

УДК 519.6

ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ, ТРЕБУЮЩИХСЯ ПРИ РАСЧЕТЕ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БАЗИСА ХИЛЛЕРААСОВСКОГО ТИПА

С. Я. Ищенко¹

Представлена новая версия стандартного алгоритма для вычисления многочастичных корреляционных интегралов, основанного на применении бесконечных рядов. Большое увеличение скорости счета в этом алгоритме достигнуто с помощью выражения друг через друга вспомогательных W -функций по рекуррентным формулам, что позволяет вычислять только малую их часть с помощью бесконечных рядов. Также усовершенствованы вычисление W -функций с использованием бесконечных рядов и процедура ускорения сходимости.

Ключевые слова: многочастичные интегралы, базис хиллераасовского типа, ускорение сходимости.

1. Введение. Использование базиса Хиллераасовского типа позволяет получить решения уравнения Шредингера для электронной оболочки атома с очень высокой точностью. По сравнению с другими базами, такой базис позволяет получить результат с заданной точностью при включении в пробную функцию значительно меньшего числа параметров. При этом получается алгебраическая проблема собственных значений значительно меньшей размерности, однако по сравнению с другими вариантами расчета вычисления матричных элементов намного сложнее. Но при использовании многопроцессорного компьютера существенно то, что вычисление матричных элементов очень хорошо распараллеливается, а решение задачи на собственные значения — намного хуже. Поэтому метод, использующий Хиллераасовский базис, может быть более выгодным для расчетов с большой точностью.

Главной трудностью при вычислении матричных элементов является вычисление так называемых n -частичных интегралов вида

$$I(\alpha_i \dots \alpha_n q_1 \dots q_n q_{12} q_{13} \dots q_{1n} q_{23} \dots q_{2n} \dots q_{n-1n}) = \int \exp\left(-\sum_{i=1}^n \alpha_i r_i\right) \left(\prod_{i=1}^n r_i^{q_i} \prod_{j=i+1}^n r_{ij}^{q_{ij}}\right) Z(\theta_1, \phi_1, \dots, \theta_n, \phi_n) dV^{3n}, \quad (1)$$

где r_i , θ_i , ϕ_i — сферические координаты частицы i , r_{ij} — расстояние между частицами i и j , $\alpha > 0$, q_i и q_{ij} — целые величины. Интегрирование ведется по всему $3n$ -мерному объему. Функция Z — известная функция угловых переменных. В качестве таких функций удобно использовать собственные функции оператора квадрата момента количества движения n частиц с нулевым значением момента. Эти базисные функции строятся по формуле

$$z(\theta_1, \phi_1 \dots \theta_n \phi_n) = \frac{1}{2l_n + 1} \sum C_{l_1 l_2 m_1 m_2}^{L_1 M_2} C_{L_1 l_3 m_2 m_3}^{L_2 M_3} C_{L_{n-2} l_{n-1} m_{n-2} m_{n-1}}^{l_n m_n} y_{l_1 m_1}(\theta_1 \phi_1) \dots y_{l_{n-1} m_{n-1}}(\theta_{n-1} \phi_{n-1}) y_{l_n m_n}^*(\theta_n \phi_n),$$

где $C_{l_1 l_2 m_1 m_2}^{LM}$ — коэффициенты Клебша–Гордана. Суммирование ведется по всем возможным значениям индексов m , M . Здесь $M_i = \sum_{j=1}^i m_j$. Величины $C_{l_1 l_1 m_1 m_1}^{l_3 m_3}$ отличны от нуля только если $-l_i \leq m_i \leq l_i$, $i = 1, 2, 3$, $|l_1 - l_2| \leq l_3 \leq l_1 + l_2$.

Вычислению этих интегралов посвящен ряд работ [1, 2, 7, 11]. Подробный список литературы можно найти в [7]. В подавляющем большинстве работ рассматривается случай $n = 3$. Отметим, что, несмотря на то, что для случая $n = 3$ и $q_{ij} \geq -1$ известен подход, позволяющий получить точные аналитические выражения [16, 17, 15], в большинстве работ используются выражения в виде бесконечных рядов.

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, механико-математический факультет, Воробьевы горы, 119992, Москва; e-mail: itshenk@mech.math.msu.su

Мы предлагаем усовершенствованный метод, основанный на применении бесконечных рядов, позволяющий во много раз уменьшить время счета. Мы ведем рассмотрение для случая $q_{ij} \geq -1$, хотя наши усовершенствования алгоритма применимы и были испытаны для расчетов интегралов с одним из параметров $q_{ij} = -2$. Если какие-либо показатели степени q_{ij} неотрицательные и четное вычисление изучаемого интеграла сильно упрощается, а поэтому будем считать, что все q_{ij} нечетны.

2. Исходные формулы. Как и в большинстве других схем, вычисления начнем с разложения степеней величины r_{ij} по многочленам Лежандра от $\cos(\Theta_{ij})$, где Θ_{ij} — угол между радиус-векторами частиц i и j . Это разложение для нечетных k имеет вид

$$r_{12}^k = \sum_{\lambda=0}^{\infty} U_{k\lambda}(r_1, r_2) P_{\lambda}(\theta_{12}) \quad \text{где} \quad U_{k\lambda} = r_{>}^k \sum_{j=0}^{(k+1)/2} A_{k\lambda j} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^{\lambda+2j}, \quad (2)$$

где $P_n(x)$ — многочлен Лежандра, $r_{>}$ и $r_{<}$ соответственно большее и меньшее среди значений r_1 и r_2 . Для коэффициентов $A_{k\lambda j}$ известны простые формулы [10].

