

ОБОБЩЕННЫЙ НЕПРЕРЫВНЫЙ АНАЛОГ
МЕТОДА НЬЮТОНА
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ
НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ
КВАНТОВО-ПОЛЕВЫХ МОДЕЛЕЙ*

*И.В.Пузынин, И.В.Амирханов, Е.В.Земляная,
В.Н.Первушин, Т.П.Пузынина, Т.А.Стриж*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В.Д.Лахно

Институт математических проблем биологии РАН, Пущино

ВВЕДЕНИЕ	210
МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО НАМН	212
Ньютоновские итерационные схемы	213
Ньютоновская итерационная схема с одновременным вычислением оператора, обратного к оператору производной нелинейной функции	220
Ньютоновская итерационная схема с параметрической зависимостью от асимптотики решений	224
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КВАНТОВО-ПОЛЕВЫХ САМОСОГЛАСО- ВАННЫХ МОДЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО НАМН	227
Уравнение полярона в рамках модели Латтинжера – Лу	228
Автолокализованные электронные состояния в жидкости	235
Квантово-полевая модель бинуклона в пределе сильной связи	237
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ КВАРКОНИЯ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕНИЯ НАМН	243

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 97-01-01040).

Уравнение Швингера — Дайсона	245
Уравнение Бете — Солпитера	247
Потенциалы взаимодействия	249
Обобщение КХД-инспирированной модели на случай конечных температур	254
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	260
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	261

ОБОБЩЕННЫЙ НЕПРЕРЫВНЫЙ АНАЛОГ
МЕТОДА НЬЮТОНА
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ
НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ
КВАНТОВО-ПОЛЕВЫХ МОДЕЛЕЙ*

*И.В.Пузынин, И.В.Амирханов, Е.В.Земляная,
В.Н.Первушин, Т.П.Пузынина, Т.А.Стриж*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В.Д.Лахно

Институт математических проблем биологии РАН, Пущино

В обзоре дано систематическое описание вычислительного метода для исследования нелинейных задач, возникающих в математических моделях физики. Единой основой для разработки вычислительных схем служит обобщение непрерывного аналога метода Ньютона, которое представляет собой качественно новое развитие ньютоновского эволюционного процесса на основе объединения идей методов теории возмущений и эволюции по параметрам. Представлены результаты численного исследования квантово-полевых моделей полярона, сольватированного электрона, бинуклона и потенциальных моделей КХД для наиболее распространенных потенциалов.

The systematic description of a computational method for studying the nonlinear problems arisen in mathematical models of physics is presented. A unified basis for working out the computational schemes is a generalization of the continuous analogue of Newton's method which represents a qualitatively new development of the Newtonian evolution process basing on integration of the conceptions of the methods in perturbation and evolution theory on parameters. Results of numerical research in quantum field models of polaron, solvated electron, binucleon as well as QCD potential models for the some wide-spread potentials are given.

1. ВВЕДЕНИЕ

Со времени публикации первого обзора в ЭЧАЯ о применении непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) для численного решения нелинейных уравнений в математических моделях физики [1] прошло двадцать пять лет. В дальнейшем, наряду с теоретическими обоснованиями, для НАМН были

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 97-01-01040).

найжены новые приложения в задачах физики ускорителей и в обратной задаче теории рассеяния [2]. Кроме того, за это время усилиями в основном группы сотрудников ОИЯИ этот метод превратился в мощный инструмент построения эффективных вычислительных схем для решения разнообразных нелинейных задач, возникающих в теоретической физике. Сейчас можно с уверенностью утверждать, что разработан качественно новый, по сравнению с НАМН, подход к созданию алгоритмов для численного анализа сложных многопараметрических нелинейных моделей физики.

Создание этого подхода явилось, во многом, продуктом опыта решения разнообразных практических задач. Поэтому в предложенном методе, наряду с идеями НАМН, нашли отражение наиболее привлекательные стороны некоторых известных методов, широко применяющихся при решении задач физики. Это схемы теории возмущений [3], метод продолжения по параметру [4], метод дифференцирования по параметру [5], который в задачах ядерной физики известен как метод эволюции по константе связи [6].

В разработанных итерационных схемах в определенном смысле решена задача выбора начальных приближений и упрощено решение линейной задачи относительно итерационных поправок. Более того, возможно построение итерационного процесса без обращения линейного оператора в этой задаче. Как результат, развитые вычислительные схемы обладают свойствами таких известных методов, как метод расщепления [7], многосеточные методы [8], некоторые методы регуляризации [9]. Поэтому разработанный подход отвечает современным тенденциям развития компьютерной архитектуры и технологии программирования вычислительных процессов [10].

В спектральных задачах квантовой механики обобщение НАМН может служить единой теоретической основой описания ряда известных методов, таких, как метод обратных итераций, метод обратных итераций со сдвигом и с рэлеевским частным [11]. Особенности реализации вычислительных схем в этих задачах отражены в обзорах [12, 13].

Наши работы в области развития обобщенного НАМН инициировали исследования по оптимизации сходимости ньютоновских итерационных схем [14, 15], а также схем продолжения по параметру [16]. В данном обзоре представлены результаты численного исследования нелинейных моделей теории полярона и потенциальных моделей КХД, относящихся к различным разделам теоретической физики, но выполненным с помощью вычислительных схем, основанных на обобщенном НАМН.

Обзор состоит из пяти разделов. В разд.2 дана единообразная математическая постановка задач, к решению которых приводят исследования ряда моделей квантовой теории поля. Аргументируется выбор метода Ньютона и его обобщения для решения этой задачи, описаны ньютоновские итерационные схемы и даны оценки их точности. Приведены итерационные схемы на основе модификации НАМН, эффективные при использовании на современ-

ных векторно-параллельных вычислительных системах. Даны ньютоновские итерационные схемы для решения интегрального уравнения Шредингера и нелинейных сингулярных краевых задач с параметрической зависимостью от асимптотики решений.

В разд.3 представлены обзор работ и результаты, полученные при изучении моделей полярона, бинуклона в пределе сильной связи, автолокализованных электронных состояний в жидкости.

В разд.4 рассмотрены постановки и методы численного анализа граничных нелинейных задач в рамках уравнений Швингера — Дайсона и Бете — Солпитера для ряда наиболее распространенных потенциалов. Проведено сравнение полученных результатов с известными теоретическими и экспериментальными данными других авторов.

Коллектив авторов настоящего обзора состоит из специалистов в области численного анализа нелинейных моделей физики и физиков-теоретиков, являющихся активными пользователями разработанного метода. Мы надеемся, что представленный материал даст возможность заинтересованному читателю познакомиться с основными идеями обобщенного НАМН и методикой численного анализа некоторых нелинейных моделей физики и расширить область его применимости.

2. МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО НАМН

Ряд математических моделей квантовой теории поля приводит к новым постановкам граничных задач для нелинейных дифференциальных, интегродифференциальных и интегральных уравнений. Оригинальность постановок заключается в комбинации нелинейных граничных и спектральных задач, что приводит к системам соответствующих уравнений. Общими свойствами таких систем являются их сингулярность и многопараметричность относительно параметров модели и спектральных параметров. Рассматриваемые задачи можно свести к единообразной постановке в виде уравнения

$$\varphi(\vec{a}, \vec{\lambda}, y) = 0, \quad (1)$$

где y – элемент из некоторой области B -пространства Y , $\vec{\lambda} \in R_m, \vec{a} \in R_l$ – векторы из евклидовых пространств соответствующих размерностей. Нелинейная функция φ при заданном векторе \vec{a} переводит элементы $z = \{\vec{\lambda}, y\}$ из области пространства $R_m \times Y$ в пространство $R_m \times U$, где U является B -пространством, причем $U \supseteq Y$. Предполагается, что для каждого заданного вектора \vec{a} уравнение (1) имеет счетное множество решений $\{y_n^*\}, n = 0, 1, 2, \dots$, причем каждому решению y_n^* соответствует вектор собственных

значений $\vec{\lambda}_n^*$. Решение $z_n^* = \{\vec{\lambda}_n^*, y_n^*\}$ уравнения (1) является функцией вектора параметров \vec{a} .

Отметим также следующие особенности рассматриваемых задач.

1. Как правило, имеется определенная информация о существовании и качественном поведении искомых решений. Эта информация может быть получена из физических свойств изучаемых процессов, рассмотрения упрощенных моделей, особенно в асимптотических областях изменения параметров.
2. В задачах, представляющих приближения к более сложным многомерным, а также при переходе от бесконечных областей изменения независимых переменных к конечным, возникают проблемы оценки точности применяемых аппроксимаций. Во многих случаях подобные оценки можно получить лишь численно, проводя расчеты при некоторых значениях параметров аппроксимации.

Таким образом, в постановке (1) вектор "внешних" параметров \vec{a} расширяется и помимо "физических" параметров модели содержит также параметры аппроксимации задачи, в том числе и вычислительной схемы. Численное исследование модели обычно сводится к проведению массовых расчетов в широкой области изменения этих параметров, позволяющих одновременно изучать и свойства рассматриваемых моделей, то есть поведение решений в зависимости от "физических" параметров, и точность получаемых результатов в зависимости от параметров аппроксимации исходных задач.

В дальнейшем там, где это несущественно, мы будем опускать зависимость функции φ от параметров \vec{a} и $\vec{\lambda}$.

2.1. Ньютоновские итерационные схемы. В работе [17], где впервые был предложен НАМН, рассматривается группа одношаговых итерационных методов решения нелинейного уравнения в B -пространстве

$$\varphi(z) = 0,$$

в которых на каждом шаге с номером k итерационного процесса поправка Δz_k к известному приближению z_k искомого решения вычисляется по формуле

$$\Delta z_k = \psi(z_k),$$

$$z_{k+1} = z_k + \Delta z_k, k = 0, 1, 2, \dots$$

z_0 — заданный элемент.

Способ построения функции $\psi(z)$ определяется в зависимости от используемого итерационного метода. В частности, для метода Ньютона

$$\psi(z) = -\varphi'(z)^{-1}\varphi(z),$$

где $\varphi'(z)$ – линейный оператор, производная Фреше функции $\varphi(z)$. Для каждого итерационного процесса указанного вида можно построить его непрерывный аналог путем введения вместо дискретной переменной k ($k = 0, 1, 2, \dots$) непрерывного параметра t ($0 \leq t < \infty$). Предполагая непрерывную зависимость $z = z(t)$ и вводя вместо приращения Δz_k производную $\frac{d}{dt}z(t)$, мы получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{d}{dt}z(t) = \psi(z(t)), z(0) = z_0. \quad (2)$$

В результате нахождение решения уравнения (1) осуществляется путем решения задачи Коши (2) на полуоси $0 \leq t < \infty$. В цитируемой работе [17] доказан ряд утверждений о сходимости непрерывных аналогов итерационных методов при $t \rightarrow \infty$ к изолированному решению z^* уравнения (1).

Для НАМН такое доказательство основано на преобразовании уравнения (2) к виду

$$\frac{d}{dt}\varphi(z(t)) = -\varphi(z(t)), z(0) = z_0, \quad (3)$$

откуда следует существование интеграла

$$\varphi(z(t)) = e^{-t}\varphi(z_0).$$

При условии гладкости функции $\varphi(z)$ и существования ограниченного оператора $\varphi'(z)^{-1}$ в окрестности начального приближения z_0 доказано существование в этой окрестности корня z^* уравнения (1) и сходимость траектории $z(t)$ при $t \rightarrow \infty$ к этому корню.

Для приближенного решения задачи Коши (2) в работе [17] предлагается использовать подходящие численные методы, ожидая их устойчивости при асимптотической устойчивости $z = z(t)$.

В обзоре [1] описан простейший метод приближенного интегрирования задачи (2) – метод Эйлера для НАМН. Этот метод на дискретной сетке $\{t_k, k = 0, 1, 2, \dots; t_{k+1} - t_k = \tau_k\}$ приводит к последовательности линейных задач

$$\begin{aligned} \varphi'(z_k)v_k &= -\varphi(z_k), \\ z_{k+1} &= z_k + \tau_k v_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (4)$$

где z_0 – заданный элемент. При $\tau_k \equiv 1$ получается последовательность метода Ньютона.

Сходимость метода Эйлера доказана [1] на конечном отрезке $0 \leq t \leq T$ при $\tau_k \rightarrow 0$. Однако для практической реализации трактовка параметра τ_k как шага интегрирования не представляет интереса. Действительно, для того, чтобы $z = z(T)$ мало отличался от искомого решения z^* , необходимо выбрать $t = T$ достаточно большим. В то же время для более точного вычисления методом Эйлера значения $z = z(T)$ необходимо задавать τ_k достаточно малыми.

Данные требования являются противоречивыми, поскольку нас не интересуют все приближенные значения $z_k \approx z(t_k)$, а лишь необходим элемент $z(T)$.

Чтобы найти представление параметра τ_k , соответствующее требованиям минимальности вычислительных затрат при достижении с требуемой точностью решения z^* , вспомним, что метод Ньютона, обладая квадратичной сходимостью в близкой окрестности решения, обеспечивает минимальность невязки для линейной части $\varphi(z)$ [18].

Обобщая это свойство, будем рассматривать τ_k как итерационный параметр в итерациях (4), оптимальный выбор которого дает минимум функции перехода $\psi_{k+1}(\tau)$ в оценке [19]

$$\|\varphi(z_{k+1})\| \leq \psi_{k+1}(\tau_k) \|\varphi(z_k)\|.$$

Если предположить, что в окрестности искомого решения

$$\|\varphi'(z)^{-1}\| \leq B, \quad \|\varphi''(z)\| \leq M, \quad (5)$$

то функция перехода определяется как

$$\psi_{k+1}(\tau) = 1 - \tau + \frac{\tau^2}{2} MB^2 \|\varphi(z_k)\|, \quad 0 < \tau \leq 1.$$

В работе [19] показано, что алгоритм определения итерационного параметра

$$\tau_k = \|\varphi'(z_k)\|^{-1} \|\varphi(z_{k-1})\| \tau_{k-1}, \quad 0 < \tau_0 \leq \tau_k \leq 1 \quad (6)$$

обеспечивает при удачном выборе τ_0 вычисление последовательности $\{\tau_k\}$, близкой к оптимальной, и в случае сходимости переход итераций (4) в метод Ньютона. Следует отметить, что алгоритм (6) впервые был предложен в работе [20] и успешно применен к решению многих нелинейных задач [21].

В работе [19] исследована локальная сходимость итераций (4) с итерационным параметром (6).

Теорема 1 [19]. Пусть в сфере

$$\bar{D}_1 = \{ \|z - z_0\| < \frac{B}{1 - q_1} \|\varphi(z_0)\| \}$$

выполнены условия (5) и

$$q_0 = \frac{\tau_0}{2} MB^2 \|\varphi(z_0)\| < 1.$$

Пусть существует целое положительное число K такое, что

$$1) \quad 1 > \tau_k = \frac{\|\varphi(z_{k-1})\|}{\|\varphi(z_k)\|} \tau_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, K - 1.$$

2) $\tau_{k+j} = 1, \quad j = 0, 1, \dots$

3) $\tau_0 > q_1^K, q_1 = \psi_1(\tau_0)$.

Тогда уравнение (1) имеет решение $z^* \in \bar{D}_1$, к которому сходятся итерации (4), начиная с z_0 . Скорость сходимости определяется неравенством

$$\|z^* - z_k\| < Bq_1^{2^{(k-K)}-1+K} \|\varphi(z_0)\|, \quad k > K.$$

В этой работе также показано, что область сходимости итераций на основе НАМН при таком выборе τ_k шире, чем у классического метода Ньютона.

В силу того, что НАМН обеспечивает сходимость к решению уравнения (1) только в окрестности локального решения [1], весьма важной является проблема построения начальных приближений, которая, вообще говоря, не алгоритмуема и решается по-разному в зависимости от особенностей конкретной задачи.

В частности, при численном анализе большинства моделей теоретической физики обычно имеется априорная информация о характере решений, которая может учитываться при выборе начальных приближений.

В программном комплексе SLIPN4 [22], реализующем решение задачи Штурма — Лиувилля, для построения начальных приближений эффективно используется метод, предложенный в работе [23]. Он основан на алгоритме вычисления корней полинома методом Ньютона с удалением вычисленного корня [24]. В этой же работе, а также в [25] для исключения сходимости к уже найденному решению на каждой итерации производится дополнительная ортогонализация вычисляемого приближенного решения.

В работе [26] выполнено численное исследование некоторых параметрически зависимых задач в рамках различных физических моделей на основе сочетания ньютоновских итераций с методом продолжения [4]. Вычислительный процесс при этом организуется таким образом, что известное для некоторого набора параметров решение используется в качестве начального приближения при решении задачи с новыми значениями параметров. При этом малое изменение параметров и непрерывная зависимость решения задачи от них гарантируют сходимость ньютоновской итерационной схемы.

Следует отметить, что трудности при практическом применении НАМН могут быть вызваны близостью к нулю $\|\varphi'(z)\|$. Они связаны с тем, что система (4) в этом случае становится некорректной. Некоторые варианты регуляризации итерационного процесса (4) рассматриваются в работе [14].

В работе [27] предложена итерационная процедура, основанная на комбинации ньютоновских итераций и метода установления [28], преимущество которой перед схемой (4) состоит в более широкой применимости для случаев, близких к вырожденным ($\|\varphi'(z)\| \rightarrow 0$).

Оценки точности ньютоновских итерационных схем. Остановимся на вопросе точности вычислительных схем на основе НАМН. Как уже отмечалось,

при практической реализации ньютоновских итерационных схем уравнение (1) заменяется аппроксимирующим его уравнением в сеточном пространстве

$$\varphi_h(z_h) = 0. \quad (7)$$

Пусть z_h^* – точное решение уравнения (7). Тогда в сеточной норме справедлива следующая оценка:

$$\|z^* - z_h^k\| \leq \|z^* - z_h^*\| + \|z_h^* - z_h^k\|, \quad (8)$$

где z_h^k – приближение к решению, полученное после k -й итерации при выполнении условия

$$\|\varphi_h(z_h^k)\| \leq \varepsilon, \quad (9)$$

где $0 < \varepsilon \ll 1$.

Поскольку

$$\|z^* - z_h^*\| \leq O(h^p) \quad [29],$$

$$\|z_h^* - z_h^k\| \leq B\|\varphi_h(z_h^k)\| \quad [17],$$

то при $B\|\varphi_h(z_h^k)\| \ll O(h^p)$, что выполняется при задании достаточно малого ε в соотношении (9), точность полученного приближенного решения близка к теоретической оценке выбранного метода разностной аппроксимации уравнения (1):

$$\|z^* - z_h^k\| \sim O(h^p). \quad (10)$$

Ее можно детально исследовать на последовательности сгущающихся сеток. При этом возможно уточнение разностного решения с помощью экстраполяции Паде или Ричардсона (см., например, [8]).

