

## О МЕТОДАХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ СЛОЖНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

*И. В. Пузынин, Т. Л. Бояджиев, С. И. Виноцкий, Е. В. Земляная,  
Т. П. Пузынина, О. Чулуунбаатар*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В обзоре рассмотрены разработанные в ОИЯИ методы вычислительной физики для исследования моделей сложных физических процессов из различных разделов теоретической физики. Дана общая математическая постановка уравнений для изучаемых моделей, описаны используемые численные методы, представлена информация о разработанных комплексах программ. Обсуждаются конкретные модели физических процессов. Демонстрируются результаты их численного исследования.

Methods of computational physics that were developed at JINR for investigation of various theoretical physics models of complex physical processes are considered. General mathematical formulation of equations for the models under study is given. Numerical methods are described. Information about developed computer codes is presented. Concrete physical processes models are discussed. Results of numerical analysis are demonstrated.

PACS: 02.60.Cb, 02.60.Lj, 02.60.Nm,  
03.65.-w, 03.65.Ge

### ВВЕДЕНИЕ

Новый раздел физики — вычислительная физика — возник в середине 60-х гг. XX в. и стал бурно развиваться в связи с автоматизацией физических исследований и компьютерной обработкой информации. В эти годы появились новые международные журналы, такие как «Computer Physics Communications», «Journal of Computational Physics», были опубликованы первые монографии по этому разделу физики [1, 2]. Позднее в России это направление также завоевало право на жизнь. В ряде университетов и научных центров были организованы кафедры и лаборатории по вычислительной физике (например, в СПбГУ, Саратовском государственном университете, Московском университете дружбы народов, ВЦ СОАН, ВЦ АН), появились учебные пособия по этой дисциплине [3].

Во многих источниках подчеркивается, что методы вычислительной физики специально направлены на исследование математических моделей физики и органически связаны с их компьютерной реализацией. Анализ методов вычислительной физики показывает, что определяющую роль в их развитии играют

решения практических задач, для которых известные методы иногда оказываются неэффективными в силу оригинальности и новизны постановок этих задач. При этом важность физических приложений определяет выделение этих задач в самостоятельные классы, заслуживающие отдельного углубленного изучения.

Соотношение между качеством математической модели сложного физического процесса и адекватным методом ее исследования является принципиальным вопросом в вычислительной физике. Действительно, только располагая надежным методом исследования математической модели, который обеспечивает требуемую и контролируемую точность, а также обладает такими «потребительскими» свойствами, как простота программной реализации и экономичность, можно уверенно оценить степень соответствия модели изучаемому процессу. Ценность метода тем выше, чем шире класс уравнений, доступных для изучения с его помощью. Это особенно важно как при сравнении свойств математических моделей, используемых в различных разделах физики, где в каждом доминируют свои устоявшиеся подходы к изучению сходных уравнений, так и при моделировании процессов на стыке разных областей.

Вычислительная физика как научное направление оформилось в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ) к началу 90-х гг. прошлого столетия. Бурное развитие в течение последнего десятилетия информационных технологий выдвинуло на первый план новые задачи. Одна из них заключалась в освоении и модернизации комплексов программ, ставших достоянием физического сообщества, и внедрении в них новейших математических методов, отвечающих потребностям современных физических исследований. Основную задачу этого направления в настоящее время можно сформулировать как алгоритмическую и программную поддержку теоретических и экспериментальных исследований, проводимых в ОИЯИ, на основе эффективного использования современных вычислительных систем и высокоскоростных сетей.

В представленном обзоре рассмотрены разработанные в ОИЯИ методы вычислительной физики для исследования моделей ряда сложных физических процессов из различных разделов теоретической физики. Для рассмотренных моделей дана общая математическая постановка, которая в дальнейшем формулируется как нелинейное функциональное уравнение, зависящее от параметров модели. Рассмотрено несколько методов исследования параметрических зависимостей характеристик моделей. Один из них — метод продолжения, предусматривающий эффективный переход через особые точки в пространстве параметров. Другой метод основан на формулировке обратной задачи для параметров в особой точке путем постановки для них дополнительных условий, что позволяет определить параметры модели в особой точке, решая возникшую обратную задачу.

Одним из основных методов в рамках концепции продолжения является обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона (НАМН) [4], для которого в этом обзоре представлены новые итерационные схемы решения спектральных задач с использованием вариационных функционалов. Приведены краткие описания разработанных комплексов программ и даны ссылки на библиотеку программ ОИЯИ, в которую эти комплексы включены.

Далее рассмотрены модели сложных физических процессов. В рамках квантово-механической системы трех частиц в адиабатическом представлении рассмотрены: эволюция квазистационарных состояний в связанные состояния мезомолекул в зависимости от изменения эффективной массы как параметра и приложение к задаче рассеяния мезоатомов на ядрах изотопов водорода; неадиабатическая связь каналов антипротонного иона гелия для получения двухсторонних оценок уровней энергии переходов; ионизация основного состояния атома гелия быстрыми электронами. Изучены эффективные двухчастичные модели сложных квантово-механических систем, описывающих ядерные взаимодействия в рамках высокоэнергетических приближений. Изучены волновые процессы в нелинейных средах, частицеподобные возбуждения в моделях конденсированных состояний, нелинейной оптики, джозефсоновских переходов в сверхпроводниках и астрофизики.

Обзор состоит из двух разделов. В первом даны общая математическая постановка уравнений для изучаемых моделей, описание используемых численных методов и информация о разработанных комплексах программ. Во втором разделе приведены конкретные модели физических процессов и анализ полученных численных результатов их исследования.

## 1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, АЛГОРИТМИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

**1.1. Общая характеристика задач.** В общем случае класс уравнений, возникающих в математических моделях рассматриваемых сложных физических процессов, может быть описан с помощью систем нелинейных интегродифференциальных уравнений вида

$$\Gamma \frac{\partial^\alpha \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^\alpha} = \left\{ -\Theta [(\nabla_{\mathbf{x}} I + A(\boldsymbol{\rho}; \mathbf{x}, t))^2 + V(\boldsymbol{\rho}; \mathbf{x}, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))] + \right. \\ \left. + \Pi \int_{\Omega} G(\boldsymbol{\rho}; \mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{u}(\mathbf{x}', t)) d\mathbf{x}' \right\} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

где  $t$  — время эволюционного процесса;  $\mathbf{x} \in \Omega$ ,  $\Omega$  — область координатного пространства;  $\boldsymbol{\rho}$  — вектор параметров модели;  $A$  — внешнее поле;  $V$  и  $G$  — локальный и нелокальный потенциалы взаимодействия;  $\Gamma, \Theta, \Pi$  — операторы, задаваемые в зависимости от рассматриваемой модели. Кроме того, для каждой модели система (1) дополняется начальными и граничными условиями, а также, возможно, условиями нормировки искомого решения.

Общими характеристиками класса уравнений (1) являются многопараметричность относительно параметров модели, многомерность координатного пространства и наличие особых точек в нем, а также возможная неединственность (спектр) решений. Этот класс нелинейных задач описывает эволюцию сложных систем, которая может иметь бифуркационные и критические режимы.

Особое место занимают стационарные задачи ( $\Gamma = 0$ ).

Проблема устойчивости решений системы (1) анализируется в рассматриваемых моделях специальным образом, а именно: исследуется устойчивость стационарных решений системы (1) при  $\Gamma = 0$ . Для вычисленных стационарных решений ставится задача их эволюции в малом промежутке времени при малых возмущениях специального вида. Как результат формулируется спектральная задача, которая вместе со стационарной граничной задачей (1) образует новую систему. По свойствам части спектра системы делается вывод о характере локальной устойчивости моделируемого процесса.

Стационарные задачи можно свести к единообразной постановке в виде уравнения

$$\varphi(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}, y) = 0, \quad (2)$$

где  $y$  — элемент из некоторой области банахового пространства  $Y$ ;  $\mathbf{a} \in R_l$  и  $\boldsymbol{\lambda} \in R_m$  — векторы из евклидовых пространств соответствующих размерностей. Нелинейная функция  $\varphi$  при заданном векторе  $\mathbf{a}$  переводит элементы  $z = \{\boldsymbol{\lambda}, y\}$  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  $\mathbf{a}$  уравнение (2) имеет счетное (или конечное) множество решений  $\{y_n^*\}, n = 0, 1, 2, \dots$ , причем каждому решению  $y_n^*$  может соответствовать вектор собственных значений  $\boldsymbol{\lambda}_n^*$ . Решение  $z_n^* = \{\boldsymbol{\lambda}_n^*, y_n^*\}$  уравнения (2) является функцией вектора параметров  $\mathbf{a}$ .

Для решения стационарных задач широко распространен метод понижения размерности путем разложения искомого решения по специальным базисам и редукции исходной задачи к системам одномерных уравнений (метод Л. В. Канторовича [5]).

Исследуемые задачи имеют следующие особенности.

1. Имеется определенная информация о существовании и качественном поведении искомого решения, которую можно получить из природы изучаемых процессов или при изучении упрощенных моделей, например, в асимптотических областях изменения параметров.

2. В задачах низкой размерности, представляющих приближения для более сложных многомерных, а также при переносе асимптотических условий для решения в конечные области возникают проблемы оценки точности применяемых аппроксимаций. Эти оценки зачастую можно получить только приближенно, проводя последовательные расчеты при определенных значениях параметров аппроксимации.

Естественно в постановке (2) вектор физических параметров  $\mathbf{a}$  дополнить параметрами аппроксимации задачи 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. Поэтому при организации таких расчетов целесообразно применить методы продолжения по параметру и итерационные методы, позволяющие в процессе вычислений использовать всю априорную информацию для уточнения результатов.

Среди самых простых одношаговых итерационных методов метод Ньютона имеет при определенных условиях самую быструю, квадратичную, сходимость в окрестности изолированного решения и обеспечивает при этом минимальность линейной части невязки на каждом шаге. Метод Ньютона получил дальнейшее развитие на основе обобщения его непрерывного аналога\*.

### 1.2. Модифицированные ньютоновские схемы.

1.2.1. *Обобщенный НАМН и модифицированные итерационные схемы.* В обзоре [4] дано систематическое описание класса итерационных схем численного решения граничных задач для дифференциальных, интегродифференциальных и интегральных уравнений с дополнительными условиями на искомые решения. Для всех этих задач рассмотрена единая постановка в виде нелинейного уравнения (2) (вектор параметров  $\mathbf{a}$  опущен):

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

Основу для построения итерационных схем рассматриваемого класса представляет НАМН, описываемый эволюционным уравнением

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

где  $t$  — дополнительный параметр, а  $z_0$  — начальное приближение к искомому решению  $z^*$  уравнения (1).

---

\* Гавурин М. К. Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итерационных методов // Изв. вузов. Математика. 1958. Т. 5, вып. 6. С. 18–31.

Дано обоснование итерационной схемы

$$\varphi'(z_k)\Delta z_k = -\varphi(z_k), \quad z_{k+1} = z_k + \tau_k \Delta z_k \quad (4)$$

с дополнительным параметром оптимизации сходимости  $\tau_k$ , полученной с помощью метода Эйлера решения уравнения (3).

Дальнейшее обобщение развиваемого метода основано на параметризации исходной функции  $\varphi$  в (2) относительно дополнительного параметра  $t$  с явной зависимостью  $\varphi$  от  $t$ . Согласно идее Д. Ф. Давиденко [6] непрерывный параметр  $0 \leq t < \infty$  вводится в функцию  $\varphi = \varphi(t, z(t))$  так, чтобы при  $t = 0$  получалось простое уравнение

$$\varphi(0, z(0)) \equiv \varphi_0(z_0) = 0 \quad (5)$$

и  $\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t, z(t)) = \varphi(z)$ . Для параметризованной функции рассматривается обобщенное уравнение НАМН:

$$\frac{d}{dt}\varphi(t, z(t)) = -\varphi(t, z(t)). \quad (6)$$

Поскольку интеграл уравнения (6) 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 устойчивую сходимость  $z(t)$  к искомому решению  $z^*$ .

Если  $z_0$  — точное решение уравнения (5), мы получаем задачу Коши, определяющую метод Давиденко на полуоси  $0 \leq t < \infty$ :

$$\frac{dz}{dt} = -\varphi'_z(t, z(t))^{-1}\varphi'_t(t, z(t)), \quad z(0) = z_0. \quad (7)$$

Если  $z_0$  — приближенное решение уравнения (5), то из уравнения (6), введя обозначение  $A(t, z(t)) = \varphi'_z(t, z(t))$ , получаем модифицированный НАМН:

$$\frac{dz}{dt} = -A(t, z(t))^{-1}[\varphi(t, z(t)) + \varphi'_t(t, z(t))], \quad (8)$$

с начальным условием  $z(0) = z_0$ .

При аппроксимации уравнения (8) по схеме Эйлера получается последовательность итераций  $(z_k = z(t_k); B_k = A(t_k, z_k)^{-1})$ :

$$V_k = -B_k[\varphi(t_k, z_k) + \varphi'_t(t_k, z_k)], \quad (9)$$

$$z_{k+1} = z_k + \tau_k V_k. \quad (10)$$

Для параметризации  $\varphi(t, z(t))$  часто рассматривается аддитивное представление функции  $\varphi(z)$ :

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

где  $\varphi_0(z)$  — регулярная часть, а  $\varphi_1(z)$  — ее возмущение. Считаем, что для уравнения  $\varphi_0(z) = 0$  легко найти приближенное решение  $z_0$ , а оператор  $\varphi'_0(z)$  легко обратим.

Параметризацию можно выполнить с использованием скалярной функции  $g(t)$ , так называемой функции включения возмущения, такой, что  $g(0) = g(\infty) - 1 = g'(\infty) = 0$ , например,  $g(t) = 1 - e^{-t}$ , и представления функции  $\varphi(t, z(t))$  в виде суммы

$$\varphi(t, z(t)) = \varphi_0(z(t)) + g(t)\varphi_1(z(t)). \quad (11)$$

Достоинство рассматриваемого подхода состоит в построении модифицированных итерационных схем, где вместо обращения оператора  $\varphi'(z)$  на каждой итерации необходимо обращение производной специально выбранного оператора  $\varphi_0$ , имеющего простую структуру. Отметим, что итерационные схемы на основе представления (11) имеют приложения при использовании многоточечных разностных аппроксимаций высокого порядка точности [7]. Они сохраняют трехдиагональную структуру матрицы для оператора  $\varphi'$  в ньютоновских итерациях. С точки зрения компьютерной реализации большое значение имеет сохранение относительно простой структуры этого оператора при высокой точности аппроксимации решаемого уравнения. В рамках обобщения НАМН в качестве другого примера можно привести итерационные схемы с запаздыванием для интегродифференциальных уравнений.

Следующий шаг состоит в формулировке функционально-операторного уравнения ( $B$  — неизвестный оператор  $\varphi'(z)^{-1}$ )

$$\phi(B; z) = \begin{pmatrix} \varphi(z) \\ \varphi'(z)B - I \end{pmatrix} = 0. \quad (12)$$

Применение изложенного подхода к этому уравнению позволяет построить итерационные схемы без обращения оператора  $\varphi'(z_k)$  [8].

Для уточнения  $B$  используются итерационные формулы

$$W_k = -B_k[\varphi'_z(t_k, z_k)B_k - I], \quad (13)$$

$$B_{k+1} = B_k + \tau_k W_k, \quad (14)$$

являющиеся следствием применения НАМН к уравнению (12). Сходимость этого процесса для  $\tau_k = 1$  доказана, например, в работе [9].

Получается итерационная схема (9), (10), (13), (14) без обращения оператора  $\varphi'_z$ , в которой параметр  $\tau_k$  минимизирует невязку исходного уравнения. Таким образом, имея начальное приближение  $z_0$  и  $B_0$ , можно последовательно найти все приближения  $z_k$  и  $B_k$ . Практические вычисления показали, что  $B_0 = A^{-1}(z_0)$  является наилучшим начальным приближением для  $B$  (т. е. в этом случае обращение оператора  $\varphi'_z(t, z(t))$  надо сделать один раз при

$t = 0$ ). Преимуществом итерационной схемы является отсутствие операций 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. При векторизации операций [10] умножение матриц предпочтительнее обращения матрицы, и модифицированный алгоритм (9), (10), (13), (14) дает выигрыш по времени на векторной вычислительной системе. Но этот выигрыш будет получен за счет увеличения объема памяти, необходимого для хранения дополнительных матриц.

Таким образом, к настоящему времени разработаны и широко используются модификации НАМН, увеличивающие его эффективность для конкретных классов задач и расширяющие область его применения. 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 Фреше в этой задаче.

*1.2.2. Оценки точности численных результатов.* После редукции с помощью метода Канторовича исходная многомерная нелинейная стационарная граничная задача

$$\varphi(\mathbf{a}, z) = 0 \quad (15)$$

переходит в систему  $N$  ( $N \rightarrow \infty$ ) одномерных уравнений

$$\varphi_N(\mathbf{a}, N, z_N) = 0. \quad (16)$$

С учетом постановки граничных условий на конечных интервалах, характеризующихся граничными точками  $\gamma$ , она имеет вид

$$\varphi_{N,\gamma}(\mathbf{a}, N, \gamma, z_{N,\gamma}) = 0. \quad (17)$$

После дискретизации с параметрами дискретизации  $h$  мы получаем совокупность соответствующих уравнений на сетке

$$\varphi_{N,\gamma,h}(\mathbf{a}, N, \gamma, h, z_{N,\gamma,h}) = 0. \quad (18)$$

Ньютоновский итерационный процесс (4) реализуется для уравнения (18) до выполнения условия

$$\delta_K = \|\varphi_{N,\gamma,h}(\mathbf{a}, N, \gamma, h, z_{N,\gamma,h,K})\|_h \leq \varepsilon, \quad (19)$$

где  $K$  — номер итерации, при котором было выполнено условие (19);  $\varepsilon > 0$  — заданное малое число.

Требуется оценить  $\|z^* - z_{N,\gamma,h,K}\|_h$ , где  $z^*$  — решение уравнения (15).



Если  $z_{N,\gamma,h}^*$  — точное решение уравнения (18), то теоретическая оценка при выполнении условия (19) имеет вид

$$\|z_{N,\gamma,h}^* - z_{N,\gamma,h,K}\|_h \leq B\delta_K \leq B\varepsilon, \quad B = \text{const}. \quad (20)$$

Для точного решения  $z_{N,\gamma}^*$  уравнения (17) имеется теоретическая оценка

$$\|z_{N,\gamma}^* - z_{N,\gamma,h}^*\|_h \leq Ch^p, \quad C = \text{const}, \quad (21)$$

где  $p$  — порядок аппроксимации при дискретизации (18).

Тогда выполняется неравенство

$$\|z_{N,\gamma}^* - z_{N,\gamma,h,K}\|_h \leq B\varepsilon + Ch^p. \quad (22)$$

При условии  $\varepsilon \ll h$  верна оценка

$$\|z_{N,\gamma}^* - z_{N,\gamma,h}^*\|_h \sim \tilde{C}h^p. \quad (23)$$

Это соотношение необходимо проверять на сгущающихся сетках ( $h \rightarrow 0$ ) и использовать экстраполяционные формулы для повышения точности результатов.

О вкладе погрешностей  $\|z^* - z_N^*\|_h$  и  $\|z_N^* - z_{N,\gamma}^*\|_h$ , где  $z_N^*$  и  $z_{N,\gamma}^*$  — решения уравнений (16) и (17), можно косвенно судить, проводя расчеты: 1) на последовательностях расширяющихся интервалов  $\{\gamma \rightarrow \infty\}$ , 2) для увеличивающегося числа  $N\{N \rightarrow \infty\}$  уравнений системы (16).

Если значения сдвигов  $\|\bar{\gamma}\|$  и  $\bar{N}$  из соответствующих последовательностей  $\{\gamma\}$  и  $\{N\}$  достаточно велики, а величины  $\|z_{N,\gamma,h,K}^* - z_{N,\gamma+\bar{\gamma},h,K}^*\|_h$  и  $\|z_{N,\gamma,h,K}^* - z_{N+\bar{N},\gamma,h,K}^*\|_h$  настолько малы, что соотношение (23) выполняется, можно считать, что параметры аппроксимации  $N, \gamma, h$  определены подходящим образом. Естественно, что такая практическая процедура основана на предположениях о сходимости соответствующих методов аппроксимации исходного уравнения (15) и служит подтверждением этих предположений. Эту процедуру удобно реализовать на основе метода продолжения по параметрам, используя в итерациях уже вычисленные решения для уточнения последующих.

*1.2.3. НАМН в спектральных задачах.* Рассмотрим модифицированный ньютоновский эволюционный процесс

$$\varphi'(\tilde{z}(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\varphi(z(t)), \quad z(0) = z_0, \quad (24)$$

где  $\tilde{z}$  — некоторый фиксированный элемент из окрестности искомого решения  $z^*$ . Этот процесс дает итерационные схемы типа (3), в которых оператор  $\varphi'(\tilde{z}(t))$  требуется обратить только один раз. В спектральных задачах, когда

неизвестное  $z$  состоит из двух компонент  $\lambda$  и  $\Psi$  (собственное значение и собственный элемент), можно фиксировать как обе, так и одну из этих компонент, в зависимости от того, насколько хорошо известно соответствующее приближение к искомому решению.

Для классической спектральной задачи  $(H - \lambda I)\Psi = 0$  относительно пары  $z = \{\lambda, \Psi\} \in R \times Y$  нелинейное уравнение (2) может быть представлено в виде

$$\varphi(\lambda, \Psi) = \begin{pmatrix} (H - \lambda I)\Psi \\ F(\lambda, \Psi) \end{pmatrix} = 0. \quad (25)$$

Здесь  $H$  — оператор в гильбертовом пространстве, который в ряде случаев можно представить в виде

$$H \equiv H(g) = H_0 + gH_1, \quad (26)$$

где  $g$  — формальный параметр — константа взаимодействия, а  $F(\lambda, \Psi)$  — дополнительный функционал, например:

$$\text{а) } (\Psi, \Psi) - 1 = 0 \text{ — условие нормировки,} \quad (27)$$

$$\text{б) } (\Psi, (H - \lambda I)\Psi) = 0 \text{ — условие ортогональности.} \quad (28)$$

Для решения спектральных задач (25) применима итерационная схема (3), которая при фиксированном значении вектор-параметра  $\mathbf{a}$  включает на каждом шаге систему относительно поправки  $\Delta z_k = \{\Delta \lambda_k, \Delta \Psi_k\}$ :

$$\begin{aligned} (H - \lambda_k I)\Delta \Psi_k &= -(H - \lambda_k I)\Psi_k + \Delta \lambda_k \Psi_k, \\ F'_\lambda(\lambda_k, \Psi_k)\Delta \lambda_k + F'_\Psi(\lambda_k, \Psi_k)\Delta \Psi_k &= -F(\lambda_k, \Psi_k). \end{aligned} \quad (29)$$

Двухкомпонентная структура функции  $\varphi$  и возможность изменения вида функционала  $F$  в итерациях позволяют получить широкий набор итерационных процессов с регулируемыми свойствами.

В зависимости от способа решения этой системы и выбора формы функционала  $F$  можно получить разные известные итерационные схемы решения спектральных задач.

Представляя  $\Delta \Psi_k$  в виде

$$\Delta \Psi_k = -\Psi_k + \Delta \lambda_k U_k, \quad (30)$$

где  $U_k$  — решение задачи

$$(H - \lambda_k I)U_k = \Psi_k, \quad (31)$$

получаем следующее выражение для  $\Delta \lambda_k$ :

$$\Delta \lambda_k = \frac{1 + (\Psi_k, \Psi_k)}{2(\Psi_k, U_k)}. \quad (32)$$

При  $\tau_k = 1$  получаем следующее выражение для новых приближений:

$$\begin{aligned}\Psi_{k+1} &= \Delta\lambda_k(H - \lambda_k I)^{-1}\Psi_k, \\ \lambda_{k+1} &= \lambda_k + \frac{1 + (\Psi_k, \Psi_k)}{2(\Psi_k, (H - \lambda_k I)^{-1}\Psi_k)}.\end{aligned}\quad (33)$$

Отсюда видно, что получена известная схема обратных итераций.

При использовании функционала  $F$  в форме (28) получаем следующую систему относительно итерационных поправок:

$$(H - \lambda_k I)\Delta\Psi_k - \Delta\lambda_k\Psi_k = -(H - \lambda_k I)\Psi_k,$$

$$\begin{aligned}(\Delta\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k) + (\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Delta\Psi_k) - (\Psi_k, \Delta\lambda_k\Psi_k) = \\ = -(\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k).\end{aligned}$$

Используя первое уравнение этой системы, получаем из второго уравнения

$$(\Delta\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k) = 0.$$

Если оператор  $H$  самосопряженный, то

$$(\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Delta\Psi_k) = 0.\quad (34)$$

Подстановка выражения для  $\Delta\Psi_k$ :

$$\Delta\Psi_k = -\Psi_k + \Delta\lambda_k(H - \lambda_k I)^{-1}\Psi_k,\quad (35)$$

в соотношении (34) дает выражение

$$-(\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k) + \Delta\lambda_k(\Psi_k, \Psi_k) = 0.$$

Отсюда имеем при  $\tau_k = 1$

$$\Delta\lambda_k(\Psi_k, \Psi_k) = (\Psi_k, H\Psi_k) - \lambda_k(\Psi_k, \Psi_k)$$

или

$$\Psi_{k+1} = \Delta\lambda_k(H - \lambda_k I)^{-1}\Psi_k, \quad \lambda_{k+1} = \frac{(\Psi_k, H\Psi_k)}{(\Psi_k, \Psi_k)}.\quad (36)$$

Эта формула приводит к известной схеме обратных итераций с рэлеевским сдвигом.

В частности, для классической спектральной задачи при фиксированном значении  $\lambda_k = \tilde{\lambda}$  и  $\tau_k = 1$  получается известная схема обратных итераций с фиксированным сдвигом, обеспечивающая сходимость к собственному значению  $\lambda^*$ , ближайшему к  $\tilde{\lambda}$ . Модифицированную схему с фиксированным сдвигом целесообразно использовать при последовательных расчетах элементов ограниченной части спектра оператора  $H$  в сочетании с дополнительной ортогонализацией найденного в итерации с номером  $k$  приближения  $\Psi_{k+1}$  ко всем уже вычисленным собственным элементам  $\Psi_n^*$ , где  $n$  — номер собственного элемента, и сдвигом от вычисленного собственного значения к следующему после окончания итераций.

1.2.4. *Алгоритмы выбора итерационного параметра  $\tau_k$ .* Здесь представлены пять алгоритмов вычисления параметра  $\tau_k$  ( $0 < \tau_0 \leq \tau_k \leq 1$ ), минимизирующих невязку и хорошо зарекомендовавших себя при решении ряда задач.

1.  $\tau_k \equiv \tau_0$ . Этот алгоритм при достаточно малом  $\tau_0$  ( $\sim 0,1; 0,05; 0,01$ ) обычно применяется при плохих начальных приближениях с целью проверить возможность сходимости от этих приближений. Сходимость при этом очень медленная.

При  $\tau_0 \equiv 1$  получается классическая схема Ньютона.

2.  $\tau_k = \min(1, 2\tau_{k-1})$ , если  $\delta_k < \delta_{k-1}$ ;  $\tau_k = \max(\tau_0, \tau_{k-1}/2)$ , если  $\delta_k \geq \delta_{k-1}$ , где  $\delta_k$  определяется по формуле (19) в сеточном аналоге нормы в  $C$ . Этот алгоритм аналогичен широко распространенному способу выбора шага интегрирования в стандартных программах решения задачи Коши и вычисления интегралов. Алгоритм рекомендуется применять при хороших начальных приближениях. Он обеспечивает быструю сходимость, однако не всегда устойчив при плохих приближениях.

3.  $\tau_k = \min\left(1, \tau_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k}\right)$ , если  $\delta_k < \delta_{k-1}$ ;  $\tau_k = \max\left(\tau_0, \tau_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k}\right)$ , если  $\delta_k \geq \delta_{k-1}$ , где  $\delta_k$  также вычисляется по формуле (19) в сеточном аналоге нормы в  $C$ . Этот алгоритм, минимизирующий функцию перехода для двух последовательных невязок [11], более устойчив и обеспечивает сходимость в достаточно широкой области начальных приближений, которая, однако, как и скорость сходимости, зависит от величины  $\tau_0$ . Чем меньше  $\tau_0$ , тем шире область сходимости и медленнее сходимость вдали от решения.

4.  $\tau_k = \frac{\delta_{k-1}}{\delta_{k-1} + \delta_k(1)}$ , где  $\delta_k(1)$  — невязка на  $k$ -й итерации для  $\tau_k = 1$ . Величина  $\delta_k$  вычисляется по формуле (19) в сеточном аналоге нормы в  $L_2$ . Это алгоритм оптимального выбора  $\tau_k$ , предложенный в работе [12]. Он основан на квадратичной аппроксимации зависимости  $\delta$  от  $\tau$ . При итерациях он должен обеспечить минимум невязки на каждом шаге.

5. На равномерной сетке  $\omega_\tau$  отрезка  $[0, 1]$  с шагом  $\Delta\tau$  вычисляется последовательность невязок  $\delta^i$  по формуле (19) и выбирается такое значение  $\tau_k$ , которому соответствует минимальная невязка. Этот алгоритм более общий, чем описанный в п.4, но требует большего объема вычислений. Точность нахождения оптимального шага  $\tau_k$ , обеспечивающего минимум невязки на каждом шаге, зависит от выбора сетки  $\omega_\tau$ . Эту сетку можно выбрать таким образом, чтобы точность нахождения  $\tau_k$  и быстродействие алгоритма оптимально сочетались.

### 1.3. Метод исследования задачи рассеяния на основе объединения НАМН с вариационным подходом.

1.3.1. *Многопараметрическая ньютоновская итерационная схема.* Основная идея построения обобщенной итерационной схемы, сформулированная в

работе [13], состоит в использовании зависимости от физических параметров  $a$  исходной задачи (15). Нужно значение компоненты  $a = a^*$ , при котором требуется найти искомое  $z^*$ , фиксируется в слабом смысле дополнительным асимптотическим условием

$$F(a^*, z) = 0. \quad (37)$$

Решение переформулированной таким образом исходной задачи (15)

$$\Phi(a, z) = \{\varphi(a, z), F(a^*, z)\} = 0 \quad (38)$$

осуществляется с помощью многопараметрической ньютоновской итерационной схемы

$$\Phi'_a \Delta a + \Phi'_z \Delta z_k = -\Phi(a_k, z_k), \quad a_{k+1} = a_k + \tau_k \Delta a_k, \quad z_{k+1} = z_k + \tau_k \Delta z_k, \quad (39)$$

в которой стремление  $a \rightarrow a^*$  обеспечивается присоединением асимптотической компоненты (37) к (15). Данная схема в отличие от стандартной (4) позволяет находить наряду с неизвестной  $z$  ее производную  $\partial z / \partial a|_{a=a^*}$ . Это обстоятельство в дальнейшем дает возможность при вычислении элемента  $z$  траектории  $z(a)$  в точке  $a = a^* + \Delta a$  использовать хорошее начальное приближение  $z_0(a) = z^*(a)|_{a=a^*} + \Delta a (\partial z / \partial a)|_{a=a^*}$ , что позволяет сократить число итераций в процессе (39). Если из итерационной схемы (39) исключить ньютоновскую компоненту  $-\Phi(a_k, z_k)$ , то получаем дискретный аналог метода эволюции по константе связи [14], или метод Давиденко [6].

