

11-2003-115

На правах рукописи
УДК 517.9; 519.6;
539.12; 681.3.06

ПУЗЫНИНА
Таисия Петровна

**МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НЬЮТОНОВСКИЕ СХЕМЫ
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ
КВАНТОВО-ПОЛЕВЫХ МОДЕЛЕЙ**

Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Тверь 2003

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор Е. А. Гребеников
доктор физико-математических наук, профессор К. А. Гриднев
доктор физико-математических наук, профессор В. П. Цветков

Ведущая организация: Российский университет дружбы народов, г. Москва

Защита диссертации состоится “ _____ ” _____ 2003г.
в _____ на заседании диссертационного совета Д212.263.04 при
Тверском государственном университете по адресу: Тверь, ул.
Желябова, 33.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке
Тверского государственного университета.

Автореферат разослан “ _____ ” _____ 2003 г.

Учёный секретарь совета
доктор технических наук, профессор



В.Н.Михно

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

В диссертации выполнено численное исследование основных характеристик ряда математических моделей сложных процессов из различных разделов физики. Рассмотрены следующие математические модели:

1. Задача трех квантовых частиц, взаимодействующих по закону Кулона, как модель для вычисления уровней энергии и волновых функций связанных и квазистационарных состояний мезомолекул в проблеме мезокатализа синтеза ядер изотопов водорода, а также структуры уровней энергии "экзотической" квантовой системы $\bar{p}He^+$ – антипротонной молекулы гелия.

2. Океаническая модель "жидкого дна" для расчета полей акустического волновода.

3. Модель кругового джозефсоновского перехода с микро неоднородностью для исследования устойчивости и точек бифуркации статических распределений магнитного потока.

4. Модель Латтинжера–Лу полярона (электрона в поле, создаваемом его взаимодействием со средой) для расчета основных характеристик поляронных состояний.

5. Потенциальные модели кваркония (мезона, состоящего из тяжелого кварка и его антикварка) для расчета характеристик системы кварк–антикварк с несколькими типами потенциалов.

Актуальность исследования указанных моделей обусловлена потребностями теоретических и экспериментальных программ и проектов. В частности, теоретические расчеты характеристик процессов мюонного катализа выполнялись по Программе исследований явления мюонного катализа, утвержденной Совместным решением ГКАЭ и Президиума АН СССР (№32, 19.09.83г.). Разработка алгоритмов и программ для расчета волнового распространения звука в океане проводилась в рамках Соглашения о научно–техническом сотрудничестве между ОИЯИ и Ленинградским государственным университетом. Исследования по джозефсоновским переходам велись совместно с Институтом радиоэлектроники г. Москва. Результаты исследований антипротонной молекулы гелия использованы в проекте CERN "Atomic spectroscopy and collisions using slow antiprotons" ASACUSA Collaboration (CERN/SPSC 97–19, CERN/SPSC P–307).

Выполнение работ проводилось при поддержке РФФИ (гранты 94–01–01119, 97–01–01040, 00–01–00617, 03–01–00657).

Эти модели объединены объектом численного исследования, которым являются сингулярные нелинейные спектральные или граничные задачи для систем дифференциальных, интегральных и интегро–дифференциальных уравнений.

Полное исследование таких задач с помощью аналитических и качественных методов возможно лишь в исключительных случаях. Нередко из–за сложности математической постановки задач единственно возможным является их численное решение. Создание обоснованного и эффективного алгоритма численного решения поставленной задачи, обеспечивающего необходимую точность результатов, и его реализация в виде комплекса программ эквивалентны, в определенном смысле, ее полному решению.

В диссертации представлены ньютоновские итерационные схемы и их алгоритми-

ческая и программная реализация для исследования этих нелинейных задач. Основой для их построения служит непрерывный аналог метода Ньютона (НАМН), впервые предложенный М.К. Гавуриным ¹. Обоснование и первые применения этого подхода к решению конкретных задач изложены в обзоре ². НАМН зарекомендовал себя как универсальный и эффективный метод исследования многих важных проблем теоретической физики. В результате его развития создан качественно новый ([7],[12],[27]–[29],[38]–[41]), обобщенный НАМН, соединивший в себе достоинства некоторых других известных методов, широко применяющихся при решении уравнений в математических моделях физики. Это схемы теории возмущений, метод продолжения по параметру, метод вариации параметра, который в задачах ядерной физики известен как метод эволюции по константе связи. Разработаны усовершенствованные итерационные схемы, алгоритмы и комплексы программ [30]–[35].

Исследование современных математических моделей физики предъявляет высокие требования к методам их численного анализа. Особенно сложными являются возникающие в них спектральные и нелинейные задачи, в которых решение является не единственным и требуется обеспечить выделение необходимого решения из множества других. Многочисленные подходы к приближенному решению таких задач, развитые в различных разделах теоретической физики, в большинстве своем носят частный характер и предназначены для решения узко специальных задач. Поэтому создание новых эффективных алгоритмов и комплексов программ для решения систем дифференциальных, интегро–дифференциальных и интегральных уравнений на основе единого метода, позволяющего единообразно анализировать точность расчетов и параметрические зависимости результатов и где НАМН представляется перспективной основой, является актуальной проблемой в области компьютерного моделирования сложных физических процессов.

Работы, положенные в основу диссертации, выполнены в соответствии с научно-тематическими планами научно-исследовательских работ ОИЯИ.

Цели и задачи исследований

Целью диссертационной работы является решение фундаментальной научной проблемы—создание эффективных итерационных схем, алгоритмов и комплексов программ для численного моделирования физических систем, приводящего к спектральным и граничным задачам для дифференциальных, интегро–дифференциальных и интегральных уравнений, а также исследование конкретных математических моделей квантовой механики, квантовой хромодинамики, конденсированных сред и акустики.

Достижение цели диссертационной работы осуществляется решением следующих задач:

1. На основе свойств обобщенного НАМН реализовать общую концепцию построения вычислительных схем, опирающуюся на метод продолжения по параметрам. Объединение физических параметров модели и параметров дискретной аппрокси-

¹Гавурин М.К. Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итеративных методов. Известия вузов. Математика, 1958, т.5(6), с.18–31.

²Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, 1973, т.4, вып.1, с.127–166.

мации в методе продолжения позволяет наряду с исследованием параметрических зависимостей характеристик модели выполнять их уточнение, а также упростить проблему задания начальных приближений для итераций.

2. Разработать для данного круга задач способы дискретной аппроксимации сингулярных задач, включая перенос асимптотических условий для решений на конечные интервалы интегрирования.

3. Разработать для итерационных схем простые алгоритмы решения уравнений для итерационных поправок и построения начальных приближений к искомому решению.

4. Выполнить численные исследования точности предложенных алгоритмов на моделях, близких к реальным задачам, или с помощью численных экспериментов на сгущающихся сетках и расширяющихся интервалах.

5. Разработать эффективные алгоритмы и создать комплексы программ для численного решения конкретных физических задач.

Для всех представленных в диссертации исследований выполнены все необходимые перечисленные выше задачи. Численное решение ряда задач теоретической физики из ее различных разделов с помощью разработанных схем и комплексов программ является практическим доказательством их эффективности.

Научная новизна и значимость работы

1. Наряду с классическими постановками (прямая и обратная задачи для уравнения Шредингера, нелинейная граничная задача для уравнения Латтинжера–Лу), рассматриваются новые постановки для систем, объединяющих нелинейные граничные и спектральные задачи, уравнения в которых связаны через неизвестные решения граничных задач. Это система из уравнения синус–Гордона и сопутствующего уравнения на собственные значения в задаче исследования устойчивости солитонных решений, система нелинейных уравнений Швингера–Дайсона и уравнений на собственные значения Бете–Солпитера в потенциальных моделях квантовой хромодинамики (КХД).

2. Данная диссертация является одной из первых работ, в которой систематически путем программной реализации и практической проверки эффективности представлены новые вычислительные схемы ньютоновского типа с параметром, минимизирующим невязку:

2.1. модифицированная схема с фиксированным сдвигом и дополнительной ортогонализацией собственных функций для последовательного вычисления решений из ограниченной части спектра оператора в задаче на собственные значения;

2.2. модифицированные итерационные схемы на основе дополнительной параметризации исходного уравнения, в частности, итерационная схема с одновременным уточнением обратного оператора в линейном уравнении для итерационной поправки, не требующая его обращения.

3. Разработано новое, усовершенствованное адиабатическое представление задачи трех кулоновских частиц в модели мезомолекул путем построения эффективных потенциалов простого двухуровневого приближения, воспроизводящего известные с высокой точностью уровни энергии мюонной трехчастичной системы за счет подбора параметра, обобщающего эффективную массу.

4. На основе новых модифицированных ньютоновских схем разработаны алгоритмы и созданы проблемно-ориентированные комплексы программ, объединенные в виде модулей, выполняющих как самостоятельные, так и вспомогательные функции при совместном использовании.

5. С использованием созданных программных комплексов впервые проведены численные исследования ряда нелинейных математических моделей физики и получены новые результаты:

5.1. В адиабатическом представлении задачи трех тел вычислены уровни энергии слабосвязанных возбужденных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, что послужило обоснованием модели резонансного образования мезомолекул и инициировало дальнейшие исследования проблемы мюкатализа.

5.2. На основе усовершенствованного двухуровневого адиабатического представления выполнен расчет характеристик рассеяния мезоатомов на ядрах дейтерия и трития, более экономичный в отличие от многоуровневых расчетов.

5.3. Выполнен расчет схемы уровней энергии антипротонной молекулы гелия для широкого набора квантовых чисел с использованием идеи построения эффективных потенциалов адиабатического приближения, воспроизводящих известные спектрметрические экспериментальные данные с помощью подбора подгоночных параметров.

5.4. В океанической модели "жидкого дна" проведен численный анализ влияния на поведение акустического поля океанического волновода способов аппроксимации профиля скорости распространения звука на различных глубинах океана и выполнено исследование характеристик звукового поля в случае, когда источник и приемник находятся вблизи поверхности, что продемонстрировало более широкую применимость разработанной схемы по сравнению с применявшимися ранее методами.

5.5. Реализовано моделирование бифуркационных режимов в круговых джозефсоновских контактах, что послужило основой для развития новых итерационных схем для исследования устойчивости стационарных режимов в джозефсоновских контактах других конфигураций.

5.6. Для модели Латтинжера-Лу впервые получены сферически несимметричные решения уравнения полярона.

5.7. В рамках потенциальной модели кваркония с гауссовским потенциалом впервые получены параметры для описания массовой функции кварка, энергии и константы лептонного распада основного состояния пиона. В рамках этой модели также получены результаты, ценные для решения проблем перенормировки и устранения расходимости в потенциальных моделях КХД.

5.8. Проведены численные исследования релятивистского уравнения Шредингера для кулоновского и линейного потенциалов. Сделан анализ динамики спектра в зависимости от параметров. Численные результаты подтверждают теоретические оценки влияния релятивистских эффектов и эффектов запаздывания взаимодействия на изменение спектра.

