ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 18 Май 1978 Июнь № 3

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]:

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

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

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

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

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

$$(4)\qquad \sum_{i=1}^{n}\int_{0}^{\infty} r^2|\psi_i(r)|^2=1,$$

$\hat{k}_0[\varphi(r), r]$ — 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:

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

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

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

(5г) $\int\limits_0^\infty \psi^2(r) r^2 dr=1;$

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

$$I(\psi,\varphi)=\frac{1}{2}\int\limits_0^\infty [\psi'^2+\alpha\varphi\psi^2+\varphi'^2+\varkappa^2\psi^2] r^2 dr$$

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) $r\to r/\alpha,\ \varphi\to\alpha^2\varphi,\ \varkappa^2\to\alpha^2\varkappa^2,\ \psi\to\alpha^{3/2}\psi$

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 $[\varepsilon, R]$, заменяющем полубесконечный интервал $0\leqslant r<\infty$, граничные условия в точках $\varepsilon\ll 1$ и $R\gg 1$, в которые переходят условия (5в), запишем, используя асимптотическое поведение решений уравнений (5а) и (5б), в виде

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

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

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

(7в) $F_1^{(4)}\equiv\int\limits_\varepsilon^R \psi^2(r) r^2 dr+c^2\frac{e^{-2\varkappa R}}{2\varkappa}-1=0,$

причем $c=Re^{\varkappa R}\psi(R)$.

Мы не учитывали в (7в) вклад в интеграл от отрезка $[0, \varepsilon]$, 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 $z=\{\varkappa, \psi(r), \varphi(r)\}$.

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

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

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

$$z(0)=[\varkappa_0, \psi_0(r), \varphi(r)], \qquad z'(t)=[\mu(t), u_1(r, t), u_2(r, t)], \tag{9}$$

где

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

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.

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

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:

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

где Φ_1 и Φ_2 — совокупность операторов $F_1^{(j)}$ и $F_2^{(k)}$ соответственно, $y(t)\equiv\{\varkappa, \psi(r, t)\}$, 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

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

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

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:

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

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

$$
(12в)\qquad
\begin{aligned}
& u_{1k}'(\varepsilon)-\frac{\varepsilon}{3}u_{1k}(\varepsilon)[\varphi_k(\varepsilon)+\varkappa_k^2]=-F_1^{(2)}[z_k(\varepsilon)],\\
& u_{1k}(\varepsilon)=-F_2^{(2)}[z_k(\varepsilon)];
\end{aligned}
$$

$$
(12г)\qquad
\begin{aligned}
& u_{1k}'(R)+\left(\varkappa_k+\frac{1}{R}\right)u_{1k}(R)=-F_1^{(3)}[z_k(R)],\\
& u_{2k}'(R)+\frac{1}{R}u_{2k}(R)=-F_2^{(2)}[z_k(R)],
\end{aligned}
$$

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

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

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

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

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

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

$$
(14)\qquad \mu_k=-\frac{1}{2}\left[\int_\varepsilon^R v_{1k}(r)\psi_k(r)r^2dr-c^2\frac{\exp(-2\varkappa_k R)}{2\varkappa_k}\left(2R+\frac{1}{\varkappa_k}\right)\right]^{-1}\times
$$

$$
\times\left\{\int_\varepsilon^\infty \psi_k^2(r)r^2dr+c^2\frac{\exp(-2\varkappa_k R)}{2\varkappa_k}-1+2\int_\varepsilon^R \psi_k(r)u_{1k}(r)r^2dr\right\}.
$$

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 $\varkappa_0$, то процесс вычисления $\varkappa_k$ 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 $\psi^2(r)$:

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

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* ($\lambda^*=\varkappa^{*2}$). *Тогда*:

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

$$\|\Phi_{1y}'(z^*)^{-1}\|\leqslant C_1, \qquad \|\Phi_{2\varphi}'(z^*)^{-1}\|\leqslant C_2;$$

2) *если числа* α, β, $\gamma\geqslant 0$ *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* $\|\psi^*-\psi_0\|\leqslant\alpha_1$, $\|\lambda^*-\lambda_0\|\leqslant\beta_1$, $\|\varphi_0-\varphi^*\|\leqslant\gamma_1$, *причем*

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

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

$$\left.+\gamma_1+B(\alpha_1^2+\beta_1^2)^{1/2}\right\}\leqslant\gamma,$$

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

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

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 $\Phi_{1y}'(y^*,\varphi^*)^{-1}$ 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.

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

имеет только нулевое решение.

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

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

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

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

Используя это соотношение, находим следующую оценку:

$$\|y(t)-y^*\|\leqslant\|y(t)-y_0\|+\|y_0-y^*\|\leqslant(\alpha_1^2+\beta_1^2)^{1/2}+ \tag{16}$$

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

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

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

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

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

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],

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

Теорема доказана.

§ 4. Решение модельной задачи

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

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

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

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

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

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

Возьмем для определенности φ_0 в следующем виде:

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

Нетрудно получить точное решение задачи (18):

$$\varphi(r)=\varphi_0=\frac{4}{9\lambda^2},\qquad \varkappa^2=\frac{4\alpha}{9\lambda^2}-\frac{2}{3\lambda},$$
$$\psi(r)=2\left(\frac{2}{3}\right)^{3/2}(\pi\lambda^3)^{-1/4}\exp\left[-\frac{2}{9\lambda}r^2\right].$$

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]:

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

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

$$|\bar\psi_k(r)-\bar\psi_{k-1}(r)|_{\max}\leqslant\delta_1=10^{-5}.$$

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 $\bar\psi(r)$ от точного $\psi(r)$, как и следовало ожидать, имело порядок $O(h^2)$, т. е.

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

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:

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

$$\varphi_0(r)=A^2\frac{\alpha^2}{4\beta^2}\left\{v_{-1}\frac{1}{2\beta r}-e^{-2\beta r}\sum_{k=-1}^{2}v_k(2\beta r)^k\right\} \tag{20}$$

$$\varkappa_0^2=5\cdot10^{-4}\,\alpha^2,$$

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 $\varkappa^2$, получено следующее значение:

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

Сравнение вариационного и численного решений для функций $\psi(r)$ и $\varphi(r)$ проведено в таблице. Как видно из таблицы, функции ψ_0, φ_0 довольно 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 $\tau_k=\tau_0=0.7$, причем для достижения сходимости, т. е. для выполнения условия $|\psi_k(r)-\psi_{k-1}(r)|_{\max}\leqslant\delta=10^{-6}$, 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.

$x=r\alpha\cdot 10^{-2}$	$\dfrac{\psi_0\, x^{1/2}}{\alpha^{3/2}}\cdot 10^3$	$\dfrac{\psi\, x^{1/2}}{\alpha^{3/2}}\cdot 10^3$	$\dfrac{\varphi_0\, x^{1/2}}{\alpha^2}\cdot 10^4$	$\dfrac{\varphi\, x^{1/2}}{\alpha^2}\cdot 10^4$
$0.674\cdot 10^{-2}$	0.0745	0.0421	1.1006	0.8203
$0.550\cdot 10^{-1}$	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

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

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

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 $\bar{\psi}(r)$ в уравнении (1) является трехкомпонентным, а потенциал $\varphi(r)$ входит в (1) достаточно сложным образом. Кроме того, $\varphi(r)$ не может в явном виде быть выражен через вектор $\vec{\psi}(r)$, 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, E2-9116, 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. Рябенький.* 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.