В случае, если исходная задача является сингулярной, в оценку точности добавляется слагаемое, характеризующее ошибку аппроксимации сингулярной задачи соответствующей регулярной задачей [30]. Оценить эту погрешность можно путем проведения последовательных расчетов на расширяющихся интервалах. При этом добиваются такого соотношения параметров вычислительной схемы, чтобы основной вклад составляла погрешность разностного решения, т.е. чтобы выполнялось соотношение (10).

Отметим, что, согласно [31], классические спектральные задачи для линейных операторов могут трактоваться как нелинейные функциональные уравнения. Для этого задача на собственные значения вида

$$\mathcal{D}y - \lambda y = 0$$

доопределяется условием нормировки собственного элемента

$$\Gamma(y) = 0,$$

где Γ – нормировочный функционал, например,

$$(y, y) - 1 = 0.$$

В такой постановке задача на собственные значения представляет собой нелинейное функциональное уравнение (1) относительно неизвестного $z = \{\lambda, y\}$. Таким образом, НАМН может использоваться и при решении задач на собственные значения [21].

Обобщение НАМН. В настоящее время разработаны и широко используются различные модификации НАМН, увеличивающие его эффективность для конкретных классов задач и расширяющие область его применения.

Одной из таких модификаций, используемой в целом ряде работ, является обобщение НАМН, согласно которому параметризация уравнения (1) относительно дополнительного параметра t осуществляется с явной зависимостью φ от t . При этом непрерывный параметр t вводится в уравнение (1) так, чтобы при $t = 0$ получалось простое уравнение

$$\varphi(0, z(0)) \equiv \varphi_0(z_0) = 0,$$

которое можно легко решить, и

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t, z(t)) = \varphi(z).$$

Таким образом, для нелинейного функционального уравнения (1) строится эволюционное уравнение по непрерывному параметру t , подобное уравнению (3):

$$\frac{d}{dt} \varphi(t, z(t)) = -\varphi(t, z(t)), \quad 0 \leq t < \infty \quad (11)$$

с начальным условием $z(0) = z_0$.

Из уравнения (11), обозначив $A(t) = \varphi'_z(t, z(t))$, получаем

$$\frac{dz}{dt} = -A(t)^{-1} [\varphi(t, z(t)) + \varphi'_t(t, z(t))]. \quad (12)$$

Поскольку интеграл уравнения (11) есть $\varphi(t, z(t)) = e^{-t} \varphi(0, z_0)$, то $\|\varphi(t, z(t))\| \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, и следует ожидать асимптотически устойчивой сходимости $z(t)$ к искомому решению z^* .

При аппроксимации по схеме Эйлера уравнения (12) производится дискретизация непрерывного параметра $t : (t_0, t_1, \dots, t_k)$; $t_0 = 0$, $t_{k+1} - t_k = \tau_k$ и получается последовательность итераций

$$z_{k+1} = z_k + \tau_k V_k, \quad (13)$$

где

$$V_k = -B_k [\varphi(t_k, z_k) + \varphi'_t(t_k, z_k)], \quad B_k = A(t_k)^{-1}. \quad (14)$$

Вычисляя для каждого значения t_k итерационную поправку V_k и шаг τ_k , получаем новое приближение z_{k+1} к решению z^* . Итерационный процесс (13), (14) должен продолжаться до выполнения неравенства

$$\delta_k = \|\varphi(t_k, z_k)\| < \epsilon. \tag{15}$$

Один из вариантов параметризации на основе обобщения НАМН можно выполнить с использованием скалярной функции $g(t)$ [32], так называемой функции включения возмущения, такой, что $g(0) = g(\infty) - 1 = g'(\infty) = 0$, и представления функции $\varphi(t, z(t))$ в виде суммы

$$\varphi(t, z(t)) = \varphi_0(z(t)) + g(t)[\varphi(z(t)) - \varphi_0(z(t))]. \tag{16}$$

Считаем, что для уравнения $\varphi_0(z) = 0$ легко найти решение, или оно известно, а оператор $\varphi'_0(z)$ легко обратим. Такой вариант может рассматриваться как комбинация НАМН и метода вариации параметра [5].

В работе [33] функция $g(t)$ вычисляется в итерационном процессе через итерационную поправку, в работах [34—39] функциональная зависимость $g(t)$ задается явно.

Условия сходимости ньютоновского эволюционного процесса (11), (16) при $g(t) = 1 - \exp(-t)$ рассматриваются в работе [32].

Теорема 2 [32]. Пусть в сфере

$$D : \|z - z_0\| \leq \frac{B}{1 - q} \|\varphi(z_0)\|, \quad 0 < q < 1$$

функциональное уравнение (1) представляется как

$$\varphi(z) = \varphi_0(z) + \varphi_1(z) = 0,$$

параметрическая зависимость имеет вид

$$\varphi(t, z(t)) = \varphi_0(z(t)) + g(t)\varphi_1(z(t)),$$

существуют производные Фреше $\varphi'_0(z), \varphi'_1(z)$ и линейные производные $\varphi''_0(z), \varphi''_1(z)$, причем линейный оператор $\varphi'_0(z)$ обратимый, и имеют место неравенства

$$\|\varphi'_0(z)^{-1}\| \leq B, \quad \|\varphi'_1(z)^{-1}\| \leq C, \quad q = 2BC < 1.$$

Пусть также операторы φ''_0 и φ''_1 ограничены в окрестности каждой точки из сферы D . Тогда выполняется следующее:

- 1) Уравнение (11) имеет решение $z = z(t)$ для всех t из $[0, \infty)$, причем его значения лежат в D .
- 2) Существует предел $\lim_{t \rightarrow \infty} z(t) = z^*$, служащий корнем уравнения (1).

Теорема 3 [32]. Пусть уравнение (1) имеет единственное решение z^* в некоторой открытой области D пространства X , и в этой области выполнены все условия теоремы 2. Тогда существует сфера $S: \|z - z_0\| \leq \epsilon$, принадлежащая области D , такая, что для любого $z_0 \in S$ дифференциальное уравнение (11) имеет единственное решение $z(t)$ для всех $t \in [0, \infty)$ и $\lim_{t \rightarrow \infty} z(t) = z^*$.

Одно из преимуществ такого подхода заключается в конструктивном решении вопроса о выборе начального приближения, в качестве которого может быть использовано известное приближенное решение уравнения

$$\varphi_0(z) = 0.$$

Другая возможность применения рассматриваемого подхода состоит в построении модифицированных итерационных схем, где вместо обращения оператора $\varphi'(z)$ на каждой итерации происходит обращение производной специально выбранного оператора φ_0 , имеющего простую структуру. Вопросы сходимости таких схем также обсуждаются в работе [32].

В работах [35—39] параметризация указанного вида используется для разработки эффективных вычислительных схем повышенной точности.

В работах [34] представлены численные схемы на основе обобщения НАМН для решения интегродифференциальных уравнений, в которых интегральная часть уравнения рассматривается как возмущение и вводится через функцию включения.

Наличие интегрального оператора в задачах такого рода приводит к необходимости обращения аппроксимирующих его заполненных матриц высокого порядка на каждой итерации. Рассматриваемый подход позволяет избежать этой требующей значительных затрат компьютерных ресурсов операции и существенно упростить решение задачи.

Отметим, что, как показано в работе [32], реализация ньютоновского эволюционного процесса (12)—(14) приводит к процессам регуляризации ньютоновского типа, рассмотренным в работах [9, 40].

2.2. Ньютоновская итерационная схема с одновременным вычислением оператора, обратного к оператору производной нелинейной функции. Развитие векторно-параллельных вычислительных систем делает актуальной проблему разработки специальных алгоритмов и программ для эффективного использования возможностей этих систем. В этом разделе представлен модифицированный алгоритм на основе обобщенного НАМН, учитывающий эти возможности. В работе [41] разработан итерационный процесс, в котором обращение оператора производной нелинейной функции заменяется на каждой итерации на два умножения линейных операторов.

Идея такого подхода для нахождения обратных матриц в применении к методу вариации параметра была высказана в работах [42, 43]. Преимуществом его является отсутствие операции деления на протяжении всех вычислений. Этим исключаются и случаи деления на малое число, возможные при обращении плохо обусловленных матриц. Тем самым повышаются устойчивость и точность вычислений.

Тестовые расчеты, проведенные для ряда задач, подтвердили эффективность представленного алгоритма для векторно-параллельных систем, имеющих в ОИЯИ.

Описание модифицированного алгоритма. Будем рассматривать вместо уравнения (1) следующую систему функционально-операторных уравнений:

$$\begin{cases} \varphi(z) = 0, \\ BA - I = 0, \end{cases} \quad (17)$$

где $A = \varphi'_z, B = A^{-1}, I$ — единичный оператор.

Вводя непрерывный параметр t ($0 \leq t < \infty$) и переходя, согласно обобщенному НАМН, к системе эволюционных уравнений, получаем

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\varphi(t, z(t)) = -\varphi(t, z(t)), \\ \frac{d}{dt}[B(t)A(t) - I] = I - B(t)A(t). \end{cases} \quad (18)$$

После простых преобразований окончательно имеем

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}z(t) = -B(t)[\varphi(t, z(t)) + \varphi'_t(t, z(t))], \\ \frac{d}{dt}B(t) = [I - B(t)(A(t) + A'_t(t))]B(t). \end{cases} \quad (19)$$

Производя дискретизацию непрерывного параметра, на основе схемы Эйлера получаем формулы для вычисления $z_{k+1} = z(t_{k+1})$ и $B_{k+1} = B(t_{k+1})$, считая известными на каждом k -м шаге z_k и B_k :

$$\begin{cases} z_{k+1} = z_k + \tau_k V_k, \\ B_{k+1} = B_k + \tau_k W_k, \end{cases} \quad (20)$$

где

$$V_k = -B_k[\varphi(t_k, z_k) + \varphi'_t(t_k, z_k)], \quad (21)$$

$$W_k = [I - B_k(A_k + (A_k)'_t)]B_k. \quad (22)$$

Таким образом, имея начальное приближение z_0 и B_0 , можно последовательно найти все приближения z_k и B_k .

Итерационный процесс продолжается до выполнения неравенства (15).

Особенностью вышеизложенного алгоритма является параллельное вычисление обратного оператора B_k в итерационном процессе, что открывает дополнительные возможности для распараллеливания вычислительного процесса.

С другой стороны, обращение производной нелинейного функционального оператора в рассматриваемой модификации заменяется перемножениями вспомогательных операторов, что приводит при программной реализации к соответствующим операциям с аппроксимирующими их матрицами. Так как в скалярном варианте реализации одно обращение матрицы по времени близко ко времени умножения двух матриц [44], то время счета по модифицированной схеме должно быть приблизительно в два раза больше по сравнению с обычной схемой.

Однако с точки зрения векторизации операций [45] умножение матриц предпочтительнее обращения матрицы, и модифицированный алгоритм дает выигрыш по времени на векторной вычислительной системе. Естественно, что этот выигрыш будет получен за счет дополнительных затрат на объем памяти, необходимый для хранения дополнительных матриц.

Вопросы сходимости представленной итерационной схемы обсуждаются в работе [46].

Итерационная схема решения задачи на собственные значения для линейного интегрального уравнения. Рассмотрим в качестве иллюстрации итерационную схему для решения следующего уравнения:

$$\Phi(z) \equiv \begin{pmatrix} \varphi(z) \\ \Gamma(z) \end{pmatrix} = 0, \quad (23)$$

где

$$\Phi(z) \equiv y(x)(Q(x) - \lambda) + \alpha \int_0^R K(x, x')y(x')dx' = 0, \quad (24)$$

$K(x, x')$ известно, $z = (y(x), \lambda)$, условие нормировки имеет вид

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^R y^2(x)dx - N = 0. \quad (25)$$

Введем параметр $t(0 \leq t < \infty)$ и функцию "включения" $g(t) = 1 - e^{-t}$. Представим $\Phi(t, z)$ в виде

$$\Phi(t, z) = \Phi_0(z) + g(t)(\Phi(z) - \Phi_0(z)), \quad (26)$$

где $\Phi_0(z) = 0$ – некоторое простое функциональное уравнение с известным решением z_0 , используемым как начальное приближение.

Учитывая, что $z(t) = (y(x, t), \lambda(t))$, и переходя к эволюционному уравнению, получим для (26):

$$\begin{aligned} & [(\Phi_0(z(t)))'_y + g(t)[(\Phi(z(t)))'_y - (\Phi_0(z(t)))'_y]]y'_t = \\ & = -[\Phi_0(z(t)) + (g(t) + g'_t(t))(\Phi(z(t)) - \Phi_0(z(t)))] - \\ & - [(\Phi_0(z(t)))'_\lambda + g(t)((\Phi(z(t)))'_\lambda - (\Phi_0(z(t)))'_\lambda)]\lambda'_t(t). \end{aligned} \quad (27)$$

Применив подход, описанный выше, обозначив $y_k(x) = y(x, t_k)$, $g_k = g(t_k)$, $g'_k = g'(t_k)$, $v_k = y'_t(x, t_k)$, $\mu_k = \lambda'_t(t_k)$, $A_k = \Phi'_y$, $B_k = A_k^{-1}$, для каждого t_k с учетом (21), (22) получим

$$v_k = -B_k[G_k + \mu_k F_k], \quad (28)$$

$$W_k = [I - B_k(A_k + A'_{k_t})]B_k, \quad (29)$$

где

$$\begin{aligned} A_k(v_k(x)) = & \Phi'_{0_y}(z_k)v_k(x) + g_k[(Q(x) - \lambda_k)v_k(x) + \\ & + \alpha \int_0^R K(x, x')v_k(x')dx' - \Phi'_{0_y}(z_k)v_k(x)], \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} A'_{k_t}(v_k(x)) = & (\Phi'_{0_y}(z_k))'_t v_k(x) + g'_k[(Q(x) - \lambda_k)v_k(x) + \alpha \int_0^R K(x, x')v_k(x')dx' - \\ & - \Phi'_{0_y}(z_k)v_k(x)] - g_k v_k(x)[\mu_k + (\Phi'_{0_y}(z_k))'_t], \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} G_k = & \Phi_0(z_k) + (g_k + g'_k)[(Q(x) - \lambda_k)y_k(x) + \\ & + \alpha \int_0^R K(x, x')y_k(x')dx' - \Phi_0(z_k)], \end{aligned} \quad (32)$$

$$F_k = \Phi'_{0_\lambda}(z_k) - g_k(1 + \Phi'_{0_\lambda}(z_k)). \quad (33)$$

Итерационная поправка v_k вычисляется следующим образом:

$$v_k = v_k^{(1)} + \mu_k v_k^{(2)}, \quad (34)$$

где

$$v_k^{(1)} = -B_k G_k, \quad v_k^{(2)} = -B_k F_k. \quad (35)$$

Формула для вычисления μ_k выводится из условия нормировки (25) и имеет вид

$$\mu_k = \frac{N - \int_0^R y_k(x)(y_k(x) - 2v_k^{(1)}(x))dx}{\int_0^R 2y_k(x)v_k^{(2)}(x)dx}. \quad (36)$$

После вычисления итерационных поправок μ_k, v_k, W_k можно найти новое приближение по схеме Эйлера:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + \tau_k v_k, \\ \lambda_{k+1} &= \lambda_k + \tau_k \mu_k, \\ B_{k+1} &= B_k + \tau_k W_k. \end{aligned} \quad (37)$$

Численная аппроксимация уравнения (24) на дискретной сетке по x : ($0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = R$) приводит к системе n уравнений:

$$\Phi_i = y_i(Q_i - \lambda) + \alpha \sum_{j=1}^n K_{ij} y_j \xi_j, \quad (38)$$

где $y_i = y(x_i)$, $Q_i = Q(x_i)$, $K_{ij} = K(x_i, x_j)$, ξ_j — коэффициенты квадратурной формулы численного интегрирования. При этом операторы A, A'_t, F, G в формулах (28)—(33) аппроксимируются соответственно матрицами $\{a_{ij}\}$, $\{\tilde{a}_{ij}\}$ и векторами (F_i) , (G_i) . В частности, значения матричных элементов a_{ij} и \tilde{a}_{ij} на k -м шаге определяются следующим образом:

$$a_{ij} = a_{ij}^{(0)} + g_k[(Q_i - \lambda_k)\delta_{ij} + \alpha K_{ij}\xi_j - a_{ij}^{(0)}], \quad (39)$$

$$\tilde{a}_{ij} = \tilde{a}_{ij}^{(0)} + g'_k[(Q_i - \lambda_k)\delta_{ij} + \alpha[K_{ij}\xi_j - \tilde{a}_{ij}^{(0)}] - g_k[\mu_k + \tilde{a}_{ij}^{(0)}], \quad (40)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, $a_{ij}^{(0)}$ и $\tilde{a}_{ij}^{(0)}$ — элементы матриц, аппроксимирующих на дискретной сетке по x операторы $\Phi'_{0y}(z_k)$ и $[\Phi'_{0y}(z_k)]'_t$ соответственно.

2.3. Ньютоновская итерационная схема с параметрической зависимостью от асимптотики решений. Моделирование нелинейных эффектов в полевых моделях приводит к сингулярным нелинейным граничным задачам, зависящим от "внешних" физических параметров модели. Зачастую учет их дополнительных связей позволяет уменьшить количество параметров задачи. Следует отметить, что при этом возникают дополнительные условия, которые, как правило, связывают интегральные характеристики искомых решений с их асимптотическим поведением. Поскольку при этом группа зависимых параметров может быть заменена асимптотическими соотношениями для некоторых

искомых решений, можно говорить о постановке оригинальной граничной задачи, в которой уравнения зависят не только от искомых решений, но и явно от граничных условий для них.

Разработанная в [47] итерационная схема для решения этого нового типа задач использует комбинацию НАМН и метода продолжения по параметру [4]. Она дает возможность исследовать зависимость поведения решения от параметров задачи, включая "внешние" параметры физической модели и "внутренние" параметры вычислительной схемы.

Рассмотрим систему N уравнений, записанную в векторной форме

$$\mathbf{R}(\vec{y}) \equiv \vec{y}'' + \mathbf{F}(\vec{y}; \vec{y}'; x; \vec{c}) = 0, \quad 0 \leq x < \infty, \quad (41)$$

где штрих означает дифференцирование по x , \vec{c} – параметры задачи (M -компонентный вектор), \mathbf{F} – непрерывная вектор-функция своих аргументов $\vec{y}, \vec{y}', \vec{c}$, кроме того, как функция x может иметь сингулярность $1/x^p, p \leq 2$, при $x \rightarrow 0$.

