

Решение краевых многомерных задач шредингеровского типа методом Канторовича

О. Чулуунбаатар¹, А.А. Гусев¹, С.И. Виницкий²

¹Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ; ²Лаборатория теоретической физики, ОИЯИ

Схема решения краевых задач методом Канторовича (МК)

В ряде случаев малочастичные квантово-механические задачи сводятся к решению многомерного стационарного уравнения Шредингера для волновой функции $\Psi(r, \Omega)$:

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

Здесь $\hat{\Lambda}_\Omega^2$ – самосопряженный дифференциальный оператор эллиптического типа с частными производными в конечной области $\hat{X} \subset \mathbf{R}^{d-1}$, $\Omega = \{\Omega_j\}_{j=1}^{d-1} \in \hat{X}$ – набор независимых переменных, $r \in (r_1, r_2) \in B \subset \mathbf{R}^1$ – независимая переменная, $X = B \otimes \hat{X} \subset \mathbf{R}^d$ – конечная область координатного пространства \mathbf{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 самосопряженный оператор $L(\Omega; r) = -\hat{\Lambda}_\Omega^2 + U(r, \Omega)$ имеет только дискретный вещественный спектр $\varepsilon(r)$.

Решение $\Psi(r, \Omega) \in \mathbf{L}_2(X)$ уравнения (1) подчиняется краевым условиям третьего рода:

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

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

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

В разложении (3) вектор-функция $\chi(r) = (\chi_1(r), \dots, \chi_{j_{\max}}(r))^T$ – искомая. Базисные функ-

ции $\psi_j(\Omega; r)$ – решения параметрической задачи на собственные значения

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

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

$$\int_{\hat{X}} \psi_j(\Omega; r)\psi_j(\Omega; r)d\Omega = 1. \quad (5)$$

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

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

$$\mathbf{H}(r)\chi(r) = E\chi(r), \quad (6)$$

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(r) &= -\frac{1}{f_1(r)}\mathbf{I} \frac{d}{dr} f_2(r) \frac{d}{dr} + \mathbf{V}(r) \\ &+ \frac{f_2(r)}{f_1(r)}\mathbf{Q}(r) \frac{d}{dr} + \frac{1}{f_1(r)} \frac{d f_2(r) \mathbf{Q}(r)}{dr}. \end{aligned} \quad (8)$$

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

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

Для многоканальной задачи рассеяния (6)–(8) число открытых каналов $N_o = \max j \leq j_{\max}$ определяется условием $E \geq \lim_{r_2 \rightarrow \infty} V_{jj}(r_2)$, если $\lim_{r_2 \rightarrow \infty} f_2(r_2)/f_1(r_2) = \text{const}$, а нормировка решения $\Phi(r) = \{\chi_{i_o}(r)\}_{i_o=1}^{N_o}$ – условием:

$$\Phi(r_2) = \Phi_{\text{reg}}(r_2) + \Phi_{\text{irr}}(r_2)\mathbf{K}, \quad (10)$$

где \mathbf{K} – искомая матрица реакции размерностью $N_o \times N_o$, а $\Phi_{\text{рег}}(r)$ и $\Phi_{\text{ит}}(r)$ – асимптотики регулярных и нерегулярных решений уравнения (6).

В системе (8) переменные элементы матриц $\mathbf{V}(r)$ и $\mathbf{Q}(r)$ размерностью $j_{\text{max}} \times j_{\text{max}}$ определяются формулами

