

ЧУЛУУНБААТАР Галмандах

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СХЕМЫ РЕШЕНИЯ КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедре Прикладной информатики и теории вероятностей федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы».

Научный руководитель: **Севастьянов Леонид Антонович**
доктор физико-математических наук, профессор, кафедра прикладной информатики и теории вероятностей, Российского университета дружбы народов

Официальные оппоненты: **Ланеев Евгений Борисович**
доктор физико-математических наук, профессор Математического института им. С.М. Никольского ФГАОУ ВО РУДН

Цирулев Александр Николаевич
доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей математики и математической физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Мележик Владимир Степанович
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории теоретической физики Объединённого института ядерных исследований

Защита состоится «20» октября 2023 г. в 15:00 часов на заседании диссертационного совета ПДС 0200.006 при *Российском университете дружбы народов*, по адресу: 117198, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, ауд. 214.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке *Российского университета дружбы народов* по адресу 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6.

Автореферат разослан «_____» _____ 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
ПДС 0200.006,
канд. физ.-мат. наук, доцент



Демидова А.В

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Разработка вычислительных схем для расчета спектральных характеристик квантовомеханических молекулярных, атомных и ядерных систем с высокой точностью, необходимой как для интерпретации экспериментальных данных так и для планирования новых экспериментов, является актуальной задачей математического моделирования.

Спектральные характеристики рассматриваемых квантовомеханических систем определяются набором искомым собственным значениям энергии или матрицей рассеяния при фиксированных вещественных значениях энергии квантовомеханической системы, а также набором собственных функций краевых задач для уравнений в частных производных, которые соответствуют стационарным уравнениям Шрёдингера или Дирака в многомерном координатном пространстве независимых переменных. В этих случаях решение, как правило, ищется в виде разложения по подходящему базису во всем координатном пространстве с неизвестными коэффициентами, или по базису в пространстве меньшей размерности, в том числе по базису в подпространстве размерностью на единицу меньше размерности исходного координатного пространства. В результате краевая задача в многомерном пространстве сводится к алгебраической задаче, или к краевой задаче для системы уравнений в частных производных в подпространстве меньшей размерности, или краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) по одной из независимых переменных.

Для решения алгебраических задач применяются программы пакета линейной алгебры. При использовании базиса пробных функций, зависящих как от независимых переменных координатного пространства, так и от дополнительных нелинейных параметров, нелинейные параметры пробных функций находятся решением алгебраической задачи вариационным методом минимакса соответствующего квадратичного функционала. Для решения краевых задач в пространстве меньшей размерности или краевых задач для системы ОДУ применяют как методы разложения по подходящему базису во всем координатном подпространстве, так и метод конечных элементов (МКЭ), в котором координатное подпространство разбивается на конечные элементы.

В первом случае задача редуцируется к алгебраической задаче, в общем случае, с разреженными матрицами, элементы которых даются интегралами во всем подпространстве, во втором случае – с разреженными матрицами, элементы которых даются интегралами на каждом конечном элементе разбиения подпространства. Вычисление интегралов на конечном элементе требует применение подходящих квадратурных формул (и также их построение если они неизвестны), а также подходящих конечно-элементных базисных функций, отличных от нуля на одном или на нескольких примыкающих друг к другу конечных элементах.

Выбор и построение подходящих квадратурных формул и базисных функций, выбор адекватного метода и построение вычислительной схемы для решения с требуемой точностью искомой краевой задачи определяются как размерностью координатного подпространства, так и аналитическими особенностями искомого решения и краевыми условиями задачи.

Для ряда квантовомеханических задач атомной, молекулярной и ядерной физики остаются нерешенные проблемы, связанные с формулировкой краевых условий задачи, с сохранением непрерывности производных численного решения МКЭ на границах примыкающих конечных элементов, с применением адекватного математического метода для построения вычислительной схемы, необходимых для численного решения с требуемой точностью краевой задачи. Построение вычислительных схем, с помощью которых решаются указанные проблемы, определил цель и задачи диссертационной работы.

Степень разработанности темы исследования. При решении вариационным методом краевой задачи на собственные значения энергии электрона в поле зарядов тяжелых ионов двух кулоновских центров для уравнения Дирака в предшествующих работах (см., например, [1, 2]) не учитывались аналитические свойства решений, которые приводят к необходимости построения новой вычислительной схемы вариационного метода с непрерывной минимаксной оптимизацией и ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций для больших и малых компонент решения.

В литературе доступно множество алгоритмов и методов для реализации расчета выпукло-вогнутой минимаксной задачи (или равновесия Нэша), а также существует несколько пакетов программ для решения дискретной минимаксной задачи, например программа FSQP [3], однако, нет пакетов программ для решения непрерывной минимаксной задачи.

Во всех известных реализациях вариационных методов основной трудностью является появление ложных решений. Они соответствуют решениям уравнения Дирака, для которых значение энергии основного уровня ниже точного значения. Это нарушает вариационный принцип, так как результат вариации всегда должен быть не ниже точного значения энергии [4]. Причиной этой трудности является существование континуума отрицательной энергии $E_R < -m_e c^2$ в спектре дираковского электрона. В работах [1, 2] анализируется механизм появления ложных решений и для их устранения предлагаются численные методы с использованием дополнительных условий кинетического баланса, при этом недостатком данной схемы является её низкая скорость сходимости по числу пробных функций. Используя принцип непрерывной минимаксной оптимизации нами был разработан новый алгоритм определения параметров пробных волновых функций с высокой скоростью сходимости [ГЧ1].

Дискретный спектр вещественных собственных значений энергии двухатомной молекулы (димера) бериллия (в основном состоянии по движению электронов) при нулевом значении углового момента стал достоверно известен лишь в эксперименте 2009 года [5], при этом имеется ряд численных результатов полученных различными методами (см., например, [6, 7]). При этом спектр вещественных собственных значений энергии при ненулевых значениях углового момента молекулы и комплексных собственных значений метастабильных состояний, необходимый для интерпретации и планирования дальнейших экспериментов, ранее в литературе не обсуждался, поэтому его расчет дан в работе [ГЧ2].

Решение краевых задач на связанные и метастабильные состояния и состояния рассеяния для системы ОДУ методом конечных элементов (МКЭ) рассматривалось в работе [8]. Однако, общий случай задачи рассеяния с асимптотическими недиагональными матрицами

потенциалов и соответствующими недиагональными матрицами асимптотических решений, которые применяются для формулировки краевых условий третьего рода в граничных точках конечного интервала интегрирования, в литературе не рассматривался. Необходимость построения такой вычислительной схемы, представленной в работе диссертанта [ГЧЗ], и ее применение для исследования задачи дифракции в волноводе на примере плоского скалярного случая и для правильной интерпретации поведения измеренных в экспериментах сечений подбарьерного слияния тяжелых ионов, показаны в работах [9, ГЧ4].

Краеугольным сдерживающим фактором при реализации схем МКЭ для решения многомерных краевых задач является вычисление интегралов. Известно [10], что в результате применения МКЭ p -го порядка к решению задачи о дискретном спектре для эллиптического уравнения (Шрёдингера) определяются собственные функции и собственные значения с точностью порядка $p+1$ и $2p$ соответственно при условии, что все промежуточные величины вычисляются с достаточной точностью. Отсюда следует, что для реализации схемы МКЭ порядка p соответствующие интегралы должны быть вычислены с точностью не ниже порядка $2p$. Наиболее экономичный способ вычисления таких интегралов основан на использовании квадратур типа Гаусса.

В многомерном случае возникают дополнительные трудности двоякого рода по сравнению с двумерным: быстрый рост числа независимых уравнений с ростом размерности и большое количество различных систем нелинейных алгебраических уравнений, что приводит к необходимости построения начальных оценок для итерационного процесса. Таким образом, в случае асимметричных квадратурных формул порядка p числа независимых нелинейных уравнений равны $C_{p+d}^d = (p+d)!/(p!d!)$, где d – размерность симплекса. В случае симметричных квадратурных формул порядка p числа независимых уравнений, которые можно вычислить по рекуррентным формулам относительно p и d [11], намного меньше, чем C_{p+d}^d . При этом сам вопрос о минимальном количестве узлов для квадратурных формул с положительными весами и минимальным числом узлов внутри симплексов остается открытым. В [11] давались только нижние оценки.

Разработка экономичных алгоритмов и программы вычисления полностью симметричных квадратурных формул на d -мерных симплексах с положительными весами и минимальным числом узлов внутри симплексов до настоящего времени остается открытым вопросом, который интенсивно обсуждается в литературе, например, в работах [12–15] и решался в работах [ГЧ5, ГЧ6].

Перечисленные вопросы определили цель и решаемые задачи диссертационной работы. Ответы на эти вопросы были даны в работах диссертанта, результаты которых резюмируются в основных положениях диссертации.

