

УДК 519.633.2,517.958: 530.145.6

Вариационно-итерационные алгоритмы численного решения задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для систем связанных радиальных уравнений

О. Чулуунбаатар

*Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, Дубна, Московская обл., Россия, 141980*

Представлены вариационно-итерационные алгоритмы численного решения задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для систем связанных радиальных уравнений в рамках метода Канторовича (МК). Редукция краевых задач с условиями третьего рода для систем связанных радиальных уравнений выполнена методом конечных элементов (МКЭ) высокого порядка точности на неравномерной сетке. В качестве теста для проверки скорости сходимости разложения МК и эффективности аппроксимации задачи МКЭ используются точные значения энергии, фазы и длины рассеяния для модели трёх тождественных частиц (бозонов) на прямой, взаимодействующих парными потенциалами нулевого радиуса. Выполнено сравнение скорости сходимости МК и метода Галёркина в численных расчётах энергии основного состояния данной модели.

Ключевые слова: вариационно-итерационные алгоритмы, метод Канторовича, системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с переменными коэффициентами, метод конечных элементов.

1. Введение

В атомной физике используется гиперсферический адиабатический подход к решению краевых задач для конечномерного уравнения Шрёдингера в области $\mathbf{R}^d \setminus \{0\}$, описывающего, например, атом гелия [1] или водородоподобный атом в магнитном поле [2]. В этом подходе, известном в математической литературе как метод Канторовича приведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям, уравнение Шрёдингера сводится усреднением по угловым переменным $\Omega \in \mathbf{S}^{d-1}$ к системе обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по радиальной переменной $\rho \in \mathbf{R}_+^1$ с переменными коэффициентами. Переменные коэффициенты выражаются через интегралы между собственными функциями по угловым переменным Ω вспомогательного оператора угловой части гамильтониана, зависящего от параметра — радиальной переменной ρ , и их производными по параметру.

Для того, чтобы гарантировать высокую точность численного решения задачи МК, необходимо, прежде всего, иметь алгоритм вычисления матричных элементов с заданной (компьютерной) точностью. Соответствующая программа для вычисления матричных элементов атома водорода в магнитном поле представлена в [2]. Следует отметить, что переменные коэффициенты системы обыкновенных дифференциальных уравнений и её линейно независимые матричные решения при больших значениях радиальной переменной представляются в виде асимптотических медленно сходящихся разложений по обратным степеням по радиальной переменной. Поэтому требуется разработка специальной вариационной постановки задачи, включающей краевые условия третьего рода, и соответствующих стабильных и высокоточных вариационно-итерационных алгоритмов численного решения алгебраических задач, полученных на основе МКЭ.

Статья поступила в редакцию 18 декабря 2007 г.

Работа выполнена в рамках темы ОИЯИ «Математическая поддержка экспериментальных и теоретических исследований, проводимых ОИЯИ 09-6-1060-2005/2009».

Автор благодарит С. И. Виницкого, А. А. Гусева, М. С. Касчиева, И. В. Пузынина и Л. А. Севастьянова за сотрудничество и поддержку.

В данной работе представлены алгоритмы численного решения краевых задач с условиями третьего рода для систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с использованием МКЭ и аппроксимации матричных решений лагранжевыми элементами высокого порядка точности на неравномерной сетке узлов. Обобщённая алгебраическая задача $\mathbf{A}\mathbf{F} = E\mathbf{B}\mathbf{F}$ относительно пары неизвестных (E, \mathbf{F}) , полученная редукцией задачи на собственные значения для систем дифференциальных уравнений с помощью аппроксимации МКЭ, решается методом обратных итераций в подпространстве с помощью подпрограммы SSPACE [3]. Обобщённая алгебраическая задача $(\mathbf{A} - E\mathbf{B})\mathbf{F} = \lambda\mathbf{D}\mathbf{F}$ относительно пары неизвестных (λ, \mathbf{F}) , полученная редукцией задачи рассеяния в открытых каналах при фиксированных значениях энергии E , решается с помощью $\mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T$ факторизации симметричной матрицы и метода обратной подстановки, используя подпрограммы DECOMP и REDBAK [3]. В качестве теста эффективности работы представленного алгоритма и реализующего его программы, а именно: для проверки скорости сходимости разложения МК и эффективности аппроксимации задачи МКЭ используются точные значения энергии, фазы и длины рассеяния для модели трёх тождественных частиц (бозонов) на прямой, взаимодействующих парными потенциалами нулевого радиуса.

2. МК для уравнения Шрёдингера

В ряде случаев конечномерные квантово-механические задачи приводятся к решению стационарного уравнения Шрёдингера для волновой функции $\Psi(\rho, \Omega)$:

$$(\mathbf{H} + \mathbf{U}(\rho, \Omega))\Psi(\rho, \Omega) = E\Psi(\rho, \Omega), \quad (1)$$

где \mathbf{H} — гамильтониан в d -мерном пространстве ($d > 1$) с эффективным потенциалом $\mathbf{U}(\rho, \Omega)$, E — спектральный параметр (энергия системы), $\rho = \sqrt{\sum_{j=1}^d \rho_j^2}$ — гиперрадиус системы $\rho \in \mathbf{R}_+^1$, $\Omega = \{\Omega_j\}_{j=1}^{d-1}$ — набор угловых координат на гиперсфере $S^{d-1}(\Omega)$.

В МК парциальная волновая функция $\Psi_i(\rho, \Omega)$ ищется в виде разложения по однопараметрическому набору гиперповерхностных функций $\{B_j(\Omega; \rho)\}_{j=1}^{j_{\max}}$:

$$\Psi_i(\rho, \Omega) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} B_j(\Omega; \rho) \chi_j^{(i)}(\rho). \quad (2)$$

В разложении (2) вектор-функции $\chi^{(i)}(\rho) = (\chi_1^{(i)}(\rho), \dots, \chi_{j_{\max}}^{(i)}(\rho))^T$ являются искомыми величинами, а поверхностные функции $\mathbf{B}(\Omega; \rho) = (B_1(\Omega; \rho), \dots, B_{j_{\max}}(\Omega; \rho))^T$ образуют ортонормированный базис $\mathbf{B}(\Omega; \rho) \in L_2(S^{d-1})$ по набору угловых переменных Ω для каждого значения гиперрадиуса ρ , который рассматривается здесь как параметр. Базисные функции $B_j(\Omega; \rho)$ определяются как решения параметрической задачи на собственные значения

$$\left(-\frac{1}{\rho^2} \hat{\mathbf{A}}_\Omega^2 + 2\mathbf{U}(\rho, \Omega)\right) B_j(\Omega; \rho) = \varepsilon_j(\rho) B_j(\Omega; \rho), \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{A}}_\Omega^2$ — самосопряжённый оператор обобщённого углового момента. Собственные функции задачи (3) удовлетворяют краевым условиям по угловым переменным Ω , аналогичным тем, которые наложены на волновую функцию $\Psi_i(\rho, \Omega)$ при каждом фиксированном значении параметра $\rho \in \mathbf{R}_+^1$:

$$\left\langle B_i(\Omega; \rho) \middle| B_j(\Omega; \rho) \right\rangle_\Omega = \int \bar{B}_i(\Omega; \rho) B_j(\Omega; \rho) d\Omega = \delta_{ij}, \quad (4)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, а черта обозначает комплексное сопряжение.

После варьирования подходящего функционала с использованием разложения (2) уравнение (1) сводится к системе из j_{\max} обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно неизвестных функций $\chi(\rho) \equiv \chi^{(i)}(\rho)$:

$$(\mathbf{L} - 2E\mathbf{I})\chi(\rho) \equiv \left(-\frac{1}{\rho^{d-1}}\mathbf{I}\frac{d}{d\rho}\rho^{d-1}\frac{d}{d\rho} + \mathbf{V}(\rho) + \mathbf{Q}(\rho)\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho^{d-1}}\frac{d\rho^{d-1}\mathbf{Q}(\rho)}{d\rho} - 2E\mathbf{I} \right)\chi(\rho) = 0. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{I} , $\mathbf{V}(\rho)$ и $\mathbf{Q}(\rho)$ — матрицы размерности $j_{\max} \times j_{\max}$, элементы которых определяются соотношениями

$$V_{ij}(\rho) = H_{ij}(\rho) + \frac{\varepsilon_i(\rho) + \varepsilon_j(\rho)}{2}\delta_{ij}, \quad I_{ij} = \delta_{ij}, \quad (6)$$

$$H_{ij}(\rho) = \left\langle \frac{\partial B_i(\Omega; \rho)}{\partial \rho} \middle| \frac{\partial B_j(\Omega; \rho)}{\partial \rho} \right\rangle_{\Omega}, \quad Q_{ij}(\rho) = - \left\langle B_i(\Omega; \rho) \middle| \frac{\partial B_j(\Omega; \rho)}{\partial \rho} \right\rangle_{\Omega}.$$