Для задачи непрерывного спектра (25), (26), (28) в качестве  $a$  можно выбрать, например, параметр  $q$  — значение импульса в канале при некотором значении спектрального параметра  $\lambda$  (или энергии  $2E = q^2$ ). Тогда условие (37) приобретает вид

$$F(q^*, \psi) = (\psi, (H - q^{*2})\psi) = 0, \quad (40)$$

подобный (28). При этом итерации по параметру  $q$  в окрестности  $q = q^*$  служат для определения интересующих нас производных по этому параметру. Для иллюстрации ограничимся рассмотрением задачи упругого рассеяния для моделей квантово-механических систем, описываемых радиальным уравнением Шредингера на полуоси  $\rho \in (0, \infty)$  с короткодействующим центрально-симметричным потенциалом  $V(\rho) \equiv V(\rho, g)$  ( $V(\rho) \equiv V(\rho, g = 0) \equiv 0$ ) в  $n$ -мерном пространстве при заданных константе взаимодействия  $g \geq 0$ , импульсе  $q \geq 0$  и орбитальном моменте  $l$ , следуя работе [15]:

$$\left( \frac{1}{\rho^{n-1}} \frac{d}{d\rho} \rho^{n-1} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+n-2)}{\rho^2} + q^2 \right) \Psi_l(\rho) = V(\rho) \Psi_l(\rho). \quad (41)$$

Для уравнения (41) соответствующие граничные условия получаются в результате переноса асимптотических условий для волновых функций из сингулярной области  $[0, \infty)$

$$\Psi_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^l; \quad \Psi_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} C \rho^{-\nu} \sin(q\rho - \pi(l + \nu - 1)/2 + \delta_l) \quad (42)$$

в конечную область интегрирования  $\rho \in [\rho_{\min}, \rho_{\max}]$ , где  $\nu = (n - 1)/2$ ,  $\delta_l$  — искомый фазовый сдвиг, а  $C$  — нормировочный коэффициент. В одномерном пространстве ( $n = 1$ ) задача (41) рассматривается на всей оси  $(-\infty, \infty)$ . Тогда для потенциалов с асимптотикой  $V(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \pm\infty} \exp(\pm\rho)$  вместо условий (42) удобно использовать условия

$$\Psi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow -\infty} 0; \quad \Psi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} C \sin(q\rho + \delta). \quad (43)$$

Задача (41)–(43) редуцируется на конечный интервал  $[0, \rho_m]$  с помощью однородных граничных условий

$$\phi^{(2)} = \lim_{r \rightarrow 0} [b_{11} \partial\psi/\partial r + b_{12} \psi] = 0, \quad \phi^{(3)} = \lim_{r \rightarrow \infty} [b_{21} \partial\psi/\partial r + b_{22} \psi] = 0, \quad (44)$$

где функции  $b_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2$ , определяются асимптотическими условиями (42) или (43). Для потенциала Морзе ( $n = 1$ ) с двумя связанными состояниями ( $v = \delta(0)/\pi = 2$ ) зависимости от квадрата импульса фазового сдвига  $\delta$  и его производной  $\partial\delta/\partial q$  представлены на рис. 1, *a*. С помощью производной  $\partial\delta/\partial q$  можно контролировать точность вычислений и качество функций  $\psi$ , используя теорему вириала [16]

$$C^2 q^2 \partial\delta/\partial q = (\psi, (2V + r\partial V/\partial r)).$$

Другая возможность, которая детально исследована в [13], состоит в выборе в качестве  $a$  из (37) константы взаимодействия  $g$  из (26). Тогда условие (37) имеет вид

$$F(g^*, \psi) = (\psi, (H(g^*) - q^2)\psi) = 0 \quad (45)$$

и согласно теореме Гельмана–Фейнмана позволяет контролировать величину

$$\partial K/\partial g = -(\psi, (\partial V(g)/\partial g)\psi), \quad (46)$$

а также при определенных ограничениях на потенциал  $V$  получать односторонние оценки элементов  $K$ -матрицы [17]. Итерационные схемы (37)–(39) можно применять для уточнения различных вариационных расчетов в задаче рассеяния. В самом деле, задача рассеяния для уравнения Шредингера с указанными выше дополнительными условиями может быть сведена к вычислению минимума функционала в рамках различных вариационных принципов Хюльтена, Кона или Швингера. Так, например, для решения квантовой

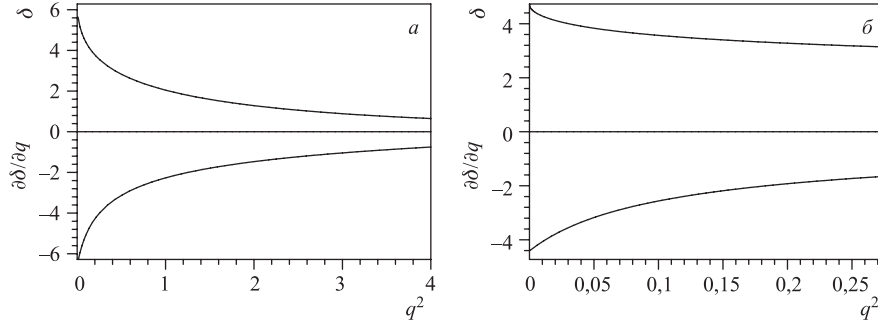


Рис. 1. Зависимость фазового сдвига  $\delta$  и его производной  $d\delta/dq$  от квадрата импульса: а) для потенциала с двумя связанными состояниями; б) для потенциала с одним связанным и полусвязанным состояниями

задачи нескольких частиц с короткодействующими парными потенциалами используется вариационный функционал Швингера [18], на основе которого разработаны различные итерационные схемы. На первый взгляд, интегральная формулировка задачи существенно проще, чем дифференциальная, поскольку не требует детального анализа асимптотического поведения искомого решения при  $g \neq 0$  для вычисления функций  $b_{ij}, i, j = 1, 2$ , в (44), а использует лишь известные регулярные и нерегулярные решения при  $g = 0$ . Однако такие схемы для многоканальной задачи рассеяния в ряде случаев не обеспечивают устойчивого вычисления необходимых физических параметров. Поэтому разработка устойчивых вариационно-итерационных схем на основе объединения проекционных методов, вариационных принципов и ньютоновских итерационных схем является актуальной проблемой численного моделирования квантово-механических систем.

1.3.2. Многопараметрическая ньютоновская итерационная схема с функционалом Швингера. Краевые задачи (41), (42) сводятся к спектральной задаче для уравнения Фредгольма [19]:

$$A_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho') = \lambda_l B_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho'), \quad (47)$$

$$A_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho') = \Psi_l(\rho) - \int_0^\infty G_l(\rho, \rho')V(\rho')\Psi_l(\rho')\rho'^{n-1}d\rho', \quad (48)$$

$$B_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho') = y_l(\rho) \int_0^\infty y_l(\rho')V(\rho')\Psi_l(\rho')\rho'^{n-1}d\rho',$$

где  $\lambda_l = -\pi \operatorname{ctg} \delta_l/2$  — искомый спектральный параметр, а зависимость от нормировочного коэффициента  $C$  в асимптотике неизвестной волновой функции  $\Psi_l(\rho)$  исключена. Функция  $y_l(\rho)$  и свободная функция Грина  $G_l(\rho, \rho')$

определяются через регулярные и нерегулярные в точке  $\rho = 0$  решения уравнения (41) при  $V(\rho) \equiv 0$ . Функция  $y_l(\rho)$  имеет вид

$$y_l(\rho) \equiv \rho^{-\mu} J_{l+\mu}(q\rho), \quad \mu = n/2 - 1, \quad n > 1, \quad (49)$$

где  $J_i$  — функция Бесселя первого рода. Для решения задачи (47), (48) используется дополнительное условие типа (37):

$$(V(\rho)\Psi_l(\rho), (A_l(\rho, \rho') - \lambda_l B_l(\rho, \rho'))\Psi_l(\rho')) = 0, \quad (50)$$

следствием которого является вариационный функционал Швингера

$$\lambda_l = \frac{(V(\rho)\Psi_l(\rho), A_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho'))}{(V(\rho)\Psi_l(\rho), B_l(\rho, \rho')\Psi_l(\rho'))}, \quad (51)$$

где скобки  $(\dots, \dots)$  обозначают скалярное произведение, т.е.  $(f, g) = \int_0^\infty f^* g \rho^{n-1} d\rho$ . В результате интегральному уравнению (47) сопоставляется функционал, устойчивый относительно вариаций первого порядка по  $\Psi_l$ , и задача рассеяния (41), (42) формулируется как задача на собственные значения относительно пары неизвестных  $z = (\lambda_l, \Psi_l)$ : функции фазового сдвига  $\lambda_l$  и волновой функции  $\Psi_l$ . Дискретизация задачи (47), (50) на сетке узлов  $\Omega_h \in [\rho_{\min}, \rho_{\max}]$  (с использованием известных квадратурных формул Боде) приводит к алгебраической обобщенной задаче на собственные значения:

$$\varphi(z) = \begin{pmatrix} (A - \lambda B)\Psi, \\ (V\Psi, (A - \lambda B)\Psi) \end{pmatrix} = 0. \quad (52)$$

Далее строится итерационная схема для нахождения приближений  $\lambda_{k+1}, \Psi_{k+1}$  с помощью поправок  $v_k, u_k$  и  $\mu_k$ :

$$\begin{cases} v_k = -\Psi_k, \\ (A - \lambda_k B)u_k = B\Psi_k, \\ \mu_k = \frac{(\Psi_k V, A\Psi_k)}{(\Psi_k V, B\Psi_k)} - \lambda_k, \\ \Psi_{k+1} = \Psi_k + \tau_k(v_k + u_k\mu_k), \\ \lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k\mu_k, \end{cases} \quad (53)$$

где  $\{\lambda_0, \Psi_0\}$  — начальное приближение из окрестности искомого решения, а для выбора итерационного шага  $\tau_k, k = 0, 1, 2, \dots$ , используется условие минимизации невязки [12]. Выражение для  $\mu_k$  совпадает с вариационным



функционалом Швингера (51). Обобщение итерационной схемы (53) для многоканальной задачи рассеяния дано в работе [20].

В диссертации [21] сходимость предложенной итерационной схемы продемонстрирована для задачи упругого рассеяния (41)–(43) с потенциалом Морзе ( $n = 1$ ), Вудса–Саксона и сферически-симметричной прямоугольной ямы ( $n = 3$ ). Однако схема имеет второй порядок точности по шагу  $h$  равномерной сетки  $\Omega_h$ , поскольку первая производная по аргументу  $\rho$  функции Грина  $G_l(\rho, \rho')$  имеет разрыв при  $\rho = \rho'$ . Для рассматриваемых потенциалов фазовый сдвиг  $\delta$  вычислен с шестью верными знаками.

В [21] показано также, что использование в окрестности точки  $\rho_{\min}$  асимптотики  $\Psi(\rho)$  для аппроксимации решений позволяет построить схемы повышенного порядка точности для вычисления фазового сдвига  $\delta$ . Эффективность реализации такой схемы вычислений шестого порядка точности по шагу  $h$  равномерной сетки  $\Omega_h$  продемонстрирована при расчете фазового сдвига  $\delta$  с двенадцатью верными цифрами для одномерной задачи рассеяния с потенциалом Морзе.

Соответствующие алгоритмы реализованы в виде комплексов программ на языке Фортран в представлении вещественных чисел с двойной точностью\*.

**1.4. Методы исследования локализованных структур и критических режимов в нелинейных задачах.** Современные модели теоретической физики описываются сложными системами нелинейных уравнений в частных производных, допускающими в ряде случаев солитонные или солитоноподобные решения (локализованные в пространстве частицеподобные состояния с конечной энергией). Моделирование явлений, связанных с образованием, распространением и устойчивостью солитонов, представляет собой быстро развивающуюся междисциплинарную область современной вычислительной физики. Причина интереса к ней очевидна — солитоны и солитоноподобные образования являются важными примерами устойчивых состояний в очень широком классе нелинейных неограниченных и однородных моделей физических систем (см., например, работы [22–25]).

Однако реальные физические системы ограничены в пространстве и могут иметь внутренние структурные неоднородности, способствующие порождению новых физических эффектов. Объяснение этих эффектов связано, как правило, с возможностью локализации солитонов на неоднородностях и с их взаимодействием с границами. Если в модели системы отсутствует внешняя подкачка энергии и имеется затухание, связанное с диссипацией энергии, то произвольное начальное солитонное состояние переходит в некоторое равновесное (статическое) решение, иногда называемое [25] статическим аттрактором. Автомодельные решения нелинейных уравнений, например решения

---

\* <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/d112>; <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/scatterh6>

типа бегущих волн в подвижной системе координат, связанной с волной, также формально можно рассматривать как «статические». Под равновесными решениями в общем случае понимаются статические или периодические по времени и квазипериодические решения.

Значительные трудности при исследовании устойчивости равновесных решений относительно малых пространственно-временных возмущений связаны с наличием в моделях заданных или неизвестных геометрических и физических параметров: размеров системы и неоднородностей, структуры неоднородностей, параметров, определяющих поведение полей на границах, вид и величину нелинейного взаимодействия элементов системы и т. д.

Во многих классических моделях физических систем постепенное изменение некоторого конкретного параметра соответствует единственному и непрерывному решению и линейная теория устойчивости достаточно хорошо описывает состояния системы. Однако существует большое количество задач, в которых число и устойчивость решений резко изменяются при переходе параметра через некоторые критические значения. Такие явления, называемые обычно ветвлениями, или бифуркациями [26–28], могут описывать качественные изменения в физической системе. Значения параметров, при которых в модели происходит бифуркация решений, называются бифуркационными, или критическими, а сам процесс перехода через критические значения параметров называется критическим, или бифуркационным режимом. Геометрическое место точек в пространстве параметров, соответствующих бифуркациям решений, определяет в общем случае некоторую гиперповерхность, называемую поверхностью бифуркаций, или поверхностью катастроф [28].

В теоретическом аспекте знание бифуркационных зависимостей позволяет определить число равновесных решений и понять их структуру, оценить области изменения параметров, в которых можно ожидать устойчивость или неустойчивость системы и, возможно, описать происходящие при этом физические явления [25].

Для практических целей особенно важна возможность экспериментальной проверки бифуркационных зависимостей, являющейся важным источником информации для уточнения модели. В качестве конкретного примера укажем на методы изучения вихревых солитоноподобных структур магнитного потока в длинных джозефсоновских переходах (ДДП), основанных на измерении (бифуркационной) зависимости критического тока от магнитного поля [29, 30].

К сожалению, аналитические выражения для поверхностей бифуркаций удается получить лишь в достаточно простых моделях. Для большинства содержательных задач современной теоретической физики изучение бифуркационных зависимостей параметров возможно лишь численно.

Традиционным инструментом исследования зависимости структурных решений от параметра являются методы продолжения по параметру, которые

опираются на численные методы решения задачи Коши. Однако в окрестности поверхностей бифуркации такие методы применять затруднительно, поскольку на этих поверхностях происходит нарушение единственности решений. Поэтому создание численных методов, позволяющих найти и исследовать поведение решений в окрестности бифуркаций и построить поверхности бифуркаций этих решений, а также создание соответствующих комплексов компьютерных программ, реализующих эти методы, представляется весьма актуальной задачей математического моделирования.

*1.4.1. Схемы продолжения по параметрам через точку поворота.* В данном пункте излагается общая концепция численного продолжения по параметру и представлены две схемы, открывающие дополнительные возможности численного исследования.

Изначально методы продолжения по параметру развивались как способ получения начальных приближений с целью расширить область сходимости итерационных методов, используемых для решения нелинейной задачи (2) при фиксированном наборе параметров (см. [31] и цитируемую литературу). Современные разработки в этой области в значительной степени направлены на решение проблем, связанных с анализом бифуркаций и критических режимов в нелинейных задачах (см., например, [32–34]).

Любая схема численного продолжения содержит в том или ином виде три обязательные компоненты: 1) выбор начального приближения, 2) метод решения задачи для данного значения параметра (наиболее распространенным методом являются ньютоновские итерационные схемы), 3) алгоритм движения по параметру.

Отметим здесь, что существуют алгоритмы, объединяющие в единой итерационной схеме некоторые из указанных компонент. К таким схемам можно отнести, например, метод эволюции параметра (см. [35] и цитируемую литературу).

Начальное приближение строится обычно с использованием численных результатов, полученных на предыдущих шагах. Простейшим, наиболее распространенным и во многих случаях вполне эффективным вариантом схемы продолжения является такая организация вычислений, при которой решение с предыдущего шага используется как начальное приближение для следующего значения параметра. Для того чтобы обеспечить более высокую устойчивость и быструю сходимость ньютоновских итераций, начальное приближение строится по результатам, рассчитанным для 2–3 предыдущих значений параметра. Так, для начального приближения часто используется схема эйлеровского типа:

$$\varphi^{(0)}(\alpha_{i+1}) = \varphi(\alpha_i) + (\alpha_{i+1} - \alpha_i) \frac{\varphi(\alpha_i) - \varphi(\alpha_{i-1})}{\alpha_i - \alpha_{i-1}}. \quad (54)$$

Здесь  $\alpha_i$  — элемент вектора параметров  $\mathbf{a}$  на  $i$ -м шаге продолжения. При построении начального приближения на стартовой точке численного продол-

жения ( $i = 0$ ) используется известный для каких-либо предельных значений параметров аналитический вид решения либо качественная информация о его форме, которая имеется в большинстве физических задач. В рамках обобщения НАМН в определенных случаях эта проблема решается на основе представления функции  $\varphi(t, z(t))$  в эволюционной задаче (6) в виде суммы (11):

$$\varphi(t, z(t)) = \varphi_0(z(t)) + g(t)[\varphi(z(t)) - \varphi_0(z(t))],$$

где оператор  $\varphi'_0(z)$  легко обратим; для уравнения  $\varphi_0(z) = 0$  легко найти решение, а функция включения  $g(t)$  такая, что  $g(0) = 0$ ,  $g(\infty) = 1$ .

Методы выбора шага движения по параметру определяются спецификой конкретных задач и целей исследования. Одним из критериев выбора является устойчивая сходимость ньютоновских итераций. Если шаг по параметру достаточно мал, то, как показывают соответствующие теоретические оценки, начальное приближение будет находиться в области сходимости ньютоновских итераций. В определенной мере увеличить шаг движения по параметру и тем самым ускорить процедуру продолжения можно за счет выбора итерационного параметра  $\tau_k$  в ньютоновской итерационной схеме.

Возможная неединственность решений и наличие бифуркаций требуют разработки специальных методов численного исследования.

Так, одной из проблем численного продолжения по параметру решений нелинейных задач, связанной с неединственностью решения, является организация продолжения по параметру в точках поворота, где необходимо поменять направление движения по параметру с выходом на новую, неизвестную ветвь решений (рис. 2, а).

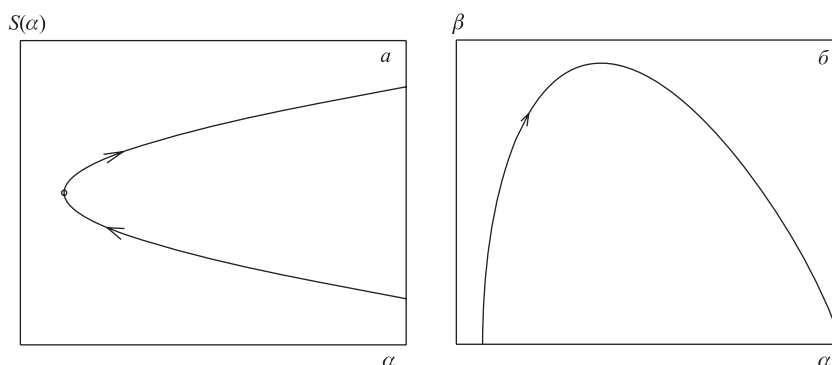


Рис. 2. а) Продолжение по параметру через точку поворота; б) численное продолжение на плоскости двух параметров  $(\alpha, \beta)$

Алгоритм продолжения, который представлен здесь, позволяет решить эту проблему. Идея предлагаемого подхода состоит в следующем.

При продолжении по параметру  $\alpha$  решения  $z$  стационарной граничной задачи

$$\varphi(z, \alpha) = 0 \quad (55)$$

(здесь  $\varphi$  — нелинейный оператор;  $\alpha$  — элемент вектора параметров  $\mathbf{a}$ , по которому ведется продолжение; остальные элементы вектора  $\mathbf{a}$  фиксированы) обычно вычисляется норма или какая-либо другая скалярная характеристика решения  $S(z)$  (так называемая «бифуркационная мера») и строится ее зависимость от параметра  $S(\alpha)$ . Как правило, в качестве такой скалярной характеристики применяются величины, имеющие физический смысл в рассматриваемых моделях.

В предложенной в работе [36] схеме продолжения используется тот факт, что производная  $d\alpha/dS(z)$  в точке поворота равна нулю. Численно аппроксимируя значение этой производной и проверяя на каждом шаге по параметру выполнение соотношения

$$\frac{|\Delta\alpha_i|}{\Delta S_i} < \epsilon, \quad (56)$$

где  $\epsilon > 0$  — заранее заданное малое число;  $\Delta\alpha_i = \alpha_i - \alpha_{i-1}$  — шаг по параметру, а  $\Delta S_i = |S(z(\alpha_i)) - S(z(\alpha_{i-1}))|$ , можно с необходимой точностью установить положение точки поворота, в которой движение вдоль бифуркационной кривой должно поменять направление. Это означает, что при выполнении условия (56) следует поменять знак шага продолжения по параметру. При этом построение начального приближения по формуле (54) с использованием результатов, полученных для двух предыдущих значений параметра, исключает возврат на ветку с уже известными решениями.

Шаг по параметру вычисляется по формуле

$$\Delta\alpha_{i+1} = \Delta\alpha_i \frac{\Delta S_{i-1}}{\Delta S_i}, \quad (57)$$

которая обеспечивает его уменьшение вблизи точки поворота (где решение меняется быстро) и увеличение на «пологом» участке бифуркационной кривой. При этом начальный ( $i = 0$ ) шаг по параметру должен быть достаточно малым, чтобы обеспечивать устойчивую и быструю (за 3–5 итераций) сходимость ньютоновской итерационной схемы. Отметим здесь, что при движении на «пологих» участках бифуркационной кривой эффективными являются «классические» ньютоновские итерации, в то время как на участках вблизи точек поворота необходим переход к итерациям на основе НАМН, что обеспечивается путем соответствующего выбора итерационного параметра  $\tau$ .

Таким образом, представленный подход обеспечивает возможность выхода на новые ветви решений в точках поворота, сохраняя при этом структуру матрицы, аппроксимирующей оператор производной Фреше, и не усложняя,

в отличие от других известных в литературе рецептов [32, 33], ньютоновскую итерационную схему.

С другой стороны, предложенный алгоритм выбора шага по параметру позволяет регулировать его величину, обеспечивая тем самым быструю сходимость ньютоновских итераций и высокую скорость движения по параметру.

В [37] представлена еще одна схема продолжения — модифицированная схема продолжения по параметру с одновременным вычислением другого параметра, предназначенная для организации численного продолжения на плоскости двух параметров, один из которых неизвестен (см. рис. 2, б). Схема объединяет представленную выше процедуру продолжения с ньютоновскими итерациями для нелинейного функционального уравнения

$$F(z, \alpha, \beta) \equiv \begin{Bmatrix} \varphi(z, \alpha, \beta) \\ \Gamma(z, \alpha, \beta) \end{Bmatrix} = 0, \quad (58)$$

где  $\beta$  — неизвестный элемент вектора параметров  $\mathbf{a}$ , продолжение ведется по параметру  $\alpha$ , в то время как остальные элементы вектора  $\mathbf{a}$  фиксированы. Дополнительное условие  $\Gamma$  формулируется с учетом особенностей конкретной задачи, например, на основе вариационного подхода [15], с использованием параметрической зависимости решений на асимптотике [38], с учетом трансляционной инвариантности решений [37].

После перехода к эволюционному уравнению и последующей дискретизации по непрерывному параметру  $t$  получаем итерационную схему, которая на каждом  $i$ -м шаге численного продолжения по параметру  $\alpha$  имеет вид

$$z_{s+1} = z_s + \tau_s \phi_s, \quad \beta_{s+1} = \beta_s + \tau_s \mu_s. \quad (59)$$

Здесь  $s$  — номер ньютоновской итерации;  $\tau_s$  ( $0 < \tau_s \leq 1$ ) — итерационный параметр ньютоновской схемы,  $\phi_s$  определяется как линейная комбинация:

$$\phi_s = \phi_s^{(1)} + \mu_s \phi_s^{(2)},$$

где

$$\phi_s^{(1)} = -[\partial\varphi/\partial z]_s^{-1} \varphi(z_s, \alpha_i, \beta_s), \quad \phi_s^{(2)} = -[\partial\varphi/\partial z]_s^{-1} \partial\varphi/\partial\beta, \quad (60)$$

а итерационная поправка  $\mu_s$  вычисляется по формуле

$$\mu_s = \frac{-\Gamma(z_s, \alpha_i, \beta_s) - [\partial\Gamma/\partial z]_s \phi_s^{(1)}}{[\partial\Gamma/\partial z]_s \phi_s^{(2)} + [\partial\Gamma/\partial\beta]_s}.$$

В качестве бифуркационной меры при численном продолжении выступает значение параметра  $\beta$ . Движение через точки поворота осуществляется по описанному выше алгоритму. Начальное приближение и шаг по параметру вычисляются, соответственно, по формулам (54) и (57).

1.4.2. Метод линеаризации в исследовании критических режимов нелинейных систем. В [39] дана постановка задачи о вычислении бифуркационных кривых для равновесных решений широкого класса нелинейных уравнений с оператором, зависящим от некоторого множества параметров. Пусть  $T$  — интервал на вещественной полупрямой  $[0, \infty)$ . Рассмотрим частный вид уравнения (1):

$$\dot{u} + G(u, p) = 0. \quad (61)$$

Реальная или комплекснозначная вектор-функция  $u(t)$  (размерности  $M \geq 1$ ) определена на  $T$  со значениями в банаховом пространстве  $\mathcal{B}$  с нормой  $\|\cdot\|_{\mathcal{B}}$ . Через  $G$  обозначен нелинейный оператор, который определен на некотором множестве  $\mathcal{D} \subset \mathcal{B}$  и зависит также от  $K$ -вектора  $p \in \mathcal{P} \subset \mathbb{R}^K$  физических параметров модели.

Многочисленные примеры физических моделей, уравнения которых сводятся к виду (61), можно найти, например, в работах [22–25, 27]. В виде (61) могут быть записаны уравнения физических моделей, рассматриваемых в настоящей работе.

Предположим, что в некоторой области  $\mathcal{P} \in \mathbb{R}^K$  изменения параметров уравнение (61) имеет равновесное решение  $u_s(p)$ , такое, что

$$G(u_s, p) = 0, \quad (62)$$

при этом зависимость  $u_s(p)$  от параметров является гладкой функцией. К равновесным решениям относятся решения статические, обусловленные, например, диссипацией в модели [25], решения широкого класса задач в автотомельных переменных [40, 41], решения задач теории поля с осциллирующей во времени фазой и статической амплитудой [24] и ряд других.

Исследование локальной устойчивости равновесных решений относительно малых возмущений в линейном приближении приводит к задаче на собственные значения:

$$A(p)\psi = \kappa\psi, \quad (63)$$

с подходящим условием нормировки

$$N[\psi] = 0. \quad (64)$$

Здесь линейный оператор  $A \equiv G'_u$  есть производная Фреше нелинейного оператора  $G(u)$  в точке  $u_s \in \mathcal{D}$ , а  $N[\psi]$  — заданный дифференцируемый по Фреше функционал. Будем предполагать, что в некоторой области  $\mathcal{P}$  пространства параметров спектр оператора  $A(p)$  является дискретным. Пусть  $\lambda(p) = \min \operatorname{Re} \kappa_i(p)$ . Тогда условие устойчивости равновесного решения  $u_s(p)$  имеет вид  $\lambda(p) > 0$ . При  $\lambda(p) < 0$  равновесное решение является неустойчивым. Уравнение

$$\lambda(p) = 0 \quad (65)$$

определяет в пространстве параметров поверхность бифуркаций решения  $u_s$ .

Для вычисления точек бифуркаций система, состоящая из уравнения для равновесных состояний (62), уравнения линейной задачи на собственные значения (63) и условия нормировки (64), рассматривается как единое нелинейное функциональное уравнение для функций  $u(p)$ ,  $\psi(p)$  и одного из  $K$  параметров  $p$ , который будем обозначать через  $\xi$ , выбирая без ограничения общности  $\xi \equiv p_1$ . Остальные  $K - 1$  параметров предполагаются известными. Собственное значение линейной задачи (63) также считается фиксированным (например, равным нулю). Тем самым указанная система переходит в обратную задачу на собственные значения для параметра  $\xi$ .

Для решения нелинейной задачи на собственные значения применяется непрерывный аналог метода Ньютона. На каждом шаге итерационного процесса решаются две пары линейных уравнений для приращений  $(U_1, U_2)$  и  $(\Psi_1, \Psi_2)$  собственных функций:

$$\begin{aligned} A(\xi) U_1 &= -G(u, \xi), \\ A(\xi) U_2 &= -G'_\xi(u, \xi); \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} [A(\xi) - \lambda I] \Psi_1 &= -A'_u(\xi) \psi U_1 - [A(\xi) - \lambda I] \psi, \\ [A(\xi) - \lambda I] \Psi_2 &= -A'_u(\xi) \psi U_2 - A'_\xi(\xi). \end{aligned} \quad (67)$$

Поправка  $P$  для собственного значения находится из уравнения

$$P = -(N'[\psi] \Psi_2)^{-1} (N[\psi] + N'[\psi] \Psi_1), \quad (68)$$

вытекающего из условия нормировки (64). Если  $(u^k, \psi^k, \xi^k)$  есть приближенное решение задачи на  $k$ -й итерации ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ), то очередное приближение  $(u^{k+1}, \psi^{k+1}, \xi^{k+1})$  к точному решению вычисляется по формулам

$$u^{k+1} = u^k + \tau_k (U_1^k + P^k U_2^k), \quad (69a)$$

$$\psi^{k+1} = \psi^k + \tau_k (\Psi_1^k + P^k \Psi_2^k), \quad \xi^{k+1} = \xi^k + \tau_k P^k. \quad (69b)$$

Набор алгоритмов для определения оптимального шага представлен выше в 1.2.4.

В специальных случаях, когда удастся получить решение задачи (62) в аналитическом виде, вычисление соответствующих этому решению точек бифуркаций сводится к обратной задаче на собственные значения — требуется найти значение параметра  $\xi$ , при котором выполняется условие  $\lambda(\xi) = 0$ . Основные уравнения ньютоновской итерационной схемы для таких задач имеют вид (67), (68) и (69б).

Во многих моделях уравнения (66) и (67) представляют собой краевые задачи для дифференциальных уравнений второго порядка. Для численного решения таких задач в [39] разработана сплайн-коллокационная разностная



схема повышенного порядка точности. Схема отличается простотой реализации на равномерных и неравномерных сетках и допускает простое обобщение на задачи с разрывами производных. Приведен эффективный экономичный метод решения возникающей алгебраической блочно-диагональной системы уравнений. Возможности схемы демонстрируются на конкретных тестовых примерах.

**1.5. Проблемно-ориентированные комплексы программ.** В табл. 1 представлены комплексы программ, разработанные для численного исследования ряда задач. Программные продукты, которые нашли широкое применение, переданы в библиотеку JINRLIB для свободного доступа через Интернет (соответствующие названия выделены жирным шрифтом).

Большинство представленных в табл. 1 программ построено на основе различных вариантов метода продолжения по параметру в сочетании с итерациями на основе НАМН и его обобщения.

*1.5.1. Комплексы программ для решения задач на собственные значения на основе НАМН.*

1. SLIP1 [42] — комплекс программ для решения задачи на собственные значения для линейного дифференциального уравнения 2-го порядка с граничными условиями, нелинейно зависящими от спектрального параметра, с конечно-разностной аппроксимацией  $O(h^2)$  (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/#slip1>).

2. SLIPH4 [43] — развитие пакета SLIP1 с трехточечной аппроксимацией задачи  $O(h^4)$  (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/#sliph4>). При построении начальных приближений к решению в [43] разработан алгоритм, основанный на методе Ньютона для нахождения корней полинома с исключением уже найденных корней и алгоритме встречной прогонки для повышения устойчивости вычисления собственных функций.

3. SLIPS2 [44] — комплекс программ для решения задачи на собственные значения для системы двух дифференциальных уравнений 2-го порядка (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/#slips2>).

4. SNIDE [45] — комплекс программ для решения задачи на собственные значения для интегродифференциального уравнения (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/snide>).

5. SYSINT (SYSINTM) [46] — комплекс программ для решения задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/sysint>). В программе SYSINTM реализован итерационный процесс, в котором обращение оператора производной нелинейной функции заменяется на каждой итерации на два умножения линейных операторов. Модифицированный алгоритм более эффективен при использовании векторных процессоров.