Практическая ценность

Программные комплексы SLIP1 [30], TERM [31], SLIPH4 [33], SLIPS2 [34], SYSTEM, SYSTEMQ [4], [36] использовались в ОИЯИ, ИАЭ им. И.В. Курчатова (Москва), ИФВЭ (Протвино), ИАН (Белград) для решения квантово-механической задачи трех

тел, для расчетов уровней энергии связи и волновых функций мезомолекул, мезомолекулярных комплексов, квазистационарных состояний, применяемых для определения скоростей и кинетики мюонного катализа. Комплексы программ WAVE [6] использовались при расчете полей акустических волноводов в океанической модели "жидкого дна" в НИИФ СПбГУ.

Комплексы SLIP1, SLIPH4, SLIPS2, SNIDE, SYSINT(SYSINTM) с полным описанием и тестовыми задачами сданы в библиотеку стандартных программ ОИЯИ JINRLIB. Адреса их размещений на WWW (первые два адреса для SLIP1, SLIPH4 и SLIPS2):

<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/index.html>

<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/indexe.html>

<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/snide/index.html>

<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/sysint/index.html>

Апробация результатов работы

Различные составные части диссертационной работы докладывались на международных конференциях "International Conference on High Energy Physics and Nuclear Structure", 6-th, Santa Fe – Los Alamos, 1975; " PANIC, Particles, and Nuclei", Tenth International Conference, Heidelberg, 1984; "Tenth International Conference on Atomic Physics", Tokyo, 1986; International Symposium "Schroedinger Operators Standard and non-Standard", Dubna, 1988; International Conference on Programming and Mathematical Methods for Solving Physical Problems, Dubna, 1993; International Workshop "Perspectives in Polarons ", Pushchino, Russia, 1993; WNAA'96 (I International Workshop on Numerical Analysis and Applications, 1996, Rousse, Bulgaria); "First International Conference on Modern Trends in Computational Physics, Dubna, 1998"; "Second International Conference on Modern Trends in Computational Physics, Dubna, 2000"; Пятый Международный конгресс по математическому моделированию (*V IСММ*), Дубна, 2002; на научных семинарах Лаборатории информационных технологий и Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Публикации

Основное содержание диссертации опубликовано в 49 работах в виде статей в журналах ЖВМиМФ, Мат. моделирование, ЖЭТФ, Ядерная Физика, Акустический журнал, ЭЧАЯ, Краткие Сообщения ОИЯИ, J. Comp. Phys., Z. Phys. D, J. Phys. B, Annals of Physics, Phys. Letters A,B, J. Hyperfine Interactions, Comp. Phys. Comm., докладов в трудах международных конференций, препринтов и сообщений ОИЯИ.

Структура и объём диссертации

Диссертация, содержащая 253 страницы, состоит из введения, шести глав, заключения, списка основных публикаций (в диссертации они имеют номера П1–П49) и списка цитируемой литературы, включающего 198 наименований. Главы разбиты на параграфы, параграфы – на пункты. Нумерация формул, таблиц (всего таблиц 49) и рисунков (их 42) сквозная в пределах каждой главы.

Личный вклад автора

Автор диссертации, работая в коллективе соавторов, объединяющем сотрудников Лаборатории информационных технологий, Лаборатории теоретической физики и Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ, участвовал в математической постановке задач, создании, проверке и улучшении математических моделей, в разработке и обосновании вычислительных схем. В создание комплексов программ, в проведение вычислений, часто длительных и трудоемких, в анализ достоверности и указанной точности численных результатов автор внес определяющий вклад.

Программные комплексы TERM [31], MANYPAR [32], SLIPS2 [34], SYSTEM, SYSTEMQ [4], [36] созданы автором. В создание комплексов SLIP1 [30] и SLIPH4 [33] автором внесен определяющий вклад.

Программные реализации по проблеме мюонного катализа в работах [1]–[5], [15]–[21], [26]–[29], [36]–[42] и по исследованию структуры уровней энергии "экзотической" системы $\bar{p}He^+$ в работах [11], [22]–[24] выполнены с определяющим вкладом автора диссертации.

Все программные реализации прямой и обратной задач квантовой механики в R-матричном подходе с использованием баргмановского формализма в работах [44]–[46], задачи о расчете полей акустических волноводов в работе [6] выполнены автором. В работе [43] исследование устойчивости и точек бифуркации связанных статических состояний флюксонов в круговом джозефсоновском переходе с микронеоднородностью проведено с использованием двух вычислительных схем, одна из которых разработана автором диссертации.

Описанные в Главе 2 программные комплексы SNIDE [35], SYSINT(SYSINTM) и выполненные с их использованием работы по поляронной проблеме [14], [47] и исследованию потенциальных моделей кваркония [8], [9], [48], [49], представленные в Главах 5 и 6 диссертации, выполнены под научным руководством³ и при непосредственном участии автора диссертации. В получение результатов по исследованию релятивистского уравнения Шредингера, представленных в работах [10], [13], [25], автором внесен существенный вклад.

2. ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении описываются цели и задачи исследований, поставленные в диссертации, обосновываются актуальность темы диссертации, научная новизна и значимость работы, ее практическая ценность. Приведен список конференций, семинаров, где была проведена апробация результатов работы. Указан личный вклад автора в выполненные работы, вошедшие в диссертацию. Приводится описание структуры и объема диссертации. Приводится краткое описание содержания диссертации по главам.

Глава 1 "Непрерывный аналог метода Ньютона и его обобщение" посвящена описанию непрерывного аналога метода Ньютона, эффективного для исследования нелинейных математических моделей.

³Земляная Е.В. SYSINT(SYSINTM) – комплекс программ для численного решения задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений. Сообщение ОИЯИ, P11–94–120, Дубна, 1994.// Диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук, Дубна, 1994.

Во Введении (параграф 1.1) описывается класс уравнений, возникающих в математических моделях физических процессов, рассмотренных в диссертации. В общем случае этот класс может быть описан с помощью систем интегро-дифференциальных уравнений вида

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

где t – время эволюционного процесса, $\vec{x} \in \Omega$, Ω – область координатного пространства, $\vec{\rho}$ – вектор параметров модели, A – внешнее поле, V и G – локальный и нелокальный потенциалы взаимодействия, Γ, Θ, Π – 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 решений, а также их возможная неединственность (спектр). Этот класс нелинейных задач описывает эволюцию сложных систем, которая может иметь бифуркационные и критические режимы.

Основным объектом исследований в диссертации являются стационарные задачи ($\Gamma = 0$).

Проблема устойчивости решений системы (1) решается в рассматриваемых моделях специальным образом. 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. Кроме того, к стационарным задачам для уравнения (1) можно отнести системы граничных и спектральных задач из потенциальных моделей КХД, в которых уравнения спектральной задачи определяются через решения граничной задачи.

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).

Перечисленные задачи можно свести к единообразной постановке в виде уравнения

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

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

Исследуемые задачи имеют следующие особенности:

1. Как правило, имеется определенная информация о существовании и качественном поведении искомых решений. Эта информация может быть получена из физических свойств изучаемых процессов или рассмотрения упрощенных моделей, особенно в асимптотических областях изменения параметров.

2. В задачах, представляющих приближения для более сложных многомерных, а также при переходе от бесконечных областей изменения независимых переменных к конечным возникают проблемы оценки точности применяемых аппроксимаций. Во многих случаях подобные оценки можно получить лишь численно, проводя расчеты при некоторых последовательных значениях параметров аппроксимации.

Таким образом, в постановке (2) вектор "внешних" параметров \vec{a} расширяется и помимо "физических" параметров модели содержит также параметры аппроксимации задачи, в том числе и вычислительной схемы. Численное исследование модели обычно сводится к проведению массовых расчетов в широкой области изменения этих параметров, позволяющих одновременно изучать и свойства рассматриваемых моделей, то есть поведение решений в зависимости от "физических" параметров, и точность получаемых результатов в зависимости от параметров аппроксимации исходных задач. Поэтому естественно при организации таких расчетов применить методы продолжения по параметру и итерационные методы, позволяющие в процессе вычислений использовать всю априорную информацию для уточнения результатов.

Среди 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 его непрерывного аналога.

В параграфе 1.2 "Непрерывный аналог метода Ньютона (обзор)" дан краткий обзор работ по теоретическому обоснованию и первым применениям НАМН к решению ряда нелинейных задач физики.

В пункте 1.2.1 показана связь НАМН с известными методами обратных итераций, обратных итераций с фиксированным и рэлеевским сдвигами.

Приведены ньютоновские итерационные схемы с итерационным параметром τ_k .

Исходная нелинейная стационарная задача (2) при фиксированном наборе физических вектор-параметров $\vec{a} \in R_t$ заменяется эволюционной задачей Коши

$$\varphi'(\vec{a}, z(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\varphi(\vec{a}, z(t)), \quad z(0) = z_0. \quad (3)$$

Здесь t ($0 \leq t < \infty$) – непрерывный параметр, от которого зависит траектория $z(t)$, φ' – производная Фреше, z_0 – элемент в окрестности искомого решения $z^* = \{\lambda^*, y^*\}$ уравнения (2). Доказательство сходимости непрерывной траектории $z(t)$ при $t \rightarrow \infty$ к решению z^* при условии непрерывности φ и φ' и существовании ограниченного оператора $(\varphi')^{-1}$ в окрестности z^* основано на существовании интеграла задачи Коши (3) :

$$\varphi(\vec{a}, z(t)) = e^{-t} \varphi(\vec{a}, z_0). \quad (4)$$

Дискретная аппроксимация по параметру t задачи (3) на основе метода Эйлера сводит ее к решению последовательности линейных задач :

$$\varphi'(\vec{a}, z_k) \Delta z_k = -\varphi(\vec{a}, z_k), \quad z_{k+1} = z_k + \tau_k \Delta z_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad 0 < \tau_0 \leq \tau_k \leq 1, \quad (5)$$

причем специальным выбором параметра τ_k оптимизируются скорость и устойчивость сходимости $z_k \rightarrow z^*$ ⁴.

В пункте 1.2.2 приведены оценки точности ньютоновских итерационных схем.

После редукции с помощью метода Л.В. Канторовича исходная многомерная нелинейная стационарная граничная задача

$$\varphi(\vec{a}, z) = 0 \quad (6)$$

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

$$\varphi_N(\vec{a}, N, z_N) = 0. \quad (7)$$

С учетом постановки граничных условий на конечных интервалах, характеризующихся граничными точками γ , она имеет вид

$$\varphi_{N,\gamma}(\vec{a}, N, \gamma, z_{N,\gamma}) = 0. \quad (8)$$

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

$$\varphi_{N,\gamma,h}(\vec{a}, N, \gamma, h, z_{N,\gamma,h}) = 0. \quad (9)$$

Ньютоновский итерационный процесс (5) реализуется для уравнения (9) до выполнения условия

$$\delta_K = \|\varphi_{N,\gamma,h}(\vec{a}, N, \gamma, h, z_{N,\gamma,h,K})\|_h \leq \varepsilon, \quad (10)$$

где K – номер итерации, при котором выполнилось условие (10), $\varepsilon > 0$ – заданное малое число.

