

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

Подпись

ЧУЛУУНБААТАР Очбадрах

**ВАРИАЦИОННО-ПРОЕКЦИОННЫЕ
МЕТОДЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ
МАЛОЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ
СИСТЕМ**

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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна – 2010

Работа выполнена в *Лаборатории информационных технологий
Объединенного института ядерных исследований.*

Научные консультанты:

*доктор физико–математических наук,
профессор,
заслуженный деятель науки РФ*

Пузынин Игорь Викторович

*доктор физико–математических наук,
профессор*

Виницкий Сергей Ильич

Официальные оппоненты:

*доктор физико–математических наук,
профессор*

*Севастьянов Леонид Антонович,
Российский университет дружбы народов*

*доктор физико–математических наук,
доцент*

*Цирулев Александр Николаевич,
Тверской государственный университет*

доктор физико–математических наук,

*Пупышев Василий Вениаминович,
Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория теоретической физики*

Ведущая организация:

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобел-
цына Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.*

Защита состоится «_____» _____ 2010 г. в _____ часов на заседа-
нии диссертационного совета Д720.001.04 при Объединенном институте
ядерных исследований (Лаборатория информационных технологий) по ад-
ресу: 141980, г. Дубна, Московской области, ул. Жолио Кюри, д. 6.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке *Объединенного
института ядерных исследований.*

Автореферат разослан «_____» _____ 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико–математических наук,

профессор



Иванченко Иосиф Моисеевич

1. Общая характеристика работы

Актуальность работы. Диссертация посвящена разработке эффективных вариационно-проекционных методов, экономичных алгоритмов и комплексов программ для численного исследования широкого класса математических моделей физических процессов, протекающих в малочастичных квантовых системах атомного и молекулярного типа при их взаимодействии с внешними электромагнитными полями или пучками частиц [1–3]. В рамках сформулированных математических моделей исследованы следующие физические процессы:

1. фотоионизация и рекомбинация атома водорода в однородном магнитном поле под воздействием лазерного излучения;
2. возбуждение и девозбуждение волнового пакета атома водорода в однородном магнитном поле под воздействием последовательности сверхкоротких лазерных импульсов;
3. ионизация двухатомных молекул и их ионов электронным ударом.

Математические модели изученных процессов объединены объектом численного исследования, которым является краевые и начально-краевые задачи для стационарного и нестационарного уравнения Шредингера в многомерном координатном пространстве, описывающие динамику малочастичных квантовых систем.

Математические модели процессов 1 и 2 играют фундаментальную роль в изучении механизмов образования атомов антиводорода в холодной позитронно-антипротонной плазме в лабораторных магнито-оптических ловушках [2]. Эти модели относятся к первому классу задач, требующих точности решения, принятой в лазерной спектроскопии. Исследование этих задач аналитическими и качественными методами возможно лишь в частных случаях. Нередко из-за сложности математической постановки соответствующих краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа единственно возможным является их численный анализ. Специфика данного класса задач состоит в том, что наличие нескольких потенциалов взаимодействия между заряженными частицами или частиц с внешними электрическим и магнитным полями приводит к разбиению координатного пространства на подобласти, в каждой из которых, в зависимости от значения физических параметров и энергии, доминирует тот или иной потенциал. Поэтому в рамках вариационно-проекционных методов традиционно используют, например, многопараметрические вариационные или составные базисные функции, учитывающие это обстоятельство. Однако этими методами не всегда удается при заданных значениях физических параметров, например, напряженности магнитного

поля или энергии, решить с требуемой точностью задачи данного класса из-за накопления ошибок, связанных с плохой обусловленностью возникающих алгебраических задач большой размерности [4, 5] или большого интервала интегрирования по временной переменной [6]. Поэтому разработка специальных эффективных численных методов, экономичных алгоритмов и комплексов программ для исследования с контролируемой точностью данного класса задач является актуальной проблемой.

Математические модели процесса 3 являются теоретическим фундаментом для анализа экспериментальных сечений ионизации двухатомных молекул и их ионов электронным ударом [3]. Эти модели относятся к второму классу задач, требующих точности решения, принятой в электронной импульсной спектроскопии. В отличие от математических моделей процессов 1 и 2 функции начального и конечного состояний, описывающие процессы ионизации, должны быть заданы в аналитическом виде, адаптированном для вычисления многократных интегралов, определяющих сечения ионизации [3]. Однако известные пробные волновые функции конечного состояния непрерывного спектра электронов не учитывают корректно двухцентровый характер кулоновского взаимодействия электронов с зарядами ядер молекулы, находящимися в равновесном положении в момент удара электроном [7, 8]. По этой причине вычисленные сечения ионизации часто не совпадают с экспериментальными. Поэтому в обсуждаемом классе задач особый интерес вызывает построение пробных волновых функций конечного состояния непрерывного спектра электронов двухцентрового типа. Так как многократные интегралы содержат координатные многомерные кулоновские функции непрерывного спектра электронов, то разработка экономичных алгоритмов и комплексов программ для надежного вычисления таких интегралов также является актуальной проблемой.

В силу указанных выше фактов разработка эффективных методов, создание экономичных алгоритмов и проблемно-ориентированных комплексов программ для численного анализа с контролируемой точностью краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа является актуальной и фундаментальной проблемой в области математического моделирования динамики малочастичных квантовых систем.

Здесь и далее уравнением шредингеровского типа называется уравнение Шредингера, в котором оператор Лапласа заменен самосопряженным дифференциальным оператором.

Для численного решения краевых многомерных задач шредингеровского типа из первого класса задач, включающего математические модели процессов 1 и 2, в диссертации разработаны эффективные вариационно-проекционные схемы на основе понижения размерности исходных задач методом Канторовича (МК) – приведение к обыкновенным дифференци-

альным уравнениям [9]. Как известно [10, ОЧ1], этот метод позволяет реализовать экономичный алгоритм вычисления однопараметрических базисных функций, непрерывно зависящих от одного из пространственных аргументов этих уравнений как от параметра и учитывающих и указанные выше особенности, и краевые условия исходной задачи. Кроме того, МК дает возможность построить оптимальные асимптотические разложения решений многоканальной задачи рассеяния, необходимые для переноса асимптотических краевых условий на границу конечной области в виде условий третьего рода. Это позволяет выбрать подходящую параметризацию и оптимальную область изменения пространственных переменных. Поэтому, основное преимущество МК по сравнению с другими проекционными методами состоит в том, что с его помощью нетрудно аппроксимировать краевые условия, заданные на границах сложной области. Последнее обстоятельство крайне важно для построения оптимальной дискретизации возникающей последовательности краевых задач в конечной области по пространственным переменным, в качестве которой в диссертации применяется метод конечных элементов (МКЭ) высокого порядка точности [11]. Для численного решения начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа, включающих математическую модель процесса 2, в диссертации построены симметричные неявные операторно-разностные многослойные схемы до шестого порядка точности по шагу временной переменной. Построение выполнено на основе явного разложения Магнуса оператора эволюции [12] и аппроксимации Паде [13] с дополнительными операторными преобразованиями. Эти симметричные схемы специально адаптированы для аппроксимации волнового пакета в МК и МКЭ по пространственным переменным.

Для численного исследования второго класса задач, порожденных математическими моделями процесса 3, в диссертации построены новые пробные модифицированные кулоновские функции с вариационными параметрами, описывающие конечное состояние непрерывного спектра одного или двух электронов и учитывающие их кулоновское взаимодействие с ядрами молекулы. Возникающие при расчете сечения ионизации многократные интегралы с помощью преобразования Фурье сводятся к вычислению последовательности трехкратных интегралов. Они содержат комплексные гипергеометрические функции, для вычисления которых предложен эффективный алгоритм.

Актуальность представленных в диссертации исследований обусловлена потребностями российских и международных научных программ и проектов. Исследования выполнялись автором в соответствии с научно-тематическими планами научно-исследовательских работ ОИЯИ и в рамках протоколов о выполнении совместной научно-исследовательской работы с

Монгольским государственным университетом (г. Улан-Батор, Монголия), с Институтом математики и информатики Болгарской Академии Наук (г. София, Болгария) и Лабораторией молекулярных столкновений Университета им. Поля Верлена (г. Метц, Франция). Исследования поддерживались грантами РФФИ и Болгарского фонда научных исследований.

Цель диссертационной работы. Фундаментальная проблема, на решение которой направлена настоящая диссертация — создание и развитие эффективных вариационно-проекционных методов, экономичных алгоритмов и проблемно-ориентированных комплексов программ для численного анализа краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа, а также применение этих методов для исследования математических моделей малочастичных квантовых систем.

Основные цели диссертации достигаются решением следующих задач:

1. разработка эффективных вариационно-проекционных методов численного решения краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа;
2. разработка экономичных алгоритмов и программная реализация эффективных методов дискретизации, а также доказательство оценок погрешностей приближенных решений, обеспечивающих необходимую точность и достоверность численных результатов;
3. создание комплексов программ для численного решения с контролируемой точностью краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа;
4. выполнение численных исследований оценок скорости сходимости разложения метода Канторовича по числу базисных функций и точности вычисления приближенных решений в рамках предложенных алгоритмов и созданных комплексов программ на интегрируемых моделях, близких к реальным задачам, или с помощью численных экспериментов на сгущающихся сетках;
5. построение новых пробных кулоновских функций, описывающих конечное состояние непрерывного спектра одного или двух электронов в двухатомных молекулах и в их ионах с учетом двухцентрового характера кулоновского взаимодействия электронов с ядрами, включая создание эффективных алгоритмов и комплексов программ для вычисления многократных интегралов от таких функций, определяющих сечения ионизации.

Научная новизна диссертации состоит в следующем.

1. Впервые разработаны эффективные вариационно-проекционные вычислительные схемы и оригинальные экономичные алгоритмы для численного решения краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа на основе метода Канторовича, теории \mathbf{R} -матрицы, асимптотических методов, разложения Магнуса унитарного оператора эволюции, последовательности операторных преобразований и метода конечных элементов.
2. Впервые в рамках метода конечных элементов доказаны оценки погрешности аппроксимаций первой производной по параметру от собственных значений, собственных функций параметрической сопряженной задачи Штурма–Лиувилля и интегралов от произведения собственных функций и их первых производных по параметру.
3. Впервые в рамках симметричных неявных операторно-разностных многослойных схем доказаны оценки погрешности аппроксимаций решений начально-краевой задачи шредингеровского типа.
4. Построены новые модификации пробных кулоновских функций непрерывного спектра электронов в двухатомных молекулах и в их ионах, в виде линейной комбинации произведения модифицированных кулоновских функций, аппроксимирующих в аналитическом виде функции непрерывного спектра задачи двух кулоновских центров. Разработаны специальные алгоритмы и созданы комплексы программ для расчета сечений ионизации одно- и двухэлектронных двухатомных молекул и их ионов электронным ударом, которые сводятся к вычислению многократных интегралов до тринадцатого порядка кратности с использованием технологии распараллеливания.
5. С помощью разработанных схем и созданных проблемно-ориентированных комплексов программ, впервые получены следующие физические результаты:
 - (а) исследован резонансный механизм фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле, реализованный через квазистационарные состояния, погруженные в непрерывный спектр и предсказаны эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле;
 - (б) выполнено численное исследование модели эволюции населенностей возбужденных состояний атома водорода в однородном магнитном поле под воздействием последовательности сверхкоротких лазерных импульсов и показана возможность стабилизации зеемановского волнового пакета и контроля населенностей

вариацией магнитного поля;

- (в) выполнено численное исследование моделей ионизации атома гелия, ионов и молекул водорода, азота электронным ударом и достигнуто хорошее согласие теоретических и экспериментальных сечений ионизации; впервые теоретически корректно описаны интерференционные эффекты когерентного рассеяния электрона на двух кулоновских центрах молекулы, проявляющиеся в установленном функциональном отношении дифференциальных сечений ионизации атома гелия и молекулы водорода.