Цели и задачи диссертационной работы: Цель диссертационной работы состоит в разработке высокоточных вычислительных схем вариационного метода и метода конечных элементов для решения квантовомеханических задач.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. разработать и протестировать новую вычислительную схему непрерывной минимаксной оптимизации нелинейных функционалов;
2. построить и протестировать новую вычислительную схему вариационного метода с непрерывной минимаксной оптимизацией и ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций для больших и малых компонент решения уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских зарядов тяжелых ионов;
3. разработать, обосновать и протестировать новые вычислительные схемы МКЭ высокого порядка точности решения краевых задач рассеяния и на метастабильные состояния для системы ОДУ второго порядка, включая общий случай с асимптотическими недиагональными матрицами потенциалов;
4. разработать и протестировать алгоритмы и программы вычисления полностью симметричных квадратурных формул на d -мерных симплексах с положительными весами и узлами внутри симплексов;
5. выполнить с помощью разработанных вычислительных схем вариационного метода и МКЭ высокоточные расчеты: собственных значений энергии релятивистского электрона в кулоновском поле зарядов двух тяжелых ионов; собственных значений энергии связанных и метастабильных состояний димера бериллия в основном состоянии.

Научная новизна. Новизна результатов проведенных исследований состоит в:

1. разработке новых схем вариационного метода с непрерывной минимаксной оптимизацией нелинейных функционалов и их применение к решению уравнения Дирака,
2. разработке новых вычислительных схем метода конечных элементов высокого порядка точности решения краевых задач рассеяния и на метастабильные состояния для системы ОДУ второго порядка, с различным числом асимптотически связанных или запутанных открытых каналов в асимптотических областях,
3. построении квадратурных формул на симплексах для вычисления многомерных интегралов;
4. и их применения к расчетам с высокой точностью спектральных характеристик, избранных квантовомеханических атомных и молекулярных систем.

Теоретическая и практическая значимость. Разработанная новая итерационная схема, основанная на методах минимизации и непрерывного минимакса ньютоновского типа в сочетании с методами отрицательного направления кривизны для невыпукло-невогнутого, выпукло-невогнутого и невыпукло-вогнутого случаев, применимая для решения широкого класса непрерывных минимаксных оптимизационных задач в различных предметных областях.

Программа INQSIM, являющаяся частью комплекса программ для построения полностью симметричных квадратурных формул и предназначенная для их преобразования из компактного вида в развернутый, включена в библиотеку программ JINRLIB ОИЯИ [ГЧ6]. Программу INQSIM и уже вычисленные с её помощью квадратурные формулы (т.е. значе-

ния весов и узлов) можно использовать при решении многомерных (вплоть до 6-мерных) краевых задач методом МКЭ в различных предметных областях.

Показано, что реализация общей схемы решения непрерывных минимаксных задач в виде вычислительной схемы вариационного метода решения двухцентральной кулоновской задачи для уравнения Дирака обеспечивает обоснованные и надежные оценки собственных значений энергии и собственных функций, необходимые для интерпретации экспериментов с тяжелыми ионами.

Построенная вычислительная схема решения краевых задач рассеяния с запутанными открытыми каналами уже нашла свое применение для правильной интерпретации поведения измеренных в экспериментах сечений подбарьерного слияния тяжелых ионов.

Полученные оценки спектра вещественных собственных значений энергии при нулевых и ненулевых значениях углового момента двухатомной молекулы бериллия и комплексных собственных значений энергии метастабильных состояний этой молекулы полезны для интерпретации и планирования дальнейших экспериментов.

Полученные квадратурные формулы можно использовать при решении многомерных (вплоть до 6-мерных) краевых квантовомеханических задач методом МКЭ, при расчете спектральных и оптических характеристик атома гелия, аксиально-симметричных квантовых точек и коллективной модели атомного ядра с тетраэдрической симметрией, для квадруполь-октупольных коллективных моделей атомного ядра, а также для моделей сложных физических систем.

Разработанные вычислительные схемы, алгоритмы и проблемно-ориентированные комплексы программ уже используются в Объединённом институте ядерных исследований (ОИЯИ, г. Дубна, Россия), Российском университете дружбы народов (РУДН, г. Москва, Россия), Саратовском государственном университете (СГУ, г. Саратов, Россия), Институте ядерной физики (ИЯФ, г. Алматы, Казахстан), Российско-Армянском (Славянском) университете (РАУ, г. Ереван, Армения), Педагогическом университете Хошимина (г. Хошимин, Вьетнам), Лотарингском университете (г. Метц, Франция) и институте атомной энергии (г. Пекин, Китай) для анализа моделей систем нескольких квантовых частиц, низкоразмерных квантовых систем и коллективной модели атомного ядра, реакций слияния тяжелых ионов.

Методология и методы исследования. Вариационно-проеекционные методы, метод конечных элементов, методы решения нелинейных непрерывных минимаксных оптимизационных задач.

Положения, выносимые на защиту:

1. Новая вычислительная схема непрерывной минимаксной оптимизации нелинейных функционалов.
2. Вычислительные схемы вариационного метода с непрерывной минимаксной оптимизацией и ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций для больших и малых компонент решения уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских зарядов тяжелых ионов.

3. Вычислительные схемы МКЭ высокого порядка точности решения краевых задач рассеяния и на метастабильные состояния для системы ОДУ второго порядка с различным числом асимптотически связанных или запутанных открытых каналов в асимптотических областях.
4. Вычислительная схема, алгоритмы и программы для вычисления полностью симметричных квадратурных формул на d -мерных симплексах ($d = 2, \dots, 6$) до порядка p с положительными весами и узлами внутри симплексов, включая оценки точности квадратурных формул в вычислительных экспериментах.
5. Тестирование разработанных вычислительных схем вариационного метода и МКЭ в вычислительных экспериментах на эталонных задачах и их приложение: высокоточные расчеты собственных значений энергии релятивистского электрона в кулоновском поле зарядов двух тяжелых ионов; высокоточные расчеты связанных и метастабильных состояний димера бериллия.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность результатов, полученных в диссертации, обеспечивается использованием строгих математических методов, тестированием вычислительных схем и алгоритмов в численных экспериментах, подтверждающими известные теоретические оценки точности численных решений, а также сравнением с известными точными решениями или с результатами, полученными другими авторами.

Основные результаты диссертационной работы докладывались на международных конференциях: 21st Workshop on Computer Algebra, May 23–24, 2019, Dubna, ЛИТ ОИЯИ, Дубна, Россия; Maple Conference, November 2–4, 2020, Waterloo, Maple Inc., Canada; LXX International conference NUCLEUS-2020, Nuclear physics and elementary particle physics. Nuclear physics technologies, October 11–17, 2020, Saint Petersburg State University, Russia; Maple Conference, November 2–5, 2021, Waterloo, Maple Inc., Canada; 22nd Workshop on Computer Algebra in memory of Professor Vladimir Gerdt, Dubna, Russia, May 24–25, 2021; International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing, CASC-2022, August 22–26, 2022, Gebze, Turkey; и на научных семинарах Лаборатории информационных технологий ОИЯИ (г. Дубна), кафедры прикладной информатики и теории вероятностей факультета физико-математических и естественных наук РУДН (г. Москва).

Публикации. Основное содержание диссертации изложено в 6 публикациях. Из них [ГЧ1, ГЧ2, ГЧ3, ГЧ4, ГЧ5] в виде статей в рецензируемых изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science и рекомендованных ВАК РФ, и программы INQSIM [ГЧ6] в библиотеке программ ОИЯИ JINRLIB.

Личный вклад автора. Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, самостоятельно разработал все численные и символьные компьютерно-алгебраические алгоритмы и создал реализующие их комплексы программ, а также тесты, представленные в диссертации. Его вклад в разработку компьютерного моделирования и анализ конкретных численных экспериментов является определяющим.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трёх глав и

заклучения. Объём диссертации – 106 страниц, 12 рисунков, 27 таблиц. Список литературы включает 88 наименований.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В **первой главе** представлена новая итерационная схема для решения непрерывной минимаксной (или максиминной) задачи, основанная на модифицированном методе Ньютона для решения задачи минимизации [16] и непрерывной минимаксной задачи [17] в сочетании с методами отрицательного направления кривизны для невыпукло-невогнутого, выпукло-невогнутого и невыпукло-вогнутого случаев [16, 18]. Использовались также оптимальные шаги метода типа Ньютона, как в [19]. Приведены расчеты численных примеров, которые продемонстрируют эффективность предложенной схемы нахождения точек минимакса и максимина. Разработанная вычислительная схема применялась для вычисления собственных значений и собственных функций задачи двух кулоновских центров для уравнения Дирака. Расчеты проводились на базе гетерогенной вычислительной платформы HybridLIT (ЛИТ, ОИЯИ).