Требуется оценить $\|z^* - z_{N,\gamma,h,K}^*\|_h$, где z^* – решение уравнения (6).

Если $z_{N,\gamma,h}^*$ точное решение уравнения (9), то теоретическая оценка при выполнении условия (10) имеет вид

$$\|z_{N,\gamma,h}^* - z_{N,\gamma,h,K}\|_h \leq B\delta_K \leq B\varepsilon. \quad (11)$$

Для точного решения $z_{N,\gamma}^*$ уравнения (8) имеется теоретическая оценка

$$\|z_{N,\gamma}^* - z_{N,\gamma,h}^*\|_h \leq Ch^p, \quad (12)$$

где p – порядок аппроксимации при дискретизации (9).

Тогда выполняется неравенство

$$\|z_{N,\gamma}^* - z_{N,\gamma,h,K}^*\|_h \leq B\varepsilon + Ch^p. \quad (13)$$

При условии $\varepsilon \ll h$ верна оценка

$$\|z_{N,\gamma}^* - z_{N,\gamma,h,K}^*\|_h \sim \tilde{C}h^p. \quad (14)$$

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

⁴Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. Оптимальный шаг и регуляризация метода Ньютона. ЖВМиМФ, 1981, 21, с.491–497. Жанлав Т., Пузынин И.В. О сходимости итераций на основе непрерывного аналога метода Ньютона. ЖВМиМФ, 1992, 32, 6, с.846–856.

погрешностей $\|z_N^* - z_{N,\gamma}^*\|_h$, где z_N^* – решение уравнения (7), и $\|z^* - z_N^*\|_h$ можно косвенно судить, проводя расчеты на последовательностях расширяющихся интервалов $\{\gamma \rightarrow \infty\}$ и для увеличивающегося числа $N \{N \rightarrow \infty\}$ уравнений системы (7).

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 (14) выполняется, можно считать, что параметры аппроксимации N, γ, h определены подходящим образом. Естественно, что такая практическая процедура основана на предположениях о сходимости соответствующих методов аппроксимации исходного уравнения (6) и служит подтверждением этих предположений. Эту процедуру удобно реализовать на основе метода продолжения по параметрам, используя в итерациях уже вычисленные решения для уточнения последующих.

В пункте 1.2.3 описаны пять алгоритмов вычисления параметра τ_k ($0 < \tau_0 \leq \tau_k \leq 1$), минимизирующие невязку и хорошо зарекомендовавшие себя при решении ряда задач.

1. $\tau_k \equiv \tau_0$.

Этот алгоритм при достаточно малом τ_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 δ_k определяется по формуле (10) 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. $\tau_k = \min(1, \tau_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k})$, если $\delta_k < \delta_{k-1}$; $\tau_k = \max(\tau_0, \tau_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k})$, если $\delta_k \geq \delta_{k-1}$,

где δ_k также вычисляется по формуле (10) в сеточном аналоге нормы в C . Этот алгоритм более устойчив и обеспечивает сходимость в достаточно широкой области начальных приближений.

4. $\tau_k = \frac{\delta_{k-1}}{\delta_{k-1} + \delta_k(1)}$,

где $\delta_k(1)$ – невязка на k -той итерации для $\tau_k = 1$. Величина δ_k вычисляется по формуле (10) в сеточном аналоге нормы в L_2 . Это алгоритм оптимального выбора τ_k , предложенный в работе ⁴. Он основан на квадратичной аппроксимации зависимости δ от τ . При итерациях он должен обеспечить минимум невязки на каждом шаге.

5. На равномерной сетке ω_τ отрезка $[0, 1]$ с шагом $\Delta\tau$ вычисляется последовательность невязок δ^i по формуле (10) и выбирается такое значение τ_k , которому соответствует минимальная невязка. Этот алгоритм более общий, чем в пункте 4, но требует большего объема вычислений. Точность нахождения оптимального шага τ_k , обеспечивающего минимум невязки на каждом шаге, зависит от выбора сетки ω_τ .

Эту сетку можно выбрать таким образом, чтобы точность нахождения τ_k и быстродействие алгоритма оптимально сочетались.

Алгоритмы 1,2,3 реализованы в SLIP1, алгоритмы 1–5 реализованы в SLIP4, SLIPS2, SNIDE, SYSINT(SYSINTM). Все они прошли проверку на широком круге задач и использовались при решении представленных в диссертации моделей.

В параграфе 1.3 "Обобщение непрерывного аналога метода Ньютона" представлены разработанные нами и широко использующиеся 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.

В пункте 1.3.1 рассмотрен модифицированный ньютоновский эволюционный процесс (здесь и далее вектор–параметр \vec{a} в формулах опущен, вместо $\vec{\lambda}$ будет λ):

$$\varphi'(\vec{z}(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\varphi(z(t)), \quad z(0) = z_0, \quad (15)$$

где \vec{z} – некоторый фиксированный элемент из окрестности искомого решения z^* . Этот подход дает итерационные схемы типа (5), в которых оператор $\varphi'(\vec{z}(t))$ требуется обратить только один раз. В спектральных задачах, когда неизвестное z состоит из двух компонент λ и Ψ , 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) представимо в виде

$$\varphi(\lambda, \Psi) = \begin{pmatrix} (H - \lambda I)\Psi \\ F(\lambda, \Psi) \end{pmatrix} = 0. \quad (16)$$

Здесь H – оператор в гильбертовом пространстве, а $F(\lambda, \Psi)$ – дополнительный функционал, например:

- a) $\langle \Psi, \Psi \rangle - 1 = 0$ – условие нормировки,
- b) $\langle \Psi, (H - \lambda I)\Psi \rangle = 0$ – условие ортогональности.

Для решения спектральных задач (16) применима итерационная схема (5), которая при фиксированном значении вектор–параметра \vec{a} представляет собой на каждом шаге систему относительно поправки $\Delta z_k = \{\Delta \lambda_k, \Delta \Psi_k\}$:

$$\begin{aligned} (H - \lambda_k I)\Delta \Psi_k &= -(H - \lambda_k I)\Psi_k + \Delta \lambda_k \Psi_k, \\ F'_\lambda(\lambda_k, \Psi_k)\Delta \lambda_k + F'_\Psi(\lambda_k, \Psi_k)\Delta \Psi_k &= -F(\lambda_k, \Psi_k). \end{aligned} \quad (17)$$

Двухкомпонентная структура функции φ и возможность изменения вида функционала F в итерациях позволяют получить широкий набор итерационных процессов с регулируемыми свойствами. В частности, для классической спектральной задачи при фиксированном значении $\lambda_k = \vec{\lambda}$ и $\tau_k = 1$ получается известная схема обратных итераций с фиксированным сдвигом, обеспечивающая сходимость к собственному значению λ^* , ближайшему к $\vec{\lambda}$. Схему (15) целесообразно использовать при

последовательных расчетах элементов ограниченной части спектра оператора H в сочетании с дополнительной ортогонализацией найденного в итерации с номером k приближения Ψ_{k+1} ко всем уже вычисленным собственным элементам Ψ_m^* , где m – номер собственного элемента, и сдвигом от вычисленного собственного значения к следующему после окончания итераций.

Указанная ньютоновская итерационная схема реализована на примере решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля для одного уравнения и для системы двух дифференциальных уравнений второго порядка с граничными условиями, зависящими от спектрального параметра, и дополнительным условием нормировки собственной функции. Созданные на основе этой схемы (вместе с алгоритмами получения начальных приближений к решению, уточнения решения, набором алгоритмов для определения параметра τ_k , с примерами использования) программные комплексы SLIPN4, SLIPS2 подробно описаны в Главе 2 и на сайтах

<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/index.html>

<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/indexe.html> .

Реализована она и в комплексе SNIDE для решения интерпо-дифференциального уравнения. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/snide/index.html>

В пункте 1.3.2 "Модифицированные итерационные схемы с явной зависимостью эволюционного уравнения от дополнительного параметра" представлена параметризация эволюционного уравнения относительно дополнительного параметра t с явной зависимостью φ от t . Следуя идее Д.Ф. Давиденко ⁵, непрерывный параметр $0 \leq t < \infty$ вводится в функцию $\varphi(z) = \varphi(t, z(t))$ так, чтобы при $t = 0$ получалось простое уравнение

$$\varphi(0, z(0)) \equiv \varphi_0(z_0) = 0, \quad (18)$$

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

$$\frac{d}{dt} \varphi(t, z(t)) = -\varphi(t, z(t)). \quad (19)$$

Интеграл этого уравнения аналогично (4) есть $\varphi(t, z(t)) = e^{-t} \varphi_0(z_0)$. Если z_0 – точное решение уравнения (18), мы получаем задачу Коши, определяющую метод Давиденко на полуоси $0 \leq t < \infty$,

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

Если z_0 – приближенное решение уравнения (18), то из уравнения (19), обозначив $A(t, z(t)) = \varphi'_z(t, z(t))$, получаем модифицированную ньютоновскую схему

$$\frac{dz}{dt} = -A(t, z(t))^{-1} [\varphi(t, z(t)) + \varphi'_t(t, z(t))] \quad (20)$$

с начальным условием $z(0) = z_0$. Поскольку интеграл уравнения (19) 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 сходимую $z(t)$ к искомому решению z^* .

⁵ Давиденко Д.Ф. О приложении метода вариации параметра к теории нелинейных функциональных уравнений. Укр. матем. журнал, 1955, 7, 1, с.18.

При аппроксимации уравнения (20) по схеме Эйлера получается последовательность итераций ($z_k = z(t_k)$; $B_k = A(t_k, z_k)^{-1}$)

$$z_{k+1} = z_k + \tau_k V_k, \quad (21)$$

$$V_k = -B_k[\varphi(t_k, z_k) + \varphi'_t(t_k, z_k)]. \quad (22)$$

Вычисляя для каждого значения t_k итерационную поправку V_k и шаг τ_k , получаем новое приближение z_{k+1} к решению z^* . Итерационный процесс (21),(22) должен продолжаться до выполнения неравенства (10).

В пункте 1.3.3 представлен итерационный процесс (21),(22) [7], в котором обращение оператора производной нелинейной функции $\varphi'_z(t, z(t))$ заменяется на каждой итерации на два умножения линейных операторов.

Для этого дополнительно к уравнению(19) вводится операторное уравнение для $B = B(t, z(t)) = A(t, z(t))^{-1}$

$$AB - I = 0, \quad (23)$$

где I —единичный оператор. Для уточнения B можно использовать, аналогично ⁶, итерационные формулы для $B_k = B(t_k, z_k)$

$$B_{k+1} = B_k + \tau_k W_k, \quad (24)$$

$$W_k = -B_k[A_k B_k - I], \quad (25)$$

являющиеся следствием применения НАМН к уравнению (23). Сходимость этого процесса для $\tau_k = 1$ доказана, например, в работе ⁷.