Практическая значимость. Разработанные методы и алгоритмы позволяют численно решать с контролируемой точностью краевые и начально-краевые многомерные задачи шредингеровского типа, более эффективно по сравнению с традиционно применяемыми вариационно-проекционными методами. На основе этих методов и алгоритмов созданы проблемно-ориентированные комплексы программ численного решения следующих краевых и начально-краевых задач:

- (а) задачи на связанные состояния и многоканальной задачи рассеяния для систем стационарных уравнений шредингеровского типа;
- (б) начально-краевой задачи для систем дифференциальных уравнений в частных производных шредингеровского типа;
- (в) задач вычисления решения однопараметрической краевой задачи на собственные значения и матричных элементов, являющихся переменными коэффициентами в системах дифференциальных уравнений краевых и начально-краевых задач.

Они доступны для широкого использования и успешно применяются в ряде российских и зарубежных научных организациях для исследования математических моделей физических процессов в малочастичных квантовых системах.

Выполненное в диссертации численное исследование различных математических моделей малочастичных квантовых систем с использованием разработанных методов, алгоритмов, построенных волновых функций и созданных комплексов программ является практическим доказательством эффективности и возможности их широкого применения.

Комплексы программ KANTBP, POTHMF, ODPEVP и TIME6T используются в ОИЯИ, Саратовском государственном университете (г. Саратов, Россия), Институте математики и информатики Болгарской Академии Наук (г. София, Болгария), Институте ядерной физики (г. Алматы, Казахстан), Ереванском государственном университете (г. Ереван, Армения), РУДН (г. Москва, Россия), Университете Темпл (г. Темпл, США)

и Институте физики (г. Куэрновака, Мексика) для численного решения краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа.

Комплексы программ ZHYPG2, INFUN, INTEG и OUTFUN используются в совместных научных проектах с Монгольским государственным университетом (г. Улан-Батор, Монголия), НИИЯФ МГУ (г. Москва, Россия), Лабораторией молекулярных столкновений Университета им. Поля Верлена (г. Метц, Франция), Лабораторией атомных и молекулярных столкновений (г. Орсэ, Франция) и Институтом молекулярных исследований (г. Оказаки, Япония) для численного исследования моделей ионизации двухатомных молекул и их ионов электронным ударом.

В общей сложности в перечисленных выше комплексах программ задействовано около 21 000 операторов фортранного кода.

Комплексы программ KANTBP¹, ROTNMF² и ODPEVP³ с полным описанием и тестовыми примерами сданы в библиотеку программ журнала Computer Physics Communication. К этим программам с сентября 2007 г., с января 2008 г. и с июля 2009 г. по декабрь 2009 г. было официально зарегистрировано 305, 138 и 49 обращений пользователей, соответственно.

Комплексы программ TIME6T⁴ и ZHYPG2⁵ с полным описанием и тестовыми примерами представлены в библиотеку программ ОИЯИ.

Построенные модифицированные кулоновские функции конечного состояния непрерывного спектра одного или двух электронов двухатомных молекул и их ионов применялись авторами работ [14–16], в которых отмечалась высокая эффективность использования этих функций. Выявленные новые интерференционные эффекты [ОЧ19], проявляющиеся в установленном функциональном отношении сечений ионизации атома гелия и молекулы водорода электронным ударом в настоящее время интенсивно изучаются другими авторами.⁶

На защиту выносятся следующие основные результаты:

1. В рамках метода Канторовича и метода конечных элементов разработаны эффективные вариационно-проекторные схемы и алгоритмы для численного решения с заданной точностью краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа с однородными краевыми условиями.

¹ http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v1_0.html

² http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEAA_v1_0.html

³ http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEDV_v1_0.html

⁴ <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/time6t>

⁵ <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/zhypg2>

⁶ За 2008–2009 гг. на работу [ОЧ19] уже имеется 16 ссылок в реферируемых журналах.

2. Построены новые модификации пробных кулоновских волновых функций непрерывного спектра электронов в двухатомных молекулах и в их ионах с учетом двухцентрового характера кулоновского взаимодействия электронов с ядрами молекул.
3. Доказаны следующие теоретические оценки:
 - (а) в рамках метода конечных элементов получены погрешности аппроксимаций первой производной по параметру от собственных значений, собственных функций параметрической самосопряженной задачи Штурма–Лиувилля и интегралов от произведения собственных функций и их первых производных по параметру;
 - (б) в рамках симметричных неявных операторно-разностных многослойных схем выведены погрешности аппроксимаций решений начально-краевой задачи шредингеровского типа.
4. Созданы проблемно-ориентированные комплексы программ для численного анализа различных процессов в малочастичных квантовых системах. Следующие комплексы программ, представляющие интерес для широкого круга пользователей, переданы в библиотеки программ журнала Computer Physics Communication и ОИЯИ:
 - (а) KANTBP для решения задачи на связанные состояния и многоканальной задачи рассеяния для самосопряженных систем обыкновенных дифференциальных уравнений шредингеровского типа с краевыми условиями третьего рода;
 - (б) TIMEBT для решения начально-краевой задачи для самосопряженных систем дифференциальных уравнений в частных производных шредингеровского типа с краевыми условиями первого и (или) второго рода по пространственной переменной;
 - (в) ODPEVP для решения однопараметрической самосопряженной задачи Штурма–Лиувилля, и вычисления первой производной по параметру от собственных функций и интегралов от произведения собственных функций и их первых производных по параметру;
 - (г) ROTNMF для решения однопараметрической задачи на собственные значения для угловых сплюснутых сфероидальных функций, и вычисления первой производной по параметру от собственных функций и интегралов от произведения собственных функций и их первых производных по параметру;
 - (д) ZHYPG2 для вычисления комплексных гипергеометрических функций ${}_2F_1(a, 2; c, z)$.

5. С помощью разработанных методов, алгоритмов и созданных комплексов программ получены следующие физические результаты в малочастичных квантовых системах.
- (а) Проведено численное исследование модели резонансного механизма фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле. Впервые предсказаны эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле.
 - (б) Проведено численное исследование модели эволюции населенностей возбужденных состояний атома водорода в однородном магнитном поле под воздействием последовательности сверхкоротких лазерных импульсов. В результате показана возможность стабилизации зеемановского волнового пакета и контроля населенностей вариацией магнитного поля.
 - (в) Выполнено численное исследование моделей ионизации атома гелия, молекул водорода и ионов, азота электронным ударом. Достигнуто хорошее согласие результатов расчета теоретических сечений с современными экспериментальными данными. Впервые теоретически корректно описаны интерференционные эффекты когерентного рассеяния электрона на двух кулоновских центрах молекулы, проявляющиеся в установленном функциональном отношении дифференциальных сечений ионизации молекулы водорода и атома гелия.

Достоверность результатов. Корректность результатов подтверждена численными экспериментами на математических моделях физических процессов, допускающих точное решение, проверкой выполнения известных и доказанных автором теоретических оценок погрешностей численных решений в используемых вычислительных схемах, сравнением с результатами других теоретических расчетов и экспериментов.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались на научных семинарах ЛИТ, ЛТФ ОИЯИ и на следующих международных конференциях: “Fifth Conference on Numerical Methods and Applications”, Borovets, Bulgaria, 2002; “Saratov Fall Meeting”, Саратов, Россия, 2003, 2005, 2006, 2007, 2008; “First National Conference on Nonlinear Sciences”, Ulan-Bator, Mongolia, 2004; “International Conference on Contemporary Physics”, Ulan-Bator, Mongolia, 2005, 2007; “International Conference on Mathematics”, Ulan-Bator, Mongolia, 2006; “Computer Algebra and Scientific Computing”, Bonn, Germany, 2007; “Computer Algebra and Differential Equations”, Turku, Finland, 2007; “International Conference on

Muon Catalyzed Fusion and Related Topics”, Dubna, Russia, 2007; “Quantum Physics and Communication”, Dubna, Russia, 2007; “Symmetries in Physics”, Dubna, Russia, 2008, 2009; “Mathematical Modeling And Computational Physics”, Dubna, Russia, 2009.

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в 22 работах. Из них 7 работ в российских журналах, рекомендованных ВАК [ОЧ1, ОЧ7, ОЧ8, ОЧ9, ОЧ10, ОЧ11, ОЧ16]; 13 работ в зарубежных журналах, рекомендованных ВАК [ОЧ2, ОЧ3, ОЧ4, ОЧ12, ОЧ13, ОЧ14, ОЧ15, ОЧ17, ОЧ18, ОЧ19, ОЧ20, ОЧ21, ОЧ22] и 2 работы в библиотеке программ ОИЯИ [ОЧ5, ОЧ6].

Структура и объем диссертации. Диссертация, содержащая 244 страниц, состоит из введения, шести глав, заключения, списка основных публикаций (в диссертации они имеют номера ОЧ1–ОЧ22) и списка цитируемой литературы, включающего 147 наименований. Главы разбиты на параграфы, параграфы – на пункты. Нумерация формул, таблиц (всего таблиц 11) и рисунков (их 36) сквозная в пределах каждой главы.

Личный вклад автора. Автор диссертации в сотрудничестве с коллегами и соавторами из ЛИТ, ЛТФ ОИЯИ и других (российских и зарубежных) научных центров участвовал в математической постановке рассматриваемых в диссертации задач, создании, проверке и улучшении соответствующих математических моделей, а также в разработке и обосновании оценок точности вычислительных схем.

Автор диссертации внес определяющий вклад в создание представленных комплексов программ, в проведение тестирований, в компьютерное моделирование конкретных физических задач, в анализ достоверности и указанной точности полученных результатов. Обзор [ОЧ1] написан с существенным вкладом автора. Работы [ОЧ2, ОЧ3, ОЧ4, ОЧ5] выполнены с определяющим вкладом автора в разработку вычислительных схем, алгоритмов и комплексов программ и в проведении численного анализа; все разработанные алгоритмы и комплекс программ в [ОЧ6, ОЧ7, ОЧ8, ОЧ9, ОЧ10, ОЧ11] являются авторскими; все численные результаты в [ОЧ12, ОЧ13, ОЧ14, ОЧ15, ОЧ16, ОЧ17, ОЧ18, ОЧ19, ОЧ20, ОЧ21, ОЧ22] получены автором на основе разработанных им алгоритмов и комплексов программ.

