



УДК 539.182/184, 519.677

О ВЫЧИСЛЕНИИ АТОМНЫХ ИНТЕГРАЛОВ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫМИ ФУНКЦИЯМИ

В. В. Нечаев, О. Д. Зиганшина, Н. К. Сучкова

Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина
Email: VL-Nechaev@yandex.ru

Рассмотрен новый тип корреляционных атомных интегралов, возникающих в вариационных расчетах энергии трехчастичных кулоновских систем. Подынтегральная функция в них наряду с линейным членом по межчастичному расстоянию под экспонентой дополнительно содержит квадратичный член. Показано, что эти интегралы аналитически выражаются через функцию Фаддеевой чисто мнимого аргумента и ее производные. Разработан устойчивый и быстрый алгоритм для вычисления производных функции Фаддеевой до двадцатого порядка. Даны тестовые значения исследованных специальных функций.

Ключевые слова: атомные интегралы, трехчастичные кулоновские системы, производные функции Фаддеевой, устойчивый алгоритм расчета.

Calculation of Atomic Integrals with Exponentially Correlated Functions

V. V. Nechaev, O. D. Ziganshina, N. K. Suchkova

A new type of correlation atomic integrals occurring in variation energy calculations of three-particle Coulomb systems is studied. A integrand in them along with an interparticle distance linear term under an exponent additionally contains a quadratic term. It is demonstrated that these integrals are analytically expressed through Faddeeva function of a pure imaginary argument and its derivatives. A stable and fast algorithm for calculation of Faddeeva function derivatives to the twentieth order is developed. The test values of the studied special functions are provided.

Keywords: atomic integrals, three-particle Coulomb systems, derivatives of Faddeeva function, stable algorithm for calculation.

При проведении высокоточных вариационных расчетов энергии трехчастичных кулоновских систем возникает необходимость в быстром вычислении следующих шестикратных интегралов [1]:

$$I(i, j, k) = \int r_1^i r_2^j r_{12}^k \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12} - b r_1 - c r_2) dV_1 dV_2, \quad (1)$$

где, i, j, k – целые числа; r_1, r_2 – модули радиус-векторов точек 1 и 2 относительно некоторой точки трехмерного пространства; r_{12} – расстояние между точками 1 и 2; α, β, b, c – постоянные действительные коэффициенты; dV_1, dV_2 – элементы объема для векторов r_1, r_2 соответственно.

В исходном выражении (1) можно провести интегрирование по угловым переменным с использованием преобразования, предложенного в [2]. Перейдем к сферическим координатам для каждого трехмерного интеграла и свяжем полярную ось системы координат для внутреннего интеграла с радиус-вектором r_1 для внешнего интеграла. Учитывая, что

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\theta),$$

$$dr_{12} = -\frac{r_1 r_2}{r_{12}} d(\cos(\theta))$$

получаем

$$I(i, j, k) = \int_0^\infty d\varphi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin(\theta_1) \int_0^{2\pi} d\varphi_2 R(i, j, k) = 8\pi^2 R(i, j, k), \quad (2)$$

где

$$I(i, j, k) = \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} r_1^{i+1} r_2^{j+1} r_{12}^{k+1} \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12} - b r_1 - c r_2).$$

Интеграл (2) сходится при условии

$$((\alpha > 0) \wedge (b + c > 0)) \vee ((\alpha = 0) \wedge (b + c > 0) \wedge (b + \beta > 0) \wedge (c + \beta > 0)). \quad (3)$$

Докажем это утверждение для $I(-1, -1, -1)$. Воспользуемся периметрическими координатами [3]. Связь r_1, r_2, r_{12} с новыми координатами в общем случае задается линейным преобразованием:

$$r_1 = a_2 \rho_2 + a_{12} \rho_{12},$$

$$r_2 = a_{12} \rho_{12} + a_1 \rho_1,$$

$$r_{12} = a_1 \rho_1 + a_2 \rho_2,$$

где a_1, a_2, a_{12} – постоянные, отличные от нуля коэффициенты. Требование отличия коэффициентов от нуля необходимо для биективности преобразования. Положим $a_1 = a_2 = a_{12} = 1$. Якобиан перехода в этом случае имеет вид

$$J = \det \begin{vmatrix} 0 & a_2 & a_{12} \\ a_1 & 0 & a_{12} \\ a_1 & a_2 & 0 \end{vmatrix} = 2a_1 a_2 a_{12} = 2.$$



Основное достоинство периметрических координат заключается в том, что они позволяют перейти от зависимых пределов в интеграле (2) к независимым. В таких координатах условие треугольника

$$\begin{aligned} |r_2 - r_{12}| &\leq r_1 \leq r_2 + r_{12}, \\ |r_{12} - r_1| &\leq r_2 \leq r_{12} + r_1, \\ |r_1 - r_2| &\leq r_{12} \leq r_1 + r_2 \end{aligned}$$

выполняется автоматически для любых сочетаний периметрических координат $\rho_1, \rho_2, \rho_{12}$, т. е.

$$\begin{aligned} I(-1, -1, -1) &= 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12}) dr_{12} \int_0^\infty \exp(-br_1) dr_1 \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} \exp(-cr_2) dr_2 = \\ &= 16\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-\alpha(\rho_1 + \rho_2)^2 - (\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2) \int_0^\infty d\rho_{12} \exp(-(b + c)\rho_{12}). \end{aligned} \quad (4)$$

Из этого выражения следует необходимое условие сходимости $b + c > 0$.