Получается итерационная схема (21),(22),(24),(25) без обращения оператора φ'_z , в которой параметр τ_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 $t = 0$).

Итерационный процесс продолжается до выполнения неравенства (10).

Отсутствие обращения оператора A_k в итерационном процессе (21)–(25) открывает дополнительные возможности для векторизации вычислительного процесса. Обращение производной нелинейной функции в рассматриваемой модификации заменяется перемножениями вспомогательных операторов, что приводит при программной реализации к умножению аппроксимирующих их матриц. При использовании вычислительных систем с последовательным выполнением команд одно обращение матрицы по времени близко ко времени умножения двух матриц ⁸, поэтому время счета по модифицированной схеме (21)–(25) должно быть приблизительно в два раза больше по сравнению с обычной схемой (21),(22). Однако, с точки зрения векторизации операций ⁹ умножение матриц предпочтительнее обращения матрицы, и

⁶Давиденко Д.Ф. Доклады АН СССР, 1960, 131, N.3, с.500.

⁷Ульм С. Об итерационных методах с последовательной аппроксимацией обратного оператора. Изв. АН Эст. ССР. Том XVI, Физика. Математика. 1967, №4, с.403–411.

⁸Калиткин Н.Н. Численные методы. М.:Наука, 1978.

⁹Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.:Мир, 1991.

модифицированный алгоритм (21)–(25) дает выигрыш по времени на векторной вычислительной системе. Но этот выигрыш будет получен за счет увеличения объема памяти, необходимого для хранения дополнительных матриц.

В пункте 1.3.4 для параметризации $\varphi(t, z(t))$ рассматривается известное 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

$$\varphi(t, z(t)) = \varphi_0(z(t)) + g(t)\varphi_1(z(t)). \quad (26)$$

Достоинство рассматриваемого подхода состоит в построении модифицированных итерационных схем, где вместо обращения оператора $\varphi'(z)$ на каждой итерации необходимо обращение производной специально выбранного оператора φ_0 , имеющего простую структуру. Эта схема была использована при создании программного комплекса SNIDE [35] для решения задачи на собственные значения для интегродифференциального уравнения, где $\varphi_0(z(t))$ и $\varphi_1(z(t))$ — дифференциальный и интегральный операторы соответственно.

В заключении к главе указано, что представленные итерационные схемы могут служить основой для разработки их новых модификаций.

В Главе 2 "Описание разработанных комплексов программ" представлены пять программных пакетов:

1. **SLIP1** (Sturme–Liouville Problem for 1 equation) [30] 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 $O(h^2)$.

2. **SLIPH4** (Sturme–Liouville Problem with precision $O(H^4)$) [33] – развитие пакета SLIP1 с трехточечной аппроксимацией задачи $O(h^4)$.

3. **SLIPS2** (Sturme–Liouville Problem for System 2 equations) [34] для решения задачи на собственные значения для системы 2-х дифференциальных уравнений 2-го порядка.

Эти комплексы помещены на сайты

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/slip/index.html>

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/slip/indexe.html>

4. **SNIDE** – для решения задачи на собственные значения для интегродифференциального уравнения [35]

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/snide/index.html>

5. **SYSINT (SYSINTM)**(SYSem of INTtegral equations)

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/sysint/index.html> – для решения задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений.

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

При построении начальных приближений к решению 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.

Комплексы SYSINT и его модификация SYSINTM предназначены для решения задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений. Модификация состоит в реализации итерационного процесса, в котором обращение оператора производной нелинейной функции заменяется на каждой итерации на два умножения линейных операторов. Преимуществом его является отсутствие операции деления на протяжении всех вычислений. Этим исключаются и случаи деления на малое число, возможные при обращении плохо обусловленных матриц. Тем самым повышаются устойчивость и точность вычислений. Тестовые расчеты, проведенные для ряда задач, подтвердили эффективность представленного алгоритма для векторных процессоров. Оба комплекса использовались при численном исследовании задачи Бете–Солпитера в рамках модели кваркония. Модифицированный алгоритм более эффективен при использовании векторных процессоров.

В заключении к главе подчеркивается практическая значимость разработанных программных комплексов.

Глава 3 "Алгоритмическое и программное обеспечение теоретических исследований мезомолекулярных процессов" посвящена изложению алгоритмов на основе непрерывного аналога метода Ньютона и его обобщения при изучении моделей мезокатализа.

Во Введении дается краткое описание идеи мезокатализа¹⁰. В качестве основной модели рассматривается квантово-механическая проблема трех тел, взаимодействующих по закону Кулона. С помощью расчета основных характеристик этой системы вычисляются параметры процессов мезокатализа, таких, как процессы перезарядки мезоатомов, скорости образования мезомолекул и расчет 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 представление¹¹, в основе которого лежит разложение волновой функции $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$ исходного уравнения Шредингера для системы трех тел

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

в шестимерном пространстве (\vec{r}, \vec{R}) (здесь \vec{R} – вектор, соединяющий ядра мезомолекулы a и b (их массы M_a и M_b , $M_a \geq M_b$), \vec{r} – вектор, соединяющий середину отрезка R и μ – мезон (с массой m_μ)) по полному набору решений задачи двух центров

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

¹⁰Пономарев Л.И. Мюонный катализ. Обзор. Москва, Министерство атомной энергетики и промышленности СССР, 1990.

¹¹Виницкий С.И., Пономарев Л.И. Адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. ЭЧАЯ, 1982, 13, с.557.

В результате применения метода Л.В. Канторовича для редукции уравнения в частных производных получена бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon - U_{ii}(R)\right)\chi_i(R) = \sum_{i \neq j} U_{ij}(R)\chi_j(R) + \sum_s \int U_s(R, k)\chi_s(R, k)dk, \quad (27)$$

где M – приведенная масса системы. 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, и от параметров численной аппроксимации.

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 Ψ по набору волновых функций задачи двух центров непрерывного и дискретного спектров. Этот набор и эффективные потенциалы U_{ij} находятся численно. Контроль за точностью вычислений представляет собой на каждом этапе реализации и в комплексе сложную проблему.

В семидесятые годы полученные результаты были первыми. Они нашли косвенное экспериментальное подтверждение при расчетах скоростей образования мезомолекулы $dd\mu$ и инициировали более перспективные для изучения проблемы мезокатализа исследования мезомолекулы $dt\mu$.

В параграфе 3.2 дана постановка задачи трех тел в адиабатическом представлении, которая сводится к бесконечной системе радиальных уравнений Шредингера. С учетом асимптотики искомым волновых функций сформулированы граничные условия для волновых функций дискретного, непрерывного и дискретно-непрерывного (в задаче рассеяния с закрытыми каналами) спектров.

В параграфе 3.3 рассматривается проблема построения базиса для адиабатического представления задачи трех тел. Дана постановка задачи двух центров, приводятся алгоритмы вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектров и матричных элементов по ним. 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).

В параграфе 3.4 описана численная аппроксимация задачи для системы радиальных уравнений (27).

В параграфе 3.5 представлено решение больших систем и экстраполяция результатов по параметрам аппроксимации.

В параграфе 3.6 в двухуровневом адиабатическом приближении выполнено моделирование перехода квазистационарного состояния мезомолекулы $dt\mu$ в связанное состояние при увеличении эффективной массы M . Построены новые эффективные потенциалы двухуровневого приближения, в которых эффективная масса трехчастичной системы рассматривается как параметр, подбором которого можно воспроизвести более точный вариационный уровень энергии. Вычислены волновые функции

слабосвязанного состояния $dt\mu$ -мезомолекулы, имеющие в отличие от вариационных правильную асимптотику. Для решения задачи рассеяния в системе трех кулоновских частиц применено построенное эффективное адиабатическое представление, в котором потенциалы строятся таким образом, чтобы воспроизвести результаты расчетов уровней энергии связанных состояний, полученные вариационным способом. Приведены расчеты задачи непрерывного спектра с использованием этого эффективного представления, согласующиеся со сложными многоуровневыми адиабатическими расчетами других авторов.

В параграфе 3.7 описаны расчеты структуры уровней энергии "экзотической" системы $\bar{p}He^+$ [11], [22]–[24]. При расчете этой структуры в широком диапазоне квантовых чисел использовалась развитая в предыдущем параграфе идея построения эффективных потенциалов простого адиабатического приближения, воспроизводящих известные с большой точностью спектрометрические экспериментальные данные за счет выбора подгоночных параметров. Это приближение позволило экономично выполнить необходимые расчеты.

В заключении к главе перечислены основные полученные результаты.

Глава 4 "Прямые и обратные спектральные задачи и исследование некоторых волновых процессов" содержит описание трех задач из разных разделов теоретической физики, решенных на основе обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона и разработанных модифицированных ньютоновских схем и комплексов программ.

4.1. Численное решение прямой и обратной задач квантовой механики в R-матричном подходе с использованием баргмановского формализма.

При исследовании многих задач квантовой механики приходится решать две группы задач – прямые и обратные. Прямая задача состоит в нахождении энергии и волновой функции как решения уравнения Шредингера при заданном потенциале взаимодействия. Обратная задача – определение самих потенциалов по спектральной функции $\rho(\lambda)$ уравнения Шредингера. В различных подходах к обратной задаче в качестве спектральной функции $\rho(\lambda)$ используются различные экспериментальные данные. Например, в качестве $\rho(\lambda)$ можно использовать фазы рассеяния $\delta(k)$ при $0 \leq k < \infty$, собственные значения E_n и нормировочные константы N_n (можно использовать $S(k)$ - матрицу, $R(k)$ – матрицу и т.д.). С помощью аппарата обратной задачи рассеяния можно, используя точные решения уравнения Шредингера для специальных потенциалов (например, потенциалы баргмановского типа), приближенно восстановить потенциал по экспериментальным данным.

В диссертации представлены результаты работ [44]–[46]. Уравнение Шредингера для задачи трех тел сводится к многоканальной системе связанных одномерных уравнений Шредингера и для восстановления потенциалов задачи трех тел рассматривается точно решаемая многоканальная модель баргмановского типа. Приводятся общие формулы для матриц взаимодействия баргмановского типа и матричные (векторные) решения в рамках R-матричной теории рассеяния. На основе и с использованием комплексов программ SLIP1, SLIP4 и SLIP2, описанных в Главе 2, созданы два комплекса программ для решения прямой V и обратной S задач квантовой механики. Приведены результаты численных экспериментов для одноканальной и двухканальной задач.

4.2. Решение задачи о расчете полей акустических волноводов в океанической модели "жидкого дна".