2. Содержание диссертации

Во введении дана общая характеристика работы, обоснованы ее актуальность и научная новизна, описаны цели диссертации, ее структура и объем и представлено содержание диссертации по главам.

Глава 1 посвящена описанию функциональной схемы МК, эффек-

тивной для численного исследования краевых многомерных задач шредингеровского типа, описывающих динамику малочастичных квантовых систем. В этой главе детально формулируются основные проблемы, возникающие при решении МК краевых многомерных задач, которые требуют разработки эффективных вычислительных схем, и обосновывается выбор методов их решения.

В параграфе 1.1 представлена функциональная схема решения краевых задач МК. Даны формулировки краевых задач для стационарного уравнения Шредингера в конечной области координатного пространства \mathbf{R}^d , описывающего динамику малочастичной квантовой системы

$$\begin{aligned} H(r, \Omega)\Psi(r, \Omega) &= E\Psi(r, \Omega), \\ H(r, \Omega) &= -\frac{1}{f_1(r)}\frac{\partial}{\partial r}f_2(r)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{f_3(r)}\left(-\hat{\Lambda}_\Omega^2 + U(r, \Omega)\right). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\hat{\Lambda}_\Omega^2$ – самосопряженный дифференциальный оператор эллиптического типа с частными производными в конечной области $\hat{X} \subset \mathbf{R}^{d-1}$, $\Omega = \{\Omega_j\}_{j=1}^{d-1} \in \hat{X}$ – набор независимых переменных, $r \in (r_1, r_2) \in B \subset \mathbf{R}^1$ – независимая переменная, $X = B \otimes \hat{X} \subset \mathbf{R}^d$ – конечная область координатного пространства \mathbf{R}^d ; E – спектральный параметр, соответствующий энергии квантовой системы. Предполагается, что функции $f_1(r) > 0$, $f_2(r) > 0$, $f_3(r) > 0$, $\partial_r f_2(r)$, $U(r, \Omega)$ и $\partial_r U(r, \Omega)$ – непрерывны и ограничены при всех $(r, \Omega) \in X$. Предполагается также, что самосопряженный оператор $L(\Omega; r) = -\hat{\Lambda}_\Omega^2 + U(r, \Omega)$ имеет только дискретный вещественный спектр $\varepsilon(r)$.

Решение $\Psi(r, \Omega) \in \mathbf{L}_2(X)$ уравнения (1) подчиняется краевым условиям третьего рода:

$$\begin{aligned} \mu_l \frac{\partial \Psi(r, \Omega)}{\partial r} - \lambda_l \Psi(r, \Omega) &= 0, \quad r = r_l, \quad \Omega \in \partial \hat{X} \cup \hat{X}, \quad l = 1, 2; \\ a \frac{\partial \Psi(r, \Omega)}{\partial \mathbf{n}} - b(r)\Psi(r, \Omega) &= 0, \quad \Omega \in \partial \hat{X}, \quad r \in [r_1, r_2], \end{aligned} \quad (2)$$

где $\mu_1, \lambda_1, \mu_2, a$ – вещественные константы; $\lambda_2 \equiv \lambda_2(r_2)$ – вещественная функция, зависящая от r_2 ; $\mu_l^2 + \lambda_l^2 \neq 0$; функции $b(r)$, $\partial_r b(r)$ – непрерывны и ограничены; \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границе $\partial \hat{X}$ области \hat{X} .

В МК решение $\Psi(r, \Omega)$ ищется в виде разложения по однопараметрическому набору базисных функций $\{\psi_j(\Omega; r)\}_{j=1}^{j_{\max}} \in \mathcal{F}_r \sim \mathbf{L}_2(\hat{X})$:

$$\Psi(r, \Omega) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \psi_j(\Omega; r)\chi_j(r). \quad (3)$$

В разложении (3) вектор-функция $\chi(r) = (\chi_1(r), \dots, \chi_{j_{\max}}(r))^T$ – искомая.

Базисные функции $\psi_j(\Omega; r)$ – решения параметрической задачи на собственные значения

$$\begin{aligned} L(\Omega; r)\psi_j(\Omega; r) &= \varepsilon_j(r)\psi_j(\Omega; r), \\ a\frac{\partial\psi_j(\Omega; r)}{\partial\mathbf{n}} - b(r)\psi_j(\Omega; r) &= 0, \quad \Omega \in \partial\hat{X}, \quad r \in [r_1, r_2]. \end{aligned} \quad (4)$$

Они образуют ортонормированный базис по набору переменных $\Omega \in \hat{X}$ для каждого значения $r \in (r_1, r_2) \in B$, который рассматривается как параметр, и удовлетворяют условию нормировки

$$\int_{\hat{X}} \psi_j(\Omega; r)\psi_j(\Omega; r)d\Omega = 1. \quad (5)$$

Здесь $\varepsilon_1(r) < \dots < \varepsilon_{j_{\max}}(r) < \dots \in \varepsilon(r)$ – искомый набор вещественных собственных значений, расположенных в порядке возрастания.

После подстановки разложения (3) в уравнение (1) и умножения слева на функции $\psi_j(\Omega; r)$ с последующим интегрированием в области \hat{X} , исходная краевая задача (1), (2) сводится к задаче на связанные состояния (относительно искомого $E, \chi(r)$) или к многоканальной задаче рассеяния (относительно набора искомого $\{\lambda_{2,i_o}\}_{i_o=1}^{N_o}, \{\chi_{i_o}(r)\}_{i_o=1}^{N_o}$ при фиксированном значении E) для системы из j_{\max} обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\mathbf{H}(r)\chi(r) = E\chi(r), \quad (6)$$

$$\mu_l \left(\mathbf{I} \frac{d}{dr} - \mathbf{Q}(r) \right) \chi(r) - \lambda_l \chi(r) = 0, \quad r = r_l, \quad l = 1, 2, \quad (7)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица, $\mathbf{H}(r)$ – самосопряженный матричный оператор:

$$\mathbf{H}(r) = -\frac{1}{f_1(r)} \mathbf{I} \frac{d}{dr} f_2(r) \frac{d}{dr} + \mathbf{V}(r) + \frac{f_2(r)}{f_1(r)} \mathbf{Q}(r) \frac{d}{dr} + \frac{1}{f_1(r)} \frac{d f_2(r)}{dr} \mathbf{Q}(r). \quad (8)$$

Собственная функция $\chi(r)$ задачи на связанные состояния (6)–(8) нормирована:

$$\|\chi(r)\|_0 = 1, \quad \|\chi(r)\|_0^2 = \int_{r_1}^{r_2} f_1(r) \chi(r)^T \chi(r) dr. \quad (9)$$

Для многоканальной задачи рассеяния (6)–(8) число открытых каналов $N_o = \max j \leq j_{\max}$ определяется условием $E \geq \lim_{r_2 \rightarrow \infty} V_{jj}(r_2)$, если $\lim_{r_2 \rightarrow \infty} f_2(r_2)/f_1(r_2) = \text{const}$, а нормировка решения $\Phi(r) = \{\chi_{i_o}(r)\}_{i_o=1}^{N_o}$ – условием:

$$\Phi(r_2) = \Phi_{\text{reg}}(r_2) + \Phi_{\text{irr}}(r_2)\mathbf{K}, \quad (10)$$

где \mathbf{K} – искомая матрица реакции размерностью $N_o \times N_o$, а $\Phi_{\text{reg}}(r)$ и $\Phi_{\text{irr}}(r)$ – асимптотики регулярных и нерегулярных решений уравнения (6).

В системе (8) переменные элементы матриц $\mathbf{V}(r)$ и $\mathbf{Q}(r)$ размерностью $J_{\text{max}} \times J_{\text{max}}$ определяются формулами

$$V_{ij}(r) = V_{ji}(r) = \frac{\varepsilon_i(r) + \varepsilon_j(r)}{2f_3(r)} \delta_{ij} + \frac{f_2(r)}{f_1(r)} \int_{\hat{X}} \frac{\partial \psi_i(\Omega; r)}{\partial r} \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} d\Omega, \quad (11)$$

$$Q_{ij}(r) = -Q_{ji}(r) = - \int_{\hat{X}} \psi_i(\Omega; r) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} d\Omega.$$

Производная от собственной функции $\partial_r \psi_j(\Omega; r) \in \mathcal{F}_r \sim \mathbf{L}_2(\hat{X})$ – решение параметрической неоднородной краевой задачи, получаемой дифференцированием по параметру задачи (4), (5):

$$(L(\Omega; r) - \varepsilon_j(r)) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} = \left(\frac{\partial \varepsilon_j(r)}{\partial r} - \frac{\partial L(\Omega; r)}{\partial r} \right) \psi_j(\Omega; r), \quad (12)$$

$$a \frac{\partial^2 \psi_j(\Omega; r)}{\partial r \partial \mathbf{n}} - b(r) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} = \frac{\partial b(r)}{\partial r} \psi_j(\Omega; r), \quad \Omega \in \partial \hat{X}, \quad r \in [r_1, r_2],$$

$$\int_{\hat{X}} \psi_j(\Omega; r) \frac{\partial \psi_j(\Omega; r)}{\partial r} d\Omega = 0.$$

Таким образом, реализация МК приводит к необходимости разработки эффективных вычислительных схем для решений следующих проблем:

- **Проблема 1.** Вычисление конечного набора собственных значений и собственных функций параметрической краевой задачи (4), (5).
- **Проблема 2.** Вычисление первой производной собственных функций по параметру из неоднородной краевой задачи (12).
- **Проблема 3.** Вычисление элементов матриц $\mathbf{Q}(r)$ и $\mathbf{V}(r)$ по формулам (11).
- **Проблема 4.** Решение задачи на связанные состояния для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (6)–(9).
- **Проблема 5.** Решение многоканальной задачи рассеяния для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (6)–(8), (10).

В параграфе 1.2 обосновывается выбор методов, использованных для численного решения **проблем 1–5** в рамках соответствующих вариационных формулировок, использующих функционалы Рэля-Ритца, Ритца [11] и Хюльтена [1], а также вычислительных схем. Следует отметить, что система (6) содержит самосопряженный оператор в виде суммы двух слагаемых, включающих антисимметричную матрицу $\mathbf{Q}(r)$ при первой производной по переменной r и ее первую производную по переменной r . При

непосредственной дискретизации соответствующих задач требуется численно дифференцировать матрицу $\mathbf{Q}(r)$ по переменной r , что приводит к дополнительному ограничению на оценки погрешности приближенного решения. Используемая вариационная формулировка этих задач свободна от этого недостатка.

Дискретизация и минимизация соответствующих симметричных вариационных функционалов реализована МКЭ [11] высокого порядка точности. Выбор порядка аппроксимации p зависит от гладкости искомого решения. Тогда **проблемы 1, 4 и 5** сводятся к решению обобщенных задач на собственные значения, **проблема 2** – к решению алгебраических задач, а **проблема 3** – к умножению матрицы масс с двух сторон на соответствующие численные решения **проблем 1 и 2**. Следуя теории \mathbf{R} -матрицы [1] и используя краевые условия третьего рода (7) и асимптотические разложения решений (10), **проблема 5** редуцируется к решению алгебраических задач относительно искомым матрицы логарифмических производных решений $\mathbf{R} \equiv \mathbf{R}(r_2)$, матрицы реакции \mathbf{K} и решений $\Phi(r)$.