При численном решении задачи (1) применяются обобщённые однородные краевые условия третьего рода для парциальной функции $\Psi_i(\rho, \Omega)$ по гиперрадиусу в граничных точках конечного интервала $0 \leq \rho < \rho_{\max} < \infty$:

$$\mu_1 \frac{\partial \Psi_i(\rho, \Omega)}{\partial \rho} - \lambda_1 \Psi_i(\rho, \Omega) = 0, \quad \rho = 0, \quad \Omega \in S^{d-1}(\Omega), \quad (7)$$

$$\mu_2 \frac{\partial \Psi_i(\rho, \Omega)}{\partial \rho} - \lambda_2 \Psi_i(\rho, \Omega) = 0, \quad \rho = \rho_{\max}, \quad \Omega \in S^{d-1}(\Omega), \quad (8)$$

где μ_1, λ_1 , — вещественные константы, $\mu_2 \equiv \mu_2(\rho_{\max})$ и $\lambda_2 \equiv \lambda_2(\rho_{\max})$ — вещественные числа, зависящие от ρ_{\max} и определяемые из асимптотических разложений решения. Поскольку гиперповерхностные функции образуют базис, то выполняется условие

$$\left\langle B_j(\Omega; \rho) \middle| \mu_l \frac{\partial \Psi_i(\rho, \Omega)}{\partial \rho} - \lambda_l \Psi_i(\rho, \Omega) \right\rangle_{\Omega} = 0, \quad l = 1, 2, \quad (9)$$

из которого следуют матричные однородные краевые условия третьего рода

$$\mu_l \left(\mathbf{I}\frac{d}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \right) \chi(\rho) - \lambda_l \chi(\rho) = 0, \quad l = 1, 2. \quad (10)$$

Отсюда при $l = 1$, граничное условие, наложенное на функции $\chi(\rho)$ в точке $\rho = 0$, может иметь одну из следующих форм:

1) граничное условие Дирихле, если $\min_{1 \leq j \leq j_{\max}} \lim_{\rho \rightarrow 0} \rho^{d-1} |V_{jj}(\rho)| = \infty$,

$$\chi(0) = 0; \quad (11)$$

2) граничное условие типа Неймана, если $\min_{1 \leq j \leq j_{\max}} \lim_{\rho \rightarrow 0} \rho^{d-1} |V_{jj}(\rho)| < \infty$,

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho^{d-1} \left(\mathbf{I}\frac{d}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \right) \chi(\rho) = 0. \quad (12)$$

2.1. Граничные условия для задачи дискретного спектра

Для связанных состояний вычисляются энергии E и радиальная волновая функция $\chi(\rho)$. При больших ρ радиальная волновая функция $\chi(\rho)$ убывает по экспоненциальному или степенному (в случае так называемых полусвязанных состояний) закону. Из уравнения (10) при $l = 2$ граничное условие для функции $\chi(\rho)$ в точке $\rho = \rho_{\max}$ может иметь одну из следующих форм:

1) граничное условие Дирихле при $\mu_2 = 0$

$$\chi(\rho) = 0; \quad (13)$$

2) граничное условие типа Неймана при $\lambda_2 = 0$

$$\left(\mathbf{I} \frac{d}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \right) \chi(\rho) = 0; \quad (14)$$

3) однородное граничное условие третьего рода при $\mu_2 \neq 0$ и $\lambda_2 \neq 0$

$$\left(\mathbf{I} \frac{d}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \right) \chi(\rho) = \lambda(\rho) \chi(\rho), \quad (15)$$

где $\lambda(\rho) = \lambda_2(\rho)/\mu_2(\rho)$. После подстановки (15) в (5) получаем следующую задачу на собственные значения при $\rho = \rho_{\max}$

$$(\mathbf{V}(\rho) + \mathbf{Q}^2(\rho)) \chi(\rho) = \mu(\rho) \chi(\rho), \quad (16)$$

где наименьшее собственное значение $\mu(\rho)$ и $\lambda(\rho)$ удовлетворяет соотношению

$$\mu(\rho) = \frac{1}{\rho^{d-1}} \frac{d\rho^{d-1}\lambda(\rho)}{d\rho} + \lambda^2(\rho) + 2E. \quad (17)$$

Заметим, что собственное значение $\mu(\rho)$ при $\rho = \rho_{\max}$ не зависит от E и $\lambda(\rho)$, что важно для дальнейших вычислений.

2.2. Граничные условия для задачи непрерывного спектра

Для большинства физических задач матричные потенциалы $\mathbf{V}(\rho)$ и $\mathbf{Q}(\rho)$ при $\rho \rightarrow \infty$ имеют следующее асимптотическое поведение

$$V_{ij}(\rho) = \sum_{l=2} \frac{v_{ij}^{(l)}}{\rho^l}, \quad Q_{ij}(\rho) = \sum_{l=1} \frac{q_{ij}^{(l)}}{\rho^l}, \quad \text{для } i \neq j, \quad (18)$$

$$V_{jj}(\rho) = \epsilon_j - \frac{2Z_j}{\rho} + \frac{l_j(l_j + d - 2)}{\rho^2} + \sum_{l=3} \frac{v_{jj}^{(l)}}{\rho^l}, \quad (19)$$

где $\epsilon_1 \leq \dots \leq \epsilon_N$ — пороговые энергии. В этом случае радиальные волновые функции $\{\chi^{(i)}(\rho)\}_{i=1}^{N_o}$ имеют следующее асимптотическое поведение

$$\chi_j^{(i)}(\rho) \rightarrow \frac{\sin(w_j(\rho)) \delta_{ji} + \cos(w_j(\rho)) K_{ji}}{\sqrt{k_j \rho^{d-1}}} + O(\rho^{-(d+1)/2}), \quad j = 1, \dots, N_o, \quad (20)$$

$$\chi_j^{(i)}(\rho) \rightarrow \frac{\exp(-v_j(\rho))}{\sqrt{q_j \rho^{d-1}}} + O(\rho^{-(d+1)/2} \exp(-v_j(\rho))), \quad j = N_o + 1, \dots, j_{\max}, \quad (21)$$

где

$$w_j(\rho) = k_j \rho + \frac{Z_j}{k_j} \ln(2k_j \rho) - \frac{2l_j + d - 3}{4} \pi + \delta_j^c, \quad (22)$$

$$\delta_j^c = \arg \Gamma \left(\frac{2l_j + d - 1}{2} - i \frac{Z_j}{k_j} \right), \quad v_j(\rho) = q_j \rho - \frac{Z_j}{q_j} \ln(2q_j \rho).$$

Здесь N_o — число открытых каналов, δ_j^c — кулоновские фазовые сдвиги, $\mathbf{K} = \{K_{ji}\}_{j,i=1}^{N_o}$ — искомая матрица реакции, $k_j = \sqrt{2E - \epsilon_j}$ для $j = 1, \dots, N_o$ и $q_j = \sqrt{\epsilon_j - 2E}$ для $j = N_o + 1, \dots, j_{\max}$.

Теперь рассматриваем квадратичный функционал

$$\begin{aligned} \Xi(\Phi, E, \rho_{\max}) &\equiv \int_0^{\rho_{\max}} \Phi^T(\rho) (\mathbf{L} - 2E\mathbf{I}) \Phi(\rho) \rho^{d-1} d\rho = \\ &= \Pi(\Phi, E, \rho_{\max}) - \rho_{\max}^{d-1} \Phi^T(\rho_{\max}) \Phi(\rho_{\max}) \mathbf{A}, \end{aligned} \quad (23)$$

где $\Pi(\Phi, E, \rho_{\max})$ — симметричный функционал

$$\begin{aligned} \Pi(\Phi, E, \rho_{\max}) &= \int_0^{\rho_{\max}} \left(\frac{d\Phi^T(\rho)}{d\rho} \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} + \Phi^T(\rho) \mathbf{V}(\rho) \Phi(\rho) + \right. \\ &\left. + \Phi^T(\rho) \mathbf{Q}(\rho) \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} - \frac{d\Phi(\rho)^T}{d\rho} \mathbf{Q}(\rho) \Phi(\rho) - 2E \Phi^T(\rho) \Phi(\rho) \right) \rho^{d-1} d\rho, \end{aligned} \quad (24)$$

