

УДК 517.9

## СПЕКТР И КОЛЛАПС ЧАСТИЦЫ В ОДНОМ НЕЛОКАЛЬНОМ ПОЛЕ ЦЕНТРОБЕЖНОГО ТИПА

*В. В. Пупышев*<sup>1</sup>

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Исследуемая задача — одномерное уравнение Шредингера с нулевыми граничными условиями на концах отрезка  $[0, \pi/2]$  и нелокальным взаимодействием, равным произведению потенциала, пропорционального квадрату секанса аргумента, и суммы единичного и интегрального операторов. Для такой задачи качественно и численно исследована зависимость спектра действительных собственных значений и отвечающих им собственных функций от величины действительного параметра потенциала. Для анализа предложены и использованы фурье- и сплайн-аппроксимации искомым собственным функциям. Особое внимание уделено коллапсу частицы.

The investigated problem is the one-dimensional Schrödinger equation with the zero boundary conditions at the ends of the segment  $[0, \pi/2]$ , and the interaction equal to the product of the potential proportional to squared secant of the argument and the sum of the unity and integral operators. For this problem the dependence of the spectrum of real eigenvalues and the corresponding eigenfunctions on the real potential parameter is analyzed qualitatively and numerically. For analysis the Fourier- and spline-approximations of the searched eigenfunction are proposed and applied. Special attention is paid to the particle collapse.

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе исследуется уравнение Шредингера

$$[-\partial_\varphi^2 f(\varphi; p^2) + \langle \varphi | V^{\text{eff}}(\varphi, \varphi') | f(\varphi'; p^2) \rangle] = p^2 f(\varphi; p^2), \quad \varphi \in [0, \pi/2], \quad (1)$$

с нелокальным оператором  $V^{\text{eff}}(\varphi, \varphi')$ :

$$\langle \varphi | V^{\text{eff}}(\varphi, \varphi') | f(\varphi'; p^2) \rangle = \frac{c}{(\cos \varphi)^2} \left[ f(\varphi; p^2) + \tau \int_{C_-(\varphi)}^{C_+(\varphi)} d\varphi' f(\varphi'; p^2) \right], \quad (2)$$

$$C_-(\varphi) \equiv |\pi/3 - \varphi|, \quad C_+(\varphi) \equiv \pi/2 - |\pi/6 - \varphi|, \quad (3)$$

и условиями

$$f(0; p^2) = 0, \quad f(\pi/2; p^2) = 0, \quad f \in \mathcal{C}_{[0, \pi/2]}^2 \cap \mathcal{C}_{[0, \pi/2]}^0. \quad (4)$$

По определению  $c$  и  $\tau$  — действительные параметры;  $p^2$  и  $f$  — неизвестные полная энергия и волновая функция квантовой частицы в нелокальном поле  $V^{\text{eff}}$ , представленном

---

<sup>1</sup>E-mail: pupyshev@thsun1.jinr.ru

произведением сингулярного в точке  $\varphi = \pi/2$  потенциала  $c(\sec \varphi)^2$  центробежного типа и суммы единичного и интегрального (нелокального) операторов.

Исследуемая задача относится к классу спектральных задач с сингулярными и нелокальными взаимодействиями центробежного типа. Такие задачи особо интересны прежде всего для исследования коллапса, но до сих пор малоизучены и в квантовой механике [1], и в спектральной теории гамильтоновых операторов [2], и в теории рассеяния для систем нескольких частиц [3].

Наша главная цель — качественный и численный анализ зависимости спектра  $\{p^2(c), f(\varphi; p^2(c))\}$  действительных собственных значений  $p^2 = p^2(c)$  и соответствующих собственных функций  $f(\varphi; p^2(c))$  от параметра  $c$  и иллюстрация коллапса частицы в точку  $\varphi = \pi/2$ . Как пояснялось в [4], такой анализ представляется особенно значимым потому, что является ключевым для расширения теории дифференциальных уравнений Фаддеева [3] на случай парных взаимодействий, обратно пропорциональных квадрату расстояния между частицами.

Задача (1)–(4) при  $\tau = 4/\sqrt{3}$  и вполне определенных значениях параметра  $c$  имеет точные решения, представимые конечными линейными комбинациями функций  $\sin 2n\varphi$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . Такие решения исследованы в [5] и [6]. Эта же задача, но при  $\tau = 0$ , т. е. в случае выключенного интегрального оператора, становится однородной краевой задачей Шредингера:

$$[\partial_\varphi^2 + p^2 - c(\sec \varphi)^2] \Phi(\varphi; p^2) = 0, \quad \varphi \in [0, \pi/2], \quad (5)$$

$$\Phi(0; p^2) = 0, \quad \Phi(\pi/2; p^2) = 0, \quad \Phi(\varphi; p^2) \in \mathcal{C}_{[0, \pi/2]}^2 \cap \mathcal{C}_{[0, \pi/2]}^0, \quad (6)$$

для которой спектральная проблема полностью решена в [7, 8]. Собственные числа  $p^2$  задачи (1)–(4), но лишь при  $\tau = 1$  и  $c = -6, -5, \dots, 0$ , впервые вычислены в [9]. Численный анализ зависимости дискретного спектра  $\{p_n^2(c)\}_{n=1}^\infty$  собственных значений этой задачи от параметра  $c \in [-2, 100]$  при  $\tau = 4/\sqrt{3}$  и предположениях  $\partial_\varphi^2 f = 0$ ,  $\varphi = 0, \pi/2$ , выполнен в [4].

В иных случаях ни качественный, ни численный анализ зависимости спектра  $\{p^2(c), f\}$  от величины действительного параметра  $c$  никем не предложен. Этот пробел в определенной степени восполняет настоящая работа. В ней только для определенности полагается, что  $\sqrt{p^2} = p \geq 0$ , если  $p^2 \geq 0$ , и  $\sqrt{p^2} = i|p|$ , если  $p^2 < 0$ ; для сокращения записи используются обозначения:  $\Theta$  — тета-функция,  $\nu \equiv (c + 1/4)^{1/2}$  и  $s \equiv \pi/2 - \varphi$ , а выполненный анализ излагается по следующему плану.

В разд. 1 выводятся явные асимптотики волновой функции  $f$  при  $\varphi \rightarrow 0, \pi/2$  в случае взаимодействия (2), а затем в физически наиболее реалистичном случае, когда потенциал  $c(\sec \varphi)^2$  этого взаимодействия заменен «обрезанным» в некоторой точке  $\varphi_b \neq \pi/2$  потенциалом  $\Theta(\varphi_b - \varphi)c(\sec \varphi)^2$ .

В разд. 2 предлагается и иллюстрируется простой способ вычисления, вообще говоря, комплексного спектра  $\{p^2, f\}$ , основанный на аппроксимации искомой функции  $f$  ее конечной суммой Фурье [10].

В разд. 3 для вычисления действительного спектра  $\{p^2, f\}$  предлагаются модификации анонсированного в [11] и подробно описанного в [7] алгоритма  $4''$ , основанного на аппроксимации искомой функции  $f$  кубическим сплайном  $S_{31}$  класса  $\mathcal{C}^2$ , разложенным по нормализованным  $B$ -сплайнам [12].

В разд. 4 обсуждаются итоги выполненного предложенными методами численного анализа действительного спектра  $\{p^2, f\}$ .

В заключении суммируются основные результаты.

### 1. АСИМПТОТИКИ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Пусть  $\varphi \rightarrow 0$ . Согласно (3) в уравнении (1) пределы  $C_{\pm}(\varphi)$  интеграла сходятся к  $\pi/3$ . Такой интеграл по известной теореме о средней точке [10] можно аппроксимировать произведением  $2\varphi f(\pi/3; p^2)$ . Тогда исследуемое уравнение перейдет в асимптотическое соотношение

$$(\partial_{\varphi}^2 + p^2 - c) f(\varphi; p^2) \sim 2c\tau\varphi f(\pi/3; p^2), \quad \varphi \rightarrow 0. \quad (7)$$

Из него, благодаря условию  $f = 0$  при  $\varphi = 0$ , следует, что  $\partial_{\varphi}^2 f = 0$ ,  $\varphi = 0$ , при всех  $c$  и  $p^2$ . Иные знания о строении функций  $f$  при  $\varphi \rightarrow 0$  не нужны.