Во всех случаях матрицы жесткости и масс являются симметричными и имеют блочно-ленточную структуру с наибольшими по модулю диагональными элементами (с максимальной шириной ленты $j_{\max} \times (p + 1)$), что обеспечивает устойчивость численного процесса решения соответствующих алгебраических задач и значительную экономию компьютерных ресурсов. Это позволяет существенно увеличить число решаемых дифференциальных уравнений системы (6), и тем самым, повысить точность аппроксимации численного решения исходных краевых многомерных задач. Отсюда вытекает основное требование к построению экономичных вычислительных схем – использовать численные методы, которые не требуют больших ресурсов оперативной памяти компьютера. С этой целью для решения алгебраических задач использовались $\mathbf{L D L}^T$ факторизация матрицы жесткости и метод обратной подстановки [17]. Поскольку нижняя треугольная матрица \mathbf{L} полностью сохраняет блочно-ленточную структуру, то такая факторизация не требует больших объемов оперативной памяти компьютера.

При решении обобщенной задачи на собственные значения большой размерности, для вычисления относительно небольшого числа j_{\max} собственных значений и соответствующих им собственных функций **проблем 1 и 4** использовался метод итераций в подпространстве. Этот метод удобен потому, что на каждом шаге для выбранного подпространства решается обобщенная задача на собственные значения существенно меньшей размерности, чем размерность исходной матрицы. По этой причине этот метод не требует больших объемов оперативной памяти компьютера. Для вычисления собственных значений в подпространстве применялась барьер-

ная модификация обобщенного метода Якоби, в которой число операций существенно меньше, чем в стандартной версии этого метода [18]. Следует отметить, что редукция **проблемы 5** к алгебраическим задачам позволяет избежать решения обобщенной задачи на собственные значения большой размерности методом итераций и дает существенную экономию вычислительных затрат времени.

Результаты первой главы опубликованы в работах [ОЧ1, ОЧ7, ОЧ10].

Глава 2 посвящена описанию построенных симметричных неявных операторно-разностных многослойных схем⁷ численного решения начально-краевой многомерной задачи шредингеровского типа. Имеется два основных требования для численных методов, которые применяются на практике при численном решении такой задачи: они должны быть устойчивыми и обеспечивать высокую точность дискретизации задачи как по временной, так и по пространственным переменным. В этом отношении методы расщепления имеют важные преимущества: унитарность эволюционного оператора сохраняет норму волнового пакета и гарантирует сохранение вероятности и безусловной стабильности метода [19]. В качестве первого шага для решения этой проблемы в работе [20] были построены неявные операторные схемы до шестого порядка точности по временной переменной на основе разложения Магнуса унитарного оператора эволюции и унитарной аппроксимации Паде. Следует отметить, что эти схемы содержат кроме симметричного оператора, еще и антисимметричный оператор, начиная с четвертого порядка аппроксимации, т. е. при численной реализации таких схем требуется решение систем алгебраических уравнений с несимметричными комплексными матрицами. Поэтому построение более экономичных и устойчивых симметричных операторных схем, адаптированных для аппроксимации волнового пакета МК и МКЭ по пространственным переменным – актуальная проблема, решаемая ниже.

В параграфе 2.1 представлена схема построения симметричных неявных операторных схем численного решения начально-краевой задачи для нестационарного уравнения Шредингера на конечном интервале $t \in [t_0, T]$:

$$i \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H(t)\Psi(t), \quad H(t) = H_0 + f(t), \quad \Psi(t_0) = \Psi_0. \quad (13)$$

Здесь H_0 – положительно-определенный, линейный самосопряженный оператор, не зависящий от времени, а функция $f(t)$ имеет ограниченные производные по временной переменной t до порядка $2M$ при $M = 1 \div 3$.

Для численного решения начально-краевой задачи (13) используется равномерная сетка $\Omega_\tau[t_0, T] = \{t_0, t_{k+1} = t_k + \tau, t_K = T\}$ с шагом τ по временной переменной t . Предполагается, что на каждом интервале $[t_k, t_{k+1}]$

⁷ Далее мы будем называть их операторными схемами.

справедливы следующие оценки:

$$\begin{aligned} \left\| (adH(\tau_s)) \cdots (adH(\tau_1)) \frac{\partial^m f(\tau_0)}{\partial t^m} \psi \right\| &\leq C_1 \|H_0^{s/2} \psi\|, \\ \tau \|H_0^{1/2}\| &< C_2, \quad \|\psi\| \leq \|H_0 \psi\|, \quad \psi \in D(H_0^{2M+1}), \end{aligned} \quad (14)$$

где $\tau_i \in [t_k, t_{k+1}]$, $i = 0 \div s \leq 2M$; $m = 0 \div 2M$; C_1, C_2 – положительные константы, не зависящие от шага τ . Здесь линейный оператор $(adA) : \mathcal{L}(Y) \rightarrow \mathcal{L}(Y)$ ($\mathcal{L}(Y)$ – пространство линейных операторов) определен для операторов $A, B \in \mathcal{L}(Y)$ в виде $(adA)B = AB - BA$ и обладает следующими свойствами: $(adA)^0 B = B$, $(adA)^j B = (adA)^{j-1} (adA)B$.

Численное решение $\Psi(t_{k+1})$ определяется как образ решения $\Psi(t_k)$ с помощью унитарного оператора эволюции $U(t_{k+1}, t_k)$ [20]

$$\Psi(t_{k+1}) = U(t_{k+1}, t_k) \Psi(t_k), \quad U(t_{k+1}, t_k) = \exp_M \left(-i\tau A_k^{(M)} \right) + O(\tau^{2M+1}). \quad (15)$$

Здесь $A_k^{(M)} = \hat{A}_k^{(M)} + i\check{A}_k^{(M)}$ – эффективные операторы явного разложения Магнуса унитарного оператора эволюции до порядка $O(\tau^{2M})$ в момент времени $t_c = t_k + \tau/2$, которые выражаются через производные исходного оператора $H(t)$; $\hat{A}_k^{(M)}$ – симметричные операторы; $\check{A}_k^{(M)}$ – антисимметричные операторы (в частности $\check{A}_k^{(1)} \equiv 0$); $\exp_M(B) = [M/M]$ аппроксимация Паде оператора $\exp(B)$.

Для вывода симметричных неявных операторных схем при $M = 2, 3$ использовалась последовательность операторных преобразований $\psi = \exp \left(iS_k^{(M)} \right) \Psi(t_k)$ с искомыми симметричными операторами $S_k^{(M)}$. Такая процедура позволяет на каждом интервале $[t_k, t_{k+1}]$ исключить антисимметричные операторы $\check{A}_k^{(M)}$ с точностью до порядка $O(\tau^{2M})$ и вычислить в явном виде новые симметричные операторы $\tilde{A}_k^{(M)}$:

$$\tilde{A}_k^{(M)} = \exp \left(iS_k^{(M)} \right) A_k^{(M)} \exp \left(-iS_k^{(M)} \right) + O(\tau^{2M}). \quad (16)$$

Начиная с $M = 2$, операторы $S_k^{(M)}$ зависят от шага τ квадратично. Поэтому оператор $\exp_1 \left(\pm iS_k^{(M)} \right) = \exp \left(\pm iS_k^{(M)} \right) + O(\tau^6)$ уже имеет требуемый порядок аппроксимации. В результате построены новые симметричные неявные операторные схемы

$$\Psi(t_{k+1}) = \exp_1 \left(-iS_k^{(M)} \right) \exp_M \left(-i\tau \tilde{A}_k^{(M)} \right) \exp_1 \left(iS_k^{(M)} \right) \Psi(t_k). \quad (17)$$

Они обобщают симметричную схему Кранка-Николсона [21] до шестого порядка точности, $2M = 6$, по шагу τ временной переменной t .

Автором доказано, что имеет место следующая оценка:

Теорема 1. Пусть на каждом интервале $[t_k, t_{k+1}]$ равномерной сетки $\Omega_\tau[t_0, T]$ выполняются условия (14). Тогда при достаточно малом τ справедлива следующая оценка для погрешности аппроксимации

$$\|\Psi_{ext}(t_{k+1}) - \Psi(t_{k+1})\| \leq C\tau^{2M}(t_{k+1} - t_0) \max_{t_0 \leq t \leq t_{k+1}} \|H_0^{2M+1}\Psi_{ext}(t)\|, \quad (18)$$

где $\Psi_{ext}(t_{k+1})$ – точное решение начально-краевой задачи (13), а C – положительная константа, не зависящая от τ и M .

В параграфе 2.2 приведена схема редукции МК симметричных неявных операторных схем численного решения начально-краевой многомерной задачи шредингеровского типа на конечном интервале $t \in [t_0, T]$:

$$i\frac{\partial\Psi(r, \Omega, t)}{\partial t} = (H(r, \Omega) + f(r, \Omega, t))\Psi(r, \Omega, t), \quad \Psi(r, \Omega, t_0) = \Psi_0(r, \Omega), \quad (19)$$

где $H(r, \Omega)$ – оператора в (1). Искомое решение $\Psi(r, \Omega, t) \in \mathbf{L}_2(X \otimes [t_0, T])$ подчиняется краевым условиям первого и (или) второго рода (2) при каждом $t \in [t_0, T]$. Предполагается, что выполнены условия теоремы 1, а функции $U(r, \Omega)$, $f(r, \Omega, t)$ имеют непрерывные и ограниченные частные производные по временной и пространственным переменным до порядка $2M$ при всех $(r, \Omega) \in X$, $t \in [t_0, T]$.

В МК решение $\Psi(r, \Omega, t)$ при каждом значении $t \in [t_0, T]$ ищется в виде разложения (3) по однопараметрическому набору базисных функций $\{\psi_j(\Omega; r)\}_{j=1}^{j_{\max}}$ задачи (4). После подстановки разложения (3) в уравнение (19) и умножения слева на функции $\psi_j(\Omega; r)$ с последующим интегрированием в области \hat{X} , задача (19) сводится к системе из j_{\max} дифференциальных уравнений в частных производных

$$i\frac{\partial\chi(r, t)}{\partial t} = (\mathbf{H}(r) + \mathbf{Z}(r, t))\chi(r, t), \quad \chi^0(r) = \chi(r, t_0), \quad (20)$$

$$Z_{ij}(r, t) = \int_{\hat{X}} \psi_i(\Omega; r)f(r, \Omega, t)\psi_j(\Omega; r)d\Omega$$

с краевыми условиями первого и (или) второго рода (7) при каждом $t \in [t_0, T]$. Начальные условия $\chi_j^0(r)$ вычисляются как

$$\chi_j^0(r) = \int_{\hat{X}} \psi_j(\Omega; r)\Psi_0(r, \Omega)d\Omega. \quad (21)$$

Таким образом, для реализации МК необходимо разработать эффективную вычислительную схему для решения еще одной проблемы 6.

- **Проблема 6.** Решение системы дифференциальных уравнений в частных производных с краевыми условиями первого и (или) второго рода по пространственной переменной r .