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

Производная от собственной функции $\partial_r \psi_j(\Omega; r) \in \mathcal{F}_r \sim \mathbf{L}_2(\hat{X})$ – решение параметрической неоднородной краевой задачи, получаемой дифференцированием по параметру задачи (4), (5):

$$\begin{aligned} (L(\Omega; r) - \varepsilon_j(r)) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} &= \left(\frac{\partial \varepsilon_j(r)}{\partial r} - \frac{\partial L(\Omega; r)}{\partial r} \right) \psi_j(\Omega; r), \quad (12) \\ a \frac{\partial^2 \psi_j(\Omega; r)}{\partial r \partial \mathbf{n}} - b(r) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} &= \frac{\partial b(r)}{\partial r} \psi_j(\Omega; r), \quad \Omega \in \partial \hat{X}, \quad r \in [r_1, r_2], \\ \int_{\hat{X}} \psi_j(\Omega; r) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} d\Omega &= 0. \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

Методы решения и комплексы программ

Разработаны эффективные вариационно-проекционные вычислительные схемы и экономичные алгоритмы для численного решения проблем 1–5 на основе теории \mathbf{R} -матрицы, асимптотических методов и метода конечных элементов (МКЭ).

Созданы проблемно-ориентированные комплексы программ KANTBP [1, 2], ODPEVP [4] POTHMF [3].

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

$$|E_j - E_j^h| \leq c_1 h^{2p}, \quad \|\chi_j(r) - \chi_j^h\|_0 \leq c_2 h^{p+1}, \quad (13)$$

где E_j и $\chi_j(r) \in \mathcal{H}^2$ – искомые собственные значения и соответствующие собственные функции задачи на связанные состояния; E_j^h и $\chi_j^h \in \mathcal{H}^1$ – соответствующие численные решения; h – максимальный шаг конечноэлементной сетки $\Omega_{r_h}^p[r_1, r_2]$; 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_j^h – собственные значения матрицы реакции, а χ_j^h – соответствующие собственные функции.

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

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{g_1(z)} \frac{d}{dz} g_2(z) \frac{d}{dz} + U(r, z) \right) \psi_j(z; r) &= \varepsilon_j(r) \psi_j(z; r). \quad (14) \end{aligned}$$

Здесь $r \in \Omega_r = [r_1, r_2]$ – вещественный параметр, $\varepsilon_j(r)$ – 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 на концах интервала $z \in \bar{\Omega}_z$:

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

и удовлетворяют условию нормировки

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

Здесь $a_1 \geq 0$, $a_2 \geq 0$ – вещественные константы, функции $b_1(r) \leq 0$, $b_2(r) \geq 0$, $\partial_r b_1(r)$ и $\partial_r b_2(r)$ – непрерывны и ограничены при $r \in \Omega_r$, $a_l^2 + b_l^2(r) \neq 0$.

Представлен экономичный алгоритм вычисления с заданной точностью набора j_{max} собственных значений, собственных функций и их первых

производных по параметру r и интегралов

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

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

В МКЭ для численного решения ϵ_j^h и ψ_j^h доказаны следующие оценки погрешностей:

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

где $\epsilon_j(r)$ и $\psi_j(z; r) \in \mathcal{H}^2$ – точные решения; ϵ_j^h и $\psi_j^h \in \mathcal{H}^1$ – 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:

Теорема. 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:

$$\left| \frac{\partial \epsilon_j(r)}{\partial r} - \frac{\partial \epsilon_j^h}{\partial r} \right| \leq c_3 h^{2p},$$

$$\left\| \frac{\partial \psi_j(z; r)}{\partial r} - \frac{\partial \psi_j^h}{\partial r} \right\|_0 \leq c_4 h^{p+1}, \quad (19)$$

$$|Q_{ij}(r) - Q_{ij}^h| \leq c_5 h^{2p}, \quad |W_{ij}(r) - W_{ij}^h| \leq c_6 h^{2p},$$

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 $\partial_r \psi_j^h \in \mathcal{H}^1$, 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 .

Представленные выше 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 ROTNMF предназначен для численного решения **проблем 1–3** для угловых сплюснутых сфероидальных функций.

