



Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

L. I. Komarov, E. V. Krylov, I. D. Feranchuk, A numerical solution of a nonlinear self-consistent eigenvalue problem, *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 1978, Volume 18, Number 3, 681–691

<https://www.mathnet.ru/eng/zvmmf5805>

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<https://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.14.81

April 25, 2025, 08:50:47



УДК 518:517.9:53

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ САМОСОГЛАСОВАННОЙ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

Л. И. КОМАРОВ, Е. В. КРЫЛОВ, И. Д. ФЕРАНЧУК

(Минск)

Исследуется возможность численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, возникающих в самосогласованной задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем на основе непрерывного аналога метода Ньютона.

§ 1. Введение

При рассмотрении многих физических процессов возникает задача о нахождении основного состояния системы, которая состоит из частицы, взаимодействующей с квантовым полем. Здесь можно назвать задачу о движении примеси в He II [1], о движении электрона в полярном кристалле [2], о взаимодействии нуклона с мезонным полем в нерелятивистском приближении [3]. При решении таких задач необходимо прибегать к приближенным методам теории возмущений. В том случае, когда энергия взаимодействия частицы с полем мала, в нулевом приближении нам необходимо решать линейное уравнение Шрёдингера, а расчет высших порядков сводится к вычислению матричных элементов от оператора возмущения.

Существенно более сложная ситуация возникает при рассмотрении ряда конкретных физических систем в случае сильной связи, когда энергия взаимодействия пропорциональна не малому, а большому параметру. Последовательная схема теории возмущений для такого случая была впервые развита в работе [4], причем уже в нулевом приближении возникает необходимость решения нелинейной системы дифференциальных уравнений, имеющих такой общий вид [4-6]:

$$(1) \quad \bar{\psi}''(r) + \frac{2}{r} \bar{\psi}'(r) + \hat{k}_0[\varphi(r), r] = \kappa^2 \bar{\psi}(r),$$

$$(2) \quad \varphi''(r) + \frac{2}{r} \varphi'(r) + F_1[\bar{\psi}(r), \varphi(r)] = F_2[\bar{\psi}(r), r],$$

причем $0 \leq r < \infty$, а $\bar{\psi}(r)$ и $\varphi(r)$ удовлетворяют однородным граничным условиям, вытекающим из требования непрерывности и конечности функций во всем пространстве:

$$(3) \quad \bar{\psi}'(0) = \varphi'(0) = \bar{\psi}(\infty) = \varphi(\infty) = 0.$$

Здесь $\vec{\psi}(r)$ — вектор-функция размерности n , удовлетворяющая условию нормировки

$$(4) \quad \sum_{i=1}^n \int_0^{\infty} r^2 |\psi_i(r)|^2 = 1,$$

$\hat{k}_0[\varphi(r), r]$ — известная квадратная матрица размерности n , элементы которой зависят от r и скалярной функции $\varphi(r)$, $F_{1,2}[\vec{\psi}(r), \varphi(r)]$ — известные скалярные функции r , $\varphi(r)$ и вектора $\vec{\psi}(r)$.

Уравнение (1) является, по существу, стационарным уравнением Шрёдингера для волновой функции $\vec{\psi}(r)$, однако функция $\varphi(r)$, определяющая оператор потенциальной энергии частицы \hat{k}_0 , зависит от характера движения частицы и должна быть найдена из (2).

В большинстве известных нам работ, в которых рассматриваются перечисленные выше физические задачи, система уравнений (1) — (4) заменяется вариационным принципом и решение находится в некотором классе пробных функций с варьируемыми параметрами (см., например, [7]). Однако вследствие того, что с ростом числа параметров резко возрастает объем вычислений, достигнуть достаточной точности на таком пути очень трудно. В работах [9, 10] взаимодействие частицы с квантовым скалярным полем рассмотрено методом функционального интегрирования, однако и в этом случае оценка точности вычислений представляет собой сложную задачу.

В настоящей работе исследуется возможность численного решения системы (1) — (4). В качестве метода решения выбран непрерывный аналог метода Ньютона [8]. В следующем параграфе этот метод кратко описывается применительно к конкретной системе вида (1) — (4), которая возникает в так называемой «задаче о поляроне», и исследуется его сходимость. Далее проведено сравнение вариационного и численного решений задачи о поляроне. Следует отметить, что, несмотря на многочисленные физические приложения (см., например, [2]), численное решение этой задачи, насколько нам известно, не рассматривалось и не было даже получено строгой оценки точности результатов, основанных на вариационном принципе [2, 7]. Поэтому уточнение физических характеристик полярона на основе найденного в настоящей работе численного решения представляет определенный практический интерес.