Теперь рассмотрим два случая:

1) $\alpha = 0$.

Интеграл $\int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-(\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2)$

представляется в виде двух сомножителей

$\int_0^\infty d\rho_1 \exp(-(\beta + c)\rho_1)$ и $\int_0^\infty d\rho_2 \exp(-(\beta + b)\rho_2)$, откуда вытекают еще два условия сходимости $-\beta + b > 0$ и $\beta + c > 0$.

2) $\alpha \neq 0$. Очевидно, интеграл (4) расходится при $\alpha < 0$. При $\alpha < 0$ интеграл

$\int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-\alpha(\rho_1 + \rho_2)^2 - (\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2)$

всегда меньше, чем интеграл

$$\int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-\alpha\rho_1 - \alpha\rho_2 - (\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2).$$

Данный интеграл факторизуется на интегралы

$$\int_0^\infty d\rho_1 \exp(-\alpha\rho_1^2 - (\beta + b)\rho_1),$$

$$\begin{aligned} I(-1, -1, -1) &= 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12}) dr_{12} \int_0^\infty \exp(-br_1) dr_1 \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} \exp(-cr_2) dr_2 = \\ &= 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12}) \varphi(r_{12}) dr_{12} = \end{aligned} \quad (6)$$

$$= \frac{8\pi^2}{\alpha(b+c)(x-y)} (g_0(y) - g_0(x)) = \frac{4\pi^2}{\alpha\sqrt{\alpha}(x+y-t)} \left(\frac{g_0(y) - g_0(x)}{(x-y)} \right),$$

где $x = (b + \beta) / 2\sqrt{\alpha}$, $y = (c + \beta) / 2\sqrt{\alpha}$, $t = \beta / \sqrt{\alpha}$,

$$\varphi(x) = \int_0^\infty \exp(-bz) \int_{|z-x|}^{z+x} \exp(-cy) dy = \frac{2(\exp(-bx) - \exp(-cx))}{(c^2 - b^2)}, \quad g_0(x) = \exp(x^2) \int_x^\infty \exp(-z^2) dz.$$

они независимы. Так же как и межчастичные расстояния, периметрические координаты положительны.

Введем вспомогательный производящий интеграл:

$$I(-1, -1, -1) = \int \frac{\exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12} - br_1 - cr_2)}{r_1 r_2 r_{12}} dV_1 dV_2.$$

Проведем интегрирование по угловым переменным как в уравнении (2) и преобразуем его к периметрической системе координат:

$$\int_0^\infty d\rho_2 \exp(-\alpha\rho_2^2 - (\beta + c)\rho_2),$$

которые, при сделанном предположении $\alpha < 0$, сходятся независимо от величин $\beta + c$ и $\beta + b$. Снизу величина интеграла (4) ограничена нулем, что доказывает сходимость $I(-1, -1, -1)$.

Интегралы $I(i, j, k)$ с $i \geq -1, j \geq -1, k \geq -1$ определяются дифференцированием производящего интеграла $I(-1, -1, -1)$ по параметрам β, b, c :

$$I(i, j, k) = \left(-\frac{\partial}{\partial b}\right)^{i+1} \left(-\frac{\partial}{\partial c}\right)^{j+1} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{k+1} I(-1, -1, -1). \quad (5)$$

Интегралы (1) хорошо известны для случая $\alpha = 0$ [2–6]. Далее мы покажем, что в более общем случае $\alpha \neq 0$ они аналитически выражаются через функцию Фаддеевой [7] чисто мнимого аргумента и ее производные, а также рассмотрим устойчивый алгоритм их расчета.

Найдем аналитическое выражение для $I(-1, -1, -1)$:



Последняя функция возникает при интегрировании экспоненты от квадратичного полинома:

$$\int_0^{\infty} \exp(-z^2 - 2xz) dz = g_0(x). \quad (7)$$

$g_0(x)$ – это вспомогательная функция, которая носит название масштабированной дополнительной функции ошибок. Некоторые свойства $g_0(x)$ можно найти в [8], где рассмотрена функция комплексного аргумента $w(z) = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz)$, так называемая функция Фаддеевой. Для чисто мнимого аргумента $w(z)$ с точностью до множителя совпадает с $g_0(x)$. Для случая комплексного аргумента эффективный алгоритм ее вычисления был разработан в работе [9] и недавно улучшен [10].

При дифференцировании интеграла $I(-1, -1, -1)$ по параметрам β, b, c (5) возникают производные от функции $g_0(x)$ высокого порядка

$$g_n(x) = (g_0(x))^{(n)},$$

эффективное и точное вычисление которых представляет самостоятельную проблему. Специфика прикладных задач [1] такова, что необходимо рассчитывать десятки тысяч интегралов (1) для различных значений параметров α, β, b, c с заданной точностью, поэтому использование имеющихся систем аналитических вычислений (Maple [11], Mathematica [12] и др.) ограничено тестовыми расчетами для отдельных частных случаев. В связи с этим нами была поставлена задача изучения свойств $g_n(x)$ и разработки быстрого, устойчивого алгоритма их вычисления.