и $\Phi(\rho) = \{\chi^{(i)}(\rho)\}_{i=1}^{N_o}$ — матрица решения размерностью $j_{\max} \times N_o$, которая удовлетворяет задаче на собственные значения при $\rho = \rho_{\max}$

$$\frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \Phi(\rho) = \Phi(\rho) \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} = \{\delta_{ij} \lambda^{(i)}\}_{i,j=1}^{N_o}. \quad (25)$$

При использовании МКЭ, уравнение (24) аппроксимируется к задаче на собственные значения при $\rho = \rho_{\max}$ (детали см. в разделе 2.4)

$$\mathbf{G}(\rho) \Phi(\rho) = \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho) \Phi(\rho), \quad (26)$$

где $\mathbf{G}(\rho)$ — симметричная матрица размерностью $j_{\max} \times j_{\max}$. Отсюда получаем соотношение между $\Phi(\rho)$ и её производной $d\Phi(\rho)/d\rho$ при $\rho = \rho_{\max}$

$$\frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} = \mathbf{R}(\rho) \Phi(\rho), \quad \mathbf{R}(\rho) = \mathbf{G}(\rho) + \mathbf{Q}(\rho). \quad (27)$$

После этого уравнение (27) перепишем с помощью независимых регулярных $\Phi_{\text{reg}}(\rho) = \{\chi_{\text{reg}}^{(i)}(\rho)\}_{i=1}^{N_o}$ и нерегулярных $\Phi_{\text{irr}}(\rho) = \{\chi_{\text{irr}}^{(i)}(\rho)\}_{i=1}^{N_o}$ асимптотических решений уравнения (5), а также их производных при $\rho = \rho_{\max}$:

$$\Phi(\rho) = \Phi_{\text{reg}}(\rho) + \Phi_{\text{irr}}(\rho) \mathbf{K}, \quad \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} = \frac{d\Phi_{\text{reg}}(\rho)}{d\rho} + \frac{d\Phi_{\text{irr}}(\rho)}{d\rho} \mathbf{K}. \quad (28)$$

Используя формулу (27), приходим к следующему матричному уравнению для матрицы реакций \mathbf{K}

$$\left(\frac{d\Phi_{\text{irr}}(\rho)}{d\rho} - \mathbf{R}(\rho) \Phi_{\text{irr}}(\rho) \right) \mathbf{K} = - \left(\frac{d\Phi_{\text{reg}}(\rho)}{d\rho} - \mathbf{R}(\rho) \Phi_{\text{reg}}(\rho) \right). \quad (29)$$

Регулярные и нерегулярные функции должны удовлетворять обобщённому соотношению при больших ρ

$$\text{Wr}(\mathbf{Q}(\rho); \Phi_{\text{irr}}(\rho), \Phi_{\text{reg}}(\rho)) = \mathbf{I}_{oo}, \quad (30)$$

где $\mathbf{Wr}(\bullet; \mathbf{a}(\rho), \mathbf{b}(\rho))$ – обобщённый Вронскиан

$$\mathbf{Wr}(\bullet; \mathbf{a}(\rho), \mathbf{b}(\rho)) = \rho^{d-1} \left[\mathbf{a}^T(\rho) \left(\frac{d\mathbf{b}(\rho)}{d\rho} - \bullet \mathbf{b}(\rho) \right) - \left(\frac{d\mathbf{a}(\rho)}{d\rho} - \bullet \mathbf{a}(\rho) \right)^T \mathbf{b}(\rho) \right] \quad (31)$$

и \mathbf{I}_{oo} – единичная матрица размерностью $N_o \times N_o$. При $\rho = \rho_{\max}$ соотношение (30) эквивалентно

$$\mathbf{Wr}(\mathbf{R}(\rho); \Phi_{\text{irr}}(\rho), \Phi_{\text{reg}}(\rho)) = \mathbf{Wr}(\mathbf{Q}(\rho); \Phi_{\text{irr}}(\rho), \Phi_{\text{reg}}(\rho)). \quad (32)$$

Таким образом, для матрицы реакции \mathbf{K} получаем следующую формулу

$$\mathbf{K} = -\mathbf{X}^{-1}(\rho_{\max}) \mathbf{Y}(\rho_{\max}), \quad (33)$$

где

$$\mathbf{X}(\rho) = \left(\frac{d\Phi_{\text{irr}}(\rho)}{d\rho} - \mathbf{R}(\rho)\Phi_{\text{irr}}(\rho) \right)_{oo}, \quad \mathbf{Y}(\rho) = \left(\frac{d\Phi_{\text{reg}}(\rho)}{d\rho} - \mathbf{R}(\rho)\Phi_{\text{reg}}(\rho) \right)_{oo} \quad (34)$$

— квадратные матрицы размерностью $N_o \times N_o$, элементы которых определяются на открытых каналах.

2.3. Регулярные и нерегулярные матричные решения

Мы будем искать регулярные $\Phi_{\text{reg}}(\rho)$ и нерегулярные $\Phi_{\text{irr}}(\rho)$ матричные решения уравнения (5) с компонентами $\chi_{\text{reg}}^{(i)}(\rho) = (\chi_{1i}^{\text{reg}}(\rho), \dots, \chi_{j_{\max}i}^{\text{reg}}(\rho))^T$ и $\chi_{\text{irr}}^{(i)}(\rho) = (\chi_{1i}^{\text{irr}}(\rho), \dots, \chi_{j_{\max}i}^{\text{irr}}(\rho))^T$, используя следующие асимптотические формы при больших ρ

$$\chi_{ji}^{\text{reg}}(\rho) = \frac{\sin(w_i(\rho))}{\sqrt{k_i \rho^{d-1}}} \sum_{l=0} s_{ji}^{(l,1)} \rho^l + \frac{\cos(w_i(\rho))}{\sqrt{k_i \rho^{d-1}}} \sum_{l=0} c_{ji}^{(l,1)} \rho^l, \quad (35)$$

$$\chi_{ji}^{\text{irr}}(\rho) = \frac{\cos(w_i(\rho))}{\sqrt{k_i \rho^{d-1}}} \sum_{l=0} c_{ji}^{(l,2)} \rho^l + \frac{\sin(w_i(\rho))}{\sqrt{k_i \rho^{d-1}}} \sum_{l=0} s_{ji}^{(l,2)} \rho^l. \quad (36)$$

Подставляя выражения (18), (19) и (35), (36) в уравнение (5) и приравнявая коэффициенты при $\sin(w_i(\rho))$, $\cos(w_i(\rho))$, а также при одинаковых степенях ρ , получаем рекуррентные соотношения для определения искоемых коэффициентов $s_{ji}^{(l,1)}$, $s_{ji}^{(l,2)}$ и $c_{ji}^{(l,1)}$, $c_{ji}^{(l,2)}$ с начальными данными $s_{ji}^{(0,1)} = \delta_{ji}$, $c_{ji}^{(0,1)} = 0$, $c_{ji}^{(0,2)} = \delta_{ji}$, $s_{ji}^{(0,2)} = 0$ следующими из асимптотик (20) [2].

2.4. Формулировка алгебраических задач МКЭ

Для численного решения задачи Штурма–Лиувилля для уравнения (5) с соответствующими граничными условиями из (11), (12) и (13), (14), (15), (25) приближения высокого порядка в МКЭ [3, 4] были разработаны в работе [5] и показана их точность, устойчивость и эффективность для широкого набора квантово-механических систем. Высокоточные вычислительные схемы построены из вариационного функционала Рэля–Ритца для связанных состояний

$$\mathcal{R}_b(\chi, E, \lambda) = \left\{ \int_0^{\rho_{\max}} \sum_{i,j=1}^{j_{\max}} [\chi H \chi]_{ij} \rho^{d-1} d\rho - \lambda \rho_{\max}^{d-1} \sum_{j=1}^{j_{\max}} \chi_j^2(\rho_{\max}) \right\} \times \left\{ \int_0^{\rho_{\max}} \sum_{j=1}^{j_{\max}} \chi_j^2(\rho) \rho^{d-1} d\rho \right\}^{-1}, \quad (37)$$

и из вариационного функционала Хюльгена для задачи рассеяния

$$\mathcal{R}_s(\chi, \lambda) = \left\{ \int_0^{\rho_{\max}} \sum_{i,j=1}^{j_{\max}} [\chi(H - 2E)\chi]_{ij} \rho^{d-1} d\rho \right\} \left\{ \rho_{\max}^{d-1} \sum_{j=1}^{j_{\max}} \chi_j^2(\rho_{\max}) \right\}^{-1}. \quad (38)$$

Здесь

$$ij = \chi'_i(\rho)\chi'_j(\rho)\delta_{ij} + \chi_i(\rho)V_{ij}(\rho)\chi_j(\rho) + Q_{ij}(\rho)[\chi_i(\rho)\chi'_j(\rho) - \chi'_i(\rho)\chi_j(\rho)], \quad (39)$$

$$[\chi(H - 2E)\chi]_{ij} = [\chi H \chi]_{ij} - 2E\chi_i(\rho)\chi_j(\rho)\delta_{ij},$$

и «'» обозначает производную по ρ .