6. CANM [47] — комплекс программ для решения систем нелинейных алгебраических уравнений с использованием НАМН.

Таблица 1. Комплексы программ для численного исследования нелинейных моделей микропроцессов, описываемых волновыми уравнениями

Комплекс (программа)	Задача (модель)	Организация
TERM MATR TERM, MATR <b>SLIP1, SLIPH4</b> <b>SLIPS2, SYSTEM</b> ITER, BAAP BSMADM SYSTEMQ	Решение задачи двух центров квантовой механики, расчет уровней энергии связи и волновых функций мезомолекул, мезомолекулярных комплексов, квазистационарных состояний, рассеяния на мезоатомах	ГНЦКИ, Москва НИИФ, СПбГУ ИФВЭ, Протвино ОИЯИ, Дубна
<b>SLIPH4</b>	Расчет уровней энергии антипротонной молекулы $\bar{p}\text{He}^+$	ОИЯИ, Дубна
<b>CONTIN-NLIN</b> <b>CONTIN-NLIN-MOD</b> <b>PROGS2H4</b>	Нелинейное уравнение Шредингера	ОИЯИ, Дубна Ун-т Кейптауна, ЮАР
GAP-EV <b>CMATPROG</b>	Устойчивость щелевых солитонов	ОИЯИ, Дубна Ун-т Кейптауна, ЮАР
OSCILLON <b>PROGON4</b>	Осциллоны в модели нелинейного фарадеевского резонанса	ОИЯИ, Дубна Ун-т Кейптауна, ЮАР
POLARON <b>SLIPS2</b> <b>SNIDE, SLIPH4</b>	Расчет характеристик оптической модели полярона [4]	ОИЯИ, Дубна ИМПБ РАН, Пушкино
DEUTERON <b>MATPROG, SLIP1</b>	Квантово-полевая модель бинуклона	ОИЯИ, Дубна ИМПБ РАН, Пушкино
QUARKONIUM <b>SYSINT,</b> <b>SLIPS2</b>	Модель кваркония на основе уравнений Швингера-Дайсона и Бете-Солпитера [4]	ОИЯИ, Дубна
REL-SCHR <b>SLIPH4, SYSINT</b>	Релятивистская модель кваркония	ОИЯИ, Дубна
<b>HEA-CRS</b> <b>HEA-TOTAL</b>	Расчет характеристик ядерных взаимодействий в рамках ВЭП	ОИЯИ, Дубна ИАЭ, Свек, Польша НЦИАЭ, Каир, Египет
DIRAC	Расчет характеристик электронного упругого рассеяния	ОИЯИ, Дубна ИЯИАЭ, София, Болгария

Для каждого пакета дается описание ньютоновских итерационных схем, параметров подпрограмм, обсуждаются особенности программной реализации и приводятся примеры использования пакетов для решения физических задач.

*1.5.2. Комплексы программ для исследования нелинейных моделей микропроцессов.* В состав комплексов POLARON, DEUTERON, QUARKONIUM, REL-SCHR для исследования квантово-полевых моделей входят уже упомянутые программы SLIP1, SLIP4 и SYSINT, реализующие HAMH для различных задач на собственные значения. В комплексах CONTIN-NLIN (<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/contin-nlin>) и OSCILLON реализована процедура продолжения по параметру через точки поворота. Комплекс CONTIN-NLIN-MOD составлен с использованием модифицированной схемы продолжения на плоскости двух параметров.

Комплекс GAP-EV предназначен для продолжения по параметру собственных значений системы дифференциальных уравнений первого порядка в комплексных переменных.

Программы PROGS2H4 (<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/progs2h4>), PROGON4 (<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/progon4>) и MATPROG (СМАТPROG) (<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/matprog>) разработаны для численного решения линейных задач при вычислении ньютоновских итерационных поправок. Подобные задачи сами могут выступать объектом исследования в различных моделях. Кроме того, необходимость их решения возникает, например, в рамках неявных схем при решении уравнений в частных производных. Программы PROGON4 и PROGS2H4 [48] предназначены для решения, соответственно, одного и двух обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями третьего рода. В обеих программах используется конечно-разностная нумеровская аппроксимация четвертого порядка. Программы MATPROG и СМАТPROG реализуют метод матричной прогонки соответственно для случаев вещественных и комплексных переменных.

Комплекс программ HEA (<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/hea>), включающий программы HEA-CRS и HEA-TOTAL, предназначен для расчета характеристик ядро-ядерного взаимодействия в рамках высокоэнергетического приближения.

Комплекс DIRAC разработан для расчета сечений упругого электрон-ядерного рассеяния на основе соответствующей системы уравнений Дирака с использованием технологии Message Passing Interface (MPI) для организации расчетов в параллельном режиме.

## 2. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

**2.1. Уровни энергии мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех частиц.** Задача трех квантовых частиц представляет собой класси-

ческую проблему и используется в качестве модели для описания физических процессов в различных областях: мезокатализ, захват антипротонов в смеси атомов гелия и молекул водорода, ионизация атомов гелия быстрыми электронами и протонами, фрагментация ядер и т. д. Теоретические подходы для изучения этих процессов тесно связаны с компьютерным моделированием. Вычисление с заданной точностью энергий и волновых функций атома гелия и гелиеподобных атомов, сечений реакций ионизации ( $e, 2e$ ) и ( $e, 3e$ ) атома гелия быстрыми электронами, а также исследование реакций простого захвата протона  $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^+$  и захвата протона с ионизацией атома гелия  $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^{++} + e$  являются актуальными задачами для интерпретации новых экспериментов в области лазерной и электронной импульсной спектроскопии (ЭИС) в современной атомной физике. Разработка устойчивых и эффективных методов численного анализа задачи трех квантовых частиц — одна из фундаментальных проблем математического моделирования широкого класса физических процессов.

Данный раздел посвящен изложению алгоритмов, разработанных на основе непрерывного аналога метода Ньютона и его обобщения при изучении моделей мезокатализа, а также главным результатам, полученным с их помощью.

Основные идеи мезокатализа изложены в обзорах [49, 50]. В качестве основной модели рассматривается квантово-механическая проблема трех тел, взаимодействующих по закону Кулона. С помощью расчета характеристик этой системы вычисляются параметры процессов мезокатализа, такие как параметры перезарядки мезоатомов, скорости образования мезомолекул и вероятность прилипания мезонов к гелию. Отмечено, что рассматриваемая модель включает в себя все основные задачи квантовой механики: задачу на связанные состояния, задачу рассеяния и обратную задачу восстановления потенциалов ядерного взаимодействия с использованием экспериментальных данных.

Первым подходом при исследовании этих задач было адиабатическое представление [51], в основе которого лежит разложение волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  исходного уравнения Шредингера для системы трех тел:

$$(H - \varepsilon)\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0,$$

в шестимерном пространстве  $(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  по полному набору решений задачи двух центров:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_j \Phi_j^J(\mathbf{r}; \mathbf{R}) R^{-1} \chi_j^J(R) + \sum_s \int \Phi_s^J(\mathbf{r}, \mathbf{R}; k) R^{-1} \chi_s^J(R, k) dk.$$

Здесь  $\mathbf{R}$  — вектор, соединяющий ядра  $a$  и  $b$  мезомолекулы (их массы  $M_a$  и  $M_b$ ,  $M_a \geq M_b$ );  $\mathbf{r}$  — вектор, соединяющий середину отрезка  $R$  и  $\mu$ -мезон (с массой  $m_\mu$ ).

В результате применения метода Канторовича для редукции уравнения в частных производных получена бесконечная система обыкновенных интегродифференциальных уравнений типа (1) при  $\Gamma = 0$ :

$$\left( \frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv} - U_{ii}^J(R) \right) \chi_i^J(R) = \\ = \sum_{j \neq i} U_{ij}^J(R) \chi_j^J(R) + \sum_s \int U_{is}^J(R, k) \chi_s^J(R, k) dk, \quad (70)$$

где  $M$  — приведенная масса системы в мезоатомных единицах;  $\varepsilon_{Jv}$  — энергия связи вибрационного состояния  $v$  системы с полным орбитальным моментом  $J$ .

Таким образом, в данном подходе необходимо реализовать вычислительную схему, которая одновременно обеспечивала бы точность вычисления необходимых характеристик в зависимости от числа членов разложения, т. е. числа уравнений системы (70), и от параметров численной аппроксимации.

В [52] показано, что ньютоновская итерационная схема в сочетании с методом продолжения по указанным параметрам представляет собой перспективный и наиболее оптимальный подход к решению этой проблемы.

Адиабатическое представление включает в себя разложение волновой функции  $\Psi$  по набору волновых функций задачи двух центров непрерывного и дискретного спектров. Этот набор и эффективные потенциалы  $U_{ij}^J(R)$  находятся численно. Контроль за точностью вычислений представляет собой на каждом этапе реализации и в комплексе сложную проблему.

Для решения задачи рассматривается проблема численного построения базиса адиабатического представления задачи трех тел. Постановка задачи двух центров, алгоритмы вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектров и матричных элементов по ним приведены в работах [53–56]. В вычислительных схемах реализована концепция продолжения по параметрам, которыми в данном подходе являются константы связи и число членов в разложениях двухцентровых волновых функций по специальным базисам. Использовались асимптотические свойства волновых функций и энергий (термов) системы при  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$  ( $R$  — фиксированное расстояние между двумя центрами).

С учетом асимптотики искомым волновых функций системы (70) сформулированы граничные условия для волновых функций дискретного, непрерывного и дискретно-непрерывного (в задаче рассеяния с закрытыми каналами) спектров, нелинейно зависящие от энергии.

Численная аппроксимация задачи для системы радиальных уравнений (70) включает разностную аппроксимацию дифференциального оператора в этом уравнении и применение квадратурных формул того же порядка точности для интегрального оператора.

В семидесятые годы впервые [54] были получены результаты в двухуровневом приближении. Они нашли подтверждение в модели Весмана резонансного образования мезомолекулы  $dd\mu$  [49, 50] и инициировали более перспективные для изучения проблемы мезокатализа исследования мезомолекулы  $dt\mu$ .

Решение больших систем и экстраполяция результатов по параметрам аппроксимации было реализовано с использованием НАМН и метода продолжения по параметрам.

В финальном адиабатическом расчете [57] с использованием 844 уравнений системы (70) были получены нерелятивистские значения уровней энергии слабосвязанных вращательно-колебательных состояний  $J = v = 1$  мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ :  $\varepsilon_{11}(dd\mu) = -1,956$  эВ и  $\varepsilon_{11}(dt\mu) = -0,656$  эВ.

**2.2. Новые эффективные потенциалы двухуровневого приближения и решение задачи рассеяния в системе трех частиц.** Результаты, полученные в адиабатическом приближении, стимулировали прямые вариационные вычисления [58], поскольку развитие вычислительных мощностей позволило выполнить такие трудоемкие расчеты с полностью заполненными матрицами. Позднее в вариационных вычислениях [59] были получены уточненные значения  $-\varepsilon_{11}(dd\mu) = 1,97475$  эВ и  $-\varepsilon_{11}(dt\mu) = 0,6600$  эВ. В этих вычислениях использовалось около 2660 вариационных функций дискретного спектра, вид которых был выбран с учетом особенностей адиабатического разложения в сферической системе координат. Поскольку первые результаты для энергии слабосвязанных состояний мезомолекул были получены в адиабатическом представлении, было необходимо объяснить приведенные выше расхождения. Это полезно и для экономичного применения адиабатических приближений (AD) в мюонной трехтельной задаче рассеяния, поскольку ее решение другими авторами также было реализовано по расширяющейся многоканальной схеме [60] без учета результатов, полученных для связанных состояний. Простая идея — построить эффективные потенциалы двухканального приближения, имеющие правильную асимптотику и воспроизводящие принятые за эталон на сегодняшний день уровни энергии дискретного спектра, дает экономичную схему расчета задачи рассеяния и двухуровневые волновые функции дискретного спектра с правильной асимптотикой [61].

Первые адиабатические вычисления были выполнены в двухуровневом приближении. В 1975 г. впервые вычислено квазистационарное состояние  $dt\mu$ -молекулы с полным орбитальным моментом  $J = 1$  и  $M = 10,894$  (в этих единицах приведенная масса  $m^* = 202,024m_e$ ). Для этой массы были вычислены энергия  $-\varepsilon = E = 0,68$  эВ ( $E \equiv \tilde{E} - E_1(\infty)$ ) и ширина этого состояния  $\Gamma = 10,87$  эВ. Радиальные волновые функции  $\chi_1^{(1)}(R)$  для открытого канала и  $\chi_2^{(1)}(R)$  для закрытого канала в случае упругого рассеяния

$$(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d \quad (71)$$

представлены на рис. 3, *a*. Однако эти результаты не были опубликованы в работах [62]. В работе [63] был воспроизведен переход квазистационарного состояния  $dt\mu$  в слабосвязанное, когда эффективная масса  $M$  увеличивается как параметр.

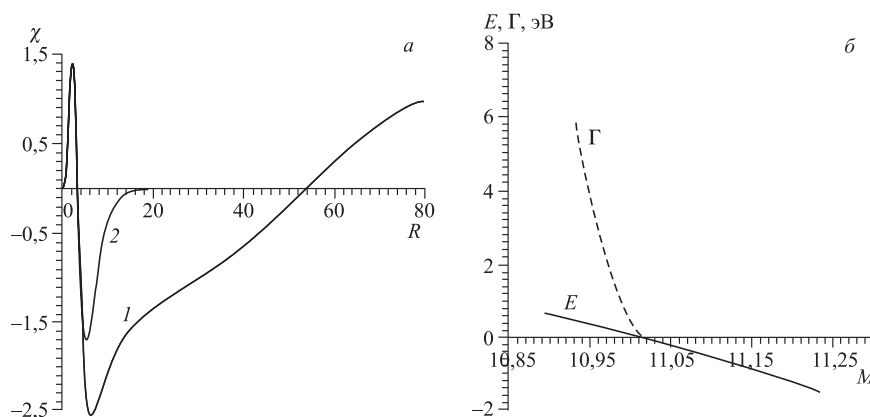


Рис. 3. *a*) Радиальные волновые функции: 1 —  $\chi_1^{(1)}(R)$  для открытого и 2 —  $\chi_2^{(1)}(R)$  для закрытого каналов в случае упругого рассеяния  $(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d$  с орбитальным моментом  $J = 1$ . *б*) Зависимость энергии  $E$  и ширины  $\Gamma$  от эффективной массы  $M$  для  $dt\mu$ -мезомолекулы

На рис. 3, *б* приведена зависимость энергии  $E$  и ширины  $\Gamma$  от этой массы. Для массы со значением  $M \sim 11,01$  мы имеем состояние с нулевой энергией и нулевой шириной, так называемое полусвязанное состояние. Радиальные функции для такого случая представлены на рис. 4, *a*. Функция 1 открытого канала уменьшается медленно по сравнению с функцией 2 закрытого канала. Когда масса  $M$  увеличивается, система  $dt\mu$  переходит в связанное состояние. Для значения массы  $M \sim 11,12$  получено «симметричное» значение энергии  $E = -0,68$ . Поэтому можно ожидать, что слабосвязанное состояние ( $J = 1, v = 1$ ) существует и значение энергии связи близко к такому значению, если мы учтем все неадиабатические поправки к уровню энергии. Действительно, наши многоканальные адиабатические и вариационные результаты близки к этой величине. Имея функцию  $E = E(M)$ , можно найти для «точного» значения  $E = -0,66$  эВ соответствующее значение эффективной массы  $M \sim 11,11$ . Радиальные функции для этого состояния представлены на рис. 4, *б*. Эти функции, в отличие от вариационных [64, 65], имеют правильную асимптотику при  $R \rightarrow \infty$ . Таким образом, подбором эффективной массы  $M = M(E)$  в двухуровневом приближении восстанавливается значение вариационного уровня энергии.

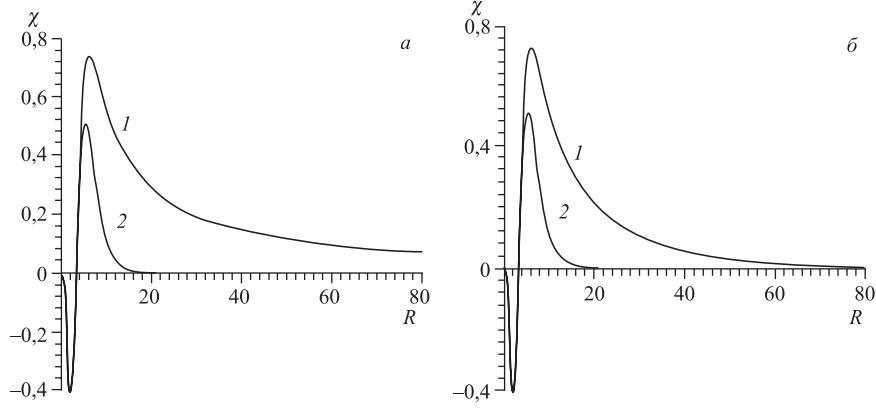


Рис. 4. а) Радиальные волновые функции: 1 —  $\chi_1^{(1)}$  для открытого и 2 —  $\chi_2^{(1)}$  для закрытого каналов при  $J = 1$ , нулевой энергии связи  $\varepsilon = 0$ ,  $(t\mu)_{n=1} + d \rightarrow (t\mu)_{n=1} + d$ . б) Радиальные волновые функции: 1 —  $\chi_1^{(1)}$  и 2 —  $\chi_2^{(1)}$  основного состояния ( $J = 1, v = 1$ )  $dt\mu$ -мезомолекулы

Полученные результаты по моделированию перехода квазистационарного состояния в связанное привели к естественному обобщению эффективной массы  $M$  как переменного оператора  $\Theta$  (см. (1),  $\Gamma = 0, \Pi = 0$ ) в новом эффективном двухуровневом приближении [63]:

$$\left[ \delta M \mu^{-1}(R) \frac{d^2}{dR^2} - \delta M (2\tilde{Q}(R, M)) \frac{d}{dR} + \tilde{V}^J(R, M) + \tilde{p}^2 \right] \tilde{\chi}(R, \tilde{p}) = 0.$$

Здесь  $\tilde{p} = 2M\varepsilon$  — матрица импульсов;  $\delta M = \mathbf{M}/M$  — матрица поправок между якобиевской  $\mathbf{M}$  и адиабатической  $M$  массами;  $\tilde{Q}(R, M) = Q(R) + (2M)^{-1}\Delta Q(R)$ ,  $\tilde{V}^J(R, M) = V^J(R) + (2M)^{-1}\Delta V^J(R)$  — матрицы новых эффективных потенциалов и  $\mu^{-1}(R) = 1 + (2M)^{-1}\Delta\mu^{-1}(R)$  — обратная матрица эффективных масс  $\mu(R)$ , зависящая от расстояния и удовлетворяющая при  $R \rightarrow \infty$  асимптотическим условиям  $\delta M \mu^{-1}(R) \rightarrow 1$ . При этом поправки  $\Delta Q(R)$ ,  $\Delta V^J(R)$  и  $\Delta\mu^{-1}(R)$  определяются матричными элементами  $Q_{ij}(R)$  и  $V_{ij}^J(R)$  и собственными значениями  $E_j(R)$  кулоновской задачи двух центров, входящими в определения эффективных потенциалов системы (70). Например, диагональные поправки  $\Delta\mu_{ii}^{-1}(R)$  определяются в виде суммы:

$$-\Delta\mu_{ii}^{-1}(R) = 4 \sum_{j \neq i}^{\infty} \frac{Q_{ij}(R)Q_{ji}(R)}{(E_i(R) - E_j(R))} + \sum_{s=0}^{\infty} \int dk \frac{Q_{is}(kR)Q_{si}(kR)}{(E_i(R) - k^2/2)}. \quad (72)$$

Если суммирование и интегрирование в (72) выполняются по полному набору состояний дискретного и непрерывного спектров кулоновской задачи



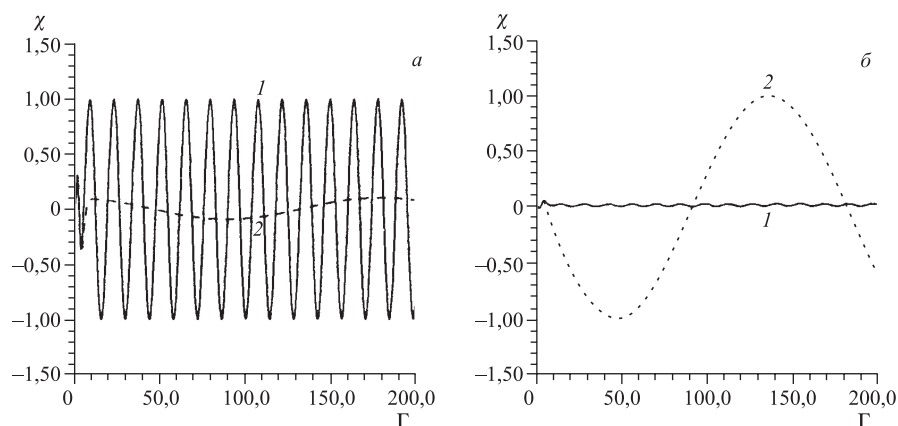


Рис. 5. а) Радиальные волновые функции: 1 —  $\chi_1^{(1)}$  и 2 —  $\chi_2^{(1)}$  для  $J = 0$ , соответствующие рассеянию  $(t\mu) + d$  с двумя открытыми каналами при энергии  $E = 0,3$  эВ; б) радиальные волновые функции: 1 —  $\chi_1^{(2)}$  и 2 —  $\chi_2^{(2)}$  для  $J = 0$ , соответствующие рассеянию  $(d\mu) + t$  с двумя открытыми каналами при той же энергии  $E = 0,3$  эВ

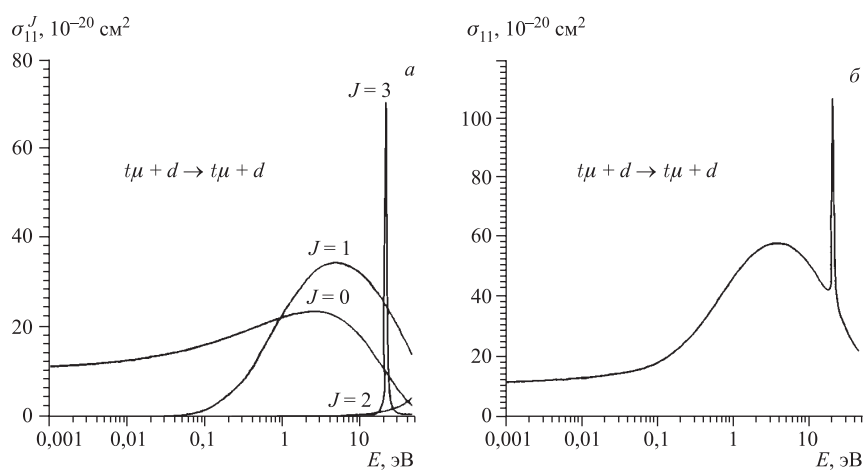


Рис. 6. Зависимость парциальных сечений  $\sigma_{11}^J(E)$ ,  $J = 0, 1, 2, 3$ , (а) и полного сечения  $\sigma_{11}(E)$  (б) от энергии  $E$  для процесса рассеяния  $t\mu$ -атомов на ядре дейтерия

двух центров, то асимптотическое соотношение выполняется в силу правила сумм Томаса–Рейхе–Куна. Поскольку при суммировании учитывается только конечное число членов, то асимптотическое соотношение точно не

выполняется. С другой стороны, имеет место приближенное соотношение:  $\mu^{-1}(\infty) = 1 - (2M)^{-1}0,5 \approx 0,973$ , при  $(2M)^{-1} \approx 0,05339$  (точное для  $dd\mu$ ). Если в (72) используется только конечное число состояний непрерывного спектра, имеем следующее значение:  $\tilde{\mu}^{-1}(\infty) \approx 1 - (2M)^{-1}0,28 \approx 0,985$ . Этот факт объясняется спецификой поведения матричных элементов, связывающих дискретный и непрерывный спектры задачи двух центров [55]. В самом деле, локализация матричных элементов с увеличением номера  $l$  — орбитального момента мюона смещается в сторону больших значений  $R$  [66]. Следовательно, если при суммировании по  $l$  в формуле (72) ограничиться конечным числом членов  $l_{\max}$ , то вклад непрерывного спектра  $\approx 44\%$  при  $l > l_{\max}$  будет потерян при  $R \rightarrow \infty$ . В результате имеем  $|(\mu^{-1}(\infty) - \tilde{\mu}^{-1}(\infty))/\mu^{-1}(\infty)| \approx 1\%$ . В частности, подстановка приближенных значений эффективных масс при фиксированном числе базисных функций  $l_{\max}$  в точке  $R_0 < R_m$  (на границе области действия эффективного потенциала) с необходимостью использовалась для расчетов задачи рассеяния с закрытыми каналами в работе [67]. Как показано в работе [63], учет этого обстоятельства при формулировке краевой задачи на конечном интервале  $R \in [0, R_{\max}]$  для слабосвязанных состояний  $dd\mu$  и  $dt\mu$  объясняет относительную разность, порядка 1%, между результатами, полученными вариационным методом и в адиабатическом приближении. Таким образом, при подходящем выборе значения эффективной массы  $M = M(E)$  можно ограничиться конечным числом членов при суммировании в (72).

Для проверки этого подхода были выполнены вычисления [68] сечения реакции (71), использующие соответствующее значение массы  $M$ . Радиальные волновые функции  $\chi_1^{(1)}, \chi_2^{(1)}$  и  $\chi_1^{(2)}, \chi_2^{(2)}$ , соответствующие реакциям  $(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d$  и  $(d\mu)_{1s} + t \rightarrow d + (t\mu)_{1s}$ , представлены на рис. 5. Результаты вычисления частичных парциальных ( $\sigma_{11}^J$ ) и полных ( $\sigma_{11}$ ) сечений упругой реакции  $t\mu$ -атома на ядре дейтерия  $d$  (см. рис. 6) находятся в согласии с другими многоканальными вычислениями [69] и воспроизводят известную форму резонанса для  $J = 3$  и  $E \sim 21$  эВ.

**2.3. Структура «экзотической» системы  $\bar{p}\text{He}^+$ .** В этом пункте описаны расчеты структуры уровней энергии «экзотической» системы  $\bar{p}\text{He}^+$  [70–73]. Схемы уровней энергии представлены на рис. 7. При расчете начальных оценок энергии этой структуры в широком диапазоне квантовых чисел использовалась развитая в предыдущем пункте идея построения новых эффективных потенциалов двухуровневого приближения, воспроизводящих известные с большой точностью спектрметрические экспериментальные данные [74] за счет выбора подгоночных параметров [72]. Это приближение позволило не только экономично выполнить необходимые расчеты, но и получить первые оценки тонкой и сверхтонкой структур и спиновых эффектов в спектроскопии системы [71, 73].

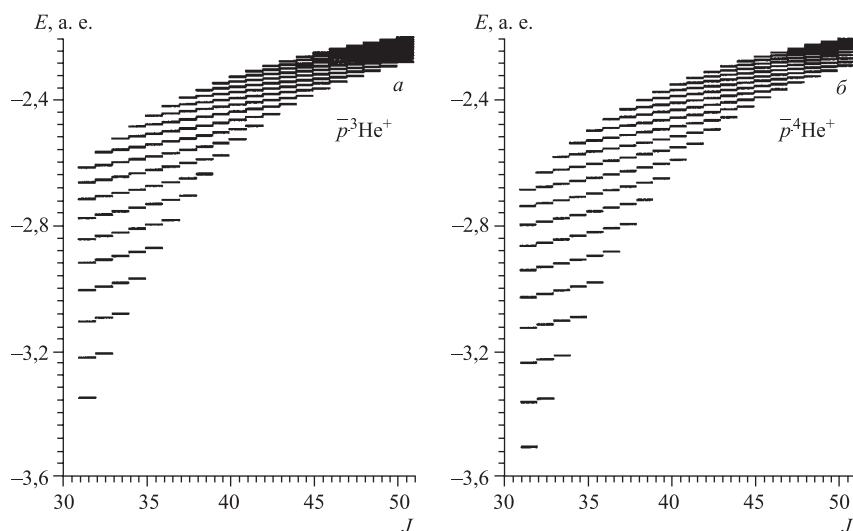


Рис. 7. а) Уровни энергии  $E_v^J$  ( $J = 30-50, v = 0-9$ ) молекулы  $\bar{p}^3\text{He}^+$ . б) Уровни энергии  $E_v^J$  ( $J = 30-50, v = 0-9$ ) молекулы  $\bar{p}^4\text{He}^+$

Эксперименты [74], использующие эффект индуцированного лазерного насыщения, показали, что метастабильные состояния  $\bar{p}\text{He}^+$ -системы имеют квантовые числа  $n_{\text{max}} \sim 40$ ,  $l_{\text{max}} \sim n_{\text{max}} - 1$ , которые соответствуют орбитам, близким к круговым, и главную первичную заселенность, появляющуюся при  $n \sim 38$ . Однако изолированная система имеет дополнительно к этим состояниям целый ряд других заселенных метастабильных состояний.

Для объяснения экспериментов необходимо было прежде всего вычислить начальные заселенности и вращательно-колебательные состояния системы. Характеристики этих состояний можно определить, зная схему энергетических уровней системы.

Здесь представлены расчеты уровней энергии  $\bar{p}\text{He}^+$ -системы с помощью эффективного адиабатического представления с учетом неадиабатической связи [68, 70]. Для изучения особенностей метастабильных состояний  $\bar{p}\text{He}^+$  были использованы различные приближения при формировании эффективных потенциалов в системе (70). Здесь мы используем стандартные определения, взятые из [75], и программу [76] для вычисления состояний дискретного (D) спектра и приближения двух типов для определения состояний непрерывного (C) спектра электрона задачи двух кулоновских центров. Первое — приближение объединенного атома (UA) на всей полуоси  $R$ , а второе — комбинация приближения объединенного атома при малых  $R$  и приближения разделенного атома при больших  $R$ . Реализована вто-

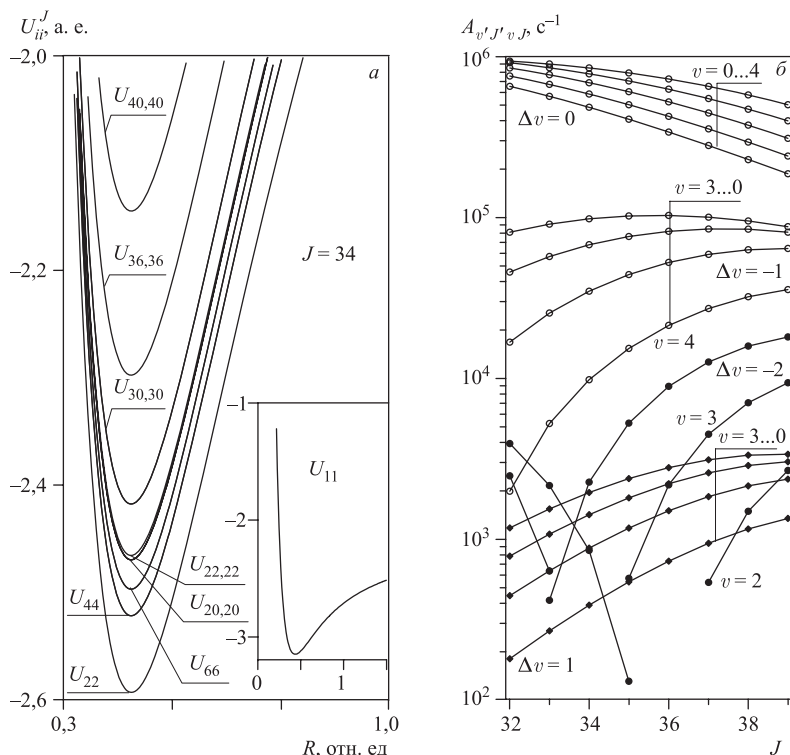


Рис. 8. а) Диагональные эффективные потенциалы  $U_{ii}^J(R)$  при  $J = 34$ . б) Скорости  $A_{v'J'v,J}$  некоторых радиационных переходов между состояниями  $J'v' \rightarrow Jv$  иона  $\bar{p}\text{He}^+$  ( $\Delta v = v' - v$  и  $\Delta J = J' - J$ )

рая схема с разьединенным атомом (SA) согласно [75]. Как будет показано ниже, использования этих двух приближений (SA и UA) достаточно для получения нижних и верхних оценок трехчастичной энергии  $E_v^J$ . Полнота выбранного набора состояний соответствует вкладу второго порядка ТВ в  $\Delta E_v^J = E_v^J - E_v^{J\text{BO}}$ , что контролировалось оценкой соответствующих правил сумм Томаса–Рейхе–Куна для эффективных потенциалов с точностью  $10^{-5}$ . В этом случае 21 состояние дискретного и 42 состояния непрерывного спектров задают требуемые эффективные потенциалы для системы радиальных уравнений (70). Для дискретной части спектра соответствующие элементы базиса  $\{i = 1, \dots, 21\}$  связаны с набором сферических квантовых чисел ( $Nlm$ ) объединенного атома:  $\{(m = 0, l = 0, N = 1), (m = 1, l = 1, N = 2), \dots, (m = 1, l = 1, N = 11), (m = 0, l = 0, N = 11)\}$ . Для непрерывной части спектра эта последовательность дополнена следующей

подпоследовательностью  $\{i = 22, \dots, 63\}$ :  $\{(m = 1, l = 1, \varepsilon_1), (m = 0, l = 0, \varepsilon_1), \dots, (m = 1, l = 1, \varepsilon_{21}), (m = 0, l = 0, \varepsilon_{21})\}$ , с теми же значениями  $m, l$  и энергией электрона  $\varepsilon_k = 0,5 \operatorname{tg} x_k$ ,  $k = 1, \dots, 21\}$ , взятой на равномерной сетке  $\omega_h(x)$ :  $(x_1 = 10^{-8}, x_{k+1} = hk, k = 1, \dots, 20, h = 0,075, x_{21} = 1,5)$ . На рис. 8, а показана последовательность эффективных потенциалов  $U_{ii}^J$  для  $J = 34$ . Заметим, что диагональные эффективные потенциалы с номерами 22 и 23, соответствующие состояниям с нулевой энергией ( $m = 1, l = 1, \varepsilon_1$ ) и ( $m = 0, l = 0, \varepsilon_1$ ), разделяют непрерывный и дискретный спектры электрона задачи двух центров.