Для расчетов акустических полей в океаническом волноводе широко используется метод нормальных волн. Число нормальных волн, которое надо учитывать в разложении полного поля при типичных океанических условиях, того же порядка, что и значение частоты в Гц. На частотах десятки–сотни Гц ряд традиционных методов расчета собственных функций и собственных значений краевой задачи в вертикальном сечении, через которые выражаются нормальные волны, не применим. В таком диапазоне частот достаточно эффективны асимптотические методы, однако, дать аккуратную оценку точности расчетов по асимптотическим формулам довольно затруднительно. Кроме того, их реализация в случае некоторых особенностей поведения профиля звука $c(z)$ слишком громоздка.

В работе [6] для расчета нормальных волн использован непрерывный аналог метода Ньютона. К числу его достоинств надо отнести: применимость при достаточно широких предположениях о поведении профиля скорости $c(z)$ в зависимости от глубины; возможность контроля точности вычислений; естественность пересчета по трассе с медленно меняющимися параметрами; достаточное быстродействие.

В качестве модели океана выбрана модель вертикально–стратифицированного водного слоя, лежащего на жидком однородном полупространстве. Алгоритм расчета может быть, однако, без больших затруднений перенесен и на случай более сложных моделей. В выбранной модели поле от монохроматического точечного источника представляется в виде следующего ряда нормальных волн:

$$U(r) = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{8\pi pr}} \sum_{m=1}^N \frac{\exp(ip\mu_m r)}{\sqrt{\mu_m}} \frac{\Psi_m(z_0)\Psi_m(z_1)}{N_m^2}. \quad (28)$$

Здесь Ψ_m – собственные функции, μ_m^2 – собственные значения задачи Штурма–Лиувилля

$$\Psi''(z) + p^2(n^2(z) - \mu^2)\Psi(z) = 0, \quad (29)$$

$$\Psi(0) = 0, \quad (30)$$

$$\Psi'(H) + \frac{p}{\alpha} \sqrt{\mu^2 - n_H^2} \Psi(H) = 0, \quad (31)$$

N_m^2 – нормировочный интеграл

$$N_m^2 = \int_0^H \Psi_m^2(z) dz + \frac{\Psi_m^2(H)}{2p\sqrt{\mu_m^2 - n_H^2}}, \quad (32)$$

z_0 – глубина источника, z_1 – глубина приемника, H – глубина океана, r – расстояние между источником и приемником по горизонтали, $n(z)$ – показатель преломления ($n(z) = c^*/c(z)$, $c(z)$ – скорость распространения звука в воде, $c^* = \min c(z)$), n_H – показатель преломления в дне, $n_H = c^*/c_H$, $p = \omega/c^*$, $\omega = 2\pi\nu$, ν – частота источника, α – отношение плотности дна к плотности воды. Считается, что разложение (28) включает в себя только незатухающие нормальные волны, а вкладом боковой волны и затухающих нормальных волн можно пренебречь. Это оправдано в условиях глубокого океана и достаточного разнесения источника и приемника. С помощью созданного пакета WAVE, использующего программы MANYPAR [32] и SLIPN4,

проведены расчеты зависимости решения задачи (29)–(31) и суммарного поля (28) от способа аппроксимации скорости распространения звука в воде $c(z)$ для любых расстояний между источником и приемником, а также на любых глубинах их расположения. При этих расчетах очень эффективно использовалась итерационная схема с фиксированным сдвигом, подробно описанная в Главе 2 при описании комплекса SLIPH4 и его параметров (MOD=2). Все предыдущие расчеты, полученные другими авторами, использовали разные подходы и методы, применимые лишь для частных случаев аппроксимации $c(z)$.

4.3. Исследование устойчивости и точек бифуркации связанных статических состояний флюксонов в круговом джозефсоновском переходе с микронеоднородностью.

В этом параграфе рассматривается статическая математическая модель джозефсоновского перехода в форме круга радиуса R с кольцевой микронеоднородностью

$$j = [1 - \mu\delta(r - r_0)]\sin\varphi(r, \theta), \quad 0 < r_0 < R. \quad (33)$$

Здесь j – джозефсоновский ток, φ – распределение разности фаз волновых функций сверхпроводящих электронов в верхнем и нижнем сверхпроводниках перехода, определяемое уравнением

$$\Delta\varphi = j, \quad (34)$$

$\delta(r - r_0)$ – дельта-функция Дирака, μ, r_0, R – физические параметры. За единицу длины принята джозефсоновская глубина проникновения λ_J . Исследуется радиально-симметричный случай, для которого уравнение (34) имеет вид

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)\varphi(r) - [1 - \mu\delta(r - r_0)]\sin\varphi(r) = 0. \quad (35)$$

Граничные условия

$$\left.\frac{d\varphi(r)}{dr}\right|_{r=0, r=R} = 0 \quad (36)$$

отвечают требованиям регулярности магнитного поля в точке $r = 0$ и отсутствия магнитного поля на границе круга. Граничную задачу (35)–(36) можно получить из условия обращения в нуль первой вариации функционала энергии $\delta E = 0$, где

$$E[\varphi] = 2\pi \int_0^R r dr \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{d}{dr}\varphi(r) \right]^2 + [1 - \mu\delta(r - r_0)][1 - \cos\varphi(r)] \right\}. \quad (37)$$

Первое слагаемое в выражении (37) пропорционально энергии магнитного поля в переходе, второе – энергии джозефсоновских токов. Состояния $\varphi(r)$, определенные из условия $\delta E[\varphi] = 0$, устойчивы относительно малых флуктуаций, если $\delta^2 E[\varphi] > 0$. Последнее условие сводится к требованию положительности собственных значений λ в линейной граничной задаче

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + \lambda - [1 - \mu\delta(r - r_0)]\cos\varphi(r) \right\} \eta(r) = 0, \quad (38)$$

$$\left.\frac{d}{dr}\eta(r)\right|_{r=0, r=R} = 0. \quad (39)$$

Изложенный подход эквивалентен исследованию устойчивости решений нестационарного уравнения

$$\begin{aligned}\Psi_{tt} &= \Delta\Psi - [1 - \mu\delta(r - r_0)]\sin\Psi, \\ \Psi &= \Psi(r, \theta, t), \quad 0 < r < R, \quad 0 < \theta < 2\pi, \quad 0 \leq t < \infty, \\ \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r},\end{aligned}\quad (40)$$

представимых в виде

$$\Psi = \varphi(r) + \xi(r, \theta)e^{-i\omega t}. \quad (41)$$

Здесь $\varphi(r)$ – решение граничной задачи (35)–(36), а $\xi(r, \theta)$ – малая амплитуда возмущения,

$$\|\xi\| \ll \|\varphi\|, \quad \frac{\partial}{\partial r}\xi(r, \theta)|_{r=0, r=R} = 0, \quad \xi(r, \theta) = \xi(r, \theta + 2\pi).$$

В линейном приближении анализ устойчивости решения (41) относительно возмущений $\xi(r, \theta)e^{-i\omega t}$ сводится путем разделения переменных в линеаризованном относительно $\xi(r, \theta)$ уравнении (40) к рассмотрению спектра задачи на собственные значения (38)–(39), где $\lambda = \omega^2$.

Для приложений наиболее интересны устойчивые состояния и точки (поверхности) бифуркаций, в которых при медленном изменении параметров система может скачком перебрасываться из одного устойчивого состояния в другое или же переходить в нестационарный режим.

Приводятся вычислительные схемы, численный анализ их точности, а также результаты численного решения задачи (35)–(36) и определения минимального собственного значения λ задачи (38)–(39) в физически интересной области значений внешних параметров (r, R_0, μ) модели. Согласно изложенному выше, $\lambda > 0$ соответствует устойчивому состоянию $\varphi(r)$, $\lambda < 0$ – неустойчивому, а $\lambda = 0$ – точке бифуркации.

В заключении к главе перечислены основные полученные результаты.

Глава 5 “Численное исследование уравнения полярона в рамках модели Латтинжера–Лу” посвящена описанию поведения полярона (электрона в поле, создаваемом его взаимодействием со средой).

В настоящее время проблема электронного переноса возбуждений в самых разных конденсированных средах (растворы, биомакромолекулы, органические поляронные состояния) приобретает большое значение. Общим в различных физических задачах, приводящих к уравнениям полярона, является необходимость решения самосогласованной спектральной задачи. В диссертации рассматривается модель, развитая в работе Латтинжера и Лу¹².

В параграфе 5.2 описывается обобщенная поляронная модель Латтинжера–Лу. С математической точки зрения эта задача сводится к решению задачи на собственные значения для нелинейного интегро-дифференциального уравнения в трехмерном координатном пространстве

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \nabla^2 - \frac{\alpha\sqrt{2}}{\mu} \int d\vec{r}' \frac{|u(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} (1 - e^{-C|\vec{r} - \vec{r}'|}) \right] u(\vec{r}) = \epsilon u(\vec{r}), \quad (42)$$

¹²Luttinger J.M., Lu C.Y. Phys.Rev. B, 1980, V.21, 10, p.425-426.

в которой $\{\epsilon_n, u(\vec{r})\}$ – уровни энергии и волновые функции полярона, ∇^2 – трехмерный оператор Лапласа, $\mu = m/(1+m)$ – приведенная масса электрона, α – константа связи, $C = \mu\sqrt{2}/\sqrt{1-\mu}$. Условие нормировки имеет вид:

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

В пункте 5.2.1 дана постановка задачи для сферически симметричного случая в виде спектральной задачи для системы дифференциальных уравнений [47]:

$$\begin{aligned} \psi''(x) - \lambda\psi(x) + A\psi(x)\frac{V_2 - V_1}{x} &= 0, \\ V_1'' + \frac{\psi^2}{x} &= 0, \\ V_2'' + CV_2 + \frac{\psi^2}{x} &= 0, \end{aligned} \quad (43)$$

где $\psi(x) = xu(x)$, $x = r$,
с условием нормировки

$$\int_0^\infty \psi^2(x) dx = \frac{1}{4\pi}. \quad (44)$$

Решения должны удовлетворять асимптотическим условиям

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

В пункте 5.2.2 формулируется постановка задачи для сферически несимметричного случая.