§ 2. Метод решения

При описании движения электрона в полярном кристалле [4, 7] приходим к задаче о взаимодействии частицы со скалярным квантовым безмассовым полем (задача о поляроне). В этом случае система уравнений (1) — (4) принимает наиболее простой вид:

$$(5a) \quad F_1^{(1)} \equiv \psi''(r) + \frac{2}{r} \psi'(r) - [\varphi(r) + \kappa^2] \psi(r) = 0,$$

$$(5b) \quad F_2^{(1)} \equiv \varphi''(r) + \frac{2}{r} \varphi'(r) - \frac{\alpha}{2} \varphi^2(r) = 0,$$

$$(5в) \quad \psi'(0) = \varphi'(0) = \psi(\infty) = \varphi(\infty) = 0,$$

$$(5г) \quad \int_0^{\infty} \psi^2(r) r^2 dr = 1;$$

здесь α — константа связи. Отметим, что уравнения (5а) и (5б) могут быть получены варьированием функционала

$$I(\psi, \varphi) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} [\psi'^2 + \alpha \varphi \psi^2 + \varphi'^2 + \kappa^2 \psi^2] r^2 dr$$

по $\psi(r)$ и $\varphi(r)$ соответственно при дополнительном условии (5г).

Ради простоты изложения будем далее рассматривать только этот простой случай, хотя основные результаты остаются справедливыми и в более общих задачах, одна из которых будет кратко описана в заключительной части работы.

Отметим только одно существенное преимущество, которым обладает задача о поляроне по сравнению с более сложными случаями. Действительно, нетрудно показать, что заменой переменных

$$(6) \quad r \rightarrow r/\alpha, \quad \varphi \rightarrow \alpha^2 \varphi, \quad \kappa^2 \rightarrow \alpha^2 \kappa^2, \quad \psi \rightarrow \alpha^{3/2} \psi$$

параметр α полностью исключается из уравнений. Таким образом, зависимость решения от константы связи определяется, согласно (6), в аналитическом виде и нам достаточно получить численное решение при одном значении α , поэтому положим $\alpha = 1$.

При конечно-разностной аппроксимации краевой задачи (5) на конечном отрезке $[\epsilon, R]$, заменяющем полубесконечный интервал $0 \leq r < \infty$, граничные условия в точках $\epsilon \ll 1$ и $R \gg 1$, в которые переходят условия (5в), запишем, используя асимптотическое поведение решений уравнений (5а) и (5б), в виде

$$(7а) \quad F_1^{(2)} \equiv \psi'(\epsilon) - \frac{\epsilon}{3} \psi(\epsilon) [\kappa^2 + \varphi(\epsilon)] = 0, \quad F_2^{(2)} \equiv \varphi'(\epsilon) - \frac{\epsilon}{6} \psi^2(\epsilon) = 0,$$

$$(7б) \quad F_1^{(3)} \equiv \psi'(R) + \left(\kappa + \frac{1}{R} \right) \psi(R) = 0, \quad F_2^{(3)} \equiv \varphi'(R) + \frac{1}{R} \varphi(R),$$

Для того чтобы обеспечить достаточную точность решения при малых значениях величины κ , необходимо учесть в явном виде вклад в нормировочный интеграл (5г) от интервала $R \leq r < \infty$. В результате получаем

$$(7в) \quad F_1^{(4)} \equiv \int_{\epsilon}^R \psi^2(r) r^2 dr + c^2 \frac{e^{-2\kappa R}}{2\kappa} - 1 = 0,$$

причем $c = R e^{\kappa R} \psi(R)$.

Мы не учитывали в (7в) вклад в интеграл от отрезка $[0, \epsilon]$, который пропорционален ϵ^3 , так как в вычислениях использовалась конечно-разностная аппроксимация с точностью порядка $O(h^2)$, где h — шаг по оси r ,

и при выборе $r \sim h$ интегрированием по отрезку $[0, \varepsilon]$ можно пренебречь.

Рассматриваемая задача является нелинейным функциональным уравнением $F(z) = 0$, где F — совокупность операторов $\{F_1^{(j)}, j=1, 2, 3, 4; F_2^{(k)}, k=1, 2\}$, определенных в (5) и (7), а $z = \{\kappa, \psi(r), \varphi(r)\}$.