Величину $\cos(\Theta_{ij})$ с помощью известного тождества выражаем через сферические функции от угловых координат отдельных частиц.

$$P_{\lambda}(\cos(\Theta_{12})) = \frac{4\pi}{2\lambda+1} \sum_{m=-\lambda}^{\lambda} Y_{\lambda m}(\theta_1, \phi_1) Y_{\lambda m}^*(\theta_2, \phi_2). \quad (3)$$

Подставляя выражения (2) в формулу (1) и используя (3) получим выражение интеграла в виде суммы (4). Суммирование ведется по всем возможным значениям индексов λ .

$$I = \sum I_a(\lambda_{12}, \lambda_{13} \dots \lambda_{n-1n}) I_r(\lambda_{12}, \lambda_{13} \dots \lambda_{n-1n}). \quad (4)$$

Каждый член суммы представляет собой произведение интегралов по угловым и по радиальным переменным. Интегралы по угловым переменным можно вычислить с помощью аппарата теории момента количества движения [13]. Они в сложных случаях выражаются через суммы, содержащие $6j$ -символы Вигнера. Радиальные интегралы I_r , ввиду формулы (2), распадаются на $n!$ интегралов по подобластям. Каждая подобласть отвечает определенному упорядочиванию значений переменных r_i . Если изменить нумерацию переменных r_i и r_{ij} так, чтобы в данной подобласти переменной r_i с большим значением отвечал больший номер i : $r_1 \leq r_2 \leq r_3 \leq \dots \leq r_n$, то радиальный множитель можно записать в виде

$$\sum_{j_{12}=0}^{(q_{12}+1)/2} \sum_{j_{13}=0}^{(q_{13}+1)/2} \dots \sum_{j_{n-1n}=0}^{(q_{n-1n}+1)/2} A_{q_{12}\lambda_{12}j_{12}} A_{q_{13}\lambda_{13}j_{13}} \dots A_{q_{n-1n}\lambda_{n-1n}j_{n-1n}} W(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, p_1, p_2, \dots, p_n),$$

где $p_i = \sum_{k=1}^{i-1} q_{ki} + \sum_{k=i+1}^n (2J_{ik} + \lambda_{ik}) - \sum_{k=1}^{i-1} (2J_{ik} + \lambda_{ik}) + q_i + 2$. Таким образом интеграл по подобласти — линейная комбинация интегралов вида $W_n(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, p_1, p_2, \dots, p_n)$ с одинаковыми значениями параметров α .

Функции W определяются формулой

$$W_n(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, m_1, m_2, \dots, m_n) = \int_0^{\infty} \exp(-\alpha_1 r_1) r_1^{m_1} dr_1 \int_{r_1}^{\infty} \exp(-\alpha_2 r_2) r_2^{m_2} dr_2 \dots \int_{r_{n-1}}^{\infty} \exp(-\alpha_n r_n) r_n^{m_n} dr_n.$$

Приближенное значение интеграла (1), полученное по формуле (4) при учете всех членов с $\lambda \leq L$, будем обозначать S_L . Введем также величину $T_l = \Delta S_{l-1} = S_l - S_{l-1}$.

3. Ускорение сходимости. При прямом применении формулы (4) для достижения желаемой точности требуется брать большое количество слагаемых T_l .

Для уменьшения количества слагаемых применяется процесс экстраполяции по значениям l . В ряде работ [10, 5, 7] исследовалась эффективность разных методов экстраполяции. Среди них чаще всего используется метод Ричардсона и u -преобразование Левина. Уточненное по методу Ричардсона значение суммы получается следующим образом. По значениям частичных сумм S_i с $i = m, m+1, \dots, m+p$

строится интерполяционный полином от аргумента $1/i$, и за улучшенное приближение к сумме принимают значение этого полинома в нуле. В u -преобразовании Левина предполагается, что остаточный член $S - S_i$ выражается как произведение $(i + \delta)T_i$ и многочлена от $1/(i + \delta)$, где δ — некий параметр. Оба подхода приводят к простым формулам. Метод Левина очень часто оказывается намного эффективнее метода Ричардсона. Численный эксперимент показывает, что результаты, полученные в обсуждаемой задаче методом Левина, практически не зависят от δ , поэтому обычно берут $\delta = 0$. Мы при расчете энергии основного состояния атома лития, результаты которого представлены в работе [14], использовали другой метод.