В *разделе 1.1* даны формулировки непрерывной минимаксной задачи

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \max_{y \in \mathcal{Y}} f(x, y), \quad (1)$$

где $f(x, y): \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ – дважды непрерывно дифференцируемая функция в области пространства $\mathcal{X} \times \mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M$. При её рассмотрении используются следующие обозначения для градиента \mathbf{G} и гессиана \mathbf{H}

$$\nabla f(x, y) = \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_x \\ \mathbf{G}_y \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x, y) = \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{xx} & \mathbf{H}_{xy} \\ \mathbf{H}_{yx} & \mathbf{H}_{yy} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где \mathbf{G}_x и \mathbf{G}_y – вектора длины N и M , \mathbf{H}_{xx} , \mathbf{H}_{xy} , \mathbf{H}_{yx} и \mathbf{H}_{yy} – матрицы размерностью $N \times N$, $N \times M$, $M \times N$ и $M \times M$, причём матрица \mathbf{H} – симметричная.

Необходимые и достаточные условия для локального равновесия Нэша и для минимакса дважды непрерывно дифференцируемой функции f в точке (x^*, y^*) следующие [16]:

Предложение 1. *Необходимое условие для локального равновесия Нэша и для минимакса:*

$$\mathbf{G} = 0. \quad (3)$$

Предложение 2. *Достаточное условие для локального равновесия Нэша:*

$$\mathbf{H}_{xx} \succ 0, \quad \mathbf{H}_{yy} \prec 0. \quad (4)$$

Предложение 3. *Достаточное условие для локального минимакса:*

$$\mathbf{H}_{yy} \prec 0, \quad (5)$$

$$\mathbf{H}_{xx} - \mathbf{H}_{xy}\mathbf{H}_{yy}^{-1}\mathbf{H}_{yx} \succ 0. \quad (6)$$

Здесь \succ и \prec обозначают положительную и отрицательную определенность матрицы, соответственно. Градиенты и гессианы вычисляются в точке $(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)$.

В *разделе 1.2* представлен алгоритм модифицированного метода Ньютона в сочетании с методами отрицательного направления кривизны для нахождения локальной точки минимакса.

В *разделе 1.3* приведены расчеты численных примеров, которые продемонстрируют эффективность предложенной схемы для нахождения минимаксных и максимальных точек, и даны сравнения с результатами, полученными с использованием метода градиентного спуска. Показано, что комбинированные методы градиентного спуска и отрицательного направления кривизны не сходятся при плохом начальном приближении.

В *разделе 1.4* на основе предложенной схемы представлены вычислительная схема вариационного метода непрерывной минимаксной оптимизации с ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций для больших и малых компонент решения $\Psi(\mathbf{r})$ уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских зарядов тяжелых ионов [20]

$$H_D\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $E = E_R$ – релятивистская энергия, а H_D – двухцентровый гамильтониан Дирака:

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + c^2\boldsymbol{\beta} + U(\mathbf{r})\mathbf{I}. \quad (8)$$

Здесь c – скорость света, \mathbf{p} – оператор импульса, $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{\beta}$ – известные матрицы Дирака размерности 4×4 [20] и \mathbf{I} – единичная матрица размерности 4×4 . Двухцентровый притягивающий кулоновский потенциал $U(\mathbf{r})$ в приближении точечных зарядов определяется соотношением

$$U(\mathbf{r}) = V(r_1) + V(r_2), \quad V(r) = -\frac{e^2Z}{r},$$

где eZ – заряд центров (ядер) 1 и 2, $r = |\mathbf{r}|$, $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}/2$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}/2$, $\boldsymbol{\rho} = (0, 0, \rho)$, и ρ – межъядерное расстояние. В расчетах использовались атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1$, и $c = 137.0359895$. Следуя [20] спинорные орбитали слейтеровского типа задаются формулой

$$\psi_{n_jlm}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \iota P_{n\kappa}(r)\Omega_{+\kappa m}(\theta, \varphi), \\ Q_{n\kappa}(r)\Omega_{-\kappa m}(\theta, \varphi), \end{cases} \quad (9)$$

где r, θ, φ – сферические координаты электрона. Спинорные сферические гармоники имеют вид

$$\Omega_{jlm}(\theta, \varphi) \equiv \Omega_{\kappa m}(\theta, \varphi) = \begin{cases} \begin{cases} +\sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}Y_{lm-1/2}(\theta, \varphi), \\ +\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}Y_{lm+1/2}(\theta, \varphi), \end{cases} & \kappa < 0, l = -\kappa - 1, \\ \begin{cases} -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}Y_{lm-1/2}(\theta, \varphi), \\ +\sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}Y_{lm+1/2}(\theta, \varphi), \end{cases} & \kappa > 0, l = \kappa, \end{cases} \quad j = |\kappa| - 1/2, \quad (10)$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферическая гармоника [21]. Большие $P_{n\kappa}(r)$ и малые $Q_{n\kappa}(r)$ радиальные компоненты выбраны в виде одноцентровых функций на каждом центре

$$P_{n\kappa}(r) = (-1)^l \sum_{n_p=1}^{n_p \max} c_{n_p \kappa} p_{n_p \kappa}(r), \quad Q_{n\kappa}(r) = (-1)^l \sum_{n_q=1}^{n_q \max} d_{n_q \kappa} q_{n_q \kappa}(r). \quad (11)$$

Здесь $p_{n_p \kappa}(r)$ и $q_{n_q \kappa}(r)$ – нормированные орбитали слейтеровского типа с нецелыми степенями $\gamma_\kappa + n_p - 2$ и $\gamma_\kappa + n_q - 2$ по переменной r :

$$p_{n_p \kappa}(r) = \frac{(2\lambda_\kappa)^{\gamma_\kappa + n_p - 1/2}}{\sqrt{\Gamma(2\gamma_\kappa + 2n_p - 1)}} r^{\gamma_\kappa + n_p - 2} \exp(-\lambda_\kappa r),$$

$$q_{n_q \kappa}(r) = \frac{(2\mu_\kappa)^{\gamma_\kappa + n_q - 1/2}}{\sqrt{\Gamma(2\gamma_\kappa + 2n_q - 1)}} r^{\gamma_\kappa + n_q - 2} \exp(-\mu_\kappa r), \quad (12)$$

и $\lambda_\kappa > 0$, $\mu_\kappa > 0$ – вариационные нелинейные параметры. Нецелый параметр γ_κ выбирается из асимптотического поведения большой $P_{n\kappa}(r)$ и малой $Q_{n\kappa}(r)$ компонент вблизи соответствующего центра

$$\gamma_\kappa = \gamma_{-\kappa} = \sqrt{\kappa^2 - \frac{Z^2}{c^2}}. \quad (13)$$

Отметим, что при $|\kappa| = n_p = n_q = 1$ степени по переменной r в (12) отрицательные. Полная одноцентровая спинорная функция слейтеровского типа имеет следующий вид

$$\psi_{N_{\max}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} i \sum_{n=1}^{N_{\max}} \sum_{\kappa=-n, \kappa \neq 0}^{n-1} P_{n\kappa}(r) \Omega_{+\kappa m}(\theta, \varphi), \\ \sum_{n=1}^{N_{\max}} \sum_{\kappa=-n, \kappa \neq 0}^{n-1} Q_{n\kappa}(r) \Omega_{-\kappa m}(\theta, \varphi), \end{cases} \quad (14)$$

где N_{\max} – максимальное главное квантовое число, для которого числа $n_{p \max}$, $n_{q \max}$, заданные в уравнении (11) для устранения ложных решений выбираются согласно условиям [22]:

$$n_{p \max} = n - |\kappa| + 1, \quad n_{q \max} = \begin{cases} n_{p \max}, & \kappa < 0, \\ n_{p \max} + 1, & \kappa > 0. \end{cases} \quad (15)$$

Из (11), (14) и (15) следует, что при $N_{\max} = 2, 3, 4$ и 5 общее количество одноцентровых базисных функций равно 11, 24, 41 и 62, соответственно.

Одноэлектронная четная волновая функция $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$ для уравнения (7) имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_{N_{\max}}(\mathbf{r}_1) + \psi_{N_{\max}}(\mathbf{r}_2). \quad (16)$$

Согласно [23] минимаксная формулировка уравнения Дирака (7) имеет вид:

$$-c^2 \leq E_R = \min_{P_{n\kappa}(r) \neq 0} \max_{Q_{n\kappa}(r)} \frac{\langle \Psi(\mathbf{r}) | H_D | \Psi(\mathbf{r}) \rangle}{\langle \Psi(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}) \rangle} = \min_{\lambda_\kappa} \max_{\mu_\kappa} \frac{\langle \Psi(\mathbf{r}) | H_D | \Psi(\mathbf{r}) \rangle}{\langle \Psi(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}) \rangle} \leq c^2. \quad (17)$$

В данном разделе также представлен эффективный алгоритм вычисления трехкратных двухцентровых интегралов, возникших при вычислении элементов матриц (17).