Для численного решения этого уравнения мы использовали непрерывный аналог метода Ньютона (н.а.м.н.), неоднократно описанный в литературе [11]. В этом случае исходная задача заменяется эволюционным уравнением

$$(8) \quad F'[z(t)] \frac{dz}{dt} = -F[z(t)],$$

где $F'(z)$ — производная Фреше оператора $F(z)$, а искомое решение $z(t)$ является функцией непрерывного параметра t , $0 \leq t < \infty$, причем

$$(9) \quad z(0) = [\kappa_0, \psi_0(r), \varphi(r)], \quad z'(t) = [\mu(t), u_1(r, t), u_2(r, t)],$$

где

$$\mu(t) = \frac{d\kappa(t)}{dt}, \quad u_1(r, t) = \frac{d\psi(r, t)}{dt}, \quad u_2(r, t) = \frac{d\varphi(r, t)}{dt}.$$

Как известно, в том случае, когда существует ограниченный оператор $F'(z^*)^{-1}$, эволюционное уравнение (8) приводит к искомому решению z^* при достаточно общих предположениях [11], т. е.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |z(t) - z^*| = 0.$$

Однако при исследовании рассматриваемой нелинейной задачи нам не удалось доказать ограниченность сверху оператора $F'(z^*)^{-1}$. Более того, численное интегрирование показало, что собственный вектор оператора $F'(z^*)$ лежит в достаточно малой окрестности вектора z^* и, как следствие, итерационный процесс, основанный на эволюционном уравнении (8), не сходится к искомому решению.

В связи с этим мы провели некоторую модификацию н.а.м.н., на основе чего получены условия локальной сходимости и найдено основное состояние в проблеме полярона. Указанная модификация состоит в изменении уравнения (8) следующим образом:

$$(10) \quad \begin{aligned} \Phi_{1y}'[y(t), \varphi(t)] \frac{dy}{dt} &= -\Phi_1[y(t), \varphi(t)], \\ \Phi_{2\varphi}'[y(t), \varphi(t)] \frac{d\varphi}{dt} &= -\Phi_2[y(t), \varphi(t)], \end{aligned}$$

где Φ_1 и Φ_2 — совокупность операторов $F_1^{(j)}$ и $F_2^{(k)}$ соответственно, $y(t) \equiv \{\kappa, \psi(r, t)\}$, Φ_{1y}' и $\Phi_{2\varphi}'$ — производные Фреше по $y(t)$ и $\varphi(t)$ от указанных операторов.

Согласно [11], дискретную аппроксимацию уравнения (10) можно реализовать на основе метода Эйлера. Для этого полубесконечный интервал

$0 \leq t < \infty$ разбивается узловыми точками t_k , $k=0, 1, \dots$, на отрезки τ_k , причем

$$(11) \quad \begin{aligned} t_{k+1} &= \tau_k + t_k, & t_0 &= 0, & \kappa_{k+1} &= \kappa_k + \tau_k \mu_k, \\ \psi_{k+1}(r) &= \psi_k(r) + \tau_k [u_{1k}(r) + \mu_k v_{1k}(r)], \\ \varphi_{k+1}(r) &= \varphi_k(r) + \tau_k [u_{2k}(r) + \mu_k v_{2k}(r)], \end{aligned}$$

где для произвольной функции $R(t)$

$$R_k \equiv R(t_k).$$

Функции $u_{ik}(r)$ и $v_{ik}(r)$, $i=1, 2$, являются решениями следующих краевых задач:

$$(12a) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \varphi_k(r) - \kappa_k^2 \right] u_{1k}(r) = -F_1^{(1)} [z_k(r)];$$

$$(12б) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] u_{2k}(r) = -F_2^{(1)} [z_k(r)];$$

$$(12в) \quad u_{1k}'(\varepsilon) - \frac{\varepsilon}{3} u_{1k}(\varepsilon) [\varphi_k(\varepsilon) + \kappa_k^2] = -F_1^{(2)} [z_k(\varepsilon)],$$

$$u_{1k}(\varepsilon) = -F_2^{(2)} [z_k(\varepsilon)];$$

$$(12г) \quad u_{1k}'(R) + \left(\kappa_k + \frac{1}{R} \right) u_{1k}(R) = -F_1^{(3)} [z_k(R)],$$