Этот метод, как оказалось, представляет собой некоторую модификацию метода предложенного Дрейком и Яном [5]. Он основан на следующей идее. Члены суммы T_i убывают как i^{-q} , поэтому целесообразно применить полиномиальную интерполяцию к последовательности $T_i i^q$. Кроме того, в отличие от метода Дрейка, вместо аргумента полиномов $1/i$ используем аргумент $1/(i + \delta)$. Таким образом, как и в любом линейном методе, для уточненного значения суммы получим формулу вида $S = \sum_{i=0}^{m+p} C_i T_i$, где $C_i = 1$ при $i = 0, 1, \dots, m-1$. При $m \leq i \leq m+p$ для коэффициентов C_i получается формула

$$C_i = 1 + (i + \delta)^q \sum_{j=m+p+1}^{\infty} (j + \delta)^{-q} \prod_{k=m, k \neq i}^{m+p} \frac{(k-j)(i+\delta)}{(k-i)(j+\delta)}. \quad (5)$$

Для вычисления величин C_i производится суммирование по формуле (5) до $j < j_{\max}$, а суммы от j_{\max} до бесконечности выражаются через величины вида $\sum_{j=j_{\max}+1}^{\infty} \frac{1}{(j+\delta)^k}$. Последние величины с точностью до

желаемой степени $1/j_{\max}$ оцениваются через интегралы вида $\int_{x=j_{\max}+1/2}^{\infty} (x+\delta)^{-J}$. Такой способ вычисления

мало чувствителен к ошибкам округления.

Для подбора параметров q и δ вычисляем набор слагаемых t_i при $i = 0, \dots, i_{\max}$. Затем при некоем пробном δ , например -1.1 , подбираем q минимизирующее невязку $\sum_{j=m+p+1}^{i_{\max}} \left| (j+\delta)^{-q} P_{mp} \left(\frac{1}{j+\delta} - T_j \right) \right|$,

где P_{mp} — интерполяционный полином построенный по $p+1$ точкам $\frac{1}{m+\delta}, \dots, \frac{1}{m+p+\delta}$ для функции принимающей в точке $\frac{1}{i+\delta}$ значение $T_i(1+\delta)^q$. Затем находим δ , минимизирующее невязку. На практике брали m от 1 до 6, p — от 10 до 16 и i_{\max} — порядка 60 или более. При этом оказалось, что использование m отличного от единицы не дает заметных преимуществ. Оптимальное значение δ выбиралось перебором значений на равномерной сетке с шагом 0.01, покрывающей отрезок от 0 до -4 .

Функция, выражающая зависимость невязки от δ , имеет много локальных минимумов, и при изменении параметра p глобальный минимум часто перемещается между ними. Оптимальное δ может сильно меняться с изменением p . Кроме того, оптимальное δ может сильно меняться при изменении параметров q_i . Несмотря на это, δ , подобранное для конкретного набора α_i, q_i, q_{ij} , позволяет получить хорошие результаты для других значений α_i, q_i . Обычно оптимальное δ при оптимальном q лежит на отрезке $[-2, 0]$.

Сравнить аналитически эффективность предложенного метода и метода Левина довольно трудно. Однако сравнение легко провести экспериментально. Мы провели ряд экспериментов для сравнения нашего метода с другими методами. Сравнение проводилось на примере трех-частичных интегралов

В этом случае множитель z имеет вид

$$z(\theta_1, \phi_1 \theta_2, \phi_2 \theta_3, \phi_3) (2l_3 + 1)^{-1/2} \sum_{m_3=-l_3}^{l_3} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} C_{l_1 l_2 m_1 m_3 - m_1}^{l_3 m_3} y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) y_{l_2 m_3 - m_1}(\theta_2, \phi_2) y_{l_3 m_3}(\theta_3, \phi_3),$$

а угловой множитель имеет вид

$$I_a(\lambda_{12} \lambda_{13} \lambda_{23} l_1 l_2 l_3) = (-1)^{\lambda_{12} + \lambda_{13} + \lambda_{23}} (2l_3 + 1) (64\pi^3 (2l_1 + 1) (2l_2 + 1))^{1/2} [\lambda_{12} l_{13} l_1] [\lambda_{12} l_{23} l_2] [\lambda_{13} l_{23} l_3] \begin{pmatrix} \lambda_{12} l_1 \lambda_{13} \\ l_3 \lambda_{23} l_2 \end{pmatrix},$$

где $[l_1 l_2 l_3]$ — $3j$ -символ Вигнера с нулевыми проекциями момента, а $\begin{pmatrix} \lambda_{12} l_1 l_{13} \\ l_3 \lambda_{23} l_2 \end{pmatrix}$ — $6j$ -символ Вигнера.