Общая идея МКЭ для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений состоит в том, что интервал $\Delta = [0, \rho_{\max}]$ делится на подынтервалы $\Delta_j = [\rho_{j-1}, \rho_j]$ ($\Delta = \bigcup_{j=1}^n \Delta_j$), называемые элементами.

В каждом из подынтервалов Δ_j определяются узлы¹ $\rho_{j,r}^p$ и строятся интерполяционные полиномы Лагранжа

$$\phi_{j,r}^p(\rho) = \prod_{i=0, i \neq r}^p \frac{(\rho - \rho_{j,i}^p)}{(\rho_{j,r}^p - \rho_{j,i}^p)}. \quad (40)$$

С их помощью определяем набор локальных функций $N_l(\rho)$:

$$N_l^p(\rho) = \begin{cases} \begin{cases} \phi_{1,0}^p(\rho), & \rho \in \Delta_1, \\ 0, & \rho \notin \Delta_1, \end{cases} & l = 0, \\ \begin{cases} \phi_{j,r}^p(\rho), & \rho \in \Delta_j, \\ 0, & \rho \notin \Delta_j, \end{cases} & l = r + p(j - 1), r = 1, \dots, p - 1, \\ \begin{cases} \phi_{j,p}^p(\rho), & \rho \in \Delta_j, \\ \phi_{j+1,0}^p(\rho), & \rho \in \Delta_{j+1}, \\ 0, & \rho \notin \Delta_j \cup \Delta_{j+1}, \end{cases} & l = jp, j = 1, \dots, n - 1, \\ \begin{cases} \phi_{n,p}^p(\rho), & \rho \in \Delta_n, \\ 0, & \rho \notin \Delta_n, \end{cases} & l = np. \end{cases} \quad (41)$$

Кусочно-дифференцируемые функции $\{N_l^p(\rho)\}_{l=0}^L$, $L = np$, формируют базис в пространстве полиномов порядка p . Далее каждую функцию $\chi_\mu(\rho)$ аппроксимируем конечной суммой локальных функций $N_l^p(\rho)$:

$$\chi_\mu(\rho) = \sum_{l=0}^L \chi_\mu^l N_l^p(\rho), \quad \chi_\mu^l \equiv \chi_\mu^l(\rho_{j,r}^p). \quad (42)$$

Для связанных состояний, после подстановки выражений (42) в вариационный функционал (37) и его минимизации [3, 4], получаем обобщённую алгебраическую задачу на собственные значения для определения решений χ^h и E^h на наборе локальных функций $N_l(\rho)$:

$$(\mathbf{A}^p - \lambda^h \mathbf{M})\chi^h = 2E^h \mathbf{B}^p \chi^h. \quad (43)$$

¹Используется равномерное разбиение каждого из подынтервалов

$$\rho_{j,r}^p = \rho_{j-1} + \frac{h_j}{p} r, \quad h_j = \rho_j - \rho_{j-1}, \quad r = 0, \dots, p.$$

Здесь \mathbf{M} — диагональная матрица с нулевыми элементами, кроме последних j_{\max} элементов, которые равны ρ_{\max}^{d-1} . Если используются граничные условия Дирихле или типа Неймана, то $\lambda^h \equiv 0$.

В случае граничного условия третьего рода λ^h определяется из условия (17)

$$\mu = \frac{1}{\rho^{d-1}} \frac{d\rho^{d-1}\lambda^h}{d\rho} + (\lambda^h)^2 + 2E^h, \quad (44)$$

где μ — наименьшее собственное значение задачи (16). Тогда используется следующая итерационная схема для нахождения $\lambda \equiv \lambda^h$, $E \equiv E^h$ и $\chi \equiv \chi^h$

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}^p - \lambda^{(j-1)}\mathbf{M})\chi^{(j-1)} &= 2E^{(j-1)} \mathbf{B}^p \chi^{(j-1)}, \\ (\lambda^{(j)})^2 &= \mu - \frac{d\lambda^{(j-1)}}{d\rho} - \frac{d-1}{\rho_{\max}}\lambda^{(j-1)} - 2E^{(j-1)}, \end{aligned} \quad (45)$$

где $\lambda^{(0)}$ и $\chi^{(0)}$ — начальные приближения.

Для решения задачи рассеяния при фиксированной энергии E , после подстановки выражений (42) в вариационный функционал (38) и его минимизации [3, 4], получаем обобщённую задачу на собственные значения для определения решений $\Phi^h \equiv ((\chi^{(1)})^h, \dots, (\chi^{(N_o)})^h)$:

$$\mathbf{G}^p \Phi^h \equiv (\mathbf{A}^p - 2E \mathbf{B}^p) \Phi^h = \mathbf{M} \Phi^h \Lambda^h, \quad \Lambda^h = \{\delta_{ij}(\lambda^{(i)})^h\}_{ij=1}^{N_o}. \quad (46)$$

Уравнение (46) удобно переписать в виде

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_{aa}^p & \mathbf{G}_{ab}^p \\ \mathbf{G}_{ba}^p & \mathbf{G}_{bb}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_a^h \\ \Phi_b^h \end{pmatrix} = \rho_{\max}^{d-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_a^h \\ \Phi_b^h \end{pmatrix} \Lambda^h, \quad \Phi^h = \begin{pmatrix} \Phi_a^h \\ \Phi_b^h \end{pmatrix}, \quad (47)$$

где искомые решения Φ_a^h и $\Phi_b^h \equiv \Phi(\rho_{\max})$ — матрицы размерностью $(Lj_{\max} - j_{\max}) \times N_o$ и $j_{\max} \times N_o$, соответственно. Из (47) получаем явное выражение для Φ_a^h ,

$$\Phi_a^h = -(\mathbf{G}_{aa}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ab}^p \Phi_b^h \quad (48)$$

и задачу на собственные значения относительно Φ_b^h и Λ^h

$$\left(\mathbf{G}_{bb}^p - \mathbf{G}_{ba}^p (\mathbf{G}_{aa}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ab}^p \right) \Phi_b^h = \rho_{\max}^{d-1} \Phi_b^h \Lambda^h, \quad (49)$$

которая с помощью (25) сводится к уравнению

$$\left(\mathbf{G}_{bb}^p - \mathbf{G}_{ba}^p (\mathbf{G}_{aa}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ab}^p \right) \Phi_b^h = \rho_{\max}^{d-1} \left(\frac{d\Phi_b^h}{d\rho} - \mathbf{Q}(\rho_{\max}) \Phi_b^h \right). \quad (50)$$

Используя (27), получаем соотношение между Φ_b^h и её производной:

$$\frac{d\Phi_b^h}{d\rho} = \mathbf{R}(\rho_{\max}) \Phi_b^h, \quad \mathbf{R}(\rho_{\max}) = \rho_{\max}^{1-d} \left(\mathbf{G}_{bb}^p - \mathbf{G}_{ba}^p (\mathbf{G}_{aa}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ab}^p \right) + \mathbf{Q}(\rho_{\max}). \quad (51)$$

Для того чтобы избежать обращения матрицы \mathbf{G}_{aa}^p при вычислении $\mathbf{R}(\rho_{\max})$, рассмотрим вспомогательное алгебраическое уравнение

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_{aa}^p & \mathbf{G}_{ab}^p \\ \mathbf{G}_{ba}^p & \mathbf{G}_{bb}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_a^p \\ \mathbf{F}_b^p \end{pmatrix} = \rho_{\max}^{d-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Это уравнение имеет решение

$$\mathbf{F}_a^p = -(\mathbf{G}_{aa}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ab}^p \mathbf{F}_b^p, \quad \mathbf{F}_b^p = \rho_{\max}^{d-1} \left(\mathbf{G}_{bb}^p - \mathbf{G}_{ba}^p (\mathbf{G}_{aa}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ab}^p \right)^{-1}, \quad (53)$$

из которого следует, что искомая матрица $\mathbf{R}(\rho_{\max})$ равна

$$\mathbf{R}(\rho_{\max}) = (\mathbf{F}_b^p)^{-1} + \mathbf{Q}(\rho_{\max}), \quad (54)$$

а решения Φ^h вычисляются по формулам (48) и (53)

$$\Phi_a^h = \mathbf{F}_a^p (\mathbf{F}_b^p)^{-1} \Phi_b^h, \quad \Phi_b^h = \Phi_{\text{reg}}(\rho_{\max}) + \Phi_{\text{irr}}(\rho_{\max}) \mathbf{K}, \quad (55)$$

где \mathbf{K} — матрица реакций, определяемая из (33) и $\Phi_{\text{reg}}(\rho) = \{\chi_{\text{reg}}^{(i)}(\rho)\}_{i=1}^{N_o}$; $\Phi_{\text{irr}}(\rho) = \{\chi_{\text{irr}}^{(i)}(\rho)\}_{i=1}^{N_o}$ — асимптотические решения, определенные в (28).