$$u_{2k}'(R) + \frac{1}{R} u_{2k}(R) = -F_2^{(2)} [z_k(R)],$$

где $z_k(r) = \{\kappa_k, \psi_k(r), \varphi_k(r)\}$,

$$(13a) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \varphi_k(r) - \kappa_k^2 \right] v_{1k}(r) - 2\kappa_k \psi_k(r) = 0;$$

$$(13б) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] v_{2k}(r) = 0;$$

$$(13в) \quad v_{1k}'(\varepsilon) - \frac{\varepsilon}{3} v_{1k}(\varepsilon) [\varphi_k(\varepsilon) + \kappa_k^2] - \frac{2}{3} \varepsilon \kappa_k \psi_k(\varepsilon) = 0, \quad v_{2k}'(\varepsilon) = 0;$$

$$(13г) \quad v_{1k}'(R) + \left(\kappa_k + \frac{1}{R} \right) v_{1k}(R) + \psi_k(R) = 0, \quad v_{2k}'(R) + \frac{1}{R} v_{2k}(R) = 0.$$

Параметр μ_k в (11) определяется из условия нормировки (7в):

$$(14) \quad \begin{aligned} \mu_k &= -\frac{1}{2} \left[\int_{\varepsilon}^R v_{1k}(r) \psi_k(r) r^2 dr - c^2 \frac{\exp(-2\kappa_k R)}{2\kappa_k} \left(2R + \frac{1}{\kappa_k} \right) \right]^{-1} \times \\ &\times \left\{ \int_{\varepsilon}^{\infty} \psi_k^2(r) r^2 dr + c^2 \frac{\exp(-2\kappa_k R)}{2\kappa_k} - 1 + 2 \int_{\varepsilon}^R \psi_k(r) u_{1k}(r) r^2 dr \right\}. \end{aligned}$$

Отметим, что при использовании обычной схемы н.а.м.н., соответствующей (8), в уравнениях (12а) и (12б) присутствовали бы выражения вида

$\psi_k u_{2k}$ и $\psi_k u_{1k}$ соответственно. Аналогичные члены опущены и в других уравнениях.

Для решения краевых задач (12) и (13) использовалась трехточечная конечно-разностная схема, обеспечивающая точность порядка $O(h^2)$, и квадратурные формулы того же порядка. Численное решение дискретных краевых задач осуществлялось при помощи хорошо известного алгоритма матричной прогонки [12].

Таким образом, если при $t=0$ заданы некоторые пробные функции ψ_0 , φ_0 и пробное значение λ_0 , то процесс вычисления λ_k и ψ_k , φ_k при любых k полностью определен формулами (11)–(14).

Отметим, что уравнение (5а) является уравнением типа Хартри [14], если подставить в него потенциал $\varphi(r)$, выраженный из (5б) через $\psi^2(r)$:

$$(15) \quad \varphi(r) = -\frac{\alpha}{2} \left[\frac{1}{r} \int_0^{\infty} \psi^2(x) x^2 dx + \int_r^{\infty} x \psi^2(x) dx \right].$$

Поэтому для рассматриваемого уравнения можно осуществить такой же итерационный процесс вычисления, который используется при расчете атомных орбиталей [14], а именно: задать пробную функцию $\psi_0(r)$, при помощи (15) найти $\varphi_0(r)$ и, решив уравнение (5б) с этим потенциалом, получить функцию $\psi_1(r)$ первого приближения, затем повторить такую процедуру до сходимости. Однако конкретные расчеты показали, что указанная схема вычислений в задаче о поляроне требует существенно больше времени для достижения сходимости, чем при использовании непрерывного аналога метода Ньютона для всей системы в целом.

§ 3. О локальной сходимости модифицированного н. а. м. н.

Для рассматриваемой системы уравнений справедливо утверждение, аналогичное теореме, доказанной в [11] в случае задачи на собственные значения для линейного оператора.

