С. 54–65.

8. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Abrashkevich A. G.* et al. KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach // Comput. Phys. Commun. 2007. Vol. 177. P. 649–675.

9. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Vinitsky S. I.* et al. KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach // Comput. Phys. Commun. 2008. Vol. 179. P. 685–693.

10. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Gerdt V. P.* et al. POTHMF: A program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field // Comput. Phys. Commun. 2008. Vol. 178. P. 301–330.

11. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Vinitsky S. I.* et al. ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjoined Sturm–Liouville problem // Comput. Phys. Commun. 2009. Vol. 180. P. 1358–1375.

Статья поступила в редакцию 19 марта 2009 г.