Таким образом, мы получили выражение для искомых матрицы $\mathbf{R}(\rho_{\max})$, которое не содержит собственные значения Λ^h и соответствующие собственные вектора Φ^h . Это позволяет избежать решения алгебраической задачи на собственные значения с матрицей большой размерности и обращения матрицы \mathbf{G}_{aa}^p , что существенно экономит компьютерные ресурсы.

Матрицы жёсткости \mathbf{A}^p и массы \mathbf{B}^p — симметричные и ленточные матрицы, и \mathbf{B}^p — положительно определена. Они имеют вид

$$\mathbf{A}^p = \sum_{j=1}^n \mathbf{a}_j^p, \quad \mathbf{B}^p = \sum_{j=1}^n \mathbf{b}_j^p. \quad (56)$$

Здесь локальные матрицы \mathbf{a}_j^p и \mathbf{b}_j^p вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}_j^p)_{\mu\nu}^{qr} &= \int_{-1}^{+1} \left\{ \delta_{\mu\nu} \frac{4}{h_j^2} (\phi_{j,q}^p)'(\rho) (\phi_{j,r}^p)'(\rho) + V_{\mu\nu}(\rho) \phi_{j,q}^p(\rho) \phi_{j,r}^p(\rho) \right. \\ &\quad \left. + Q_{\mu\nu}(\rho) \left[\phi_{j,q}^p(\rho) (\phi_{j,r}^p)'(\rho) - (\phi_{j,q}^p)'(\rho) \phi_{j,r}^p(\rho) \right] \frac{2}{h_j} \right\} \rho^{d-1} \frac{h_j}{2} d\eta, \quad (57) \\ (\mathbf{b}_j^p)_{\mu\nu}^{qr} &= \delta_{\mu\nu} \int_{-1}^{+1} \phi_{j,q}^p(\rho) \phi_{j,r}^p(\rho) \rho^{d-1} \frac{h_j}{2} d\eta, \end{aligned}$$

где $\rho = \rho_{j-1} + 0, 5h_j(1 + \eta)$, $q, r = 0, \dots, p$, $\mu, \nu = 1, \dots, j_{\max}$. Интегралы (57) вычисляются с помощью гауссовской квадратурной формулы

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}_j^p)_{\mu\nu}^{qr} &= \sum_{g=0}^p \left\{ \delta_{\mu\nu} \frac{4}{h_j^2} (\phi_{j,q}^p)'(\rho_g) (\phi_{j,r}^p)'(\rho_g) + V_{\mu\nu}(\rho_g) \phi_{j,q}^p(\rho_g) \phi_{j,r}^p(\rho_g) \right. \\ &\quad \left. + Q_{\mu\nu}(\rho_g) \left[\phi_{j,q}^p(\rho_g) (\phi_{j,r}^p)'(\rho_g) - (\phi_{j,q}^p)'(\rho_g) \phi_{j,r}^p(\rho_g) \right] \frac{2}{h_j} \right\} \rho_g^{d-1} \frac{h_j}{2} w_g, \quad (58) \\ (\mathbf{b}_j^p)_{\mu\nu}^{qr} &= \sum_{g=0}^p \delta_{\mu\nu} \phi_{j,q}^p(\rho_g) \phi_{j,r}^p(\rho_g) \rho_g^{d-1} \frac{h_j}{2} w_g, \end{aligned}$$

где $\rho_g = \rho_{j-1} + 0, 5h_j(1 + \eta_g)$, η_g и w_g , $g = 0, \dots, p$ — гауссовские узлы и веса.

Для решения поставленной задачи с помощью ЭВМ используется следующая стратегия: зная матричные элементы $\mathbf{V}(\rho)$ и $\mathbf{Q}(\rho)$, выбираем конечноэлементную сетку (КЭС), потом вычисляем эти матричные элементы в гауссовских узлах и затем вычисляем соответствующие интегралы (57).

Чтобы решить обобщённую задачу на собственные значения (43), мы выбрали метод итераций в подпространстве [3, 4] для решения алгебраических задач на

собственные значения с симметричными ленточными матрицами большой размерности. Для проверки сходимости используемого метода используется соотношение Рэля для собственных значений и собственных функций. На практике, для достижения машинной точности ($2 \cdot 10^{-16}$), обычно достаточно 10–16 итераций.

Если матрица $\mathbf{A}^p - \lambda^h \mathbf{M}$ в левой части уравнения (43) не является положительно определённой, то данный метод неприменим, однако, используя сдвиг спектра энергии α , матрицу $\mathbf{A}^p - \lambda^h \mathbf{M}$ можно привести к положительно определённой

$$\tilde{\mathbf{A}}^p \boldsymbol{\chi}^h = \tilde{E}^h \mathbf{V}^p \boldsymbol{\chi}^h, \quad \tilde{\mathbf{A}}^p = \mathbf{A}^p - \lambda^h \mathbf{M} - \alpha \mathbf{V}^p. \quad (59)$$

Заметим, что собственные векторы задач (43) и (59) совпадают, и собственные значения отличаются на постоянный сдвиг $E^h = \tilde{E}^h + \alpha$.

Для решения (16) для граничных условий третьего рода минимальный сдвиг определить сложно, поскольку величины $\mu(\rho_{\max})$ существенно зависят от $\rho = \rho_{\max}$. Однако можно использовать следующие нижние и верхние оценки величины $\mu(\rho_{\max})$:

$$|\mu(\rho_{\max}) - f_{ii}| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^{j_{\max}} |f_{ij}|, \quad f_{ij} = (\mathbf{V}(\rho_{\max}) + \mathbf{Q}^2(\rho_{\max}))_{ij}, \quad i = 1, \dots, j_{\max}, \quad (60)$$

из которых определяется минимальный сдвиг

$$\alpha = \min_{1 \leq i \leq j_{\max}} \left(f_{ii} - \sum_{j=1, j \neq i}^{j_{\max}} |f_{ij}| \right) - 1. \quad (61)$$

Тогда уравнение (16) принимает вид

$$(\mathbf{V}(\rho_{\max}) + \mathbf{Q}^2(\rho_{\max}) - \alpha \mathbf{I}) \boldsymbol{\chi}(\rho_{\max}) = \tilde{\mu}(\rho_{\max}) \boldsymbol{\chi}(\rho_{\max}), \quad \mu(\rho_{\max}) = \tilde{\mu}(\rho_{\max}) + \alpha. \quad (62)$$

В этом случае матрица в левой части (62) положительно определена, что позволяет применить метод итераций в подпространстве.

Справедливы следующие оценки погрешности [4]

$$|E_m^h - E_m| \leq c_1 |E_m| h^{2p}, \quad \left\| \boldsymbol{\chi}_m^h(\rho) - \boldsymbol{\chi}_m(\rho) \right\|_0 \leq c_2 |E_m| h^{p+1}, \quad (63)$$

где E_m , $\boldsymbol{\chi}_m(\rho)$ — точные решения, E_m^h , $\boldsymbol{\chi}_m^h(\rho)$ — соответствующие численные решения, h — максимальный шаг сетки, m — номер решения, c_1 и c_2 — положительные константы не зависящие от шага h . Подобные оценки верны также для численных значений $(\lambda^{(i)})^h$ и $(\boldsymbol{\chi}^{(i)}(\rho))^h$.