Будем искать решение системы (41) (существование которого предполагается), удовлетворяющее асимптотическим условиям

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_L(\vec{y}) &\equiv \mathbf{G}_L(\vec{y}(x_L); \vec{y}'(x_L); x_L; \vec{c}) = 0, x_L \rightarrow 0, \\ \mathbf{R}_R(\vec{y}) &\equiv \mathbf{G}_R(\vec{y}(x_R); \vec{y}'(x_R); x_R; \vec{c}) = 0, x_R \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (42)$$

а также дополнительному функциональному условию

$$\mathbf{R}_A(\vec{y}) \equiv \mathbf{S}(\vec{y}; \vec{y}'; x, \vec{c}) = 0, \quad (43)$$

где \mathbf{G}_L и \mathbf{G}_R – N -компонентные вектор-функции, \mathbf{S} – p -компонентная вектор-функция, причем $p \leq M$. Заметим, что при $p = M$, разрешая уравнение (43) относительно \vec{c} (если это возможно) и подставляя в (41), можно полностью исключить параметры задачи. Если $p < M$, то всегда остаются свободные параметры. Далее, не нарушая общности, предположим, что $p = M$.

Таким образом, решая краевую задачу (41), (42) с учетом дополнительного условия (43), нужно найти неизвестные величины $\{\vec{y}(x), \vec{c}\}$. При численном решении сингулярной граничной задачи (41)–(43) на полуоси ($0 \leq x < \infty$) необходимо определить соответствующие граничные условия на конечном интервале ($0 \leq x \leq x_R$). При этом возникает дополнительная проблема, связанная с переносом асимптотических условий для искомых решений в конечные точки ($x = x_L, x = x_R$) и оценкой точности такого приближения. В общем случае такие оценки можно выполнить только численно,

используя расчеты для последовательности значений параметров x_L , x_R . Предположим, что граничные условия (42) для конечных значений $x_L = 0$ и $x_R < \infty$ достаточно точно учитывают асимптотические особенности искомых решений. Для решения задачи (41)–(43) на конечном интервале ($0 \leq x \leq x_R$) применим непрерывный аналог метода Ньютона. Ньютоновские итерации для этой задачи заключаются в решении на каждом шаге с номером k линейной задачи

$$\vec{v}_k'' + \mathbf{F}'_{\vec{y}} \vec{v}_k' + \mathbf{F}'_{\vec{y}} \vec{v}_k = -\mathbf{R}(\vec{y}) - \vec{\mu}_k^T \mathbf{F}'_{\vec{c}} \quad (44)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \mathbf{G}'_{L\vec{y}} \vec{v}_k'(0) + \mathbf{G}'_{L\vec{y}} \vec{v}_k(0) &= -\mathbf{R}_L(\vec{y}) - \vec{\mu}_k^T \mathbf{G}'_{L\vec{c}}, \\ \mathbf{G}'_{R\vec{y}} \vec{v}_k'(x_R) + \mathbf{G}'_{R\vec{y}} \vec{v}_k(x_R) &= -\mathbf{R}_R(\vec{y}) - \vec{\mu}_k^T \mathbf{G}'_{R\vec{c}} \end{aligned} \quad (45)$$

и дополнительным уравнением

$$\mathbf{S}'_{\vec{y}} \vec{v}_k' + \mathbf{S}'_{\vec{y}} \vec{v}_k = -\mathbf{R}_D(\vec{y}) - \vec{\mu}_k^T \mathbf{S}'_{\vec{c}} \quad (46)$$

относительно итерационной поправки $\vec{v}_k = \Delta \vec{y}_k, \vec{\mu}_k = \Delta \vec{c}_k$ к известному приближению $\{\vec{y}(x)_k, \vec{c}_k\}$ искомого решения. Решение системы (44) будем искать в виде

$$\vec{v}_k = \vec{v}_k^{(1)} + \vec{\mu}_k^T \vec{v}_k^{(2)}. \quad (47)$$

Подставляя (47) в (44) и (45), получим

$$(\vec{v}_k^{(1)})'' + \mathbf{F}'_{\vec{y}} (\vec{v}_k^{(1)})' + \mathbf{F}'_{\vec{y}} \vec{v}_k^{(1)} = -\mathbf{R}(\vec{y}), \quad (48)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}'_{L\vec{y}} (\vec{v}_k^{(1)}(0))' + \mathbf{G}'_{L\vec{y}} \vec{v}_k^{(1)}(0) &= -\mathbf{R}_L(\vec{y}), \\ \mathbf{G}'_{R\vec{y}} (\vec{v}_k^{(1)}(x_R))' + \mathbf{G}'_{R\vec{y}} \vec{v}_k^{(1)}(x_R) &= -\mathbf{R}_R(\vec{y}) \end{aligned} \quad (49)$$

и

$$(\vec{v}_k^{(2)})'' + \mathbf{F}'_{\vec{y}} (\vec{v}_k^{(2)})' + \mathbf{F}'_{\vec{y}} \vec{v}_k^{(2)} = -\mathbf{F}'_{\vec{c}}, \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}'_{L\vec{y}} (\vec{v}_k^{(2)}(0))' + \mathbf{G}'_{L\vec{y}} \vec{v}_k^{(2)}(0) &= -\mathbf{G}'_{L\vec{c}}, \\ \mathbf{G}'_{R\vec{y}} (\vec{v}_k^{(2)}(x_R))' + \mathbf{G}'_{R\vec{y}} \vec{v}_k^{(2)}(x_R) &= -\mathbf{G}'_{R\vec{c}}. \end{aligned} \quad (51)$$

Для нахождения функций $\vec{v}_k^{(1)}$ и $\vec{v}_k^{(2)}$ решаем граничные задачи (48)–(49) и (50)–(51). Затем, подставляя (47) в (46), получаем систему уравнений для нахождения $\vec{\mu}_k$. Таким образом, на каждой итерации надо решать краевые задачи (48)–(49), (50)–(51) и систему алгебраических уравнений (46) для

определения $\vec{\mu}_k$. Переход к следующему приближению осуществляется по формулам

$$\begin{aligned}\vec{y}_{k+1} &= \vec{y}_k + \tau_k \vec{v}_k, \\ \vec{c}_{k+1} &= \vec{c}_k + \tau_k \vec{\mu}_k,\end{aligned}\tag{52}$$

где τ_k — итерационный параметр, выбор которого может обеспечить оптимальные условия сходимости итераций [14]. Итерации прекращаются при выполнении условия

$$\delta_k < \epsilon,$$

где невязка δ_k может определяться как

$$\delta_k = \max_j \max_i \max_{x \in [x_L, x_R]} | \mathbf{R}_i(y_{ik}(x), c_{jk}) |, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

$\epsilon > 0$ — заданное малое число.

Рассмотренный подход к построению итерационных схем непосредственно применяется к уравнению (1) при фиксированном векторе параметров \vec{a} . Для исследования зависимости решения уравнения (1) от параметров \vec{a} целесообразно построить вычислительную схему на основе метода продолжения [4]. Этот метод позволяет использовать уже вычисленные решения при некотором значении \vec{a}_k как начальное приближение в итерациях для нахождения решения при новом значении вектора параметров $\vec{a}_{k+1} = \vec{a}_k + \Delta \vec{a}_k$. Известно [4], что конечную область изменения вектора параметров \vec{a} можно разбить узлами $\{\vec{a}_k\}$ так, что будет обеспечена сходимость даже классического метода Ньютона от выбранных таким образом начальных приближений. Область сходимости обсуждаемых итерационных схем шире, чем классического метода. Поэтому узлы $\{\vec{a}_k\}$ можно задавать более произвольно. Начинать вычисления следует от решений в асимптотических областях "физических" параметров. Таким образом, получается замкнутая схема численного анализа уравнения (1).

3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КВАНТОВО-ПОЛЕВЫХ САМОСОГЛАСОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО НАМН

Моделирование ряда физических процессов в конденсированных средах во многих случаях проводится в терминах автолокализованных состояний. Поэтому их изучение является весьма актуальной задачей, и в течение ряда лет большие усилия предпринимались для одночастичного самосогласованного

описания многочастичных систем (см., например, сборник [48] и ссылки в нем).

В качестве примера можно привести концепцию полярона [49], являющегося, с одной стороны, простейшей моделью квантовой теории поля, а с другой — имеющего многочисленные приложения в физике конденсированных систем. Отметим, что проблема полярона как нерелятивистской частицы, взаимодействующей с квантованным полем, была первоначально сформулирована как проблема автолокализованного электрона в ионном кристалле.

В настоящее время имеется большое число физических примеров, когда электрон образует автолокализованное состояние. К числу таких примеров относятся магнитоупорядоченные кристаллы, в которых возможно образование магнитных поляронов, полярные жидкости, в которых автолокализованные состояния представляют собой сольватированные электроны, и многие другие (см. ссылки в [48]). В случае заряженной пробной частицы, взаимодействующей с электронным газом, одночастичный спектр был исследован в приближении частицы, связанной с плазмонами и образующей автолокализованное состояние [50].

С математической точки зрения возникновение автолокализованных состояний связано с появлением при некотором значении константы взаимодействия пробной частицы с квантовым полем частицеподобных решений [51].

Моделирование нелинейных эффектов в конденсированных средах и квантово-полевых моделях приводит к нелинейным задачам на собственные значения для дифференциальных уравнений, зависящих от "внешних" физических параметров модели. Таким образом, центр тяжести проблемы в значительной степени связан с исследованием решений уравнений, возникающих при сильном взаимодействии частицы с полем, когда становится возможным образование автолокализованных состояний.

В настоящем разделе представлены постановки задач в рамках некоторых самосогласованных моделей, численное исследование которых проводилось с использованием ньютоновских итерационных схем. Это обобщенное уравнение полярона в рамках модели Латтинжера - Лу [52], самосогласованная модель сольватированного электрона [53] и квантово-полевая модель бинуклона в пределе сильной связи [54].

3.1. Уравнение полярона в рамках модели Латтинжера – Лу. *Общая постановка задачи.* В пределе сильной связи расчет характеристик (уровней энергии и волновых функций) полярона сводится к решению нелинейной системы дифференциальных уравнений на собственные значения

$$\begin{aligned}\Delta_r \Psi(\vec{r}) + \phi(\vec{r})\Psi(\vec{r}) + E\Psi(\vec{r}) &= 0, \\ \Delta_r \phi(\vec{r}) + C\Psi^2(\vec{r}) &= 0,\end{aligned}\tag{53}$$

в которой на функцию $\Psi(\vec{r})$ наложено условие $\int \Psi^2(\vec{r}) d\vec{r} = 1$ (здесь E – собственное значение, C – параметр). Система (53) была получена С.И.Пекаром из феноменологической теории [55]. В основополагающей работе Н.Н.Боголюбова [56] уравнения (53) были конструктивно получены из последовательной микроскопической теории движения нерелятивистской частицы, взаимодействующей с квантовым полем.

Сферически-симметричные решения системы (53) к настоящему времени достаточно хорошо изучены. Впервые приближенные решения системы (53) этого вида были получены в [55] для основного состояния путем применения прямого вариационного метода с выбором пробных функций в виде полиномов и экспонент. Уточнение вариационных расчетов основного состояния полярона выполнено в [57] с помощью численного интегрирования уравнений (53). В [58] для расчета основного состояния был использован НАМН. В [59] были впервые вычислены решения уравнений (53), отвечающие четырем различным возбужденным самосогласованным состояниям частицы в квантовом поле. Поскольку физико-химические реакции в конденсированных средах идут именно через возбужденные состояния, то количественное исследование их физических характеристик несомненно актуально. В связи с этим возрос и интерес к проблеме решения задачи о поляроне не только в пределе сильного взаимодействия, но и во всем интервале изменения константы связи частицы с полем. Физическая сторона проблемы отражена в многочисленных статьях и обзорах (см., например, обзор Чуева и Лахно в [48] и содержащиеся в нем ссылки).

Как известно, в настоящее время наилучшей аппроксимацией для полярона при промежуточных значениях электрон-фононной связи является фейнмановский подход [60] с использованием интегралов по траекториям. К сожалению, этот подход непосредственно применим для расчета лишь основного состояния полярона. По существу, этот метод аналогичен прямому вариационному методу для уравнения Шредингера. Заметным развитием подхода Фейнмана явилась работа Латтинжера и Лу [52], а также последующие публикации [61]. Эти работы позволяют переформулировать фейнмановский подход на языке дифференциальных уравнений. В настоящее время это единственный подход, позволяющий с помощью дифференциальных уравнений описать переход от предела слабой связи частицы с полем к пределу сильного взаимодействия. При этом существенно, что в пределе сильной связи получаемые уравнения являются асимптотически точными, т.е. переходят в уравнения Боголюбова — Тябликова, отвечающие пределу сильной связи.

Таким образом, простейшая согласованная модель полярона при произвольной связи получается из общей задачи, сформулированной в [62]. Согласно этой работе уровни энергии и волновые функции полярона $\{\epsilon_n, u(\vec{r})\}$ в рамках модели Латтинжера — Лу определяются задачей на собственные значения для интегродифференциального уравнения в трехмерном координатном

пространстве

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \nabla^2 - \frac{\alpha\sqrt{2}}{\mu} \int d\vec{r}' \frac{|u(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} (1 - e^{-C|\vec{r} - \vec{r}'|}) \right] u(\vec{r}) = \epsilon u(\vec{r}), \quad (54)$$

в которой ∇^2 – трехмерный оператор Лапласа, $\mu = m/(1+m)$ – приведенная масса электрона, α – константа связи, $C = \mu\sqrt{2}/\sqrt{1-\mu}$. Условие нормировки имеет следующий вид:

$$\int d\vec{r} |u(\vec{r})|^2 = 1.$$

Задача (54) может быть сформулирована в безразмерных величинах как нелинейная задача на собственные значения для системы уравнений:

$$\begin{aligned} \Delta\psi(\vec{r}) - \lambda\psi(\vec{r}) + A(V_1(\vec{r}) - V_2(\vec{r}))\psi(\vec{r}) &= 0, \\ \Delta V_1(\vec{r}) + |\psi(\vec{r})|^2 &= 0, \\ \Delta V_2(\vec{r}) - C^2 V_2(\vec{r}) + |\psi(\vec{r})|^2 &= 0 \end{aligned} \quad (55)$$

с условием нормировки

$$\int_0^\infty |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1, \quad (56)$$

где Δ – трехмерный оператор Лапласа, A и C – физические параметры задачи, λ – собственные значения, определяющие уровни энергии состояний полярона.

Сферически-симметричный случай. Представляя сферически-симметричные решения уравнения (54) в виде

$$u(\vec{r}) = x^{-1}\psi(x), \quad x = |\vec{r}|,$$

получаем следующую задачу на собственные значения, решения которой определяют уровни энергии и волновые функции полярона в сферически-симметричном случае [62]:

$$\psi''(x) - \lambda\psi(x) + A\psi(x)V(x, \psi(x)) = 0, \quad (57)$$

где

$$V(x, \psi(x)) = \frac{1}{x} \int_0^\infty D(x, x') \frac{\psi^2(x')}{x'} dx',$$

граничные условия имеют вид

$$\psi(0) = \psi(\infty) = 0,$$

условие нормировки

$$\int_0^{\infty} \psi^2(x) dx = \frac{1}{4\pi}, \quad (58)$$

$$D(x, x') = \begin{cases} x' - \frac{1}{C} \exp(-Cx) \sinh(Cx'), & x' < x, \\ x - \frac{1}{C} \exp(-Cx') \sinh(Cx), & x < x', \end{cases}$$

$A = 8\sqrt{2}\pi\alpha$, $\lambda = 2\mu\epsilon$, $\epsilon > 0$ – уровни энергии. В предельном случае сильной связи при $\mu = 1$, соответствующем постановке задачи для модели Пекара [55], функция $D(x, x')$ принимает вид

$$D(x, x') = \begin{cases} x', & x' < x, \\ x, & x < x'. \end{cases}$$

В работе [63] для решения указанной задачи использовалась составленная на основе модификации НАМН [64] программа.

Другая постановка задачи на собственные значения (57) имеет вид [65]:

$$\begin{cases} \psi''(x) - \lambda\psi(x) + A\psi(x) \frac{V_2 - V_1}{x} = 0, \\ V_1'' + \frac{\psi^2}{x} = 0, \\ V_2'' - CV_2 + \frac{\psi^2}{x} = 0 \end{cases} \quad (59)$$

с условием нормировки (58). Искомые решения системы (59) должны удовлетворять следующим асимптотическим условиям:

$$\psi(0) = \psi(\infty) = 0, \quad V_1(0) = V_1'(\infty) = 0, \quad V_2(0) = V_2(\infty) = 0.$$

Решения задачи (57) являются решениями задачи (59) и наоборот. В работе [65] для численного решения системы (59) применялся модифицированный алгоритм на основе НАМН, описание которого дается ниже для более общего сферически-несимметричного случая.

После ряда преобразований спектральная задача (57)—(59) может быть сведена [62] к параметрически-зависимой системе нелинейных уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} \phi'' - \phi + \frac{1}{x}\phi(W_1 - W_2) = 0, \\ W_1'' + \frac{1}{x}\phi^2 = 0, \\ W_2'' - a^2W_2 + \frac{1}{x}\phi^2 = 0 \end{cases} \quad (60)$$

с граничными условиями

$$\phi(0) = \phi(\infty) = 0, \quad W_1(0) = W_1'(\infty) = 0, \quad W_2(0) = W_2(\infty) = 0,$$

решения которой $z = \{\phi, W_1, W_2\}$ вычисляются для различных значений параметра a . Особенностью такой постановки является тот факт, что уровни энергии и другие физические параметры задачи могут быть определены лишь после того, как найдено решение системы для некоторого значения параметра a . В работе [62] представлена ньютоновская итерационная схема для численного исследования задачи (60). В этой работе впервые найдены первые пять сферически-симметричных состояний полярона. Отметим, что результаты решения задачи на собственные значения в постановках (57) и (59), полученные в [63] и [65] соответственно, согласуются с результатами [62].