Таблица 1. Энергия электрона $E_e = E_R - c^2$ состояния $1\sigma_g$ при $\rho = 2/Z$.

| Z | Ион | N_{\max} | Энергия | Энергия [24] |
|-----|----------------------|------------|--------------------|--------------------|
| 1 | H_2^+ | 2 | -1.102 248 990 | -1.102 641 581 |
| | | 3 | -1.102 624 606 | |
| | | 4 | -1.102 640 853 | |
| | | 5 | -1.102 641 574 | |
| 50 | Sn_2^{99+} | 2 | -2803.286 356 845 | -2804.659 807 931 |
| | | 3 | -2804.566 122 743 | |
| | | 4 | -2804.656 452 590 | |
| | | 5 | -2804.659 770 918 | |
| 100 | Fm_2^{199+} | 2 | -11942.178 005 611 | -11952.941 940 110 |
| | | 3 | -11951.832 987 584 | |
| | | 4 | -11952.939 381 324 | |
| | | 5 | -11952.941 727 610 | |
| 118 | Og_2^{235+} | 2 | -17461.232 762 069 | |
| | | 3 | -17477.122 912 713 | |
| | | 4 | -17479.073 413 320 | |
| | | 5 | -17479.125 249 624 | |
| 121 | 121_2^{241+} | 2 | -18577.427 339 685 | |
| | | 3 | -18594.349 381 894 | |
| | | 4 | -18596.454 717 052 | |
| | | 5 | -18596.509 996 585 | |

Теорема 1. Трехкратный двухцентровый интеграл

$$F_{l_1 l_2}^{m_1 m_2}(a_1, \nu_1, a_2, \nu_2, \rho) = \int d\mathbf{r} r_1^{\nu_1-1} e^{-a_1 r_1} Y_{l_1 m_1}^*(\mathbf{r}_1) r_2^{\nu_2-1} e^{-a_2 r_2} Y_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) \quad (18)$$

при $a_1 > 0$, $a_2 > 0$, $\max(\nu_1, \nu_2) > 0$, $\min(\nu_1, \nu_2) > -1$ может быть представлен как конечные суммы однократных интегралов.

Теорема 2. Трехкратный двухцентровый интеграл

$$Q_{l_1 l_2}^{m_1 m_2}(a, \nu, \rho) = \int d\mathbf{r} r_1^{-1} r_2^{\nu-1} e^{-a r_2} Y_{l_1 m_1}^*(\mathbf{r}_1) Y_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) \quad (19)$$

при $a > 0$, $\nu > -1$ может быть вычислен аналитически через неполные гамма-функции.

В таблице 1 представлены вычисленные собственные значения энергии электрона $E_e = E_R - c^2$ состояния $1\sigma_g$ различных ионов при «химическом» межъядерном расстоянии $\rho = 2/Z$ в релятивистском приближении, в зависимости от числа N_{\max} и дано их сравнение с результатами, приведенными в [24]. Из результатов следует, что вычисленные энергии дают верхние оценки точных значений энергии с монотонной сходимостью при увеличении N_{\max} . При $N_{\max} = 5$ полученные результаты согласуются с результатами [24] с относительной точностью $10^{-7} - 10^{-8}$.

Во **второй главе** представлены новые вычислительные схемы МКЭ высокого порядка точности решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка. Представлен новый алгоритм МКЭ, реализованный в виде программы KANTBP 5M в MAPLE для решения краевых задач для систем ОДУ второго порядка с непрерывными или кусочно-непрерывными действительными или комплексными коэффициентами. Искомое решение на конечном интервале вещественной независимой переменной подчиняется смешанным однородным краевым условиям. Для сведения задачи на связанные или метастабильные состояния или задачи рассеяния с различным числом асимптотически связанных или запутанных открытых каналов в двух асимптотических областях к краевым задачам на конечном интервале асимптотические краевые условия при больших значениях независимой переменной аппроксимируются однородными краевыми условиями Робина.

Дискретизация осуществляется с помощью МКЭ с использованием интерполяционных полиномов Эрмита (ИПЭ) с произвольной кратностью узлов, что сохраняет непрерывность производных искомых решений на границах прилежащих конечных элементов. Соответствующие алгебраические задачи решаются с помощью встроенных процедур линейной алгебры. Для расчета метастабильных состояний с комплексными собственными значениями энергии или для нахождения связанных состояний с краевыми условиями, зависящими от спектрального параметра, реализована итерационная схема метода Ньютона.

Приведены результаты численных экспериментов применения разработанной вычислительной схемы МКЭ и программы KANTBP 5M к решению краевых задач для эталонных квантовомеханических систем и двухатомной молекулы (димера) бериллия в основном состоянии $X^1\Sigma_g^+$.

В *разделе 2.1* дана формулировка краевой задачи для системы ОДУ и краткое описание вычислительной схемы МКЭ. Вычислительная схема, реализованная в виде программы KANTBP 5M, предназначена для численного решения с заданной точностью краевых задач для системы N ОДУ второго порядка относительно неизвестной вектор-функции $\Phi(z) = (\Phi_1(z), \dots, \Phi_N(z))^T$ независимой переменной $z \in (z^{\min}, z^{\max})$:

$$\left(-\frac{1}{f_B(z)} \mathbf{I} \frac{d}{dz} f_A(z) \frac{d}{dz} + \mathbf{V}(z) + \frac{f_A(z)}{f_B(z)} \mathbf{Q}(z) \frac{d}{dz} + \frac{1}{f_B(z)} \frac{df_A(z)}{dz} \mathbf{Q}(z) - E \mathbf{I} \right) \Phi(z) = 0. \quad (20)$$

Здесь $f_B(z) > 0$ и $f_A(z) > 0$ – непрерывные или кусочно-непрерывные положительные функции, \mathbf{I} , $\mathbf{V}(z)$ и $\mathbf{Q}(z)$ – единичная, симметричная и антисимметричная матрицы размерностью $N \times N$. Элементы $V_{ij}(z) = V_{ji}(z)$ и $Q_{ij}(z) = -Q_{ji}(z)$ матриц $\mathbf{V}(z)$ и $\mathbf{Q}(z)$, эффективных потенциалов – непрерывные или кусочно-непрерывные вещественные или комплексные коэффициенты, обеспечивающие существование нетривиальных решений $\Phi(z)$, подчиненных однородным краевым условиям Дирихле, Неймана или Робина

$$\begin{aligned} \Phi(z^t) &= 0, \quad t = \min, \max, \\ \lim_{z \rightarrow z^t} f_A(z) \left(\mathbf{I} \frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \Phi(z) &= 0, \\ \left(\mathbf{I} \frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \Phi(z) \Big|_{z=z^t} &= \mathbf{G}(z^t) \Phi(z^t), \quad \mathbf{G}(z) = \mathcal{R}(z) - \mathbf{Q}(z) \end{aligned} \quad (21)$$

в граничных точках интервала $z \in \{z^{\min}, z^{\max}\}$ при заданных значениях вещественных или комплексных матриц логарифмических производных $\mathcal{R}(z)$ размерностью $N \times N$.

Задача рассеяния. При заданном вещественном значении энергии E искомая волновая функция при $z \rightarrow \pm\infty$ дается в форме «падающая волна + уходящие волны»:

$$\Phi_{\rightarrow}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow}^c, & z \rightarrow -\infty, \\ \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)\mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)\mathbf{T}_{\rightarrow}^c, & z \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (22)$$

$$\Phi_{\leftarrow}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)\mathbf{T}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)\mathbf{T}_{\leftarrow}^c, & z \rightarrow -\infty, \\ \mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow}^c, & z \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (23)$$

Здесь нижний индекс « \rightarrow » или « \leftarrow » означает направление падающей волны; $\Phi_{\rightarrow}(z)$ и $\Phi_{\leftarrow}(z)$ – искомые матричные решения размерностью $N \times N_o^L$ и $N \times N_o^R$, где N_o^L и N_o^R – число открытых каналов, т.е. число пар линейно независимых осциллирующих решений в асимптотической области $z \rightarrow -\infty$ или $z \rightarrow +\infty$; $\mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z)$ и $\mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)$ – матрицы размерностью $N \times N_o^L$, составленные из известных осциллирующих асимптотических решений при $z \rightarrow -\infty$, которые трактуются как волны, движущиеся в направлении указанном стрелкой; аналогично, $\mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)$ и $\mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z)$ – матрицы размерностью $N \times N_o^R$ при $z \rightarrow +\infty$; $\mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)$ и $\mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)$ матрицы составленные из известных экспоненциально убывающих решений, соответствующих закрытым каналам, их размерность $N \times (N - N_o^L)$ и $N \times (N - N_o^R)$; \mathbf{R}_{\rightarrow} и \mathbf{R}_{\leftarrow} – искомые квадратные матрицы амплитуд отражения размерностью $N_o^L \times N_o^L$ и $N_o^R \times N_o^R$; \mathbf{T}_{\rightarrow} и \mathbf{T}_{\leftarrow} – искомые прямоугольные матрицы амплитуд прохождения размерностью $N_o^R \times N_o^L$ и $N_o^L \times N_o^R$; $\mathbf{R}_{\rightarrow}^c$, $\mathbf{T}_{\leftarrow}^c$ и $\mathbf{T}_{\rightarrow}^c$, $\mathbf{R}_{\leftarrow}^c$ – вспомогательные матрицы размерностью $(N - N_o^L) \times N_o^L$ и $(N - N_o^R) \times N_o^R$. Для вещественных $\mathbf{V}(z)$ и $\mathbf{Q}(z)$ потенциалов матрица \mathbf{S} , составленная из амплитуд прохождения $\mathbf{T}_{\leftrightarrow}$ и отражения $\mathbf{R}_{\leftrightarrow}$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}$$

является унитарной $\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}$ и симметричной $\mathbf{S} = \mathbf{S}^T$. Для комплексных $\mathbf{V}(z)$ и $\mathbf{Q}(z)$ потенциалов матрица \mathbf{S} является только симметричной $\mathbf{S} = \mathbf{S}^T$. Здесь \dagger и T обозначают сопряженное транспонирование и транспонирование матрицы.