Применение симметричных неявных операторных схем (15) при $M = 1$ и (17) при $M = 2, 3$ на каждом интервале $[t_k, t_{k+1}]$ равномерной сетки $\Omega_\tau[t_0, T]$ для системы уравнений (20), (21) сводит ее, соответственно, к последовательности одной, четырех и пяти неоднородных краевых задач для системы самосопряженных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по пространственной переменной r . Эти системы как и система (6) содержат дополнительный самосопряженный оператор. Поэтому для численного решения этих задач использовались дискретизация МКЭ и методы решения алгебраических задач из главы 1.

Результаты второй главы опубликованы в работах [ОЧ8, ОЧ9, ОЧ17].

Глава 3 посвящена описанию проблемно-ориентированных комплексов программ, использовавшихся для численного анализа перечисленных в главах 1 и 2 **проблем 1–6**.

Комплексы программ KANTBP, TIME6T и ODPEVP ориентированы на численное решение краевых и начально-краевых многомерных задач шредингеровского типа МК. Они также применимы для данного класса задач и в рамках стандартных проекционных методов. Программа POTHMF специально ориентирована для анализа моделей физических процессов, рассматриваемых в главах 4 и 5. С целью экономии оперативной памяти компьютера во всех программах используются динамическое распределение оперативной памяти в виде одномерных массивов и виртуальной памяти. На Рис. 1 показана структурно-функциональная схема решения **проблем 1–6** в рамках соответствующих вариационных формулировок и вычислительных схем, представленных в главах 1 и 2.

В *параграфе 3.1* дано описание комплекса программ KANTBP для численного решения **проблем 4 и 5**. Построенная численная схема обеспечивает доказанные в [11] оценки следующих погрешностей численного решения на неравномерной сетке $\Omega_{r_n}^p[r_1, r_2]$:

$$|E_j - E_j^h| \leq c_1 h^{2p}, \quad \|\chi_j(r) - \chi_j^h\|_0 \leq c_2 h^{p+1}, \quad (22)$$

где E_j и $\chi_j(r) \in \mathcal{H}^2$ – искомые собственные значения и соответствующие собственные функции задачи на связанные состояния; E_j^h и $\chi_j^h \in \mathcal{H}^1$ – соответствующие численные решения; h – максимальный шаг конечноэлементной сетки $\Omega_{r_n}^p[r_1, r_2]$; p – порядок аппроксимации; а c_1 и c_2 – положительные константы, не зависящие от h и p . Подобные оценки верны также для численного решения многоканальной задачи рассеяния, где λ_j^h – собственные значения матрицы реакции, а χ_j^h – соответствующие собственные функции.

Приведенные тестовые расчеты, демонстрируют скорость сходимости разложения МК по числу базисных функций при вычислении значений энергии, длины рассеяния и матрицы реакции интегрируемой модели

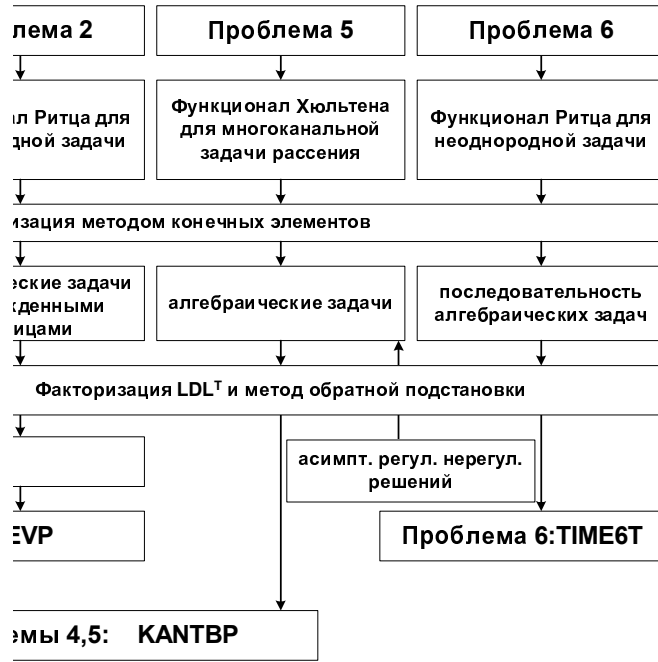


Рис. 1. Структурно-функциональная схема решения проблем 1–6.

трех тождественных бозонов на прямой с парными потенциалами взаимодействия нулевого радиуса. Модельными расчетами показано строгое соответствие численных оценок теоретическим для построенных схем до пятого порядка точности по шагу h конечноэлементной сетки $\Omega_{r_h}^p[r_1, r_2]$.

В параграфе 3.2 дано описание комплекса программ TIME6T для численного решения **проблемы 6**. В рамках МКЭ на конечно-элементной сетке $\Omega_{r_h}^p[r_1, r_2]$ между точным $\chi(r, t_k)$ и приближенным χ_k^h решениями имеет место оценка погрешности (22). Приведены тестовые расчеты, демонстрирующие эффективность и устойчивость построенных схем (17) путем численного анализа интегрируемых моделей одномерного осциллятора с частотой, зависящей от времени, и двумерного осциллятора во внешнем поле, зависящем от времени. В итоге модельных расчетов показано строгое соответствие численных оценок теоретическим для построенных схем второго, четвертого и шестого порядка точности относительно шага равномерной сетки по временной переменной и восьмого порядка точности относительно шага неравномерной сетки по пространственной переменной. Выполнено численное исследование скорости сходимости разложения волнового пакета по числу базисных функций.

В параграфе 3.3 дано описание комплекса программ ODPEVP в рамках **проблем 1–3** для численного решения однопараметрической задачи

Штурма–Лиувилля на конечном интервале $z \in \bar{\Omega}_z = (z_1, z_2)$:

$$\left(-\frac{1}{g_1(z)} \frac{d}{dz} g_2(z) \frac{d}{dz} + U(r, z) \right) \psi_j(z; r) = \epsilon_j(r) \psi_j(z; r). \quad (23)$$

Здесь $r \in \Omega_r = [r_1, r_2]$ – вещественный параметр, $\epsilon_j(r)$ – собственные значения, зависящие от параметра r . Предполагается, что функции $g_1(z) > 0$, $g_2(z) > 0$, $d_z g_2(z)$, $U(r, z)$ и $\partial_r U(r, z)$ – непрерывны и ограничены при всех $z \in \bar{\Omega}_z$ и $r \in \Omega_r$. Параметрические собственные функции $\psi_j(z; r)$ подчиняются краевым условиям третьего рода на концах интервала $z \in \bar{\Omega}_z$:

$$a_l g_2(z) \frac{d\psi_j(z; r)}{dz} + b_l(r) \psi_j(z; r) = 0, \quad z = z_l, \quad l = 1, 2, \quad (24)$$

и удовлетворяют условию нормировки

$$\|\psi_j(z; r)\|_0 = 1, \quad \|v(z)\|_0^2 = \int_{z_1}^{z_2} g_1(z) v(z)^2 dz. \quad (25)$$

Здесь $a_1 \geq 0$, $a_2 \geq 0$ – вещественные константы, функции $b_1(r) \leq 0$, $b_2(r) \geq 0$, $\partial_r b_1(r)$ и $\partial_r b_2(r)$ – непрерывны и ограничены при $r \in \Omega_r$, $a_l^2 + b_l^2(r) \neq 0$.

Представлен экономичный алгоритм вычисления с заданной точностью набора j_{\max} собственных значений, собственных функций и их первых производных по параметру r и интегралов

$$P_{ij}(r) = \int_{z_1}^{z_2} g_1(z) \frac{\partial \psi_i(z; r)}{\partial r} \frac{\partial \psi_j(z; r)}{\partial r} dz, \quad Q_{ij}(r) = - \int_{z_1}^{z_2} g_1(z) \psi_i(z; r) \frac{\partial \psi_j(z; r)}{\partial r} dz. \quad (26)$$

Для вычисления конечного набора собственных значений, начиная с наименьшего, в рамках метода итераций в подпространстве требуется положительная определенность матрицы жесткости. Кроме того, для экономии числа итераций нужно задать нижний сдвиг спектра для наименьшего собственного значения. Рассматриваемый в диссертации класс задач не предполагает положительную определенность матрицы жесткости. Поэтому автором предложен и апробирован специальный алгоритм для нахождения нижней границы наименьшего собственного значения как для положительно определенных, так и неположительно определенных матриц жесткости. Этот алгоритм позволяет автоматически определить сдвиг спектра и сэкономить число итераций при вычислении набора приближенных решений применяемым методом итераций в подпространстве.

В МКЭ для численного решения ϵ_j^h и ψ_j^h доказаны следующие оценки погрешностей [11]:

$$|\epsilon_j(r) - \epsilon_j^h| \leq c_1 h^{2p}, \quad \|\psi_j(z; r) - \psi_j^h\|_0 \leq c_2 h^{p+1}, \quad (27)$$

где $\epsilon_j(r)$ и $\psi_j(z; r) \in \mathcal{H}^2$ – точные решения; ϵ_j^h и $\psi_j^h \in \mathcal{H}^1$ – соответствующие численные решения; h – максимальный шаг конечноэлементной сетки $\Omega_{z_h}^p [z_{\min}, z_{\max}]$; p – порядок аппроксимации; c_1 и c_2 – положительные константы, не зависящие от h и p .

Автором доказана следующая теорема.

Теорема 2. *При заданном значении параметра r погрешности аппроксимаций первой производной по параметру от собственных значений, собственных функций краевой задачи (23)–(25) и интегралов (26) ограничены неравенствами:*

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial \epsilon_j(r)}{\partial r} - \frac{\partial \epsilon_j^h}{\partial r} \right| &\leq c_3 h^{2p}, \quad \left\| \frac{\partial \psi_j(z; r)}{\partial r} - \frac{\partial \psi_j^h}{\partial r} \right\|_0 \leq c_4 h^{p+1}, \\ |Q_{ij}(r) - Q_{ij}^h| &\leq c_5 h^{2p}, \quad |P_{ij}(r) - P_{ij}^h| \leq c_6 h^{2p}, \end{aligned} \quad (28)$$

где $\partial_r \epsilon_j(r)$ и $\partial_r \psi_j(z; r) \in \mathcal{H}^2$, $Q_{ij}(r)$ и $P_{ij}(r)$ – точные функции; $\partial_r \epsilon_j^h$ и $\partial_r \psi_j^h \in \mathcal{H}^1$, Q_{ij}^h и P_{ij}^h – соответствующие численные значения; c_3 , c_4 , c_5 и c_6 – положительные константы, не зависящие от h и p .

Таким образом, представленные выше комплексы программ KAN-TBP, TIME6T и ODPEVP позволяют решать с заданной точностью краевую и начально-краевую задач для двумерного уравнения в частных производных эллиптического типа в рамках МК с дискретизацией последовательности краевых задач МКЭ.