Теорема. *Предположим, что существует нетривиальное решение $z^* = [\lambda^*, \psi^*(r), \varphi^*(r)]$ уравнений (5а), (5б), причем λ^* определяет простое изолированное собственное значение ($\lambda^* = \lambda^{*2}$). Тогда:*

1) для операторов $\Phi_{1\psi}'(z^*)$ и $\Phi_{2\varphi}'(z^*)$, определенных формулами (14) и (15), существуют обратные, причем

$$\|\Phi_{1\psi}'(z^*)^{-1}\| \leq C_1, \quad \|\Phi_{2\varphi}'(z^*)^{-1}\| \leq C_2;$$

2) если числа $\alpha, \beta, \gamma \geq 0$ таковы, что $4\alpha^2 + \beta^2 < 1/C_2^2$, $\gamma < 1/C_2^2$ и вектор $z_0 = [\lambda_0, \psi_0(r), \varphi_0(r)]$ удовлетворяет условиям $\|\psi^* - \psi_0\| \leq \alpha_1$, $\|\lambda^* - \lambda_0\| \leq \beta_1$, $\|\varphi_0 - \varphi^*\| \leq \gamma_1$, причем

$$(1-AB)^{-1} \left\{ \|\Phi_1(y_0, \varphi^*)\| \frac{C_1}{1-C_1(4\alpha^2+\beta^2)^{1/2}} + A \|\Phi_2(y^*, \varphi_0)\| \frac{C_2}{1-C_2\gamma} + (\alpha_1^2 + \beta_1^2)^{1/2} + A\gamma_1 \right\} \leq \left(\frac{\alpha^2}{4} + \beta^2 \right)^{1/2},$$

$$(1-AB)^{-1} \left\{ \|\Phi_2(y^*, \varphi_0)\| \frac{C_2}{1-C_2\gamma} + B\|\Phi_1(y_0, \varphi^*)\| \frac{C_1}{1-C_1(4\alpha^2+\beta^2)^{1/2}} + \right. \\ \left. + \gamma_1 + B(\alpha_1^2 + \beta_1^2)^{1/2} \right\} \leq \gamma,$$

где $A = \|\Phi_{1\varphi}'(z^*)\|$, $B = \|\Phi_{2\varphi}'(z^*)\|$ — нормы производных Фреше от операторов $\Phi_{1,2}$ по φ и y соответственно, а в окрестности $\|\lambda - \lambda^*\| \leq \alpha^2/4 + \beta^2$ нет других собственных значений, кроме λ^* , то процесс модифицированного н.а.м.н. сходится при $t \rightarrow \infty$ к решению z^* , т.е.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t) - z^*\| = 0.$$

Доказательство. Как следует непосредственно из формул (12), (13), функциональное уравнение $\Phi_1(y, \varphi^*) = 0$ определяет задачу на собственные значения для уравнения Шрёдингера с фиксированным потенциалом $\varphi^*(r)$. Поэтому существование ограниченного оператора $\Phi_{1\varphi}'(y^*, \varphi^*)^{-1}$ вытекает из теоремы Н. Н. Калиткина [13] или из теоремы, доказанной в [11].

В свою очередь, оператор $\Phi_{2\varphi}'(z^*)^{-1}$ также будет ограниченным, так как краевая задача $\Phi_{2\varphi}'(z^*)\varphi(r) = 0$, т.е.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] \varphi(r) = 0, \quad \varphi'(0) = \varphi(\infty) = 0,$$

имеет только нулевое решение.

Если теперь рассмотреть эти операторы в окрестности точного решения: $\|\bar{\varphi} - \varphi^*\| \leq \alpha$, $\|\bar{\lambda} - \lambda^*\| \leq \beta$, $\|\bar{\varphi} - \varphi^*\| \leq \gamma$, то, повторяя рассуждения, аналогичные приведенным в [11], получим следующую оценку:

$$\|\Phi_{1\varphi}'(\bar{y}, \varphi^*)^{-1}\| \leq \frac{C_1}{1-C_1(4\alpha^2+\beta^2)^{1/2}}, \quad \|\Phi_{2\varphi}'(y^*, \varphi^*)^{-1}\| \leq \frac{C_2}{1-C_2\gamma}.$$

Из эволюционного уравнения (10) следует, что

$$\frac{d}{dt} \Phi_1[y(t), \varphi^*] + [\varphi(t) - \varphi^*] \frac{d}{dt} \Phi_{1\varphi}'[y(t), \varphi^*] = \\ = -\Phi_1(y, \varphi^*) - [\varphi(t) - \varphi^*] \Phi_{1\varphi}'(y, \varphi^*).$$

Интегрируя, получаем

$$\Phi_1[y(t), \varphi^*] = e^{-t} \Phi_1(y_0, \varphi^*) + \int_0^t [\varphi(\xi) - \varphi^*] \frac{d}{d\xi} \{e^{\xi} \Phi_1[y(\xi), \varphi^*]\} d\xi.$$