Если в асимптотической области коэффициенты системы ОДУ (20) $f_B(z) = f_A(z) = 1$, $Q_{ij}(z) = 0$, а коэффициенты $V_{ij}(z \rightarrow -\infty) = V_{ij}^L$ или $V_{ij}(z \rightarrow +\infty) = V_{ij}^R$ не зависят от z , то асимптотические решения $\mathbf{X}_i^{(*)}(z \rightarrow \pm\infty)$ выражаются через её фундаментальные решения: для открытых каналов $i = i_o = 1, \dots, N_o^{L,R}$:

$$\mathbf{X}_{i_o}^{(\overleftrightarrow{*})}(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \frac{\exp\left(\pm i\sqrt{E - \lambda_{i_o}^{L,R}}z\right)}{\sqrt[4]{E - \lambda_{i_o}^{L,R}}} \Psi_{i_o}^{L,R}, \quad \lambda_{i_o}^{L,R} < E, \quad (24)$$

и для закрытых каналов $i = i_c = N_o^{L,R} + 1, \dots, N$:

$$\mathbf{X}_{i_c}^{(c)}(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \exp\left(-\sqrt{\lambda_{i_c}^{L,R} - E}|z|\right) \Psi_{i_c}^{L,R}, \quad \lambda_{i_c}^{L,R} \geq E.$$

Здесь $\lambda_i^{L,R}$ и $\Psi_i^{L,R} = \{\Psi_{1i}^{L,R}, \dots, \Psi_{Ni}^{L,R}\}^T$ – решения алгебраической задачи на собственные значения

$$\mathbf{V}^{L,R} \Psi_i^{L,R} = \lambda_i^{L,R} \Psi_i^{L,R}, \quad (\Psi_i^{L,R})^T \Psi_j^{L,R} = \delta_{ij}. \quad (25)$$

В стандартном случае незапутанных каналов, $V_{i \neq j}^{L,R} = 0$, решение системы (25) имеет вид $\lambda_i^{L,R} = V_{ii}^{L,R}$ и $\Psi_{ji}^{L,R} = \delta_{ji}$.

Связанные и метастабильные состояния. Как и для задачи рассеяния, при редукции задачи на связанные или на метастабильные состояния на конечный интервал, из асимптотических решений следует, что в краевых точках интервала в общем случае должны быть заданы краевые условия Робина зависящие от собственного значения энергии. Однако, для задачи на связанные состояния в большинстве случаев достаточно ограничиться краевыми условиями Дирихле или Неймана. Для задачи на метастабильные состояния краевые условия Робина следуют из фундаментальных асимптотических решений соответствующих уходящим волнам и в литературе называются краевыми условиями Сегерта [25]:

$$\Phi(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z) \mathbf{O}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z) \mathbf{O}_{\leftarrow}^c, & z \rightarrow -\infty, \\ \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z) \mathbf{O}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z) \mathbf{O}_{\rightarrow}^c, & z \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

где \mathbf{O}_{\leftarrow} и \mathbf{O}_{\rightarrow} – искомые матрицы амплитуд уходящих волн размерностью $N_o^L \times M$ и $N_o^R \times M$, $\mathbf{O}_{\leftarrow}^c$ и $\mathbf{O}_{\rightarrow}^c$ – вспомогательные матрицы размерностью $(N - N_o^L) \times M$ и $(N - N_o^R) \times M$.

Если в асимптотической области коэффициенты системы ОДУ (20) $f_B(z) = f_A(z) = 1$, $Q_{ij}(z) = 0$, а коэффициенты $V_{ij}(z) = V_{ij}^{L,R}$ не зависят от z , то асимптотические решения $\mathbf{X}_i^{(*)}(z \rightarrow \pm\infty)$ выражаются через её фундаментальные решения:

для связанных состояний:

$$\mathbf{X}_{i_c}^{(c)}(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \exp\left(-\sqrt{\lambda_{i_c}^{L,R} - E}|z|\right) \Psi_{i_c}^{L,R}, \quad \lambda_{i_c}^{L,R} \geq E, \quad i_c = 1, \dots, N,$$

и для метастабильных состояний:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{i_o}^{(\overrightarrow{c})}(z \rightarrow \pm\infty) &\rightarrow \exp\left(+i\sqrt{E - \lambda_{i_o}^{L,R}}|z|\right) \Psi_{i_o}^{L,R}, & \lambda_{i_o}^{L,R} < \Re E, \\ \mathbf{X}_{i_c}^{(c)}(z \rightarrow \pm\infty) &\rightarrow \exp\left(-\sqrt{\lambda_{i_c}^{L,R} - E}|z|\right) \Psi_{i_c}^{L,R}, & \lambda_{i_c}^{L,R} \geq \Re E, \end{aligned}$$

где $i_o = 1, \dots, N_o^{L,R}$ и $i_c = N_o^{L,R} + 1, \dots, N$. В данном случае матрица логарифмических производных $\mathcal{R}(z^t)$ для соответствующих краевых условий Робина принимает вид

$$\mathcal{R}(z^t) = \Psi^{L,R} \mathbf{F}^{L,R} (\Psi^{L,R})^{-1},$$

где $\mathbf{F}^{L,R} = \text{diag}\left(\dots, \pm\sqrt{\lambda_{i_c}^{L,R} - E}, \dots, \mp i\sqrt{E - \lambda_{i_o}^{L,R}}, \dots\right)$ и $\Psi^{L,R}$ – матрица, составленная из решений $\Psi_j^{L,R}$ алгебраической задачи на собственные значения (25).

Собственные функции $\Phi^{(m)}(z)$ подчиняются условиям нормировки и ортогональности

$$\langle \Phi^{(m)} | \Phi^{(m')} \rangle = \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} f_B(z) (\Phi^{(m)}(z))^\bullet \Phi^{(m')}(z) dz = \delta_{mm'},$$

Таблица 2. Собственные значения E_i , $i = 1, 2, 3$ связанных состояний и $E_i^M = \Re E_i^M + i\Im E_i^M$, $i = 1, \dots, 4$ метастабильных состояний, полученные решением задачи на собственные значения с краевыми условиями Неймана (Н), методом Ньютона (МН) с краевыми условиями Робина и МСФР.

| | | | |
|------|----------------------------------|------------------------------------|----------------|
| Н | -2.12846503065 | -0.925565889437 | 0.835126562953 |
| МН | -2.12846503036 | -0.925565881437 | 0.835126980234 |
| МСФР | -2.12846503156 | -0.925565883542 | 0.835126979072 |
| МН | 1.35989392876- i 0.00016253897 | 2.43040517408- i 0.0789059067115 | |
| МСФР | 1.35989392695- i 0.00016253895 | 2.43040517183- i 0.0789059070893 | |
| МН | 6.32021061134- i 0.00326071312 | 7.50608788873- i 0.0194121454599 | |
| МСФР | 6.32021060910- i 0.00326071319 | 7.50608789245- i 0.0194121442796 | |

где \bullet означает эрмитово сопряжение \dagger для задачи на связанные состояния или транспонирование T для задачи на метастабильные состояния.

Если коэффициенты системы ОДУ (20) вещественные, то собственные значения E задачи на связанные состояния вещественные, $E_1 \leq E_2 \leq \dots$, а задачи на метастабильные состояния – комплексные с отрицательной мнимой частью, $E = \Re E + i\Im E$, $\Im E < 0$: $\Re E_1 \leq \Re E_2 \leq \dots$.

В разделе 2.2 для численных экспериментов выбрана эталонная краевая задача для системы ОДУ (20) с $f_B(z) = f_A(z) = 1$, $Q_{ij}(z) = 0$ и кусочно-постоянными потенциалами

$$V_{ij}(z) = i^2 \delta_{ij} + \left\{ 0, z < -2; -2, |z| \leq 2; 2, z > 2 \right\} \left\{ \frac{\pi}{2}, i=j; 0, \text{чётное } i-j \neq 0; \frac{-8ij}{\pi(i^2-j^2)^2}, \text{нечётное } i-j \right\}.$$

В таблице 2 представлены энергии связанных и метастабильных состояний рассчитанные при $N = 6$ различными способами. Связанные состояния рассчитывались по сетке $[-25.78125, -18.1875, -13.125, -9.75, -7.5, -6(1)6]$, где в круглых скобках указан шаг конечноэлементной сетки, с краевыми условиями Неймана (Н). Также связанные и метастабильные состояния с краевыми условиями Робина, зависящими от собственного значения были найдены методом Ньютона (МН) на сетке $[-4(1)4]$. Для сравнения численных результатов, решения этой краевой задачи были вычислены с точностью 10^{-12} методом шивки фундаментальных решений (МСФР). Видно, что результаты, полученные МСФР и МКЭ, совпадают с точностью $10^{-9} \div 10^{-7}$.