Данные функции знакопостоянны (четные – положительные, нечетные – отрицательны):

$$g_{2j}(x) > 0, \quad g_{2j+1}(x) < 0, \quad j \geq 0. \quad (8)$$

Это свойство следует из формулы, получаемой дифференцированием (7):

$$g_n(x) = (-2)^n \int_0^{\infty} z^n \exp(-z^2 - 2xz) dz,$$

так как подынтегральное выражение всегда неотрицательно. Функции $g_n(x)$ подчиняются рекуррентным соотношениям:

$$g_1(x) = 2xg_0(x) - 1, \quad (9)$$

$$g_n(x) = 2xg_{n-1}(x) + 2(n-1)g_{n-2}(x) \quad (10)$$

и обладают следующими свойствами на бесконечности:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} g_n(x)x^{-n} \exp(-x^2) = 2^n \sqrt{\pi},$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} g_n(x)x^{n+1} = (-1)^n \frac{n!}{2}. \quad (11)$$

При $x = 0$ можно получить простые соотношения $g_{2n}(0) = 2^{n-1}(2n-1)!!\sqrt{\pi}$, $g_{2n+1}(0) = -2^n(2n)!!$.

Функцию $g_n(x)$ можно также представить в виде

$$g_n(x) = g_0(x)K_n(x) + L_n(x), \quad (12)$$

где $K_n(x), L_n(x)$ – полиномы, как и $g_n(x)$, подчиняющиеся рекуррентной формуле (9), причем $K_0(x) = 1, K_1(x) = 2x; L_0(x) = 0, L_1(x) = -1$. $K_n(x)$ выражаются через полиномы Эрмита комплексного аргумента $K_n(x) = (-1)^n H_n(ix)$. Первое слагаемое правой части отношения

$$g_0(x) = -L_n(x)/K_n(x) + g_n(x)/K_n(x) \quad (13)$$

является оценкой сверху (нечетные n) и снизу (четные n) для $g_0(x)$, а при больших n, x оно же может использоваться для подсчета $g_0(x)$. Для доказательства этого рассмотрим систему рекурсий и ограничений

$$x_n = a_n x_{n-2} + b x_{n-1}, \quad (14)$$

$$y_n = a_n y_{n-2} - b y_{n-1}, \quad (15)$$

$$b, x_n, y_n > 0, \quad (16)$$

$$a_n > a_{n-1} > \dots > \max\{0, 1-b\}, \quad (17)$$

т. е. b, x_n , неотрицательны, y_n, a_n положительны, $\{a_n\}$ строго монотонно возрастает.

Лемма 1. Последовательность $\{x_n\}$ при

$$x_0 \leq x_1 \quad b \geq 1 - a_2 x_0 / x_1 \quad b \geq 1 - a_2 x_0 / x_1, \quad (18)$$

удовлетворяющая (14), (16), (17), строго монотонно возрастает, начиная со второго члена.

Доказательство. Из условий (18) и соотношения (14) следует $x_1 - x_0 \geq 0$, $x_2 - x_1 = a_2 x_0 + (b-1)x_1 \geq 0$. Строгая монотонность для следующих членов доказывается по индукции

$$x_n - x_{n-1} = a_n x_{n-2} - a_{n-1} x_{n-3} +$$

$$+ b(x_{n-1} - x_{n-2}) \geq a_{n-1}(x_{n-2} - x_{n-3}) +$$

$$+ b(x_{n-1} - x_{n-2}) \geq 0.$$

Здесь использовано условие (17) для замены a_n на a_{n-1} .

Лемма 2. Последовательности $\{x_{2j}/y_{2j}\}, \{x_{2j+1}/y_{2j+1}\}$, определяемые системой рекурсий (14), (15) и ограничений (16), (17), являются убывающими.

Доказательство. Система неравенств

$$\frac{x_n}{y_n} = \frac{a_n x_{n-2} + b x_{n-1}}{a_n y_{n-2} - b y_{n-1}} > \frac{x_{n-2}}{y_{n-2}} + \frac{b x_{n-1}}{a_n y_{n-1}} > \frac{x_{n-2}}{y_{n-2}}$$

доказывает лемму.

Лемма 3. Если последовательность частичных сумм

$$s_n = \sum_j^n 1/a_j \quad (19)$$

неограничена сверху, то последовательности $\{x_n\}, \{x_n/y_n\}$, определяемые системой рекурсий



(14), (15) и ограничений (16), (17), (18), неограничены сверху.

Доказательство. Из уравнения (15) и условий (16), (17) следует, что

$$y_n < a_n y_{n-2}, \quad y_n < y_m \prod_{j=1}^{[n/2]} a_{2j+m},$$

где $m = \text{mod}(n, 2)$, $[n/2]$ – целая часть числа $n/2$.

Последовательность $\{x_n\}$ строго монотонно возрастает по условию (18) и

$$x_n \geq (a_n + b)x_{n-2}, \quad x_n \geq x_0 \prod_{j=1}^{[n/2]} (a_{2j+m} + b). \quad (20)$$

Тогда

$$\frac{x_n}{y_n} \geq k \prod_{j=1}^{[n/2]} \left(1 + \frac{b}{a_{2j+m}} \right) \geq bk \sum_{j=1}^{[n/2]} \frac{1}{a_{2j+1}}, \quad (21)$$

где $k = \min\{x_1, x_0\} / y_m$.

Последовательность частичных сумм в (21) является неограниченной при $n \rightarrow \infty$, как и последовательность (19). Последовательность $\{x_n\}$ неограниченна в силу выполнения неравенств (17) и (20).