Задача на собственные значения для системы из 63 связанных уравнений (21 состояние дискретного спектра и 42 — непрерывного спектра) решалась с помощью ньютоновской итерационной схемы [58]. Применялась конечно-разностная аппроксимация краевых задач шестого порядка точности по шагу  $h = h_R$  равномерной сетки  $\omega_h(R)$ , протестированной на подходящей точнорешаемой кулоновской двухчастичной задаче ( $\alpha$ -частица и антипротон) при  $J \sim 30$  в работе [77], т.е. для антипротонного атома гелия в конечном состоянии после инъекции оже-электрона. Вычисления проводились для  $28 < J < 42$  на равномерной сетке  $\omega_h(R) = \{R_0 = 0,1; R_i = R_{i-1} + h, R_n = 1,5; i = 1, n\}$  с точностью  $O(h^6)$  при шаге  $h = 0,00625$ .

На рис. 9 представлены разности  $\Delta E_v^J = E_v^J - E_v^{JBO}$ , составленные из значений  $E_v^J$  энергии AD-, DSA-, SA-, UA-приближений (70) и VK-вариационного расчета [78] относительно ВО-приближения (ВО — приближение Борна–Оппенгеймера)  $E_v^{JBO}$  (выбранного здесь как начало отсчета), в зависимости от орбитального момента  $J$  и вибрационного квантового числа  $v = 0, 1, 2, 3$ .

Анализируя DSA-кривые (DSA — дискретный спектр разъединенного атома), соответствующие вычислениям с учетом только дискретного D электронного спектра, видим, что асимптотическое поведение вклада непрерывного спектра С в SA-приближение также правильное и дает верхнюю оценку по отношению к более точной кривой VK, представляющей результаты вариационных расчетов [78]. Как видно, ВО-приближение удовлетворительно выше  $J_B = 37$  и неудовлетворительно ниже этого значения. Это очевидно, поскольку при  $J < J_B$  диагональные эффективные потенциалы  $U_{22,22}^J$  и  $U_{23,23}^J$ , разделяющие дискретный и непрерывный спектры электрона задачи двух центров, находятся ниже первого порога SA разъединенного атома  $\text{He}^+$ .

Другая интересная точка  $J_A = 32$ , соответствующая нижнему метастабильному состоянию, разделяет области  $J < J_A$ , где преобладают оже-процессы. Как видно, ниже этой точки разность  $\Delta E_v^J$  между значениями энергии в DSA- и ВО-приближениях отрицательна, это означает, что ВО-приближение не дает нижнюю границу, если не учитывать вклад непрерывной части спектра, соответствующей оже-процессам. Это означает, что ниже  $J_A$  роль про-

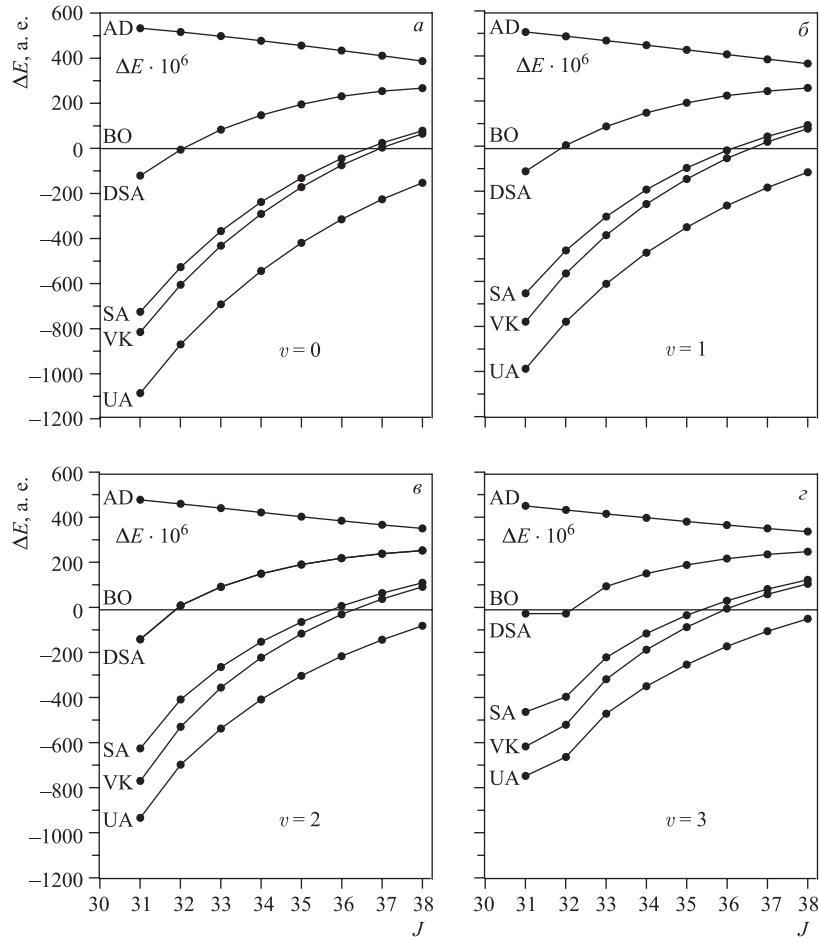


Рис. 9. Разности значений энергии  $\Delta E_v^J = E_v^J - E_v^{JBO}$ , вычисленные в AD-, DSA-, SA-, UA-приближениях, и вариационного расчета VK [78] относительно начала отсчета в ВО-приближении в зависимости от орбитального момента  $J$  и вибрационного квантового числа  $v = 0, 1, 2, 3$

цессов возбуждения также возрастает, т.е.  $J_A$  — нижняя граница относительно устойчивых метастабильных состояний.

Таким образом, определена область существования метастабильных состояний  $J_A < J < J_B$ , внутри которой ВО-приближение не верно и неадиабатическую связь необходимо учитывать для получения адекватной структуры уровней и переходов между ними. Можно заключить, что рассмотрение неади-

абатической связи в уравнениях (70) дает верхнюю и нижнюю границы сдвига  $\Delta E_v^J$  относительно ВО-энергии. Это может быть использовано для фитирования экспериментальных данных при построении подходящего эффективного приближения для волновых функций [79]. В качестве примера сравним теоретические значения длин волн, соответствующих UA-приближению (без фитирования), с экспериментом [74]:

$$(3, 35) \rightarrow (3, 34) : \delta E = 0,076288, \lambda = 597,255, \text{exp } 597,259(2) \text{ нм};$$

$$(2, 35) \rightarrow (2, 34) : \delta E = 0,086033, \lambda = 529,603, \text{exp } 529,621(3) \text{ нм};$$

$$(2, 34) \rightarrow (2, 33) : \delta E = 0,096794, \lambda = 470,724, \text{exp } 470,724(2) \text{ нм}.$$

На рис. 8, б показаны оценки  $A_{v'J'vJ}$ -скоростей радиационных переходов, подобные полученным ранее в ВО-приближении [80]. Оценки уровней энергии и переходного дипольного момента, вычисленные представленным здесь методом, применялись для построения теоретических моделей измерения и контроля динамики населенностей метастабильных состояний лазерными импульсами [81]. Отметим, что представленная схема расчетов, учитывающая неадиабатическую ротационно-вибрационную связь состояний с подходящим набором квантовых чисел электрона ( $lm$ ), также позволяет иметь требуемые оценки скоростей радиационных переходов  $A_{v'J'vJ}$ , уровней энергии  $E_v^J$  и ширин  $\Gamma_v^J$  для метастабильных состояний иона  $\bar{p}\text{He}^+$  с электроном не только в основном, но и в возбужденном состоянии [82, 83]. В качестве примера укажем ридберговские состояния антипротонного атома гелия в так называемом приближении Борна–Оппенгеймера для термов  $W_{Nlm}(R)$ , соот-

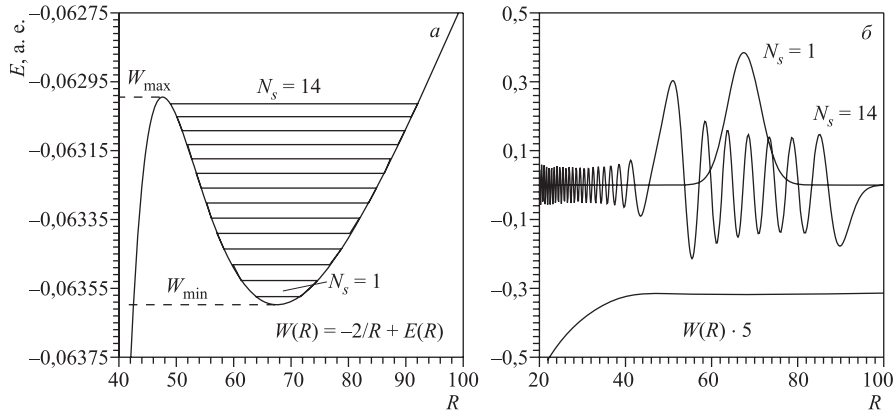


Рис. 10. а) Уровни энергии  $E$  во внешней осцилляторной яме  $W_{Nlm}(R)$  при  $N = 6$ ,  $l = 5$ ,  $m = 0$ ; б) волновые функции для низшего и высшего уровней энергии

ветствующие диагональным эффективным потенциалам  $U_{ii}^J(R)$  при  $J = 0$  без диагональной неадиабатической поправки. При  $N = 6$ ,  $l = 5$ ,  $m = 0$  такой потенциал, представленный на рис. 10, *а*, поддерживает 14 почти эквидистантных квазистационарных состояний, уровни энергии которых описываются приближенной формулой  $E^{\text{approx}} = W_{\min} + C_v(W_{\max} - W_{\min})$ ,  $C_v = 0,04 + 0,07v$ ,  $v = 0, 1, \dots, 13$ , где  $W_{\min} = -0,0635974$  и  $W_{\max} = -0,0629946$  — локальные минимум и максимум потенциала. Положение локальных минимума и максимума  $R_{\min} = 67,6$  и  $R_{\max} = 47,6$  определяется из асимптотического разложения ридберговского термина  $W_{Nlm}(R)$  по обратным степеням  $R$ . Радиальные волновые функции во внешней яме, соответствующие минимальному  $N_s = v + 1 = 1$  и максимальному  $N_s = 14$  уровням энергии, показаны на рис. 10, *б*.

**2.4. Задача рассеяния трех бозонов на прямой.** В ядерной физике для корректного решения задачи нескольких частиц с короткодействующими парными взаимодействиями широко используются методы биполярных и гиперсферических гармоник и поверхностных однопараметрических функций. В этих подходах исходная задача редуцируется методом Галеркина или Канторовича к спектральным задачам для систем интегродифференциальных или обыкновенных дифференциальных уравнений с гиперрадиусом в качестве независимой переменной. Особый интерес вызывают задачи с сингулярными взаимодействиями, например, центробежными взаимодействиями, взаимодействиями нулевого радиуса в виде  $\delta$ -функций, и задачи с граничными условиями третьего рода. Дело в том, что дифференциальная постановка таких задач вызывает трудности. Чтобы их избежать, используется формулировка задачи в виде системы интегральных уравнений, в которой все трудности преодолеваются путем выбора подходящего параметрического базиса и аппроксимации алгебраической задачи с полностью заполненными матрицами. Поэтому актуальной задачей является разработка устойчивых итерационных схем и алгоритмов решения спектральных задач для систем фредгольмовских интегральных уравнений.

В работе [84] выполнен анализ разработанных алгоритмов, их апробация проведена на интегрируемых моделях трех бозонов на прямой с парными взаимодействиями нулевого радиуса, поскольку здесь известны собственные значения энергии  $E$  связанного и полусвязанного состояний и  $S$ -матрица процессов упругого рассеяния [86]. Зависимость от квадрата импульса фазового сдвига и его производной от импульса для процесса упругого рассеяния ниже трехчастичного порога  $E \leq 0$  представлена на рис. 1, *б*. Для рассматриваемой модели уравнение Шредингера в полярных координатах  $\rho$  и  $\theta$  для парциальной волновой функции  $\Psi_i(\rho, \theta)$  имеет вид [86]:

$$\left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - h_\rho + 2E \right] \Psi_i(\rho, \theta) = 0, \quad \rho \in \mathcal{R}_+^1, \quad \theta \in \Omega. \quad (73)$$



Здесь  $\Psi_i$  — искомая волновая функция;  $E$  — энергия в системе центра масс (в единицах  $\hbar = m = 1$ , где  $m$  — масса бозона);  $h_\rho$  — параметрический гамильтониан при каждом фиксированном значении  $\rho$ :

$$h_\rho = -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{2g}{\rho} \sum_{n=0}^5 \delta(\theta - \theta_n), \quad \theta_n = \frac{n\pi}{3} + \frac{\pi}{6}, \quad (74)$$

где  $g = 2c\bar{\kappa}$  — константа взаимодействия,  $\bar{\kappa} = \pi/6$ ,  $c = -1$  соответствует притяжению двух частиц, а  $c = 1$  — отталкиванию. Полная волновая функция  $\hat{\Psi}$  ищется в виде разложения Канторовича по ортогональному набору поверхностных однопараметрических функций  $B_j(\rho, \theta)$  и  $B_j^{\text{as}}(\theta) = B_j(\rho \rightarrow \infty, \theta)$  с неизвестными коэффициентами  $\chi_{ji}(\rho)$ :

$$\hat{\Psi} = \sum_{i=0}^{N-1} |\Psi_i\rangle \langle B_i^{\text{as}}|, \quad |\Psi_i\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} |B_j\rangle \langle B_j|\Psi_i\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} B_j(\rho, \theta) \chi_{ji}(\rho). \quad (75)$$

Собственные функции  $B_j(\rho, \theta) \in \mathcal{W}_2^1(\Omega)$  и собственные значения  $\epsilon_j(\rho)$  гамильтониана (74) находятся при каждом фиксированном значении  $\rho \in \mathcal{R}_+^1$  из краевой задачи

$$\begin{cases} -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} B_j(\rho, \theta) = \epsilon_j(\rho) B_j(\rho, \theta), \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} B_j(\rho, \theta) \Big|_{\theta=\theta_n^\pm} = \mp c\bar{\kappa} B_j(\rho, \theta_n^\pm), \quad \theta_n^\pm = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}. \end{cases} \quad (76)$$

В результате усреднения уравнения (73) по базису  $B_j(\rho, \theta)$  получается система из  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений на полуоси  $\rho \in \mathcal{R}_+^1$  типа (41) при  $n = 2$ . Асимптотические граничные условия по радиальной переменной зависят от типа физических процессов. Например, асимптотика радиальных функций  $\chi_{ji}(\rho)$  при  $\rho \rightarrow \infty$  выше трехчастичного порога ( $E > 0$ ) имеет вид

$$\begin{cases} \chi_{0i}^{\text{as}}(\rho) \rightarrow (-Y_{1/2}(q\rho)\delta_{0i} + J_{1/2}(q\rho)W_{0i}), \\ \chi_{ji}^{\text{as}}(\rho) \rightarrow (J_{6j-3}(k\rho)\delta_{ji} + Y_{6j-3}(k\rho)W_{ji}), \end{cases} \quad \text{при } c = -1, \quad (77)$$

$$\chi_{ji}^{\text{as}}(\rho) \rightarrow (J_{6j+3}(k\rho)\delta_{ji} + Y_{6j+3}(k\rho)W_{ji}) \quad \text{при } c = 1,$$

где  $q = \sqrt{\pi^2/36 + k^2}$ ,  $2E = k^2$ , а  $J_i$  и  $Y_i$  — функции Бесселя и Неймана первого рода;  $W_{ji} = K_{ji}^{-1}$  — элементы обратной матрицы реакции. Соответствующая двумерная задача рассеяния для уравнения (73) в представлении поверхностных однопараметрических функций (75) формули-

руется как многоканальная спектральная задача (2) относительно пары неизвестных  $z = (K, \Psi)$  для системы одномерных интегральных уравнений (47) с матричными операторами (48) и дополнительного вариационного функционала Швингера (50). Сходимость разложения (75) в методе Канторовича и эффективность предложенных итерационных схем (53) продемонстрирована для рассматриваемой модели ниже трехчастичного порога ( $E < 0$ ) и в окрестности выше трехчастичного порога ( $E > 0$ ). Как видно из рис. 11 и 12, волновые функции имеют максимумы для притяжения ( $c = -1$ ) и минимумы для отталкивания ( $c = 1$ ) на границах шести секторов круга  $\Omega$ , где первые и вторые производные решения имеют скачок. Вычислены элементы  $K$  матрицы ниже трехчастичного порога и в окрестности выше трехчастичного порога с четырьмя и тремя верными цифрами, соответственно, в случае  $N = 6$ . Проведено сравнение с аналитическими результатами [87].

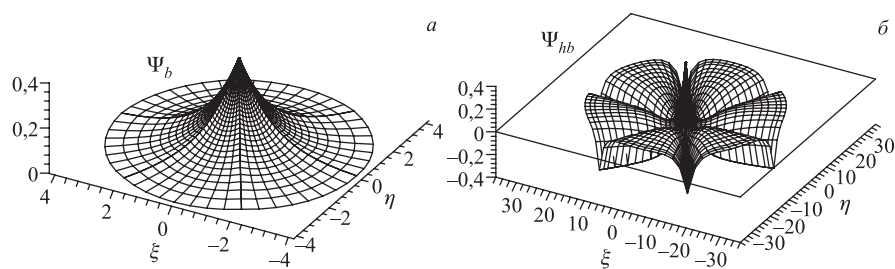


Рис. 11. Волновые функции основного состояния  $\Psi_b$  (а) и полусвязанного состояния  $\Psi_{hb}$  (б) при  $2E_b \approx 2E^{\text{exact}} = -\pi^2/9$  и  $2E_{hb} \approx 2E^{hb,\text{exact}} = -(\pi/6)^2$  ( $q = 0$ )

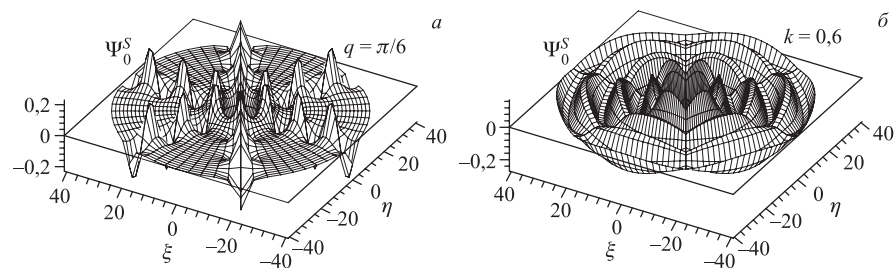


Рис. 12. Волновые функции рассеяния  $\Psi_0^S$  при  $q = \pi/6$  (при трехчастичной пороговой энергии  $2E = -k^2 = 0$ ) для притягивающих парных потенциалов ( $c = -1$ ) (а) и при  $k = 0,6$  для отталкивающих парных потенциалов ( $c = 1$ ) (б)

Таблица 2. Сравнение скорости сходимости разложений Канторовича (К) (75) и Галеркина (Г) (78) на примере расчета энергии  $E(N)$  связанного трехчастичного состояния. В первой строке показано число уравнений  $N$ , во второй и третьей строках — разности  $\Delta E(N) = E(N) - E^{\text{exact}}$  вычисленного  $E(N)$  и точного значения энергии  $E^{\text{exact}}$

Разность $\Delta E(N)$	$N$					
	1	2	3	4	5	6
$\Delta E^K$	1,801(-4)	2,762(-6)	2,697(-7)	5,413(-8)	1,594(-8)	5,949(-9)
$\Delta E^\Gamma$	9,662(-2)	4,116(-2)	2,573(-2)	1,866(-2)	1,462(-2)	1,201(-2)

На примере расчета энергии  $E(N)$  связанного трехчастичного состояния для этой модели ( $c = -1$ ) в табл. 2 представлено сравнение скорости сходимости разложений Канторовича (75) и Галеркина:

$$\Psi_i(\rho, \theta) = (2\pi)^{-1/2} \bar{\chi}_0(\rho) + (\pi)^{-1/2} \sum_{j=1}^{N-1} \bar{\chi}_j(\rho) \cos(6j\theta). \quad (78)$$

Медленная скорость сходимости значений энергии  $\Delta E^\Gamma(N)$  при увеличении числа  $N$  базисных функций (78) объясняется тем, что ослабить достаточные условия сходимости классического метода Галеркина здесь нельзя. Более того, редуцированная таким образом задача при любом конечном  $N$  на полуоси имеет ложный кулоновский спектр с квантовым дефектом и качественно отличное пороговое поведение для фазового сдвига [85]. Это обстоятельство следует учитывать при редукации методом Галеркина краевой задачи для системы трех частиц с парными взаимодействиями, поддерживающими связанные состояния.

**2.5. Корреляция электронов в процессах ионизации атома гелия.** Прогресс, достигнутый в последние годы в развитии экспериментальных методов электронной импульсной спектроскопии (ЭИС) (когда в конце реакции появляются, как минимум, два быстрых электрона, измеряемых на совпадение) [88], в частности, развитие спектроскопии по импульсу иона отдачи в холодной мишени (cold-target recoil-ion momentum spectroscopy (COLTRIMS)), позволяет выполнить точные, кинематически полные исследования сложных атомных соударений [89].

Уникальные эксперименты по однократной и двукратной ионизации атомов и молекул быстрыми электронами, проводимые японскими учеными в геометрии метода (ЭИС), показали необходимость как ревизии теории динамических механизмов этих процессов, так и создания нового семейства вариационных волновых функций, максимально приближенных к точному решению

многочастичного уравнения Шредингера для атома или молекулы [90]. В этих целях вместо интегрального уравнения Липпмана–Швингера с некомпактным сингулярным ядром формулируются и исследуются интегральные уравнения резольвентного типа для системы нескольких частиц с кулоновским взаимодействием, которые имеют связное ядро и в которых явно выделены все необходимые сингулярности: двухчастичные (кластерные) сингулярности и трехчастичные кулоновские особенности. На основе такого подхода строятся ряды теории возмущений, в которых высшие борновские члены, описывающие механизмы взаимодействия, выражаются сходящимися интегралами и поддаются численному расчету. Разрабатывается новая методика построения пробных одноцентровых волновых функций атома с корреляторами, явно зависящими от взаимного расстояния между электронами, которые не только с высокой точностью воспроизводят энергию связанного состояния, но и удовлетворяют дополнительным условиям типа условий Като [91, 92]. Эта методика распространяется и на молекулы в рамках метода линейной комбинации атомных орбиталей. Кроме того, в расчетах с ионом молекулы водорода используются известные двухцентровые кулоновские волновые функции [93]. Симметрия электронных корреляций молекулярного иона водорода и двухатомных систем, имеющих два активных электрона, в процессах ионизации с возбуждением быстрым электронным ударом изучалась в борновском приближении с использованием квазиточного решения в базисе двухцентровых кулоновских функций [94–96], что необходимо для адекватного описания эффектов второго порядка в эксперименте [89]. Вышеобозначенные подходы и методики планируется отработать на атоме гелия и молекуле водорода и использовать далее для молекул воды и окиси углерода, которые будут исследоваться японскими экспериментаторами.

Для изучения корреляции электронов в работе [97] построен и исследован новый однопараметрический базис факторизованных коррелированных вариационных функций, необходимых для расчетов с заданной точностью энергии и волновых функций связанных состояний гелиеподобных атомов. Эта задача, в отличие от кулоновской задачи двух тел, не имеет точного аналитического решения, но является базовой трехчастичной системой для прецизионных расчетов и экспериментов в атомной физике. Для вычисления энергии связанных состояний используется вариационный принцип Рэлея–Ритца и подходящий набор параметрических пробных функций в координатном представлении. Верхняя оценка энергии атома гелия в основном состоянии  $E = -2,903\,724\,377\,032$  а. е. в нерелятивистском приближении для бесконечной массы ядра была получена еще в 1966 г. [98]. Недавно для энергии этого состояния были получены лучшие оценки:  $E = -2,903\,724\,377\,034\,119\,593$  а. е. [99] и  $E = -2,903\,724\,377\,034\,119\,597$  а. е. [100].

Для явного учета корреляции двух электронов в атоме, находящихся на расстояниях  $r_{12}$  между собой и на расстояниях  $r_1$  и  $r_2$  от ядра атома, в вари-

ационных расчетах используют периметрические координаты  $r_1, r_2, r_{12}$  [98]. В этих координатах радиальная часть элемента объема интегрирования не сводится к простому произведению одномерных интегралов, поэтому для перехода к факторизованному коррелированному представлению необходимо использовать специальные проективные координаты.

В работе [97] сформулирован альтернативный вариант оптимизации вариационных вычислений, который обеспечивает лучшую устойчивость и более высокую точность вычисления значений энергии. В проективных координатах

$$s = r_1 + r_2, \quad v = r_{12}/(r_1 + r_2), \quad w = (r_1 - r_2)/r_{12} \quad (79)$$

трехмерные интегралы, необходимые для редукции вариационной задачи к алгебраической, представляются в виде произведения одномерных интегралов:

$$I = \int_0^\infty s^5 ds \int_0^1 v^2 dv \int_0^1 F(s, v, w) (1 - v^2 w^2) dw. \quad (80)$$

Основное преимущество такой постановки задачи достигается благодаря выбору факторизованного по всем трем аргументам (79) коррелированного представления для вариационных функций

$$\Psi = \sum_{n=0}^N C_n \psi_n, \quad \psi_n \equiv \psi_{ij,2k} = U_i(s) V_j(v) W_{2k}(w), \quad (81)$$

где  $W_{2k}(w)$  — четные функции по  $w$  на интервале  $[-1,1]$  для основного  $S$ -состояния гелиеподобных атомов, в котором все матричные элементы гамильтониана исходной задачи с элементом объема (80) вычисляются аналитически. Эта задача после вариации функционала Рэлея–Ритца приводится к обобщенной задаче на собственные значения.

Для вычисления энергии использовалась ньютоновская итерационная схема, построенная на основе вариационного функционала Рэлея–Ритца с функциями (81) в виде

$$U_i(s) = N_i e^{-\alpha_i s} L_i^5(2\alpha_i s), \quad V_j(v) = \overline{N}_j P_j^{(0,2)}(2v-1), \quad (82)$$

$$W_{2k}(w) = \hat{N}_{2k} P_{2k}^{(1,1)}(w),$$

где  $N_i, \overline{N}_j$  и  $\hat{N}_{2k}$  — константы нормировки;  $L_i^5$  — обобщенные полиномы Лагерра;  $P_j^{(q,t)}$  — полиномы Якоби и  $\alpha_i$  — вариационные параметры. В расчетах использовался ортонормированный базис  $U_i$  с единственным параметром  $\alpha \equiv \alpha_i$ , значения которого определялись из условия  $\partial E(\alpha)/\partial \alpha = 0$ . В этом подходе получены новые верхние оценки основного состояния атома гелия с точностью до двадцати двух знаков:  $E = -2,903\,724\,377\,034\,119\,598\,297$  а. е.,

а также получены новые оценки энергии для изотопов гелиевого атома:

$$\begin{aligned} E(^4\text{He}) &= -2,903\,304\,557\,733\,234\,397\,556 \text{ а. е.}, \\ E(^3\text{He}) &= -2,903\,167\,210\,703\,584\,120\,495 \text{ а. е.}, \end{aligned}$$

и изоэлектронных состояний при  $Z = 3, \dots, 10$ . Заметим, что расчеты с многопараметрическими коррелированными экспоненциальными вариационными функциями VK [101] для основного состояния атома гелия  $E = -2,903\,724\,377\,034\,119\,598\,311\,159$  а. е. подтвердили наши результаты.

Соответствующая программа написана на языке Фортран в представлении вещественных чисел с двойной точностью (для получения до тринадцати верных знаков в значении энергии) и с четверной точностью (для получения до двадцати двух верных знаков в значении энергии).

Представлены результаты численного анализа скорости сходимости по номеру  $N$  в разложении решения (81) по однопараметрическому базису пробных функций (82). Выполнен независимый численный расчет и дано сравнение с неполностью факторизованным базисом в проективных координатах [99]

$$\begin{aligned} \bar{u} &= r_>, \quad \bar{v} = r_</r_>, \quad \bar{w} = (r_{12} - r_>)/r_<, \\ r_> &= \max(r_1, r_2), \quad r_< = \min(r_1, r_2), \end{aligned} \quad (83)$$

для которого условия Като в виде граничных условий в точке парного соударения электронов определяются эффективным потенциалом в виде  $\delta$ -функции, входящим непосредственно в определение гамильтониана задачи. В этих координатах радиальная базисная функция не может быть представлена как произведение двух радиальных водородоподобных функций:

$$\exp(\alpha s) \equiv \exp(\alpha(r_1 + r_2)) = \exp(\alpha(r_> + r_<)) = \exp(\alpha\bar{u}(1 + \bar{v})), \quad (84)$$

т. е. не может быть приведена точно к факторизованному виду  $f(\bar{u})g(\bar{v})$ .

В работах [90, 102, 103] исследованы модели процессов ионизации основного  $S$ -состояния атома гелия быстрыми электронами и протонами в импульсном приближении. Изучены радиальные и угловые корреляции электронов с помощью известных вариационных функций, приведенных в работе [90]: однокомпонентной функции Хиллерааса (Hu), двенадцатипараметрической функции Бонама и Коля (BK), Хиллерааса–Эккарта–Чандрасекара (HEC), Хартри–Фока (HF), конфигурационного взаимодействия (CI) и двенадцати-компонентной ( $N = 12$ ) однопараметрической функции CPV (81), построенной в [102]. Функция CPV адекватно учитывает корреляцию электронов в атоме и согласована с лидирующим экспоненциальным членом (84) в асимптотическом разложении формального решения «точной» волновой функции мишени [104] (см. рис. 13).

Недавно процессы двойной ионизации атома гелия электронным ударом, однократной ионизации с одновременным возбуждением и двукратной ионизации изучались при большом значении переданного импульса с использованием энерго- и импульсно-дисперсионного бинарного  $(e, 2e)$ -спектро-

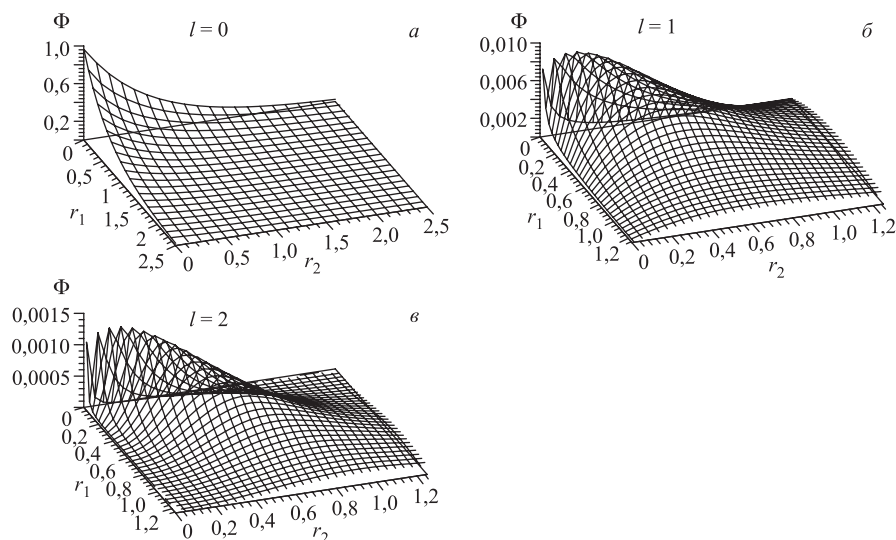


Рис. 13. Парциальные компоненты  $\Phi_l$  факторизованной двенадцатикомпонентной коррелированной вариационной функции CPV (81) при значениях орбитального момента электрона  $l = 0, 1, 2$

метра [90]. Эксперимент выполнялся при энергии столкновения 2080 эВ в симметричной некомпланарной геометрии. Таким образом, была достигнута большая передача импульса: 9 а. е., т. е. значение, которое никогда еще не было реализовано для изучения двукратной ионизации атома гелия. Измеренные сечения  $(e, 2e)$  и  $(e, 3 - 1e)$  для переходов в возбужденное ( $n = 2$ ) состояние  $\text{He}^+$  и в дважды ионизированное состояние  $\text{He}^{2+}$  были представлены как нормализованные значения относительно сечений для переходов в основное ( $n = 1$ ) состояние  $\text{He}^+$ . Соответствующие численные результаты для нормированных сечений были получены в плосковолновом импульсном приближении (plane-wave impulse approximation (PWIA)) первого порядка и борновском приближении в методе искаженных волн (distorted-wave Born approximation (DWBA)) с использованием различных волновых функций основного состояния атома гелия  $\text{He}$  (с целью исследования моделей динамики процессов и структуры квантовой корреляции двухэлектронных состояний).