Сферически-несимметричный случай. Если представить решение системы (55) в виде разложения по сферическим функциям $Y_{lm}(\theta, \phi)$:

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{\psi_{lm}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \\ V_i(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{V_{ilm}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \end{cases} \quad i = 1, 2 \quad (61)$$

и подставить это разложение в систему (55), умножая слева на $Y(\theta, \phi)^*$ и интегрируя по $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$, то получится следующая система уравнений для коэффициентов разложения $\psi_{lm}(r)$ и $V_{ilm}(r)$:

$$\psi_{lm}''(r) - \lambda \psi_{lm}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \psi_{lm}(r) + \frac{A}{r} \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} Q_{lm l_1 m_1}(r) \psi_{l_1 m_1}(r) = 0,$$

$$V_{1lm}''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} V_{1lm}(r) + S_{lm}(r) = 0, \quad (62)$$

$$V_{2lm}''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} V_{2lm}(r) - C^2 V_{2lm}(r) + S_{lm}(r) = 0, \quad l = 0, 1, 2, \dots, m = -l, \dots, l$$

с условием нормировки

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \int_0^{\infty} \psi_{lm}^2(r) dr = 1, \quad (63)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{lm l_1 m_1} &= \sum_{l_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} W_{lm l_1 l_2 m_2} (V_{1l_2 m_2}(r) - V_{2l_2 m_2}(r)), \\ S_{lm} &= \frac{1}{r} \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{l_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \bar{W}_{lm l_1 l_2 m_2} \psi_{l_1 m_1}(r) \psi_{l_2 m_2}(r), \end{aligned} \quad (64)$$

$$W_{lm_1 m_1 l_2 m_2} = \int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2}, \quad \bar{W}_{lm_1 m_1 l_2 m_2} = \int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2}^*.$$

Искомые решения системы (62) удовлетворяют следующим асимптотическим условиям:

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(r)_{r \rightarrow 0} &\rightarrow A_{1lm} r^{l+1}, & \psi_{lm}(r)_{r \rightarrow \infty} &\rightarrow A_{2lm} e^{-\sqrt{\lambda} r}, \\ V_{1lm}(r)_{r \rightarrow 0} &\rightarrow B_{1lm} r^{l+1}, & V_{1lm}(r)_{r \rightarrow \infty} &\rightarrow B_{2lm} r^{-l}, \\ V_{2lm}(r)_{r \rightarrow 0} &\rightarrow C_{1lm} r^{l+1}, & V_{2lm}(r)_{r \rightarrow \infty} &\rightarrow C_{2lm} r^{-Cr}, \end{aligned} \quad (65)$$

где $A_{1lm}, A_{2lm}, B_{1lm}, B_{2lm}, C_{1lm}, C_{2lm}$ – константы.

Численное решение задачи (62)–(64) с граничными условиями (65) производится на конечном интервале $0 \leq r \leq R_m$, $R_m \gg 1$ с ограничением количества членов в разложениях (61) числом L_m для $\psi(\vec{r})$ и числом $L_v = 2L_m$ для $V_i(r)$, $i = 1, 2$.

Как уже упоминалось, наиболее изученным является случай сферически-симметричных решений $\psi(r, \theta, \phi) \rightarrow \psi(r)$, соответствующий значению $L_m = 0$, когда задача (62)–(65) может быть сведена к представленным в предыдущем пункте постановкам.

Остановимся на более общем случае: $\psi(r, \theta, \phi) \rightarrow \psi(r, \theta)$. Тогда в разложении (61) функцию $Y_{lm}(\theta, \phi)$ надо заменить на

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta),$$

где P_l – полином Лежандра и $l = 0, 1, \dots, L_m$.

Вводя более удобные обозначения $\psi_{l0} = \psi_l$, $V_{1l0} = V_{1l}$, $V_{2l0} = V_{2l}$, $S_{l0} = S_l$, $Q_{l0l_1 0} = Q_{ll_1}$, $W_{l0l_1 0l_2 0} = W_{ll_1 l_2}$, с учетом вышеизложенных ограничений систему (62)–(65) можно переписать в виде

$$\psi_l''(r) - \lambda \psi_l(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \psi_l(r) + \frac{A}{r} \sum_{l_1=0}^{L_m} Q_{ll_1}(r) \psi_{l_1}(r) = 0, \quad l = 0, 1, \dots, L_m, \quad (66)$$

$$V_{1l}''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} V_{1l}(r) + S_l(r) = 0, \quad (67)$$

$$V_{2l}''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} V_{2l}(r) - C^2 V_{2l}(r) + S_l(r) = 0, \quad (68)$$

где $l = 0, 1, \dots, L_v$, а условие нормировки имеет вид

$$\sum_{l=0}^{L_m} \int_0^{R_m} \psi_l^2(r) dr = 1. \quad (69)$$

Здесь

$$Qu_1(r) = \sum_{l_2=0}^{L_v} W_{l_1 l_2} (V_{1l_2}(r) - V_{2l_2}(r)), \quad (70)$$

$$S_l(r) = \sum_{l_1=0}^{L_m} \sum_{l_2=0}^{L_m} W_{l_1 l_2} \psi_{l_1}(r) \psi_{l_2}(r), \quad (71)$$

$$W_{l_1 l_2}(r) = 2\pi \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l_2+1}{4\pi}} \int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l_1}(x) P_{l_2}(x) dx. \quad (72)$$

Учитывая асимптотические свойства решений (65), напомним краевые условия на конечном интервале $0 \leq r \leq R_m$:

$$\psi_{1A}(0)\psi'_l(0) - \psi'_{1A}(0)\psi_l(0) = 0, \quad (73)$$

$$\psi_{2A}(R_m)\psi'_l(R_m) - \psi'_{2A}(R_m)\psi_l(R_m) = 0, \quad (74)$$

$$V_{i1A}(0)V'_{il}(0) - V'_{i1A}(0)V_{il}(0) = 0, \quad (75)$$

$$V_{i2A}(R_m)V'_{il}(R_m) - V'_{i2A}(R_m)V_{il}(R_m) = 0, \quad (76)$$

где

$$\begin{aligned} \psi_{1A} &= A_{1l}r^{l+1}, & \psi_{2A} &= A_{2l}e^{-\sqrt{\lambda}r}, & V_{11A} &= B_{1l}r^{l+1}, \\ V_{12A} &= B_{2l}r^{-l}, & V_{21A} &= C_{1l}r^{l+1}, & V_{22A} &= C_{2l}e^{-Cr}, \end{aligned}$$

A_{il}, B_{il}, C_{il} – константы, $i = 1, 2$.

Практическая реализация НАМН применительно к рассматриваемой задаче приводит к необходимости решать на каждой итерации достаточно сложные системы из $(L_m + 2L_v + 3)$ нелинейных дифференциальных уравнений. В работе [67] для решения этой системы предлагается другой подход. По аналогии с методом расщепления [68] вместо системы $(L_m + 2L_v + 3)$ нелинейных дифференциальных уравнений можно последовательно решать более простые задачи — задачу на собственные значения для системы из $(L_m + 1)$ линейных дифференциальных уравнений (66) и $2(L_v + 1)$ краевых задач для линейных дифференциальных уравнений (67), (68).

Итерационная процедура для решения задачи (66)—(76) согласно [67] имеет следующую последовательность действий.

Задавшись некоторым набором $\{\lambda^{(0)}, \psi_l^{(0)}(r), l = 0, 1, \dots, L_m\}$ (начальное приближение), используя выражение (71), вычисляем коэффициенты $S_l(r)$ для (67), (68). Решая (67), (68) с граничными условиями (75), (76), находим $V_{1l}^{(0)}(r)$ и $V_{2l}^{(0)}(r)$. Затем, используя выражения (70)—(72), вычисляем

эффективные потенциалы $Q_{ll_1}^{(0)}(r)$. Далее, решая задачу на собственные значения для системы (66) с граничными условиями (73)—(74), условием нормировки (69) и найденным потенциалом $Q_{ll_1}^{(0)}(r)$, получаем новые функции $\{\lambda^{(1)}, \psi_l^{(1)}(r), l = 0, 1, \dots, L_m\}$, которые, в свою очередь, используются для вычисления решений $V_{1l}^{(1)}(r), V_{2l}^{(1)}(r)$ и построения эффективного потенциала $Q_{ll_1}^{(1)}(r)$ для следующей итерации.

Этот процесс продолжается до тех пор, пока собственные значения и волновые функции $\{\lambda^{(k)}, \psi_l^{(k)}(r), l = 0, 1, \dots, L_m\}$, а также функции $V_{il}^{(k)}(r), i = 1, 2, l = 0, 1, \dots, L_v$, получаемые после двух последовательных итераций, не будут совпадать друг с другом с заданной точностью ϵ , т.е. пока не выполнится условие

$$\delta \leq \epsilon,$$

где

$$\delta = \max \{ |\lambda^{(k+1)} - \lambda^{(k)}|, \max_{r_j \in [0, R_m]} \{ \max_{l \in [0, \dots, L_v], i=1,2} |V_{il}^{(k+1)}(r_j) - V_{il}^{(k)}(r_j)|, \max_{l \in [0, \dots, L_m]} | \psi_l^{(k+1)}(r_j) - \psi_l^{(k)}(r_j) | \} \}.$$

Аналогичный алгоритм использовался также в работе [65] для определения сферически-симметричных решений.

Отметим, что описанная итерационная процедура может рассматриваться как вариант сочетания метода установления с ньютоновскими итерациями, теоретическое обоснование сходимости которого дано в работе [27].

Представленный алгоритм успешно использовался при решении ряда других нелинейных задач.

Результаты численного анализа рассматриваемой задачи согласуются с теоретическими результатами работы [69]. Более общий случай $m \neq 0$ исследован в работе [70]. В этой работе представлен алгоритм на основе НАМН и результаты расчетов в пределе сильной связи.

3.2. Автолокализованные электронные состояния в жидкости. Для описания автолокализованных электронных состояний в жидкости, так называемого сольватированного электрона, в работе [71] используется система трех нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} \xi''(x) - \xi(x) + \xi(x) \frac{\eta_1(x) - \eta_2(x)}{x} = 0 \\ \eta_1''(x) + \frac{1}{x^2} \xi^2(x) = 0 \\ \eta_2''(x) - \frac{\alpha^2}{d} x \sinh\left(\frac{d\eta_2(x)}{x}\right) + \frac{b}{x} \xi^2(x) = 0 \end{cases} \quad (77)$$

с граничными условиями

$$\xi(0) = \xi(\infty) = \eta_1(0) = \eta_1'(\infty) = \eta_2(0) = \eta_2(\infty) = 0, \quad (78)$$

где α, b, d – параметры физической модели.

Эта же система с линеаризованным $[\sinh \frac{d\eta_2(x)}{x} \sim \frac{d\eta_2(x)}{x}]$ последним уравнением и с теми же граничными условиями (78) совпадает с системой (60) и решалась в [59].

Для некоторых физических моделей предполагаются дополнительные связи между этими параметрами. Для краевой задачи (77)–(78) выполняются условия

$$\begin{aligned} m &= \frac{dT_1^2}{5,2629 \cdot 10^2}, \\ n &= m \frac{d\alpha^2}{b \cdot 6,2125 \cdot 10^2}, \end{aligned} \quad (79)$$

а для задачи (60),(78) — условие

$$b \left(\frac{T_1^2}{\alpha} \right)^2 = 0,84713 \frac{m^2}{n}, \quad (80)$$

где

$$\begin{aligned} T_1 &= \int_0^\infty \xi^2(x) dx = \eta_1(\infty), \\ A_1 &= dT_1^2, \quad A_2 = d\alpha^2, \end{aligned} \quad (81)$$

m — эффективная масса электрона, n — концентрация ионов. Эти параметры m и n удобны тем, что определяются из экспериментальных данных.

Таким образом, с учетом условий (79) и (80) исходные краевые задачи, зависящие от трех независимых параметров, можно свести к краевым задачам с одним параметром и дополнительным условием (81), связывающим интегральное условие на одну искомую функцию с асимптотическим поведением другой функции.

Подобный подход позволяет сформулировать краевую задачу с дополнительными условиями, описанную в предыдущем разделе.

В случае задачи о сольватированном электроде мы имеем в обозначениях $\xi = y_1$, $\eta_1 = y_2$ и $\eta_2 = y_3$ систему (77) с граничными условиями

$$\begin{aligned} G_{L1} &\equiv y_1(0) = 0 \\ G_{L2} &\equiv y_2(0) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G_{L3} &\equiv y_3(0) = 0 \\
 G_{R1} &\equiv y_1'(x_R) + y_1(x_R) = 0 \\
 G_{R2} &\equiv y_2'(x_R) - C = 0 \\
 G_{R3} &\equiv y_3'(x_R) + \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} C y_3(x_R) = 0,
 \end{aligned} \tag{82}$$

аппроксимирующими асимптотические условия (78), и дополнительным условием

$$Q_1 \equiv \int_0^{x_R} y_1^2(x) dx - C = 0, \tag{83}$$

которая приводится в процессе итераций к системе линейных уравнений

$$\begin{cases}
 v_{1k}'' - v_{1k} + \frac{y_{2k} - y_{3k}}{x} v_{1k} + \frac{v_{2k} - v_{3k}}{x} y_{1k} = -R_1 \\
 v_{2k}'' + \frac{2}{x} y_{1k} v_{1k} = -R_2 \\
 v_{3k}'' - \frac{A_2}{A_1} C^2 \cosh\left(\frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x}\right) v_{3k} + \frac{2b}{x} y_{1k} v_{1k} = \\
 -R_3 + \mu \left(\frac{A_2}{A_1^2} 4C^3 x \sinh\left(\frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x}\right) - \frac{A_2}{A_1} 2C y_3 \cosh\left(\frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x}\right) \right)
 \end{cases} \tag{84}$$

с граничными условиями

$$\begin{cases}
 v_{1k}(0) = -G_{L1} \\
 v_{2k}(0) = -G_{L2} \\
 v_{3k}(0) = -G_{L3} \\
 v_{1k}'(x_R) + v_{1k}(x_R) = -G_{R1} \\
 v_{2k}(x_R) - \mu = -G_{R2} \\
 v_{3k}'(x_R) + \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} C v_{3k}(x_R) = -G_{R3} - \mu \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} y_{3k}(x_R)
 \end{cases} \tag{85}$$

и дополнительным уравнением

$$2 \int_0^{x_R} y_{1k}(x) v_{1k}(x) dx - \mu_k = -Q_1. \tag{86}$$

В работе [47] дается подробное описание алгоритма решения представленной задачи и демонстрируются полученные численные результаты.

3.3. Квантово-полевая модель бинуклона в пределе сильной связи. Проблеме описания бинуклона (связанного состояния нейтрона и протона) посвящено большое число работ, ссылки на которые содержатся в книгах и обзорах, посвященных данной тематике [72, 73]. Однако до сих пор эта задача остается актуальной, поскольку именно ее решение дает непосредственные сведения о ядерных силах.

В работах [74] рассчитаны основные характеристики бинуклона в рамках предложенной в [54] квантово-полевой модели. Согласно рассматриваемому подходу описание взаимодействия нуклонов с мезонным полем в пределе сильной связи сводится к системе нелинейных дифференциальных уравнений в трехмерном пространстве.

В соответствии с [54] функционал полной энергии в квантово-полевой модели бинуклона для случая точечного взаимодействия нуклонов со скалярным и псевдоскалярным мезонными полями имеет вид:

$$F = \frac{\hbar^2}{m} \int |\nabla\psi|^2 dV - \frac{g^2}{\pi} \int \frac{e^{-k_C|r-r'|/2}}{|r-r'|} |\psi(r)|^2 |\psi(r')|^2 dV dV' - \tilde{f}^2 \int (\sigma\nabla_r)(\sigma\nabla_{r'}) \frac{e^{-k_{\text{ПС}}|r-r'|/2}}{|r-r'|} |\psi(r)|^2 |\psi(r')|^2 dV dV', \quad (87)$$

где k_C – масса скалярного мезона, $k_{\text{ПС}}$ – масса псевдоскалярного мезона, m – масса нуклона, g, \tilde{f} – константы взаимодействия со скалярным и псевдоскалярным мезонными полями, σ – спиновый оператор (единичный вектор, направленный по оси z), \hbar – постоянная Планка.

Из условия минимума функционала (87) на классе функций $\psi(\vec{r})$, удовлетворяющих условию нормировки

$$\int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = 1, \quad (88)$$

можно получить систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2}{m} \Delta\psi - \varepsilon\psi + \frac{2g^2}{\pi} V_1\psi + 2\tilde{f}^2 [(\sigma\nabla_r)V_2]\psi = 0, \\ \Delta V_1 - \left(\frac{k_C}{2}\right)^2 V_1 = -4\pi|\psi|^2, \\ \Delta V_2 - \left(\frac{k_{\text{ПС}}}{2}\right)^2 V_2 = -4\pi(\sigma\nabla_r)|\psi|^2. \end{cases} \quad (89)$$

Далее, обозначая

$$V_3 = (\sigma\nabla_r)V_2$$

и полагая $\hbar^2 = 1$, перепишем систему (89) в виде:

$$\begin{cases} \frac{1}{m} \Delta\psi - \varepsilon\psi + \frac{2g^2}{\pi} V_1\psi + 2\tilde{f}^2 V_3\psi = 0, \\ \Delta V_1 - \left(\frac{k_C}{2}\right)^2 V_1 = -4\pi|\psi|^2, \\ \Delta V_3 - \left(\frac{k_{\text{ПС}}}{2}\right)^2 V_3 = -4\pi(\sigma\nabla_r)^2 |\psi|^2. \end{cases} \quad (90)$$

Решая систему (90) на классе функций $\psi(\vec{r})$, ограниченных при $0 < \vec{r} < \infty$, удовлетворяющих условию нормировки (88) и асимптотическим условиям

$$\begin{cases} \lim_{r \rightarrow 0} \psi(\vec{r}) = \text{const}, & \lim_{r \rightarrow 0} V_1(\vec{r}) = \text{const}, & \lim_{r \rightarrow 0} V_3(\vec{r}) = \text{const}, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = \text{const}, & \lim_{r \rightarrow \infty} V_1(\vec{r}) = \text{const}, & \lim_{r \rightarrow \infty} V_3(\vec{r}) = \text{const}, \end{cases} \quad (91)$$

можно определить уровни энергии ε и волновые функции ψ бинуклона. (Здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$). Тогда радиус бинуклона R и его квадрупольный момент Q вычисляются, соответственно, по формулам

$$R = \int d\vec{r} r |\psi|^2, \quad Q = \int d\vec{r} (3z^2 - r^2) |\psi|^2. \quad (92)$$

Выполнив преобразования вида

$$\vec{r} = r_0 \vec{r}', \quad \psi = \gamma \varphi, \quad (93)$$

систему (90) можно переписать в безразмерных величинах (черту над вектором \vec{r}' в дальнейшем опускаем)

$$\begin{cases} \Delta \varphi - \lambda \varphi + (V_1 + BV_3) \varphi = 0, \\ \Delta V_1 - k_1^2 V_1 = -|\varphi|^2, \\ \Delta V_3 - k_2^2 V_3 = -(\sigma \nabla_r)^2 |\varphi|^2, \end{cases} \quad (94)$$

где

$$\lambda = \varepsilon m r_0^2, k_1^2 = \left(\frac{k_C}{2}\right)^2 r_0^2, k_2^2 = \left(\frac{k_{\text{ПЦ}}}{2}\right)^2 r_0^2, B = \frac{\tilde{f}^2}{g^2} \frac{\pi}{r_0^2}, 8g^2 m r_0^4 \gamma^2 = 1. \quad (95)$$

С учетом замены переменных (93) перепишем выражения (88), (92) и (87) в следующем виде:

$$\hat{N} = \int d\vec{r}' |\varphi|^2 = \frac{1}{r_0^3 \gamma^2}, \quad R = r_0^4 \gamma^2 \hat{R}, \quad \hat{R} = \int d\vec{r}' r' |\varphi|^2, \quad (96)$$

$$Q = r_0^5 \gamma^2 \hat{Q}, \quad \hat{Q} = \int d\vec{r}' (3z'^2 - r'^2) |\varphi|^2, \quad F = (\varepsilon/\lambda)[(\hat{T} - W_{13}/2)/\hat{N}], \quad (97)$$

где

$$T = r_0 \gamma^2 \hat{T}, \quad \hat{T} = \int d\vec{r}' |\nabla \varphi|^2, \quad W_{13} = \int d\vec{r}' (V_1 + BV_3) |\varphi|^2. \quad (98)$$

Указанные величины связаны следующими соотношениями

$$R = r_0 (\hat{R}/\hat{N}), \quad Q = r_0^2 (\hat{Q}/\hat{N}). \quad (99)$$

Здесь выражения в скобках являются безразмерными.