Данная задача рассеяния имеет различное число открытых каналов в асимптотических областях $|z| > 2$, причем в асимптотической области $z > 2$ имеет *запутанные каналы*, которые даются недиагональными матричными асимптотическими решениями (24), (25). На рис. 1 показаны действительные и мнимые части элементов $(R_{\rightarrow})_{ij}$, $(R_{\leftarrow})_{ij}$, $(T_{\rightarrow})_{ij} = (T_{\leftarrow})_{ji}$ матриц амплитуд отражения $\mathbf{R}_{\vec{z}}$, и прохождения $\mathbf{T}_{\vec{z}}$. При $E \leq \lambda_1^{(R)} \approx 3.7$ рассматриваемую задачу можно интерпретировать как одноканальную задачу рассеяния на полуоси. Как следует из теории рассеяния, в случае резонанса аргумент единственного элемента $S_{11} = (R_{\rightarrow})_{11}$ матрицы рассеяния равен $\pi/2$. Эти значения действительной и мнимой частей $(R_{\rightarrow})_{11}$ наблюдаются при $E \approx 1.1$ и $E \approx 2.4$, соответствующих первым двум резонансам в таблице 2. Вблизи $E \approx 6.3$ и $E \approx 7.5$, соответствующих двум следующим резонансам, наблюдается резкое изменение амплитуд отражения и прохождения.

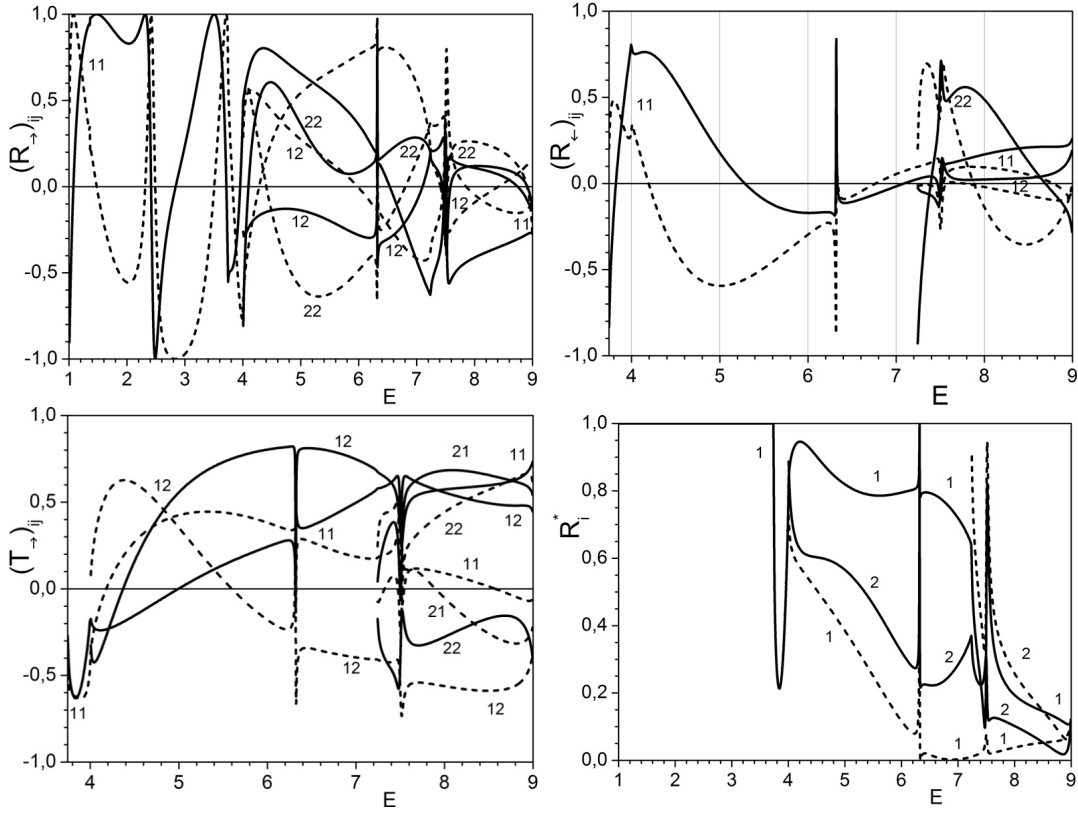


Рис. 1. Действительные (сплошные линии) и мнимые (штриховые линии) части элементов $(R_{\rightarrow})_{ij}$, $(R_{\leftarrow})_{ij}$, $(T_{\rightarrow})_{ij} = (T_{\leftarrow})_{ji}$ матриц амплитуд отражения $\mathbf{R}_{\leftarrow\rightarrow}$ и прохождения $\mathbf{T}_{\leftarrow\rightarrow}$ и коэффициенты отражения $R_i^* = (\mathbf{R}_*^\dagger \mathbf{R}_*)_{ii}$ при $* = \rightarrow$ (сплошные кривые) и $* = \leftarrow$ (штриховые кривые) в зависимости от энергии E .

Предложенная программа применялась для исследования двумерной задачи дифракции в волноводе на примере плоского скалярного случая с одним открытым каналом [ГЧ4]. В расчетах использовалось неполное разложение Галеркина по стандартному базису искомого решения, которое сводит исходную двумерную задачу к системе ОДУ. Показана сходимость матрицы рассеяния \mathbf{S} с увеличением числа уравнений N .

В разделе 2.3 представлены результаты расчетов связанных и метастабильных состояний двухатомной молекулы бериллия. В квантово-химических расчетах эффективные потенциалы межатомного взаимодействия представляются в виде таблично заданных значений, рассчитанных с ограниченной точностью и определенных на неравномерной сетке узлов в конечном интервале межатомных расстояний [6, 7]. Важно, что предлагаемая схема МКЭ с ИПЭ обеспечивает гладкую сшивку табличного потенциала с его аналитическим асимптотическим выражением, а также гладкую аппроксимацию собственных функций [ГЧ2]. Уравнение Шрёдингера для двухатомной молекулы бериллия в адиабатическом приближении, обычно называемом приближением Борна–Опенгеймера

$$(-s_2 \Delta_{\mathbf{r}} + V(r) - E) \Psi_E(\mathbf{r}) = 0,$$

$$\left(-\frac{s_2}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + V_L(r) - E \right) \Phi_{EL}(r) = 0, \quad V_L(r) = V(r) + \frac{s_2 L(L+1)}{r^2},$$