На рис. 14, *a, б* сравниваются расчеты  $(e, 2e)$ - и  $(e, 3 - 1e)$ -сечений реакций, выполненных с вариационными функциями Ну, HF, HEC, CPV, CI, ВК, а на рис. 14, *в* — с коррелированными экспоненциальными вариационными функциями ВК [101] с учетом условий Като как в слабой, так и в сильной форме [105], а также экспериментальные данные. Видно, что форма зависимости экспериментальных сечений  $(e, 2e)$  и  $(e, 3 - 1e)$  от переданного

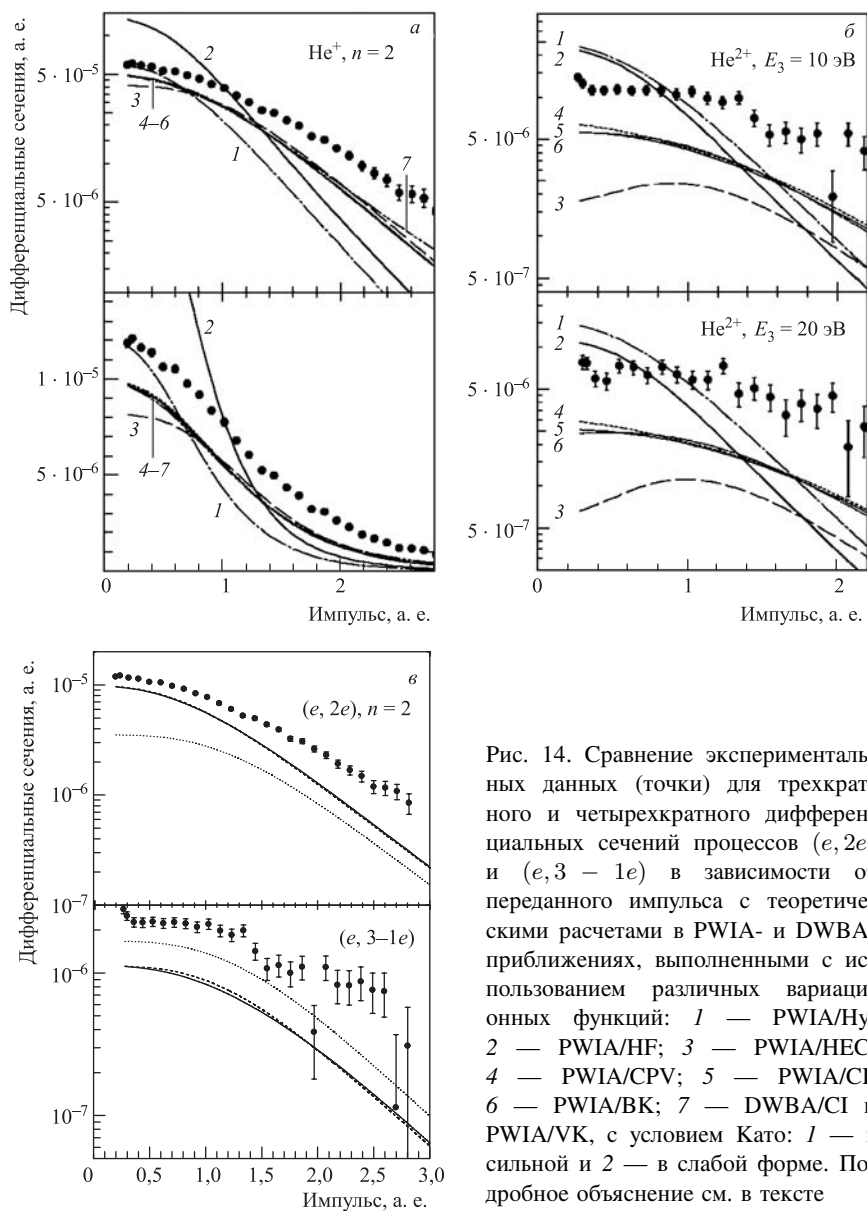


Рис. 14. Сравнение экспериментальных данных (точки) для трехкратного и четырехкратного дифференциальных сечений процессов  $(e, 2e)$  и  $(e, 3 - 1e)$  в зависимости от переданного импульса с теоретическими расчетами в PWIA- и DWBA-приближениях, выполненными с использованием различных вариационных функций: 1 — PWIA/Hu; 2 — PWIA/HF; 3 — PWIA/HEC; 4 — PWIA/CPV; 5 — PWIA/CI; 6 — PWIA/BK; 7 — DWBA/CI и PWIA/VK, с условием Като: 1 — в сильной и 2 — в слабой форме. Подробное объяснение см. в тексте

импульса хорошо воспроизводится PWIA-вычислениями только тогда, когда используются сильно коррелированные волновые функции электронов атома гелия [90].



В работе [103] были исследованы различные модели реакции захвата с ионизацией  $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^{++} + e$  при очень малых углах рассеяния водорода  $\theta_p = 0,1-0,5$  мрад и энергии протона  $E_p = 0,15-1,4$  МэВ, которые предлагали использовать для получения новой информации о структуре волновой функции мишени в импульсном приближении авторы недавних экспериментов [106]. Ими было высказано предположение [107], что при построении теоретической модели можно опустить требование резонансного захвата и рассматривать только полюсный механизм. Однако, как показали расчеты с использованием различных вариационных функций, а также расчеты с точными функциями для реакции перезарядки атома водорода быстрыми протонами, для количественного согласования экспериментальных и теоретических данных необходимо учитывать эффекты второго порядка [108].

**2.6. Солитонные решения нелинейного уравнения Шредингера с диссипацией и накачкой.** Нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) описывает амплитуду квазимонохроматической волны, распространяющейся в нелинейной дисперсионной среде, и в этом качестве (в различных вариантах математической постановки) имеет множество физических приложений в самых разных моделях теории конденсированных состояний и нелинейной оптики (см., например, [22] и цитируемую литературу).

В рамках этих моделей актуальной проблемой является получение новой информации о существовании устойчивых частицеподобных состояний (солитонов) в изучаемых системах, об условиях возникновения бифуркаций, критических режимов, о механизмах возникновения неустойчивости. В нелинейной оптике, например, возникновение устойчивых связанных состояний солитонов интерпретируется как устойчивое искажение сигнала, что ведет к потере информации в линиях передачи и элементах оптической памяти.

Постановка задачи представляет различные варианты комплекснозначного уравнения в частных производных с кубической нелинейностью и с членами, моделирующими диссипативные потери энергии и накачку энергии в систему извне.

Рассматриваются следующие уравнения.

Нелинейное уравнение Шредингера с параметрической накачкой и диссипацией:

$$i\Psi_t + \Psi_{xx} + 2|\Psi|^2\Psi - \Psi = h\bar{\Psi} - i\gamma\Psi, \quad \Psi(x = \pm\infty) = 0. \quad (85)$$

Здесь и далее  $\Psi$  — амплитуда квазигармонической стационарной волны;  $h$  — амплитуда накачки;  $\gamma$  — коэффициент диссипации, черта над  $\Psi$  означает комплексное сопряжение. Это уравнение используется при описании магнетиков во вращающемся магнитном поле, в теории джозефсоновских контактов, в моделях гидродинамики, а также при анализе распространения СВЧ-волны в плазме.

В случае прямой (внешней) накачки уравнение Шредингера имеет вид

$$i\Psi_t + \Psi_{xx} + 2|\Psi|^2\Psi - \Psi = -h - i\gamma\Psi, \quad \Psi_x(x = \pm\infty) = 0. \quad (86)$$

Данное уравнение описывает эффект фазового усиления в оптических волноводах, конвекцию в бинарных смесях и жидких кристаллах, волны намагничивания в ферромагнетиках под действием комбинации статического и СВЧ-полей и имеет ряд других приложений.

Наконец, для случая нелинейности дефокусирующего типа рассматривается следующее уравнение:

$$i\Psi_t + \frac{1}{2}\Psi_{xx} - |\Psi|^2\Psi + \Psi = h\bar{\Psi} - i\gamma\Psi, \quad \Psi_x(x = \pm\infty) = 0, \quad (87)$$

которое, в частности, моделирует волны намагничивания в легкоосных ферромагнетиках с дополнительной слабой анизотропией. В газовой динамике оно известно как уравнение амплитуды колебаний поверхности жидкости в вертикально вибрирующем канале с большой шириной и малой глубиной. В нелинейной оптике уравнение (87) получено в модели оптического параметрического осциллятора в квадратичной среде в пределе большой отстройки второй гармоники.

Численное исследование каждого из этих трех уравнений включало в себя: 1) продолжение по параметру стационарных решений; 2) численное решение линеаризованной задачи на собственные значения для исследования свойств устойчивости стационарных решений (для рассматриваемых уравнений эта задача представляет собой систему двух дифференциальных уравнений второго порядка в комплексных переменных) и, наконец, 3) численное решение исходной задачи в частных производных для определенных значений параметров.

Численное продолжение по параметру стационарных решений проводилось с помощью программы CONTIN-NLIN. В большинстве случаев численные эксперименты проводились на интервале  $x = [-100, 100]$  с шагом конечно-разностной аппроксимации 0,005. Для решения линеаризованной задачи на собственные значения использовалась стандартная программа из библиотеки EISPACK (<http://www.netlib.org/eispack>). При необходимости собственные значения уточнялись с помощью ньютоновских итераций. Численное решение исходной задачи в частных производных осуществлялось на основе двухшагового условно устойчивого алгоритма с фурье-аппроксимацией по пространственной переменной [109, 110], известного как псевдоспектральный метод.

Цель исследования состояла в поиске новых классов локализованных решений в виде многосолитонных комплексов и движущихся солитонов, изучении границ области существования локализованных состояний, исследовании точек бифуркации, численном анализе устойчивости солитонных решений.

Для каждого из уравнений (85) и (86) в литературе известны по два односолитонных решения: для уравнения (85) они известны в явном виде, а для уравнения (86) — найдены численно [111].

Что же касается многосолитонных решений уравнения (85), хотя связанные состояния солитонов наблюдались в экспериментах по фарадеевскому резонансу на поверхности жидкости [112], теоретический анализ [113, 114] не выявил существования связанных состояний даже в случае сильного перекрытия солитонов.

Впервые многосолитонные решения уравнения (85) были численно найдены и исследованы в работе [115]. В этой же работе построена аналитическая аппроксимация двухсолитонных решений на основе вариационного подхода.

Двух- и трехсолитонные комплексы уравнения (86) впервые были обнаружены в работе [116]. В отличие от уравнения (85) в уравнении (86) солитоны могут связываться на разных расстояниях («квантовых орбитах»), что объясняется их осциллирующей асимптотикой [117].

Численное исследование многосолитонных комплексов уравнения (86) в зависимости от параметров проведено в [36], в том числе там впервые найдены устойчивые двухсолитонные решения. Область существования солитонов уравнения (86) исследована в [118].

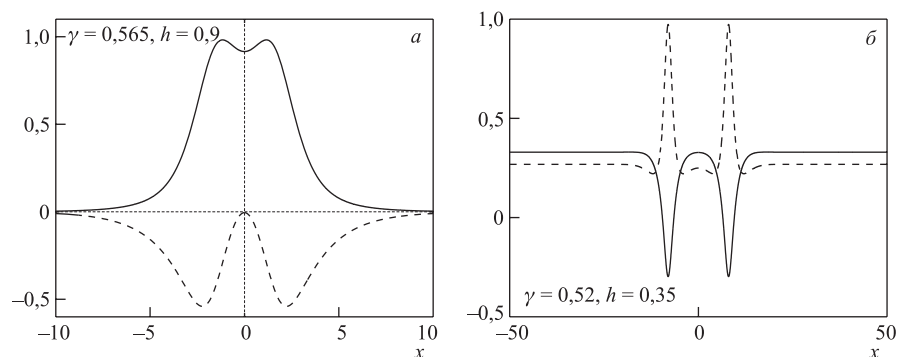


Рис. 15. Устойчивые двухсолитонные комплексы уравнения (85) (а) и уравнения (86) (б). Сплошные линии — вещественная часть; штриховые — мнимая часть

На рис. 15 представлены устойчивые двухсолитонные комплексы, впервые найденные для уравнений (85) и (86).

В работе [119] исследованы движущиеся с постоянной скоростью  $V$  солитоны уравнения (85), где  $\psi(\xi) \rightarrow 0$  при  $|\xi| \rightarrow \infty$ . Такие решения удовле-

творяют обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$-iV\psi_\xi + \psi_{\xi\xi} + 2|\psi|^2\psi - \psi = h\bar{\psi} - i\gamma\psi, \quad (88)$$

в котором скорость  $V$  играет роль дополнительного параметра.

Анализ устойчивости движущихся солитонов к малым возмущениям амплитуды

$$\delta\psi(\xi, t) = e^{\lambda t} [\delta u(\xi) + i\delta v(\xi)] \quad (89)$$

проводится путем численного решения линеаризованной задачи на собственные значения, которая в данном случае имеет вид

$$\mathcal{H}_0 \mathbf{y} = (\lambda + \gamma)J \mathbf{y}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}(\xi) = (\delta u, \delta v)^T, \quad (90)$$

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} -\partial_\xi^2 + 1 + h - 6u^2 - 2v^2 & -V\partial_\xi - 4uv \\ V\partial_\xi - 4uv & -\partial_\xi^2 + 1 - h - 6v^2 - 2u^2 \end{pmatrix}. \quad (91)$$

Критерием устойчивости является отсутствие собственных значений  $\lambda$  с положительной вещественной частью.

В случае нулевой диссипации численное исследование движущихся солитонов осуществляется по той же схеме, которая используется для неподвижных солитонов, с помощью комплекса CONTIN–NLIN.

Случай ненулевой скорости и ненулевой диссипации более сложный. Для него в работе [120] сформулированы необходимые и достаточные условия на точки бифуркации, где берут начало ветви движущихся диссипативных солитонов. Проверка этих условий осуществлялась численно. Из найденных точек бифуркации выполнялось численное продолжение солитонных решений на плоскости параметров  $(\gamma, V)$  и  $(h, V)$ , которое проводилось с помощью комплекса программ CONTIN–NLIN–MOD. Показано, что в присутствии параметрической накачки два и более диссипативных солитона могут образовать комплекс, движущийся с нулевым импульсом, но с ненулевой скоростью. Некоторые результаты численного продолжения представлены на рис. 16.

Локализованные состояния уравнения (87) носят название «темных солитонов» в моделях нелинейной оптики и «доменных стенок» в моделях теории ферромагнетизма. Как и в предыдущих случаях, в литературе уже известны в явном виде локализованные решения этого уравнения, имеющие кинкообразную форму: «стенка Нееля» и «стенка Блоха».

Еще один известный в литературе тип локализованных решений уравнения с дефокусирующей нелинейностью — «пузыри» (в западной литературе «bubble»).

В [121] исследована обратная спектральная задача, порожденная семейством аналитических «пузырьковых солитонов» нелинейного уравнения Шредингера. Конкретное решение из этого семейства определяется двумя пара-

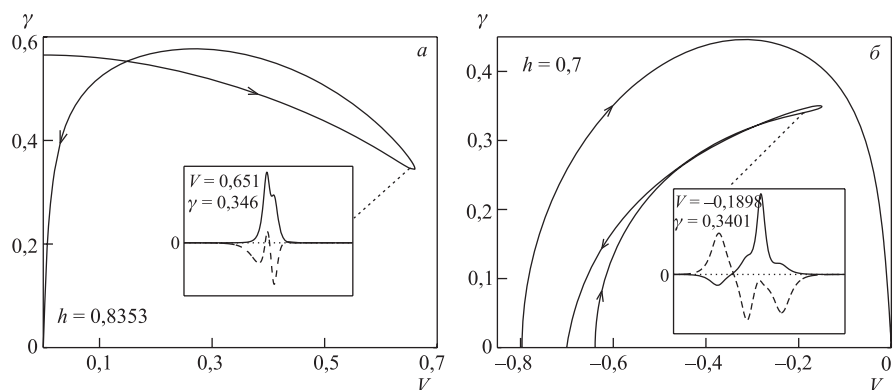


Рис. 16. Результаты численного продолжения диссипативных движущихся солитонов уравнения (88) на плоскости параметров  $(V, \gamma)$ . Вставки иллюстрируют решение на одной из внутренних точек кривой. Сплошная линия — вещественная часть; штриховая линия — мнимая часть. Стрелки указывают направление численного продолжения

метрами  $A$  и  $V$ , первый из которых характеризует среду, в которой движется солитон, а второй есть скорость солитона. Солитон устойчив, если его скорость больше некоторой критической скорости, зависящей от параметра среды. Математическая формулировка задачи сводится к определению значения скорости солитона, при которой собственное значение соответствующей линеаризованной задачи на собственные значения обращается в нуль. Численное исследование проводилось на основе подхода, описанного в 1.4.2. Показано, что критическая скорость солитона монотонно возрастает с ростом параметра среды.

В работах [122, 123] получены новые устойчивые диссипативные многосолитонные комплексы уравнения (87), а также ветви устойчивых движущихся темных солитонов для случая нулевой диссипации. Обнаружен эффект «мультистабильности», т. е. сосуществование различных типов устойчивых состояний для одних и тех же наборов параметров. Пример устойчивого комплекса двух темных солитонов представлен на рис. 17, *a*. Рис. 17, *б* демонстрирует область существования и устойчивости таких решений на плоскости параметров  $(h, \gamma)$ .

В работах [124, 125] рассматривается решеточная модель нелинейного фарадеевского резонанса. В рамках этой модели формулируется нелинейное уравнение с параметрической накачкой и диссипацией для амплитуды осциллирующих объектов (осциллонов), экспериментально наблюдающихся на поверхности жидких и гранулированных материалов. Уравнение имеет вид

$$i\psi_t + \nabla^2\psi + 2|\psi|^2\psi - \psi = h\bar{\psi} - i\gamma\psi. \quad (92)$$

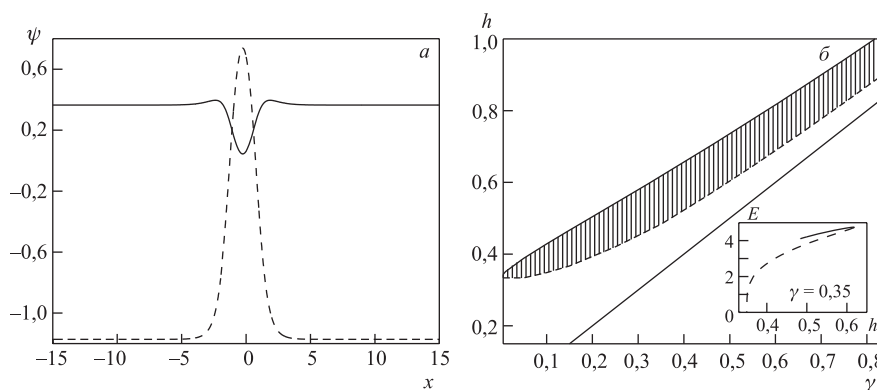


Рис. 17. *а*) Пример устойчивого связанного состояния двух темных солитонов уравнения (87) при  $\gamma = 0,35$ ,  $h = 0,617$ . Сплошная линия — вещественная часть; штриховая — мнимая часть. *б*) Диаграмма области существования диссипативных двухсолитонных решений (основной рисунок). Заштрихованная часть соответствует устойчивым решениям. На вставке представлена энергия  $E$  как функция  $h$  для фиксированного значения  $\gamma$ . Сплошная и штриховая линии на вставке показывают устойчивую и неустойчивую ветки соответственно

Здесь  $\gamma$  и  $h$  — соответственно, коэффициент диссипации и амплитуда накачки. (В одномерном случае получаем (85).) Рассматриваются радиально-симметричные локализованные решения этого уравнения в двумерном и трехмерном случаях. Для исследования устойчивости стационарных осциллонов к радиальным и азимутальным возмущениям амплитуды сформулированы две линейризованные задачи на собственные значения. Численное исследование проводилось с использованием комплекса программ OSCILLON. В результате численного анализа в [124] найдена область значений параметров, где двумерные осциллоны устойчивы, и построена соответствующая диаграмма. Результаты численного анализа согласуются с теоретическими исследованиями в рамках вариационного подхода и с результатами прямого компьютерного моделирования исходного уравнения (92) в частных производных [125].

**2.7. Модель оптического волокна с периодически меняющимся показателем преломления.** Распространение бегущей волны в оптических волокнах с периодически меняющимся коэффициентом преломления описывается системой амплитудных уравнений

$$\begin{aligned} i(u_t + u_x) + v + (|v|^2 + \rho|u|^2)u &= 0, \\ i(v_t - v_x) + u + (|u|^2 + \rho|v|^2)v &= 0. \end{aligned} \tag{93}$$

Здесь  $x$  — координата вдоль решетки;  $t$  — время и  $\rho$  — параметр, который в рамках различных моделей может принимать значения от 0 до  $\infty$ . (Отметим, что система (93) имеет множество других приложений в различных моделях физики элементарных частиц и конденсированных состояний.)

Рассматриваются стационарные солитонные решения этой системы (щелевые солитоны) с граничными условиями  $u(x = \pm\infty) = v(x = \pm\infty) = 0$ , имеющие явный вид и зависящие от параметра скорости  $V$  и угла  $\theta$  ( $0 < \theta < \pi$ ), который параметризует частоту солитона в промежутке спектра:  $\Omega = \cos \theta$ .

Проблема устойчивости локализованных решений системы (93) долгое время оставалась открытой, хотя этому вопросу посвящено значительное число публикаций, начиная с конца семидесятых годов. С середины девяностых годов интерес к этому вопросу возрос в связи с развитием новых технологий передачи информации и исследованием соответствующих нелинейно-оптических моделей [126, 127]. Ответ на него получен в работах [128, 129].

Для исследования устойчивости щелевых солитонов путем линеаризации исходной системы (93) формулируется задача на собственные значения для системы четырех дифференциальных уравнений первого порядка в комплексных переменных:

$$\hat{\mathcal{H}}\mathbf{z} = \lambda J\mathbf{z}, \quad J = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = (z_1, z_2, z_3, z_4)^T, \quad (94)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = i \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix} \frac{d}{dX} + \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} (|W|^2 + \cos \theta) + \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} + \\ + \alpha^2 \begin{pmatrix} \rho e^{2y}|W|^2 & -W^2 & \rho e^{2y}W^2 & -|W|^2 \\ -W^{*2} & \rho e^{-2y}|W|^2 & -|W|^2 & \rho e^{-2y}W^{*2} \\ \rho e^{2y}W^{*2} & -|W|^2 & \rho e^{2y}|W|^2 & -W^{*2} \\ -|W|^2 & \rho e^{-2y}W^2 & -W^2 & \rho e^{-2y}|W|^2 \end{pmatrix}. \quad (95)$$

Здесь  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_3$  — матрицы Паули. Признаком устойчивости является отсутствие собственных значений с положительной мнимой частью.

Для численного исследования использовались следующие методы.

1. Разложение решений по базису Фурье и решение полученной задачи на собственные значения с помощью стандартных программ из библиотеки EISPACK.

2. Уточнение и продолжение по параметру наиболее интересных с точки зрения свойств устойчивости собственных значений. Для этой цели разработан комплекс программ GAP-EV, в котором реализована, в рамках продолжения по параметру, ньютоновская итерационная схема с использованием конечно-разностной нумеровской аппроксимации четвертого порядка.

3. Численное решение с помощью ньютоновских итераций нелинейной алгебраической системы, сформулированной в рамках теории возмущений для анализа колебательной неустойчивости в определенной окрестности параметров.

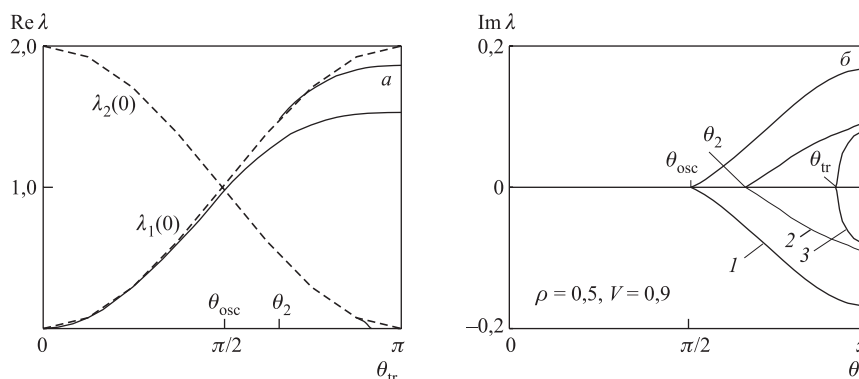


Рис. 18. Численно найденные собственные значения: а) вещественная часть; б) мнимая. Штриховые линии указывают границы непрерывного спектра,  $\lambda_{1,2}(0) = 1 \mp \cos \theta$ . Вещественное собственное значение (1) отщепляется от  $\lambda_1$  при  $\theta = 0$ ; другое вещественное значение (2) отщепляется от  $\lambda_2$  при  $\theta = \theta_{cr} > \pi/2$  (не видно на рисунке). При  $\theta = \theta_{osc}$  два собственных значения сливаются и образуют комплексно-сопряженную пару, так что возникает колебательная неустойчивость. Следующая комплексная пара отщепляется от  $\lambda_1$  при  $\theta = \theta_2$ . Наконец, еще одно собственное значение (3) отщепляется от  $\lambda_2$  и переходит на мнимую ось при  $\theta_{tr}$ .

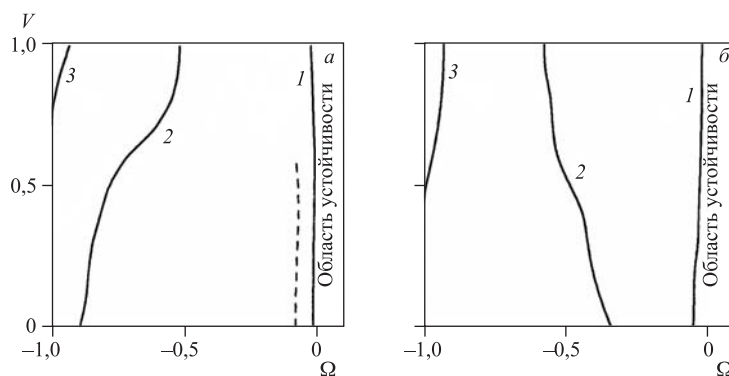


Рис. 19. Диаграмма устойчивости для  $\rho = 1/2$  (а) и  $\rho \rightarrow \infty$  (б) на плоскости параметров  $(V, \Omega = \cos \theta)$ . Кривые 1–3 соответствуют появлению в дискретном спектре «неустойчивых» собственных значений с положительной мнимой частью. Штриховая линия — асимптотическая аппроксимация для первичной колебательной неустойчивости



Результаты численного продолжения собственных значений задачи (94) по параметру  $\theta$  при фиксированных значениях  $\rho$  и  $V$  представлены на рис. 18.

В результате численного исследования построена диаграмма областей неустойчивости в полном диапазоне значений параметров модели (рис. 19). Полученные в [128, 129] результаты согласуются с теоретическим анализом и результатами компьютерного моделирования, сделанного для отдельных значений параметров в работах [130, 131]. В дальнейшем эти результаты нашли подтверждение в теоретических и численных исследованиях других авторов (см., например, [132]).

### 2.8. Ядерные взаимодействия в высокоэнергетическом приближении.

Движение налетающего ядра с кинетической энергией  $E$  в поле комплексного ядро-ядерного потенциала  $U$  описывается волновым уравнением Шредингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r}) + (E - U)\Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (96)$$

Здесь  $m$  — приведенная масса;  $\Psi(\mathbf{r})$  — волновая функция относительного движения ядер;  $\hbar$  — постоянная Планка. В общем случае потенциал  $U$  зависит от  $\Psi$ , и задача является существенно нелинейной.

Одной из важных проблем исследования уравнения (96) является проблема построения потенциала  $U$ . Знание потенциала как главной характеристики взаимодействия ядер необходимо для расчета дифференциальных сечений как упругого, так и неупругого рассеяния, а также для моделирования реакций передачи нуклонов. Особое значение приобретает методика построения мнимой части потенциала, поскольку до сих пор основные теоретические разработки касались только микроскопических расчетов вещественной части потенциала, в то время как его мнимая часть традиционно восстанавливается путем подгонки свободных параметров.

Для обеспечения возможности предсказательных расчетов на основе численного анализа имеющихся экспериментальных данных строятся обобщенные зависимости параметров потенциалов от энергии и физических параметров, определяющих структуру сталкивающихся ядер. Такие расчеты проводились, например, в [133].

Другой известный подход основан на построении зависимости ядро-ядерного потенциала от функции распределения плотности ядерной материи в ядрах, информацию о которой можно получить из независимых экспериментов. Для построения вещественной части потенциалов наиболее часто используемой является модель двойного фолдинга (ДФ) (см. обзор [134] и цитируемую литературу). В рамках этого подхода для построения потенциала формулируется нелинейная задача для интегрального уравнения, которая решается итерационными методами. Что же касается построения мнимой части потенциала — один из эффективных подходов основан на применении высокоэнергетического приближения [135–137].

В рамках высокоэнергетического приближения (ВЭП), когда  $E \gg |U|$  и движение налетающего ядра близко к свободному, решение  $\Psi$  аппроксимируется с использованием функций специального вида, называемых эйконалными. Это позволяет получить аналитические выражения для дифференциального сечения упругого ядро-ядерного рассеяния и полного сечения реакции [138, 139]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(q)|^2, \quad \sigma_r = 2\pi \int_0^{\infty} db b \left[ 1 - e^{-2\text{Im} \Phi(b)} \right], \quad (97)$$

где амплитуда упругого рассеяния  $f(q)$  и фаза  $\Phi(b)$  имеют вид

$$f(q) = ik \int_0^{\infty} db b J_0(qb) \left[ 1 - e^{i\Phi(b)} \right], \quad \Phi(b) = -\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} dz U(\sqrt{b^2 + z^2}). \quad (98)$$

Здесь  $q = 2k \sin(\theta/2)$  — переданный импульс;  $\theta$  — угол рассеяния;  $k$  — импульс;  $v$  — скорость падающего ядра;  $J_0$  — цилиндрическая функция Бесселя;  $U(r) = U_c(r) + U_N(r)$  — потенциал, включающий кулоновскую  $U_c(r)$  и ядерную  $U_N(r) = V(r) + iW(r)$  составляющие. Таким образом, расчет основных физических характеристик сводится либо к численному решению уравнения (96), либо к численному или аналитическому интегрированию выражений (98), конкретная форма которых зависит от способа построения потенциала  $U$ .

Модель на основе высокоэнергетического приближения с использованием приближенных аналитических выражений, понижающих размерность исходных интегралов и существенно упрощающих расчеты, реализована в комплексе программ HEA-CRS и HEA-TOTAL. Проведенное численное исследование подтвердило применимость данного подхода для моделирования ядро-ядерных взаимодействий при энергиях от 10 до 100 МэВ на нуклон налетающего ядра. В настоящее время комплекс используется для обработки экспериментов, проводимых в ЛЯР ОИЯИ [140].