Вывод асимптотик функции  $f$  при  $\varphi \rightarrow \pi/2$ , когда  $s \rightarrow 0$ , более сложен. В предлагаемом ниже способе ключевыми будут метод вариации постоянных коэффициентов [13] и известные асимптотики [7] при  $s \rightarrow 0$  фундаментальных решений  $\Phi^{\pm}$  вспомогательной задачи (5), (6):

$$\Phi^+(\varphi; p^2) = s^{1/2+\nu} [1 + O(ps)^2], \quad (8)$$

$$\Phi^-(\varphi; p^2) = s^{1/2-\nu} [1 + O(ps)^2] \begin{cases} 1, & c \neq -1/4, \\ \ln s, & c = -1/4. \end{cases}$$

Пусть  $\varphi \rightarrow \pi/2$ . В уравнении (1) пределы  $C_{\pm}$  интеграла равны  $\pi/6 \pm s$  и сходятся к  $\pi/6$ . По условиям (4)  $f \in C_{[0, \pi/2]}^2$ . Поэтому при  $\varphi \rightarrow \pi/6$  существует ряд Тейлора

$$f(\varphi; p^2) = \sum_{n=0}^2 \frac{f^{(n)}}{n!} \left(\varphi - \frac{\pi}{6}\right)^n + o\left[\left(\varphi - \frac{\pi}{6}\right)^2\right], \quad (9)$$

$$f^{(n)} \equiv \partial_{\varphi}^n f(\varphi; p^2)|_{\varphi=\pi/6}.$$

Считая его коэффициенты  $f^{(0)}$  и  $f^{(2)}$  известными, запишем уравнение (1) в пределе  $\varphi \rightarrow \pi/2$  в виде неоднородного уравнения

$$\left[ \partial_{\varphi}^2 + p^2 - \frac{c}{(\cos \varphi)^2} \right] f(\varphi; p^2) = R(\varphi) \equiv \frac{2c\tau}{(\cos \varphi)^2} \left\{ f^{(0)} + \frac{s^2}{3} f^{(2)} + o(s^2) \right\} \quad (10)$$

с условием  $f(\pi/2; p^2) = 0$ . Решим такую краевую задачу методом вариации постоянных коэффициентов: общее решение  $f$  представим суммой

$$f(\varphi; p^2) = \Phi(\varphi; p^2) + g(\varphi; p^2), \quad \Phi(\varphi; p^2) = A\Phi^+(\varphi; p^2) - B\Phi^-(\varphi; p^2), \quad (11)$$

в которой  $g$  — частное решение этой задачи:

$$g(\varphi; p^2) = \Phi^-(\varphi; p^2) \int_0^s \frac{\Phi^+(\varphi'; p^2)}{W(\Phi^{\pm}, \varphi')} R(s) ds -$$

$$- \Phi^+(\varphi; p^2) \int_0^s \frac{\Phi^-(\varphi'; p^2)}{W(\Phi^{\pm}, \varphi')} R(s) ds, \quad \varphi' = \pi/2 - s, \quad s \rightarrow 0; \quad (12)$$

$$W(\Phi^{\pm}, \varphi') \equiv \Phi^+ \partial_{\varphi} \Phi^- - \Phi^- \partial_{\varphi} \Phi^+,$$

$A$  и  $B$  — некоторые константы, а  $\Phi$  — известное общее решение [7] соответствующей однородной ( $R \equiv 0$ ) задачи, т. е. задачи (5), (6). Теперь заменим  $\Phi^\pm$  суммами (8) в (11) и (12) и получим асимптотику

$$g(\varphi; p^2) = -2\tau s \left[ f^{(0)} + O(s^2 f^{(2)}) \right], \quad s \equiv \pi/2 - \varphi \rightarrow 0, \quad (13)$$

а затем и искомую явную асимптотику волновой функции  $f$ :

$$f(\varphi; p^2) = -2\tau s [f^{(0)} + O(s^2 f^{(2)})] + s^{1/2+\nu} [1 + O((ps)^2)] \begin{cases} A - B s^{-2\nu}, & c \neq -1/4, \\ A - B \ln s, & c = -1/4, \end{cases} \quad (14)$$

где  $A$ ,  $B$ ,  $f^{(0)}$  и  $f^{(2)}$  — неизвестные коэффициенты, а  $s \rightarrow 0$ .

Получим иное представление асимптотики функции  $f$  при  $s \rightarrow 0$ . Положим в (11) сначала  $A = 1, B = 0$ , а затем  $A = 0, B = -1$ . В полученных суммах  $f^\pm = \Phi^\pm + g^\pm$  частные решения  $g^\pm$  уравнения (10) представим аналогами формул (12), а затем, используя (8), найдем явные асимптотики

$$f^+ = s^{1/2+\nu} [1 + O((ps)^2)] - 2\tau s [f^{(0+)} + O(s^2 f^{(2+)})], \quad \forall c; \quad (15)$$

$$f^- = -2\tau s [f^{(0-)} + O(s^2 f^{(2-)})] + s^{1/2+\nu} [1 + O((ps)^2)] \begin{cases} 1, & c \neq -1/4, \\ \ln s, & c = -1/4, \end{cases}$$

где  $s \rightarrow 0$ , а коэффициенты  $f^{(n\pm)} \equiv \partial_\varphi^n f^\pm(\varphi; p^2)$ ,  $\varphi = \pi/6$ ,  $n = 0, 2$ , неизвестны. В особом случае  $c < -1/4$ , когда  $\nu = i|\nu|$  и  $(\Phi^+)^* = \Phi^-$ , в сумме (11) можно положить  $\Phi^+ = \text{Re } \Phi^+$  и  $\Phi^- = \text{Im } \Phi^+$ , затем тем же способом получить вместо прежних комплексных решений  $f^\pm$  с асимптотиками (15) действительные решения  $f^\pm$  с асимптотиками при  $s \rightarrow 0$ :

$$f^+(\varphi; p^2) \sim s^{1/2} \sin(|\nu| \ln s) - 2\tau s f^+(\pi/6; p^2), \quad (16)$$

$$f^-(\varphi; p^2) \sim s^{1/2} \cos(|\nu| \ln s) - 2\tau s f^-(\pi/6; p^2).$$

Решения  $f^\pm$  имеют разные асимптотики и поэтому линейно независимы вблизи точки  $\varphi = \pi/2$ . Предположим, что такие фундаментальные (линейно независимые) решения существуют на всем отрезке  $[0, \pi/2]$ , тогда общее решение задачи (1)–(4) — сумма  $f = a f^+ - b f^-$  с некоторыми коэффициентами  $a$  и  $b$ . Подставим эту сумму в условия (4) и рассмотрим два возможных случая: при  $\varphi = \pi/2$  в нуль обращается только функция  $f^+$  или же обе функции  $f^\pm$ . В силу (15) первый случай имеет место при  $c \geq 0$ , когда  $\nu \geq 1/2$ , а второй при  $-1/4 < c < 0$ , когда  $\nu = \text{Re } \nu < 1/2$  и при  $c < -1/4$ , когда  $\nu = \text{Im } \nu = i|\nu|$ . Поэтому при  $c \geq 0$  следует положить  $a = 1$  и  $b = 0$ , тогда функция  $f = f^+$  будет равной нулю при  $\varphi = 0$ , а спектр  $\{p^2\}$  определится уравнением  $f^+(0; p^2) = 0$  и поэтому будет дискретным. В случае  $c < 0$  любому наперед заданному  $p^2$  отвечает единственная собственная функция  $f = a f^+ - b f^-$  с коэффициентами  $a = f^-(0; p^2)$  и  $b = f^+(0; p^2)$  и, следовательно, спектр  $\{p^2\}$  должен быть сплошным и невырожденным.