Система дифференциальных уравнений для бинуклона (94) представляет собой нелинейную трехпараметрическую задачу на собственные значения. Численное интегрирование (94) в пределе $k_{\text{ПС}} \rightarrow \infty$ было осуществлено в [54]. Численное исследование задачи (94) для конечных $k_{\text{ПС}}$ выполнено в [74].

Приведем в качестве примера вариант постановки краевой задачи для системы (94) в частном случае, когда решения симметричны относительно оси, т.е. $\Phi(\rho, z, \phi) \rightarrow \Phi(\rho, z)$ (цилиндрическая система координат). Кроме того, мы переходим от полубесконечного интервала интегрирования к конечной области ($-z_M \leq z \leq z_M, 0 \leq \rho \leq \rho_M$). При этом описание бинуклона сводится к решению двумерной спектральной задачи для системы нелинейных дифференциальных уравнений.

Сформулируем постановку задачи таким образом, чтобы свести ее к одномерной системе уравнений.

Решение системы (94) в цилиндрической системе координат будем искать в виде

$$\begin{cases} \varphi(\rho, z) = \sum_{n=1}^{\infty} y_n(z) \Phi_n(\rho), \\ V_1(\rho, z) = \sum_{n=1}^{\infty} V_{1n}(z) \Phi_{1n}(\rho), \\ V_3(\rho, z) = \sum_{n=1}^{\infty} V_{3n}(z) \Phi_{3n}(\rho), \end{cases} \quad (100)$$

где собственные значения и функции $\{\mu_n, \Phi_n\}$ определяются как решения следующей спектральной задачи:

$$\begin{cases} \Phi_n'' + \frac{1}{\rho} \Phi_n' + \mu_n \Phi_n = 0, & 0 \leq \rho \leq \rho_M, \\ \Phi_n'(0) = 0, & \Phi_n'(\rho_M) - A_{\rho_M} \Phi_n(\rho_M) = 0, \\ \int d\rho \rho \Phi_n^2 = 1. \end{cases} \quad (101)$$

A_{ρ_M} определяется из соотношений

$$A_{\rho_M} = \left. \frac{\frac{d}{d\rho}[\Phi_A(\rho)]}{\Phi_A(\rho)} \right|_{\rho=\rho_M}, \quad \Phi_A(\rho) = \int_{-z_M}^{z_M} dz y_0(z) \varphi_A(z, \rho).$$

При нахождении наборов $\{\mu_{1n}, \Phi_{1n}\}$ и $\{\mu_{3n}, \Phi_{3n}\}$ функция φ_A заменяется, соответственно, на V_{1A} и V_{3A} , а функция $y_0(z)$ — соответственно, на V_{10} и V_{30} , где $y_0(z), V_{10}, V_{30}$ — некоторые начальные приближения. В частном случае можно использовать только один набор функций $\{\Phi_n\}$.

Подставляя разложение (100) в систему (94), получаем

$$\begin{cases} y_n'' - (\lambda + \mu_n)y_n + \sum_{m=1}^{\infty} W_{nm}y_m = 0, & n = 1, 2, \dots \\ V_{1j}'' - (k_1^2 + \mu_{1j})V_{1j} = -J_{1j}, & j = 1, 2, \dots \\ V_{3j}'' - (k_2^2 + \mu_{3j})V_{3j} = -J_{3j}, \end{cases} \quad (102)$$

где

$$W_{nm} = \sum_{j=1}^{\infty} [Q_{1njm}V_{1j} + BQ_{3njm}V_{3j}], \quad (103)$$

$$J_{1j} = \sum_{n,m=1}^{\infty} Q_{1njm}y_n y_m, \quad J_{3j} = \sum_{n,m=1}^{\infty} Q_{3njm} \frac{d^2}{dz^2}(y_n y_m), \quad (104)$$

$$Q_{ijnm} = \int_0^{\rho_M} d\rho \rho \Phi_n(\rho) \Phi_{ij}(\rho) \Phi_{im}(\rho), \quad i = 1, 3. \quad (105)$$

Функции y_n, V_{1j}, V_{3j} удовлетворяют следующим граничным условиям:

$$\begin{cases} y_n'(z_M) - A(z_M)y_n(z_M) = 0, & y_n'(-z_M) - A(-z_M)y_n(-z_M) = 0, \\ V_{1j}'(z_M) - A_1(z_M)V_{1j}(z_M) = 0, & V_{1j}'(-z_M) - A_1(-z_M)V_{1j}(-z_M) = 0, \\ V_{3j}'(z_M) - A_3(z_M)V_{3j}(z_M) = 0, & V_{3j}'(-z_M) - A_3(-z_M)V_{3j}(-z_M) = 0, \end{cases} \quad (106)$$

где

$$\begin{aligned} A(z_M) &= \left. \frac{d}{dz}[y_A(z)] \right|_{z=z_M} / y_A(z), & y_A(z) &= \int_0^{\rho_M} d\rho \rho \Phi_0(\rho) \varphi_A(z, \rho), \\ A_1(z_M) &= \left. \frac{d}{dz}[V_{1A}(z)] \right|_{z=z_M} / V_{1A}(z), & V_{1A}(z) &= \int_0^{\rho_M} d\rho \rho \Phi_{10}(\rho) V_{1A}(z, \rho), \\ A_3(z_M) &= \left. \frac{d}{dz}[V_{3A}(z)] \right|_{z=z_M} / V_{3A}(z), & V_{3A}(z) &= \int_0^{\rho_M} d\rho \rho \Phi_{30}(\rho) V_{3A}(z, \rho). \end{aligned}$$

Аналогично определяются коэффициенты $A(-z_M), A_1(-z_M)$ и $A_3(-z_M)$.
Условие нормировки для системы (102) принимает вид

$$\sum_n \int_{-z_M}^{z_M} dz y_n^2(z) = \frac{1}{2\pi r_0^3 \gamma^2} = \hat{N}_c.$$

С учетом разложения (100) формулы (96) и (97) для вычисления необходимых физических величин имеют следующий вид:

$$\hat{R} = 2\pi \int_{-z_M}^{+z_M} dz \int_0^{\rho_M} d\rho \rho \sqrt{(z^2 + \rho^2)} \varphi^2(z, \rho), \quad (107)$$

$$\hat{Q} = 2\pi \int_{-z_M}^{+z_M} dz \int_0^{\rho_M} d\rho \rho (2z^2 - \rho^2) \varphi^2(z, \rho), \quad (108)$$

$$F = (\varepsilon/\lambda) [\hat{T}_c - \hat{W}_c/2]/(2\pi N_c), \quad (109)$$

где

$$\hat{T}_c = 2\pi \int_{-z_M}^{+z_M} dz \int_0^{\rho_M} d\rho \rho \left[\left| \frac{\partial \varphi^2}{\partial \rho} \right| + \left| \frac{\partial \varphi^2}{\partial z} \right| \right],$$

$$\hat{W}_c = 2\pi \sum_{jnm} \int_{-z_M}^{+z_M} dz [V_{1j}(z) + BV_{3j}(z)] y_n(z) y_m(z).$$

Отметим, что, используя симметрию задачи, систему (102) можно решать на интервале $0 \leq z \leq z_M$. При этом нужно соответственно изменить граничные условия и условие нормировки.

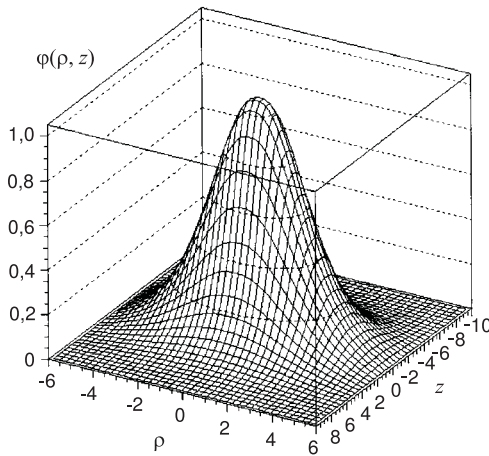


Рис. 1. Волновая функция $\varphi(\rho, z)$ бинуклона

Для численного исследования представленной задачи в работе [74] использовался модифицированный алгоритм на основе НАМН, аналогичный описанному в п. 3.1 (сферически-несимметричный случай). В качестве иллюстрации на рис.1 представлена волновая функция бинуклона $\varphi(\rho, z)$. Расчеты показали, что численные решения системы для двух нуклонов в пределе сильного взаимодействия в скалярном и псевдоскалярном поле позволяют получить согласованные с экспериментом значения энергии связи, эффективного радиуса и квадратурного момента дейтрона.

В заключение отметим, что система вида (53) возникает в самых различных случаях взаимодействия частицы с полем. Это, например, автолокализованные состояния электронов в электролитах [71, 75] и электронные состояния в биомакромолекулах [76, 77], в частности, перенос электронов в биосистемах на большие расстояния. К нелинейным самосогласованным системам приводят также некоторые модели ядерной физики (Хартри — Фока и Хартри — Фока — Слетера [78]).

Общим во всех указанных и многих других задачах является решение нелинейной самосогласованной спектральной задачи. Поэтому развитие методов численного исследования автолокализованных состояний приобретает весьма важное значение.

Разработанные для представленных выше задач алгоритмы и программы на основе НАМН имеют широкую область применения и могут использоваться для решения широкого круга нелинейных самосогласованных задач.

4. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ КВАРКОНИЯ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕНИЯ НАМН

Физические программы экспериментов на "мезонных фабриках" ставят перед теорией элементарных частиц задачу построения модели для единообразного описания спектра и формфакторов взаимодействия легких и тяжелых мезонов. В ряде работ [79—84] для решения этой задачи было использовано квантово-полевое обобщение нерелятивистской потенциальной модели одноглюонного обмена. Главной особенностью такого подхода является описание спонтанного нарушения киральной симметрии с помощью уравнения Швингера — Дайсона. При этом описание спектра мезонов сводится к решению краевых задач для уравнений Швингера — Дайсона (ШД) и Бете — Солпитера (БС) в трехмерной форме. Уравнение ШД описывает кварки "внутри" мезона и позволяет с помощью одного и того же феноменологического потенциала, используемого в спектроскопии тяжелых кваркониев, вычислить "динамическую" массу кварка, которая является мерой спонтанного нарушения киральной симметрии в области легких кварков. Решения уравнения БС (собственные значения и собственные функции) сопоставляются массам и волновым функциям свободных мезонов. Путем сравнения полученных решений с экспериментальными данными для масс и констант распадов исследуется вопрос построения эффективного потенциала КХД, не зависящего от аромата кварков. В пределе тяжелых кварков уравнения модели переходят в уравнение Шредингера.

В работах [80—84] кварковая потенциальная модель с различными феноменологическими потенциалами (типа гармонического осциллятора, линейно

растущего потенциала в комбинации с кулоновским и потенциала Ричардсона) была применена для описания широкого спектра масс мезонов, волновых функций и их констант лептонного распада (F_π и т.п.). Главным результатом авторы указанных работ считают описание на качественном уровне спектров масс всех мезонов, представляемых в виде связанных состояний кварка и антикварка. В частности, в [85] большая разность масс ρ - и π -мезонов получена в приближении осцилляторного потенциала как следствие спонтанного нарушения киральной симметрии без учета спин-спинового взаимодействия кварка и антикварка, которое обычно добавляют в потенциал взаимодействия. Вместе с тем в упомянутых выше работах для констант лептонных распадов мезонов (например, F_π) получены значения, значительно меньшие, чем экспериментальные данные.

Одна из трудностей численного исследования релятивистских потенциальных моделей (см., например, [85]) связана с тем, что в качестве эффективного потенциала в них, как и в нерелятивистском случае [86], обычно используется комбинация кулоновского и линейного потенциалов, что приводит к расходимостям в ядрах интегральных уравнений. В литературе для решения этой проблемы часто используется метод так называемой "перенормировки волновой функции кварка внутри мезона". По сути, устранение сингулярностей при этом происходит за счет дополнительно введенных в гамильтониан контрчленов. Отметим, что до сих пор нет самосогласованного способа регуляризации сингулярностей, когда кварк находится вне массовой поверхности и является составляющей адрона.

Другой путь преодоления проблемы сингулярностей предполагает модификацию исходного потенциала на уровне координатного представления путем его аппроксимации некоторыми функциями с "хорошими" свойствами. В частности, в работе [87] рассматривается ряд функций, аппроксимирующих кулоновский и линейный потенциалы. На примере нерелятивистского уравнения Шредингера проведено исследование свойств этих аппроксимаций и проведено сравнение с расчетами [88], где проблема расходимости решается другим способом.

С математической точки зрения задача ШД представляет собой систему двух нелинейных интегральных уравнений в трехмерном импульсном пространстве. Ее решениями являются волновая функция и функция энергии кварка, которые используются в уравнении БС. Постановка задачи дополняется асимптотическими условиями, из физических соображений накладываемыми на динамическую массу и энергию кварка.

Система уравнений БС в рамках рассматриваемой модели представляет собой задачу на собственные значения для системы линейных интегральных уравнений в трехмерном импульсном пространстве. Собственные значения и собственные функции системы БС имеют физический смысл уровней энергии и волновых функций мезона.

Таким образом, теоретические исследования характеристик кварков в рамках указанной модели приводят к численному решению сингулярных граничных задач для систем нелинейных дифференциальных, интегродифференциальных и интегральных уравнений. Эти задачи характеризуются счетным множеством решений, с помощью которых можно описать спектры кварков, которые, в свою очередь, зависят от физических параметров модели: массы и заряда кварка, характеристик модельного потенциала.

Исследование поставленных задач представляет собой сложную вычислительную проблему. Отметим, что в общем виде каждая из них может рассматриваться как нелинейное функциональное уравнение в B -пространстве [89]. Единый подход к численному анализу указанных задач, основанный на обобщенном непрерывном аналоге метода Ньютона, позволяет создавать эффективные вычислительные схемы, максимально учитывая специфику исследуемых задач. Разработанные алгоритмы и программы позволили успешно решить задачу вычисления спектров масс и констант лептонных распадов для ряда эффективных потенциалов взаимодействия.

Так, в [90] проведено численное исследование уравнений ШД и БС с осцилляторным потенциалом и получены решения для спектра мезонов (π, π', K, K'). В [91] для этого же потенциала вычислены спектры псевдоскалярных, скалярных, векторных и аксиально-векторных мезонов. В [92] найдены численные решения уравнений ШД и БС для потенциала, содержащего осцилляторный и кулоновский члены. В [93] в приближении потенциала Гаусса впервые удалось описать экспериментальное значение константы лептонного распада псевдоскалярного пиона. В [98–100] численный анализ модифицированных уравнений ШД и БС на основе НАМН был проведен для потенциалов Юкавы, комбинации осцилляторного и гауссовского, а также линейного и кулоновского членов.

Отметим, что явный вид указанных уравнений зависит от выбранного эффективного потенциала. Ниже представлена общая постановка задач ШД и БС в рамках рассматриваемого подхода, приводятся виды потенциалов, популярных в спектроскопии мезонов, а также обсуждаются методы численного исследования поставленных задач на основе обобщения НАМН.

4.1. Уравнение Швингера — Дайсона. Система уравнений ШД для заданного потенциала $V(|\vec{p} - \vec{q}|)$ согласно [84] имеет следующий вид:

$$\begin{cases} E(p) \cos(2v(p)) = m_0 + \frac{1}{2} \int d\vec{q} V(|\vec{p} - \vec{q}|) \cos(2v(q)) / (2\pi)^3 \\ E(p) \sin(2v(p)) = p + \frac{1}{2} \int d\vec{q} V(|\vec{p} - \vec{q}|) \xi \sin(2v(q)) / (2\pi)^3, \end{cases} \quad (110)$$

где интегрирование ведется в трехмерном пространстве координат вектора \vec{q} , $\xi = (\vec{p}/p, \vec{q}/q)$ – скалярное произведение единичных трехмерных векторов,

m_0 – заданная константа (токовая масса кварка), $E(p)$ и $v(p)$ – соответственно, энергия и волновая функция кварка, которые надо найти.

После интегрирования по углам $\Omega\vec{q}$ система (110) принимает вид

$$\begin{cases} E(p) \cos(2v(p)) = m_0 + I_1(p) \\ E(p) \sin(2v(p)) = p + I_2(p), \end{cases} \quad (111)$$

где

$$I_1(p) = \int_0^\infty dq V_1(p, q) \cos(2v(q)), \quad I_2(p) = \int_0^\infty dq V_2(p, q) \sin(2v(q)), \quad (112)$$

$$V_1(p, q) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} q^2 \int d\Omega V(|\vec{p} - \vec{q}|), \quad V_2(p, q) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} q^2 \int d\Omega \xi V(|\vec{p} - \vec{q}|). \quad (113)$$

Решения системы уравнений (111)–(113) зависят как от вида потенциала, так и от асимптотического поведения функций $V_1(p, q)$ и $V_2(p, q)$ при

$$p \rightarrow 0, \quad q = \text{const} \quad (\text{или } q \rightarrow 0, \quad p = \text{const}),$$

$$p \rightarrow \infty, \quad q = \text{const} \quad (\text{или } q \rightarrow \infty, \quad p = \text{const}),$$

$$|p - q| \rightarrow 0.$$

Кроме того, из физических соображений функции $I_1(p)$ и $I_2(p)$ должны удовлетворять определенным асимптотическим условиям при $p \rightarrow 0$ и $p \rightarrow \infty$:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} I_1 = 0, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} I_2 = 0, \quad \lim_{p \rightarrow 0} I_1 = \text{const} < \infty, \quad \lim_{p \rightarrow 0} I_2 = \text{const} < \infty. \quad (114)$$

Это накладывает ограничения на класс допустимых потенциалов.