В этом случае задача (42) сформулирована как нелинейная задача на собственные значения для системы уравнений [14]:

$$\begin{aligned} \Delta\psi(\vec{r}) - \lambda\psi(\vec{r}) + A(V_1(\vec{r}) - V_2(\vec{r}))\psi(\vec{r}) &= 0 \\ \Delta V_1(\vec{r}) + |\psi(\vec{r})|^2 &= 0 \\ \Delta V_2(\vec{r}) - C^2V_2(\vec{r}) + |\psi(\vec{r})|^2 &= 0 \end{aligned} \quad (45)$$

с условием нормировки

$$\int_0^\infty |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1, \quad (46)$$

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

Используя представление решения системы (45) в виде разложения по сферическим функциям $Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{\psi_{lm}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad V_i(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{V_{ilm}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad i = 1, 2 \quad (47)$$

и подставив его в систему (45), после ряда преобразований получим следующую систему уравнений для коэффициентов разложения $\psi_{lm}(r)$ и $V_{ilm}(r)$:

$$\begin{aligned} \psi_{lm}''(r) - \lambda\psi_{lm}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\psi_{lm}(r) + \frac{A}{r} \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-i_1}^{i_1} Q_{lm_1m_1}(r)\psi_{li_1m_1}(r) &= 0, \\ V_{1lm}''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}V_{1lm}(r) + S_{lm}(r) &= 0, \end{aligned} \quad (48)$$

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

с условием нормировки

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \int_0^{\infty} \psi_{lm}^2(r) dr = 1, \quad (49)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{lm_1m_1} &= \sum_{l_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} W_{lm_1m_1l_2m_2} (V_{1l_2m_2}(r) - V_{2l_2m_2}(r)), \\ S_{lm} &= \frac{1}{r} \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-i_1}^{i_1} \sum_{l_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \bar{W}_{lm_1m_1l_2m_2} \psi_{li_1m_1}(r) \psi_{l_2m_2}(r), \\ W_{lm_1m_1l_2m_2} &= \int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l_1m_1} Y_{l_2m_2}, \quad \bar{W}_{lm_1m_1l_2m_2} = \int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l_1m_1} Y_{l_2m_2}^*. \end{aligned} \quad (50)$$

Искомые решения системы (48) удовлетворяют асимптотическим условиям:

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(r)_{r \rightarrow 0} &\rightarrow A_{1lm} r^{l+1}, & \psi_{lm}(r)_{r \rightarrow \infty} &\rightarrow A_{2lm} e^{-\sqrt{\lambda}r}, \\ V_{1lm}(r)_{r \rightarrow 0} &\rightarrow B_{1lm} r^{l+1}, & V_{1lm}(r)_{r \rightarrow \infty} &\rightarrow B_{2lm} r^{-l}, \\ V_{2lm}(r)_{r \rightarrow 0} &\rightarrow C_{1lm} r^{l+1}, & V_{2lm}(r)_{r \rightarrow \infty} &\rightarrow C_{2lm} r^{-Cr}, \end{aligned} \quad (51)$$

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

В параграфе 5.3 описывается итерационный процесс на основе НАМН с использованием программного комплекса SNIDE для численного решения уравнения полярона в указанных в пунктах 5.2.1 и 5.2.2 постановках.

В параграфе 5.4 обсуждаются численные результаты.

Полученные решения $\psi = \{\psi_l, l = 0, 1, \dots, 5\}$ (l — количество нулей функции) могут быть разделены на несколько групп:

1. сферически симметричные решения, в которых только функции ψ_0 не равны нулю,
2. ненулевыми являются функции ψ_l для четных значений l ($l = 0, 2, 4$),
3. ненулевыми являются функции ψ_l для нечетных значений l ($l = 1, 3, 5$).

В *Заключении* показано, что полученные решения в сферически симметричном случае согласуются с имеющимися численными результатами работы ¹³. Для сферически несимметричного случая классификация полученных решений согласуется с результатами работы ¹⁴ для модели Пекара.

¹³ Амирханов И.В., Лахно В.Д., Пузынин И.В., Стриж Т.А., Федянин В.К. Численное исследование нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения в обобщенной модели полярона. Препринт НЦБИ АН СССР, Пушкино, 1988.

¹⁴ Gabboulline R.R. A low-dimensional approximation of solutions to the polaron equation. Препринт НЦБИ АН СССР, Пушкино, 1991.

В Главе 6 "Численное исследование уравнений Швингера-Дайсона и Бете-Солпитера в рамках модели кваркония" описывается динамика кварков и их связанных состояний с помощью решений уравнений Швингера-Дайсона (Ш-Д) для массовой функции кварков и Бете-Солпитера (Б-С) для связанных состояний кварков. (Кварконий – мезон, состоящий из тяжелого кварка и его антикварка. Кварки –элементарные составляющие всех адронов – мезонов и барионов.)

Представлено разработанное алгоритмическое и программное обеспечение для численного исследования этой модели и полученные численные решения краевых задач для указанной системы уравнений с некоторыми видами феноменологических потенциалов. Рассмотрены различные схемы модификаций ("перенормировок") уравнения Швингера-Дайсона. При этом задача исследования состоит в определении параметров задачи и схемы перенормировки, при которых удастся описать наилучшим способом известные экспериментальные данные (в данном случае это спектры масс $M_\pi \sim 137$ и константы лептонных распадов $F_\pi \sim 132$ пиона).

Явный вид этих уравнений зависит от физической постановки задачи. Как правило, эти уравнения являются нелинейными дифференциальными, интегральными или интегро-дифференциальными уравнениями.

В параграфе 6.2 показано, что уравнение Ш-Д для заданного потенциала $V(|\vec{p}-\vec{q}|)$ может быть сведено к следующей системе интегральных уравнений:

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

где интегрирование ведется в трехмерном пространстве координат вектора \vec{q} , $\xi = (\vec{p}/p, \vec{q}/q)$ – скалярное произведение единичных трехмерных векторов, m_0 – заданная константа (масса кварка), $E(p)$ и $v(p)$ – соответственно энергия и волновая функция кварка, которые надо найти.

После интегрирования по углам вектора \vec{q} эта система принимает вид

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

где

$$I_1 = \int dq V_1(p, q) \cos(2v(q)), \quad (52)$$

$$I_2 = \int dq V_2(p, q) \sin(2v(q)), \quad (53)$$

$$V_1 = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} q^2 \int d\Omega V(|\vec{p}-\vec{q}|), \quad (54)$$

$$V_2 = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} q^2 \int d\Omega \xi V(|\vec{p}-\vec{q}|). \quad (55)$$

Энергия кварка $E(p)$ и массовая функция кварка $m(p) = E(p) \cos(2v(p))$ должны удовлетворять, исходя из физических соображений, следующим асимптотическим условиям:

$$\lim_{p \rightarrow 0} E(p) = Const, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} E(p) = p, \quad \lim_{p \rightarrow 0} m(p) = Const, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} m(p) = m_0, \quad (56)$$

что эквивалентно требованиям

$$\lim_{p \rightarrow 0} I_1 = Const < \infty, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} I_1 = 0, \quad \lim_{p \rightarrow 0} I_2 = Const < \infty, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} I_2 = 0. \quad (57)$$

При более сильном условии

$$\lim_{p \rightarrow 0} I_2 = 0 \quad (58)$$

асимптотическое поведение функции $v(p)$ имеет вид:

$$\lim_{p \rightarrow 0} v(p) = 0, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} v(p) = \pi/4. \quad (59)$$

Требования (57)–(59) накладывают определенные ограничения на класс допустимых потенциалов, т.к. только при их выполнении можно надеяться на существование решений, имеющих физический смысл. Для расширения класса допустимых потенциалов ряд авторов предлагает производить переход к перенормированной системе, который может осуществляться разными способами.

В пункте 6.2.1 описана потенциальная модель КХД для потенциала Гаусса:

$$V = v_0 \exp(-\mu^2 r^2) + C, \quad (60)$$

где C – постоянный член. В импульсном представлении указанный потенциал имеет следующий вид:

$$V(|\vec{p} - \vec{q}|) = \frac{v_0}{(\sqrt{\pi})^3} R^3 \exp(-R^2 |\vec{p} - \vec{q}|^2) + C(2\pi)^3 \delta(|\vec{p} - \vec{q}|), \quad R = \mu/2. \quad (61)$$

В диссертации исследуются варианты перенормированных систем, обеспечивающие выполнение асимптотических условий (57)–(59) для разных $I_2^{(k)}$, $k = 1, 2, 3$, где

$$I_2^{(1)} = \int dq V_2(p, q) (\sin(2v(q)) - q/E(q)), \quad I_2^{(2)} = 0, \quad (62)$$

$$I_2^{(3)} = \int dq V_2(p, q) (\sin(2v(q)) - q/E_0(q)), \quad E_0(p) = \sqrt{m_0^2 + p^2}.$$

В пункте 6.2.2 дается постановка задачи Б–С с потенциалом Гаусса. Рассматривается уравнение Б–С для псевдоскалярных мезонов, состоящих из кварков с разными массами¹⁵:

$$ML_{(\frac{1}{2})}(\vec{p}) = E_i(p)L_{(\frac{1}{2})}(\vec{p}) - \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} V(|\vec{p} - \vec{q}|) [C_p^{(\mp)} C_q^{(\mp)} + \xi S_p^{(\mp)} S_q^{(\mp)}] L_{(\frac{1}{2})}(\vec{q}), \quad (63)$$

где

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

v_1, v_2 и E_1, E_2 – решения уравнения Ш–Д для кварка и антикварка, $E_i(p) = E_1(p) + E_2(p)$ – полная энергия мезона, M – собственное значение (масса связанного состояния), $L_{(\frac{1}{2})}$ – волновые функции. Условие нормировки имеет вид:

$$\frac{4N_C}{M} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} L_1(\vec{q}) L_2(\vec{q}) = 1, \quad (64)$$

¹⁵ Амирханов И.В., Жураев О.М., Каллис В., Первушин В.Н., Пузынин И.В., Сариков Н.А., Стриж Т.А. Кварковый в КХД с растущим потенциалом. Сообщение ОИЯИ Р11–88–506, Дубна, 1988.

где $N_C = 3$ – квантовое число. Зная волновые функции v_1 и v_2 уравнения Ш–Д и используя полученные решения системы (63), можно вычислить константы лептонных распадов псевдоскалярных мезонов

$$F_\pi = \frac{4N_C}{M} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} L_2(\vec{q}) \cos(v_1(q) + v_2(q))q. \quad (65)$$

Для модификаций, приведенных в п.6.2.1, ставилась задача найти такие значения параметров, при которых для основных состояний уравнения Б–С выполняется условие $M_\pi/F_\pi \sim 1.04$, соответствующее экспериментальным данным для пиона. При этом массы U и D –кварков должны быть в пределах теоретических оценок $m_0 = 2 \div 10$.

Решения системы (63) ищутся в виде

$$L_{(2)}(\vec{p}) = \frac{1}{p} \sum_{l,m} U_{(2)lm}(p) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (66)$$

где $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – сферические функции.