Таблица 1

Сравнение методов экстраполяции

I	N	δ_1	δ_2	u	a	b	c	d
1	10	-0.2		-11.0	-14.3	-12.9		
1	12	-0.51		-13.2	-16.7	-14.8		
1	14	-0.81		-15.8	-19.9	-17.0		
1	16	-1.18		-17.0	-20.4	-19.2		
1	20	-0.75		-20.7	-23.7	-22.9		
1	22	-0.68		-22.8	-26.1	-24.9		
1	24	-0.21		-24.3	-27.9	-27.0		
1	26	-0.94		-23.6	-29.1	-29.1		
1	28	-1.98		-22.1	∞	-28.2		
2	10	-0.49	-0.78	-11.9	-13.1	-10.0	-14.8	-11.2
2	12	-0.45	-0.28	-13.9	-15.2	-12.2	-16.2	-13.5
2	14	-0.82	-0.54	-16.1	-17.0	-14.5	-18.1	-15.9
2	16	-0.24	-0.08	-18.1	-19.6	-16.7	-20.3	-18.4
2	20	-0.55	-0.29	-21.0	-22.3	-21.4	-23.9	-22.3
2	22	-0.98	-0.71	-22.7	-24.2	-23.4	-26.0	-24.2
2	24	-0.40	-0.13	-24.8	-26.7	-25.1	-28.2	-26.4
2	26	-0.31	-0.04	-26.0	-27.9	-26.7	-28.8	-28.5
2	28	-0.23	-0.47	-24.8	-29.3	-28.5	∞	-30.2
3	10	-0.65	-0.98	-15.6	-15.5	-11.2	-17.6	-13.3
3	12	-1.01	-0.76	-16.1	-18.2	-13.4	-20.0	-15.8
3	14	-0.7	-1.11	-17.9	-19.8	-15.7	-22.2	-18.2
3	16	-0.76	-0.89	-20.9	-21.9	-18.0	-23.6	-21.0
3	20	-1.33	-1.42	-23.6	-25.7	-22.7	-29.0	-26.6
3	22	-1.36	-0.99	-26.3	-27.5	-25.7	-29.7	-28.1
3	24	-1.40	-1.41	-27.5	-29.2	-28.4	∞	-29.0
4	10	-1.88	-1.47	-21.2	-17.9	-12.7	-22.6	-16.4
4	12	-1.94	-1.40	-23.2	-20.9	-14.6	-25.5	-18.8
4	14	-1.94	-1.34	-25.8	-23.2	-16.5	-27.9	-21.3
4	16	-1.87	-1.26	-28.2	-25.8	-18.5	-30.1	-23.7
4	20	-1.47	-1.2	-31.0	-30.3	-22.5	-34.0	-28.8
4	22	-1.41	-1.27	-31.7	-33.5	-24.9	-33.1	-30.9
4	24	-1.32	-1.12	-29.9	-33.5	-27.0	∞	$-\infty$

В таблице 1 приведены результаты расчетов некоторых интегралов, значения которых приведены в работе [7]. Все интегралы, как и в большинстве других работ имеют угловую часть $z = 1$ и отличаются лишь нормировочным множителем $(4\pi)^{3/2}$ от нашего случая $l_1 = l_2 = l_3 = 0$. В столбцах u, a, b, c, d представлена точность значения интеграла полученного разными методами: u — преобразование Левина, a — наш метод с $q = (q_{12} + q_{13} + q_{23} + 11)/2$ и подобранным δ_1 , b — наш метод с $q = (q_{12} + q_{13} + q_{23} + 11)/2$ и $\delta = 0$, c — наш метод с $q = q_{12} + q_{13} + q_{23} + 7$ и подобранным δ_2 , d — наш метод с $q = q_{12} + q_{13} + q_{23} + 7$ и $\delta = 0$. В качестве точности берется число $\log_{10}(|(E - R)/E|)$, где R — вычисленное значение, а E — эталонное значение, которое считаем точным. В столбцах δ_1 и δ_2 приведены значения параметров δ , с которыми рассчитаны числа из столбцов a, b и c, d . В таблице 1 мы полагаем точность эталонного значения бесконечной.

В таблице 2 приведены параметры рассчитанных интегралов и точность взятого в таблице 1 эталонного значения, причем теперь за эталонное значение принимается результат из [7], приведенный с двадцатью девятью десятичными знаками. Числа из столбца b в точности отвечают полученным по предписанию Дрейка при $m = 1$. Видно, что введение параметра δ и использование лучшего параметра q заметно улучшает результат.

Обращает на себя внимание тот факт, что определенное экспериментально лучшее значение показат

Таблица 2

Параметры I -интегралов

I	q_{12}	q_{13}	q_{23}	q_1	q_2	q_3	α_1	α_2	α_3	ϵ
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1.0	1.0	1.0	-29.1
2	1	-1	-1	1	2	3	2.0	2.0	2.0	-28.8
3	1	1	-1	1	2	3	2.7	2.9	0.6	-29.1
4	5	3	1	1	2	3	2.7	2.9	0.6	-29.1

теля q вычисляется не по формуле $(q_{12} + q_{13} + q_{23} + 11)/2$, предложенной в большинстве работ [2, 5], а как $q_{12} + q_{13} + q_{23} + 7$.

Эту оценку можно получить для конкретных q_{ij} и аналитически. Для этого рассмотрим слагаемое T_l с большим значением l . Оно состоит из шести сумм вида

$$T_l = \frac{(4\pi)^{3/2}}{(2l+1)^2} \sum_{J_1=0}^{(q_{ij}+1)/2} \sum_{J_2=0}^{(q_{ik}+1)/2} \sum_{J_3=0}^{(q_{jk}+1)/2} A_{lq_{ij}J_1} A_{lq_{ik}J_2} A_{lq_{jk}J_3} \times \quad (6)$$

$$\times W_3(\alpha_i, \alpha_j, \alpha_k, q_i + 2l + 2(J_1 + J_2) + 2, q_j + 2(J_3 - J_1) + 2 + q_{ij}, q_k - 2l - 2(j_2 + j_3) + q_{ik} + q_{jk} + 2),$$

где набор индексов i, j, k пробегает все перестановки элементов 1, 2, 3. Входящие в (6) функции $W_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, p_1, p_2, p_3)$ имеют такие значения аргументов p , что $p_1 \gg p_1 + p_2 + p_3$. Используя формулу (10), мы можем выписать разложения вида

$$W_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, p_1, p_2, p_3) = W_1(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3, p_1 + p_2 + p_3 + 2) +$$

$$+ \left(\frac{1}{(p_1 + 1)(p_1 + p_2 + 2)} + \frac{c_1}{(p_1 + 1)(p_1 + p_2 + 2)(p_1 + p_2 + 3)} + \frac{c_2}{(p_1 + 1)(p_1 + 2)(p_1 + p_2 + 3)} \dots \right),$$