Итак, если фундаментальные решения  $f^\pm$  уравнения (1) с асимптотиками (15) существуют на всем отрезке  $[0, \pi/2]$ , то все возможные и, вообще говоря, комплексные спектры  $\{p^2, f\}$  задачи (1)–(4) определяются по следующим правилам. При  $c \geq 0$

$$f^+(0; p^2) = 0, \quad f(\varphi; p^2) = f^+(\varphi; p^2) \quad (17)$$

и в силу (15) вблизи точки  $\varphi = \pi/2$  функция  $f$  не осциллирует:

$$f(\varphi; p^2) = s^{1/2+\nu} [1 + O((ps)^2)] - 2\tau s [f^{(0)} + O(s^2 f^{(2)})], \quad s \rightarrow 0. \quad (18)$$

Если  $c < 0$ , то любому заданному  $p^2$  отвечает одна волновая функция

$$f(\varphi; p^2) = f^-(0; p^2) f^+(\varphi; p^2) - f^+(0; p^2) f^-(\varphi; p^2). \quad (19)$$

Согласно (15) в случае  $-1/4 \leq c < 0$  она имеет неосциллирующую при  $\varphi \rightarrow \pi/2$  асимптотику

$$f(\varphi; p^2) \sim as^{\nu+1/2} - 2\tau s [af^{(0+)} - bf^{(0-)}] - bs^{1/2} \begin{cases} s^{-\nu}, & c \neq -1/4, \\ \ln s, & c = -1/4, \end{cases} \quad (20)$$

и неограниченные в точке  $\varphi = \pi/2$  производные, а в случае  $c < -1/4$ , когда  $\nu = i|\nu|$ , ее асимптотика быстро осциллирует: если  $\varphi \rightarrow \pi/2$ , то

$$f(\varphi; p^2) = s^{1/2} [(a-b) \cos(|\nu| \ln s) - i(a+b) \sin(|\nu| \ln s)] - 2\tau s [af^{(0+)} - bf^{(0-)}] + O(s^{3/2}), \quad (21)$$

а производные не имеют определенных пределов.

Теперь исследуем случай «обрезанного» поля. В задаче (1)–(4) заменим потенциал  $c(\sec \varphi)^2$  «обрезанным» в некоторой точке  $\varphi = \varphi_b$ , близкой к точке  $\varphi = \pi/2$ , потенциалом  $\Theta(\varphi_b - \varphi) c(\sec \varphi)^2$ . Последнее из трех условий (4) ослабим, но только в точке  $\varphi = \varphi_b$ : пусть в этой точке производная  $\partial_\varphi f$  — непрерывна, а производная  $\partial_\varphi^2 f$  может иметь разрыв первого рода. Ослабленные условия — условия «сшивки»:

$$\partial_\varphi^n f_{<}(\varphi; p^2) = \partial_\varphi^n f_{>}(\varphi; p^2), \quad n = 0, 1, \quad \varphi = \varphi_b.$$

Исследуем зависимость действительного спектра  $\{p^2(c; \varphi_b)\}$  сформулированной задачи от аргумента  $c$  и параметра  $\varphi_b$  при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$ , когда «обрезанный» потенциал сходится к исходному. При  $\varphi > \varphi_b$ , т. е. при  $s \leq s_b \equiv \pi/2 - \varphi_b$ , используем точное решение  $f = f_{>} \equiv \sin ps/p$ , непрерывное по  $p$  в точке  $p = 0$  и равное  $s$  при  $p = 0$  и  $\text{sh } |p|s/|p|$  при  $p^2 < 0$ , когда  $p = i|p|$ . При  $\varphi \leq \varphi_b$ , т. е. при  $s \geq s_b$ , решение  $f$  ищем в виде суммы (11), т. е. полагаем  $f = f_{<} \equiv A\Phi^+ - B\Phi^- + g$ . Для аппроксимации этой суммы при  $\varphi$ , близком к  $\varphi_b$  и ограниченном  $|p|$ , т. е. при  $s \rightarrow s_b + 0$  и  $|ps| \ll 1$ , используем ее асимптотики (14). Коэффициенты  $A$ ,  $B$  и  $f^{(0)}$  этих асимптотик определим как функции аргумента  $p$  и параметра  $\varphi_b$  из условий «сшивки». Рассмотрим два случая.

Случай  $c > 0$  и  $f^{(0)} \equiv f(\pi/6; p^2) \neq 0$ . Так как  $\nu > 1/2$ , то  $A\Phi^+ \sim s^{1/2+\nu} = o(s)$ , а  $g \sim s$ . Поэтому в сумме  $f_{<} = A\Phi^+ - B\Phi^- + g$  пренебрегаем слагаемым  $A\Phi^+$  и полагаем

$f_{<} \approx -Bs^{1/2-\nu} - 2\tau s f^{(0)}$ . Отношение  $B/f^{(0)}$  при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$  определяем из условий «сшивки»:

$$B/f^{(0)} \sim 4\tau s_b^{1/2+\nu} (\chi_b - 1)/(2\chi_b + 2\nu - 1), \quad \chi_b \equiv 2ps_b \operatorname{ctg}(ps_b).$$

Следовательно,  $B \rightarrow 0$ , если  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$  и  $f^{(0)} \neq 0$ .

Случай  $c < 0$ . В сумме  $f_{<} = A\Phi^+ - B\Phi^- + g$  при малом  $s$  пренебрегаем слагаемым  $g \sim s$ , затем из условий «сшивки» находим формулы

$$\frac{B}{A} \sim \frac{\chi_b - 1 - 2\nu}{\chi_b + 2\nu - 1} s_b^{2\nu}, \quad c \neq -1/4; \quad \alpha \sim \frac{1 - \chi_b}{2 + (1 - \chi_b) \ln s_b}, \quad c = -1/4. \quad (22)$$

Из них следует, что  $B \rightarrow 0$  при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$ , если  $c \geq -1/4$ , а в случае  $c < -1/4$  отношение  $B/A$  не имеет определенного предела, поэтому сумма  $f_{<} = A\Phi^+ - B\Phi^- + g$  при любом  $\varphi_b \neq \pi/2$  содержит обе функции  $\Phi^\pm$  и в силу (8) быстро осциллирует при  $\varphi \rightarrow \varphi_b - 0$ .

Итак, в (11) коэффициент  $B \rightarrow 0$  при  $c \geq -1/4$  и  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$ , но если  $c < -1/4$ , то отношение  $B/A$  не определено при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$ . Поэтому следует ожидать, что спектр  $\{p^2(c; \varphi_b), f\}$  имеет те же качественные особенности, что и описанный в [8] спектр  $\{p^2(c; \varphi_b), \Phi\}$  задачи (5), (6) в случае «обрезанного» в той же точке  $\varphi_b$  потенциала  $\Theta(\varphi_b - \varphi) c (\sec \varphi)^2$ :

1) если  $c \geq -1/4$ , то при любом  $\varphi_b$  имеется только действительный и счетный спектр  $\{p_n^2(c; \varphi_b), f\}_{n=1}^\infty$ , который в пределе  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$  сходится к спектру  $\{p_n^2(c), f\}_{n=1}^\infty$  исходной задачи (1)–(4);

2) при  $c < -1/4$  и любом  $\varphi_b \neq \pi/2$  имеется действительный, дискретный и ограниченный снизу спектр  $\{p_n^2(c; \varphi_b), f\}_{n=1}^\infty$ , но исходная задача при любом  $p^2$  имеет единственное решение  $f$  и действительный, сплошной и не ограниченный ни снизу, ни сверху спектр  $\{p^2\}$ .

Эти гипотезы подтверждают прежние [4] и новые расчеты, выполненные по описанным в разд. 2, 3 схемам и представленные в разд. 4.

## 2. ФУРЬЕ-АППРОКСИМАЦИЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Сначала сформулируем доказанный в [6] критерий существования точных решений задачи (1)–(4) и его следствие в виде следующей теоремы.