Перспективы и применение

Комплексы программ KANTBP^{1 2}, ROTNMF³ и ODPEVP⁴ с полным описанием и тестовыми примерами сданы в библиотеку программ журнала Computer Physics Communication. К этим

¹http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v1_0.html

²http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v2_0.html

³http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEAA_v1_0.html

⁴http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEDV_v1_0.html

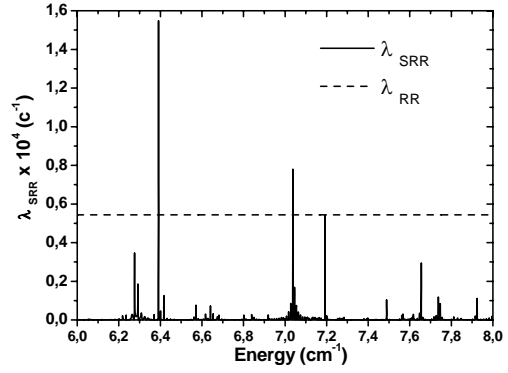


Рис. 1: Зависимость скорости лазерно-стимулированной рекомбинации на один антипротон по отношению к начальной энергии позитрона E (при $Z = 1$, $m = 0$): λ_{SRR} при $\gamma = 2.595 \times 10^{-5}$ ($H \approx 6$ Тл) (сплошная линия), λ_{RR} при $\gamma = 0$ (пунктирная линия)

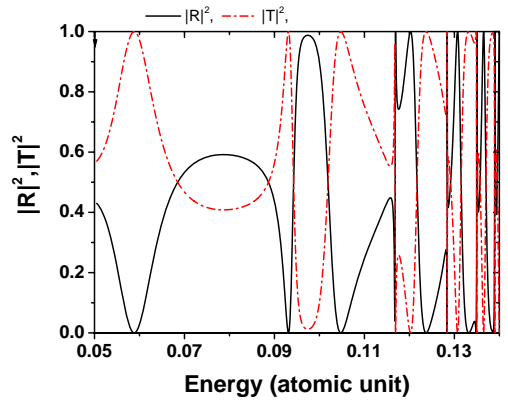


Рис. 2: Коэффициенты прохождения $|\hat{T}|^2$ и отражения $|\hat{R}|^2$ при $Z = 1$, $m = 0$ и $\gamma = 1 \times 10^{-1}$

программам с сентября 2007 г., с января 2008 г. и с июля 2009 г. по сентябрь 2009 г. было официально зарегистрировано 289, 131 и 36 обращений пользователей, соответственно.

Эффективность разработанных методов, алгоритмов и созданных комплексов программ подтверждена результатами численного анализа полученных теоретических оценок погрешности решений краевых задач и результатами моделирования следующих физических процессов в мало-частичных квантовых системах:

(а) Проведено численное исследование модели резонансного механизма фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле $\gamma = H/H_0$ (см. рис. 1). Впервые предсказаны эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле [5, 6] (см. рис. 2, 3).