где $c_1 = \frac{(p_1 + p_2 + p_3 + 3)(\alpha_1 + \alpha_2)}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}$, $c_2 = \frac{(p_1 + p_2 + p_3 + 3)\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}$. Взяв нужное количество членов разложения и формулы для коэффициентов $A_{q\lambda j}$ с конкретными q_{ij} и выполнив подстановку $x = 1/l$, попытаемся преобразовать результат к виду $x^q N/D$, где N и D — многочлены со свободным членом. Для всех q_{ij} от -1 до 7 был получен результат $q = q_{12} + q_{13} + q_{23} + 7$. Более высокие значения q_{ij} не интересны.

Параметр q для четырех-частичных интегралов ведет себя менее понятно. Если все шесть q_{ij} равны -1 , он равен -4 . Такое же значение имеет этот параметр, если два или три q_{ij} равны единице, а остальные -1 . Если четыре параметра q_{ij} равны единице и два -1 , то $q = 6$. Если пять равны единице и один -1 , то $q = 8$. Если все шесть равны единице, то $q = 10$.

Другой эксперимент по сравнению нашего метода экстраполяции и метода Левина был проведен на вычислении интегралов с одним из параметров q равным -2 по методу из работы [10]. Вычисления, как и в работе [10], проводились с использованием шестнадцатибайтовых вещественных чисел. Отличие от [10] состоит в том, что для вычисления коэффициентов разложения полиномов Гегенбауэра по полиномам Лежандра не использовался счет с сверхвысокой точностью по приведенным в [10] формулам и применялись Гауссовы квадратуры. Параметры этих квадратур выражались через собственные векторы и значения матрицы оператора умножения на x в базисе полиномов Лежандра. Наш метод с $q = -2$ и $\delta = 0$ дал результаты несколько лучшие, чем метод Левина.

Преимуществом предлагаемого метода экстраполяции является линейность. Это свойство позволяет заранее вычислить коэффициенты при величинах W и не накапливать слагаемые T , что уменьшает количество операций и упрощает алгоритм. То, что скорость убывания слагаемых T_l определяется в основном параметрами q_{ij} , позволяет экспериментально выбрать необходимое число слагаемых T , обеспечивающее заданную точность. В свою очередь это позволяет заранее знать набор значений параметров p_i функций W .

4. Вычисление функций W . Наибольшую долю времени вычислений требуют величины W . Параметры p_i величин W могут быть положительными и отрицательными. При расчете трехэлектронных систем отрицательным может быть только p_3 , а при расчете четырех-частичных или много-частичных систем с учетом четырех-частичных возбуждений самыми сложным будут W с $n = 4$ и отрицательными p_3 и p_4 . Отметим, что при расчете большого атома с учетом четырех-частичных возбуждений нужны W с $n = 5$ и 6 но с положительными индексами. Вычисление величин W описано в работах [2, 1, 4, 6, 5, 11].

В основном рассмотрен случай $n = 3$ и $n = 4$. Для вычислений обычно используются бесконечные ряды и реже аналитические формулы. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

5. Рекуррентные формулы для величин W . Применяя интегрирование по частям к интегралу по переменной r_i , получим:

$$W_n(\dots \alpha_i \dots p_i + 1 \dots) = (p_i + 1)W_n(\dots \alpha_i \dots p_i \dots) + \frac{W_{n-1}(\dots \alpha_{i-1} + \alpha_i \dots p_{i-1} + p_i + 1 \dots) - W_{n-1}(\dots \alpha_i + \alpha_{i+1} \dots p_i + p_{i+1} + 1 \dots)}{\alpha_i}. \tag{7}$$

Величины содержащие параметры с номерами 0 или $n + 1$ следует считать равными нулю.

Формула (7) в принципе позволяет вычислить величины W , если вычислены некоторые базовые значения. Например вычислив $W_1(\alpha_1, 0) = 1/\alpha_1$, можно вычислить все W с неотрицательными значениями параметров p_i . Причем вычисления будут численно устойчивы. Вычислив $W_2(\alpha_1, \alpha_2, 0, -1)$ и $W_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, -1, -1)$, в принципе можно за конечное число шагов точно вычислить все W с одним и двумя отрицательными индексами. Однако вычислительный процесс в этом случае часто бывает неустойчивым. Это легко понять на примере интеграла $W_2(\alpha_1, \alpha_2, p_1, p_2)$. Начиная с базового значения $W_2(\alpha_1, \alpha_2, 0, -1)$, мы, повышая значение первого индекса, получим $W_2(\alpha_1, \alpha_2, p_1, -1)$, а затем, понижая второй индекс и используя обращение формулы (7), получим искомый результат. Этот процесс является решением неоднородного уравнения в конечных разностях первого порядка. Но соответствующее однородное уравнение имеет частное решение вида $\widetilde{W} = \frac{C p_1!}{|p_2|!} \frac{\alpha_2^{p_2}}{\alpha_1^{p_1}}$, искомое значение W не больше чем $\frac{(p_1 + p_2 + 1)!}{(\alpha_1 + \alpha_2)^{p_1 + p_2 + 1}} \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_2}$.