**Теорема.** *Задача (1)–(4) имеет точные решения*

$$f(\varphi; p^2) = \sum_{n=1}^{m-1} \frac{X_n}{n^2 - m^2} \sin 2n\varphi + X_m \sin 2m\varphi \quad (23)$$

тогда и только тогда, когда  $p^2 = 4m^2$ ,  $m = 0, 1, \dots$ , параметр  $c$  равен нулю  $c^\mu$  детерминанта трехдиагональной матрицы  $\mathbf{A}$  с элементами

$$A_{n,n\pm 1} = 1, \quad A_{nn} = 2 + c \frac{(1 + 2K_n)}{n^2 - p^2/4}; \quad K_n \equiv \frac{\sin 2\pi n/3}{n \sin 2\pi/3}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (24)$$

столбец  $X \equiv (X_1, X_2, \dots, X_{m-1})^T$  искомых коэффициентов  $X_n$  подчиняется уравнению  $\mathbf{A} \mathbf{X} = 0$ , а  $X_m = -X_{m-1}/(4c)$ . В частности, при любом  $c$  и  $p^2 = 16$  существует точное решение  $f = \sin 4\varphi$ , а при  $c = 4$  и  $p^2 = 36$  точное решение таково:

$$f(\varphi; p^2 = 36) = \sin 2\varphi - (4/5) \sin 4\varphi + \sin 6\varphi. \quad (25)$$

В случае  $c \neq c^\mu$  любое решение  $f$  — бесконечный ( $N = \infty$ ) фурье-ряд

$$f(\varphi; p^2) = \sum_{n=1}^N a_{np} X_n \sin 2n\varphi, \quad a_{np} \equiv \begin{cases} 1, & p^2 = 4n^2, \\ (n^2 - p^2/4)^{-1}, & p^2 \neq 4n^2. \end{cases} \quad (26)$$

Дополним эту теорему доказательством следующего утверждения: если при данных  $c$  и  $p^2$ , отличных от указанных в ней ( $c \neq c^\mu$ ), решение  $f$  существует, то оно единственное и его можно вычислить как ряд (26), зная только коэффициент  $X_1$ , если  $p^2 \neq m^2$ ,  $m = 1, 2, \dots$ , а в противном случае — коэффициент  $X_m$ .

Случай  $p^2 \neq 4m^2$ ,  $m$  — целое. Искомый ряд (26) — бесконечный. Заменим им функцию  $f$  в уравнении (1), умноженном на  $(\cos \varphi)^2$ . Полученное соотношение с помощью тригонометрических тождеств

$$4(\cos \varphi)^2 \sin 2n\varphi = \sin 2(n-1)\varphi + 2 \sin 2n\varphi + \sin 2(n+1)\varphi$$

и спектральных тождеств [6]

$$(4/\sqrt{3}) \int_{-(\varphi)}^{+(\varphi)} d\varphi' \sin 2n\varphi' = 2 K_n \sin 2n\varphi, \quad K_n \equiv \frac{\sin 2n\pi/3}{n \sin 2\pi/3},$$

справедливых при любых  $\varphi$  и целых  $n$ , спроецируем на все базисные функции  $\sin 2n\varphi$  и таким образом подчиним бесконечный столбец  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots)^T$  матричному уравнению  $\mathbf{A} \mathbf{X} = 0$ , где  $\mathbf{A}$  — трехдиагональная матрица с ненулевыми элементами (24). Поэтому все неизвестные  $X_n$  с  $n \geq 2$  последовательно и однозначно выражаются через коэффициент  $X_1$  формулами  $X_n = C(c, p, n) X_1$ , где  $C(c, p, n)$  — вполне определенная функция аргументов  $c, p, n$ .

Как следствие этого факта, докажем такое утверждение: если при данных  $c$  и  $p^2$  решение  $f$  существует, то оно единственное. Предположим противное: пусть  $f = f_1$  и  $f = f_2$  — разные решения. Тогда столбцы  $\mathbf{X}^1$  и  $\mathbf{X}^2$  из коэффициентов  $X_n^1$  и  $X_n^2$  их рядов Фурье удовлетворяют уравнению  $\mathbf{A} \mathbf{X} = 0$ . Поэтому  $X_n^k = C(c, p, n) X_1^k$ ,  $k = 1, 2$ ,  $n \geq 2$ , и следовательно,  $X_n^2/X_n^1 = \lambda \equiv X_1^2/X_1^1$  при всех  $n$ . Любое решение  $f$  определено с точностью до умножения на некоторую константу, поэтому можно положить  $X_1^1 = 1$ ,  $X_1^2 = 1$  и получить тождество  $f_1(\varphi; p^2) \equiv f_2(\varphi; p^2)$  по  $\varphi$  и тем самым опровергнуть ранее высказанное предположение.

Случай  $c < 4$ ,  $p^2 = 4m^2$ , где  $m = 1, 2, \dots$ . Искомый ряд (26) — бесконечный. Матричный аналог уравнения (1) — бесконечномерное уравнение  $\mathbf{A} \mathbf{X} = 0$ . Так как  $p^2 = 4m^2$ , то элементы  $A_{m\pm 1, m}$  матрицы  $\mathbf{A}$  равны нулю, а все остальные вычисляются по формулам (24). Поэтому матричное уравнение  $\mathbf{A} \mathbf{X} = 0$  расщепляется на два уравнения  $\mathbf{A}^- \mathbf{X}^- = 0$  и  $\mathbf{A}^+ \mathbf{X}^+ = 0$  для конечного и бесконечного столбцов  $\mathbf{X}^- =$

$(X_1, \dots, X_{m-1})^T$  и  $\mathbf{X}^+ = (X_{m+1}, X_{m+2}, \dots)^T$  и соотношение  $X_{m+1} = -4cX_m - X_{m-1}$ . Так как  $\mathbf{A}^-$  — матрица с доминирующей главной диагональю, то  $\det \mathbf{A}^- \neq 0$  и поэтому уравнение  $\mathbf{A}^- \mathbf{X}^- = 0$  имеет лишь одно решение  $X_n = 0$ ,  $n = 1, 3, \dots, m-1$ . Следовательно,  $X_{m+1} = -4cX_m$ , а все остальные неизвестные последовательно и однозначно выражаются через  $X_m$  из уравнения  $\mathbf{A}^+ \mathbf{X}^+ = 0$ . Поэтому, как и в предыдущем случае, если при данных  $c$  и  $p^2 = 4m^2$  решение  $f$  существует, то оно единственное.

Конечные ( $N < \infty$ ) подсуммы рядов Фурье (26) с коэффициентами  $X_2, X_3, \dots, X_N$ , вычисленными описанным выше способом, предлагается использовать для аппроксимации функции  $f$ , отвечающей заданным значениям  $c$ ,  $p^2$  и  $X_1$  или  $X_m$ . Для примера исследовались четыре случая:  $c = -25/4, -4, -2, -0,3$ . В каждом из них полагалось  $p^2 = \pm 10; \pm 1; \pm 0,1$  и  $X_1 = 1$ , а коэффициенты  $X_n$ ,  $n \leq N$ , вычислялись. Достаточное для сходимости ряда (26) условие  $|X_n| \approx \text{const}$  наблюдалось при довольно больших  $n \geq 10^5$ , что подтверждает существование единственного решения  $f$  задачи (1)–(4) при любых  $c < -1/4$  и  $p^2$ .

Пусть теперь значение  $c$  задано, причем  $c > 0$  и  $c \neq c^\mu$ , а требуется вычислить приближение  $\tilde{p}_n^2(c)$  собственного числа  $p_n^2(c)$  и приближение  $\tilde{f}(\varphi; \tilde{p}_n^2)$  собственной функции  $f(\varphi; p_n^2)$ . Искомая функция  $f$  — бесконечный ряд Фурье (26). В качестве ее приближения  $\tilde{f}$  используем конечную сумму Фурье:

$$\tilde{f} = \sum_{n=1}^N \frac{\tilde{X}_n}{n^2 - p^2/4} \sin 2n\varphi, \quad N < \infty. \quad (27)$$

Заменим функцию  $f$  этой суммой в уравнении (1), умноженном на  $(\cos \varphi)^2$ . Проецируя полученное уравнение, но только на функции  $\sin 2n\varphi$  с  $n \leq N$ , выведем уравнение  $\mathbf{A}(c; p^2) \tilde{\mathbf{X}} = 0$ , где  $\mathbf{A}$  — трехдиагональная матрица с зависящими от  $p^2$  ненулевыми элементами (24), а  $\tilde{\mathbf{X}} \equiv (\tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \dots, \tilde{X}_N)^T$  — столбец искомых коэффициентов. Хотя бы один из них отличен от нуля тогда и только тогда, когда  $p^2$  является корнем  $\tilde{p}_k^2$  уравнения  $\det \mathbf{A}(c; p^2) = 0$ . Так как  $\mathbf{A}$  — матрица Якоби [14], то все корни  $\tilde{p}_k^2$ ,  $k = 1, 2, \dots, N$ , простые и каждому из них отвечают только один вектор-столбец  $\tilde{\mathbf{X}}^k$ . Поэтому, положив  $\tilde{X}_1 = 1$  и  $p^2 = \tilde{p}_k^2$  в уравнении  $\mathbf{A}(c; p^2) \tilde{\mathbf{X}} = 0$ , можно последовательно и однозначно вычислить все коэффициенты  $\tilde{X}_n$ ,  $n \geq 2$ , а затем вычислить и приближение  $\tilde{f}(\varphi; \tilde{p}_k^2)$  функции  $f$  как сумму (27), в которой  $p^2 = \tilde{p}_k^2$ .