В [141] предложен приближенный аналитический метод, на основе которого получено явное выражение для фазы  $\Phi(b)$  для типичного в ядерной физике феноменологического потенциала в симметризованной форме Вудса-Саксона:

$$U_N(r) = (V_0 + iW_0)u_{sf}, \quad u_{sf} = \frac{\text{sh}(R/a)}{\text{ch}(R/a) + \text{ch}(r/a)}, \quad (99)$$

с заданными параметрами  $R$  и  $a$ . Путем замены типичных интегралов специально подобранными параметрическими выражениями получены явные выражения для дифференциального сечения упругого рассеяния с учетом кулоновского искажения траектории. Показано, что полученные в данном подходе

численные результаты согласуются, в области применимости ВЭП, с расчетами на основе численного интегрирования исходного уравнения (96), а также с экспериментальными результатами в широком диапазоне значений атомных масс и энергий.

В [142, 143] разработаны методы расчета полных сечений реакций. В рамках микроскопического подхода мнимая часть ядерной фазы  $\Phi_N(b)$  в формуле (97) определяется как

$$\text{Im } \Phi_N(b) = \frac{\bar{\sigma}_{NN}}{2} \int_0^{\infty} dq q J_0(qb) \tilde{\rho}_p^{\circ}(q) \tilde{\rho}_t^{\circ}(q) f_N(q). \quad (100)$$

Здесь  $\tilde{\rho}_i^{\circ}(q)$  ( $i = p, t$ ) — фурье-образы точечных плотностей сталкивающихся ядер;  $f_N(q) = \exp(-q^2 r_0^2/6)$ ;  $r_0 = \sqrt{0,658}$  фм;  $\bar{\sigma}_{NN}$  — известная величина [144] — изотопически-усредненное сечение нуклон-нуклонного взаимодействия. Показано, что при использовании реалистичной плотности распределения ядерной материи в виде симметризованной ферми-функции:

$$\rho_{\text{SF}}(r) = \rho(0) u_{\text{SF}}(r), \quad \rho(0) = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi R^3} [1 + (\pi a/R)^2]^{-1}, \quad (101)$$

с известными из независимых экспериментов параметрами  $a$  и  $R$  разработанный подход обеспечивает адекватное описание экспериментальных данных по полным сечениям и не требует введения свободных параметров (см. рис. 20; экспериментальные данные взяты из [145]). При этом соответствующие фурье-образы можно получить в явном виде.

На рис. 21 сравниваются экспериментальные данные и полные сечения реакций взаимодействия легких ядер  ${}^6, {}^8\text{He}$  с избытком нейтронов на периферии со стабильным ядром  ${}^{28}\text{Si}$ , рассчитанные в рамках указанного подхода в работе [146] с использованием функций распределения плотности из работы [147].

Мнимая часть потенциала  $W(r)$  в рамках микроскопического подхода [148] восстанавливается из фазы (100) и имеет вид

$$W(r) = -\frac{E}{2k\pi^2} \bar{\sigma}_{NN} \int_0^{\infty} dq q^2 j_0(qb) \tilde{\rho}_p^{\circ}(q) \tilde{\rho}_t^{\circ}(q) f(q). \quad (102)$$

Вещественная часть потенциала может определяться по формуле  $V = \bar{\alpha}_{NN} W$ , где  $\bar{\alpha}_{NN}$  — известная величина [149] — изотопически-усредненное отношение вещественной и мнимой частей  $NN$ -амплитуды рассеяния вперед. Таким образом, построенный микроскопический комплексный потенциал не содержит свободных параметров и, как показывают расчеты, удовлетворительно

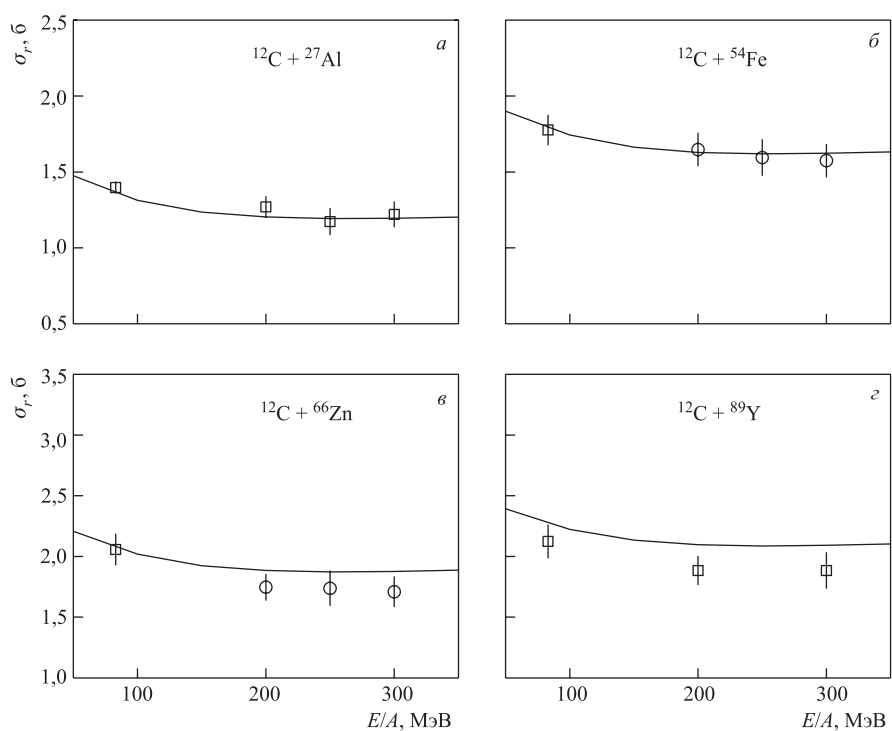


Рис. 20. Сравнение расчетов полных сечений ядро-ядерных реакций с экспериментальными данными. В качестве функций распределения плотностей ядер взяты известные данные анализа экспериментов по  $eA$ -рассеянию

описывает данные экспериментов по дифференциальным сечениям упругого рассеяния тяжелых ионов (рис. 22; экспериментальные данные взяты из [150]) и по полным сечениям реакций.

Численный анализ [151, 152] показал эффективность сочетания методов ДФ и ВЭП для построения микроскопических ядро-ядерных потенциалов. В недавней работе [153] данный подход обобщен на случай неупругого рассеяния ядер.

В работах [154–156] проведен сравнительный численный анализ различных теоретических моделей плотности распределения ядерной материи путем исследования формфакторов ядра  $^{12}\text{C}$ . Рассчитанные в рамках микроскопического подхода на основе ВЭП формфакторы сравниваются как с данными экспериментов, так и с расчетами в других подходах на основе более гру-

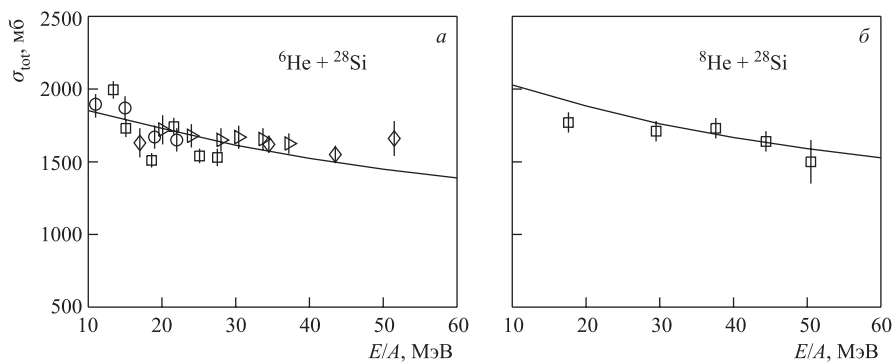


Рис. 21. Рассчитанные в рамках ВЭП полные сечения реакций  ${}^{6,8}\text{He} + {}^{28}\text{Si}$  в сравнении с экспериментальными данными

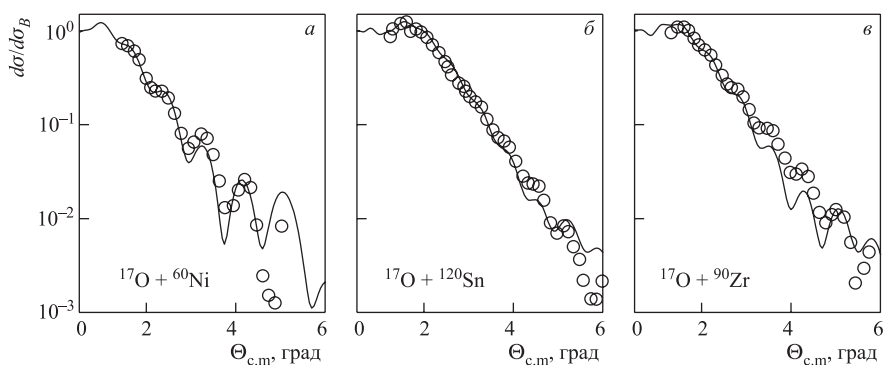


Рис. 22. Сравнение дифференциальных сечений упругого рассеяния, рассчитанных в рамках ВЭП, с экспериментальными данными.  $E_{\text{lab}} = 1435$  МэВ

бого, но часто используемого борновского приближения, а также на основе численного решения системы уравнений Дирака.

**2.9. Бифуркации статических решений в моделях джозефсоновских контактов.** На основе модифицированного уравнения Гинзбурга–Ландау (ГЛ) в [157] и [158] рассматривается построение зависимостей вида сверхток–разность фаз для джозефсоновских контактов. Пусть  $z \in (-L, -d) \cup (d, L)$  и  $z \in (-d, d)$ ,  $0 < d \ll L < \infty$  — области, занятые сверхпроводниками и барьерным слоем контакта соответственно. Тогда основная система уравнений в переменных амплитуда  $R(z)$ –фаза  $\varphi(z)$  параметра порядка имеет

следующий вид:

$$-\frac{1}{m(z)}R'' + a(z)R + b(z)R^3 + \frac{m(z)J^2}{R^3} = 0, \quad R'(-L) = 0, \quad R'(L) = 0, \quad (103a)$$

$$m_0 R'(-d-0) = R'(-d+0), \quad R'(d-0) = m_0 R'(d+0);$$

$$-\frac{1}{m(z)}\psi'' + q(z, p)\psi = \lambda\psi, \quad \psi'(-L) = 0, \quad \psi'(L) = 0, \quad (103б)$$

$$m_0 \psi'(-d-0) = \psi'(-d+0), \quad \psi'(d-0) = m_0 \psi'(d+0),$$

$$\int_{-L}^L \psi^2(z) dz = 1, \quad (103в)$$

где потенциал задачи Штурма–Лиувилля (ЗШтЛ) (103б), (103в) определяется по формуле  $q(z, p) = a(z) + 3b(z)R^2(z, p) - 3m(z)J^2/R^4(z, p)$ . Физические свойства отдельных слоев контакта могут существенно различаться, что моделируется кусочно-постоянными функциями  $a(z)$ ,  $b(z)$  и  $m(z)$ .

Если  $R(z)$  — некоторое решение (103а), то соответствующий ему ток  $J$  вычисляется при помощи первого интеграла  $J = R^2\varphi'/m(z)$ .

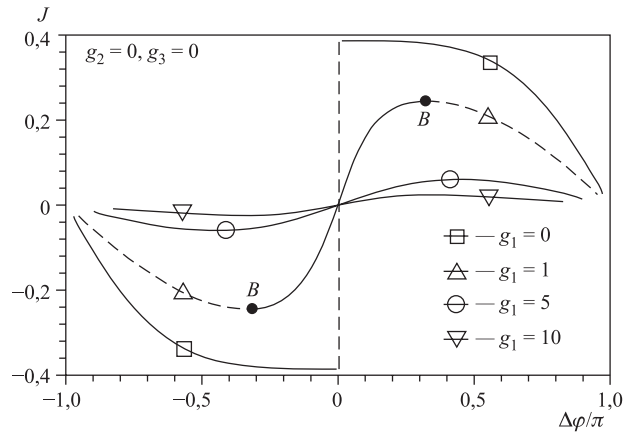
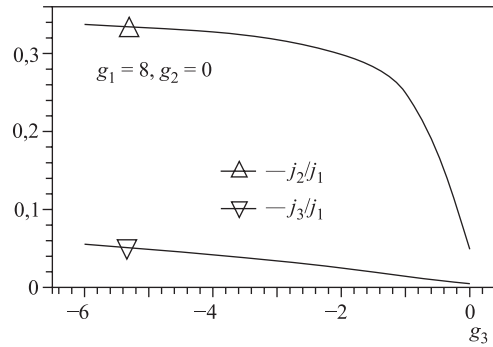


Рис. 23. Кривые  $J(\Delta\varphi)$

Показано, что при фиксированных значениях параметров задача имеет несколько различных решений с различными энергиями. Построены соответствующие каждому решению кривые вида ток  $J$ –разность фаз  $\Delta\varphi$ . Конкретные примеры демонстрируются на рис. 23 (параметры  $g_1$ ,  $g_2$  и  $g_3$  определя-

ются через ГЛ-коэффициенты). Каждая кривая состоит из трех ветвей, отвечающих устойчивому (дуга  $BB$  на рис. 23) и неустойчивому состояниям амплитуды параметра порядка  $R(z)$ . Критический ток в джозефсоновском контакте соответствует точкам  $B$  бифуркации решений (точке склейки ветвей). Построены примеры бифуркационных зависимостей, связывающих критический ток с феноменологическими коэффициентами ГЛ-уравнения.

Идеальная джозефсоновская зависимость  $J = j_c \sin \Delta\varphi$ , где  $j_c$  — максимальный (критический) ток Джозефсона, имеет место при  $g_2 = 0$ ,  $g_3 = 0$  и при больших значениях  $g_1$ . Для изучения влияния ГЛ-коэффициентов на кривые зависимости ток–фаза применяется численное фурье-разложение. Показано, что в случае неравных эффективных масс носителей в слоях контакта ( $m(z) \neq 1$ ) амплитудой второй гармоники  $j_2$  нельзя пренебрегать по сравнению с основной амплитудой  $j_1$  (см. рис. 24). Физически этот результат указывает область применимости двойного  $\sin$ -Гордон уравнения для описания процессов в двухслойном джозефсоновском контакте (ДДК).

Рис. 24. Влияние параметра  $g_3$ 

В [159, 160] сформулированы краевые задачи и порожденные ЗШТЛ для статических распределений магнитного потока  $\varphi(x)$  в ДДК с неоднородностями в зависимости от геометрии контакта. В частности, для контакта длиной  $2L$  в случае модели перекрытия (overlap-геометрии) система уравнений (62)–(64) в безразмерных переменных принимает вид

$$-\varphi'' + j_C(x) \sin \varphi + \gamma = 0, \quad \varphi'(\pm L) = h_e, \quad (104a)$$

$$-\psi'' + q(x, p)\psi = \lambda\psi, \quad \psi'(\pm L) = 0, \quad (104б)$$

$$\int_0^L \psi^2(x) dx - 1 = 0. \quad (104в)$$

Здесь  $0 \leq j_C(x) \leq 1$  есть непрерывная функция, моделирующая распределение амплитуды джозефсоновского тока, а через  $\gamma$  и  $h_e$  обозначены ток смещения и граничное магнитное поле. Потенциал в уравнении (104б) определяется по формуле  $q(x, p) = j_C(x, p) \cos \varphi(x, p)$ , где  $p$  есть совокупность параметров модели. Так как  $|q(x, p)| \leq 1$ , то ЗШтЛ (104б), (104в) имеет дискретный невырожденный ограниченный снизу спектр  $-1 \leq \lambda_{\min}(p) \equiv \lambda_0(p) < \lambda_1(p) < \dots < \lambda_n(p) < \dots$ .

Простейшая модель микронеоднородности в виде узкого прямоугольного выступа (ямы) в барьерном слое характеризуется шириной  $\Delta < 2L$ , центром  $\zeta$  и долей тока Джозефсона  $\kappa$ , протекающего через неоднородность в контакте. При наличии неоднородности имеет место локальное изменение тока Джозефсона:  $j_C(x) = 1 + \kappa$  при  $x \in \Delta$  и  $j_C(x) = 1$  при  $x \notin \Delta$ . Выбор  $\kappa = 0$  означает, что толщина барьерного слоя контакта постоянна (однородный контакт). При  $\kappa \in [-1, 0)$  неоднородность является микрорезистором, а при  $\kappa > 0$  — шунтом (микроразороткой).

Ньютоновские схемы расчета бифуркационных кривых вида ток–граничное магнитное поле для ДДК:

$$\lambda_{\min}(\gamma, h_e) = 0, \tag{105}$$

при заданном токе  $\gamma$  или при заданном граничном магнитном поле  $h_e$  предложены в [161, 162]. Обобщения на случай двухслойных джозефсоновских контактов рассмотрены в работе [163].

Исследована иерархия вихрей магнитного потока в ДДК. Показано, что в ДДК конечной длины с резистивной неоднородностью (RJJ) в центре  $\zeta = 0$  устойчивыми могут быть:

1) чистые цепочки вихрей, являющиеся результатом нелинейного взаимодействия только флюксонов либо только антифлюксонов (далее используем обозначение  $\Phi^n$ ,  $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Конкретные примеры решений вида  $\Phi^1$ ,  $\Phi^3$  и  $\Phi^5$  в окрестности точки бифуркации ( $\lambda = 10^{-4}$ ) представлены на рис. 25. Для сравнения приведена кривая  $M$  устойчивого мейсснеровского распределения (решение  $\varphi(x) = 0$  при  $h_e = 0$  и  $\gamma = 0$ );

2) смешанные цепочки вихрей, которые представляют собой нелинейные образования из флюксонов и антифлюксонов, например,  $\Phi^n \Phi^m$ ,  $n, m \neq 0$ . Такие вихри существуют парами, соответствующими перестановке индексов  $n$  и  $m$ . Для иллюстрации на рис. 26 представлены цепочки  $\Phi^1 \Phi^{-1}$  и  $\Phi^2 \Phi^{-2}$ .

Распределения магнитного потока в ДДК характеризуются функционалом среднего магнитного потока через контакт

$$N[\varphi](p) = \frac{1}{2L\pi} \int_{-L}^L \varphi(x, p) dx, \tag{106}$$



определенным на множестве решений задачи (104а). Геометрически величина (106) пропорциональна отношению площади вихря к длине контакта. Для «бесконечного» ДДК выражение (106) следует понимать в смысле предельного перехода при  $L \rightarrow \infty$ .

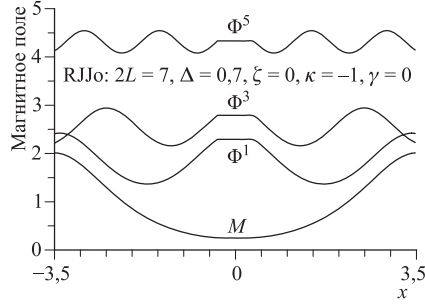


Рис. 25. Чистые цепочки флюксонов в неоднородном ДДК

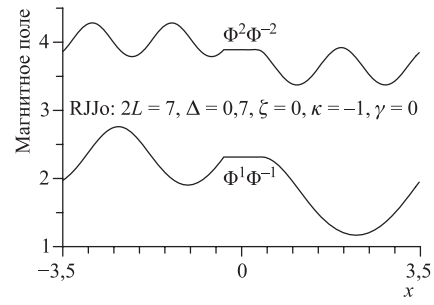


Рис. 26. Смешанные цепочки флюксонов в неоднородном ДДК

Так как любое решение  $\varphi(x)$  задачи (104а) определено с точностью до  $2k\pi$ ,  $k = 0, \pm 1, \dots$ , то и значение  $N[\varphi]$  определено с точностью до  $2k$ . Произвол в выборе целого  $k$  следует использовать для согласования числа  $N[\varphi]$  с величиной и знаком (направлением магнитного поля) полного магнитного потока распределения  $\Delta\varphi = \varphi(L) - \varphi(-L)$ .

В симметричном случае  $j_C(x) = j_C(-x)$  для любого распределения магнитного потока  $\varphi(x)$  значение  $N[\varphi]$  не зависит от магнитного поля  $h_e$  во всех линейных статических моделях ДДК (overlap и in-line) при отсутствии дополнительного тока, обусловленного, например, переменной геометрией контакта [164–167] в плоскости барьерного слоя. В частности, при токе  $\gamma = 0$  для устойчивого  $M$ -решения и чистых  $n$ -флюксонных (антифлюксонных) распределений  $\Phi^n$  имеем  $N[M] = 0$  и  $N[\Phi^n] = n$ . Для смешанных цепочек вихрей целой является сумма значений (106) на решениях пары:  $N[\Phi^n\Phi^m] + N[\Phi^m\Phi^n] = 2(|n| + |m|)$ . Если  $\gamma \neq 0$ , то и для чистых цепочек вихрей число  $N[\varphi]$  не является целым за счет сдвига распределения током. Однако пусть  $\Phi(\gamma)$  есть решение (104а) (чистое или смешанное) при фиксированном  $h_e$  и  $\gamma > 0$  и пусть  $\Phi(-\gamma)$  есть симметричное решение с тем же полным потоком при токе  $-\gamma$ , т. е.  $\Delta\Phi(\gamma) = \Delta\Phi(-\gamma)$ . Тогда сумма  $N[\Phi(\gamma)] + N[\Phi(-\gamma)]$  также есть целое число.

Указанные свойства позволяют интерпретировать функционал (106) как число вихрей (квантов магнитного потока) в решении  $\varphi(x)$  [39].

Для зависящих от времени решений  $\phi(t, x)$  соответствующей нестационарной задачи вида (61) функция  $N[\phi](t)$  и среднее напряжение на контакте

$\bar{V}(t)$  связаны очевидным соотношением:

$$\bar{V}(t) \equiv \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \phi_t(t, x) dx = \pi N_t[\phi](t).$$

Таким образом, независимость числа флюксонов в контакте от времени  $t$  (т. е.  $N_t = 0$ ) эквивалентна равенству нулю среднего напряжения на контакте.

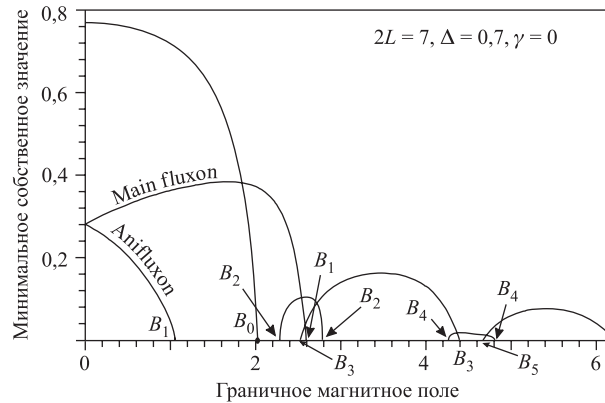


Рис. 27. Зависимость  $\lambda_{\min}(h_e)$

На рис. 27 показаны критические зависимости  $\lambda_{\min}(h_e)$  минимального собственного значения задачи Штурма–Лиувилля (104б), (104в) от граничного магнитного поля для некоторых устойчивых распределений магнитного потока в ДДК с неоднородностью в центре. Ввиду симметрии относительно вертикальной оси демонстрируется только часть  $h_e \geq 0$  полной картины. Точки пересечения кривых с горизонтальной осью соответствуют точкам бифуркации решений. В частности, точка  $B_0$  есть точка бифуркации  $M$ -решения, а через  $B_1$  обозначены точки бифуркации флюксона  $\Phi^1$  и антифлюксона  $\Phi^{-1}$ . Точки  $B_3$  и  $B_5$  на рис. 27 соответствуют чистым цепочкам из трех ( $\Phi^3$ ) и пяти ( $\Phi^5$ ) флюксонов в ДДК, а точки  $B_2$  — смешанным флюксон–антифлюксонным состояниям вида  $\Phi^{-1}\Phi^1$  и  $\Phi^1\Phi^{-1}$ . Аналогично точки  $B_4$  соответствуют бифуркациям смешанных вихрей  $\Phi^2\Phi^{-2}$  и  $\Phi^{-2}\Phi^2$ .

Построены бифуркационные кривые (105) для основных вихрей магнитного потока в RJJ-контакте (см. рис. 28). Численным путем предсказан [160] новый физический эффект, обусловленный наличием резистивной неоднородности: в нулевом магнитном поле (т. е. при  $h_e = 0$ ) кривые зависимости  $\gamma_c(h_e)$ , соответствующие основному флюксону  $\Phi^1$  и антифлюксону  $\Phi^{-1}$  в ДДК, пересекаются, образуя флюксон–антифлюксонный крест (точка  $C_O$  на

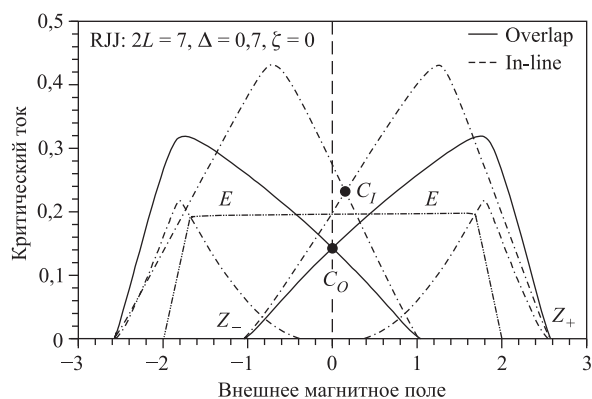


Рис. 28. Кресты критических кривых для однофлюксонных состояний

рис. 28). Для сравнения на этом же рисунке штрихпунктирными линиями изображены критические кривые для основного флюксона  $\Phi^1$  и антифлюксона  $\Phi^{-1}$  в однородном ДДК. Этот эффект был экспериментально подтвержден в работе [29].

Наклон  $\gamma'_c(h_e)$  критических кривых в точках пересечения существенно определяется геометрическими параметрами контакта: с увеличением длины ДДК наклон быстро падает, а точка пересечения  $C_O$  поднимается вверх. Этот эффект демонстрируется на рис. 28 расчетной критической кривой ( $E$ ) для основного флюксона  $\Phi^1$ , которая соответствует длине  $2L = 15$  образца в эксперименте [29].

Критическая кривая для ДДК «в целом» при заданных геометрических параметрах строится как огибающая бифуркационных кривых для отдельных устойчивых решений. Иными словами, критические кривые состоят из кусков бифуркационных кривых, соответствующих различным распределениям с наибольшим при заданном поле  $h_e$  критическим током  $\gamma$ . Конкретный пример моделирования критической кривой RJJ-контакта с overlap-геометрией представлен на рис. 29. Четко прослеживается немонотонное убывание локальных экстремумов с увеличением поля  $|h_e|$ , что характерно для экспериментальных критических кривых контактов с резистивными неоднородностями [30]. Эта важная особенность обусловлена притяжением (пиннингом) статических распределений магнитного потока неоднородностью. Благодаря пиннингу вклад в критическую кривую контакта могут давать бифуркационные кривые слабоустойчивых смешанных распределений. При этом пики критического тока для цепочки из однотипных вихрей, как правило, выше, чем для смешанной цепочки. Например, на рис. 29 пики критического тока

цепочек  $\Phi^1\Phi^{-1}$ ,  $\Phi^2\Phi^{-2}$  и  $\Phi^3\Phi^{-3}$  ниже пиков критических токов для соседних чистых вихрей  $\Phi^1$ ,  $\Phi^3$  и  $\Phi^5$ .

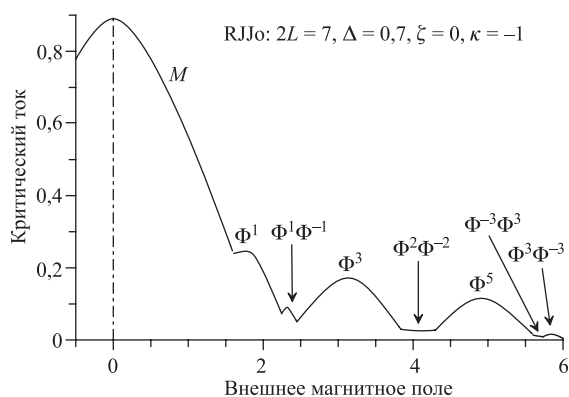


Рис. 29. Критическая кривая для ДДК с overlap-геометрией

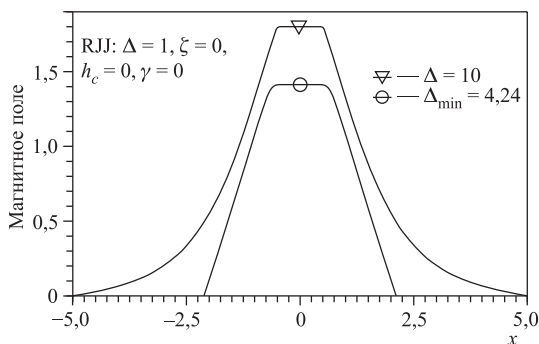


Рис. 30.  $\Phi^1$ -распределение минимальной длины

На рис. 30 представлено  $\Phi^1$ -распределение минимальной длины RJJ-контакта ( $\ominus$ ). ( $\nabla$  — начальное приближение, взятое при  $2L = 10$ .)

В работах [164, 165] проведено численное моделирование критических кривых в ДДК, ширина  $W(x)$  которого в плоскости барьерного слоя меняется по экспоненциальному закону (EJJ):  $W(x) = W_0 e^{-\sigma x}$ ,  $x \in [0, L]$ ,  $0 \leq \sigma \ll 1$ . Нелинейная краевая задача для статических распределений  $\varphi(x)$  в in-line EJJ

и соответствующая ЗШТЛ имеют в этом случае следующий вид:

$$-\varphi'' + \sigma(\varphi' - h_e) + \sin \varphi = 0, \quad (107a)$$

$$\varphi'(0) = h_e - L\gamma, \quad \varphi'(L) = h_e, \quad (107б)$$

$$-\psi'' + \sigma\psi' + \cos \varphi(x)\psi = \lambda\psi, \quad (107в)$$

$$\psi'(0) = 0, \quad \psi'(l) = 0, \quad (107г)$$

$$\int_0^L \psi^2(x) dx = 1. \quad (107д)$$

На рис. 31 представлены полученные численным путем бифуркационные кривые вида (105) для ЕJJ-контакта с in-line-геометрией. Сплошные линии соответствуют критическому току  $\gamma \geq 0$ , штриховые — току  $\gamma < 0$ . Точки соответствуют экспериментальным данным из [166]. Отметим хорошее качественное и количественное совпадение результатов численного и физического экспериментов. Отметим также, что ЕJJ-критические кривые составлены только из кусков бифуркационных кривых для мейсснеровского ( $M$ ) распределения и чистых  $n$ -флюксонных вихрей  $\Phi^n$ , что обусловлено отсутствием устойчивых смешанных распределений в таких контактах за счет дополнительного «геометрического» тока  $\sigma(\varphi' - h_e)$ . Это, со своей стороны, обеспечивает монотонное убывание экстремумов критической кривой ЕJJ-контакта. Возможно, отсутствие слабоустойчивых смешанных распределений в ЕJJ-контактах и объясняет улучшенный спектр излучения таких ДДК по сравнению с прямоугольными [166].

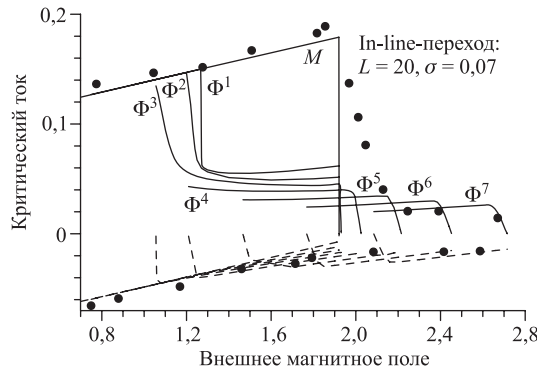


Рис. 31. ЕJJ-контакт — сравнение численных результатов с экспериментом [166]

В работе [167] при помощи преобразования независимой переменной  $x = \ln(1 + \sigma\xi) / \sigma$  уравнение (107a) сводится к самосопряженному виду

$$-\varphi'' + j_C(\xi) \sin \varphi + g(\xi) = 0. \quad (108)$$

С формальной точки зрения уравнение (108) описывает распределения магнитного потока  $\varphi(\xi)$  в одномерном прямоугольном ДДК длины  $l = (e^{\sigma L} - 1) / \sigma$  с переменной амплитудой джозефсоновского тока при наличии дополнительного распределенного тока  $g(\xi) = -\sigma h_e / (1 + a\xi)^{-2}$ . Физически переменную амплитуду можно отождествить с переменной толщиной барьерного слоя вдоль контакта. При этом амплитуда максимальна (толщина барьерного слоя минимальна) на левом торце контакта и минимальна (толщина слоя максимальна) на правом торце. Такая резистивная неоднородность является аттрактором [25] для распределений магнитного потока в контакте, притягивая последние к правому концу. Таким образом, указанным преобразованием устанавливается соответствие между классами ДДК переменной ширины и квазиодномерными прямоугольными контактами с переменной толщиной барьерного слоя.