Очевидно, что отношение \widetilde{W}/W может быть очень большим, и тогда малая ошибка в представлении чисел приводит к большой ошибке в вычисленном значении. В работе [12] приведены якобы численно устойчивые точные формулы для $W_2(\alpha_1, \alpha_2, m, -1)$ и $W_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, m, g, -1)$, но первая формула, являющаяся базовой для второй, содержит множитель являющийся разностью $\log(1 - \theta)$, где $\theta = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2}$, и $(m + 1)$ -членного разложением Тейлора по параметру θ этой функции. Значит при малых θ результат примерно в θ^m раз меньше слагаемых, и процесс его вычисления не является численно устойчивым. Единственным благоприятным случаем для применения точных формул является случай $\alpha_1 \gg \alpha_2 \gg \alpha_3$

В силу сказанного в большинстве работ предлагается вместо точных формул использовать бесконечные ряды. Эти ряды получаются просто. Используя (7), выражая W в правой части через W в левой получим:

$$W_n(\dots \alpha_i \dots p_i \dots) = \frac{\alpha_i}{p_i + 1} W_n(\dots \alpha_i \dots p_i + 1 \dots) + \frac{W_{n-1}(\dots \alpha_i + \alpha_{i+1} \dots p_i + p_{i+1} + 1 \dots) - W_{n-1}(\dots \alpha_{i-1} + \alpha_i \dots p_{i-1} + p_i + 1 \dots)}{p_i + 1}, \tag{8}$$

применяя это равенство при $i = 1$ получим

$$W_n(\dots \alpha_1 \dots p_1 \dots) = \frac{\alpha_1}{p_1 + 1} W_n(\dots \alpha_1 \dots \alpha_n p_1 + 1 \dots p_n) + \frac{W_{n-1}(\dots \alpha_1 + \alpha_2 \dots p_1 + p_2 + 1 \dots)}{p_i + 1}. \tag{9}$$

Далее, рекурсивно применяя (9), получим

$$W_n(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n p_1 p_2 \dots p_n) = p_1! \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\alpha_1^i}{(p_1 + i + 1)!} W_{n-1}(\alpha_1 + \alpha_2 \dots \alpha_n p_1 + p_2 + i + 1 \dots p_n). \tag{10}$$

По этой формуле, используя $W_1(\alpha, p) = \frac{p!}{\alpha^{p+1}}$ и (9), можно вычислить W_2, \dots, W_n за $\sum_{k=1}^n M_k$ шагов, где

M_k — максимальное значение индексов i_k , нужное для получения результатов с заданной точностью. Однако такой подход неудобен, так как промежуточные величины W могут иметь большие значения, а кроме того требуется заранее знать значения M_k , которые нельзя достаточно быстро оценить.

Последовательно выражая W_i через W_{i-1} получим формулу

$$W_n(\alpha_1 \dots \alpha_n, p_1 \dots p_n) = p_1! \sum_{i_1=0}^{\infty} \frac{\alpha_1^{i_1} (P_2 + i_1 + 1)!}{(p_1 + i_1 + 1)!} \sum_{i_2=0}^{\infty} \frac{B_2^{i_2} (P_3 + I_2 + 2)!}{(P_2 + I_2 + 2)!} \dots \sum_{i_{n-1}=0}^{\infty} \frac{B_{n-1}^{i_{n-1}} (P_n + I_{n-1} + n - 1)!}{B_n^{P_n + I_n + n}}, \tag{11}$$

где $B_k = \sum_{j=1}^k \alpha_j$, $P_k = \sum_{j=1}^k p_j$, $I_k = \sum_{j=1}^k i_j$. Введя обозначения

$$t_{ki} = (P_k + k - 1)!(P_{k+1} + k + i)!((P_k + k + i)!(P_{k+1} + k)!)^{-1} y_k^i, \quad S_{kj} = \sum_{i=0}^j t_{ki} S_{k-1 i}, \quad S_{0i} = 1,$$

изменим порядок суммирования и преобразуем (11) к виду

$$\begin{aligned} W_n(\alpha_1 \dots \alpha_n, p_1 \dots p_n) &= p_1! \sum_{I_{n-1}=0}^{\infty} (P_n + I_{n-1} + n - 1)!(P_{n-1} + I_{n-1} + n - 1)!^{-1} \times \\ &\quad \times \sum_{I_{n-2}=0}^{I_{n-1}} x_{n-1}^{I_{n-1}-I_{n-2}} (P_{n-2} + I_{n-2} + n - 2)!(P_{n-2} + I_{n-2} + n - 2)!^{-1} \dots \times \\ &\quad \times \sum_{i_1=0}^{I_2} (P_2 + i_1 + 1)!(p_1 + i_1 + 1)^{-1} x_2^{I_2-i_1} x_1^{i_1} = \\ &= p_1! \sum_{I_{n-1}=0}^{\infty} (P_n + I_{n-1} + n - 1)!(P_{n-1} + I_{n-1} + n - 1)!^{-1} y_{n-1}^{I_{n-1}} \times \\ &\quad \times \sum_{I_{n-2}=0}^{I_{n-1}} (P_{n-1} + I_{n-2} + n - 2)!(P_{n-2} + I_{n-2} + n - 2)!^{-1} y_{n-2}^{I_{n-2}} \dots \times \\ &\quad \times \sum_{i_1=0}^{I_2} (P_2 + i_1 + 1)!(P_1 + i_1 + 2)!^{-1} y_1^{i_1} = \\ &= \frac{(P_n + n - 1)!}{B_n^{P_n+n}} \sum_{I_{n-1}=0}^{\infty} t_{n-1 I_{n-1}} \sum_{I_{n-2}=0}^{I_{n-1}} t_{n-2 I_{n-2}} \dots \sum_{i_1=0}^{I_2} t_{1 i_1} = \frac{(P_n + n - 1)!}{B_n^{P_n+n}} S_{n-1}, \end{aligned}$$