Для примера, иллюстрирующего сходимость приближения  $p_1^2 \approx \tilde{p}_1^2$ , сначала вычислялись величины  $\tilde{p}_1^2(c)$ ,  $c = 0,2; 0,5; 1; 2; 3; 5$ , с точностью до четырнадцати значащих цифр, достигнутой при значении 5000 верхнего индекса  $N$  суммы (27), далее для вычисления функции

$$\chi(p_1^2(c), N) \equiv \log |\tilde{p}_1^2(c)/p_1^2(c) - 1| \quad (28)$$

такие величины использовались как точные значения  $p_1^2(c)$ , а величины  $\tilde{p}_1^2(c)$ , найденные при  $N < 200$ , — как приближенные. Как следует из таблицы, где собраны значения функции (28), относительная точность приближения  $p_1^2(c) \approx \tilde{p}_1^2(c)$  быстро улучшается с ростом  $c$  и  $N$ .

Предложенная фурье-аппроксимация имеет два преимущества, обусловленных тем, что в ней  $\mathbf{A}$  — трехдиагональная матрица Якоби: для вычисления с прецизионной точностью нулей детерминанта сколь угодно больших матриц такого типа известен экономичный алгоритм [14], а вычисление коэффициентов  $X_n$  возможно без знания всей матрицы  $\mathbf{A}$ .



**Округленные значения функции (28) при указанных значениях параметра  $c$  поля (2) и верхнего индекса  $N$  суммы (27)**

$N$	$c$					
	0,2	0,5	1,0	2,0	3,0	5,0
50	-2,5	-3,0	-3,5	-5	-6,5	-8
100	-3	-3,5	-4	-6	-7,5	-10
150	-3,5	-4	-4,5	-6,5	-8	-11
200	-4	-4,5	-5	-7	-8,5	-14

В случае  $c < 0$  фурье-аппроксимация имеет существенный недостаток: суммы Фурье (27) при  $N \rightarrow \infty$  медленно сходятся вблизи точки  $\varphi = \pi/2$  из-за того, что любая из них имеет асимптотику  $s + \text{const } s^3$ ,  $s \rightarrow 0$ , а искомая функция  $f$  обладает бесконечными производными, если  $c \in [-1/4, 0)$ , или же быстро осциллирует, если  $c < -1/4$ . Вычисление функций с такими особенностями возможно лишь специальными алгоритмами. Такие алгоритмы предлагаются в разд. 3.

### 3. СПЛАЙН-АППРОКСИМАЦИЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Напомним определения и свойства кубических сплайнов [12].

Пусть на отрезке  $[0, \pi/2]$  заданы регулярная сетка  $\Delta_\varphi$  с узлами  $\varphi_j$  и шагом  $\pi/2M$  и ее регулярное расширение  $\delta_\varphi$  с узлами  $\varphi_j$ ,  $j < 0$ ,  $j > M$ :

$$\begin{aligned} \Delta_\varphi : 0 = \varphi_0 < \varphi_1 < \dots < \varphi_M = \pi/2, \quad \varphi_{j+1} - \varphi_j = \pi/2M; \\ \delta_\varphi : \varphi_{-3} < \varphi_{-2} < \varphi_{-1} < \varphi_0 < \dots < \varphi_M < \varphi_{M+1} < \varphi_{M+2} < \varphi_{M+3}. \end{aligned} \quad (29)$$

Кубическим сплайном  $S_{31}(\varphi)$  класса  $\mathcal{C}^2$  с узлами на сетке  $\Delta_\varphi$  называется дважды непрерывно дифференцируемая на всем отрезке  $[0, \pi/2]$  функция, представимая на каждом отрезке  $[\varphi_j, \varphi_{j+1}]$  кубическим полиномом. Нормализованный кубическим базисный сплайн  $B_j(\varphi)$ , или сокращенно  $B$ -сплайн, определяется как сплайн  $S_{31}(\varphi)$ , равный нулю вне его интервала-носителя  $[\varphi_{j-2}, \varphi_{j+2}]$  и заданный на каждом отрезке  $[\varphi_k, \varphi_{k+1}]$ ,  $k = j-2, \dots, j+1$ , этого носителя кубическим полиномом аргумента  $t \equiv (\varphi - \varphi_k)2M/\pi$ :

$$B_j = \frac{1}{6}t^3, \quad B_j = \frac{1}{2}t(-t^2 + t + 1) + \frac{1}{6}, \quad B_j = \frac{1}{2}t^2(t - 1) + \frac{2}{3}, \quad B_j = \frac{1}{6}(1 - t)^3.$$

Система сплайнов  $B_j$ ,  $j = -1, \dots, M+1$ , является полным базисом в линейном пространстве  $\mathcal{S}_{31}(\Delta_\varphi)$  сплайнов  $S_{31}$  с узлами на сетке  $\Delta_\varphi$ : любой сплайн из этого пространства — линейная комбинация  $B$ -сплайнов и однозначно определяемых коэффициентов  $X_j$ :

$$S_{31}(\varphi) = \sum_{j=-1}^{M+1} X_j B_j(\varphi), \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2. \quad (30)$$

Если такой сплайн  $S_{31}$  интерполирует функцию  $f$  класса  $\mathcal{C}_{[0, \pi/2]}^8$  на отрезке  $[0, \pi/2]$  по ее заданным узловым значениям  $f_j \equiv f(\varphi_j)$ , то

$$f(\varphi) = S_{31}(\varphi) + O((\pi/2M)^4), \quad \varphi \in [0, \pi/2], \quad M \rightarrow \infty,$$

а во внутренних узлах  $\varphi = \varphi_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, M - 1$ , сетки  $\Delta_\varphi$  имеет место формула дифференцирования повышенной точности:

$$\begin{aligned} \partial_\varphi^2 f(\varphi) &= \bar{\partial}_\varphi^2 S_{31}^j + O((\pi/2M)^4), \quad \varphi = \varphi_j, \quad j = 1, 2, \dots, M - 1; \\ \bar{\partial}_\varphi^2 S_{31}^j &= [2(M/3\pi)^2] [X_{j-2} + 8X_{j-1} - 18X_j + 8X_{j+1} + X_{j+2}]. \end{aligned}$$

Для численного решения задачи (1)–(4) предлагается использовать алгоритм 4'' (см. [7]) и его представленные ниже модификации. Ключевыми будут замены

$$\begin{aligned} f(\varphi; p^2) &\rightarrow S_{31}(\varphi) = \sum_{j=-1}^{M+1} X_j B_j(\varphi), \quad \varphi \in [0, \pi/2]; \\ \partial_\varphi^2 f(\varphi; p^2) &\rightarrow \bar{\partial}_\varphi^2 S_{31}^j, \quad \varphi = \varphi_j, \quad j = 1, \dots, M - 1. \end{aligned} \quad (31)$$

а искомым — столбец  $\mathbf{X} = (X_{-1}, \dots, X_{M+1})^T$  из коэффициентов  $X_j$ .

Придется различать четыре случая.