3. Точно решаемая двумерная модель

Краевая задача для модели трёх тождественных частиц (бозонов) на прямой, взаимодействующих парными потенциалами нулевого радиуса, имеет вид [6]:

$$-\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \Psi(\rho, \theta) = 2E \Psi(\rho, \theta), \quad (64)$$

с граничными условиями на каждом из шести интервалов ($\theta_n \leq \theta < \theta_{n+1}$)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi(\rho, \theta_k)}{\partial \theta} &= (-1)^{k-n} c_{\bar{k}} \Psi(\rho, \theta_k), \quad k = n, n+1, \\ \Psi(\rho, \theta_{n+1} - 0) &= \Psi(\rho, \theta_{n+1} + 0), \\ \lim_{\rho \rightarrow 0} \rho \frac{\partial \Psi(\rho, \theta)}{\partial \rho} &= 0. \end{aligned} \quad (65)$$

Здесь $\theta_n = \bar{\kappa}(2n - 1)$, $n = 0 - 5$, $\bar{\kappa} = \pi/6$ – параметр, задающий эффективную константу связи $g = \sqrt{2c\bar{\kappa}}$ парного потенциала нулевого радиуса [6]. В случае притяжения ($c < 0$) у каждой пары системы трёх бозонов имеется парное связанное состояние $\phi_0(\eta) = \sqrt{\bar{\kappa}} \exp(-\bar{\kappa}|\eta|)$ с удвоенной энергией $-\epsilon_0^{(0)} = c^2\bar{\kappa}^2$, т.е. $2E = q^2 + \epsilon_0^{(0)}$, где q – относительный импульс третьей частицы относительно связанной пары [6]. В этом случае известны значения энергий для основного и полусвязанного состояний

$$2E_b^{\text{exact}} = -4c^2\bar{\kappa}^2 = -c^2\frac{\pi^2}{9}, \quad 2E_{hb}^{\text{exact}} = -c^2\bar{\kappa}^2 = -c^2\frac{\pi^2}{36}. \quad (66)$$

В случае отталкивания ($c > 0$) ни у одной пары частиц связанного состояния не существует, $\epsilon_0^{(0)} = 0$. Для непрерывного спектра в случаях притяжения и отталкивания известна матрица рассеяния \mathbf{S} [6, 7]. В случае притяжения фазовый сдвиг для упругого рассеяния в интервале $0 < q = \sqrt{2E - \epsilon_0^{(0)}} \leq \sqrt{-\epsilon_0^{(0)}}$ имеет вид

$$\delta^{\text{exact}}(q) = \frac{3\pi}{2} - \arctan\left(\frac{4\bar{\kappa}q}{\sqrt{3}(\bar{\kappa}^2 - q^2)}\right). \quad (67)$$

В силу (67) длина рассеяния равна $a_0 = -\lim_{q \rightarrow 0} (\tan(\delta^{\text{exact}}(q))/q) = -\infty$. Приведённые формулы для точных значений энергии, фазы и длины рассеяния используются ниже в качестве теста для проверки скорости сходимости разложения Канторовича и эффективности аппроксимации задачи МКЭ.

3.1. Разложение Канторовича

Рассмотрим формальное разложение решения $\Psi_i(\rho, \theta)$ уравнения (64), используя набор одномерных базисных функций $B_j(\theta; \rho) \in W_2^1(-\pi/6, 2\pi - \pi/6)$:

$$\Psi_i(\rho, \theta) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} B_j(\theta; \rho) \chi_j^{(i)}(\rho). \quad (68)$$

В разложении (68) функции $\chi^{(i)}(\rho) = (\chi_1^{(i)}(\rho), \dots, \chi_{j_{\max}}^{(i)}(\rho))^T$ являются неизвестными, а поверхностные функции $\mathbf{B}(\theta; \rho) = (B_1(\theta; \rho), \dots, B_{j_{\max}}(\theta; \rho))^T$ образуют ортонормированный базис по независимой угловой переменной $-\pi/6 < \theta \leq 2\pi - \pi/6$ для каждого значения ρ , которое рассматривается здесь как параметр. Базисные функции $B_j(\theta; \rho)$ определяются как решения параметрической задачи на собственные значения

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 B_j(\theta; \rho)}{\partial \theta^2} &= \varepsilon_j(\rho) B_j(\theta; \rho), \quad \theta_n \leq \theta < \theta_{n+1}, \quad n = 0 - 5, \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial B_j(\theta_k; \rho)}{\partial \theta} &= (-1)^{k-n} c\bar{\kappa} B_j(\theta_k; \rho), \quad k = n, n + 1, \\ B_j(\theta_{n+1} - 0; \rho) &= B_j(\theta_{n+1} + 0; \rho). \end{aligned} \quad (69)$$

Собственные функции $B_j(\theta; \rho)$ удовлетворяют условию нормировки

$$\left\langle B_i(\theta; \rho) \left| B_j(\rho; \theta) \right. \right\rangle = \sum_{n=0}^5 \int_{\theta_n}^{\theta_{n+1}} \bar{B}_i(\rho; \theta) B_j(\rho; \theta) d\theta = \delta_{ij}. \quad (70)$$

В результате усреднения уравнения (64) по базису $B_j(\theta; \rho)$ получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений (5) с переменными коэффициентами (6) при $d = 2$ относительно неизвестных функций $\chi(\rho) \equiv \chi^{(i)}(\rho)$. Как показано

в [6], краевая задача (69), (70) имеет аналитическое решение. При $c < 0$ имеем

$$\begin{aligned} B_1(\theta; \rho) &= \sqrt{\frac{y_1^2 - x^2}{\pi(y_1^2 - x^2) + |x|}} \cosh \left[6y_1 \left(\theta - \frac{n\pi}{3} \right) \right], \quad \varepsilon_1(\rho) = - \left(\frac{6y_1(\rho)}{\rho} \right)^2, \\ B_j(\theta; \rho) &= \sqrt{\frac{y_j^2 + x^2}{\pi(y_j^2 + x^2) - |x|}} \cos \left[6y_j \left(\theta - \frac{n\pi}{3} \right) \right], \quad \varepsilon_j(\rho) = \left(\frac{6y_j(\rho)}{\rho} \right)^2, \end{aligned} \quad (71)$$

где $x = c\rho/36$, целое число n выражается через $|\theta - n\pi/3| < \pi/6$, $n = 0 - 5$. В случае $c > 0$ используется только формула (71), но индексы j начинаются от 1. Из (69), (70) следуют уравнения для спектра, в случае притяжения ($c < 0$)

$$\begin{aligned} y_1(\rho) \tanh(\pi y_1(\rho)) &= -x, \quad 0 \leq y_1(\rho) < \infty, \\ y_j(\rho) \tan(\pi y_j(\rho)) &= x, \quad j - \frac{3}{2} < y_j(\rho) < j - 1, \quad j = 2, \dots, j_{\max}, \end{aligned} \quad (72)$$

а в случае отталкивания ($c > 0$)

$$y_j(\rho) \tan(\pi y_j(\rho)) = x, \quad j - 1 < y_j(\rho) < j - \frac{1}{2}, \quad j = 1, \dots, j_{\max}. \quad (73)$$

Потенциальные матричные элементы $\mathbf{V}(\rho)$ и $\mathbf{Q}(\rho)$ определяются выражениями (6) и вычисляются аналитически с помощью $y_j(\rho)$ и параметра x . Их явные выражения и асимптотические разложения (18), (19), а также асимптотические разложения (35), (36) регулярных и нерегулярных матричных решений задачи рассеяния приведены в [8].

3.2. Численные результаты

Изучим сходимость численного решения по МК к известному аналитическому решению по числу уравнений системы (5) для состояний дискретного и непрерывного спектров. В случае притяжения при $c = -1$ волновые функции $\chi_j(\rho)$ связанных состояний имеют асимптотики при больших ρ [8]

$$\chi_1(\rho) \rightarrow \rho^{-1/2} \exp(-\bar{q}\rho), \quad \chi_j(\rho) \rightarrow C_j \rho^{-3} \exp(-\bar{q}\rho). \quad (74)$$

Здесь $\bar{q}^2 = -2E + \epsilon_1 \geq 0$, и C_j — константа. Тогда можно использовать граничное условие Дирихле (13) для вычисления энергии основного состояния. Для вычисления энергии полусвязанного состояния \bar{q} стремится к нулю при близких значениях энергии к точному значению, т. е. функция $\chi_1(\rho)$ убывает как $\rho^{-1/2}$ и для значений ρ_{\max} , используемых в численных вычислениях, величину $\chi_1(\rho_{\max})$ нельзя полагать равной нулю. Поэтому здесь используется граничное условие третьего рода (15).

При вычислении энергии основного состояния была выбрана КЭС $\Omega_\rho[\rho_{\min}, \rho_{\max}] = \{\rho_{\min} = 0(1000) \rho_{\max} = 50\}$ с элементами четвёртого порядка ($p = 4$). Число в скобках обозначает число конечных элементов на подынтервале. Также было выбрано $j_{\max} = 70$ базисных функций. Тогда при $j_{\max} = 70$ размерность и ширина ленточных матриц \mathbf{A}^p и \mathbf{B}^p (56) равны 280040 и 9 соответственно. Расчёты выполнялись на компьютере 2 Alpha 21264, 750 МГц, 2 GB RAM и типом данных с двойной и четверной точностью, обеспечивающим 16 и 32 значащие цифры соответственно.