Следствие 1. Прямая рекурсия (9), (10) для функции $g_n(x)$ неустойчива при $x > 0$, а знак ошибки одинаков для всех $g_n(x)$.

Доказательство. Обозначим через $g'_n(x)$ сумму точной функции $g_n(x)$ и ошибки $\varepsilon_n(x)$: $g'_n(x) = g_n(x) + \varepsilon_n(x)$. В соответствии с рекурсией для первого члена (9) ошибка $\varepsilon_1(x) = 2x\varepsilon_0(x)$ имеет тот же знак, что и $\varepsilon_0(x)$, согласно (10) этот знак сохраняется для всех $\varepsilon_n(x)$. Поведение данной функции подчиняется уравнению (14). Последовательность $\{(-1)^n g_n(x)\}$ удовлетворяет (15). Таким образом, ошибка $\varepsilon_n(x)$ не ограничена сверху (лемма 3) и строго монотонно возрастает (лемма 1) при $2x \geq 1 - 2\varepsilon_0(x) / 2x\varepsilon_1(x) = 1 - 1/x$. Поскольку действительных корней уравнение $2x^2 = x - 1$ не имеет, ошибка растет во всей рассматриваемой области ($x > 0$). Относительная ошибка $|\varepsilon_n(x) / g_n(x)|$ возрастает с увеличением n (лемма 2) и также неограниченна (лемма 3).

Следствие 2. Последовательность дробно-полиномиальных функций

$$\{-L_n(x) / K_n(x)\} \quad (22)$$

сходится при $x > 0$ к $g_0(x)$. При этом последовательность четных членов сходится к пределу сверху, а нечетных – снизу.

Доказательство. Перепишем (13) в виде $-L_n(x) / K_n(x) = g_0(x)(1 - g_n(x) / L_n(x))^{-1}$.

Знакопостоянная последовательность $\{-L_n(x)\}$ удовлетворяет (14). В качестве последовательности, присутствующей в (15), снова

будем рассматривать $\{(-1)^n g_n(x)\}$. Тогда из лемм 2 и 3 следует

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |L_n(x) / g_n(x)| = \infty \text{ и } \lim_{n \rightarrow \infty} (-L_n(x) / K_n(x)) = g_0(x).$$

С учетом неравенств (8) получаем

$$-L_{2j}(x) / K_{2j}(x) < g_0(x) < -L_{2j+1}(x) / K_{2j+1}(x),$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (-L_{2j}(x) / K_{2j}(x)) = g_0(x) + 0,$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (-L_{2j+1}(x) / K_{2j+1}(x)) = g_0(x) - 0.$$

В силу леммы 2 последовательности

$$\{L_{2j}(x) / g_{2j}(x)\}, \{L_{2j+1}(x) / g_{2j+1}(x)\}$$

монотонны, а значит, и последовательности

$$\{-L_{2j}(x) / K_{2j}(x)\}, \{-L_{2j+1}(x) / K_{2j+1}(x)\}$$

монотонно приближаются к пределу $g_0(x)$ с разных сторон.

В соответствии со следствием 1 знак ошибки аппроксимации при использовании прямой рекурсии для приближенного вычисления $g_0(x)$ сохраняется для всех $g_n(x)$. Это значит, что если $g'_0(x)$ является верхней (нижней) оценкой для $g_0(x)$, то $g'_n(x)$, вычисленная по прямой рекурсии (9), (10), также будет оценкой сверху (снизу) для $g_n(x)$. Оценка ошибки аппроксимации $g_0(x)$ (22) может быть получена как разность текущего дробно-полиномиального разложения и разложения на единицу (или любое нечетное число) более высокого порядка $\varepsilon_n = |g_0 + L_n / K_n| < |-L_{n+1} / K_{n+1} + L_n / K_n|$. Здесь для краткости обозначено $L_n = L_n(x)$, $K_n = K_n(x)$, $g_n = g_n(x)$, $\varepsilon_n = \varepsilon_n(x)$.

Рассмотрим выражение под знаком модуля

$$-L_{n+1} / K_{n+1} + L_n / K_n = (L_n K_{n+1} - L_{n+1} K_n) / (K_{n+1} K_n).$$

Для его упрощения преобразуем числитель отношения с учетом выполнения рекуррентного соотношения (9) для полиномов L_n, K_n :

$$M_n = L_n K_{n+1} - L_{n+1} K_n =$$

$$= L_n (K_{n+1} - 2xK_n) - L_{n+1} (K_n - 2xL_n) =$$

$$= 2n(L_n K_{n-1} - L_{n-1} K_n) = -2nM_{n-1}.$$

То есть $M_n = (-2)^n n! M_0$, $M_0 = L_0 K_1 - L_1 K_0 = 1$ или $M_n = (-2)^n n!$. Тогда выражение для ошибки примет вид

$$\varepsilon_n = |g_0 + L_n / K_n| < 2^n n! / (K_{n+1} K_n) < 2^n n! / K_n^2.$$

Функция g_n также может быть представлена в виде дробно-полиномиального разложения. Из (12) и (13) следует представление g_n в виде предела последовательности дробно-полиномиальных выражений

$$g_n = \lim_{m \rightarrow \infty} Z_{nm} / K_m, \quad (23)$$

где

$$Z_{nm} = K_m L_n - K_n L_m. \quad (24)$$

Члены последовательности $(K_m L_n - K_n L_m) / K_m$ являются верхними (при четном m) и нижними



оценками (при нечетном m) для g_n в соответствии со следствиями 1, 2 к лемме 3.