(б) Выполнено численное исследование моде-

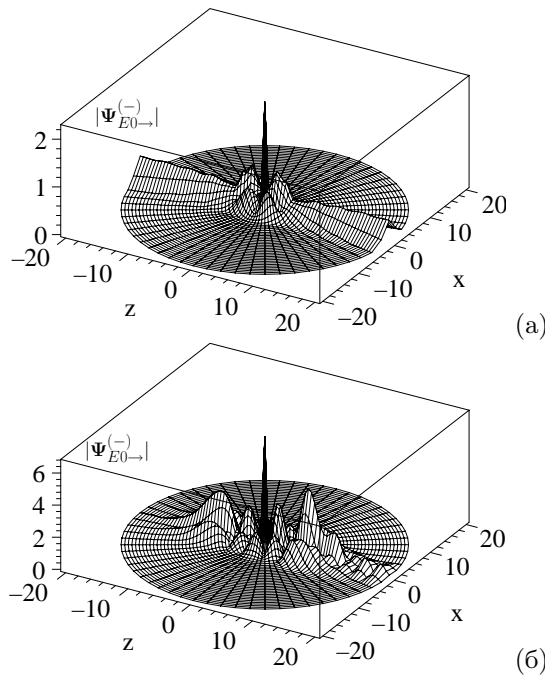


Рис. 3: Профили абсолютных значений волновых функций $|\Psi_{E0 \rightarrow}^{(-)}|$ на xz плоскости при $Z = 1$, $m = 0$ и $\gamma = 1 \times 10^{-1}$. Энергия $E = 0.05885$ а.е. соответствует энергии резонансного прохождения (а), а $E = 0.11692$ а.е. – энергии полного отражения (б).

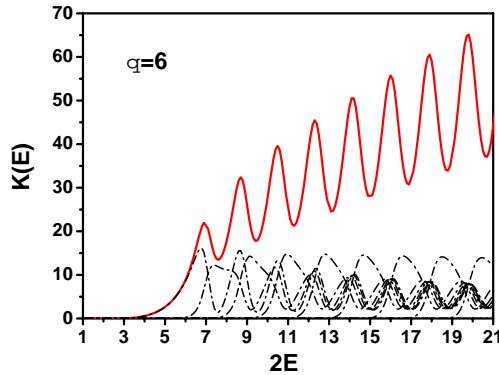


Рис. 4: Суммарный коэффициент усиления $K(E) = |\Psi(2E, r = 0, \gamma)|^2 / |\Psi(2E, r = 0, \gamma = 0)|^2$ (сплошная линия) и парциальные вклады (пунктирные линии) открытых каналов $i_0 = 1 \div 10$ в зависимости от E при $q = -Z = 6$ и $\gamma = 1$ (в масштабированных единицах)

ли осевого каналирования одноименно заряженных частиц в эффективном осцилляторном потенциале кристалла с частотой γ . Выявлен немонотонный характер зависимости от энергии E столкновения коэффициента усиления скорости ядерной реакции $K(E)$, обусловленный впервые предсказанными резонансными эффектами отражения и прохождения каналированных ионов [7, 8] (см. рис. 4, 5).

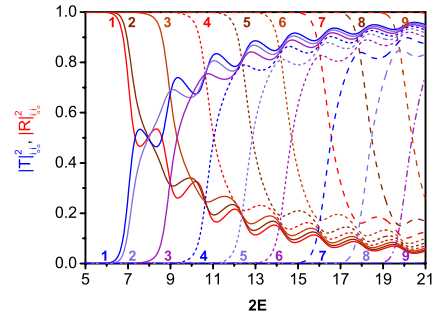


Рис. 5: Диагональные элементы амплитуд прохождения $|T_{i_0 i_0}^2|$ и отражения $|R_{i_0 i_0}^2|$, соответствующим первым девяти открытым каналам ($i_0 = 1 \div 9$), в зависимости от энергии ($2E$) для $q = -Z = 6$ и $\gamma = 1$

Список литературы

- [1] O. Chuluunbaatar, 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., **177** (2007) 649–675.
- [2] O. Chuluunbaatar, 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., **179** (2008) 685–693.
- [3] O. Chuluunbaatar, 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., **178** (2008) 301–330.
- [4] O. Chuluunbaatar, et al: *ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem*. Comput. Phys. Commun., **180** (2009) 1358–1375.
- [5] O. Chuluunbaatar, et al: *Adiabatic representation for a hydrogen atom photoionization in an uniform magnetic field*. ЯФ, **71** (2008) 871–878.
- [6] O. Chuluunbaatar, et al: *Photoionization and recombination of a hydrogen atom in a magnetic field*. Phys. Rev. **A 77**, (2008) 034702–1–4.
- [7] O. Chuluunbaatar, et al: *Channeling Problem for Charged Particles Produced by Confining Environment*. ЯФ, **72** (2009) 768–778.
- [8] С.И. Виницкий, 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., Янус-К, **12** (2009) 402–422.