Используя это соотношение, находим следующую оценку:

$$(16) \quad \|y(t) - y^*\| \leq \|y(t) - y_0\| + \|y_0 - y^*\| \leq (\alpha_1^2 + \beta_1^2)^{1/2} + \\ + \left[\|\Phi_1(y_0, \varphi^*)\| \frac{C_1(1-e^{-t})}{1-C_1(4\alpha^2+\beta^2)^{1/2}} + A\|\varphi(t) - \varphi^*\| \right].$$

Аналогичное неравенство имеет место и для $\varphi(t)$:

$$(17) \quad \|\varphi(t) - \varphi^*\| \leq \|\Phi_2(y^*, \varphi_0)\| \frac{C_2(1-e^{-t})}{1-C_2\gamma} + B\|y(t) - y^*\| + \gamma.$$

Решая систему неравенств (16) и (17), получаем

$$\begin{aligned} \|y(t) - y^*\| &\leq \frac{1}{1-AB} \left\{ \left[\|\Phi_1(y_0, \varphi^*)\| \frac{C_1}{1-C_1(4\alpha^2 + \beta^2)^{1/2}} + A\Phi_2(y^*, \varphi_0) \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. \frac{C_2}{1-C_2\gamma} \right] (1-e^{-t}) + (\alpha_1^2 + \beta_1^2)^{1/2} + A\gamma_1 \right\} \leq \left(\frac{\alpha^2}{4} + \beta^2 \right)^{1/2}, \\ \|\varphi(t) - \varphi^*\| &\leq \frac{1}{1-AB} \left\{ \left[\|\Phi_2(y^*, \varphi_0)\| \frac{C_2}{1-C_2\gamma} + \right. \right. \\ &\left. \left. + B\Phi_1(y_0, \varphi^*) \frac{C_1}{1-C_1(4\alpha^2 + \beta^2)^{1/2}} \right] (1-e^{-t}) + \gamma_1 + B(\alpha_1^2 + \beta_1^2)^{1/2} \right\} \leq \gamma. \end{aligned}$$

Таким образом, интегральная кривая $z(t)$ не выйдет из области существования операторов $\Phi_{1\varphi}'(y, \varphi^*)$ и $\Phi_{2\varphi}'(y^*, \varphi)$, и поэтому решение $z(t)$ продолжаемо до $t = \infty$. Как следствие [8, 11],

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t) - z^*\| = 0.$$

Теорема доказана.

§ 4. Решение модельной задачи

Рассмотрим сначала простую систему, моделирующую уравнения (1) – (4) и допускающую точное решение:

$$(18a) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \alpha\varphi(r) - \lambda^2 r^2 \varphi^2(r) - \kappa^2 \right] \psi(r) = 0,$$

$$(18б) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] \varphi(r) = 0,$$

$$(18в) \quad \int_0^R \psi^2(r) r^2 dr = 1, \quad 0 \leq r \leq R,$$

$$(18г) \quad \psi'(0) = \psi(R) = 0, \quad \varphi(0) = \varphi_0, \quad \varphi'(0) = 0, \quad R \gg \frac{1}{\kappa},$$

где α и λ – произвольные постоянные, причем нелинейность в задаче введем, считая $\varphi(0)$ некоторым функционалом от $\psi(r)$.

Возьмем для определенности φ_0 в следующем виде:

$$(18д) \quad \varphi_0 = \left[\int_0^R r^2 [\psi'(r)]^2 dr \right]^2.$$

Нетрудно получить точное решение задачи (18):

$$\varphi(r) = \varphi_0 = \frac{4}{9\lambda^2}, \quad \kappa^2 = \frac{4\alpha}{9\lambda^2} - \frac{2}{3\lambda},$$

$$\psi(r) = 2 \left(\frac{2}{3} \right)^{1/2} (\pi\lambda^3)^{-1/4} \exp \left[-\frac{2}{9\lambda} r^2 \right].$$

Для численного решения системы уравнений (18) мы использовали метод, описанный в § 2, причем выбор отрезков τ_k осуществлялся в соответствии с алгоритмом, использованным в [15].