*Случай  $c > 0$ .* В силу (4), (7) и (18) любое решение  $f$  уравнения (1) при  $c \in (0, 2]$  удовлетворяет равенствам  $|\partial_\varphi^2 f| = \infty$ ,  $\varphi = \pi/2$ , и

$$f, \partial_\varphi^2 f = 0, \quad \varphi = 0; \quad f = 0, \quad \partial_\varphi f(\varphi; p^2) = 2\tau f(\pi/6; p^2), \quad \varphi = \pi/2, \quad (32)$$

а при  $c > 2$  — равенствам

$$f, \partial_\varphi^2 f = 0, \quad \varphi = 0; \quad f, \partial_\varphi^2 f = 0, \quad \varphi = \pi/2. \quad (33)$$

Поэтому при  $c \in (0, 2]$  уравнение (1) дополняется до краевой задачи граничными условиями (32), а при  $c > 2$  — граничными условиями (33). Затем к такой краевой задаче применяется алгоритм 4'': после замены (31) уравнение (1) записывается во внутренних ( $0 < j < M$ ) узлах  $\varphi_j$  сетки  $\Delta_\varphi$ , а граничные условия — в соответствующих крайних узлах  $\varphi_0 = 0$  и  $\varphi_M = \pi/2$ . Полученное матричное уравнение  $\mathbf{A}(c, p^2) \mathbf{X} = 0$  решается численно: приближенное значение  $\tilde{p}^2(c)$  энергии  $p^2(c)$  вычисляется как корень уравнения  $\det \mathbf{A}(c, p^2) = 0$ , затем определяется соответствующий столбец  $\mathbf{X}$ . Аппроксимирующий функцию  $f$  сплайн  $S_{31}$  вычисляется как сумма (31).

Поточечную сходимость такой аппроксимации четвертого порядка по шагу сетки  $\Delta_\varphi$  иллюстрирует рис. 1. На нем изображены графики десятичного логарифма  $\chi_0$ ,

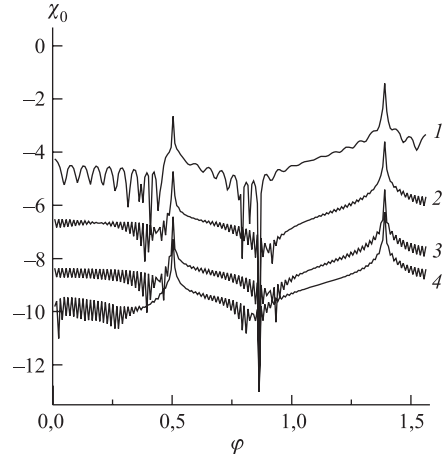


Рис. 1. Функция  $\chi_0(\varphi, M)$ : кривая 1 —  $M = 31$ ; 2 —  $M = 103$ ; 3 —  $M = 301$ ; 4 —  $M = 502$

$$\chi_0(\varphi; M) \equiv \log \left| \frac{|S_{31}(\varphi)|}{|f(\varphi; p^2 = 36)| + \delta} - 1 \right|, \quad \delta = 10^{-14}, \quad (34)$$

относительной точности, с которой сплайн  $S_{31}$ , вычисленный при значениях  $c = 4$  и  $M = 30, 102, 300, 501$ , приближает точное решение — нормированную условием  $f(\pi/4; p^2 =$

36) =  $S_{31}(\pi/4)$  сумму (25). Вычисленное значение  $\tilde{p}_1^2$  сходится к точному сверху:  $\tilde{p}^2 - 36 = 2 \cdot 10^{-4}, 2 \cdot 10^{-6}, 2 \cdot 10^{-8}, 3 \cdot 10^{-9}$ , если  $M = 30, 102, 300, 501$ .

Все корни уравнения  $\det \mathbf{A}(c, p^2) = 0$ , вычисленные при значениях  $c = 0, 1; 1; 10; 100$  и  $M = 30, 102, 300, 501$ , — действительные, простые и сходятся к своим предельным при  $M \rightarrow \infty$  значениям. Предельное множество таких корней дискретно, что подтверждает гипотезу о дискретности действительного спектра задачи (1)–(4) в рассмотренном случае  $c \geq 0$ .

*Случай  $c < 0$ .* Теперь ожидается, что энергетический спектр  $\{p^2\}$  — сплошной и невырожденный. Поэтому постановка задачи иная: необходимо вычислить действительную собственную функцию  $f$  при заданных действительных  $c$  и  $p^2$ . Асимптотика (14) этой функции при  $\varphi \rightarrow \pi/2$  содержит заранее не известные коэффициенты  $A$  и  $B$ . Асимптотики (15) или (16) действительных фундаментальных решений  $f^\pm$  не содержат никаких неизвестных коэффициентов. Поэтому удобнее сначала вычислить функции  $f^\pm$ , а затем найти функцию  $f$  по формуле (19). Поведение функций  $f^\pm$  при  $\varphi \rightarrow 0$  неизвестно, уже поэтому необходимо модифицировать алгоритм 4''.

Опишем предлагаемые модификации на примере фундаментального решения  $f \equiv f^+$  уравнения (1) при условии, что  $c$  и  $p^2$  заданы, но известна лишь асимптотика (15) или (16) этого решения при  $\varphi \rightarrow \pi/2$ . Пусть  $\varphi_k$  — некоторая точка сетки  $\Delta_\varphi$ , настолько близкая к ее последней точке  $\varphi_M = \pi/2$ , что на отрезке  $[\varphi_k, \varphi_M]$  функцию  $f^+$  можно положить равной сумме двух первых слагаемых ее асимптотики (15) или (16). После замены (31) искомой функции  $f \equiv f^+$  сплайном  $S_{31}$  запишем уравнение (1) в узлах  $\varphi = \varphi_j, j = 1, \dots, k$ , а упомянутое выше асимптотическое равенство — в остальных узлах  $\varphi = \varphi_{k+1}, \dots, \varphi_M$ . Полученную систему  $M$  линейных и неоднородных уравнений для  $M + 3$  неизвестных  $X_n$  необходимо дополнить тремя уравнениями до системы с квадратной матрицей. Дополнительные уравнения можно вывести двумя способами: подчинить искомый сплайн  $S_{31}$  вместо функции  $f$  уравнению (1) или же асимптотическому равенству в трех точках, отличных от узлов сетки и принадлежащих в первом случае интервалу  $(0, \varphi_k)$ , а во втором — интервалу  $(\varphi_k, \varphi_M)$ . В любом случае дискретным аналогом краевой задачи (1), (15) или (1), (16) для фундаментального решения  $f = f^+$  будет неоднородное матричное уравнение  $\mathbf{A}^+ \mathbf{X} = \mathbf{C}^+$ . Элементы его столбца  $\mathbf{C}^+$  — значения функции  $s^{1/2+\nu}$  или  $s^{1/2} \sin(|\nu| \ln s)$  в узлах  $\varphi_j > \varphi_k$ . Дискретный аналог  $\mathbf{A}^- \mathbf{X} = \mathbf{C}^-$  для фундаментального решения  $f^-$  выводится таким же способом.

• *Случай «обрезанного» поля.* Теперь в уравнении (1) потенциал  $c(\sec \varphi)^2$  заменен нулем при  $\varphi > \varphi_b \neq \pi/2$ , а функция  $f$  — сумма

$$f = \Theta(\varphi_b - \varphi) f_< + \Theta(\varphi - \varphi_b) f_>, \quad f_> \equiv \sin ps/p = s + (ps)^3/(6p) + \dots \quad (35)$$

При любом  $c$  такая сумма удовлетворяет равенству  $\partial_\varphi^2 f = 0$ ,  $\varphi = \pi/2$ , и всем остальным равенствам (33). Исследуемое уравнение с граничными условиями (33) сводится тем же, что и в рассмотренном выше случае  $c > 0$ , способом к уравнению  $\mathbf{A}(p^2, c) \mathbf{X} = 0$  и при  $c \geq 0$ , и при  $c < 0$ . Вычисляемый спектр  $\{p^2(c)\}$  определяется уравнением  $\det \mathbf{A}(p^2, c) = 0$  и поэтому является дискретным при любом  $c$ .

*Случай  $\partial_\varphi^2 f = 0$ ,  $\varphi = \pi/2$ .* Вернемся к исходному уравнению (1). Примем условие  $\partial_\varphi^2 f = 0$ ,  $\varphi = \pi/2$ , для всех значений параметра  $c$ . Тогда, как и в случае «обрезанного» поля, уравнение (1) при любом  $c$  дополнится граничными условиями (33), полученная краевая задача сведется к матричному уравнению  $\mathbf{A}(p^2, c) \mathbf{X} = 0$ , а вычисляемый спектр  $\{p^2(c)\}$  также будет дискретным при любом  $c$ .