В табл. 1 показана зависимость погрешности $\Delta E_b = 2E_b^h - 2E_b^{\text{exact}}$, численного результата энергий основного состояния $2E_b^h$ и её точного значения $2E_b^{\text{exact}} = -\pi^2/9$ от числа уравнений. В первой колонке показано число уравнений j_{\max} , во второй и четвёртой колонках — численные значения полученных решений на четверной (*quad*) и двойной (*double*) точности, в третьей и пятой колонках — погрешность $\Delta E = 2E_b^h - 2E_b^{\text{exact}}$. Фактор (x) обозначает 10^x . Из табл. 1 видно, что $\Delta E_b > 0$, т. е. получим верхние оценки для точной энергии, что согласуется с

теорией. Кроме того, из табл. 1 видно, что при использовании четверной точности МК монотонно с линейной скоростью сходится к точному значению при возрастании j_{\max} до максимального значения, а при использовании двойной точности — лишь только до 35 уравнений.

Таблица 1
Сходимость численных значений удвоенной энергии основного состояния $2E_b^h$ к точному значению $2E_b^{\text{exact}} = -\pi^2/9$ в зависимости от числа уравнений

j_{\max}	$2E_{KM}^{\text{quad}}$	$\Delta E_{KM}^{\text{quad}}$	$2E_{KM}^{\text{double}}$	$\Delta E_{KM}^{\text{double}}$
1	-1,09644261272635	1,801(-04)	-1,09644261272582	1,801(-04)
4	-1,09662265710171	5,413(-08)	-1,09662265710061	5,413(-08)
6	-1,09662270528240	5,949(-09)	-1,09662270528209	5,950(-09)
10	-1,09662271083539	3,967(-10)	-1,09662271083463	3,979(-10)
20	-1,09662271122115	1,099(-11)	-1,09662271122037	1,245(-11)
30	-1,09662271123076	1,390(-12)	-1,09662271122924	3,276(-12)
35	-1,09662271123151	6,357(-13)	-1,09662271122960	3,194(-12)
40	-1,09662271123182	3,232(-13)	-1,09662271122940	3,361(-12)
50	-1,09662271123204	1,046(-13)	-1,09662271122827	4,427(-12)
70	-1,09662271123213	1,957(-14)		
$2E_b^{\text{exact}}$	-1,09662271123215		-1,09662271123215	

На примере расчёта энергии основного состояния в табл. 2 представлено сравнение скорости сходимости разложений Канторовича (68) и Галёркина

$$\Psi_i(\rho, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \bar{\chi}_0(\rho) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^{j_{\max}-1} \bar{\chi}_j(\rho) \cos(6j\theta). \quad (75)$$

Таблица 2
Сравнение скорости сходимости разложений Канторовича (К) (68) и Галёркина (Г) (75) на примере расчёта удвоенной энергии $2E(j_{\max})$ основного состояния

j_{\max}	1	2	3	4	5	6
ΔE^K	1,801(-4)	2,762(-6)	2,697(-7)	5,413(-8)	1,594(-8)	5,949(-9)
ΔE^G	9,662(-2)	4,116(-2)	2,573(-2)	1,866(-2)	1,462(-2)	1,201(-2)

В первой строке показано число уравнений j_{\max} , во второй и третьей строках показаны разности $\Delta E(j_{\max}) = 2E(j_{\max}) - 2E_b^{\text{exact}}$ вычисленного $E(j_{\max})$ и точного значения энергии E_b^{exact} . Медленная скорость сходимости значений энергии $\Delta E^G(j_{\max})$ при увеличении числа j_{\max} базисных функций (75) объясняется тем фактом, что ослабить достаточные условия сходимости классического метода Галёркина здесь нельзя.

Из формулы (74) получаем граничное условие третьего рода для полусвязанного состояния при $\rho = \rho_{\max}$

$$\begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow \rho_{\max}} \frac{d\chi_1(\rho)}{d\rho} &= - \left(\frac{1}{2\rho_{\max}} + \bar{q} \right) \chi_1(\rho_{\max}), \\ \lim_{\rho \rightarrow \rho_{\max}} \frac{d\chi_j(\rho)}{d\rho} &= - \left(\frac{3}{\rho_{\max}} + \bar{q} \right) \chi_j(\rho_{\max}). \end{aligned} \quad (76)$$

В этом случае было выбрано начальное приближение $\lambda^{(0)} = -(1/(2\rho_{\max}) + \bar{q})$ и КЭС $\Omega_\rho[\rho_{\min}, \rho_{\max}] = \{\rho_{\min} = 0 (500) 50 (1500) \rho_{\max} = 500\}$ с элементами четвёртого порядка ($p = 4$). Длина рассеяния $a_0 = -a = -\lim_{q \rightarrow 0} (K_{11}/q)$ вычисляется, используя асимптотические разложения регулярных и нерегулярных решений

$\chi_{j1}^{(\text{reg})}(\rho)$, $\chi_{j1}^{(\text{irr})}(\rho)$ системы уравнений (5) при больших ρ с точностью до $O(\rho^{-5})$

$$\begin{aligned}\chi_{11}^{(\text{reg})}(\rho) &= \sqrt{\rho} + \frac{979776(4(j_{\max} - 1)^3 - j_{\max} + 1)}{5\pi^6 \rho^4 \sqrt{\rho}}, & \chi_{11}^{(\text{irr})}(\rho) &= \frac{1}{\sqrt{\rho}}, \\ \chi_{j1}^{(\text{reg})}(\rho) &= 7776(2j - 3)(-1)^{j+1} \left(-\frac{1}{\pi^4 \rho^3} - \frac{54}{\pi^6 \rho^4} \right), & & (77) \\ \chi_{j1}^{(\text{irr})}(\rho) &= 7776(2j - 3)(-1)^{j+1} \left(-\frac{3}{\pi^4 \rho^4} \right).\end{aligned}$$

В табл. 4 показана зависимость от числа уравнений разности $\Delta E_{hb} = 2E_{hb}^h - 2E_{\text{exact}}^{hb}$, численного значения энергии полусвязанного состояния $2E_{hb}^h$ и известного точного значения $2E_{\text{exact}}^{hb} = -\pi^2/36$. В первой колонке показано число уравнений j_{\max} , во второй колонке — численные значения полученных решений, в третьей колонке — разность $\Delta E_{hb} = 2E_{hb}^h - 2E_{\text{exact}}^{hb}$, а в четвёртой колонке — соответствующие собственные значения λ . В последней колонке показана длина рассеяния a_0 . Фактор (x) обозначает 10^x .

Из табл. 4 видно, что с помощью данного метода получена верхняя оценка точной энергии (т. е. $\Delta E_{hb} > 0$), что согласуется с теорией. Заметим, что сходимость по числу уравнений более медленная чем при вычислении основного состояния. Также показана длина рассеяния, соответствующая этой энергии. При увеличении числа уравнений длина рассеяния стремится к $-\infty$.

Рассмотрим задачу упругого рассеяния с одним открытым каналом ($0 < q \leq -c\bar{k}$). Фазовый сдвиг δ^h вычислен на КЭС $\Omega_\rho[\rho_{\min}, \rho_{\max}] = \{\rho_{\min} = 0 (1500) \rho_{\max} = 300/q\}$ с элементами четвёртого порядка ($p = 4$). В табл. 3 показана сходимость погрешности фазового сдвига, $\Delta\delta = \delta^{\text{exact}} - \delta^h$, между численным фазовым сдвигом δ^h и его точным значением δ^{exact} в зависимости от числа уравнений и импульса q . С увеличением числа уравнений до $j_{\max} = 25$ значения фазового сдвига сходятся к известным аналитическим значениям (67) с точностью 10^{-3} – 10^{-6} . Из табл. 3 видно, что $\Delta\delta > 0$, т. е. получим верхние оценки для фазового сдвига, что согласуется с теорией. Из табл. 3 также видно, что при одном и том же числе уравнений значения фазового сдвига получаются тем точнее, чем меньше импульс q .