Заметим, что $L_n K_{n+1} - L_{n+1} K_n = (-2)^n n!$,

$$\begin{aligned} L_n K_{n+2} - L_{n+2} K_n &= L_n (K_{n+2} - 2(n+1)K_n) - \\ &- K_n (L_{n+2} - 2(n+1)L_n) = \\ &= 2x(L_n K_{n+1} - K_n L_{n+1}) = 2x(-2)^n n!. \end{aligned}$$

При $n \neq m$ величина $L_n K_m - L_m K_n$ является полиномом степени $|n - m| - 1$. Использование данного полинома позволяет избежать ошибок вычитания, возникающих при непосредственном использовании прямой рекурсии. Для представления этого полинома можно использовать многочленную рекурсию.

$$\begin{aligned} \text{Обозначим } Z_{nm} &= L_n K_m - L_m K_n = \\ &= L_n (K_m - (2x)^{m-n} K_n) - K_n (L_m - (2x)^{m-n} L_n). \end{aligned}$$

Из разности

$$\begin{aligned} K_m - (2x)^{m-n} K_n &= \sum_{i=n+1}^m (K_i - 2xK_{i-1})(2x)^{m-i} = \\ &= \sum_{i=n+1}^m 2(i-1)(2x)^{m-i} K_{i-2} \end{aligned}$$

непосредственно следует рекурсия

$$Z_{nm} = \sum_{i=n+1}^m 2(i-1)(2x)^{m-i} Z_{ni-2}, \quad (25)$$

$$Z_{nm} = 0, \quad Z_{nn+1} = (-2)^n n! Z_{01}. \quad (26)$$

Коэффициенты полинома Z_{nm} являются целыми числами и легко могут быть рассчитаны без потери точности при применении к ним рекурсии (25), (26). В результате, Z_{nm} / K_m при $m > n$ задает верхние и нижние границы для g_n .

Для полиномов Z_{nm} может быть определена и другая рекурсия. Для её получения определим минимальное число p , не превышающее n и той же четности, что и m :

$$p = n + \text{mod}(m - n, 2). \quad (27)$$

Преобразуем:

$$K_m - B^{mp} K_p = \sum_{i=p+2}^m B^{mi} (K_i - 2(i-1)K_{i-2}) = \sum_{i=p+2}^m 2xB^{mi} K_{i-1},$$

$$\text{где } B_{mi} = 2^{(m-i)/2} (m-1)!! / (i-1)!! \quad (28)$$

Тогда с учетом равенства

$$Z_{nm} = L_n (K_m - B^{mp} K_p) - K_n (L_m - B^{mp} L_p) + B^{mp} Z_{np}$$

получаем вторую рекуррентную формулу:

$$Z_{nm} = B^{mp} Z_{np} + \sum_{i=p+2}^m 2xB^{mi} Z_{ni-1}. \quad (29)$$

При расчете, а также при исследовании свойств $g_n(x)$ полезно использовать отношение последовательных функций g_n :

$$r_n(x) = g_n(x) / g_{n-1}(x) < 0, \quad n \geq 1.$$

Из формулы (10) для этой функции при $n > 1$ можно получить выражения для прямой и обратной рекурсий:

$$r_n(x) = 2x + \frac{2(n-1)}{r_{n-1}(x)}, \quad (30)$$

$$r_{n-1}(x) = \frac{2(n-1)}{r_n(x) - 2x}. \quad (31)$$

Соотношению (30) соответствует конечная непрерывная дробь

$$r_n(x) = 2x + \frac{2(n-1)}{2x + \frac{2(n-2)}{2x + \dots \frac{2}{2x+1/g_0(x)}}}. \quad (32)$$

Уравнению (31) соответствует бесконечная непрерывная дробь

$$r_n(x) = \frac{-2n}{2x + \frac{2(n+1)}{2x + \frac{2(n+2)}{2x + \dots}} \dots = -\mathbf{K}_{k=n}^{\infty}(2k/2x). \quad (33)$$

При этом прямая рекурсия (30) и обратная (31) должны быть устойчивы для $x < 0$ и $x > 0$ соответственно.

Из формулы (30) и $r_n(x) < 0$ следует

$$|2x| < |r_n(x)| < |2x| + \frac{n-1}{|x|} \quad (x < 0, \quad n > 2). \quad (34)$$

Аналогично, из формулы (31) получаем

$$\frac{n}{x + (n+1)/2x} < |r_n(x)| < \frac{n}{x}, \quad (x > 0, \quad n \geq 1). \quad (35)$$

Из этих свойств, в частности, находим

$$|g_n(x)| < |g_1(x)| \frac{n!}{x^{n-1}}, \quad (x > 0, \quad n \geq 1),$$

$$|g_n(x)| < |g_1(x)(2x)^{n-2}|, \quad (x < 0, \quad n > 2).$$

Обобщением свойств (34), (35) являются следующие неравенства:

$$-\mathbf{K}_{k=0}^{2l} (2(k+n)/2x) < r_n(x) < -\mathbf{K}_{k=0}^{2l+1} (2(k+n)/2x)$$

при $x > 0, n \geq 1$ и

$$2x + \mathbf{K}_{k=1}^{2l+1} (2(n-k)/2x) < r_n(x) < 2x + \mathbf{K}_{k=1}^{2l} (2(n-k)/2x)$$

при $x > 0, n > 2l + 2$, для левой части неравенства и $n > 2l + 1$ для правой ($l = 0, 1, \dots$).