Подставляя разложения (66) в формулы (63),(64) при $l, m = 0$, для потенциала Гаусса (61) при $C = 0$, обозначив $U_{(2)00} = U_{(2)}$, получим:

$$MU_{(2)}(p) = E_t(p)U_{(2)}(p) - \quad (67)$$

$$-2 \int_0^\infty dq [C_p^{(+)} C_q^{(-)} \hat{V}_1(p, q) + S_p^{(+)} S_q^{(-)} \hat{V}_2(p, q)] U_{(2)}(q),$$

$$\frac{4N_C}{M} \frac{1}{(2\pi)^3} \int dq U_1(q) U_2(q) = 1, \quad (68)$$

с асимптотическими условиями на решения

$$\lim_{p \rightarrow 0} U_{(2)}(p) = 0, \quad \lim_{p \rightarrow \infty} U_{(2)}(p) = 0.$$

Здесь

$$\hat{V}_1(p, q) = \frac{p}{q} V_1(p, q), \quad \hat{V}_2(p, q) = \frac{p}{q} V_2(p, q). \quad (69)$$

Формула (65) примет вид:

$$F_\pi = \frac{4N_C}{M} \frac{1}{(2\pi)^3} \sqrt{4\pi} \int dq U_2(q) \cos(v_1(q) + v_2(q))q. \quad (70)$$

Таким образом, мы получили задачу на собственные значения для системы двух интегральных уравнений (67) с условием нормировки (68). Еще раз отметим, что в формулы, определяющие задачу Б–С, входят решения (v_1, E_1) и (v_2, E_2) системы Ш–Д для двух масс кварков m_{01} и m_{02} .

В параграфе 6.3 представлена общая схема численного исследования модели и методы численного решения уравнений Швингера–Дайсона и Бете–Солпитера с использованием подхода, определяемого НАМН. В частности, для решения одного вида перенормированной системы (62) применялся модифицированный алгоритм [7] без обращения линейного оператора. При этом постановка задачи путем простых

преобразований формулировалась в виде нелинейного интегрального уравнения для определения массовой функции кварка

$$m(p) = E(p) \cos(2v(p)).$$

Система Б-С (67) представляет собой задачу на собственные значения для двух линейных интегральных уравнений с условием нормировки (68).

Численное решение задачи (67)–(68) осуществлялось с использованием программного комплекса SYSINT (SYSINTM), описание которого дано в Главе 2.

В параграфе 6.4 представлены результаты исследования модели с потенциалом Гаусса для различных схем "перенормировки" волновой функции кварка.

В параграфе 6.5 представлены результаты исследования той же модели с потенциалом Юкавы [49], с комбинацией гауссовского и осцилляторного потенциалов [48], с кулоновским и линейным потенциалами [9].

В параграфе 6.6 "Численное исследование одного релятивистского уравнения на связанные состояния" представлены работы по численному исследованию некоторых проблем на собственные значения в импульсном представлении [10].

В пунктах 6.6.2 и 6.6.3 представлены результаты исследования релятивистского уравнения Шредингера для кулоновского и линейного потенциалов [13], [25]. Численный анализ ряда релятивистских потенциальных моделей сводится к решению задач на собственные значения для интегральных уравнений в импульсном пространстве. Одна из трудностей исследования таких задач связана с тем, что в качестве эффективного потенциала в указанных моделях, по аналогии с нерелятивистским подходом, обычно используется комбинация кулоновского V_C и линейно растущего V_L потенциалов

$$V_C(|\vec{p} - \vec{q}|) = +\alpha \frac{4\pi}{|\vec{p} - \vec{q}|^2}, \quad \alpha < 0, \quad (71)$$

$$V_L(|\vec{p} - \vec{q}|) = -\sigma \frac{8\pi}{|\vec{p} - \vec{q}|^4}, \quad \sigma > 0, \quad (72)$$

что приводит к расходимостям в ядрах интегральных уравнений при $\vec{p} = \vec{q}$ и $\vec{p} \rightarrow \infty$. В ряде работ расходимость интегралов устраняется за счет дополнительно введенных в исходные уравнения контрчленов (т.н. перенормировка). Другой подход предполагает модификацию эффективного потенциала на уровне координатного представления путем его аппроксимации некоторыми элементарными функциями. Исследование свойств ряда таких аппроксимирующих потенциалов проведено в работе [10].

В настоящей работе исследуется обобщение разработанных в [9] и [10] приемов на случай т.н. запаздывающего взаимодействия. При этом потенциалы (71) и (72) принимают, соответственно, вид

$$V_C(|\vec{p} - \vec{q}|) = +\alpha \frac{4\pi}{|\vec{p} - \vec{q}|^2 - (E_p - E_q)^2}, \quad (73)$$

$$V_L(|\vec{p} - \vec{q}|) = -\sigma \frac{8\pi}{(|\vec{p} - \vec{q}|^2 - (E_p - E_q)^2)^2}, \quad (74)$$

где $E_p = \sqrt{p^2 + m^2}$, $E_q = \sqrt{q^2 + m^2}$, m – масса (параметр модели).

Переход от потенциалов (71),(72) к (73),(74) означает на уровне координатного представления переход к нелокальному взаимодействию, т.е. исходные дифференциальные уравнения в координатном пространстве становятся интегро-дифференциальными, что сильно усложняет интуитивное представление о свойствах спектральной задачи с такими потенциалами.

В качестве примера рассматривается релятивистское уравнение

$$[Q(p) - E_{nl}^{(\beta)}]\phi_{nl}^{(\beta)}(p) + \int_0^{\infty} dq V_l^{(\beta)}(p, q)\phi_{nl}^{(\beta)}(q) = 0, \quad (75)$$

где

$$Q(p) = 2(E_p - m), \quad (76)$$

$$V_l^{(\beta)}(p, q) = \int_{-1}^{+1} dx V^{(\beta)}(p, q, x) P_l(x), \quad (77)$$

с условием нормировки

$$\int_0^{\infty} (\phi_{nl}^{(\beta)}(p))^2 dp = 1. \quad (78)$$

Здесь $n = 0, 1, 2, \dots$ – число нулей собственной функции, $l = 0, 1, 2, \dots$; m – параметр, P_l – полиномы Лежандра, $\beta = 1, 2, 3, 4$ соответствует четырем указанным выше типам взаимодействия (71),(72),(73),(74).

Отметим, что целый ряд релятивистских обобщений уравнения Шредингера отличается от задачи (75),(76) только видом функции $Q(p)$.

Нерелятивистский случай, используемый для сравнения и тестирования, соответствует функции

$$Q(p) = \frac{p^2}{m} \quad (79)$$

в задаче (75),(77),(78).

Представлены постановка задачи и методы численного анализа уравнения (75) с кулоновским и линейным потенциалами.

В пункте 6.6.4 проведен анализ динамики спектра в зависимости от параметров. Численные результаты подтверждают теоретические оценки влияния релятивистских эффектов и эффектов запаздывания взаимодействия на изменение спектра.

В *Заключении* к главе 6 сформулированы полученные результаты.

В Заключении к диссертации сформулированы все основные результаты, полученные в диссертации.

3. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. На основе обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона разработаны итерационные схемы с параметром, минимизирующим невязку уравнения:

1.1. Схема с фиксированным сдвигом и дополнительной ортогонализацией собственных элементов для решения спектральных задач.

1.2. Модифицированная итерационная схема на основе дополнительной параметризации исходного уравнения, объединяющей метод вариации параметра и НАМН.

1.3. Итерационная схема с дополнительной параметризацией исходного уравнения с одновременным уточнением обратного оператора в линейном уравнении для итерационной поправки, не требующая его обращения.

2. Разработаны проблемно-ориентированные программные комплексы, реализующие концепцию объединения ньютоновских итерационных схем и метода продолжения по параметрам для уточнения решений и изучения параметрической зависимости решений:

2.1. SLIP1 (Sturme-Liouville Problem for 1 equation)

2.2. SLIPH4 (Sturme-Liouville Problem with precision $O(H^4)$)

2.3. SLIPS2 (Sturme-Liouville Problem for System 2 equations)

Эти комплексы имеют два адреса в библиотеке программ ОИЯИ:

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/slip/index.html>

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/slip/indexe.html>

2.4. SNIDE (Integro-Differential Equation)

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/snide/index.html>

2.5. SYSINT (SYSINTM) (SYSTEM of INTtegral equations)

<http://www.jinr.ru/programs/jinr/lib/sysint/index.html>

3. С помощью разработанных вычислительных схем и комплексов программ проведено численное исследование математических моделей физики и модернизация методов их исследования.

3.1. Разработано алгоритмическое и программное обеспечение расчета уровней энергии слабосвязанных возбужденных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в адиабатическом представлении задачи трех тел, важных для обоснования модели резонансного образования этих мезомолекул.

3.2. Разработано новое, усовершенствованное двухуровневое адиабатическое представление мюонной трехчастичной задачи путем построения эффективных потенциалов простого двухуровневого приближения, воспроизводящего известные с высокой точностью уровни энергии мюонной трехчастичной системы подбором параметра, обобщающего эффективную массу.

3.3. На основе усовершенствованного двухуровневого адиабатического представления выполнен расчет сечений и волновых функций задачи рассеяния мезоатомов на ядрах дейтерия и трития, более экономичный и согласующийся по точности с многоуровневыми расчетами других авторов. Выполнен расчет

волновых функций слабосвязанного состояния $dt\mu$ -молекулы, который в отличие от вариационного расчета обеспечивает их правильное асимптотическое поведение.

3.4. Выполнен расчет схемы уровней энергии антипротонной молекулы гелия для широкого набора квантовых чисел с использованием идеи построения эффективных потенциалов адиабатического приближения, воспроизводящих известные спектрометрические экспериментальные данные с помощью подбора подгоночных параметров.

3.5. Проведены расчеты акустических полей в океаническом волноводе в модели "жидкого дна", продемонстрировавшие достоинства разработанных алгоритмов (широкие предположения о поведении профиля скорости звука, контроль точности вычислений, достаточное быстродействие, естественность пересчета по трассе с непрерывно меняющимися параметрами) и возможность применимости в более сложных моделях.

3.6. Реализовано моделирование бифуркационных режимов в круговом джозефсоновском контакте, что послужило основой для развития новых итерационных схем для исследования устойчивости стационарных режимов в джозефсоновских контактах других конфигураций.

3.7. Для модели Латтинжера-Лу впервые получены сферически несимметричные решения уравнения полярона с использованием их разложений по сферическим функциям.

3.8. В рамках потенциальной модели кваркония с потенциалом Гаусса впервые получены параметры для описания массовой функции кварка, энергии и константы лептонного распада основного состояния пиона. Проведены исследования модели с кулоновским и линейным потенциалами, с комбинацией гауссовского и осциляторного потенциалов, с потенциалом Юкавы. В рамках этой модели получены результаты, ценные для решения проблем перенормировки и устранения расходимости в потенциальных моделях КХД.