где $x_j = B_j/B_n$, $y_j = B_j/B_{j+1}$. Вычисления по формуле (11) легко сводятся к одномерной сумме. Искомая величина представляется в виде $W_n(\alpha_1 \dots \alpha_n, p_1 \dots p_n) = \frac{(p_n + n - 1)!}{B_n^{P_n+n}} S_{n-1M}$, где M — число слагаемых нужное для достижения заданной точности.

Величины t_{ki} и S_{ki} удовлетворяют соотношениям

$$t_{k0} = \frac{1}{P_k + k}, \quad t_{ki} = \frac{t_{ki-1}(P_{k+1} + k + i)}{P_k + k + i} y_k, \quad S_{1i} = S_{1i-1} + t_{1i}, \quad S_{ki} = S_{k i-1} + t_{ki} S_{k-1 i}. \quad (12)$$

Применяя соотношения (12), легко вычислить искомый результат в виде суммы S_{n-1} . Процесс продолжается до тех пор, пока $S_{n-1M-1} \neq S_{n-1M}$. Таким образом нет необходимости заранее оценивать M . Подобная схема для случая $n = 3$ описана в [2].

Мы сравнили схему (12) с наиболее новой схемой, предложенной для вычисления величин W_3 Фроловым [6, 11]. Эту схему легко получить, если применить формулу (10) при $n = 3$ и, сделав подстановку

$$W_2(a, b, k, l) = W_1(a + b, k + l + 1)F(k + l + 2, k + 2, a/(a + b)/(k + 1)), \quad (13)$$

получим при $(k)_n = \frac{(k + n)!}{k!}$

$$\begin{aligned} W_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, p_1, p_2, p_3) &= \\ &= W_1(B_3, P_3 + 2) \sum_{i=0}^{\infty} x_1^i \frac{(P_3 + 2)_i}{(p_1 + 1)_{(i+1)}(P_2 + 2 + i)} F(P_3 + 2 + i, P_2 + 3 + i, x_2). \end{aligned} \quad (14)$$

Для величин F , используя (7) при $n = 2$ и (13), получим $F(k + 1, l + 1, z) = \frac{k + 1}{(l + 1)z} f(k, l, z)$. Вычисление величин F происходит с большим накоплением ошибок. Однако, если учесть коэффициент при этих

величинах, то можно заметить, что накопление ошибок при вычислении W_3 характеризуется величиной

$$v = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(p_1 + p_2 + 2)_{(n)}}{(p_1 + 2)_{(n)}} z^n = F(p_1 + p_2 + 2, p_1 + 2, z) = \frac{W_2(\alpha_1, \alpha_2, p_1, p_2)(p_1 + 1)}{W_1(\alpha_1 + \alpha_2, p_1 + p_2 + 1)}. \quad (15)$$

Фактически метод Фролова эквивалентен тому, что величина W_3 вычисляется по формуле (10), а входящие в нее величины W_2 вычисляем по неустойчивой формуле (7). Подстановка (13) позволяет избежать работы со слишком большими числами. Используя замену

$$W_k(\alpha_1, \dots, \alpha_k, p_1 \dots p_k) = W_1(B_k, P_k + k - 1)F_k(p_1 \dots p_n, x_1 \dots x_{k-1}), \quad (16)$$

можно построить обобщение метода Фролова на случай $n > 3$.

Результаты сравнения нашего метода и метода Фролова приведены в таблице 3. В первых шести колонках представлены параметры интеграла W_3 . В колонке v — значение выражения (15). В столбцах ϵ_f и ϵ_m — относительные ошибки, полученные при расчете нашим методом и методом Фролова. Столбцы t_f и t_m содержат времена в единицах 100 тактов процессора Pentium4 вычисления интеграла методом Фролова и нашим методом. Вычисления велись по программе, написанной на Фортране. В программе была проведена ручная оптимизация. Использовался компилятор фирмы INTEL с генерацией кода для вещественной арифметики в режиме SSE2.

Таблица 3

Сравнение методов расчета функций W_3

α_1	α_2	α_3	p_1	p_2	p_3	v	ϵ_f	ϵ_m	t_f	t_m
2	1	1	3	1	-1	2.2	3.7×10^{-16}	1.5×10^{-15}	48	25
12	1	1	34	-11	-1	2.9	3.6×10^{-15}	1.6×10^{-15}	142	72
2	11	1	34	-11	-1	1.1	3.6×10^{-15}	6.1×10^{-16}	124	72
12	1	1	34	11	-1	2.9×10^4	5.9×10^{-13}	5.1×10^{-16}	193	86
12	1	1	34	11	-5	2.9×10^4	1.1×10^{-12}	7.2×10^{-16}	155	71
10	1	1	23	4	-10	69	4.5×10^{-15}	2.5×10^{-15}	80	38
10	1	1	13	10	-10	5.5×10^5	1.7×10^{-11}	2.0×10^{-15}	108	44
10	1	1	9	14	-5	5.5×10^9	1.4×10^{-9}	8.2×10^{-15}	153	67
10	1	1	9	14	-10	5.5×10^9	1.6×10^{-8}	1.6×10^{-15}	141	55

Из таблицы видно, что метод Фролова по сравнению с нашим методом дает менее точные результаты и не выигрывает по времени счета. Аналог этого метода для вычисления W_4 показал аналогичные результаты. Однако метод Йрплова может дать небольшую экономию во времени счета в случае, когда используется программным способом реализованная работа с числами повышенной точности.