В параграфе 3.4 дано описание комплекса программ ROTHMF численного решения **проблем 1–3** для угловых сплюснутых сфероидальных функций [22]. При небольших значениях параметра $r \in [r_1, r_{\text{match}})$ собственные функции ищутся в виде разложений по нормированным полиномам Лежандра [22] с неизвестными коэффициентами $c_s(r)$, где $0 \leq s \leq s_{\text{max}}$. В данном подходе исходная краевая задача сводится к алгебраической задаче на собственные значения с трехдиагональной матрицей. Для экономии затрат счетного времени построен алгоритм вычисления для значения параметра $r \in [0, r_{\text{match}})$, оптимального значения числа s_{max} членов разложения при достижении относительной точности $\text{eps} = 2^{-52} \approx 2 \cdot 10^{-16}$ (арифметика двойной точности). При больших значениях параметра r собственные функции ищутся в виде разложений по нормированным полиномам Лагерра [22] с неизвестными коэффициентами $d_l(r)$, где $0 \leq l \leq l_{\text{max}}$. Построены асимптотические разложения решений и матричных элементов до порядка $O(r^{-16})$ при $l_{\text{max}} = 16$, с помощью которых программа автоматически вычисляет значения точки сшивки r_{match} для вычисляемого набора j_{max} решений при заданной точности eps .

Результаты третьей главы опубликованы в работах [ОЧ2, ОЧ3, ОЧ4, ОЧ5, ОЧ12, ОЧ17].

Глава 4 посвящена численному анализу математических моделей физических процессов фотоионизации и рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле под воздействием лазерного излучения. Динамика этих процессов описывается волновыми функциями дискретного и непрерывного спектра трехмерного ($d = 3$) стационарного уравнения Шредингера. Потенциальная функция определяется суммой притягивающего кулоновского и поперечного осцилляторного потенциалов:

$$U = U_c + U_{osc} = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} + \frac{\gamma^2}{8}(x^2 + y^2). \quad (29)$$

Здесь $\gamma = \mathcal{H}/\mathcal{H}_0$ – безразмерный параметр ($\mathcal{H}_0 \cong 2.35 \times 10^5$ Тл), который определяет напряженность магнитного поля \mathcal{H} . Поэтому в начале системы координат доминирует кулоновский потенциал U_c , а в асимптотической области – осцилляторный потенциал U_{osc} . Следовательно, волновые функции дискретного и непрерывного спектра имеют соответственно в окрестности начала системы координат сферическую симметрию, а в асимптотической области – цилиндрическую. Расчеты сечения фотоионизации и рекомбинации выполнены при малых напряженностях магнитного поля $\mathcal{H} \sim 6$ Тл ($\gamma \sim 10^{-5}$), доступных в лабораторных условиях.

В параграфе 4.1 дана постановка краевой задачи в цилиндрических координатах, которые согласованы с асимптотиками асимптотических состояний многоканальной задачи рассеяния. Приведены тестовые расчеты энергий связанных состояний в зависимости от числа уравнений при сильном магнитном поле ($\gamma \geq 0.1$). Для этого использовались комплексы программ KANTVP и ODPEVP. Численные результаты показали низкую скорость сходимости энергии по числу базисных функций. Это явилось следствием того, что краевое условие третьего рода типа Като [23] в окрестности точки парного удара для волновой функции не выполняется.

Поэтому в параграфе 4.2 дана переформулировка краевой задачи в сферических координатах. Базисные функции являются параметрическими угловыми сплюснутыми сфероидальными функциями. Показано, что при увеличении значения радиальной переменной сферически-симметричные базисные функции непрерывно переходят в цилиндрически-симметричные базисные функции, и, следовательно, учитывают оба типа симметрии краевой задачи. Отметим, что в рамках проекционного метода обычно используются базисные функции, составленные из двух наборов вариационных функций в цилиндрических и сферических координатах. Они учитывают оба типа симметрии задачи. Однако неортогональность базисных функций приводит к алгебраическим задачам с плохо обусловленными

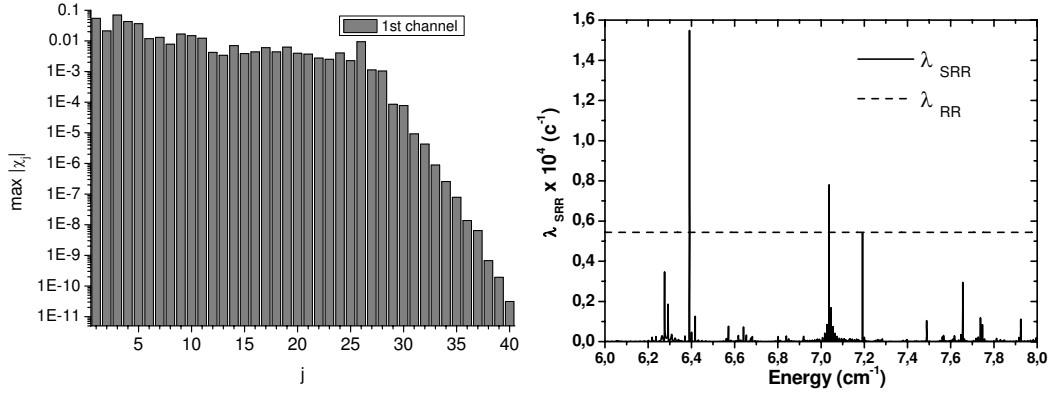


Рис. 2. Слева: абсолютные максимумы компонент решений $\chi_j(r)$ при $E = 6.0 \text{ см}^{-1}$, $\mathcal{H} = 6.1 \text{ Тл}$ и $j_{\text{max}} = 40$. Справа: зависимости скорости рекомбинации λ_{SRR} и λ_{RR} от энергии E при $\mathcal{H} = 6.1 \text{ Тл}$ и $\mathbf{H} = 0 \text{ Тл}$.

матрицами при увеличении числа базисных функций с уменьшением γ . Поэтому в случае $\gamma < 0.01$ этим методом расчет не выполнялся [5].

В параграфе 4.3 выполнена редукция исходной краевой задачи (1) с потенциалом (29) к системе радиальных обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами. В рамках **проблемы 5** построены асимптотические разложения регулярных и нерегулярных решений (10) системы радиальных уравнений (6) при больших значениях радиальной переменной с точностью до порядка $O(r^{-16})$ с выделением ведущих асимптотик в виде регулярных и нерегулярных кулоновских функций [22]. Показано, что именно такое представление дает возможность существенно уменьшить интервал области интегрирования по радиальной переменной r на порядок (например, с 10000 до 1000 а.е. в зависимости от близости значения энергии E к пороговому значению), по сравнению с традиционным выделением лишь ведущих кулоновских асимптотик. В результате удалось достичь существенной экономии вычислительных ресурсов компьютера. Этот алгоритм реализован в виде встроенной подпрограммы ASYMFN в программе POTHMF и может использоваться также в программе KANTBP. Подпрограмма ASYMFN предварительно информирует пользователя о рекомендуемом значении r_2 при достижении относительной точности $\text{eps} = 10^{-14}$ в зависимости от выбранного значения энергии E до выполнения основных процедур программы KANTBP.

В параграфе 4.4 приведены соотношения между асимптотическими разложениями решений многоканальной задачи рассеяния в сферических и цилиндрических координатах при больших значениях радиальной переменной. Эти соотношения необходимы для вычисления матриц коэффици-

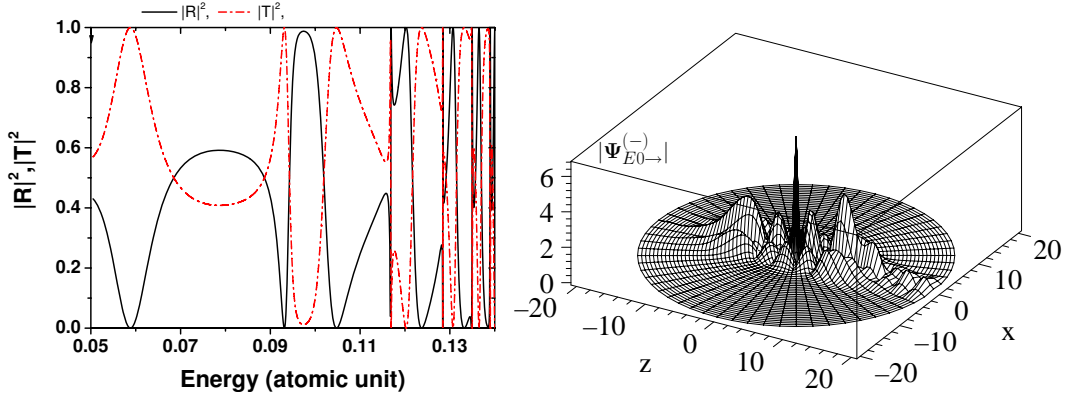


Рис. 3. Слева: коэффициенты прохождения $|\hat{T}|^2$ и отражения $|\hat{R}|^2$ в зависимости от энергии E при $\gamma = 0.1$. Справа: профиль абсолютного значения волновой функции $|\Psi|$, демонстрирующий полное отражение $|\hat{R}|^2 = 1$ при резонансном значении энергии $E = 0.11692$ а.е.

ентов прохождения и отражения через матрицу реакций.

В параграфе 4.5 представлен анализ результатов расчетов процессов фотоионизации и рекомбинации полученных с помощью комплексов программ KANTBP и ROTNMF, демонстрирующий также высокую скорость сходимости разложения МК по числу базисных функций при вычислении значений энергии, матрицы реакции и соответствующих волновых функций дискретного и непрерывного спектров.

На Рис. 2 (слева) показаны значения абсолютных максимумов компонент радиальных решений $\chi_j(r)$ при $\mathcal{H} = 6.1$ Тл ($\gamma = 2.595 \times 10^{-5}$) и $E = 6$ см $^{-1}$, подтверждающие скорость сходимости порядка j^{-5} разложения (3), начиная с $j = 28$. Расчеты сечения фотоионизации и скорости индуцированной радиационной рекомбинации выполнялись с шагом по энергии 5×10^{-4} см $^{-1}$ во всем интервале, за исключением окрестностей пиков, где шаг выбирался равным 5×10^{-6} см $^{-1}$.

На Рис. 2 (справа) показана зависимость скорости лазерно-стимулированной рекомбинации на один антипротон λ_{SRR} по отношению к начальной энергии позитрона E . В этом случае рекомбинация может быть стимулирована титан-сапфировым лазером с частотой электромагнитной волны $\omega = E - E_{Nlm}$, при условиях типичных для позитрон-антипротоновой плазмы в магнитной ловушке [24]. Для сравнения горизонтальной штриховой линией показана скорость λ_{RR} спонтанной радиационной рекомбинации во все состояния мультиплета с $N = 3$, которая при выбранной интенсивности $I = 24$ Вт/см 2 лазерного излучения равна скорости лазерно-стимулированного перехода без магнитного поля [24]. Из рисунка видно, что имеют

место узкие резонансы, для которых скорость рекомбинации в состоянии с фиксированным $l = 0$, $m = 0$ в магнитном поле значительно выше, чем скорость рекомбинации во все девять состояний с различными l и m , возможными при $N = 3$ без магнитного поля. Данные оценки указывают на возможность повышения эффективности лазерно-стимулированной рекомбинации при оптимальном подборе частоты лазера и напряженности магнитного поля.