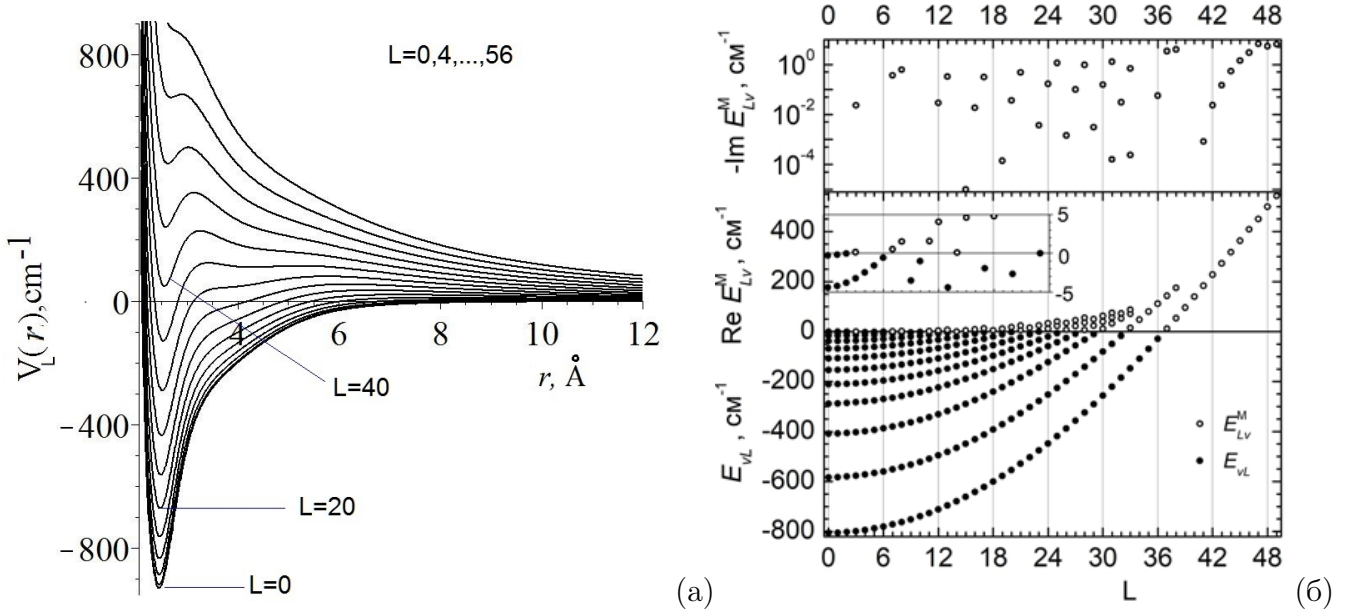


Рис. 2. (а) Потенциальные функции $V_L(r)$ при $L = 0, 4, 8, \dots, 56$. (б) Вещественные собственные значения энергии $E_{vL} < 0$ связанных состояний (нижняя панель); вещественные части $\Re E_{Lv}^M > 0$ (средняя панель) и мнимые части с обратным знаком $-\Im E_{Lv}^M > 0$ (верхняя панель) комплексных собственных энергий E_{Lv}^M метастабильных состояний. На эюре показаны значения энергий связанных и метастабильных состояний на интервале энергий $-5 \leq E \leq 5$ (в см^{-1}).

где $s_2 = 3.741151852 \text{ см}^{-1}$, r – расстояние между атомами в единице Å , E – энергия в единице см^{-1} и $\Psi_E(\mathbf{r}) = \Phi_{EL}(r)Y_{LM}(\theta, \varphi)$, $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ – сферическая гармоника [21], L и M – квантовые числа полного углового момента и его проекции. Потенциал $V(r)$ (в см^{-1}) определяется своими значениями на сетке и асимптотическим разложением за ее пределами (подробнее см. [ГЧ2]). Потенциальные функции $V_L(r)$ при значениях углового момента $L = 0, 4, \dots, 56$ показаны на рис. 2а, спектр $E = E_{vL}$ связанных и $E = E_{Lv}^M = \Re E_{Lv}^M + i\Im E_{Lv}^M$ метастабильных состояний показан на рис. 2б. В численном эксперименте доказано, что в спектре димера бериллия (в основном состоянии $X^1\Sigma_g^+$ по электронному движению) имеются 252 связанных состояний при всех значениях $L = 0, 1, \dots, 36$, и 58 метастабильных состояний при следующих значениях $L = 3, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 16, 18, 19, \dots, 49$. Отметим, что вычисленные значения энергии 12 связанных состояний при $L = 0$ согласуются с экспериментальными данными [26] и результатами других авторов [6, 7]. Существование набора метастабильных состояний также подтверждено расчетами соответствующих состояний рассеяния при резонансных значениях энергии $E \approx \Re E_{Lv}^M$. Проведенные расчеты показали эффективность и надежность вычислительной схемы МКЭ и программы KANTBP 5M.

В третьей главе разработаны новые алгоритмы и программа вычисления с квадратурной точностью на языке FORTRAN (с уточнением до заданного числа значащих цифр в системе MAPLE) полностью симметричных квадратурных формул на d -мерных симплексах. При расчете применялись модифицированные методы Левенберга-Марквардта для решения нелинейных уравнений с выпуклыми ограничениями. Расчеты проводились на базе гетерогенной вычислительной платформы HybridLIT (ЛИТ, ОИЯИ).

Таблица 3. Вычисленные минимальные числа N_{dp} узлов (тек.) для полностью симметричных квадратурных формул порядка p и сравнение с известными числами N_{dp} .

| p | N_{dp} | | | | | | | | | |
|-----|------------|------|---------|------|---------|------|---------|------|---------|--|
| | $d = 2$ | | $d = 3$ | | $d = 4$ | | $d = 5$ | | $d = 6$ | |
| | тек., [27] | тек. | [15] | тек. | [28] | тек. | [29] | тек. | [29] | |
| 4 | 6 | 14 | 14 | 20 | 20 | 27 | 27 | 43 | 43 | |
| 6 | 12 | 24 | 24 | 56 | 56 | 102 | 102 | 175 | 175 | |
| 8 | 16 | 46 | 46 | 105 | 105 | 228 | 257 | 448 | 553 | |
| 9 | 19 | 59 | 59 | 151 | 151 | 338 | | 700 | | |
| 10 | 25 | 79 | 81 | 210 | 210 | 479 | | 1078 | | |
| 12 | 33 | 123 | 168 | 370 | 445 | | | | | |
| 16 | 55 | 248 | 304 | 956 | 1055 | | | | | |
| 20 | 79 | 441 | 552 | | | | | | | |

Таблица 4. Невязки ϵ_{test}^q и соответствующий коэффициент Рунге β в численных экспериментах (26) для 6-симплекса.

| p | ϵ_{test}^2 | ϵ_{test}^4 | ϵ_{test}^8 | β |
|-----|----------------------------|----------------------------|----------------------------|---------|
| 4 | $+7.91 \cdot 10^{-12}$ | $+1.73 \cdot 10^{-13}$ | $+2.90 \cdot 10^{-15}$ | 5.50 |
| 6 | $-1.73 \cdot 10^{-14}$ | $-7.35 \cdot 10^{-17}$ | $-2.93 \cdot 10^{-19}$ | 7.88 |
| 8 | $+2.09 \cdot 10^{-18}$ | $+2.34 \cdot 10^{-21}$ | $+2.35 \cdot 10^{-24}$ | 9.80 |
| 9 | $-3.86 \cdot 10^{-20}$ | $-5.12 \cdot 10^{-23}$ | $-5.34 \cdot 10^{-26}$ | 9.56 |
| 10 | $-1.18 \cdot 10^{-22}$ | $-3.63 \cdot 10^{-26}$ | $-9.35 \cdot 10^{-30}$ | 11.66 |

В разделе 3.1 представлены общие формулировки для построения полностью симметричных квадратурных формул порядка p для интегрирования по d -симплексу, которая точна для всех полиномов d переменных степени не выше p . Для построения таких формул в качестве подынтегральных функций выбираются симметричные полиномы, заданные в баррицентрических координатах. Построение полностью симметричных квадратурных формул с положительными весами и с узлами, лежащими внутри d -симплекса, приводит к решению системы нелинейных алгебраических уравнений на выпуклых ограниченных областях. Отметим, что полученная система нелинейных уравнений при больших p , содержит большое число уравнений высокой степени и классические численные методы практически не сходятся к искомому решению в заданной выпуклой области. Например, при $d = 3$, $p = 20$ соответствующая система состоит из 108 уравнений, из которых 14 уравнений 20-ой степени.

В разделе 3.2 представлен модифицированный нами метод Левенберга-Марквардта для решения системы нелинейных уравнений в заданной выпуклой области, с помощью которого получен ряд новых полностью симметричных квадратурных формул высокого порядка p .

В разделе 3.3 приведены характеристики построенных новых полностью симметричных квадратурных формул [ГЧ5] до 20-го порядка по треугольнику и тетраэдру, 16-го порядка по 4-симплексу, 10-го порядка по 5- и 6-симплексам (см. таблицу 3) и даны оценки их погрешно-

стей. При $d = 5, 6$ квадратурные формулы 9-го и 10-го порядка ранее были неизвестны, а при $d = 3, 4$ количество узлов найденных квадратурных формул высокого порядка значительно меньше по сравнению с аналогичными, известными в литературе.

Для численного эксперимента был выбран класс интегралов

$$I_d = \int_{\Delta_d} (x_1 + \dots + x_d) \exp(-x_1 - \dots - x_d) dx_1 \dots dx_d, \quad (26)$$

которые вычисляются в аналитическом виде. В Таблице 4 представлены невязки $\epsilon_{\text{test}}^q = I_d^q - I_d$, где I_d^q – численные результаты, полученные при разбиении симплекса Δ_d на q^d равных симплексов с интегрированием на каждом из них, и коэффициенты Рунге на трех дважды сгущенных сетках

$$\beta = \log_2 |(\epsilon_{\text{test}}^q - \epsilon_{\text{test}}^{2q}) / (\epsilon_{\text{test}}^{2q} - \epsilon_{\text{test}}^{4q})|, \quad (27)$$

Из таблице 4 видно, что для найденных квадратурных формул численные оценки коэффициента Рунге соответствуют теоретическим оценкам.

В Заключение сформулированы основные результаты диссертации.