При этом, как уже отмечалось, для некоторых потенциалов, используемых в спектроскопии адронов, интегралы $I_1(p)$ и $I_2(p)$ в асимптотике малых и больших импульсов имеют расходимости. Для их устранения в рамках множества выбранных потенциалов ряд авторов предлагает заменить систему (111) системой так называемых перенормированных уравнений (обычно такой прием используется в теории возмущений):

$$\begin{cases} E(p) \cos(2v(p)) = m_0(1 - Z_m) + I_1(p) \\ E(p) \sin(2v(p)) = p(1 - Z) + I_2(p), \end{cases}$$

где

$$Z_m = \text{const} < \infty, \quad Z = \text{const} < \infty.$$

Подбирая Z_m и Z , для некоторых потенциалов можно достичь выполнения требований (114), накладываемых на систему (111). Некоторые авторы предлагают постоянные Z_m , Z заменить функциями $Z_m(p)$, $Z(p)$ и подбирать их специальным образом. Эти вопросы обсуждаются, в частности, в работах [81–83].

Более общий подход к модификации системы (111) состоит в следующем. Сохраняя вид системы ШД, введем в выражение (112) некоторые новые функции $f_1(p, q)$ и $f_2(p, q)$:

$$\begin{cases} I_1(p) = \int_0^{\infty} dq V_1(p, q) \cos(2v(q)) f_1(p, q), \\ I_2(p) = \int_0^{\infty} dq V_2(p, q) \sin(2v(q)) f_2(p, q). \end{cases} \quad (115)$$

Выбирая различным образом функции f_1 и f_2 , мы получаем различные модификации уравнения ШД. Так, например, полагая

$$f_1 = \frac{\cos(2v(p)) - m_0/\sqrt{p^2 + m_0^2}}{\cos(2v(p))}, \quad f_2 = \frac{\sin(2v(p)) - 1}{\sin(2v(p))},$$

получаем систему уравнений ШД, рассмотренную в работе [82]. При $f_1 \equiv 1$ и $f_2 \equiv 0$ мы имеем один из вариантов модификации уравнения ШД, рассмотренный в работе [93], и т.д. В качестве вариантов выбора функций f_1 и f_2 могут рассматриваться, например, аналитические решения уравнения Шредингера с соответствующим потенциалом, а также функции вида $p^a \exp(-bp)$ или $cp^a/(p^a + 1)^b$ и т.п., где $a \geq 0, b \geq 1, c > 0$. Отметим, что поскольку решения $E(p)$ и $v(p)$ системы (111),(113),(115) описывают не свободные кварки, а кварки, находящиеся в связанном состоянии ("внутри мезона"), то выбор функций f_1 и f_2 можно связать не только с решениями системы ШД, но и с решениями $U_1(p)$ и $U_2(p)$ уравнения БС, т.е. $f_1 = f_1(p, U_1(p)), f_2 = f_2(p, U_2(p))$. Уравнения ШД и БС в этом случае надо решать как единую систему уравнений. Здесь мы не занимаемся физическим обоснованием замены системы (111)—(113) на систему (111),(113),(115) и конкретного выбора функций f_1 и f_2 . Критерием вида этих функций в данном случае является правильное асимптотическое поведение решений, отсутствие расхождений в интегралах I_1 и I_2 , а также качественное и количественное описание характеристик мезонов как связанных состояний кварка и антикварка.

Таким образом, система уравнений ШД сводится к решению краевой задачи для системы нелинейных уравнений (111),(113),(115) с граничными условиями

$$\lim_{p \rightarrow 0} v(p) = 0, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} v(p) = \pi/4, \quad \lim_{p \rightarrow 0} E(p) = \text{const}, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} E(p) = p.$$

4.2. Уравнение Бете — Солпитера. Рассмотрим уравнение БС для псевдоскалярных мезонов, состоящих из кварков с разными массами [84]:

$$ML_{\binom{2}{1}}(\vec{p}) = E_t(p)L_{\binom{1}{2}}(\vec{p}) - \quad (116)$$

$$- \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} V(|\vec{p} - \vec{q}|) [C_p^{(\pm)} C_q^{(\pm)} + \xi S_p^{(\pm)} S_q^{(\pm)}] L_{(\frac{1}{2})}(\vec{q}),$$

где

$$C_p^{(\pm)} = \cos(v_1(p) \pm v_2(p)), \quad S_p^{(\pm)} = \sin(v_1(p) \pm v_2(p)),$$

v_1, v_2 и E_1, E_2 – решения уравнения ШД для кварка и антикварка с токовыми массами m_{01} и m_{02} соответственно, $E_t(p) = E_1(p) + E_2(p)$ – полная энергия мезона, M – собственное значение (масса связанного состояния), $L_{(\frac{1}{2})}$ – волновые функции. Условие нормировки имеет вид:

$$\frac{4N_C}{M} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} L_1(\vec{q}) L_2(\vec{q}) = 1, \quad (117)$$

где $N_C = 3$ – квантовое число. Используя полученные решения системы (116), можно вычислить константы лептонных распадов псевдоскалярных мезонов:

$$F_\pi = \frac{4N_C}{M} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} L_2(\vec{q}) \cos(v_1(q) + v_2(q)). \quad (118)$$

Будем искать решения системы (116) в виде разложения по сферическим функциям $Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$L_{(\frac{2}{1})}(\vec{p}) = \frac{1}{p} \sum_{l,m} U_{(\frac{2}{1})lm}(p) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (119)$$

В сферически-симметричном случае ($l, m = 0$), обозначив для краткости $U_{(\frac{2}{1})00} = U_{(\frac{2}{1})}$, получаем

$$MU_{(\frac{2}{1})}(p) = E_t(p)U_{(\frac{1}{2})}(p) - 2 \int_0^\infty dq [C_p^{(\pm)} C_q^{(\pm)} \hat{V}_1(p, q) + S_p^{(\pm)} S_q^{(\pm)} \hat{V}_2(p, q)] U_{(\frac{1}{2})}(q), \quad (120)$$

$$\frac{4N_C}{M} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dq U_1(q) U_2(q) = 1, \quad (121)$$

где $\hat{V}_1(p, q) = \frac{p}{q} V_1(p, q)$, $\hat{V}_2(p, q) = \frac{p}{q} V_2(p, q)$, $V_1(p, q)$ и $V_2(p, q)$ определяются формулой (113).

Формула для константы лептонных распадов принимает вид:

$$F_\pi = \frac{4N_C}{M} \frac{1}{(2\pi)^3} \sqrt{4\pi} \int_0^\infty dq q U_2(q) \cos(v_1(q) + v_2(q)). \quad (122)$$

Решения системы (120) должны удовлетворять асимптотическим условиям

$$\lim_{p \rightarrow 0} U_{(1)}(p) = 0, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} U_{(1)}(p) = 0. \quad (123)$$

Таким образом, мы получили задачу на собственные значения для системы (120) с условием нормировки (121) и граничными условиями (123). Еще раз отметим, что в формулы, определяющие задачу БС, входят решения (v_1, E_1) и (v_2, E_2) системы ШД для двух масс кварков m_{01} и m_{02} .

4.3. Потенциалы взаимодействия. В этом разделе представлены наиболее часто используемые эффективные потенциалы взаимодействия и обсуждаются методы численного решения задач ШД и БС с этими потенциалами.

Потенциалы Гаусса и Юкавы. Потенциал Гаусса обычно используется для упрощения модели (например, [93, 94]). Координатное представление этого потенциала следующее

$$V_G = v_g \exp(-\mu^2 r^2) + C, \quad (124)$$

где C – константа, $v_g > 0$ и $\mu > 0$ – параметры. Приведем импульсное представление потенциала (124)

$$V(|\vec{p} - \vec{q}|) = \frac{v_g}{(\sqrt{\pi})^3} R^3 \exp(-R^2 |\vec{p} - \vec{q}|^2) + C(2\pi)^3 \delta(|\vec{p} - \vec{q}|), R = \mu/2. \quad (125)$$

Потенциал, представляющий собой разность двух потенциалов Юкавы, имеет координатную и импульсную форму соответственно:

$$V = \frac{\alpha}{r} \{ \exp(-\mu_1 r) - \beta \exp(-\mu_2 r) \} + C, \quad (126)$$

$$V(\vec{p} - \vec{q}) = 4\pi\alpha \left\{ \frac{1}{\mu^2_1 + |\vec{p} - \vec{q}|^2} - \frac{\beta}{\mu^2_2 + |\vec{p} - \vec{q}|^2} \right\} + C(2\pi)^3 \delta(|\vec{p} - \vec{q}|), \quad (127)$$

где α, μ_1, μ_2, C – параметры потенциала. При $\beta=0$ остается только один потенциал Юкавы. Очевидно, что при $\beta = 0, \mu_1 r \ll 1$ потенциал становится похожим на кулоновский. Случай разности двух потенциалов Юкавы ($\beta = 1$) при $\mu_1 \ll \mu_2$ можно рассматривать как способ регуляризации кулоновского потенциала в ультрафиолетовой области ($|\vec{p} - \vec{q}|^2 \gg \mu_2^2$).

Для решения перенормированной системы (111),(113),(115) с потенциалом (124),(125) при $f_1 \equiv 1, f_2 \equiv 0$ в работе [95] применялся модифицированный ньютоновский алгоритм [96]. При этом постановка задачи путем простых преобразований формулировалась в виде нелинейного интегрального уравнения для определения массовой функции кварка

$$m(p) = m_0 + \int_0^\infty dq V(q, p) m(q) / \sqrt{m^2(q) + q^2}, \quad (128)$$

где

$$V(p, q) = \alpha_g \frac{p}{q} [\exp(-\beta_g(p^2 + q^2)) \sinh(2\beta_g pq)], \quad (129)$$

α_g и β_g – параметры.

В работах [93, 98] для решения задачи ШД использовался представленный в [93] итерационный процесс. Отметим, что численные результаты, полученные при решении системы ШД указанным методом, согласуются с результатами решения уравнения (128)—(129), полученными на основе модифицированной ньютоновской итерационной схемы, описанной в [96].

Система БС (120) для потенциалов (124)—(125) и (126)—(127) представляет собой задачу на собственные значения для двух линейных интегральных уравнений с условием нормировки (121). Ее численное решение осуществлялось с использованием программного комплекса SYSINT (SYSINTM) [97], предназначенного для решения задачи на собственные значения для системы линейных интегральных уравнений с использованием модифицированных итерационных схем на основе обобщенного НАМН. При вычислении интегралов использовалась квадратурная формула Симпсона, обеспечивающая порядок аппроксимации $O(h^4)$, что подтверждается численными экспериментами на последовательности сгущающихся сеток с шагом аргумента $h, h/2, h/4$ (см. табл.1).

Таблица 1. $m_{01} = m_{02} = 0,01$

h	M (потенциал Гаусса) $\beta = 3$	M (потенциал Юкавы) $\mu_1 = 0,001, \mu_2 = 5, \alpha = 1,8$
0,100	0,192851	0,461893
0,050	0,202286	0,463275
0,025	0,201669	0,463363
$\sigma_M = \frac{M_h - M_{h/2}}{M_{h/2} - M_{h/4}}$	15,17	15,71

Осцилляторный и гауссовский потенциалы. Осцилляторный потенциал, координатное и импульсное представление которого, соответственно, имеет вид

$$V_O(r) = -v_0 r^2, \quad V_O(|\vec{p} - \vec{q}|) = -(2\pi)^3 v_0 \Delta_{\vec{p}} \delta(|\vec{p} - \vec{q}|), \quad (130)$$

часто используется как приближение линейного для упрощения модели [81, 90–92, 99]. При этом, как показано в работах [90, 91], уравнение ШД удается свести к нелинейному дифференциальному уравнению вида

$$\psi''(p) + 2\psi'(p)/p - 2p \sin \psi(p) + \sin 2\psi(p)/p^2 + 2m_0 - 2 \cos \psi(p) = 0 \quad (131)$$

с граничными условиями

$$\psi(0) = \pi/2, \quad \psi(\infty) = m_0/\sqrt{p^2 + m_0^2}.$$

В указанных работах численное исследование уравнения (131) проводилось с помощью ньютоновской итерационной схемы. В работе [99] рассматривалась некоторая модификация задачи (131), позволяющая более точно описать некоторые экспериментальные характеристики. Ее решение также осуществлялось на основе НАМН.

Рассмотрим более общий случай, а именно, комбинацию осцилляторного и гауссовского потенциалов:

$$V = V_G + V_O, \quad V_G = v_g \exp(-\mu^2 r^2) + C, \quad V_O = -v_o r^2. \quad (132)$$

Импульсное представление потенциала (132) имеет вид

$$V(|\vec{p} - \vec{q}|) = \frac{v_g}{(\sqrt{\pi})^3} R^3 \exp(-R^2 |\vec{p} - \vec{q}|^2) + C(2\pi)^3 \delta(|\vec{p} - \vec{q}|) - v_o(2\pi)^3 \Delta_{\vec{p}} \delta(|\vec{p} - \vec{q}|), \quad R = 1/(2\mu). \quad (133)$$

При этом выражения (112) принимают вид

$$\begin{cases} \tilde{I}_1 = [(\sin(\phi(\tilde{p})))'' + \frac{2}{p}(\sin(\phi(\tilde{p})))'] + \tilde{J}_1, \\ \tilde{I}_2 = [(\cos(\phi(\tilde{p})))'' + \frac{2}{p}(\cos(\phi(\tilde{p})))' - \frac{2}{p^2} \cos(\phi(\tilde{p}))] + \tilde{J}_2, \end{cases}$$

где

$$J_1 = \hat{\alpha} \int_0^\infty dq V_1(p, q) \cos(2v(q)), \quad J_2 = \hat{\alpha} \int_0^\infty dq V_2(p, q) \sin(2v(q)), \quad (134)$$

$$V_1 = R \frac{q}{p} [\exp(-R^2(p^2 + q^2)) \sinh(2R^2 pq)], \quad (135)$$

$$V_2 = \frac{1}{2} \frac{1}{Rp^2} \{ \exp(-R^2(p^2 + q^2)) [2R^2 pq \cosh(2R^2 pq) - \sinh(2R^2 pq)] \}. \quad (136)$$

Численное исследование системы (115),(134)—(136) проводилось в работе [100]. Уравнение ШД в этом случае сводится к нелинейной граничной задаче для одного интегродифференциального уравнения (при $V_g = 0$, $f_1 \equiv f_2 \equiv 1$ мы получаем дифференциальное уравнение (131)). Численное решение такой задачи осуществлялось с помощью модифицированного ньютоновского алгоритма, рассмотренного в работах [64].

Постановка задачи (120) для потенциала (132) имеет вид задачи на собственные значения для системы двух линейных интегродифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} MU_{(2)}(p) + U_{(2)}''(p) + W_{(2)}(p)U_{(2)}(p) = \\ = -2 \int_0^{\infty} dq [C_p^{(+)} C_q^{(-)} \hat{V}_1(p, q) + S_p^{(+)} S_q^{(-)} \hat{V}_2(p, q)] U_{(2)}(q), \end{aligned} \quad (137)$$

с условием нормировки (121), где

$$W_1 = -\left\{ E_t + \frac{1}{4}(\phi'_1 + \phi'_2)^2 + \frac{2}{p^2} \cos^2\left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right) \right\}, \quad (138)$$

$$W_2 = -\left\{ E_t + \frac{1}{4}(\phi'_1 - \phi'_2)^2 + \frac{2}{p^2} \sin^2\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right) \right\}, \quad (139)$$

$$\phi_i = -2v_i + \pi/2, \quad i = 1, 2.$$

Решение задачи (137)—(138) осуществлялось в [100] с помощью той же модификации НАМН, предложенной в [64]. Для случая $V_g = 0$, когда уравнения системы становятся дифференциальными, использовался программный комплекс SLIPS2 [25].

Комбинация кулоновского и линейного потенциалов. Координатное представление комбинации кулоновского и линейного потенциалов имеет вид

$$V(r) = -\alpha_c \frac{1}{r} + \sigma r, \quad (140)$$

где α_c и σ — параметры. В импульсном представлении имеем

$$V(|\vec{p} - \vec{q}|) = -\alpha_c \frac{4\pi}{|\vec{p} - \vec{q}|^2} - \sigma \frac{8\pi}{|\vec{p} - \vec{q}|^4}. \quad (141)$$

Используя тождество

$$\frac{1}{|\vec{p} - \vec{q}|^4} = \frac{1}{6} \Delta_p \frac{1}{|\vec{p} - \vec{q}|^2}, \quad (142)$$

систему (115) можно переписать следующим образом:

$$\begin{cases} E(p) \cos(2v(p)) = m_0 + I_{1K} + I_{1L}, \\ E(p) \sin(2v(p)) = p + I_{2K} + I_{2L}, \end{cases}$$

где

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} = -\frac{\alpha_c}{2\pi}, \quad \bar{\sigma} = -\frac{\sigma}{\pi}, \\ I_{1C} = \frac{\bar{\alpha} \hat{I}_{1C}}{p}, \quad I_{2C} = \frac{\bar{\alpha} \hat{I}_{2C}}{p}, \quad I_{1L} = \frac{\bar{\sigma} \hat{I}_{1C}''}{2p}, \quad I_{2L} = \frac{\bar{\sigma}}{2p} [\hat{I}_{2C}'' - \frac{2\hat{I}_{2C}}{p^2}], \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \hat{I}_{1C}(p) = \int_0^{\infty} dq q \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| \cos(2v(q)) f_1(p, q), \\ \hat{I}_{2C}(p) = \int_0^{\infty} dq q \left[-1 + \frac{p^2+q^2}{2pq} \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| \right] \sin(2v(q)) f_2(p, q). \end{cases}$$

Для численного решения такой системы в работе [101] использовался алгоритм, описанный в [93].

В работе [101] показано также, что уравнение БС для потенциала (140)—(141) удается свести к системе вида

$$\begin{cases} V_{13}(p)U_1''(p) + V_{12}(p)U_1'(p) + V_{11}(p)U_1(p) - MU_2(p) - 2J_{12}(U_1, U_2, p) = 0 \\ V_{23}(p)U_2''(p) + V_{22}(p)U_2'(p) + V_{21}(p)U_2 - MU_1(p) - 2J_{22}(U_1, U_2, p) = 0, \end{cases} \quad (143)$$

где функции J_{12} и J_{22} нелинейно зависят от собственных функций U_1, U_2 .

Для численного решения системы (143) в [101] была разработана модифицированная ньютоновская схема, аналогичная предложенному в [67] алгоритму, сочетающая НАМН с методом последовательных приближений. Вычислительная схема реализована на равномерной сетке по аргументу p с шагом h и имеет второй порядок сходимости, что подтверждается расчетами на последовательности вдвое сгущающихся сеток, представленными в табл. 2.

Таблица 2. Интервал [0,6], $m_0 = 0, 1, \bar{\alpha} = 0, 1, \bar{\sigma} = 0, 1$

h	M	$U_1(0, 6)$	$U_2(0, 6)$
0,100	1,7691	7,8183	6,6219
0,050	1,7744	7,7721	6,6048
0,025	1,7757	7,7607	6,6005
	$\frac{M_h - M_{h/2}}{M_{h/2} - M_{h/4}} = 4, 16$	$\frac{U_{1,h} - U_{1,h/2}}{U_{1,h/2} - U_{1,h/4}} = 4, 05$	$\frac{U_{2,h} - U_{2,h/2}}{U_{2,h/2} - U_{2,h/4}} = 3, 94$

Анализ численных результатов. В работах [93, 98, 100, 101] было проведено численное исследование уравнений ШД и БС с различными видами эффективных потенциалов. Решения получены для пиона как связанного состояния кварка и антикварка, имеющих ненулевые токовые массы.