В результате проведенного численного исследования, впервые предсказаны эффекты резонансного прохождения ($|\hat{\mathbf{T}}|^2 = 1$) и полного отражения ($|\hat{\mathbf{R}}|^2 = 1$) разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле (см. Рис. 3), которые имеют принципиальное значение для расчета кинетики плазмы в магнитно-оптической ловушке.

Результаты четвертой главы опубликованы в работах [ОЧ13, ОЧ14, ОЧ15, ОЧ16].

Глава 5 посвящена численному анализу математических моделей физических процессов возбуждения и девозбуждения волнового пакета атома водорода в однородном магнитном поле под воздействием последовательности периодических сверхкоротких лазерных импульсов. Динамика этих процессов описывается волновыми функциями трехмерного нестационарного уравнения Шредингера. Потенциальная функция, независимая от времени, определяется формулой (29) как и в главе 4. Расчеты выполнялись при лабораторных значениях напряженности импульса электрического поля $F = 2 \times 10^{-3}$ а.е., направленного вдоль оси z лабораторной системы координат [6].

В параграфе 5.1 дана постановка начально-краевой задачи в сферических координатах по пространственным переменным.

В параграфе 5.2 выполнена редукция исходной начально-краевой задачи (19) к системе дифференциальных уравнений в частных производных (20) и (21). В рамках МК базисные функции являются параметрическими угловыми сплюснутыми сфероидальными функциями главы 4.

В параграфе 5.3 представлен анализ результатов расчетов эволюции населенностей возбужденных состояний в рассматриваемой модели, полученных с помощью комплексов программ TIME6T и ROTNMF. Расчеты демонстрируют также высокую эффективность МК и экономичность построенных симметричных неявных операторных схем (17). Полученные результаты в отсутствие магнитного поля ($\gamma = 0$) хорошо согласуются с результатами работы [6], где использовались разложение волнового пакета по угловым сферическим функциям и аппроксимация МКЭ по радиальной переменной с лагранжевыми элементами третьего порядка и схема Кранка-Николсона по временной переменной. При этом теоретические оценки экономичности схемы шестого порядка точности ($M = 3$) по вре-

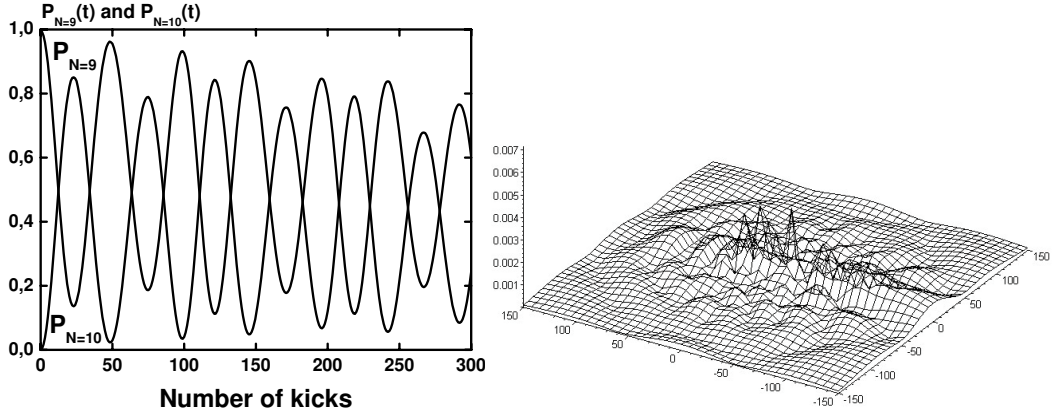


Рис. 4. Слева: населенность состояний $P_N(sT)$ с $N = 9$ и $N = 10$ для начального магнитного состояния $|N = 9, N_r = 0, m = 0\rangle$ в зависимости от номера s импульса электрического поля. Справа: соответствующий фрагмент эволюции зеemanовского волнового пакета в момент времени $25T$.

менной переменной были подтверждены результатами расчетов с заданной точностью на сетке с шагом $\tau \sim \sqrt[2M]{F} < 1$ при существенно меньших вычислительных затратах времени (~ 20 раз), по сравнению с применением схемы Кранка-Николсона ($M = 1$) с шагом τ^3 .

Исследованы возможность реализации резонансного режима эволюции зеemanовских состояний при лабораторных значениях магнитного поля $\mathcal{H} \sim 3.5$ Тл ($\gamma \sim 10^{-5}$). На Рис. 4 (слева) показана эволюция населенности состояний $P_{N=9}(t)$ и $P_{N=10}(t)$, т. е. переходов между двумя состояниями $N = 9$ и $N = 10$ в зависимости от числа импульсов s в моменты времени $t = sT$ для начального вибрационного зеemanовского состояния $|N = 9, N_r = 0, m = 0\rangle$. Начальное состояние, соответствующее минимальной поправке к энергии свободного атома водорода в состоянии $N = 9$, вычислялось с помощью программы KANTBP. Согласно условию $T_N = 2\pi/[1/2N^2 - 1/2(N+1)^2]$ период импульса равен $T = 5357$ а.е. Максимальное число импульсов равно $S = 300$, т. е. задача решалась на большом временном интервале $[0, TS] \cong [0, 1.6 \times 10^6]$.

В результате численного анализа доказана возможность стабилизации зеemanовского волнового пакета в конечной области координатного пространства и контроля населенностей вариацией магнитного поля.

Результаты пятой главы опубликованы в работах [ОЧ17, ОЧ18].

Глава 6 посвящена анализу моделей однократных и двукратных процессов, при которых происходит ионизация атома гелия, молекулярного иона и молекулы водорода и азота электронным ударом в современных

экспериментах, выполненных в Лаборатории атомных и молекулярных столкновений (г. Орсэ, Франция). Для этого специально построены новые модифицированные кулоновские функции конечного состояния непрерывного спектра одного или двух электронов, учитывающие двухцентровые эффекты взаимодействия с зарядами ядер молекулы. Созданы экономичные алгоритмы и проблемно-ориентированные комплексы программ вычисления многократных интегралов, определяющих сечения ионизации электронным ударом, с использованием этих пробных функций и с применением технологии распараллеливания вычислений. Во всех представленных ниже результатах использовались волновые функции начального состояния дискретного спектра в виде разложений по набору экспоненциальных базисных функций [25, 26].

В параграфе 6.1 сформулированы в рамках первого борновского приближения математические модели однократной и двукратной ионизации молекулы и их ионов электронным ударом.

В параграфе 6.2 построен алгоритм для вычисления волновой функции, описывающей движение испущенного электрона в поле двух кулоновских центров. Функция представлена произведением двух модифицированных по второму аргументу кулоновских функций непрерывного спектра. Преимущество такой функции в том, что модифицированные аргументы используются как нелинейные параметры, которые можно задать из условия стационарности подходящего вариационного функционала или из аппроксимации экспериментального сечения ионизации.

В параграфе 6.3 представлен анализ расчетов сечений ионизации иона водорода электронным ударом. Показана эффективность применения построенных функций при вычислении сечения ионизации по сравнению с обрезанным полным набором численных парциальных двухцентровых кулоновских функций, по которому разлагается плоская волна в направлении испущенного электрона [27]. Последний метод вычисления дает правильные результаты для ионизации молекулярного иона водорода, но его применение с ростом значения переданного импульса требует существенного увеличения набора парциальных функций, что в случае двухэлектронных молекул приводит к значительным затратам вычислительных ресурсов компьютера. Возникающие при расчете многократные интегралы от произведения построенных пробных и экспоненциальных базисных функций сводятся с преобразованием Фурье к трехкратным интегралам, содержащим произведения комплексных гипергеометрических функций ${}_2F_1(a, 2; c, x)$. Для их вычисления автором специально предложен и разработан эффективный алгоритм. Этот алгоритм позволяет сэкономить время вычисления многократных интегралов, ядро которых содержит гипергеометрические функции, примерно в 10–60 раз (в зависи-

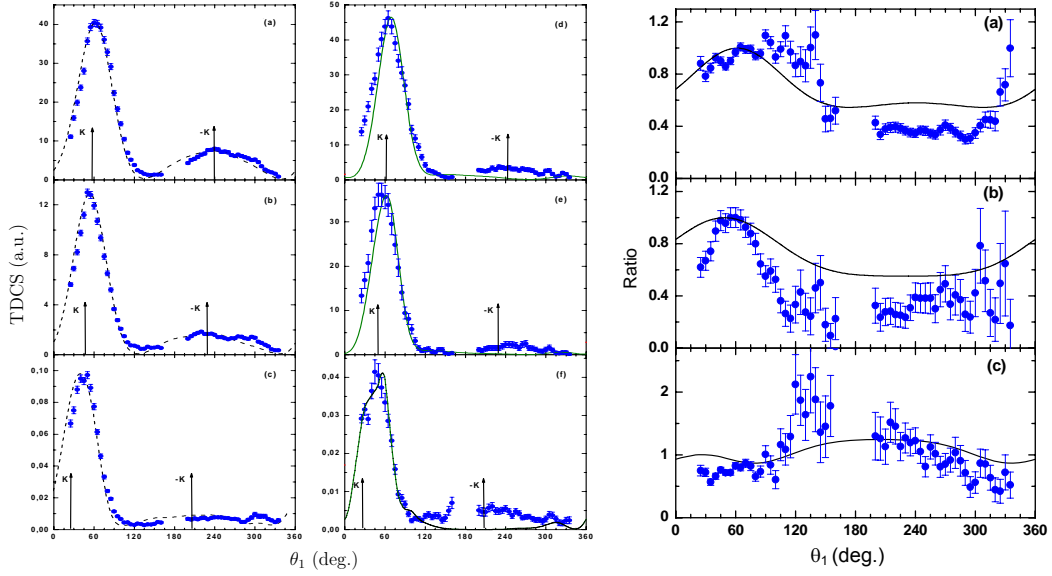


Рис. 5. Слева: сечения ионизации атома гелия и молекулы водорода как функции угла вылета испущенного электрона θ_1 . Справа: кружки – отношение экспериментальных дифференциальных сечений R . Сплошная линия – интерференционный фактор [29]. Экспериментальные данные взяты из работы [ОЧ19] при значениях энергии $E_1 = 37$ эВ (a,d), 74 эВ (b,e) и 205 эВ (c,f).

мости от точности вычисления $10^{-4} - 10^{-14}$) по сравнению с известной программой HYPGEO [28]. Авторский алгоритм реализован в программе ZHYPG2. Для расчетов сечений ионизации также использовались авторские комплексы программ INFUN, INTEG и OUTFUN.

В параграфах 6.4, 6.5 и 6.6 построенная волновая функция и ее модификации использованы для расчетов сечений ионизации молекулы водорода и азота при больших значениях начальной энергии (до 2000 эВ). Выполнен анализ и достигнуто хорошее описание современных экспериментальных данных. Теоретические исследования однократной ионизации молекулы водорода [29] доказали, что угловое распределение испущенных электронов демонстрирует интерференционную структуру, являющуюся следствием когерентного влияния двух молекулярных центров. Показано, что интерференционная структура наблюдается в угловом распределении сечения даже после усреднения по ориентации молекулы: дифференциальное сечение $\sigma_{e2e}(\text{H}_2)$ для молекулы водорода отличается от сечения $\sigma_{e2e}(\text{H})$ для атома водорода наличием интерференционного фактора $\sigma_{e2e}(\text{H}_2) = 2\mathcal{F}\sigma_{e2e}(\text{H})$, $\mathcal{F} = 1 + \sin(\rho k_{\text{rec}})/(\rho k_{\text{rec}})$, где значение параметра $\rho = 1.4$ а.е. интерпретируется как равновесное расстояние между ядрами

в молекуле водорода, а k_{rec} – импульс отдачи.