Пусть  $f$  — собственная функция (35) в случае «обрезанного» поля, а  $\varphi_b = \varphi_{M-1}$ . Сравним ее с вычисленным при том же собственном значении  $p^2$  сплайном  $S_{31}(\varphi)$ . Функции  $f$ ,  $S_{31}$  и  $\partial_\varphi^2 f$ ,  $\partial_\varphi^2 S_{31}$  подчинены одинаковым граничным условиям в точках  $\varphi = 0, \pi/2$ , а в точках  $\varphi_1, \dots, \varphi_{M-1}$  удовлетворяют одному и тому же уравнению (1). Далее, в точке  $\varphi = \varphi_{M-1}$  функции  $f$  и  $S_{31}$  непрерывно дифференцируемы. Если  $\varphi \geq \varphi_{M-1}$ , то сплайн  $S_{31}$  — полином  $\alpha s + \beta s^3$ . Его коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  не изменятся, если потенциал  $c(\sec \varphi)^2$  при  $\varphi > \varphi_{M-1}$  заменить любой другой функцией, например, положить равным нулю, т.е. «обрезать» в точке  $\varphi_{M-1}$ . В той же области  $\varphi \geq \varphi_{M-1}$  функция  $f = f_{>}$  аппроксимируется полиномом того же типа, что и сплайн  $S_{31}$ . Следовательно, сплайн  $S_{31}$  приближает собственную функцию  $f$  уравнения (1) в случае «обрезанного» в предпоследней точке  $\varphi_{M-1}$  сетки  $\Delta_\varphi$  потенциала  $\Theta(\varphi_b - \varphi) c(\sec \varphi)^2$ . Таким образом введение условия  $\partial_\varphi^2 f = 0$ ,  $\varphi = \pi/2$  и применение алгоритма 4'' эмулирует случай «обрезанного» поля.

В случае  $c < 0$  предложенный модифицированный сплайн-алгоритм позволяет воспроизводить сложную асимптотику собственной функции  $f$  вблизи точки  $\varphi = \pi/2$  при сравнительно редкой сетке  $\Delta_\varphi$ , т.е. при небольшой размерности матрицы  $\mathbf{A}$ . В этом заключается неоспоримое преимущество сплайн-аппроксимации по сравнению с фурье-аппроксимацией, описанной в разд. 2. Основной недостаток сплайн-аппроксимации очевиден: для ее реализации приходится не только хранить в оперативной памяти компьютера всю несимметричную и неразряженную матрицу  $\mathbf{A}$ , но и оперировать такой матрицей.

#### 4. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОГО СПЕКТРА

Перейдем к обсуждению итогов численного анализа задачи (1)–(4), выполненного по описанным в разд. 3 схемам при  $\tau = 4/\sqrt{3}$ .

Для выяснения качественных особенностей поведения собственных функций высокая точность их вычисления не требовалась и поэтому использовалась сравнительно редкая ( $M = 80$ ) сетка  $\Delta_\varphi$ . Полагалось  $c = 1, 5, 70$ , затем вычислялось соответствующее наименьшее собственное значение  $p^2 = p_1^2(c) \approx 13,87; 41,05; 157,5$  и собственная функция  $f$ , т.е. волновая функция основного состояния. Затем задавались пары  $(c, p_1^2) = (-0,5; -5,13), (-0,3; -0,173), (0,4), (0,3; 7,28), (0,5; 9,27)$  значений  $c$  и  $p^2$ , в качестве  $\varphi_k$  использовался узел сетки  $\Delta_\varphi$  с номером  $k = 60$ , а потом вычислялась соответствующая таким  $c, p^2$  и  $k$  функция  $f$ . Графики вычисленных функций, нормированных условием  $\max f(\varphi; p^2) = 1$ ,  $\varphi \in [0, \pi/2]$ , представлены на рис. 2.

Как видно из рис. 2, а, если потенциал  $c(\sec \varphi)^2$  взаимодействия  $V^{\text{eff}}$  притягивающий ( $c < 0$ ), а энергия  $p^2 = \tilde{p}_1^2$  основного состояния частицы уменьшается, то ее волновая функция  $f$  локализуется вблизи точки  $\varphi = \pi/2$  и частица стягивается в точку  $\varphi = \pi/2$ , т.е. происходит коллапс. Согласно рис. 2, б в случае отталкивающего ( $c > 0$ ) потенциала при увеличении энергии  $p^2 = p_1^2$  число осцилляций волновой функции  $f$  основного состояния возрастает.

Физически наиболее интересны состояния частицы в случае притягивающего потенциала  $c(\sec \varphi)^2$ ,  $c < 0$ , взаимодействия  $V^{\text{eff}}$ . Для анализа особенностей поведения ее

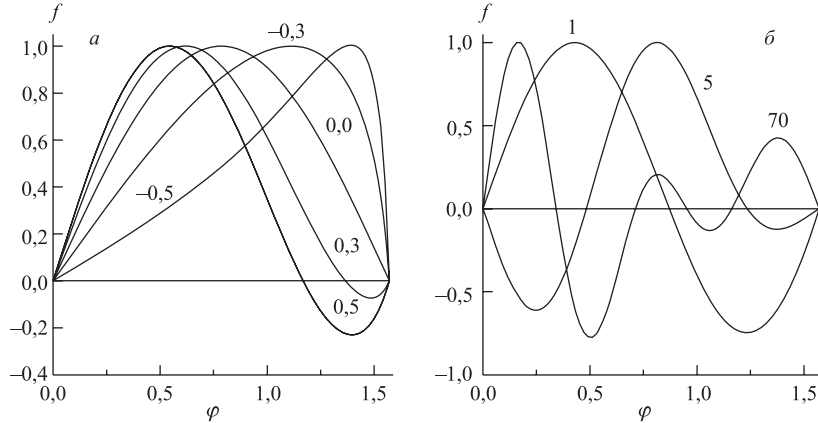


Рис. 2. Функция  $f(\varphi; p_1^2(c))$ , цифры у кривых — значения параметра  $c$  поля (2): а)  $c = 0, \pm 0, 3, \pm 0, 5$ ; б)  $c = 1, 5, 70$

волновой функции  $f(\varphi; p^2)$ , нормированной известным в квантовой механике [1] условием

$$\int_0^{\pi/2} |f(\varphi; p^2)|^2 d\varphi = 1 \quad (36)$$

на единичную плотность вероятности  $|f|^2$ , задавались те же значения  $c = -1/8$  и  $p^2 = -9, -3, 0, 4, 6$  или  $c = -25/4$  и  $p^2 = -36, -9, 0, 9$ , для которых решения  $\Phi$  задачи (5), (6), подчиняющиеся условию

$$\int_0^{\pi/2} |\Phi(\varphi; p^2)|^2 d\varphi = 1,$$

изображены на рис. 8 в работе [7]. Оказалось, что волновые функции  $f$  и плотности вероятности  $|f|^2$ , вычисленные как сплайны  $S_{31}(\varphi)$  при довольно густой ( $M = 999$ ) сетке  $\Delta_\varphi$  и выборе  $\varphi_k$  с  $k = 700$ , имеют те же особенности, что и функции  $\Phi$  и  $|\Phi|^2$ : с уменьшением  $p^2$  функция  $|f|^2$  локализуется вблизи точки  $\pi/2$ , причем в случае  $c = -1/8 > -1/4$  вблизи этой точки  $|f|^2$  не имеет нулей, а в случае  $c = -25/4 < -1/4$  обладает таковыми. Эти выводы иллюстрируют коллапс частицы в сингулярную точку  $\varphi = \pi/2$  нелокального поля (2).

Далее исследовался случай «обрезанного» поля. Для анализа зависимости энергии  $p^2 = p_n^2(c; \varphi_b)$  частицы от параметров  $c$  и  $\varphi_b$  расчеты выполнялись в четырех случаях:  $M = 102, 300, 501, 999$ . В каждом из этих случаев полагалось  $\varphi_b = \varphi_{M-1}$ ,  $s_b = \pi/2 - \varphi_b = \pi/2M$ , а вычисленные значения упорядочивались по их номеру:  $p_n^2(c; \varphi_b) < p_{n+1}^2(c; \varphi_b)$ .