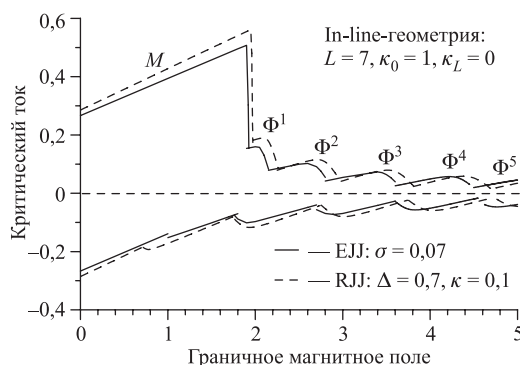


Рис. 32. Сравнение критических кривых для EJJ- и RJJ-контактов

На рис. 32 сравниваются критические кривые для EJJ- и RJJ-контактов с неоднородностью в окрестности правого конца. Хорошо видно, что наличие резистивной неоднородности на правом конце прямоугольного ДДК качественно не меняет критические кривые вида «ток–магнитное поле» по сравнению со случаем EJJ-модели. Простое обобщение показывает, что аналогичный вывод можно сделать и для контакта с шунтовой неоднородностью на левом конце. Тем самым результаты численных экспериментов демонстрируют возможность замены распределенной вдоль контакта неоднородности локальной

неоднородностью, что с технологической точки зрения может иметь определенные преимущества.

В работах [168, 169] рассмотрена задача о вычислении минимальной длины ДДК, обеспечивающей сохранение устойчивости заданного распределения магнитного потока. При помощи замены переменных исходная задача вида (104) с неизвестными границами сводится к нелинейной задаче на собственные значения относительно пары  $(\varphi, L)$ , спектральным параметром в которой является полудлина контакта  $L$ .

Численно показано, что устойчивым (неустойчивым) статическим распределением магнитного потока в ДДК соответствует минимальная длина контакта, при которой распределения сохраняют свою устойчивость (неустойчивость). В частности, при токе  $\gamma = 0$  и внешнем магнитном поле  $h_e = 0$  вычисленная минимальная длина RJJ-контакта с неоднородностью в центре для основного флюксона  $\Phi^1$  есть  $2L \simeq 4,24$ , что соответствует замечанию в работе [170] (см. рис. 30). Подробно исследовано влияние параметров модели на минимальную длину вихрей в ДДК (см. также работу [164]).

**2.10. Критические режимы в моделях астрофизики.** Объектом численного исследования в работах [171–175] являются модели скалярно-тензорных теорий гравитации с массивным дилатоном, которые оцениваются как естественные и многообещающие обобщения общей теории относительности (ОТО). В этих теориях гравитация описывается не только тензорным полем метрики пространства-времени, но и скалярным дилатонным полем.

В [171] изучается влияние дилатона ненулевой массы на устойчивость равновесных конфигураций бозонной звезды. Математическая модель сводится к нелинейной задаче на собственные значения, в которой спектральным параметром является частота  $\Omega$  бозонного поля:

$$\nu'' = -\frac{1}{r}\nu' + \left\{ -\frac{1}{r}\nu' + \mathcal{T}_0^0 - \mathcal{T}_1^1 + 2\mathcal{T}_2^2 - \gamma^2 V(\varphi) + \right. \\ \left. + \frac{r}{2}\nu' [\mathcal{T}_0^0 + \mathcal{T}_1^1 + \gamma^2 V(\varphi)] \right\} e^\lambda, \quad (109a)$$

$$\varphi'' = -\frac{1}{r}\varphi' + \\ + \left\{ -\frac{1}{r}\varphi' + \frac{\alpha}{2}\mathcal{T} + \frac{1}{4}\gamma^2 \frac{dV(\varphi)}{d\varphi} + \frac{r}{2}\varphi' [\mathcal{T}_0^0 + \mathcal{T}_1^1 + \gamma^2 V(\varphi)] \right\} e^\lambda, \quad (109б)$$

$$\sigma'' = -\frac{1}{r}\sigma' - 2\alpha\varphi'\sigma' + \left\{ -\frac{1}{r}\sigma' + 2A^2(\varphi)\frac{dW(\sigma^2)}{d\sigma^2}\sigma - \right. \\ \left. - \Omega^2 e^{-\nu}\sigma + \frac{r}{2}\sigma' [\mathcal{T}_0^0 + \mathcal{T}_1^1 + \gamma^2 V(\varphi)] \right\} e^\lambda. \quad (109в)$$

Здесь  $\nu(r)$  — метрическая функция;  $\varphi(r)$  — дилатонное поле;  $V(\varphi)$  — задаваемый потенциал дилатонного поля;  $\gamma$  — масса дилатона;  $\sigma(r)$  — бозонное поле;  $\Omega$  — частота бозонного поля;  $W(\sigma^2)$  — заданная функция (потенциал бозонного поля);  $\alpha$  есть параметр. Компоненты тензора энергии–импульса  $T_\nu^\mu$ , его след  $T$ , а также величина  $e^\lambda$  сложным образом зависят от координаты  $r \in (0, \infty)$ , от неизвестных функций  $\nu(r)$ ,  $\varphi(r)$ ,  $\sigma(r)$ , неизвестного параметра  $\Omega$  и заданных потенциалов и параметров. На неизвестные функции накладываются краевые условия

$$\nu'(0) = 0, \varphi'(0) = 0, \sigma'(0) = 0, \nu(\infty) = 0, \varphi(\infty) = 0, \sigma(\infty) = 0. \quad (110)$$

Для замыкания задачи задается дополнительное условие «нормировки»  $\sigma(0) = \sigma_c$ , где параметр  $\sigma_c$  есть плотность бозонной материи в центре звезды.

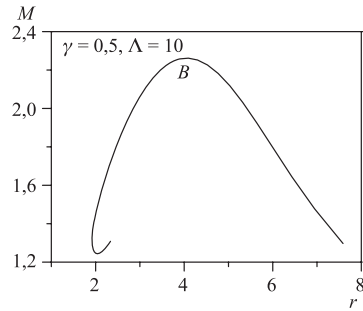


Рис. 33. Зависимость массы звезды от радиуса

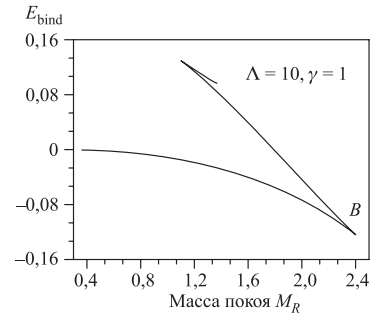


Рис. 34. Энергия связи  $E_{\text{bind}}(E_R)$

Показано, что бозонные звезды с массивным дилатоном могут существовать в широком диапазоне изменения массы дилатона  $\gamma$ . Однако при достаточно больших значениях  $\gamma$  восстанавливается конфигурация звезды из ОТО. Масса дилатонной звезды всегда меньше массы в ОТО. Продемонстрирован пример бифуркации решений при изменении массы покоя звезды (см. рис. 33, 34).

В работах [171–173] численно изучаются модели статических бозонно-фермионных сферически-симметричных звезд, базирующихся на скалярно-тензорных теориях гравитации с учетом массивного дилатона.

Основные переменные модели: метрические функции  $\lambda(r)$  и  $\nu(x)$ , дилатонное поле  $\varphi(x)$ , плотности бозонной  $\sigma(x)$  и фермионной  $\mu(x)$  материи, удовлетворяют системе уравнений

$$\frac{d\lambda}{dr} = F_1 \equiv \frac{1 - \exp(\lambda)}{r} + r \left\{ \exp(\lambda) \left[ \frac{F}{T_0^0} + \frac{B}{T_0^0} + \frac{1}{2} \gamma^2 V(\varphi) \right] + \left( \frac{d\varphi}{dr} \right)^2 \right\}, \quad (111a)$$



$$\frac{d\nu}{dr} = F_2 \equiv -\frac{1 - \exp(\lambda)}{r} - r \left\{ \exp(\lambda) \left[ \frac{F}{T_1^1} + \frac{B}{T_1^1} + \frac{1}{2} \gamma^2 V(\varphi) \right] - \left( \frac{d\varphi}{dr} \right)^2 \right\}, \quad (111б)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi}{dr^2} = F_3 \equiv & -\frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} + \frac{1}{2} (F_1 - F_2) \frac{d\varphi}{dr} + \\ & + \frac{1}{2} \exp(\lambda) \left[ \alpha(\varphi) \left( \frac{F}{T} + \frac{B}{T} \right) + \frac{1}{2} \gamma^2 V'(\varphi) \right], \quad (111в) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{dr^2} = F_4 \equiv & -\frac{2}{r} \frac{d\sigma}{dr} + \left[ \frac{1}{2} (F_1 - F_2) - 2\alpha(\varphi) \frac{d\varphi}{dr} \right] \frac{d\sigma}{dr} - \\ & - \sigma \exp(\lambda) \left[ \Omega^2 \exp(-\nu) + 4\sigma A^2(\varphi) W'(\sigma) \right], \quad (111г) \end{aligned}$$

$$\frac{d\mu}{dr} = F_5 \equiv -\frac{g(\mu) + f(\mu)}{f'(\mu)} \left[ \frac{1}{2} F_2 + \alpha(\varphi) \frac{d\varphi}{dr} \right]. \quad (111д)$$

Независимая переменная  $r \in [0, R_s] \cup [R_s, \infty)$ , где  $R_s$  — неизвестный радиус фермионной части звезды. Параметр  $\Omega$  есть неизвестная частота осцилляций бозонной материи. Величины  $T_n^F, T_n^B, n = 0, 1$ , являются диагональными компонентами тензоров энергии-импульса, а  $\frac{F}{T}, \frac{B}{T}$  — соответствующие следы. Величины  $\alpha(\varphi), A(\varphi), V(\varphi), W(\sigma), f(\mu)$  и  $g(\mu)$  являются заданными функциями, а  $\gamma$  есть масса дилатона.

Краевые условия задаются в виде

$$\lambda(0) = 0, \quad \frac{d\varphi}{dr}(0) = 0, \quad \frac{d\sigma}{dr}(0) = 0, \quad \sigma(0) = \sigma_c, \quad \mu(0) = \mu_c, \quad (112а)$$

$$\mu(R_s) = 0, \quad (112б)$$

$$\nu(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad \varphi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad \sigma(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0. \quad (112в)$$

Здесь  $\sigma_c$  и  $\mu_c$  — центральные плотности бозонной и фермионной материи.

Так как фермионная материя  $\mu(r)$  распределена только внутри звезды (при  $r < R_s$ ), то система (111) состоит из различного числа уравнений при  $r < R_s$  и  $r > R_s$ .

Для численного решения задачи предложены и реализованы два метода. В первом из них [172] путем замены переменных  $x = r/R_s, x \in [0, \infty)$

радиус  $R_s$  входит явным образом в уравнения (111) и условия (112), а положение неизвестной границы фермионной части звезды фиксируется в точке  $x = 1$ . Поставленная таким образом задача является двухпараметрической нелинейной задачей на собственные значения относительно величин  $R_s$  и  $\Omega$ .

Второй метод решения [173] основан на выполнении условий непрерывности для искомых функций в точке  $x = 1$ . Последовательно решаются две краевые задачи для уравнений (111) во внутренней и внешней области звезды, причем для замыкания задачи при  $x \in (0, 1)$  задается дополнительное параметрическое условие для одной из неизвестных функций (в настоящей работе используется условие  $\varphi(1) = \varphi_s$ ). Во внешней области решение находится при помощи трех условий непрерывности с имеющимся уже внутренним решением. Три остальных условия непрерывности образуют нелинейную алгебраическую систему для неизвестных параметров  $R_s$ ,  $\Omega$  и  $\varphi_s$ .

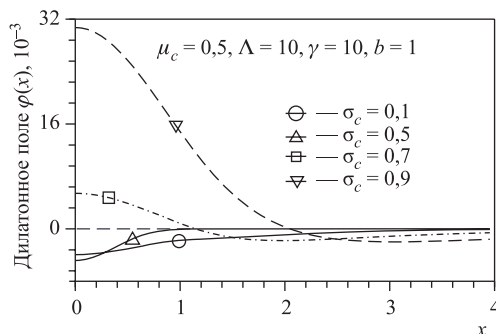


Рис. 35. Зависимость дилатонного потенциала  $\varphi(x)$  от бозонной плотности  $\sigma_c$

В рамках конкретной модели рассмотрено влияние физических параметров на устойчивость звезды. В частности, на рис. 35 показана зависимость дилатонного поля  $\varphi(x)$  от координаты  $x$  для четырех значений центральной плотности бозонной материи  $\sigma_c$ . При возрастании  $\sigma_c$  дилатонное поле в окрестности центра звезды уменьшается. После некоторого критического значения  $\sigma_c^*$ , зависящего от параметров модели, функция  $\varphi(x)$  начинает расти вместе с  $\sigma_c$ . Причина такого поведения — в наличии члена  $\frac{B}{T}$  в правой части уравнения (111в). Для достаточно малых значений плотности  $\sigma_c$  член  $\frac{B}{T} < 0$  и его вклад преобладает над вкладом  $\frac{F}{T}$ . При больших  $\sigma_c$  ( $\sigma_c \geq \sigma_c^*$ ) слагаемое  $\frac{B}{T}$  меняет знак и усиливает вклад  $\frac{F}{T}$ , что ведет к росту  $\varphi(x)$ . Звезда устойчива только при  $0 < \sigma_c < \sigma_c^*$ . Для значений параметров, соответствующих рис. 35, критическое значение  $\sigma_c^* \approx 0,55$ .

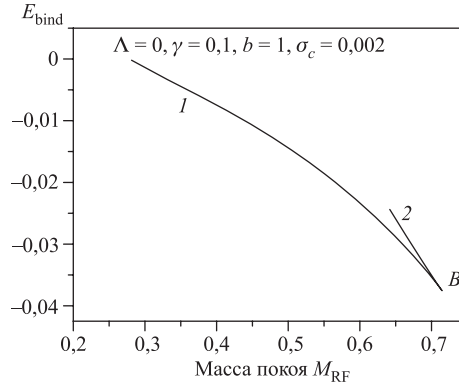


Рис. 36. Бифуркация при изменении фермионной массы покоя: 1 — устойчивая, 2 — неустойчивая ветвь

Показано, что при некотором критическом значении фермионной массы покоя звезда теряет устойчивость. Это утверждение демонстрируется на графике (см. рис. 36) зависимости безразмерной массы звезды

$$M = \int_0^{\infty} \left[ T_0^B + T_0^F + e^{-\lambda} \varphi'^2 + \gamma^2 V(\varphi)/2 \right] r^2 dr$$

от фермионной массы покоя

$$M_{RF} = b \int_0^{\infty} A^3(\varphi) e^{\lambda/2} n(\mu) r^2 dr,$$

где заданная непрерывная функция  $n(\mu)$  моделирует плотность фермионов.

В работах [174, 175] изучается сферически-симметричная модель черной дыры (ЧД) с массивным дилатоном. Физическая модель описывается многоточечной краевой задачей для системы третьего порядка для метрической функции  $f(r)$  и дилатонного поля  $\varphi(r)$ :

$$-f' + F(r, f, \varphi, \varphi') = 0, \quad (113a)$$

$$-f \left( \varphi'' + \frac{1}{r} \varphi' \right) + \Phi(r, f, \varphi, \varphi') = 0. \quad (113b)$$

Здесь  $f(r)$  — метрическая функция, радиальная координата  $r \in [R_l, \infty)$ , постоянная  $R_l > 0$ . В уравнения (113) входят два физических параметра:

заряд  $q$  ЧД и масса дилатона  $\gamma$ . Правые части  $F$  и  $\Phi$  задаются при помощи выражений

$$F \equiv \frac{1-f}{r} + 2e^{2\alpha\varphi} \frac{r^2 - \sqrt{r^4 + q^2}}{r} - r\gamma^2 V(\varphi) - rf\varphi'^2,$$

$$\Phi \equiv \left[ r\gamma^2 V(\varphi) - \frac{1}{r} - 2e^{2\alpha\varphi} \frac{r^2 - \sqrt{r^4 + q^2}}{r} \right] \varphi' +$$

$$+ \frac{\gamma^2}{2} V'(\varphi) - 2\alpha e^{2\alpha\varphi} \frac{r^2 - \sqrt{r^4 + q^2}}{r^2}.$$

Здесь заданная непрерывная функция  $V(\varphi)$  есть потенциал дилатона, а коэффициент связи  $\alpha = \pm 1$ .

Показано [175], что математическая постановка задачи для системы дифференциальных уравнений (113) зависит от вида и числа горизонтов ЧД. В простейшем случае единственного регулярного горизонта  $R_h$  граничные условия при  $\gamma > 0$  задаются в виде

$$f(R_h) = 0, \quad \Phi(R_h, 0, \varphi_h, \varphi'_h) = 0, \quad \varphi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{\alpha q^2}{\gamma^2 r^4}. \quad (114)$$

Точкой  $R_h$  отрезок  $[R_l, \infty)$  разбивается на внутреннюю  $D_{\text{int}} \equiv (R_l, R_h)$  и внешнюю  $D_{\text{ext}} \equiv (R_h, \infty)$  области ЧД, причем  $R_h$  есть точка вырождения для (113б). Граничная задача для уравнений (113) решается в  $D_{\text{ext}}$ . Если горизонт найден, масса  $M_\infty$  ЧД находится из асимптотики метрической функции. Для последующего решения задачи в области  $D_{\text{ext}}$  необходимо задаться дополнительным условием на левой границе  $R_l > 0$ .

Отметим, что традиционная постановка задачи, когда масса ЧД считается заданной (см., например, [176]), приводит к существенно более трудоемкой краевой задаче с неизвестной левой границей в области  $D_{\text{int}}$ .

Приведена постановка задачи в случае экстремальных горизонтов, в которых производная метрической функции  $f'(R_h) = 0$  [175]. Показано, что значение дилатонного поля  $\varphi_e$  в горизонте удовлетворяет некоторому нелинейному алгебраическому уравнению, которое для дилатонного потенциала в виде  $V(\varphi) = \varphi^2$  и параметра  $\alpha = -1$  имеет вид

$$C(\varphi, q, \gamma) \equiv C_1(\varphi, \gamma) - C_2(\varphi, q, \gamma) = 0, \quad C_1 \equiv 1 + \frac{\gamma^2 \varphi e^{2\varphi}}{4}, \quad (115)$$

$$C_2 \equiv q^2 \gamma^2 e^{-2\varphi} \varphi (1 + \varphi)^2.$$

При фиксированных  $q$  и  $\gamma$  уравнение (115) имеет на интервале  $(0, \infty)$  не более двух действительных корней, что иллюстрируется на рис. 37. Случай,

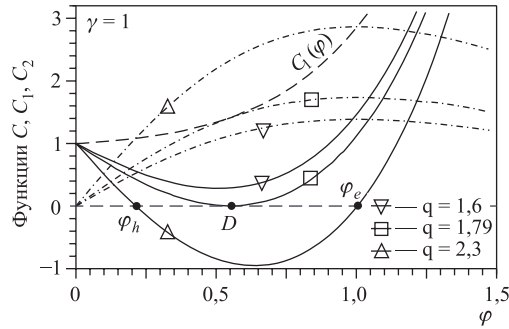


Рис. 37. Функции  $C, C_1, C_2$  (115)

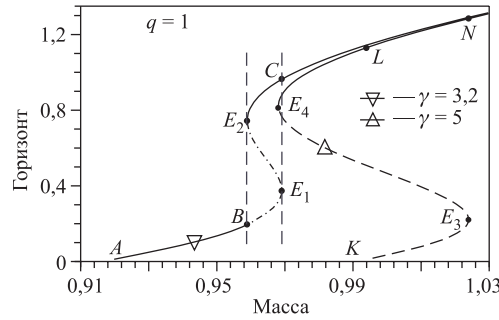


Рис. 38. Рождение и уничтожение горизонтов

обозначенный на рис.37 символом  $\nabla$ , когда уравнение не имеет корней, соответствует единственному регулярному горизонту ЧД.

При некотором соотношении между зарядом  $q_d$  и массой дилатона  $\gamma_d$  уравнение (115) имеет единственный корень  $0 < \varphi_d(\gamma) < 1$ , которому соответствует трижды вырожденное решение  $f(r)$  — в нуль обращается также и вторая производная метрической функции:  $f''(R_d) = 0$ . Краевая задача для уравнений (113) есть задача с известной левой границей  $R_d$ .

При достаточно больших значениях  $q > q_d(\gamma)$  (либо  $\gamma > \gamma_d(q)$ ) алгебраическое уравнение (115) имеет два различных корня  $\varphi_h < \varphi_e$  (штрихпунктирная кривая с  $\triangle$  на рис. 37) — модель определяет пару ЧД с экстремальными горизонтами  $R_e = 1/\gamma\sqrt{\varphi_e^2 + \varphi_e}$ . Меньший корень  $\varphi_h < 1$  соответствует ЧД с внешним экстремальным горизонтом  $R_h$ , а больший  $\varphi_e(q, \gamma)$  — ЧД с внутренним экстремальным горизонтом  $R_e$ . Процесс «рождения» и «уничтожения» горизонтов демонстрируется на рис. 38.

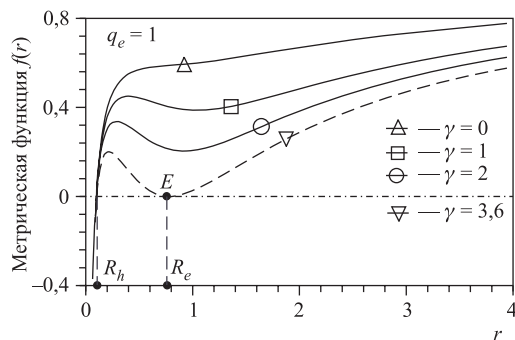


Рис. 39. Решения с внешним экстремальным горизонтом

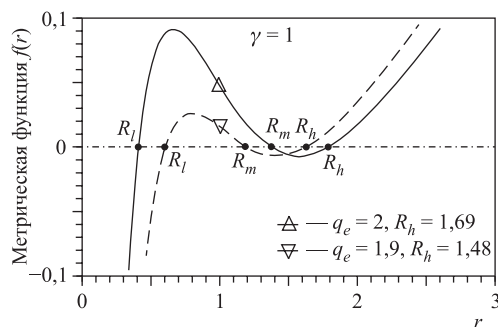


Рис. 40. Решения с тремя горизонтами

Примеры решений с одним и с двумя регулярными горизонтами, а также с экстремальными горизонтами представлены на рис. 39 и 40.

В работах [177–179] численно исследовалась система уравнений Янга–Миллса с дилатоном (ЯМд) в пространстве-времени Минковского размерности  $3 + 1$ . Такая задача является удобной математической моделью, позволяющей исследовать общие свойства широкого класса надкритических систем нелинейных эволюционных уравнений вплоть до образования сингулярностей.

Показано [177], что после выделения масштабно-инвариантной части дилатонной функции систему уравнений ЯМд можно свести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$f_{\xi\xi} = -f_{\xi} \phi_{\xi} + \frac{f[f^2 - 1]}{\xi^2 - 1}, \quad \phi_{\xi\xi} = -\frac{2}{\xi^2 - 1} + e^{\phi} \left\{ f_{\xi}^2 + \frac{(f^2 - 1)^2}{2(\xi^2 - 1)} \right\} \quad (116)$$

относительно функций  $f(\xi)$  и  $\phi(\xi)$  автомодельной переменной  $\xi = (T-t)/r$ ,  $T > 0$ . Здесь  $t$  — время;  $r$  — радиальная координата.

Система (116) имеет четыре сингулярные точки:  $\xi = -\infty, -1, +1, +\infty$ . На полубесконечном интервале  $\xi \in [1, +\infty)$ , покрывающем внутреннюю часть светового конуса, прошлого точки ( $t = T, r = 0$ ), численным путем получено семейство автомодельных решений, которые могут быть параметризованы через число нулей функции ЯМ  $f(\xi)$ .

Анализ устойчивости автомодельных решений в линейном приближении с помощью метода фазовых функций показывает, что множество автомодельных решений содержит только одно устойчивое решение ( $N = 0$ ).

Известно [180], что система уравнений ЯМд имеет счетное множество неустойчивых стационарных решений, параметризуемых числом нулей  $N$  функции ЯМ. Число неустойчивых мод стационарного решения с  $N$  нулями функции ЯМ равно  $N$ . В работе [178] собственные неустойчивые моды получены численно как решения матричной задачи Штурма–Лиувилля на полуоси  $0 < r < \infty$ :

$$-\Psi'' + U(r)\Psi - \lambda\Psi = 0, \quad (117a)$$

$$\Psi_1(0) = 0, \quad \Psi_2'(0) = 0, \quad \Psi_1(\infty) = 0, \quad \Psi_2'(\infty) = 0, \quad (117б)$$

$$\int_0^{\infty} (\Psi_1^2 + \Psi_2^2) dr - 1 = 0, \quad (117в)$$

где вектор собственных функций  $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2)^T$ , а элементы 2-матрицы  $U$  выражаются через стационарное решение, неустойчивые моды которого вычисляются.

Таблица 3. Собственные значения  $\{\lambda_N^j\}_{j=1}^N$

$N$	$\lambda_N^1$	$\lambda_N^2$	$\lambda_N^3$	$\lambda_N^4$
1	$-9,0566 \cdot 10^{-2}$			
2	$-7,5382 \cdot 10^{-2}$	$-2,0742 \cdot 10^{-4}$		
3	$-4,9346 \cdot 10^{-2}$	$-1,4957 \cdot 10^{-4}$	$-1,9622 \cdot 10^{-7}$	
4	$-4,3455 \cdot 10^{-2}$	$-5,9905 \cdot 10^{-5}$	$-1,3278 \cdot 10^{-7}$	$\sim -10^{-9}$

Собственные значения  $\lambda_N^j, j = 1, \dots, N$ , соответствующие стационарным решениям с  $N = 1, 2, 3, 4$  нулями, представлены в табл. 3. Хорошо видно, что собственные значения быстро стремятся к нулевому значению снизу с увеличением  $j$ . Поэтому для стационарных решений с  $N > 4$  просчитаны [178, 179] только основные собственные функции и собственные значения  $\lambda_N^1$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В обзоре представлен класс методов вычислительной физики для исследования функциональных зависимостей от параметров характеристик математических моделей, описывающих переходные процессы в сложных физических системах. Этот класс объединяет новые схемы продолжения по параметрам с итерационными схемами, полученными на основе дальнейшего развития обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона. Рассмотрена программная реализация приведенных вычислительных схем.

Разработка этого класса методов вычислительной физики является результатом численного исследования разнообразных математических моделей теоретической физики, имеющих несомненную важность как для теории, так и для различных экспериментальных программ. Именно практическое значение исследования этих моделей явилось аргументом в пользу поиска для них общих математических постановок и общих методов численного анализа.

Авторы выражают благодарность директору ЛИТ ОИЯИ В. В. Иванову за предложение написать этот обзор к пятидесятилетию со дня образования нашего Института.

Авторы благодарят А. Г. Абрашкевича, И. В. Амирханова, И. В. Барашенкова, А. А. Гусева, С. Н. Димову, В. К. Лукьянова, Д. В. Павлова, Ю. В. Попова, Ю. С. Смирнова, Т. А. Стриж, в сотрудничестве с которыми был получен ряд результатов, представленных в обзоре.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 06-01-00228, 06-02-17003).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Potter D.* Computational Physics. N. Y.: John Wiley & Sons, 1973. 304 p.
2. Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений: Пер. с англ. / Под. ред. Б. Олдера, С. Фернбаха и М. Роттенберга. М.: Мир, 1974. 387 с.
3. *Федоренко Р. П.* Введение в вычислительную физику. М.: Изд-во МФТИ, 1994. 526 с.
4. *Пузынин И. В. и др.* Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово-полевых моделей // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30, вып. 1. С. 210–265.
5. *Канторович Л. В., Крылов В. И.* Приближенные методы высшего анализа. М.: Физматгиз, 1962. 708 с.
6. *Давиденко Д. Ф.* О приложении метода вариации параметра к теории нелинейных функциональных уравнений // Укр. матем. журн. 1955. Т. 7, № 1. С. 18–28.
7. *Виницкий С. И., Пузынин И. В., Смирнов Ю. С.* Расчеты повышенной точности многоканальной задачи рассеяния для мезоатомных процессов // ЯФ. 1992. Т. 55, № 12. С. 3282–3294.



8. *Puzynin I. V. et al.* The Newtonian Iterative Scheme with Simultaneous Calculating the Inverse Operator for the Derivative of Nonlinear Function // JINR Rapid Commun. 1993. No.5[62]. P. 63–73.
9. Ульм С. Об итерационных методах с последовательной аппроксимацией обратного оператора // Изв. АН Эст. ССР. 1967. Т. XVI. Физика. Математика. №4. С. 403–411.
10. *Ортега Дж.* Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем: Пер. с англ. М.: Мир, 1991. 365 с.
11. *Жанлав Т., Пузынин И. В.* О сходимости итераций на основе непрерывного аналога метода Ньютона // ЖВМиМФ. 1992. Т. 32, № 6. С. 846–856.
12. *Ермаков В. В., Калиткин Н. Н.* Оптимальный шаг и регуляризация метода Ньютона // ЖВМиМФ. 1981. Т. 21, № 2. С. 491–497.
13. *Виницкий С. И. и др.* Процесс Ньютона в теории возмущений с непрерывным включением взаимодействия. Препринт ОИЯИ Р4-10942. Дубна, 1977. 14 с.
14. *Киржниц Д. А., Такибаев Н. Г.* Новый подход в задаче трех и большего числа тел // ЯФ. 1977. Т. 25. С. 700–710.
15. *Виницкий С. И., Пузынин И. В., Смирнов Ю. С.* Решение задачи рассеяния на основе многопараметрических ньютоновских схем // ЯФ. 1990. Т. 52, № 4(10). С. 1176–1189.
16. *Демков Ю. Н.* Вариационные принципы теории столкновений. М.: Физматгиз, 1958.
17. *Гайлитис М.* Экстремальные свойства приближенных методов теории столкновений при наличии неупругих процессов // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 160–166.
18. *Зубарев А. Л.* Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоатомиздат, 1981. 144 с.
19. *Chuluunbaatar O., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* Newtonian Iteration Scheme with the Schwinger Variational Functional for Solving a Scattering Problem // J. Comp. Meths. Sci. Engin. 2002. V. 2, No. 1–2. P. 37–49.
20. *Чулуунбаатар О., Пузынин И. В., Виницкий С. И.* Ньютоновская итерационная схема с вариационным функционалом Швингера для решения задачи рассеяния. Сообщение ОИЯИ Р11-2001-61. Дубна, 2001. 16 с.
21. *Чулуунбаатар О.* Ньютоновские вариационно-итерационные схемы для численного исследования трехчастичных квантовых систем. Автореф. дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Дубна, 2002. 16 с.
22. *Ньюэлл А.* Солитоны в математике и физике: Пер. с англ. М.: Мир, 1989. 326 с.
23. *Пиев I. D., Khristov E. Kh., Kirchev K. P.* Spectral Methods in Soliton Equations. N. Y.: Longman Sci. & Techn.; Wiley, 1994. 384 p.
24. *Белова Т. И., Кудрявцев А. Е.* Солитоны и их взаимодействия в классической теории поля // УФН. 1997. Т. 40, № 4. С. 359–386.
25. *Гальперн Ю. С., Филиппов А. Т.* Связанные состояния солитонов в неоднородных джозефсоновских переходах // ЖЭТФ. 1984. Т. 86, № 4. С. 1527–1543.
26. *Вайнберг М. М., Треногин В. А.* Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М.: Наука, 1969. 527 с.
27. Теория ветвления и нелинейные задачи на собственные значения / Ред. Дж. Б. Келлер и др.: Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 254 с.
28. *Арнольд В. И.* Особенности, бифуркации и катастрофы // УФН. 1983. Т. 141. С. 569–590.