3.9. Проведены численные исследования релятивистского уравнения Шредингера для кулоновского и линейного потенциалов. Сделан анализ динамики спектра в зависимости от параметров. Численные результаты подтверждают теоретические оценки влияния релятивистских эффектов и эффектов запаздывания взаимодействия на изменение спектра.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. Задача двух центров квантовой механики. Математическая часть. ЖВМ и МФ, т.8, вып.6, 1968, стр.1256–1268.
2. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Вычисление уровней энергии мезомолекул водорода с учетом адиабатических поправок на движение ядер. ЖЭТФ, 1973, т.65, вып.1(7), стр.28–34.
3. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Файфман М.П. Резонансное образование μ -мезомолекул водорода. ЖЭТФ, 1978, т.74, вып.3, стр.849–861.
4. Виноцкий 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. Ядерная Физика, 1992, 55, 12, стр.3271–3277.
5. Puzynin I.V., Puzynina T.P., Smirnov Yu.S., Vinitsky S.I. New Effective Mass in Adiabatic Approach for the Muonic Three-Body Problem. Ядерная Физика, 1993, 56, 7, стр.82–88. In Proceed. Intern. Conf. Programming and Mathematical Methods for Solving Physical Problems. P&MM'93, Dubna, 1993, p.234.
6. Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Славянов С.Ю. Применение непрерывного аналога метода Ньютона для расчета волнового распространения звука в океане. Акустический журнал, 31, 6, 1985, стр.787–790.
7. Puzynin I.V., Amirkhanov I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V. The Newtonian Iterative Scheme with Simultaneous Calculating the Inverse Operator for the Derivative of Nonlinear Function. JINR Rapid Comm., No.5[62]–93, Dubna, 1993, p.63–73. In Proceed. Intern. Conf. P&MM'93, Dubna, 1993, p.30–34.
8. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Первушин В.Н., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сариков Н.А., Стриж Т.А. Численное исследование уравнений Швингера-Дайсона и Бете-Солпитера с потенциалом Гаусса в рамках модели кваркония. Мат. моделирование, 1994, 6, 7, стр.55–70.
9. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. О некоторых проблемах численного исследования модели кваркония с кулоновским и линейным потенциалами. Мат. Моделир., 1995, 7, 7, стр.34–48.
10. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. О некоторых проблемах численного исследования задач на собственные значения в импульсном представлении. Мат. моделирование, 1997, 9, 10, стр.111–119.
11. Mardoyan L.G., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Tyukhtyaev A.Yu., Vinitsky S.I. Nonadiabatic Coupling in the pHe^+ System. Ядерная физика, 1998, 61, 11, стр.1–7.

12. Пузынин И.В., Амирханов И.В., Земляная Е.В., Первушин В.Н., Пузынина Т.П., Стриж Т.А., Лакно В.Д. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых квантово-полевых моделей. ЭЧАЯ, 1999, т.30, вып.1, стр.210–265. Phys. of Particles and Nuclei, Vol.30, No.1, 1999, p.87–110.
13. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. Релятивистские уравнения для связанных состояний с кулоновским и линейным потенциалами. Мат. моделирование, 2000, 12, 12, стр.79–96.
14. Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V. Iteration Method for Solving the Spherical Non-Symmetrical Polaron Equation (the Luttinger-Lu model). "Polaron and Applications", Ed.V.D.Lakhno, John Wiley&Sons, Chichester, New-York, Brisbane, Toronto, Singapore, 1994, p.445–452.
15. 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. Comput. Phys., Vol.13, No.1, 1973, p.1–14.
16. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. Continuous Analog of Newton's Method for the Calculation of Quasibound States of Hydrogen μ -mesic Molecules. J. Comput. Phys., Vol.22, No.1, 1976, p.125–130.
17. 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: Atom. Mol. Phys., Vol.10, No.4, 1977, p.1335–1345.
18. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Somov L.N. The Scattering Problem in Quantum Mechanics as an Eigenvalue Problem. Annals of Physics, Vol.110, No.2, 1978, p.274–286.
19. Melezhik V.S., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Somov L.N. Numerical Solution of a System of Integro-Differential Equations Arising From the Quantum Mechanical Three-Body Problem with Coulomb Interaction. J. Comput. Phys., Vol.54, No.2, 1984, p.221–236.
20. Faifman M.P., Menshikov L.I., Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A. The Energy Levels of Hydrogen Isotopes Mesic Molecular Complexes. Z.Phys. D- Atoms, Molecules and Clusters 2, 1986, p.79–82. Abstracts Tenth Intern. Conference on Atomic Physics, Tokyo, 1986, p.98. Intern. Symposium on Muon-Catalyzed Fusion, University of Tokyo, 1986. Abstracts of papers, p.28, p.35.
21. Puzynin I.V., Puzynina T.P., Smirnov Yu.S., Vinitzky S.I. New effective Adiabatic Approach to the Muonic Three-Body Problem. J. Hyperfine Interactions, 82, 1993, p.73–81.
22. Bakalov D., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Vinitzky S.I. Fine and hyperfine Structure of Antiprotonic Helium. J. Hyperfine Interactions, 101/102, 1996, p.487–492.

23. Puzyrin I.V., Puzyrina T.P., Vinitsky S.I., Puzyrin V.I. Energy Level Scheme of $\bar{p}\text{He}^+$ System in an Improved Adiabatic Approach. J. Hyperfine Interactions, **101/102**, 1996, p.493–502.
24. Bakalov D., Puzyrin I.V., Puzyrina T.P., Vinitsky S.I. Spin Effects in Anti-protonic Helium Spectroscopy. Phys. Letters **A211**, 1996, p.223–227.
25. Puzyrin I.V., Machavariani A.I., Amirkhanov I.V., Puzyrina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V. Numerical Solution of Two-Body Relativistic Equations for the Bound-State Problem with Confining and Coulomb Potentials. Comp. Phys. Comm., **126** (2000) p.16–21. In Proceed. First Intern. Conf. "Modern Trends in Computational Physic, MTCP-1998", Dubna, Russia, p.24.
26. Puzyrin I.V., Puzyrina T.P., Smirnov Yu.S., Vinitsky S.I. Effective mass of three-body quantum mechanics system with coulomb interaction as matching parameter in effective adibatic representation. In Proceed. Intern. Conf. on Programming and Mathematical Methods for Solving Physical Problems. P&MM'93, Dubna, 1993, p.234–239.
27. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Непрерывный аналог метода Ньютона в некоторых задачах математической физики на собственные значения. Сб. "Программирование и математические методы решения физических задач", ОИЯИ, D10-7707, Дубна, 1974, стр.134.
28. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Процесс Ньютона в теории возмущений с непрерывным включением взаимодействия. Пре-принт ОИЯИ, P4-10942, Дубна, 1977.
29. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Численное исследование некоторых модификаций непрерывного аналога метода Ньютона при решении частичной задачи Штурма-Лиувилля. Сообщение ОИЯИ, P5-12788, Дубна, 1979.
30. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Программа приближенного решения задачи Штурма-Лиувилля с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. В сб.: "Collection of scientific papers in collaboration of JINR, Dubna, USSR and Central Research Institute for Physics", Budapest, Hungary, KFKI-74-34, 1974, стр.93–112. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/index.html>
31. Пузынина Т.П. TERM - программа для вычисления собственных значений задачи двух центров квантовой механики. В сб.: "Collection of scientific papers in collaboration of JINR, Dubna, USSR and CRIP", Budapest, Hungary, KFKI-77-12, 1977, стр.149–169.
32. Баатар Д., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Численное решение многопараметрической задачи на собственные значения и повышение точности разностного решения. Сообщение ОИЯИ, P11-82-97, Дубна, 1982.
33. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. SLIPH4 - программа для численного решения задачи Штурма-Лиувилля. Сообщение ОИЯИ, P11-87-332, Дубна, 1987. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/index.html>

34. Пузынина Т.П. SLIP2 - программа численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений. Сообщение ОИЯИ, P11-89-728, Дубна, 1989. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/index.html>
35. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П. SNIDE - пакет программ для решения задач на собственные значения для интегро-дифференциального уравнения на основе НАМН. Сообщение ОИЯИ, P11-91-87, Дубна, 1991. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/snide/index.html>
36. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. Calculation of Quasi-Stationary State Characteristics of Hydrogen Metic Molecules. Препринт ОИЯИ, P4-9183, Дубна, 1975. In Proceed. International Conference on High Energy Physics and Nuclear Structure, 6-th, Santa Fe—Los Alamos, 1975, p.163.
37. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Вычисление уровней μ -мезомолекул изотопов водорода в адиабатическом представлении задачи трех тел. Препринт ОИЯИ, P4-10336, Дубна, 1976. В сб. "Мезоны в веществе. Труды международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе", Дубна, 7-10 июня 1977г., ОИЯИ, Д1, 2, 14-10908, с.187-192.
38. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Программа численного решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы линейных дифференциальных уравнений второго порядка. Сообщение ОИЯИ, P5-12787, Дубна, 1979.
39. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Решение частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегродифференциальных уравнений специального вида. Сообщение ОИЯИ, P5-12789, Дубна, 1979.
40. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Решение частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегро-дифференциальных уравнений, возникающей при вычислении уровней энергии μ -мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел. Сообщение ОИЯИ, P5-12790, Дубна, 1979.
41. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Решение системы интегро-дифференциальных уравнений, возникающей при вычислении энергии μ -мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел. Сообщение ОИЯИ, P11-82-842, Дубна, 1982.
42. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. Tables of the Effective Potentials for the Three-Body Problem with the Coulomb Interaction in the Adiabatic Representation. JINR Comm., E4-83-778, Dubna, 1983.
43. Касчиев М.С., Касчиева В.А., Маханьков В.Г., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Филиппов А.Т. Численное исследование устойчивости и точек бифуркации связанных статических состояний флюксонов в круговом джозефсоновском переходе с микронеоднородностью. Препринт ОИЯИ, P11-84-832, Дубна, 1984.

44. Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Zakhariev B.N. About the Three-Body Inverse Problem. Proceed. Intern. Symposium "Schroedinger Operators Standard and non-Standard", Dubna, USSR, 1988. Singapore: World Scientific, p.353.
45. Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Zakhariev B.N. Potential reconstruction from R-matrix resonance positions and reduced widths. In Intern. Proceed. on Few-Body Physics, изд-во КГУ, Калинин, 1989, с.55-59.
46. Амирханов И.В., Пузынина Т.П. Численное решение прямой и обратной задач квантовой механики в рамках R-матричного подхода и баргмановского формализма. Сообщение ОИЯИ, P11-89-771, Дубна, 1989.
47. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынина Т.П. Итерационный метод решения уравнения полярона в сферически-симметричном случае. Сообщение ОИЯИ, P11-91-139, Дубна, 1991.
48. Amirkhanov I.V., Pervushin V.N., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Sarikov N.A., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V. Numerical Investigation of Schwinger-Dyson and Bethe-Salpeter Equations with Gauss and Oscillator Potentials at the Framework of the Quarkonium Model. Препринт ОИЯИ, E11-94-509, Dubna, 1994.
49. Амирханов И.В., Давлатов Х.Ф., Земляная Е.В., Первушин В.Н., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сариков Н.А., Стриж Т.А. Численное исследование модификации КХД-инспирированной модели кваркония с потенциалом Якавы. Сообщение ОИЯИ, P11-94-523, Дубна, 1994.

Получено 17 июня 2003 г.

Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 19.06.2003.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 2,12. Уч.-изд. л. 3,24. Тираж 100 экз. Заказ № 53975.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/