При решении указанных выше физических задач чаще всего требуется найти только основное состояние системы, поэтому наиболее естественным способом определения начального приближения $z(0)$, необходимого для организации итерационного процесса, является использование вариационного принципа, соответствующего задаче (1)–(4). В связи с этим функции нулевого приближения модельной задачи находятся также из вариационного принципа, причем пробные функции выбираются в простом виде, который чаще всего используется при получении вариационных оценок [7, 14]:

$$(19) \quad \psi_0(r) = A(1 + pr + qr^2)e^{-pr}.$$

Варьирование осуществлялось по параметрам p , q и A .

При дискретной аппроксимации системы (18) интервал интегрирования, определенный согласно (18в), разбивался на $N=100$ точек. Итерационный процесс продолжался до тех пор, пока не выполнялось условие

$$|\Psi_k(r) - \Psi_{k-1}(r)|_{\max} \leq \delta_1 = 10^{-5}.$$

Выполнение его в зависимости от параметров α и λ достигалось за 5–8 итераций, несмотря на то, что начальное приближение (19) достаточно сильно отличалось от точного решения. Время счета до сходимости на ЭВМ «Минск-32» не превышало 2 мин. Максимальное отличие численного решения $\Psi(r)$ от точного $\psi(r)$, как и следовало ожидать, имело порядок $O(h^2)$, т. е.

$$|\Psi(r) - \psi(r)|_{\max} = O(h^2) = O\left(\frac{1}{\lambda N^2}\right).$$

Аналогичная оценка имеет место и для энергии системы.

Таким образом, рассмотрение модельной задачи показывает, что н.а.м.н. может быть успешно использован для численного решения задач вида (1)–(4).

§ 5. Задача о поляроне

Решение задачи о поляроне в приближении адиабатической связи было получено в [7]. Простейший вариант такого решения получается при следующем выборе пробных функций:

$$(20) \quad \begin{aligned} \psi_0(r) &= A(1 + \beta r)e^{-\beta r}, \\ \varphi_0(r) &= A^2 \frac{\alpha^2}{4\beta^2} \left\{ v_{-1} \frac{1}{2\beta r} - e^{-2\beta r} \sum_{k=-1}^2 v_k (2\beta r)^k \right\} \\ \kappa_0^2 &= 5 \cdot 10^{-4} \alpha^2, \end{aligned}$$

где A , β , v_k — числа, выписанные в [7], α — константа связи, входящая в уравнения (5).

Вариационные функции (20) использованы в качестве начального приближения $z(0)$, определенного согласно (9), и найдено решение системы уравнений (5) так, как это описано в § 2. В результате для энергии полярона, т. е. для величины κ^2 , получено следующее значение:

$$\kappa^2 = 5.160 \cdot 10^{-4} \alpha^2.$$

Сравнение вариационного и численного решений для функций $\psi(r)$ и $\varphi(r)$ проведено в таблице. Как видно из таблицы, функции ψ_0 , φ_0 доволь-

$x = r\alpha \cdot 10^{-2}$	$\frac{\psi_0 x^{1/2}}{\alpha^{3/2}} \cdot 10^3$	$\frac{\psi x^{1/2}}{\alpha^{3/2}} \cdot 10^3$	$\frac{\varphi_0 x^{1/2}}{\alpha^2} \cdot 10^4$	$\frac{\varphi x^{1/2}}{\alpha^2} \cdot 10^4$
0.674 · 10 ⁻²	0.0745	0.0421	1.1006	0.8203
0.550 · 10 ⁻¹	0.2110	0.1232	3.1355	2.3409
0.247	0.3880	0.2491	6.2840	4.8273
0.819	0.3020	0.2890	7.7584	6.9397
2.014	0.0412	0.0707	5.6001	5.5764
4.953	0.0006	0.0003	3.5757	3.5757

но сильно отличаются от численного решения, несмотря на то, что энергия определяется из вариационного принципа с достаточно высокой точностью. Вычисление волновых функций и самосогласованного потенциала проводилось с равномерным шагом $\tau_h = \tau_0 = 0.7$, причем для достижения сходимости, т. е. для выполнения условия $|\psi_h(r) - \psi_{h-1}(r)|_{\max} \leq \delta = 10^{-6}$, требовалось не более 10 итераций. Время счета на ЭВМ «Минск-32» 2 мин. Оказалось также, что рассматриваемый метод достаточно быстро сходится при существенно более грубом начальном приближении, когда начальная невязка $|\psi_1 - \psi_0|_{\max}$ имеет величину порядка единицы. Последнее обстоятельство важно при решении более сложных задач вида (1)–(4), когда вариационное решение не дает высокой точности.