Наблюдались следующие закономерности. Энергия  $p_n^2(c; \varphi_b)$  — монотонно возрастающая функция параметра  $c$  на отрезке  $c \in [-10, 100]$ . Энергия  $p_n^2(c; \varphi_b)$  слабо зависит от  $\varphi_b$ , если  $c \in [-1/4, 100]$ . Если же  $c \in [-10, -1/4]$ , то  $p_n^2(c; \varphi'_b) < p_n^2(c; \varphi_b)$  при  $\varphi'_b > \varphi_b$ , и  $p_n^2(c; \varphi_b)$  существенно зависит от  $\varphi_b$ . Например, если  $\varphi_b = \pi/2 - \pi/2M$ , а  $M$  принимает значения 102, 300, 501, 999, то нуль  $c^1(\varphi_b)$  функции  $p_1^2(c; \varphi_b)$  приближенно равен  $-0, 286, -0, 275, -0, 271, -0, 267$ . При  $M = 999$  функции  $p_n^2(c; \varphi_b)$ ,  $n = 1, 2, 3$ , имеют нули  $c^n(\varphi_b) \approx -0, 267; -0, 532; -1, 167$ .

Перечисленные выше факты указывают на то, что при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$  и  $c \geq -1/4$  энергетический спектр  $\{p^2(c; \varphi_b)\}_{n=1}^\infty$  сходится к единственному и дискретному спектру  $\{p^2(c)\}_{n=1}^\infty$  исходной задачи (1)–(4) с «необрезанным» взаимодействием  $V^{\text{eff}}$ , а при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$ , но  $c < -1/4$  нули  $c^n(\varphi_b)$  сгущаются к точке  $c = -1/4$  слева при уменьшении номера  $n$ . Следовательно, если спектр  $\{p^2(c)\}_{n=1}^\infty$  определять как предельный при  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$ , то значения  $p^2(c) < 0$  имеются уже при любом  $c$ , меньшем  $-1/4$ , например, при  $c < c^1(\varphi_b) \approx -0,267$ .

Наглядное представление о вычисленном спектре  $\{p_n^2(c)\}_{n=1}^{M-1}$  в случае  $M = 999$  и  $\varphi_b = (\pi/2)/999$  дают рис. 3, а, б, на которых сплошными линиями изображены собственные значения  $p_n^2(c) \equiv p_n^2(c; \varphi_b)$  как функции аргумента  $c$ , а отрезок горизонтальной прямой является графиком особого собственного значения  $p^2(c) = 16$ , которому отвечает точное решение  $f = \sin 4\varphi$ . На рис. 3, а темными квадратами обозначены точки  $(c, p^2)$  с абсциссами  $c = -2, -1$  и ординатами  $p^2$ , найденными в работе [9] численным решением задачи (1)–(4) при  $\tau = 1$ . Использованный алгоритм в этой работе не был описан. На рис. 3, б темными кружками обозначены точки  $(c, p^2)$  с абсциссами  $c = c^\mu$  и ординатами  $p^2 = 4m^2 = (t+2)^2$ . Значения  $c^\mu$  взяты из табл. 4 работы [6]. При таких значениях  $c$  и  $p^2$  существуют точные решения (23). На обоих обсуждаемых рис. 3, а, б для сравнения штриховыми линиями представлены графики собственных значений  $p_n^2(c; \varphi_b)$  задачи (5), (6) в случае «обрезанного» в той же точке  $\varphi_b = (\pi/2)/999$  потенциала  $\Theta(\varphi_b - \varphi) c (\sec \varphi)^2$ . Для вычисления таких собственных значений эта задача дополнялась граничными условиями  $\partial_\varphi^2 \Phi = 0, \varphi = 0, \pi/2$ , а полученная задача решалась тем же сплайн-алгоритмом  $A''$ .

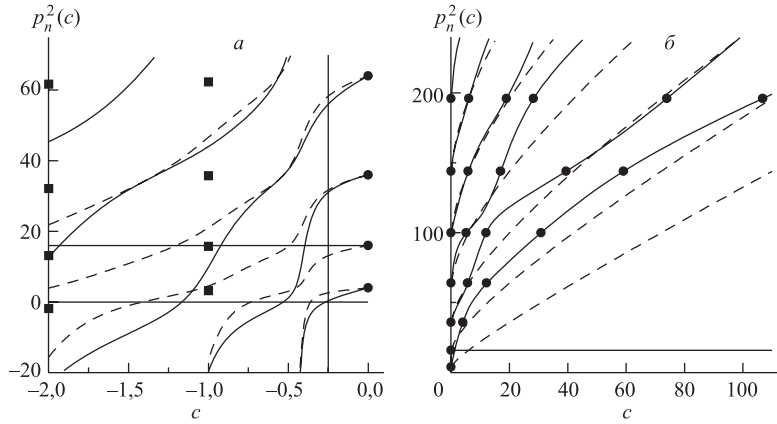


Рис. 3. Собственные значения  $p_n^2(c)$

В случае  $c = 0$  обе задачи (1)–(4) и (5), (6) вырождаются в одну и ту же краевую задачу, а именно: в уравнение  $(\partial_\varphi^2 + p^2) f = 0$  с условиями  $f = 0, \varphi = 0, \pi/2$ . Спектр такой задачи  $\{p_n^2 = 4n^2\}_{n=1}^\infty$  — счетный. Сплошную и штриховую кривые, выходящие при  $c = 0$  из одной и той же точки ( $c = 0, p_n^2 = 4n^2$ ), назовем соответствующими. Согласно рис. 3 при данном значении  $c$  сплошная кривая лежит выше или ниже соответствующей ей штриховой кривой или даже пересекается с ней. Следовательно, вклад интегрального слагаемого взаимодействия  $V^{\text{eff}}$  в энергию  $p_n^2$  может быть положительным, отрицательным и нулевым.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Суммируем основные результаты работы.

Поставленная во введении задача решена: при любом действительном параметре  $c$  нелокального взаимодействия  $V^{\text{eff}}$  предложены и проиллюстрированы два довольно простых способа вычисления действительного спектра краевой задачи Шредингера (1)–(4), основанные на фурье- и сплайн-аппроксимации искомой функции.

Первый способ реализуется решением систем линейных уравнений с разреженными, а именно с трехдиагональными матрицами Якоби, и последующим вычислением сумм Фурье, второй — решением систем того же типа, но с несимметричной и неразряженной матрицей, и последующим вычислением кубического сплайна.

Перечислим главные физические следствия выполненных расчетов.

В нелокальном поле  $V^{\text{eff}}$  при  $c > 0$  частица имеет действительный, дискретный и ограниченный снизу величиной  $p_1^2(c)$  энергетический спектр; в случае  $c < 0$  ее действительный энергетический спектр — сплошной и не ограничен ни снизу, ни сверху; условие  $c < 0$  является достаточным для коллапса частицы.

В любом «обрезанном» поле  $\Theta(\varphi_b - \varphi)V^{\text{eff}}$ ,  $\varphi_b \neq \pi/2$ , частица имеет действительный, дискретный, не ограниченный сверху и ограниченный снизу величиной  $p_1^2(c; \varphi_b)$  энергетический спектр; при  $c \geq -1/4$  и  $\varphi_b \rightarrow \pi/2$  этот спектр сходится к точному спектру в поле  $V^{\text{eff}}$ ; ни при каких  $c$  и  $\varphi_b \neq \pi/2$  значение  $p^2 = -\infty$  не достижимо и коллапс не возможен.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 04-02-16828).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Йоргенс К., Вайдман И. Спектральные свойства гамильтоновых операторов. М.: Мир, 1976.
3. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
4. Pupyshov V. V. // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. V. 36. P.L13.
5. Пупышев В. В. // ТМФ. 2001. Т. 128. С. 268.
6. Пупышев В. В. // ЯФ. 2003. Т. 66. С. 64.
7. Пупышев В. В. // ЭЧАЯ. 2004. Т. 35. С. 257.
8. Пупышев В. В. Препринт ОИЯИ Р5-2004-185. Дубна, 2004.
9. Avishai Y. // J. Math. Phys. 1975. V. 16. P. 1491.
10. Смирнов В. И. Курс высшей математики. М.: Наука, 1974. Т. 3. Ч. 2.
11. Pupyshov V. V. // Book of Abstr. of V Intern. Congress on Mathematical Modelling, Dubna, Sept. 30 – Oct. 10, 2002. V. 1. P. 169.
12. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
13. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976.
14. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.

Получено 16 декабря 2004 г.