Поскольку, как уже упоминалось выше, в ряде работ других авторов расчетные значения констант лептонного распада не соответствовали имеющимся экспериментальным данным, целью проведенных расчетов была попытка описания экспериментального значения константы лептонного распада F_π для основного состояния псевдоскалярного пиона.

Поэтому в качестве критерия выбора свободных параметров модели использовалось экспериментальное значение отношения массы и константы лептонного распада пиона $M_\pi/F_\pi \sim 1,04$. Для каждого из упомянутых выше потенциалов были найдены параметры и схема модификации системы ШД, удовлетворяющие указанному экспериментальному значению.

В частности, в работе [93] впервые было показано, что существует схема перенормировки решений задачи ШД, позволяющая описать значение F_π в рассматриваемом классе моделей.

Для фиксированных из условия выполнения этого соотношения параметров были вычислены также радиально возбужденные состояния пиона. Однако при указанном способе выбора параметров модели уровни энергии радиально возбужденных состояний оказались ниже имеющихся экспериментальных оценок, приведенных в [102]. Исключение составил осцилляторный потенциал [84], для которого энергии радиально возбужденных состояний существенно превышают экспериментальные данные.

4.4. Обобщение КХД-инспирированной модели на случай конечных температур. Обобщение уравнений ШД и БС на случай конечной температуры и барионной плотности, предложенное в работах [94, 103], интересно с точки зрения решения актуальной проблемы описания горячей и плотной адронной материи (кварк-глюонной плазмы) [104]. Поскольку до сих пор [105, 106] указанная проблема рассматривалась в основном в рамках модели Намбу — Иона-Лазинио [107], эквивалентной сепарабельному приближению [108] рассматриваемых уравнений, сравнение результатов численного решения полной системы уравнений ШД и БС с результатами, полученными в сепарабельном приближении, полезно для анализа применимости теоретической модели.

Такое исследование было проведено в [109]. Так же, как и в [93, 94], для упрощения модели использовался эффективный потенциал в виде гауссиана.

С точки зрения постановки задачи включение температурной зависимости приводит к появлению дополнительного уравнения для химического потенциала. В результате, как показано в [110], задача ШД принимает вид системы трех нелинейных интегральных уравнений в трехмерном импульсном пространстве

$$\begin{cases} E(p) \cos(2v(p)) = m_0 + \frac{1}{2} \int d\vec{q} V(|\vec{p} - \vec{q}|) [1 - f(q) - \bar{f}(q)] \cos(2v(q)) / (2\pi)^3, \\ E(p) \sin(2v(p)) = p + \frac{1}{2} \int d\vec{q} V(|\vec{p} - \vec{q}|) \xi [1 - f(q) - \bar{f}(q)] \sin(2v(q)) / (2\pi)^3, \end{cases} \quad (144)$$

$$\mu(p) = \mu_0 + \frac{1}{2} \int d\vec{q} V(|\vec{p} - \vec{q}|) [f(q) - \bar{f}(q)] / (2\pi)^3, \quad (145)$$

где

$$f(p) = \frac{1}{1 + \exp[\beta_T(E(p) - \mu(p))]}, \quad \bar{f}(p) = \frac{1}{1 + \exp[\beta_T(E(p) + \mu(p))]}. \quad (146)$$

Как и в п.4.1, интегрирование ведется в трехмерном импульсном пространстве, $\xi = (\vec{p}/p, \vec{q}/q)$ – скалярное произведение единичных трехмерных векторов, $\beta_T = 1/T$, T – температура, $E(p)$, $v(p)$, $\mu(p)$ – соответственно, энергия кварка, его волновая функция и химический потенциал, которые надо найти. Токовая масса кварка m_0 и начальный химический потенциал μ_0 рассматриваются в данном случае как заданные параметры модели.

После интегрирования по углам $\Omega\vec{q}$, перехода к безразмерным величинам и некоторых преобразований получаем систему

$$\begin{cases} \operatorname{ctg}(2v(p)) = \frac{m_0 + I_1(p)}{p + I_2(p)}, \\ E(p) = \frac{1}{2}C[1 - f(p) - \bar{f}(p)] + [m_0 + I_1(p)] \cos(2v(p)) + \\ \quad + [p + I_2(p)] \sin(2v(p)), \\ \mu(p) = \mu_0(p) + \frac{1}{2}C[f(p) - \bar{f}(p)] + \int_0^\infty dq V_1(p, q)[f(q) - \bar{f}(q)], \end{cases} \quad (147)$$

где

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty dq V_1(p, q)[1 - f(q) - \bar{f}(q)] \cos(2v(q)) f_1(p, q), \\ I_2 &= \int_0^\infty dq V_2(p, q)[1 - f(q) - \bar{f}(q)] \sin(2v(q)) f_2(p, q), \\ \begin{cases} V_1 = R \frac{q}{p} \exp(-R^2(p^2 + q^2)) \sinh(2R^2 pq), \\ V_2 = \frac{1}{2} \frac{1}{Rp^2} \exp(-R^2(p^2 + q^2)) [2R^2 pq \cosh(2R^2 pq) - \sinh(2R^2 pq)]. \end{cases} \end{aligned} \quad (148)$$

Перейдем теперь к рассмотрению задачи БС. Как показано в [110], в случае неравных токовых масс кварков для псевдоскалярных мезонов уравнение БС имеет вид задачи на собственные значения для системы четырех интегральных уравнений

$$\begin{aligned} (E^{(A)}(p) - M) L_{\left(\begin{smallmatrix} A \\ 1 \end{smallmatrix}\right)}^{(N)}(\vec{p}) = \\ = \alpha \begin{pmatrix} N \\ A \\ + \end{pmatrix} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} V(|\vec{p} - \vec{q}|) [c_p^{(+)} c_q^{(+)} + \xi c_p^{(-)} c_q^{(-)}] L_{\left(\begin{smallmatrix} A \\ 2 \end{smallmatrix}\right)}^{(N)}(\vec{q}), \end{aligned} \quad (149)$$

где

$$c_p^{(\pm)} = \cos(v_1(p) \pm v_2(p)), \quad s_p^{(\pm)} = \sin(v_1(p) \pm v_2(p)),$$

$$\alpha_{(\pm)}^{(A)} = (a_+^{(A)} \pm a_-^{(A)})/2, \quad E^{(A)} = E_1 \pm E_2,$$

$$a_+^N = 1 - f_1 - \bar{f}_2, \quad a_-^N = 1 - \bar{f}_1 - f_2, \quad a_+^A = f_2 - f_1, \quad a_-^A = \bar{f}_2 - \bar{f}_1$$

$$f_i = \frac{1}{1 + \exp[\beta_T(E_i - \mu_i)]}, \quad \bar{f}_i = \frac{1}{1 + \exp[\beta_T(E_i + \mu_i)]}, \quad i = 1, 2,$$

v_1, v_2, E_1, E_2 и μ_1, μ_2 – решения уравнения ШД и химический потенциал для кварка и антикварка с заданными токовыми массами m_{01} и m_{02} , M – собственное значение (масса связанного состояния), $L_{(1/2)}^{(A)}$ – волновые функции.

Условие нормировки имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{N_C}{M} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} & \left(\frac{(L_1^N(\vec{q}) + L_2^N(\vec{q}))^2}{a_+^N} - \frac{(L_1^N(\vec{q}) - L_2^N(\vec{q}))^2}{a_-^N} - \right. \\ & \left. - \frac{(L_1^A(\vec{q}) + L_2^A(\vec{q}))^2}{a_+^A} + \frac{(L_1^A(\vec{q}) - L_2^A(\vec{q}))^2}{a_-^A} \right) = 1. \end{aligned} \quad (150)$$

Константы лептонных распадов согласно [110] могут быть вычислены с использованием полученных решений по формуле

$$F_\pi = \frac{4N_C}{M} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} (L_2^N(\vec{q}) \cos(v_1(q) + v_2(q)) - L_2^A(\vec{q}) \sin(v_1(q) + v_2(q))). \quad (151)$$

Для сферически-симметричного случая, переходя к конечному интервалу интегрирования $[0, p_M]$, мы получаем задачу на собственные значения для системы четырех линейных интегральных уравнений.

Для случая равных токовых масс кварков $m_{01} = m_{02}$ система БС несколько упрощается и сводится к задаче на собственные значения для системы двух интегральных уравнений.

Для численного решения указанных уравнений применялись описанные в [93] алгоритмы и программы, существенно модифицированные с учетом специфики данной задачи. Для решения задачи ШД использовался метод простых итераций. Для решения системы БС использовалась программа SYSINT(SYSINTM) [97]. Поскольку введение дополнительных параметров – температуры и химического потенциала – делает задачу более громоздкой, для ее успешного решения применялся метод продолжения по параметру [4], позволяющий использовать в качестве начального приближения решения, уже полученные для других параметров задачи.

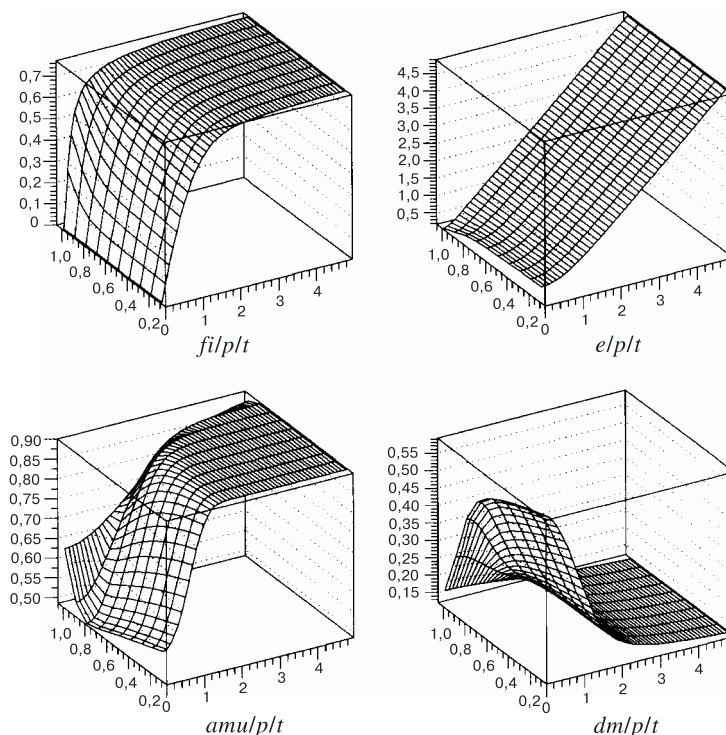


Рис. 2. Зависимость решений уравнения ШД от температуры T и импульса P ($v(T, p) = fi/p/t$, $E(T, p) = e/p/t$, $\mu(T, p) = amu/p/t$ и $m(T, p) = E(T, p) \cos(2v(T, p)) = dm/p/t$) для токовой массы кварка $m_0 = 0,1$ и начального химического потенциала $\mu_0 = 0,9$ при $I_2 = 0$

В табл. 3 представлены некоторые результаты расчетов на последовательности вдвое сгущающихся сеток, которые подтверждают, что вычислительная схема имеет порядок сходимости $O(h^4)$, соответствующий порядку численной аппроксимации задачи.

Решения задач ШД и БС для некоторых значений параметров приведены на рис.2–4. Нужно заметить, что качественное поведение решений рассматриваемых задач в модифицированном варианте (при $I_2 \equiv 0$) аналогично результатам, полученным в [110] для модели Намбу — Иона-Лазинио.

Отметим, что разработанное программное обеспечение позволяет получать решения для различных значений параметров задачи (массы кварков, температуры и начального значения "химпотенциала"). Поэтому необходимы дополнительные условия для определения решений, интересных для физических исследований.

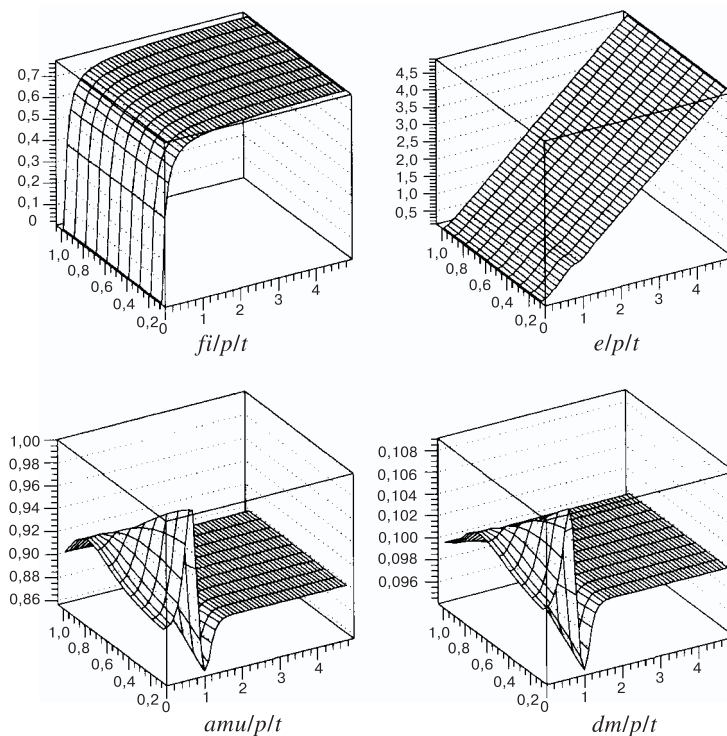


Рис. 3. Зависимость решений уравнения ШД от температуры T и импульса P ($v(T, p) = fi/p/t$, $E(T, p) = e/p/t$, $\mu(T, p) = amu/p/t$ и $m(T, p) = E(T, p) \cos(2v(T, p)) = dm/p/t$) для токовой массы кварка $m_0 = 0, 1$ и начального химического потенциала $\mu_0 = 0, 9$ для немодифицированной системы ($I_2 \neq 0$)

Следует отметить также, что разработанный подход к решению рассматриваемых задач и созданное программное обеспечение позволяют проводить численный анализ теоретических моделей и для потенциалов другого вида (например, в виде функции Юкавы).

Численное исследование уравнений ШД и БС с различными видами потенциалов показывает, что в рамках рассматриваемого подхода возможно количественное описание некоторых из имеющихся экспериментальных данных. Так, с применением комбинации кулоновского и линейного потенциалов получено удовлетворительное описание спектров масс и констант лептонных распадов тяжелых кваркониев. В приближении осциляторного потенциала удается описать спектры масс как тяжелых, так и легких кваркониев. В работе [93] на примере потенциала Гаусса впервые была показана возможность правильного описания константы распада для основного состояния

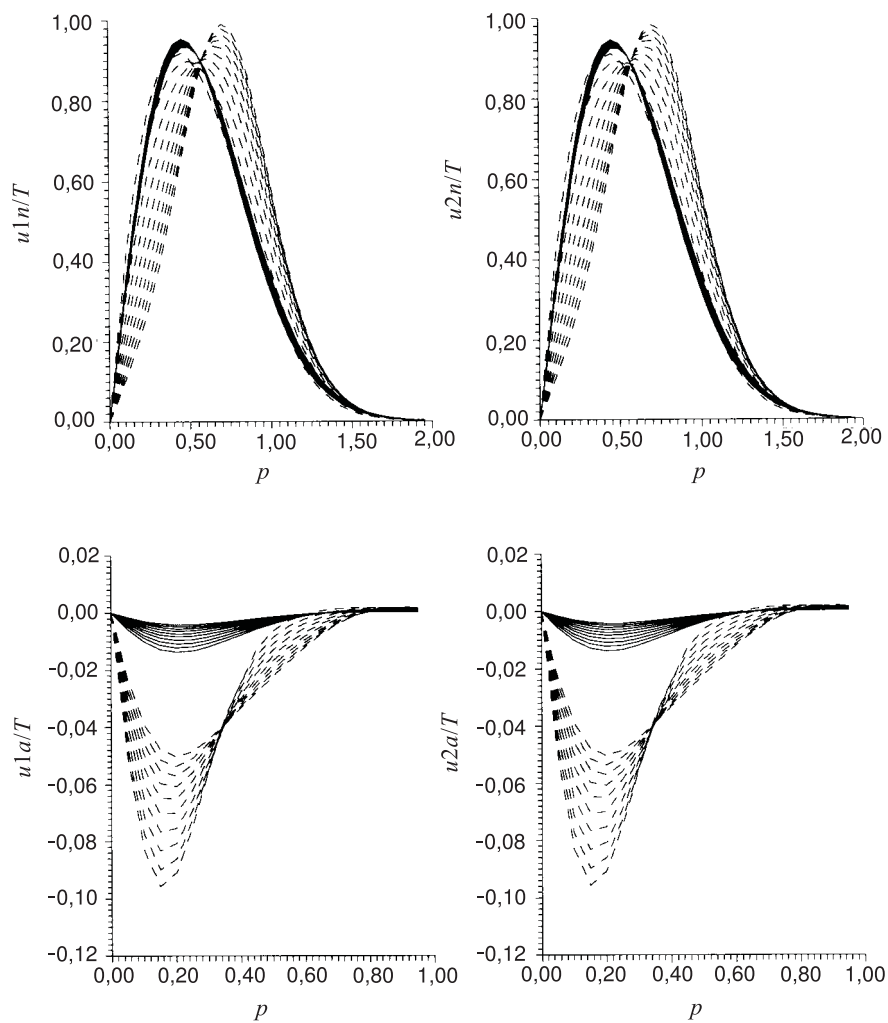


Рис. 4. Волновые функции уравнений БС в зависимости от температуры $T = 0, 1(0, 1)1$; для токовых масс кварков $m_{01} = 0, 8, m_{02} = 0, 4$ и $\mu_0 = 1$; для $I_2 = 0$ — сплошные и для $I_2 \neq 0$ — пунктирные кривые

Таблица 3. $m_{01} = m_{02} = 0, 1, T = 0, 1, \mu_0 = 1$

h	M	$U_1(1, 96)$	$U_2(1, 96)$
0,07	0,5150346	0,6175460E-02	0,5610517E-02
0,035	0,5150543	0,6176788E-02	0,5611749E-02
0,0175	0,5150554	0,6176862E-02	0,5611821E-02
	$\frac{M_h - M_{h/2}}{M_{h/2} - M_{h/4}} = 17, 9$	$\frac{U_{1,h} - U_{1,h/2}}{U_{1,h/2} - U_{1,h/4}} = 17, 9$	$\frac{U_{2,h} - U_{2,h/2}}{U_{2,h/2} - U_{2,h/4}} = 17, 1$

пиона. Аналогичные результаты получены для потенциала Юкавы и комбинации осцилляторного потенциала с гауссовским.