Приведем еще одно соотношение, вытекающее из (10):

$$g_n(x) / g_{n-2}(x) = 2(n-1) + 2xr_{n-1}(x). \quad (36)$$

1. При $x \geq 0$ с учетом $r_{n-1}(x) < 0$ и $g_n(x) / g_{n-2}(x) > 0$ получим

$$0 < g_n(x) / g_{n-2}(x) \leq 2(n-1).$$

2. При $x < 0$ с учетом $r_{n-1}(x) < 0$ и (34) из (36) следует

$$0 < g_n(x) / g_{n-2}(x) < 4(n-1) + 4x^2 \quad (n > 2). \quad (37)$$

Очевидно, последнее неравенство справедливо и для $x \geq 0$.

При разработке программы вычисления $g_n(x)$ мы ограничились $n \leq 20$. Численные расчеты



функций $g_n(x)$ в широком диапазоне x показывают, что прямая рекурсия (10) неустойчива (см. следствие 1). В этом случае можно воспользоваться обратной рекурсией, которая устойчива, но не является уточняющей. Она требует знания точных значений функций $g_{19}(x)$, $g_{20}(x)$. В нашей работе мы использовали для их вычисления на интервале $0 \leq x \leq 6$ интерполяцию кубическими сплайнами и Паде-аппроксимацию. Для $x > 6$ мы использовали разложение в непрерывную дробь [13] отношения двух последовательных функций (33), обратную рекурсию для $r_n(x)$ (31) и рациональную Чебышевскую аппроксимацию для $g_0(x)$ [14]. При $x \leq 0$ применялась прямая рекурсия для функций $r_n(x)$ в сочетании со сплайн-интерполяцией для $g_0(x)$ и $g_1(x)$. Было найдено, что для больших отрицательных x рациональнее пользоваться выражением функций $g_n(x)$ через их значения в положительной области

$$\begin{aligned} g_n(-x) &= \exp(x^2) \int_{-x}^{\infty} dz \exp(-z^2) = \\ &= \exp(x^2) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dz \exp(-z^2) - \int_x^{\infty} dz \exp(-z^2) \right) = \\ &= \sqrt{\pi} \exp(x^2) - g_0(x), \\ g_n(-x) &= (-1)^n \left(\frac{d^n}{dx^n} \sqrt{\pi} \exp(x^2) - g_n(x) \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Соотношение симметрии (38) позволяет получить более точные значения по сравнению с асимптотической формулой (11) и дает возможность избежать различного представления g -функции на отрезках полуоси $(-\infty, 0]$.

Разработанный алгоритм обеспечивал 9 верных знаков для требуемых вспомогательных функций при всех x . В действительности точность расчета зависит только от точности используемых аппроксимаций стартовых функций в уравнениях (9), (10). Заметим, что для важного случая $b = c$ ($x = y$) в выражениях (5), (6) для интегралов (1) имеется неопределенность типа $0/0$. Применяя правило Лопиталья для раскрытия неопределенности, можно найти дополнительные формулы в данном специальном случае. Однако более общим и эффективным оказывается алгоритм, основанный на разложении интеграла (6) в ряд Тейлора вблизи особой точки $b = c$.

Вычислим производную n -го порядка от выражения в квадратных скобках формулы (6) по переменной $r = x - y$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{g_0(y) - g_0(x)}{r} \right]^{(n)} &= \sum_{j=0}^n C_n^j \left(\frac{1}{r} \right)^j [g_0(y) - g_0(x)]^{(n-j)} = \\ &= \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{(-1)^j j!}{r^{j+1}} [(-1)^{n-j} g_{n-j}(y) - g_{n-j}(x)] \left(\frac{1}{2} \right)^{n-j}. \end{aligned}$$

Используя правило Лопиталья, определим производную в точке $r = 0$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{g_0(y) - g_0(x)}{r} \right]_{r=0}^{(n)} &= \\ &= \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{(-1)^j j!}{(j+1)!} \left[(-1)^{n+1} g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right) - g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right) \right] \left(\frac{1}{2} \right)^{n+1} = \\ &= \frac{(-1)^{n+1} - 1}{2^{n+1}} g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right) \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{(-1)^j}{j+1} = \frac{(-1)^{n+1} - 1}{2^{n+1}(n+1)} g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right). \end{aligned}$$

Откуда получим

$$\left[\frac{g_0(y) - g_0(x)}{x - y} \right] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} \left(\frac{x-y}{2} \right)^{2j} g_{2j+1} \left(\frac{x+y}{2} \right).$$

Тогда разложение интеграла (6) в ряд Тейлора можно записать в виде

$$I(-1, -1, -1) = \frac{4\pi^2}{\alpha \sqrt{\alpha(s-t)}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} \left(\frac{r}{2} \right)^{2j} g_{2j+1} \left(\frac{s}{2} \right), \quad (39)$$

где $s = x + y$ и $s - t = (b + c)/(2\sqrt{\alpha}) > 0$ согласно условию (3).