В итоге обработки экспериментальных данных и теоретических исследований, выполненных при участии автора, впервые выявлены двухцентровые интерференционные эффекты, которые определяются отношением $\mathcal{R} = \sigma_{e2e}(\text{H}_2)/\sigma_{e2e}(\text{He})$ вычисленных дифференциальных сечений ионизации молекулы водорода и атома гелия как в зависимости от угловых переменных, так и от энергии испущенного электрона и хорошо описывают поведение отношения соответствующих экспериментальных сечений.

На Рис. 5 представлены дифференциальные сечения ионизации атома гелия и молекулы водорода (слева) и их экспериментальные отношения \mathcal{R} (справа). Дано сравнение отношения \mathcal{R} с соответствующими значениями интерференционного фактора \mathcal{F} .

Результаты шестой главы опубликованы в работах [ОЧ6, ОЧ11, ОЧ19, ОЧ20, ОЧ21, ОЧ22].

В Заключении сформулированы основные результаты диссертации.

Основные публикации по теме диссертации

- [ОЧ1] Пузынин И.В., Бояджиев Т.Л., Виноцкий С.И., Земляная Е.В., Пузынина Т.П. и Чулуунбаатар О. О методах вычислительной физики для исследования моделей сложных физических процессов. ЭЧАЯ, 2007, т. 38, сс. 144–232.
- [ОЧ2] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Abrashkevich A.G., Amaya-Tapia A., Kaschiev M.S., Larsen S.Y. and Vinitsky S.I. KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach. Comput. Phys. Commun., 2007, v. 177, pp. 649–675.
- [ОЧ3] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G., Kaschiev M.S. and Serov V.V. POTHMF: A program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field. Comput. Phys. Commun., 2008, v. 178, pp. 301–330.
- [ОЧ4] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I. and Abrashkevich A.G. ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem. Comput. Phys. Commun., 2009, v. 180, pp. 1358–1375.
- [ОЧ5] Виноцкий С.И., Гусев А.А. и Чулуунбаатар О. TIME6T: Программа численного решения с высокой точностью задачи Коши для

- нестационарного уравнения Шредингера. Библиотека программ ОИЯИ, 2008.
- [ОЧ6] Чулуунбаатар О. ZHYPG2: Программа для вычисления комплексной гипергеометрической функции. Библиотека программ ОИЯИ, 2009.
- [ОЧ7] Чулуунбаатар О. Алгоритм численного решения параметрической задачи Штурма-Лиувилля и вычисления производных от решения по параметру методом конечных элементов. Вестник РУДН: Серия Математика. Информатика. Физика. 2009, № 2, сс. 54–65.
- [ОЧ8] Чулуунбаатар О. Многослойные схемы для численного решения нестационарного уравнения Шредингера. Вестник РУДН: Серия Математика. Информатика. Физика. 2008, № 1, сс. 59–69.
- [ОЧ9] Чулуунбаатар О. Многослойные схемы для численного решения нестационарного уравнения Шредингера методом конечных элементов. Вестник РУДН: Серия Математика. Информатика. Физика. 2008, № 3, сс. 68–83.
- [ОЧ10] Чулуунбаатар О. Вариационно-итерационные алгоритмы численного решения задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для систем связанных радиальных уравнений. Вестник РУДН: Серия Математика. Информатика. Физика. 2008, № 2, сс. 40–56.
- [ОЧ11] Чулуунбаатар О. Математические модели и алгоритмы анализа процессов ионизации атома гелия и молекул водорода с вариационными функциями. Вестник ТвГУ: Серия Прикладная Математика. 2008, № 26(86), сс. 47–64.
- [ОЧ12] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Kaschiev M.S., Kaschieva V.A., Amaya-Tapia A., Larsen S.Y. and Vinitzky S.I. Benchmark Kantorovich calculations for three particles on a line. *J. Phys. B*, 2006, v. 39, pp. 243–269.
- [ОЧ13] Chuluunbaatar O., Gusev A., Gerdt V., Kaschiev M., Rostovtsev V., Samoylov V., Tupikova T. and Vinitzky S. A symbolic-numerical algorithm for solving the eigenvalue problem for a hydrogen atom in the magnetic field: cylindrical coordinates. *Lecture Notes in Computer Science*, 2007, v. 4770, pp. 118–133.
- [ОЧ14] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., Kaschiev M.S., Serov V.V., Melnikov L.A. and Vinitzky S.I. Calculation of a hydrogen atom photoionization in a strong magnetic field by using the angular oblate spheroidal functions. *J. Phys. A*, 2007, v. 40, pp. 11485–11524.
- [ОЧ15] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Melnikov L.A. and Serov V.V. Photoionization and recombination of a hydrogen atom in a magnetic field. *Phys. Rev. A*, 2008, v. 77, pp. 034702–1–4.
- [ОЧ16] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., Kaschiev M.S., Mardo-

- yan L.G., Serov V.V., Tupikova T.V. and Vinitzky S.I. Adiabatic representation for a hydrogen atom photoionization in an uniform magnetic field. *Ядерная Физика*, 2008, т. 71, сс. 871–878.
- [ОЧ17] Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Galtbayar A., Gusev A.A., Kaschiev M.S., Vinitzky S.I. and Zhanlav T. Explicit Magnus expansions for time-dependent Schrödinger equation. *J. Phys. A*, 2008, v. 41, pp. 295203–1–25.
- [ОЧ18] Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Galtbayar A. and Zhanlav T. Two-dimensional oscillator in time-dependent fields: comparison of some exact and approximate calculations. *Phys. Rev. E*, 2008, v. 78, pp. 017702–1–4.
- [ОЧ19] Staicu Casagrande E.M., Naja A., Mezdari F., Lahmam-Bennani A., Bolognesi P., Joulakian B., Chuluunbaatar O., Al-Hagan O., Madison D.H., Fursa D.V. and Bray I. ($e, 2e$) ionisation of helium and hydrogen molecule: signature of two-center interference effects. *J. Phys. B*, 2008, v. 41, pp. 025204–1–7.
- [ОЧ20] Naja A., Staicu-Casagrande E.M., Lahmam-Bennani A., Nekkab M., Mezdari F., Joulakian B., Chuluunbaatar O. and Madison D.H. Triply differential ($e, 2e$) cross sections for ionisation of the nitrogen molecule at large energy transfer. *J. Phys. B*, 2007, v. 40, pp. 3775–3783.
- [ОЧ21] Chuluunbaatar O., Joulakian B.B., Tsookhuu Kh. and Vinitzky S.I. Modified two-centre continuum wavefunction: application to the dissociative ionization of H_2^+ by fast electrons. *J. Phys. B*, 2004, v. 37, pp. 2607–2616.
- [ОЧ22] Chuluunbaatar O., Joulakian B.B., Puzynin I.V., Tsookhuu Kh. and Vinitzky S.I. Modified two-center continuum wave function: application to the dissociative double ionization of H_2 by electron impact. *J. Phys. B*, 2008, v. 41, pp. 015204–1–6.

Список цитируемой литературы

- [1] *Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений*. Под. ред. Олдера Б., Фернбаха С. и Роттенберга М. Москва, Мир, 1974.
- [2] Robicheaux F. *J. Phys. B*, 2008, v. 41, pp. 192001–1–15.
- [3] Неудачин В.Г., Попов Ю.В. и Смирнов Ю.Ф. *УФН*, 1999, т. 169, сс. 1111–1139.
- [4] Delande D., Bommier A. and Gay J.C. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, v. 66, pp. 141–144.
- [5] Wang Q. and Greene C.H. *Phys. Rev. A*, 1991, v. 44, pp. 7448–7458.

- [6] Klews M. and Schweizer W. Phys. Rev. A, 2001, v. 64, pp. 053403–1–5.
- [7] Joulakian B., Hanssen J., Rivarola R. and Motassim A. Phys. Rev. A, 1996, v. 54, pp. 1473–1479.
- [8] Motassim A. and Joulakian B. Physica Scripta, 1999, v. 60, pp. 142–147.
- [9] Канторович Л.В. Докл. АН СССР, 1934, т. 2, с. 532–536.
- [10] Севастьянов Л.А., Егоров А.А. Оптика и Спектроскопия, 2008, т. 105, сс. 632–640.
- [11] Strang G. and Fix G.J. *An analysis of the finite element method*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York, 1973.
- [12] Magnus W. Commun. Pure Appl. Math., 1954, v. 7, pp. 649–673.
- [13] Бейкер Дж. и Грейвс-Моррис П. *Аппроксимации Паде*. Москва, Наука, 1986.
- [14] Yudin G.L., Chelkowski S. and Bandrauk A.D. J. Phys. B, 2006, v. 39, pp. L17–L24.
- [15] Ciarrina M.F. Phys. Rev. A, 2007, v. 75, 043405–1–7.
- [16] Yudin G.L., Patchkovskii S. and Bandrauk A.D. J. Phys. B, 2008, v. 41, pp. 045602–1–9.
- [17] Голуб Дж. и Ван Лоун Ч. *Матричные вычисления*. Москва, Мир, 1999.
- [18] Bathe K.J. and Wilson E.L. *Numerical Methods in Finite Element Analysis*. Englewood Cliffs, Prentice Hall, New Jersey, 1976.
- [19] Самарский А.А. *Теория разностных схем*. Москва Наука, 1977.
- [20] Puzynin I.V., Selin A.V. and Vinitzky S.I. Comput. Phys. Commun., 1999, v. 123, pp. 1–6.
- [21] Crank J. and Nicolson P. Proc. Cambridge Philos. Soc., 1947, v. 43, pp. 50–67.
- [22] Абрамовиц М. и Стиган И. *Справочник по специальным функциям*. Москва, Наука, 1979.
- [23] Пупышев В.В. ЭЧАЯ, 2009, т. 40, сс. 763–892.
- [24] Ryabinina M.V. and Melnikov L.A. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 2004, v. 214, pp. 35–39.
- [25] Mueller C. and Eyring H. J. Chem. Phys., 1951, v. 19, pp. 1495–1497.
- [26] McLean A.D., Weiss A. and Yoshimine M. Rev. Mod. Phys., 1960, v. 32, pp. 211–218.
- [27] Serov V.V., Joulakian B.B., Pavlov D.V., Puzynin I.V. and Vinitzky S.I. Phys. Rev. A, 2002, v. 65, pp. 062708–1–7.
- [28] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T. and Flannery B.P. *Numerical recipes: The art of scientific computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 1986.
- [29] Stia C.R., Fojón O.A., Weck P.F., Hanssen J. and Rivarola R.D. J. Phys. B, 2003, v. 36, pp. L257–L264.