Следует отметить, что в [7] было получено также вариационное решение на основе пробных функций вида

$$\psi_0(r) = A(1 + \beta r + 4\gamma^2 \beta^2 r^2) e^{-\beta r},$$

причем для определения параметра γ необходимо найти корни алгебраического уравнения шестой степени, что существенно затрудняет решение. Оказывается также, что в задаче о поляроне вариационный метод очень хорошо сходится, поэтому функция $\psi_0(r)$ практически совпадает с численным решением.

§ 6. Заключение

Одно из наиболее интересных применений рассмотренного в работе численного метода возникает при исследовании задачи о взаимодействии нуклона с псевдоскалярным заряженным полем [5]. Наличие у частицы и поля внутренних степеней свободы в этом случае приводит к тому, что вектор $\vec{\psi}(r)$ в уравнении (1) является трехкомпонентным, а потенциал $\varphi(r)$ входит в (1) достаточно сложным образом. Кроме того, $\varphi(r)$ не мо-

жет в явном виде быть выражен через вектор $\bar{\psi}(r)$, что не позволяет использовать итерационную процедуру Хартри. В силу нелинейной связи потенциала и волновой функции системы, не представляется возможным использовать метод разложения решения по полной системе функций [16], поэтому единственным способом получения численного решения задачи является, по-видимому, непрерывный аналог метода Ньютона.

Использование н.а.м.н. в этой задаче обладает определенной спецификой и будет рассмотрено в отдельной работе.

Поступила в редакцию 5.10.1976
Переработанный вариант 7.12.1976

Цитированная литература

1. А. И. Ахиезер, И. Я. Померанчук. О рассеянии нейтронов с энергией в несколько градусов в жидком гелии II. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, 16, 391—395.
2. Поляроны. Ред. Ю. А. Фирсов. М., «Наука», 1975.
3. Э. Хенли, В. Тирринг. Элементарная квантовая теория поля. М., Изд-во ин. лит., 1963.
4. Н. Н. Боголюбов. Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем. Украинский матем. ж., 1950, 2, № 2, 3—21.
5. Е. В. Крылов, И. Д. Феранчук. Приближение сильной связи в зарядово-симметричной теории взаимодействия нуклона с псевдоскалярным полем. Тезисы докл. III Конф. молодых физиков. Ташкент, «Фан», 1976, 59.
6. Е. П. Солодовникова, А. Н. Тавхелидзе, О. А. Хрусталёв. Осцилляторные уровни частицы, как следствие сильного взаимодействия с полем. Теор. и матем. физ., 1972, 10, № 2, 162—170.
7. С. И. Пекар. Автолокализация электрона в диэлектрической инерционно поляризующей среде. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, 16, 335—339.
8. Р. Фейман. Статистическая механика. М., «Мир» 1974.
9. S. P. Kuleshov, V. A. Matveev, M. A. Smondyrev. Approximations of strong coupling in the polaron problem. Препринт ОИЯИ, Е2-9116, Дубна, 1976.
10. Е. П. Жидков, Г. И. Макаренко, И. В. Пузынин. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. В сб. «Пробл. физ. элементарных частиц и ат. ядра.» Т. 4. № 2. Дубна, ОИЯИ, 1973, 127—166.
11. Ф. А. Гареев и др. Численное решение задач на собственные значения для интегро-дифференциальных уравнений в теории ядра. Препринт ОИЯИ, Р4-8751, Дубна, 1975.
12. С. К. Годунов, В. С. Рябенский. Введение в теорию разностных схем. М., Физматгиз, 1962.
13. Н. Н. Калиткин. Решение задач на собственные значения методом дополнительного вектора. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1965, 5, № 6, 1107—1116.
14. Д. Р. Хартри. Расчеты атомных структур. М., Изд-во ин. лит., 1960.
15. Ф. А. Гареев и др. Программа вычисления одночастичных волновых функций в деформированном ядре с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. Препринт ОИЯИ, 11-8081, Дубна, 1974.
16. Ф. А. Гареев и др. Одночастичные энергии и волновые функции потенциала Саксона — Вудса и неротационные состояния нечетных ядер в области $150 < A < 190$. В сб. «Пробл. физ. элементарных частиц и ат. ядра.» Т. 4. № 2. Дубна, ОИЯИ, 1973, 357—396.