29. *Выставкин А. Н. и др.* Обнаружение статических связанных состояний флюксонов в распределенных джозефсоновских переходах с неоднородностью // *Физика низких температур*. 1988. Т. 14, № 6. С. 646–648.
30. *Устинов А. В.* Джозефсоновские вихри в распределенных сверхпроводящих структурах. Дисс. . . д-ра физ.-мат. наук. Черноголовка, 1994.
31. *Ортега Дж., Рейнболдт В.* Итерационные методы решения нелинейных систем со многими неизвестными: Пер. с англ. М.: Мир, 1975. 558 с.
32. *Seydel R.* From Equilibrium to Chaos. Practical Bifurcation and Stability Analysis. N. Y.: Elsevier, 1988. 376 с.
33. *Allgower E. L., Georg K.* Numerical Continuation Methods. N. Y.: Elsevier, 1990.
34. Continuation and Bifurcations: Numerical Techniques and Applications / Eds.: D. Roose et al. Kluwer Acad. Publ., 1990.
35. *Родионов И. Д.* Математическое моделирование атомных взаимодействий в газовой и конденсированной фазах. Автореф. дисс. . . д-ра физ.-мат. наук. Дубна: ОИЯИ, 1987. 35 с.
36. *Земляная Е. В., Барашенков И. В.* Численное исследование многосолитонных комплексов в нелинейном уравнении Шредингера с диссипацией и накачкой // *Матем. моделирование*. 2004. Т. 16, № 10. С. 3–14.
37. *Земляная Е. В., Барашенков И. В.* Численный анализ движущихся солитонов в нелинейном уравнении Шредингера с параметрической накачкой и диссипацией. // *Матем. моделирование*. 2005. Т. 17, № 1. С. 65–78.
38. *Амирханов И. В., Пузынин И. В., Стриж Т. А.* Нелинейная граничная задача с параметрической зависимостью от асимптотики решений и ее приложение к модели полярона. Сообщение ОИЯИ P11-91-454. Дубна, 1991. 14 с.
39. *Бояджиев Т. Л.* Численное исследование критических режимов в нелинейных полевых моделях физики. Дисс. . . д-ра физ.-мат. наук. Дубна, 2002. 28 с.
40. *Самарский А. А. и др.* Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических систем. М.: Наука, ГРФМЛ, 1987.
41. *Barashenkov I. V., Makhan'kov V. G.* Soliton-like Bubbles in the System of Interacting Bosons // *Phys. Lett. A*. 1988. V. 128. P. 52–56.
42. *Пузынин И. В., Пузынина Т. П.* Программа приближенного решения задачи Штурма–Лиувилля с помощью непрерывного аналога метода Ньютона // *Collection of Scientific Papers in Collaboration of JINR, Dubna, USSR and Central Research Institute for Physics, Hungary, Budapest*. KFKI-74-34, 1974. С. 93–112.
43. *Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Стриж Т. А.* SLIPN4 – программа для численного решения задачи Штурма–Лиувилля. Сообщение ОИЯИ P11-87-332. Дубна, 1987. 18 с.
44. *Пузынина Т. П.* SLIPS2 — программа численного решения задачи Штурма–Лиувилля для системы дифференциальных уравнений. Сообщение ОИЯИ P11-89-728. Дубна, 1989. 15 с.
45. *Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынина Т. П.* SNIDE — пакет программ для решения задач на собственные значения для интегродифференциального уравнения на основе НАМН. Сообщение ОИЯИ P11-91-87. Дубна, 1991. 15 с.
46. *Земляная Е. В.* SYSINT(SYSINTM) — комплекс программ для численного решения задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений. Сообщение ОИЯИ P11-94-120. Дубна, 1994. 9 с.
47. *Abrashkevich A. G., Puzynin I. V.* CANM, a Program for Numerical Solution of a System of Non-linear Equations Using the Continuous Analog of Newton's Method // *Comp. Phys. Commun*. 2004. V. 156. P. 154–170.

48. Земляная Е. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. PROGS2H4 — программа для решения краевой задачи для системы дифференциальных уравнений. Сообщение ОИЯИ P11-97-414. Дубна, 1997. 15 с.
49. Герштейн С. С., Петров Ю. В., Пономарев Л. И. Мюонный катализ и ядерный бридинг // УФН. 1990. Т. 160, вып. 8. С. 2–46.
50. Пономарев Л. И. Мюонный катализ. Обзор. М.: Мин-во атом. энергетики и пром-сти СССР, 1990. 111 с.
51. Виницкий С. И., Пономарев Л. И. Адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием // ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336–1418.
52. Пузынина Т. П. Модифицированные ньютоновские схемы для численного исследования квантово-полевых моделей. Автореф. дисс. ... д-ра физ.-мат. наук. 11-2003-115. Тверь, 2003. 34 с.
53. Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. Задача двух центров квантовой механики. Математическая часть // ЖВМиМФ. 1968. Т. 8, № 6. С. 1256–1268.
54. Ponomarev L. I., Puzynin I. V., Puzynina T. P. Continuous Analog of Newton's Method as Applied to the Calculation of the Binding Energy of Mesic Molecules // J. Comp. Phys. 1973. V. 13, No. 1. P. 1–14.
55. Ponomarev L. I., Puzynina T. P., Somov L. N. Non-Adiabatic Matrix Elements Connecting the Discrete and Continuous Spectra of Two-Centre Problem in Quantum Mechanics // J. Phys. B. 1977. V. 10, No. 4. P. 1335–1345.
56. Пузынина Т. П. TERM — программа для вычисления собственных значений задачи двух центров квантовой механики // Collection of Scientific Papers in Collaboration of JINR, Dubna, USSR and Central Research Institute for Physics, Hungary, Budapest. KFKI-77-12. 1977. С. 149–169.
57. Gocheva A. D. et al. High Accuracy Energy-Level Calculations of the Rotational-Vibrational Weakly Bound States of  $dd\mu$  and  $dt\mu$  Mesic Molecules // Phys. Lett. B. 1985. V. 153, No. 6. P. 349–352.
58. Puzynin I. V., Vinitzky S. I. Energy Levels of Mesic Molecules // Muon Catalyzed Fusion. 1988. V. 3. P. 307–320.
59. Korobov V. I., Puzynin I. V., Vinitzky S. I. Bound States of Hydrogen Mesic Molecular Ions: Variational Approach // Muon Catalyzed Fusion. 1992. V. 7. P. 63–80.
60. Korobov V. I., Melezhik V. S., Ponomarev L. I. Muon Transfer Rates in Collisions of Hydrogen Isotope Mesic Atoms in «Bare» Nuclei. Multichannel Adiabatic Approach // Hyperfine Interactions. 1993. V. 82. P. 31–43.
61. Виницкий С. И., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. Простое эффективное адиабатическое представление в задаче трех тел и моделирование перехода квазистационарного состояния в слабосвязанное для  $dt\mu$ -мезомолекулы // ЯФ. 1992. Т. 55, № 12. С. 3271–3277.
62. Пономарев Л. И., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. Непрерывный аналог метода Ньютона для нахождения квазистационарных решений уравнения Шредингера. Препринт ОИЯИ P4-8884. Дубна, 1975. 24 с.;  
Ponomarev L. I., Puzynin I. V., Puzynina T. P. Continuous Analogue of Newton's Method for the Calculation of Quasibound States of Hydrogen  $\mu$ -Mesic Molecules // J. Comp. Phys. 1976. V. 22, No. 1. P. 125–130.
63. Puzynin I. V. et al. New Effective Mass in Adiabatic Approach for the Muonic Three-Body Problem // ЯФ. 1993. Т. 56, № 7. С. 82–88.
64. Aissing G. A., Monkhurst H. J., Petrov Yu. V. Simple Analytical Expressions for Mesomolecular Matrix Elements // Phys. Rev. A. 1990. V. 42, No. 11. P. 6894–6896.

65. *Kino Y. et al.* Asymptotic Form of Three-Body  $(dt\mu)^+$  and  $(dd\mu)^+$  Wave Functions // *Hyperfine Interactions*. 1996. V. 101/102. P. 325–328.
66. *Abramov D.I., Slavyanov S.Yu., Somov L.N.* The Asymptotic Behaviour of the Nonadiabatic Matrix Elements Connecting the Ground State and Continuum of the Two-Centre Problem // *J. Phys. B*. 1980. V. 13. P. 4717–4725.
67. *Bracci L. et al.* About the Boundary Conditions for the Three-Body Scattering Problem in the Adiabatic Representation // *Nuovo Cim. B*. 1990. V. 105, No. 4. P. 459–486.
68. *Puzynin I.V. et al.* New Effective Adiabatic Approach to the Muonic Three-Body Scattering Problem // *Hyperfine Interactions*. 1993. V. 82. P. 73–81.
69. *Chiccoli C. et al.* The Atlas of the Cross Sections of Mesic Atomic Processes. III. The Processes  $p\mu+(d, t)$ ,  $d\mu+(p, t)$  and  $t\mu+(p, d)$  // *Muon Catalyzed Fusion*. 1992. V. 7, No. 1–2. P. 87–153.
70. *Mardoyan L.G. et al.* Nonadiabatic Coupling in the  $\bar{p}\text{He}^+$  System // *ЯФ*. 1998. Т. 61, № 11. С. 2104–2110.
71. *Bakalov D. et al.* Fine and Hyperfine Structure of Antiprotonic Helium // *Hyperfine Interactions*. 1996. V. 101/102. P. 487–492.
72. *Puzynin I.V. et al.* Energy Level Scheme of  $\bar{p}\text{He}^+$  System in an Improved Adiabatic Approach // *Ibid.* P. 493–502.
73. *Bakalov D. et al.* Spin Effects in Antiprotonic Helium Spectroscopy // *Phys. Lett. A*. 1996. V. 211. P. 223–227.
74. *Yamazaki T.* Metastable Antiprotonic Helium Atomcules // *Hyperfine Interactions*. 1996. V. 101/102. P. 451–461.
75. *Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitsky S.I.* Asymptotic Form of Effective Potentials of the Coulomb Three-Body Problem in the Adiabatic Representation // *J. Phys. B*. 1976. V. 9. P. 2255–2268.
76. *Пономарев Л.И., Пузынина Т.П.* Задача двух центров квантовой механики. II. Математическая часть. Препринт ОИЯИ Р2-3012. Дубна, 1966. 27 с.
77. *Puzynin I.V. et al.* High Accuracy Newton Iteration Scheme for Solving the Multichannel Eigenvalue Problem of Some Exotic Few-Body Systems // *Proc. Intern. Conf. «СМСП-96»*, Dubna, Sept. 1996 / Eds. E.P. Zhdkov et al. Dubna, 1997. P. 240–245.
78. *Korobov V.I.* High Accuracy Calculations of Meta-Stable States of Antiprotonic Helium Atoms // *Hyperfine Interactions*. 1996. V. 101/102. P. 479–485; Variational Calculation of Energy Levels in  $\bar{p}\text{He}^+$  Molecular Systems // *Phys. Rev. A*. 1996. V. 54. P. R1749–R1752.
79. *Puzynin I.V. et al.* Energy Level of  $\bar{p}\text{He}^+$  System in Generalized Adiabatic Approach // *Hyperfine Interactions*. 1996. V. 101/102. P. 493–502.
80. *Shimamura I.* Molecule-Like Metastable States of Antiprotonic and Mesic Helium // *Phys. Rev. A*. 1992. V. 46. P. 3776–3788.
81. *Derbov V.L. et al.* Multipulse Laser Spectroscopy of  $\bar{p}\text{He}^+$ : Measurement and Control of the Metastable State Populations // *Phys. Rev. A*. 1997. V. 55. P. 3394–3400.
82. *Richter K. et al.* New State of Binding of Antiprotons in Atoms // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 66. P. 149–152.
83. *Pavlov D.V., Puzynin I.V., Vinitsky S.I.* Discrete Spectrum of Two-Center Problem of  $\bar{p}\text{He}^+$  Atomcule. JINR Preprint E4-99-141. Dubna, 1999. 35 p.
84. *Chuluunbaatar O. et al.* Newtonian Iteration Schemes for Solving the Three-Boson Scattering Problem on a Line // *Proc. SPIE*. 2002. V. 4706. P. 163–172.

85. *Gibson W. G., Larsen S. Y., Popiel J. J.* Hyperspherical Harmonics in One Dimension: Adiabatic Effective Potentials for Three Particles with  $\delta$ -Function Interactions // *Phys. Rev. A.* 1987. V. 15. P. 4919–4929.
86. *Amaya-Tapia A., Larsen S. Y., Popiel J. J.* Three-Body Phase Shift in One-Dimensional  $2 + 1$  Scattering // *Few-Body Syst.* 1997. V. 23. P. 87–109.
87. *Chuluunbaatar O. et al.* Three Identical Particles on a Line: Comparison of Some Exact and Approximate Calculations // *J. Phys. A: Math. and Gen.* 2002. V. 35. P. L513–L525.
88. *Неудачин В. Г., Попов Ю. В., Смирнов Ю. Ф.* Электронная импульсная спектроскопия атомов, молекул и тонких пленок // *УФН.* 1999. Т. 169. С. 1111–1138.
89. *Lahmam-Bennani A., Duguet A., Roussin S.* Observation of Non-First-Order Effects in an  $(e, 3-1e)$  Investigation of the Double Ionization of Helium and Molecular Hydrogen // *J. Phys. B.* 2002. V. 35. P. L59–L63.
90. *Watanabe N. et al.*  $(e, 2e)$  and  $(e, 3-1e)$  Studies on Double Processes of He at Large Momentum Transfer // *Phys. Rev. A.* 2005. V. 72. P. 032705(9).
91. *Kato T.* On the Eigenfunctions of Many-Particle Systems in Quantum Mechanics // *Commun. Pure Appl. Math.* 1957. V. 10. P. 151–177.
92. *Chuluunbaatar O. et al.* Role of the Cusp Conditions in Electron–Atom Double Ionization // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 74. P. 014703(1–4).
93. *Pavlov D. V. et al.* Wave Functions of Continuous Spectrum of the Coulomb Two-Center Problem // *J. Comp. Meth. Sci. Engin.* 2002. V. 2, No. 1s–2s. P. 261–269.
94. *Serov V. V. et al.*  $(e, 2e)$  Ionization of  $H_2^+$  by Fast Electron Impact: Application of the Exact Nonrelativistic Two-Center Continuum Wave // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 65. P. 062708(7).
95. *Chuluunbaatar O. et al.* Two-Center Electron Continua: Application to the Dissociative Ionization of  $H_2^+$  by Fast Electron // *J. Phys. B.* 2004. V. 37. P. 2607–2616.
96. *Serov V. V. et al.* Ionization Excitation of Diatomic Systems Having Two Active Electrons by Fast Electron Impact: a Probe to Electron Correlation // *J. Phys. B.* 2005. V. 38. P. 2765–2773.
97. *Chuluunbaatar O., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* Uncoupled Correlated Calculations of Helium Isoelectronic Bound States // *J. Phys. B.* 2001. V. 34. P. L425–L432.
98. *Frankowski K., Pekeris C. L.* Logarithmic Terms in the Wave Functions of the Ground State of Two-Electron Atoms // *Phys. Rev.* 1966. V. 146. P. 46–49; 1996. V. 150. P. 336–336.
99. *Goldman S. P.* Uncoupling Correlated Calculations in Atomic Physics: Very High Accuracy and Ease // *Phys. Rev. A.* 1998. V. 57. P. R677–R680.
100. *Drake G. W. F.* High Precision Theory of Atomic Helium // *Phys. Scr.* 1999. V. 83. P. 83–92.
101. *Korobov V. I.* Nonrelativistic Ionization Energy for the Helium Ground State // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 66. P. 024501(2).
102. *Чулуунбаатар О., Попов Ю. В., Виницкий С. И.* Факторизованная коррелированная вариационная функция в применении к расчетам  $(e, 2e)$ - и  $(e, 3e)$ -реакций ионизации атома гелия. Сообщение ОИЯИ Р4-2002-134. Дубна, 2002. 8 с.
103. *Попов Ю. В. и др.* Теоретические исследования реакций  $p + He \rightarrow H + He^+$  и  $p + He \rightarrow H + He^{++} + e$  при сверхмалых углах рассеяния водорода // *ЖЭТФ.* 2002. Т. 122. С. 717–722.
104. *Popov Yu. V., Ancarani L. U.* Rigorous Mathematical Study of the He Bound States // *Phys. Rev. A.* 2000. V. 62. P. 42702(9).
105. *Frolov A. M.* Bound-State Properties of the Positronium Negative Ion  $Ps^-$  // *Phys. Rev. A.* 1999. V. 60. P. 2834–2839.

106. *Mergel A. et al.* Strong Correlations in the He Ground State Momentum Wave Function Observed in the Fully Differential Momentum Distributions for the  $p + \text{He}$  Transfer Ionization Process // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. P. 2257–2260.
107. *Schmidt-Böcking H. et al.* Double-to-Single Target Ionization Ratio for Electron Capture in Fast  $p\text{-He}$  Collisions // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. P. 163201(4).
108. *Vinitsky P. S., Popov Yu. V., Chuluunbaatar O.* Fast Proton–Hydrogen Charge Exchange Reaction at Small Scattering Angles // *Phys. Rev. A.* 2005. V. 71. P. 012706(9).
109. *Weideman J. A., Herbst B. M.* Split-Step Methods for the Solutions of the Nonlinear Schrödinger Equation // *SIAM J. Numer. Anal.* 1986. V. 23. P. 485–507.
110. *Alexeeva N. V., Barashenkov I. V., Pelinovsky D. E.* Dynamics of the Parametrically Driven NLS Solitons Beyond the Onset of the Oscillatory Instability // *Nonlinearity.* 1999. V. 12. P. 103–140.
111. *Barashenkov I. V., Smirnov Yu. S.* Existence and Stability Chart for the Ac-driven, Damped Nonlinear Schrödinger Equation // *Phys. Rev. E.* 1996. V. 54. P. 5707–5725.
112. *Wang X., Wei R.* Observations of Collision Behaviour of Parametrically Excited Standing Solitons // *Phys. Lett. A.* 1995. V. 192. P. 1–4.
113. *Yan J. R., Mei Y. P.* Interaction between Two Wu’s Solitons // *Europhys. Lett.* 1993. V. 23, No. 5. P. 335–340.
114. *Malomed B. A.* Bound States of Envelope Solitons // *Phys. Rev. E.* 1993. V. 47. P. 2874–2880.
115. *Barashenkov I. V., Zemlyanaya E. V.* Stable Complexes of Parametrically Driven, Damped Nonlinear Schrödinger Solitons // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 83. P. 2568–2571.
116. *Barashenkov I. V., Smirnov Yu. S., Alexeeva N. V.* Bifurcation to Multisoliton Complexes in the Ac-driven, Damped Nonlinear Schrödinger Equation // *Phys. Rev. E.* 1998. V. 57. P. 2350–2364.
117. *Malomed B. A.* Bound Solitons in the Nonlinear Schrödinger–Ginzburg–Landau Equation // *Phys. Rev. A.* 1991. V. 44. P. 6957–6957.
118. *Barashenkov I. V., Zemlyanaya E. V.* Existence Threshold for the Ac-driven Nonlinear Schrödinger Solitons // *Physica D.* 1999. V. 132, No. 3. P. 363–373.
119. *Barashenkov I. V., Zemlyanaya E. V., Bär M.* Travelling Solitons in the Parametrically Driven Nonlinear Schrödinger Equation // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 64. P. 016603(11).
120. *Barashenkov I. V., Zemlyanaya E. V.* Travelling Solitons in the Damped Driven Nonlinear Schrödinger Equation // *SIAM J. Appl. Math.* 2004. V. 64, No. 3. P. 800–818.
121. *Barashenkov I. V. et al.* Stability of the Moving Bubbles in the System of Interacting Bosons // *Phys. Lett. A.* 1989. V. 135, No. 2. P. 125–128.
122. *Barashenkov I. V., Woodford S. R., Zemlyanaya E. V.* Parametrically Driven Dark Solitons // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 90, No. 5. P. 054103(4).
123. *Zemlyanaya E. V., Barashenkov I. V., Woodford S. R.* Parametrically Driven Dark Solitons: A Numerical Study // *Proc. of III Workshop on Numerical Analysis and Application, Rousse, Bulgaria, 2004. Lect. Notes in Comp. Sci. / Ed. by Z. Li et al. Berlin, 2005. V. 3401. P. 590–598.*
124. *Barashenkov I. V., Alexeeva N. V., Zemlyanaya E. V.* Two- and Three-Dimensional Oscillons in Nonlinear Faraday Resonance // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. P. 104101(4).
125. *Alexeeva N. V., Zemlyanaya E. V.* Nodal Two-Dimensional Solitons in Nonlinear Parametric Resonance // *Proc. of III Workshop on Numerical Analysis and Application, Rousse, Bulgaria, 2004. Lect. Notes in Comp. Sci. / Ed. by Z. Li et al. Berlin, 2005. V. 3401. P. 91–98.*
126. *de Sterke C. M., Sipe J. E.* Gap Solitons // *Progress in Optics / Ed. E. Wolf. Amsterdam, 1994. V. XXXIII. P. 203–260.*

127. *Kivshar Yu. S. et al.* Bright and Dark Gap Solitons Governed by Quadratic Nonlinearities // Intern. J. Mod. Phys. B. 1995. V. 9, No. 22. P. 2963–2987.
128. *Barashenkov I. V., Pelinovsky D. E., Zemlyanaya E. V.* Vibrations and Oscillatory Instabilities of Gap Solitons // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 5117–5120.
129. *Barashenkov I. V., Zemlyanaya E. V.* Oscillatory Instabilities of Gap Solitons: A Numerical Study // Comp. Phys. Commun. 2000. V. 126, No. 1–2. P. 22–27.
130. *de Sterke C. M.* Stability Analysis of Nonlinear Periodic Media // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 8252–8258.
131. *Aceves A. B., Wabnitz S.* Self-Induced Transparency Solitons in Nonlinear Refractive Periodic Media // Phys. Lett. A. 1989. V. 141. P. 37–42.
132. *Schöllmann J. et al.* On the Stability of Stationary Gap Solitary Waves at Periodically Modulated Surfaces // Phys. Rev. E. 1999. V. 59, No. 4. P. 4618–4629.
133. *Кутербекгов К. А. и др.* Обобщенная зависимость параметров полумикроскопической фолдинг-модели для альфа-частиц в области низких и средних энергий // ЯФ. 2005. Т. 68, № 6. С. 967–978.
134. *Кхоа Д. Т., Князьков О. М.* Обменные эффекты в ядро-ядерных потенциалах и ядерное радужное рассеяние // ЭЧАЯ. 1990. Т. 21, № 6. С. 1456–1498.
135. *Glauber R. J.* Lectures on Theor. Phys. N. Y.: Interscience, 1959. V. 1. 315 p.
136. *Ситенко А. Г.* К теории ядерных реакций с участием сложных частиц // УФЖ. 1957. Т. 4. С. 152–163.
137. *Лукьянов В. К.* Ядерные искаженные волны в высокоэнергетическом приближении // ЯФ. 1995. Т. 58, № 11. С. 1955–1962.
138. *Лукуанов В. К., Zemlyanaya E. V.* High-Energy Approximation for Nucleus–Nucleus Scattering // Intern. J. Mod. Phys. E. 2001. V. 10, No. 3. P. 163–183.
139. *Лукьянов В. К., Словинский Б., Земляная Е. В.* О роли ядерной поверхности в формировании полного сечения ядро-ядерных реакций // ЯФ. 2001. Т. 64, № 7. С. 1349–1357.
140. *Соболев Ю. Г. и др.* Энергетическая зависимость полного сечения реакции  ${}^4_2\text{He}, {}^7_3\text{Li} + {}^{28}_{14}\text{Si}$  при  $E = 5 : 50$  МэВ/А // Изв. РАН. Сер. физ. 2005. Т. 69, № 11. С. 1603–1607.
141. *Лукуанов В. К., Zemlyanaya E. V.* Eikonal Phase for the Symmetrized Woods–Saxon Potential and Its Use for Heavy Ion Scattering // J. Phys. G. 2000. V. 26, No. 4. P. 357–363.
142. *Лукьянов В. К., Земляная Е. В., Словинский Б.* Полные сечения ядро-ядерных реакций в подходе Глаубера–Ситенко для реалистических распределений ядерной материи // ЯФ. 2004. Т. 67, № 7. С. 1306–1321.
143. *Лукьянов В. К., Земляная Е. В., Словинский Б.* Расчет полных сечений ядро-ядерных реакций с использованием реалистических распределений ядерных плотностей // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. Т. 68, № 2. С. 163–167.
144. *Charagi S., Gupta G.* Coulomb-modified Glauber Model Description of Heavy-Ion Reaction Cross Sections // Phys. Rev. C. 1990. V. 41. P. 1610–1618.
145. *Kox S. et al.* Trends of Total Reaction Cross Sections for Heavy Ion Collisions in the Intermediate Energy Range // Phys. Rev. C. 1987. V. 35. P. 1678–1691.
146. *Лукуанов В. К. et al.* Testing  ${}^6,8\text{He}$  Density Distributions by Calculations of Total Reaction Cross-Sections of  ${}^6,8\text{He} + {}^{28}\text{Si}$  // Intern. J. Mod. Phys. E. 2004. V. 13, No. 3. P. 573–584.
147. *Tanihata I. et al.* Revelation of Thick Neutron Skins in Nuclei // Phys. Lett. B. 1992. V. 289. P. 261–266.

148. Лукьянов В. К. и др. Подход Глаубера–Ситенко к рассеянию ядер с реалистическими плотностями и метод восстановления оптического потенциала // Изв. РАН. Сер. физ. 2003. Т. 67, № 1. С. 55–61.
149. Shukla P. Glauber Model for Heavy Ion Collisions from Low Energies to High Energies. nucl-th/0112039. 2001.
150. Neto R. L. et al. Excitation of Giant Resonances in  $^{208}\text{Pb}$ ,  $^{120}\text{Sn}$ ,  $^{90}\text{Zr}$  and  $^{60}\text{Ni}$  by 84 MeV/nucleon  $^{17}\text{O}$  Ions // Nucl. Phys. A. 1993. V. 560. P. 733–764.
151. Земляная Е. В. и др. Восстановление оптического потенциала рассеяния при промежуточных энергиях // Изв. РАН. Сер. физ. 2005. Т. 69, № 11. С. 1649–1654.
152. Земляная Е. В., Лукьянов В. К., Лукьянов К. В. Ядро-ядерное рассеяние и оптический потенциал фолдинга // ЯФ. 2006. Т. 69, № 2. С. 262–275.
153. Natta K. M. et al. Excitation of Nuclear Collective States by Heavy Ions within the Model of Semi-Microscopic Optical Potential. nucl-th/0511037. 2005; Part. Nucl., Lett. 2006. V. 3, No. 6. P. 105–112.
154. Лукьянов В. К. и др. Структура альфа-кластеров и зарядовые формфакторы ядра  $^{12}\text{C}$  // Изв. РАН. Сер. физ. 2000. Т. 64, № 5. С. 851–861.
155. Lukyanov V. K. et al. Role of the Coulomb Distortion in Form-Factor Calculations for  $^{12}\text{C}$  Accounting for the Alpha-Clusterization and Nucleon–Nucleon Correlations // Письма в ЭЧАЯ. 2002. № 2[111]. С. 5–12.
156. Лукьянов В. К. и др. Роль кулоновского искажения в расчетах формфактора ядра  $^{12}\text{C}$  с учетом альфа-кластеризации и нуклон-нуклонных корреляций // Изв. РАН. Сер. физ. 2003. Т. 67, № 5. С. 717–721.
157. Genchev Z. D., Boyadjiev T. L. On the Solution of the Modified Ginzburg–Landau Type Equation for One-Dimensional Superconductor in Presence of a Normal Layer // Eur. J. Appl. Math. 2003. V. 14. P. 1–10.
158. Boyadjiev T. L. Bifurcations of the solutions of Modified Ginzburg–Landau Equation for Josephson Junctions // Матем. моделирование. 2003. Т. 15, № 2. С. 9–20.
159. Бояджиев Т. Л. и др. Бифуркации связанных состояний флюксонов в неоднородном джозефсоновском переходе конечной длины. Сообщение ОИЯИ Р11-85-807. Дубна, 1985. 18 с.
160. Бояджиев Т. Л. и др. Связанные состояния флюксонов в неоднородном джозефсоновском переходе с током во внешнем магнитном поле. Сообщение ОИЯИ Р17-86-506. Дубна, 1986. 9 с.
161. Бояджиев Т. Л., Павлов Д. В., Пузынин И. В. Ньютоновский алгоритм вычисления критических параметров в одномерном неоднородном джозефсоновском переходе. Сообщение ОИЯИ Р11-88-409. Дубна, 1988. 12 с.
162. Бояджиев Т. Л., Павлов Д. В., Пузынин И. В. Применение непрерывного аналога метода Ньютона для вычисления бифуркационных кривых в джозефсоновских переходах // Numerical Methods and Applications: Proc. of the Intern. Conf. on Num. Math. and Appl., Sofia, Aug. 22–27, 1988 / Eds: Bl. Sendov, R. Lazarov, I. Dimov. Sofia, 1989. P. 75–80.
163. Атанасова П. Х., Бояджиев Т. Л., Димова С. Н. Численное моделирование критических зависимостей для симметричных двухслойных джозефсоновских контактов // ЖВМиМФ. 2006. Т. 46, № 4. С. 699–713.
164. Семерджиева Е. Г., Бояджиев Т. Л., Шукринов Ю. М. Статические вихри в длинных джозефсоновских контактах с экспоненциально изменяющейся шириной // Физика низких температур. 2004. Т. 30, № 6. С. 610–618.



165. *Shukrinov Yu. M., Semerdjieva E. G., Boyadjiev T. L.* Vortex Structures in Exponentially Shaped Josephson Junctions // *J. Low Temp. Phys.* 2005. V. 139, No. 1/2. P. 299–308.
166. *Carapella G., Martucciello N., Costabile G.* Experimental Investigation of Flux Motion in Exponentially Shaped Josephson Junctions // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. P. 134531.
167. *Семерджијева Е. Г., Бояджијев Т. Л., Шукринов Ю. М.* Преобразования координат в модели длинных джозефсоновских контактов: геометрически эквивалентные контакты // *Физика низких температур.* 2005. Т. 31, № 10. С. 1110–1116.
168. *Boyadjiev T., Todorov M.* Numerical Investigation of a Bifurcation Problem with Free Boundaries Arising from the Physics of Josephson Junctions // *Матем. моделирование.* 2000. Т. 12, № 4. С. 61–72.
169. *Boyadjiev T., Todorov M.* Minimal Length of Josephson Junctions with Stable Fluxon Bound States // *Supercond. Sci. Technol.* 2002. V. 14. P. 1–7.
170. *Jhy-Jiun Chang, Ho C. H.* Nonlocal Response to a Focused Laser Beam in One-Dimensional Josephson Tunnel Junctions // *Appl. Phys. Lett.* 1984. V. 45, No. 2. P. 192–184.
171. *Fiziev P. et al.* Boson Stars in Massive Dilatonic Gravity // *Phys. Rev. D.* 2000. V. 61. P. 124018(9).
172. *Boyadjiev T. et al.* Mathematical Modeling of Boson–Fermion Stars in the Generalized Scalar-Tensor Theories of Gravity // *J. Comp. Phys.* 2001. V. 166, No. 2. P. 253–270.
173. *Boyadjiev T. et al.* New Numerical Algorithm for Modeling of Boson–Fermion Stars in Dilatonic Gravity // *J. Comp. and Appl. Maths.* 2002. V. 145, No. 1. P. 113–131.
174. *Yazadjiev S. et al.* Electrically Charged Einstein–Born–Infeld Black Holes with Massive Dilaton // *Mod. Phys. Lett. A.* 2001. V. 16, No. 33. P. 2143–2149.
175. *Бояджијев Т. Л., Физиев П. П.* Численное моделирование черных дыр с массивным дилатоном. Сообщение ОИЯИ Р2-2002-1. Дубна, 2002. 26 с.
176. *Tamaki T.* Thermodynamic Properties of Massive Dilaton Black Holes II. gr-qc/0205048.
177. *Donets E. E., Streltsova O. I., Boyadjiev T. L.* Self-Similarity and Singularity Formation in a Coupled System of Yang–Mills–Dilaton Evolution Equations // *Phys. Rev. D.* 2003. V. 68, No. 12. P. 125010(9).
178. *Streltsova O. I. et al.* Unstable Even-Parity Eigenmodes of the Regular Static  $SU(2)$  Yang–Mills–Dilaton Solutions // *ЖВМиМФ.* 2005. Т. 45, № 5. С. 925–937.
179. *Georgieva D. A. et al.* Calculation of the Eigenmodes of the Regular Static Yang–Mills–Dilaton Problem // *Gravity, Astrophysics and Strings at the Black Sea: Proc. of the 2nd Advanced Research Workshop, Kiten, Bulgaria, June 10–16, 2004 / Eds.: P. Fiziev, M. Todorov.* Sofia: St. Kliment Ohridski Univ. Press, 2005, P. 137–149.
180. *Lavrelashvili G., Maison D.* Static Spherically Symmetric Solutions of a Yang–Mills Field Coupled to a Dilaton // *Phys. Lett. B.* 1992. V. 295. P. 67–72.