Основные публикации по теме диссертации

- ГЧ1. О. Chuluunbaatar, В.В. Joulakian, G. Chuluunbaatar, J. Buša Jr., G.O. Koshcheev, Accurate calculations for the Dirac electron in the field of two-center Coulomb field: Application to heavy ions, Chem. Phys. Lett. 784, 139099–1–9 (2021).
- ГЧ2. V.L. Derbov, G. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, A. Gózdź, P.M. Krassovitskiy, I. Filikhin, A.V. Mitin, Spectrum of beryllium dimer in ground $X^1\Sigma_g^+$ state, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 262, 107529–1–10 (2021).
- ГЧ3. G. Chuluunbaatar, A. Gusev, V. Derbov, S. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, V. Gerdt, A Maple implementation of the finite element method for solving boundary-value problems for systems of second-order ordinary differential equations, Commun. Comp. Info. Sci. 1414, 152–166 (2021).
- ГЧ4. М.Д. Малых, Л.А. Севастьянов, Г. Чулуунбаатар, О применении программного обеспечения KANTBP к задаче дифракции в волноводе, Физические основы приборостроения 11, 74–79 (2022).
- ГЧ5. G. Chuluunbaatar, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, PI-type fully symmetric quadrature rules on the 3-, ..., 6-simplexes, Comp. Math. Appl. 124, 89–97 (2022).
- ГЧ6. Г. Чулуунбаатар, О. Чулуунбаатар, А.А. Гусев, С.И. Виницкий, INQSIM: программа преобразования полностью симметричных квадратурных правил типа PI на 2-, ..., 6-симплексах из компактного вида в развернутый, Библиотека программ ОИЯИ (2022). <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/inqsim/indexe.html>

Список цитируемой литературы

1. A. Kolakowska, Application of the minimax principle to the Dirac-Coulomb problem, *J. Phys. B* 29, 4515–4527 (1996).
2. V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin, G. Plunien, G. Soff, Dual kinetic balance approach to basis-set expansions for the Dirac equation, *Phys. Rev. Lett.* 93, 130405–1–4 (2004).
3. J.L. Zhou, A.L. Tits, User’s guide for FSQP Version 3.5: A Fortran code for solving constrained nonlinear minimax optimization problems, generating iterates satisfying all inequality and linear constraints, Technical Research Report, TR-92-107 (1992).
4. W.R. Johnson, S.A. Blundell, J. Sapirstein, Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines, *Phys. Rev. A* 37, 307–315 (1988).
5. K. Patkowski, V. Špirko, K. Szalewicz, On the elusive twelfth vibrational state of beryllium dimer, *Science* 326 (5958), 1382–1384 (2009).
6. A.V. Mitin, Unusual chemical bonding in the beryllium dimer and its twelve vibrational levels, *Chem. Phys. Lett.* 682, 30–33 (2017).
7. M. Lesiuk, M. Przybytek, J.G. Balcerzak, M. Musiał, R. Moszynski, Ab initio potential energy curve for the ground state of beryllium dimer, *J. Chem. Theory Comput.* 15, 2470–2480 (2019).
8. A.A. Gusev, L.L. Hai, O. Chuluunbaatar, V. Ulziibayar, S.I. Vinitzky, V.L. Derbov, A. Gózdź, V.A. Rostovtsev, Symbolic-numeric solution of boundary-value problems for the Schrödinger equation using the finite element method: scattering problem and resonance states, *Lect. Notes Comput. Sci.* 9301, 182–197 (2015).
9. P.W. Wen, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, R.G. Nazmitdinov, A.K. Nasirov, S.I. Vinitzky, C.J. Lin, H.M. Jia, Near-barrier heavy-ion fusion: Role of boundary conditions in coupling of channels, *Phys. Rev. C* 101, 014618–1–10 (2020).
10. G. Strang, G.J. Fix, An analysis of the finite element method, Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1973).
11. J.I. Maeztu, E. Sainz de la Maza, Consistent structures of invariant quadrature rules for the n -simplex, *Math. Comp.* 64, 1171–1192 (1995).
12. П.Г. Акишин, Е.П. Жидков, Некоторые кубатурные формулы для симплексов, препринт ОИЯИ, 11–81–395 (Дубна, 1981).
13. П.Г. Акишин, Метод интегральных уравнений в задачах магнитостатики, Дис. канд. физ.-мат. наук: 01.01.07 (Дубна, 1983).
14. J. Jaśkowiec, N. Sukumar, High-order cubature rules for tetrahedra, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 121, 2418–2436 (2020).
15. J. Jaśkowiec, N. Sukumar, High-order symmetric cubature rules for tetrahedra and pyramids, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 122, 148–171 (2021).
16. P.E. Gill, W. Murray, Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained

- optimization, *Mathematical Programming* 7, 311–350 (1974).
17. M.A. Howe, A quasi-Newton algorithm for continuous minimax with applications to risk management in finance, PhD thesis of the University of London (1994).
 18. L. Adolphs, H. Daneshmand, A. Lucchi, Th. Hofmann, Local saddle point optimization: A curvature exploitation approach, arXiv:1805.05751 (2018).
 19. И.В. Пузынин, Т.Л. Бояджиев, С.И. Веницкий, Е.В. Земляная, Т.П. Пузынина, О. Чулуунбаатар, О методах вычислительной физики для исследования моделей сложных физических процессов, *ЭЧАЯ* 38, 144–232 (2007).
 20. W.R. Johnson, K.T. Cheng, M.H. Chen, Chapter 3 – Accurate relativistic calculations including QED contributions for few-electron systems, *Theor. Comput. Chem.* 14, 120–187 (2004).
 21. E.U. Condon, G.H. Shortley, *The theory of atomic spectra*, Cambridge at the University Press (1970).
 22. A. Kolakowska, J.D. Talman, K. Aashamar, Minimax variational approach to the relativistic two-electron problem, *Phys. Rev. A.* 53, 168–177 (1996).
 23. J.D. Talman, Minimax principle for the Dirac equation, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1091–1094 (1986).
 24. И.И. Тупицын, Д.В. Миронова, Релятивистские расчеты основных состояний одноэлектронных двухатомных молекулярных ионов, *Оптика и Спектроскопия* 117, 365–372 (2014).
 25. A.J.F. Siegert, On the derivation of the dispersion formula for nuclear reactions, *Phys. Rev.* 56, 750–752 (1939).
 26. J.M. Merritt, V.E. Bondybey, M.C. Heaven, Beryllium dimer – caught in the act of bonding, *Science* 324 (5934) 1548–1551 (2009).
 27. H. Xiao, Z. Gimbutas, A numerical algorithm for the construction of efficient quadrature rules in two and higher dimensions, *Comp. Math. Appl.* 59, 663–676 (2010).
 28. C.V. Frontin, G.S. Walters, F.D. Witherden, W. Lee, D.M. Williams, D.L. Darmofal, Foundations of space-time finite element methods: polytopes, interpolation, and integration, *Appl. Numer. Math.* 166, 92–113 (2021).
 29. A.A. Gusev, V.P. Gerdt, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, S.I. Vinitsky, V.L. Derbov, A. Gózdź, P.M. Krassovitskiy, Symbolic-numerical algorithms for solving elliptic boundary-value problems using multivariate simplex Lagrange elements, *Lect. Notes Comput. Sci.* 11077, 197–213 (2018).

Галмандах Чулуунбаатар

Вычислительные схемы решения квантовомеханических задач

1. Разработана и протестирована новая вычислительная схема непрерывной минимаксной оптимизации (вычисления локальных равновесий Нэша или минимаксных точек) нелинейных функционалов. 2. Проведены разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных схем вариационного метода непрерывной минимаксной оптимизации с ограничениями по нелинейным параметрам пробных функций для больших и малых компонент решения уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских зарядов тяжелых ионов и схем метода конечных элементов высокого порядка точности решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка с применением современных компьютерных технологий. 3. Разработаны алгоритмы и комплекс программ построения полностью симметричных квадратурных формул p -го порядка на d -мерных симплексах с положительными весами и узлами внутри симплексов. 4. Представлены приложения разработанных вычислительных схем вариационного метода и метода конечных элементов для решения и анализа краевых задач атомной и молекулярной физики. 5. Выполнены высокоточные расчеты собственных значений энергии релятивистского электрона в кулоновском поле зарядов двух тяжелых ионов, а также связанных и метастабильных состояний двухатомной молекулы бериллия.

Galmandakh Chuluunbaatar

Computational schemes for solving quantum mechanical problems

1. A new computational scheme for the continuous minimax optimization (computations of local Nash equilibria or minimax points) of nonlinear functionals was developed and tested. 2. The development, justification and testing of efficient computational schemes of the variational method with continuous minimax optimization and constraints on the nonlinear parameters of test functions for large and small components of the solution of the Dirac equation for an electron in the field of two Coulomb charges of heavy ions and of computational finite element method schemes of high-order accuracy for solving boundary value problems for a system of second-order ODEs were carried out using modern computer technologies. 3. Algorithms and a computer program for the calculation of full symmetric p -order quadrature formulas on d -dimensional simplexes with positive weights and nodes inside the simplexes were developed. 4. Applications of the developed computational schemes of the variational method and the finite element method for solving and analyzing boundary value problems of atomic and molecular physics are presented. 5. High-precision calculations of the energy eigenvalues of a relativistic electron in the Coulomb field of charges of two heavy ions, as well as of bound and metastable states of two atomic beryllium molecules, were preformed.