Этот ряд знакопостоянен по свойству (8) и уже не имеет особенности. Члены функционального ряда (39) неотрицательны. Для отношения соседних членов с использованием (37) можно получить следующее неравенство:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{g_{2j+1}(s/2) \frac{(r/2)^2}{2j(2j+1)}}{g_{2j-1}(s/2) \frac{(r/2)^2}{2j(2j+1)}} \leq \lim_{j \rightarrow \infty} \frac{(8j+s^2)}{2j(2j+1)} = 0 < 1.$$

Следовательно, по признаку Даламбера ряд (39) сходится. Если при его вычислении ограничиться $k - 1$ членом, то сумму остаточного ряда можно оценить с помощью системы неравенств. Перепишем (37) в виде $|g_n(x)| < 4(x^2 + n - 1)|g_{n-2}(x)|$. Выберем целое четное число $l > x^2$, тогда

$$|g_n(x)| < 2^{n-m} (l + n - 1)! / (l + m - 1)! |g_m(x)|,$$

где $m = \text{mod}(n, 2)$. Учитывая (8) и формулу Стирлинга для оценки факториала, получаем

$$R_k = \sum_{j=k}^{\infty} \frac{-g_{2j+1}(s/2) \left(\frac{r}{2} \right)^{2j}}{(2j+1)!} < \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!} \sum_{j=k}^{\infty} \frac{2^{2j} (l+2j)^{l/2} \left(\frac{r}{2} \right)^{2j}}{(2j+1)!} <$$



$$\begin{aligned} &< \frac{-g_{2j+1}(s/2)}{(l+m-1)!!} \sum_{j=k}^{\infty} \frac{2^j(l+2j)^{1/2}}{j!} \left(\frac{r}{2}\right)^{2j} < \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!!} \sum_{j=k}^{\infty} \left(\frac{er^2}{2j}\right)^j (l+2j)^{1/2} < \\ &< \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!!} (er^2)^{1/2} \left(1 + \frac{l}{2k}\right)^{1/2} \sum_{j=k}^{\infty} \left(\frac{er^2}{2j}\right)^{j-1/2}. \end{aligned}$$

Для $k > er^2/2$ получаем окончательную оценку

$$R_k < \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!!} \left(er^2 \left(1 + \frac{l}{2k}\right)\right)^{1/2} \frac{(er^2/2k)^{k-1/2}}{1 - (er^2/2k)}.$$

При дифференцировании (39) по параметрам β, b, c (см. 5) получается разложение для соответствующего интеграла (1).

В таблице представлены результаты вычисления вспомогательных функций $g_n(x)$ по программе, реализованной на языке Fortran.

Тестирование всех интегралов было проведено при помощи системы аналитических вычислений Maple [11].

Значения функции $g_0(x)$ и ее производных $g_n(x)$ при различных значениях аргумента

$n \setminus x$	-0.5	0.5	3.0	10.0
0	1.730234434E+0	5.456413608E-1	1.586356399E-1	4.975365939E-2
1	-2.730234434E+0	-4.543586392E-1	-4.818616082E-2	-4.926812176E-3
2	6.190703301E+0	6.369240823E-1	2.815431483E-2	9.710752718E-4
3	-1.711164104E+1	-1.180510475E+0	-2.381875428E-2	-2.857432653E-4
4	5.425586084E+1	2.641034019E+0	2.601336334E-2	1.115863254E-4
5	-1.911489891E+2	-6.803049778E+0	-3.446985417E-2	-5.421961426E-5
6	7.337075976E+2	1.960729041E+1	5.331450836E-2	3.147096890E-5
10	3.011285623E+5	3.044513508E+3	9.302643509E+1	1.329000489E-5
15	-1.517837837E+9	-5.745251213E+6	-1.782099170E+2	-3.489317344E-5
20	1.657950330E+13	2.725817937E+10	1.167747294E+5	4.277646952E-4

Заключение

Таким образом, в настоящей работе получено аналитическое выражение двухчастичного шестикратного интеграла, встречающегося в высокоточных вариационных расчетах трехчастичных кулоновских систем. Разработан устойчивый и быстрый алгоритм для вычисления производных от функции Фаддеевой чисто мнимого аргумента до двадцатого порядка.

Благодарности

Считаем своим приятным долгом выразить благодарность кандидату физико-математических наук Д. А. Шершакову за многочисленные обсуждения, кандидату физико-математических наук В. А. Дубровскому за содействие при выполнении работы.

Список литературы

1. Shershakov D. A., Nechaev V. V., Berezin V. I. Exponential basis functions with quadratic dependence on interelectron distance for variational calculations of two-electron atoms // J. Phys. B. 2000. Vol. 33, № 1. P. 123–130.
2. Calais J.-L., Löwdin P. O. A simple method of treating atomic integrals containing function of r_{12} // J. Mol. Spectr. 1962. Vol. 8, № 3. P. 203–211.
3. Pekeris C. L. Ground state of two-electron atoms // Phys. Rev. 1958. Vol. 112, № 5. P. 1649–1658.
4. Sack R. A., Rootan C. C. J., Kolos W. Recursive evaluation of some atomic integrals // J. Math. Phys. 1967. Vol. 8, № 5. P. 1093–1094.
5. Эфрос В. Д. Задача трех тел. Обобщенное экспоненциальное разложение, произвольные состояния в коррелированном базисе и энергия связи мезомолекул // Журн. эксперим. и теорет. физ. 1986. Т. 90, № 1. С. 10–24.
6. Ley-Koo E., Bunge C. F., Jauregui R. Evaluation of relativistic atomic integrals using perimetric coordinates // Intern. J. Quant. Chem. 1997. Vol. 63, № 1. P. 93–97.
7. Фаддеева В. Н., Терентьев Н. М. Таблицы значений функции $w(z) = e^{z^2} (1 + 2i / \sqrt{\pi}) \int_0^z e^{t^2} dt$ от комплексного аргумента. М., 1954. 268 с.
8. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М., 1979. 832 с.
9. Gautschi W. Efficient computation of the complex error function // SIAM J. Numer. Anal. 1970. Vol. 7, № 1. P. 187–198.