Таблица 3

Сходимость погрешности фазового сдвига, $\Delta\delta = \delta^{\text{exact}} - \delta^h$, между численным фазовым сдвигом δ^h и его точным значением δ^{exact} в зависимости от числа уравнений и импульса q . Фактор (x) обозначает 10^x

j_{\max}	q						
	0, 002	0, 100	0, 200	0, 300	0, 400	0, 500	$\pi/6$
1	6, 180(-1)	2, 972(-2)	3, 946(-2)	5, 353(-2)	6, 857(-2)	8, 513(-2)	8, 930(-2)
4	1, 704(-3)	2, 074(-3)	4, 128(-3)	6, 188(-3)	8, 250(-3)	1, 031(-2)	1, 080(-2)
6	4, 019(-4)	1, 285(-3)	2, 566(-3)	3, 848(-3)	5, 131(-3)	6, 414(-3)	6, 717(-3)
10	8, 213(-5)	7, 299(-4)	1, 459(-3)	2, 188(-3)	2, 917(-3)	3, 647(-3)	3, 819(-3)
15	2, 848(-5)	4, 729(-4)	9, 462(-4)	1, 419(-3)	1, 892(-3)	2, 365(-3)	2, 477(-3)
20	1, 493(-5)	3, 470(-4)	6, 954(-4)	1, 044(-3)	1, 391(-3)	1, 739(-3)	1, 821(-3)
25	7, 743(-6)	2, 680(-4)	5, 391(-4)	8, 105(-4)	1, 080(-3)	1, 349(-3)	1, 412(-3)

Рассмотрим многоканальную задачу упругого рассеяния при $2E > 0$ в случаях притяжения $c = -1$ и отталкивания $c = 1$. Были рассчитаны матрицы реакции \mathbf{K} с $j_{\max} = 6$ при $2E = 0,0858443221919622$ ($q = 0,6$) в случае притяжения и при $2E = 0,01$ ($k \equiv k_j = 0,1$) в случае отталкивания на КЭС $\Omega_\rho[\rho_{\min}, \rho_{\max}] = \{\rho_{\min} = 0 (2000) 100 (4000) \rho_{\max} = 2000\}$ и $\Omega_\rho[\rho_{\min}, \rho_{\max}] = \{\rho_{\min} = 0 (2000) 100 (4000) 2000 (2000) \rho_{\max} = 11000\}$ соответственно, с элементами четвёртого порядка ($p = 4$). Результаты показаны в табл. 5 и 6. Они хорошо согласуются с расчётами работы [6] и приведёнными там аналитическими формулами. Симметрия матрицы реакции \mathbf{K} сохраняется с точностью 10^{-5} – 10^{-9} . В этих примерах все j_{\max} каналов открыты, и влияние каждого канала существенно. Поэтому при увеличении числа

уравнений j_{\max} получаем более точные результаты для подматрицы размерности меньше чем j_{\max} матрицы реакции **K**.

Таблица 4
Сходимость численных значений удвоенной энергии полусвязанного состояния $2E_{hb}^h$ к точному значению $2E_{hb}^{\text{exact}} = -\pi^2/36$ и длины рассеяния a_0 в зависимости от числа уравнений

j_{\max}	$2E_{hb}^h$	ΔE_{hb}	λ	a_0
1	-0,274154341	1,336(-6)	-6,232(-4)	-699,166
4	-0,274155412	2,657(-7)	-1,131(-3)	-301369,617
6	-0,274155416	2,615(-7)	-1,131(-3)	-1338701,715
10	-0,274155421	2,563(-7)	-1,129(-3)	-7577671,004
15	-0,274155434	2,431(-7)	-1,122(-3)	-27997011,620
$2E_{hb}^{\text{exact}}$	-0,274155667			$-\infty$

Таблица 5
Элементы матрицы реакции **K** в случае притяжения $c = -1$ и $q = 0,6$. Фактор (x) обозначает 10^x

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6
1	-0,1261	0,5000(-7)	0,9473(-8)	0,6237(-7)	0,2544(-6)	0,6469(-6)
2	0,4885(-7)	0,5940	0,3295(-1)	0,6433(-2)	0,2276(-2)	0,1024(-2)
3	0,7318(-9)	0,3295(-1)	0,6333	0,4163(-1)	0,9727(-2)	0,3783(-2)
4	0,1269(-9)	0,6432(-2)	0,4163(-1)	0,6349	0,4301(-1)	0,1031(-1)
5	0,6478(-8)	0,2275(-2)	0,9726(-2)	0,4299(-1)	0,6250	0,4228(-1)
6	0,1635(-7)	0,1023(-2)	0,3781(-2)	0,1030(-1)	0,4221(-1)	0,5836

Таблица 6
Элементы матрицы реакции **K** в случае отталкивания $c = 1$ и $k = 0,1$. Фактор (x) обозначает 10^x

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6
1	-2,56205	-0,6155(-1)	-0,1278(-1)	-0,4622(-2)	-0,2187(-2)	-0,1218(-2)
2	-0,6155(-1)	-2,6364	-0,7897(-1)	-0,1960(-1)	-0,8056(-2)	-0,4189(-2)
3	-0,1278(-1)	-0,7897(-1)	-2,6446	-0,8259(-1)	-0,2175(-1)	-0,9458(-2)
4	-0,4622(-2)	-0,1960(-1)	-0,8259(-1)	-2,6558	-0,8501(-1)	-0,2319(-1)
5	-0,2187(-2)	-0,8056(-2)	-0,2175(-1)	-0,8500(-1)	-2,6937	-0,8912(-1)
6	-0,1218(-2)	-0,4189(-2)	-0,9459(-2)	-0,2319(-1)	-0,8909(-1)	-2,80482

4. Заключение и обсуждение результатов

Представлена новая вариационная формулировка задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для системы связанных радиальных уравнений в МК, включающая краевые условия третьего рода. Разработаны стабильные и высокоточные вариационно-итерационные алгоритмы численного решения краевых задач на основе МКЭ. Выполнены численные исследования скорости сходимости к точному решению для точно решаемой модели трёх тождественных частиц на прямой, взаимодействующих парными потенциалами нулевого радиуса. Показано, что при использовании разложения Галёркина (75) медленная сходимость значений энергии $\Delta E^{\Gamma}(j_{\max})$ при увеличении числа j_{\max} базисных функций объясняется тем фактом, что ослабить достаточные условия сходимости классического метода Галёркина здесь нельзя. Более того, редуцированная таким образом задача при любом конечном j_{\max} на полуоси имеет ложный кулоновский спектр с квантовым дефектом и качественно отличное пороговое поведение для фазового сдвига. Это обстоятельство следует учитывать при редукации методом Галёркина краевой задачи для системы трёх частиц с парными взаимодействиями при наличии связанных состояний.

Литература

1. *Abrashkevich A. G., Kaschiev M. S., Vinitsky S. I.* A New Method for Solving an Eigenvalue Problem for a System of Three Coulomb Particles within the Hyper-spherical Adiabatic Representation // *J. Comp. Phys.* — Vol. 163. — 2000. — Pp. 328–348.
2. *Chuluunbaatar O. 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.* — 2007.
3. *Bathe K. J.* Finite Element Procedures in Engineering Analysis. — New-York: Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1982.
4. *Strang G., Fix G. J.* An Analysis of the Finite Element Method. — New-York: Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1973.
5. Finite-Element Solution of the Coupled-Channels Schrödinger Equation Using High-Order Accuracy Approximations / A. G. Abrashkevich, D. G. Abrashkevich, M. S. Kaschiev, I. V. Puzynin // *Computer Physics Communications.* — Vol. 85. — 1995. — Pp. 40–65.
6. *Chuluunbaatar O. et al.* Three Identical Particles on a Line: Comparison of Some Exact and Approximate Calculations // *J. Phys. A.* — Vol. 35. — 2002. — Pp. L513–L525.
7. *Kuperin Y. A. et al.* Connections and Effective S-matrix in Triangle Representation for Quantum Scattering // *Annals of Physics.* — Vol. 205. — 1991. — Pp. 330–361.
8. *Chuluunbaatar O. et al.* KANTBP: A program for Computing Energy Levels, Reaction Matrix and Radial Wave Functions in the Coupled-Channels Hyper-Spherical Adiabatic Approach // *Comput. Phys. Commun.* — Vol. 177. — 2007. — Pp. 649–675.

UDC 519.633.2,517.958: 530.145.6

Variational-Iteration Algorithms of Numerical Solving Bound State and Scattering Problems for Coupled-Channels Radial Equations

O. Chuluunbaatar

*Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie str., 6., Dubna, Moscow Region, Russia, 141980*

The variational-iteration algorithms of the numerical solving of the bound state and scattering problems for coupled-channels radial equations are presented in the framework of the Kantorovich method (KM). Reduction of the boundary problems with conditions of the third type for systems of coupled radial equations is executed by a finite element method (FEM) with a high order accuracy on a non-uniform grid. As benchmark calculation to check rate of convergence and decomposition KM and efficiency of the FEM approximations of problem, we used exact values of energy, a phase and lengths of dispersion for model of three identical particles (bosons) on a straight line interacting by the pair zero-range potentials. A comparison of convergence rate of KM and Galerkin method in numerical calculations of the ground state energy of the given model is performed.