Проведенные численные исследования системы нелинейных уравнений, включающей сингулярную граничную и спектральную задачи, показали эффективность вычислительных схем, построенных на основе обобщения непрерывного аналога метода Ньютона. Их широкие возможности продемонстрированы как для задач ШД и БС без учета температурного фактора, так и для обобщения этих уравнений на случай ненулевой температуры и барионной плотности.

Анализ полученных результатов может служить основой для дальнейшего развития используемых теоретических подходов и их экспериментальной проверки.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В предлагаемом обзоре дано систематическое описание вычислительного аппарата для исследования задач, возникающих в некоторых квантово-полевых моделях и потенциальных моделях КХД. Единой основой для разработки вычислительных схем служит обобщение непрерывного аналога метода Ньютона, которое представляет собой качественно новое развитие НАМН на основе объединения идей методов теории возмущений и эволюции по параметрам. Показано, что с помощью излагаемого подхода можно построить эффективные итерационные схемы с оптимальным шагом, дающие возможность обращаться на каждом итерационном шаге регулярную часть линейного оператора производной или избежать обращения этого оператора. Дано обоснование сходимости разработанных вычислительных схем и показана их связь с рядом существующих методов.

В обзоре представлены результаты численного исследования моделей теории полярона, биполярона, сольватированного электрона и потенциальных моделей КХД с различными типами потенциалов.

Как результат, продемонстрирован эффективный численный метод исследования широкого класса нелинейных моделей теоретической физики.

НАМН, развиваемый в ОИЯИ на протяжении более тридцати лет, и сегодня подтверждает свою жизнеспособность. Причиной этого является его тесная связь с практическими задачами математического моделирования физических процессов, откуда непрерывно поступают как новые требования к методу, так и новые идеи, стимулирующие его развитие.

Авторы благодарны профессору Е.П.Жидкову за внимание к работе и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. — ЭЧАЯ, 1973, т.4, в.1, с.127.
2. Жидков Е.П., Хоромский Б.Н. — ДАН СССР, 1976, т.231, в.5, с.1052;
Жидков Е.П., Перельштейн Э.А., Иванов И.Н. и др. — ЖВМ и МФ, 1975, т.15, в.5, с.1241;
Жидков Е.П., Визнер Я., Лелек В. и др. — ЭЧАЯ, 1978, т.9, в.3, с.710.
3. Като Т. — Теория возмущений линейных операторов. М.: Мир, 1972.
4. Ортега Дж., Рейнболдт В. — Итерационные методы решения нелинейных систем со многими неизвестными. М.: Мир, 1975.
5. Давиденко Д.Ф. — Укр. матем. журнал, 1955, т.7, в.1, с.18.
6. Киржниц Д.А., Такибаев Н.Г. — ЯФ, 1977, т.25, с.700
7. Марчук Г.И. — Методы расщепления. М.: Наука, 1988.
8. Марчук Г.И., Шайдуров В.В. — Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979.
9. Александров Л. — Дифференциальные уравнения, 1977, т.13, в.7, с.1281.
10. Системы параллельной обработки. Ред. Ивенс Д., М.: Мир, 1985.
11. Blum E.K., Chang A.F. — J. Inst. Math. Appl., 1978, v.22, p.29.
12. Bacci L., Fiorentini G. — Phys.Rep. 1982, v.86, p.169.
13. Puzyrin I.V., Vinitsky S.I. — J.Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.307.
14. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. — ЖВМ и МФ, 1981, 21, с.491.
15. Лебедев К.А. — ЖВМ и МФ, 1996, т.36, в.3, с.6.
16. Родионов И.Д. — Автореф. дисс. на соиск. уч. степ. д.ф.м.н., Дубна, 1987.
17. Гавурин М.К. — Изв.вузов. Сер. матем., 1958, т.5(6), с.18.
18. Кивистик Л.А. — Докл. АН СССР, 1961, т.136, в.1, с.22.
19. Жанлав Т., Пузынин И.В. — ЖВМ и МФ, 1992, т.32, в.6, с.846.
20. Пузынин И.В. — Дисс. на соиск. уч. ст. к.ф.м.н., Дубна, 1969.
21. Пузынин И.В. — Дисс. на соиск. уч. ст. д.ф.м.н., Дубна, 1978.
22. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. — Сообщение ОИЯИ, P11-87-332, Дубна, 1987.

23. Акишин П.Г., Пузынин И.В. — Сообщение ОИЯИ, 5-10992, Дубна, 1977.
24. Уилкинсон Дж.Х. — Алгебраическая проблема собственных значений. М.: Наука, 1970.
25. Пузынина Т.П. — Сообщение ОИЯИ, P11-89-728, Дубна, 1989.
26. Стриж Т.А. — Дисс. на соиск. уч. ст. канд. физ.-мат. наук, Дубна, 1988.
27. Жанлав Т., Пузынин И.В. — ЖВМ и МФ, 1994, т.34, в.2, с.175.
28. Бахвалов Н.С. — Численные методы. М.: Наука, 1976.
29. Самарский А.А. — Теория разностных схем. М.: Наука, 1980.
30. Глазман И.М. — Прямые методы качественного спектрального анализа сингулярных дифференциальных операторов. М.: Физматгиз, 1963.
31. Канторович Л.В. — УМН, 1956, т.11, в.6, с.90.
32. Жанлав Т., Пузынин И.В. — ЖВМ и МФ, 1992, т.31, в.1, с.3.
33. Веницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. — Сообщение ОИЯИ, P4-10942, Дубна, 1977.
34. Веницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. — Сообщение ОИЯИ, P11-81-837, Дубна, 1981;
Веницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. — Сообщение ОИЯИ, P11-82-314, Дубна, 1982;
Веницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. — Сообщение ОИЯИ, P11-82-315, Дубна, 1982.
35. Веницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. — Сообщение ОИЯИ, P11-91-327, Дубна, 1991.
36. Жанлав Т., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. — Сообщение ОИЯИ, P11-90-501, Дубна, 1990.
37. Веницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. — Ядерная физ., 1990, т.52, в.4(10), с.1176.
38. Жанлав Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. — Сообщение ОИЯИ, P11-88-823, Дубна, 1988.
39. Бояджиев Т.Л., Жанлав Т., Пузынин И.В. — Сообщение ОИЯИ, P11-89-423, Дубна, 1989.
40. Александров Л. — ЖВМ и МФ, 1970, т.11, в.1, с.36.
41. Puzynin I.V., Amirkhanov I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V. — JINR Rapid Comm., 1993, No.62, p.63.
42. Давиденко Д.Ф. — Докл. АН СССР, 1960, т.131, No.3, с. 500.
43. Holbrow W., Hass R., Kalaba R., Zagustin E. — Report University of Southern California, Los Angeles, 1972.
44. Калиткин Н.Н. — Численные методы. М.: Наука, 1978.
45. Ортега Дж. — Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991.
46. Airapetyan R.G., Puzynin I.V. — Comp. Phys. Comm., 1997, v.102, p.97.
47. Амирханов И.В., Пузынин И.В., Стриж Т.А. — Сообщение ОИЯИ, P11-91-454, Дубна, 1991.
48. Perspectives of polarons. Eds. G.N.Chuev, V.D.Lakhno, World Scientific, Singapore, 1996.
49. Фирсов Ю.А. — Поляроны. М.: Наука, 1975.
50. Lakhno V.D. — In: Polarons and Applications, Ed. V.D.Lakhno, Chichester, 1994, p.5.

51. **Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Strizh T.A., Fedyanin V.K., Lakhno V.D.** — In: Excited polaron states in condensed media, Ed. V.D.Lakhno, Manchester Univ. Press, Manchester, 1991.
52. **Luttinger J., Lu Ch.Y.** — Phys.Rev. B, 1980, v.21, p.4251.
53. **Пикаев А.К.** — Сольватированный электрон в радиационной химии. М.: Наука, 1969.
54. **Лакно В.Д.** — ТМФ, 1994, т.100, в.2, с.219.
55. **Пекар С.И.** — Исследования по электронной теории кристаллов. М.-Л.:Гостехиздат, 1951.
56. **Боголюбов Н.Н.** — УМЖ, 1950, т.2,с.3.
57. **Mijake S.J.** — J.Phys.Soc.Jap., 1975, v.38, p.181.
58. **Комаров Л.И., Крылов Е.В., Феранчук И.Д.** — ЖВМ и МФ, 1978, т.18, в.3, с.681.
59. **Амирханов И.В., Пузынин И.В., Родригес К. и др.** — Сообщение ОИЯИ, P11-85-445, Дубна, 1985;
Amirkhanov I.V., Lakhno V.D., Puzynin I.V., Strizh T.A. — In 8th Intern.Workshop "Non-linear Evolution Equations & Dynamical Systems "NEEDS'92, Dubna, Russia, Jul.,1992., Singapore a.o. World Sci., 1993, p.406-414.
60. **Feunman R.P.** — Phys.Rev., 1955, 97, p.660.
61. **Lu Y., Shen Ch.K.** — Phys.Rev. B, 1982, v.26, p.4707.
62. **Амирханов И.В., Лакно В.Д., Пузынин И.В., Стриж Т.А., Федянин В.К.** — Препринт НЦБИ АН СССР, Пушино, 1988; в кн: Возбужденные поляронные состояния в конденсированных средах, НЦБИ АН СССР, Пушино, 1990, с.70-86.
63. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П.** — Сообщение ОИЯИ, P11-91-87, Дубна, 1991.
64. **Гареев Ф.А., Гончаров С.А., Жидков Е.П. и др.** — ЖВМ и МФ, 1977, т.17, 2, с.407.
65. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П.** — Сообщение ОИЯИ, P11-91-139, Дубна, 1991.
66. **Балабаев Н.Л., Лакно В.Д.** — Препринт ОНТИ НЦБН АН СССР, Пушино, 1970.
67. **Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V.** — Preprint JINR, E11-92-205, Dubna, 1992; In: Polarons and Applications. Ed. by Lakhno V.D., Chishester a.o.: Willey, 1994, p.445.
68. **Марчук Г.И.** — Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989.
69. **Габдуллин Р.Р.** — Препринт НЦБИ АН СССР, Пушино, 1991;
Габдуллин Р.Р. — Доклады РАН, 1993, т.333, в.1, с.23-27.
70. **Акишин П.Г., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С.** — ЖВМ и МФ, 1996, т.36, в.7, с.109-118.
71. **Lakhno V.D., Vasil'ev O.V.** — Chem.Phys. 1991, v.153, (n.1,2), p.147; Phys.Lett. 1991, v.A 152, (n.5,6), p.300.
72. **Ericson T., Weise W.** — Pions and Nuclei. Clarendon Press, Oxford, 1988.
73. **Brown G.E., Jackson A.D.** — The Nucleon-Nucleon Interaction. North-Holland P.C., Amsterdam, 1976.
74. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Лакно В.Д. и др.** — Мат. моделирование, 1997, т.9, в.8, с.52;
Amirkhanov I.V., Lakhno V.D., Puzynin I.V. et al. — In: III International Simposium "Dubna-Deuteron 95" (4-7 July 1995) E2-96-100, Dubna, 1996, p.58;
Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P. et al. — In: 9th International Conference "Computational Modelling and Computing in Physics" (Dubna, September 16-21 1996). JINR, D5,11-97-112, Dubna, 1997, p.48;
Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P. et al. — In: "Perspectives of Polarons", ed. by G.N.Chuev and V.D.Lakhno, Singapore a.o.: World Sci., 1996, p.229-250.

75. **Амирханов И.В., Пузынин И.В., Стриж Т.А., Васильев О.В., Лахно В.Д.** — Препринт ОНТИ НЦБИ, Пушкино, 1990.
76. **Chuev G.N., Lakhno V.D.** — J. Theor. Biol. 1993, v.163, p.51.
77. **Лахно В.Д., Чув Г.Н.** — Биофизика, 1997, т.42, в.3, с.313.
78. **Хартри Д.Р.** — Расчеты атомных структур. М.: ИЛ, 1960.
79. **Калиновский Ю.Л., Каллис В., Куранов Б.Н., Первущин В.Н., Сариков Н.А.** — Ядерная физика, 1989, т.49, с.1709.
80. **Goldrey S., Isgur N.** — Phys. Rev. D, 1985, v.32, No.1;
Yaouanc A. Le, Oliver L., Pene P., Raynal J.C. — Phys. Rev. 1984, D29, p.1233; Phys. Rev. 1985, v.D31, p.137;
Adler S.L., Davis A.S. — Nucl. Phys., 1984, v.B224, p.469;
Pedro J. de A.Bicudo, Jose E.F.T.Ribeiro — Phys. Rev. 1990, v.D42, p.1611.
81. **Kocic A.** — Phys. Rev. 1986, v.D33, p.1785;
McKay D.W., Munczek H.J., Bing-Lin Young — Phys. Rev. 1988, v.D37, p.195.
82. **Trzupek A.** — Acta Physica Polonica, 1989, v.B20, No.2, p.93.
83. **Alkofer R., Amundsen P.A.** — Nucl. Phys. 1988, v.B306, p.305.
84. **Kalinovsky Yu.L., Kallis W., Kaschluhn L. et al.** — Fortschr. Phys., 1990, v.38, p.333; Few Body Systems, 1991, v.10, p.87;
Horvat R., Kekec D., Klabučar D., Palle D. — Phys.Rev. 1991, v.D44, No.5, p.1585.
85. **Gross F.** — Phys.Rev. 1968, v.B6, p.125;
Gross F., Milane J. — Phys.Rev. 1991, v.D43, p.2401;
Gross F., Milane J. — Phys.Rev. 1992, v.D 45, p.969;
Kadyshevsky V.G. — Nucl.Phys. 1968, v.B6, p.125;
Thompson R.H. — Phys.Rev. 1970, v.D1, p.110.
86. **Быков А.А., Дремин И.М., Леонидов А.В.** — УФН, 1984, т.143, с.3.
87. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А.** — Препринт ОИЯИ, P11-96-449, Дубна, 1996; Математическое моделирование, 1997, т.9, No.10, с.111;
Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V. — In: 9th International Conference "Computational Modelling and Computing in Physics" (Dubna, September 16-21). D5,11-97-112, JINR, Dubna, 1997, p.40.
88. **Maung K.H., Kahana D.E., Norbury J.W.** — Phys.Rev. 1993, v.D 47, 3, p.1183.
89. **Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V.** — In: "Lecture Notes in Computer Science"; 1996. Proceedings of WNAA'96 (I International Workshop on Numerical Analysis and Applications, June 1996, Rousse, Bulgaria) Ed. by Vulkov L., Wasniewski J. and Yalamov P. Springer, 1997, p.9.
90. **Амирханов И.В., Жураев О.М., Каллис В. и др.** — Сообщение ОИЯИ, P11-88-506, Дубна, 1988;
Amirkhanov I.V., Juraev O.M., Pervushin V.N. et al. — JINR Comm., E11-91-108, Dubna, 1991.
91. **Amirkhanov I.V., Juraev O.M., Pervushin V.N., Puzynin I.V., Sarikov N.A.** — Preprint JINR, E2-90-414, Dubna, 1990;
Амирханов И.В., Жураев О.М., Первущин В.Н., Пузынин И.В., Сариков Н.А. — Сообщение ОИЯИ, P11-91-111, Дубна, 1991.
92. **Амирханов И.В., Насиров Т.З., Сариков Н.А.** — Сообщение ОИЯИ, P11-93-173, Дубна, 1993.

93. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Первушин В.Н. и др.** — Препринт ОИЯИ, P11-94-74, Дубна, 1994; Математическое моделирование, 1994, т.6, No.7, с.55.
94. **Blaschke D., Kalinovsky Yu.L., Pervushin V.N., Ropke G., Schmidt S.** — Zeitschrift fur Physik, 1993, v.A346, p.85;
Blaschke D. et al. — Preprint JINR, E2-94-307, Dubna, 1994.
95. **Земляная Е.В.** — Дисс. на соиск. уч. ст. к.ф.м.н., Дубна, 1994.
96. **Puzynin I.V., Amirkhanov I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V.** — JINR Rapid Comm., 1993, 5[62]-93, Dubna, p.63;
Puzynin I.V., Amirkhanov I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V. — In: International Conference "Programming and Mathematical Techniques in Physics" (JINR, Dubna, Russia, June 1993) ed. by Yu.Yu.Lobanov and E.P.Zhidkov, Singapore a.o.: World Sci., 1994, p.30.
97. **Земляная Е.В.** — Сообщение ОИЯИ, P11-94-120, Дубна, 1994.
98. **Амирханов И.В., Давлатов Х.Ф., Земляная Е.В. и др.** — Сообщение ОИЯИ, P11-94-523, Дубна, 1994.
99. **Амирханов И.В., Насиров Т.З., Первушин В.Н., Сариков Н.А.** — Сообщение ОИЯИ, P11-94-406, Дубна, 1994.
100. **Amirkhanov I.V., Pervushin V.N., Puzynin I.V. et al.** — JINR Comm., E11-94-509, Dubna, 1994.
101. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А.** — Препринт ОИЯИ, P11-95-8, Дубна, 1995; Математическое моделирование, 1995, т.7, No.7, с.34.
102. Particle Data Group 1992 — Phys. Rev., (1992), v.D45, p.11;
Amelin D.V. et al. — In: Proceed. "Hadron-93", Como, Italy.
103. **Kalinovsky Yu.L., Weiss C.** — Z.Phys.C., 1994, v.63, No.2, p.275.
104. **Karsch F.** — In: Quark-Gluon Plasma, ed. by Hwa R.C., World Scientific, Singapore, 1990, p.61.
105. **Volkov M.K.** — Ann. Phys., 1984, v.157, p.282.
106. **Klevansky S.P.** — Rev. Mod. Phys., 1992, v.64, p.649;
Kalinovsky Yu.L., Kaschluhn L., Pervushin V.N. — Phys. Lett.B., 1989, v.231, No.3., p.288.
107. **Nambu Y., Iona-Lasinio G.** — Phys. Rev. 1961, v.122, p.345; 1961, v.124, p.246;
Volkov M.K. — Ann. Phys. 1984, v.157, p.285;
Ebert D., Reinhardt H. — Nucl. Phys., 1986, v.B27, p.188;
Kalinovsky Yu.L., Kaschluhn L., Pervushin V.N. — Phys. Let., 1989, v.B231, p.288; Fortschr. Phys. 1990, v.38, No.4.
108. **Kallis W., Pervushin V.N., Sarikov N.A.** — Preprint JINR, E9-94-42, Dubna, 1994.
109. **Амирханов И.В., Земляная Е.В., Первушин В.Н. и др.** — Препринт ОИЯИ, P11-95-325, Дубна, 1995; Математическое моделирование, 1997, т.9, No.3, с.73.
110. **Schmidt S., Blaschke D., Kalinovsky Yu.L.** — Phys. Rev. C, 1994, v.50, No.1, p.435.