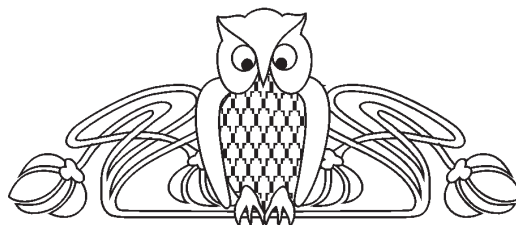
10. Poppe G. P. M., Wijers C. M. More efficient computation of the complex error function // ACM Trans. Math. Soft. 1990. Vol. 16, № 1. P. 38–46.
11. Maplesoft, «Maple», Version 15, Waterloo Maple Inc. (2012). URL: <http://www.maplesoft.com> (дата обращения: 01.07.2012).
12. Wolfram Research, Inc., «Mathematica», Version 8.0, Champaign, IL (2012). URL: <http://www.wolfram.com> (дата обращения: 01.07.2012).
13. Джоунс У., Трон В. Непрерывные дроби / пер. с англ. М., 1985. 414 с.
14. Cody W. J. Rational Chebyshev approximations for the error function // Math. Comput. 1969. Vol. 23, № 107. P. 631–637.

УДК 537.8

ДИНАМИКА ДУАЛЬНОЙ ФАЗЫ

Ю. Н. Зайко

Поволжский институт управления им. П. А. Столыпина – филиал РАНХ и ГС при Президенте РФ, Саратов
E-mail: zyrnick@rambler.ru



В статье рассмотрена динамика дуальной фазы, связанной с дуальным характером дионов – гипотетических частиц, обладающих одновременно электрическим и магнитным зарядом. Получены уравнения, описывающие динамику дуальной фазы из условия, чтобы уравнения Максвелла сохраняли свой вид под действием дуальных преобразований, соответствующий эффективному электрическому характеру заряда диона. Найдены частные решения этих уравнений в вакууме и в поле электрического диполя. Показано, что найденные ранее решения уравнений Максвелла в виде сферических волн с нулевым орбитальным моментом соответствуют монополюному излучению диона. Показан голдстоуновский характер дуальной фазы.

Ключевые слова: дион, магнитный заряд, голдстоуновская мода.

Dynamics of Dual Phase

Yu. N. Zayko

This article presents dynamics of dual phase, which is connected with dual character of dions – hypothetical particles possessing both electrical and magnetic charges. For description of dual phase the set of equations is received from condition that Maxwell equations conserve their electrical character under dual transformations, what corresponds to effective electrical charge of dion. Some special solutions of these equations for example in vacuum, and in field of electrical dipole are found. It was shown, that solutions of Maxwell equations for spherical waves with zero orbital moment momentum correspond to monopole radiation of dion. Goldstone character of dual phase was shown.

Key words: dion, magnetic charge, Goldstone mode.

Введение

Уравнения Максвелла допускают формулировку, симметричную относительно электрических и магнитных зарядов [1]:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= e \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{E} &= e \rho, \\ \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} &= -g \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{H} &= g \rho. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь \vec{E} и \vec{H} – напряженности электрического и магнитного полей, ρ и \vec{J} – плотность числа и тока частиц соответственно (в системе Хевисайда–Лоренца). Предполагается, что частицы, называемые дионами и служащие источниками полей, несут одновременно электрический (e) и магнитный (g) заряды. Как известно, с помощью дуального преобразования полей

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \cos \theta \cdot \vec{E} + \sin \theta \cdot \vec{H}, \\ \vec{H} &= -\sin \theta \cdot \vec{E} + \cos \theta \cdot \vec{H}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\cos \theta = \frac{e}{q}, \quad \sin \theta = \frac{g}{q}, \quad q = \sqrt{e^2 + g^2},$$

где θ – параметр дуального преобразования (дуальная фаза), можно исключить магнитный заряд из уравнений (1), т.е. привести их к виду [1]:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= q \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{E} &= q \rho, \\ \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} &= -g \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{H} &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

описывающему электродинамику частиц с эффективным электрическим зарядом q ¹. Таким образом, вводимый подобным способом магнитный заряд оказывается ненаблюдаемым [1]². При этом параметр θ считается постоянным, хотя и неопределенным в силу неопределенности e и g . С этой точки зрения как заряды (электрический и магнитный), так и поля получают свое наименование в результате соглашения, и мы всегда можем изменить его и называть электрическое

¹ Аналогично уравнения движения дуально заряженных частиц приводятся к уравнениям движения частиц, несущих эффективный электрический заряд q .

² Аналогично может быть «исключен» и электрический заряд [1].