Процесс вычислений с помощью (12) устойчив, так как результат получается как сумма положительных членов. Однако во многих случаях требуется большое количество слагаемых, а поэтому вычисление величин W занимает подавляющую часть времени расчета.

Нам удалось сильно сократить время требуемое для расчета величин W . Это удалось сделать за счет использования рекуррентных формул для этих величин. Опишем наш метод. Для вычисления интеграла I требуется набор из $n!$ массивов W с одинаковыми α и разными p_i , причем сумма значений p_i у всех элементов массива одинакова. Значит элемент массива можно получить из некоего другого элемента, увеличив какой-либо параметр p_i на единицу и уменьшая другой p_j на единицу. Используя (8), мы получим формулу, позволяющую вычислять элементы массива, зная какой-либо базовый элемент и массив величин W_{n-1} — интегралов меньшей кратности.

$$\begin{aligned} W_n(\dots \alpha_i \dots \alpha_j \dots p_i \dots p_j \dots) &= \frac{\alpha_i p_j}{(p_i + 1) \alpha_j} W_n(\dots \alpha_i \dots \alpha_j \dots p_i + 1 \dots p_j - 1 \dots) + \\ &+ \frac{\alpha_i}{\alpha_j (p_i + 1)} (W_{n-1}(\dots \alpha_i \dots \alpha_j + \alpha_{j-1} \dots p_i + 1 \dots p_j + p_{j-1} \dots) - \\ &- W_{n-1}(\dots \alpha_i \dots \alpha_j + \alpha_{j+1} \dots p_i + 1 \dots p_j + p_{j+1} \dots)) + \\ &+ \frac{1}{p_i + 1} (W_{n-1}(\dots \alpha_i + \alpha_{i+1} \dots \alpha_j \dots p_i + p_{i+1} + 1 \dots p_j \dots) - \\ &- W_{n-1}(\dots \alpha_i + \alpha_{i-1} \dots \alpha_j \dots p_i + p_{i-1} + 1 \dots p_j \dots)). \end{aligned} \quad (17)$$

6. Некоторые детали алгоритма Однако, применяя формулу (17) можно получить быстрый рост вычислительных ошибок. Для уменьшения ошибок будем применять формулу (17) только так, чтобы коэффициент при W_n в правой части был меньше некоторого заданного числа. Обычно в качестве такого числа брали единицу. Это ограничение определяет порядок вычисления W . Для определения этого порядка поступим следующим образом. Разделим массив W_n на отрезки. В отрезок объединяются интегралы с фиксированным набором параметров $p_2 \dots p_{n-1}$. Внутри отрезка интегралы различаются значением параметра p_1 и зависящего от него p_n . Найдем на отрезке базовые элементы, через которые будем выражать остальные элементы отрезка. Если $\frac{p_{ni}\alpha_1}{(p_{1i} + 1)\alpha_n} < 1$ где p_{ij} — параметр p_j i -го элемента отрезка, то надо выражать элементы с меньшим p_{1i} через элементы с большим p_{1i} , иначе наоборот. Таким образом определяется направление движения по отрезку. При этом возможны следующие ситуации:

- 1) коэффициент на всем отрезке меньше единицы (выбранной константы C) — при этом базовым элементом будет элемент с максимальным p_1 , т.е. самый правый;
- 2) коэффициент на всем отрезке больше единицы — при этом базовым элементом будет элемент с минимальным p_i , т.е. самый левый;
- 3) коэффициент на всем отрезке возрастает с ростом индекса, причем в начале он меньше единицы, а затем больше единицы. В этом случае два крайних элемента базовые, и элемент, на котором коэффициент ближе всего к единице делит отрезок на два подотрезка, имеющих свой базовый элемент;
- 4) коэффициент убывает, причем в начале отрезка он больше единицы, а в конце — меньше. В этом случае элемент, на котором коэффициент ближе к единице, является базовым.

Теперь для каждого базового элемента отрезков попытаемся найти элемент в другом отрезке, через который можно выразить базовый элемент. Таким образом из отрезков строится дерево. При этом найдутся такие элементы, которые нельзя при соблюдении ограничений выразить через другие элементы массива. Такие элементы, являющиеся корневыми в дереве, придется вычислять с помощью соотношений (12). Алгоритм построения дерева выглядит так. Для каждого базового элемента каждого отрезка ищем родительский элемент. Для этого для всех пар индексов $1 < i, j < n$ вычисляем показатели p'_i, p'_j , которые получаются из показателей базового элемента по формуле $p'_i = p_i + 1, p'_j = p_j - 1$, или, если массив W состоит из элементов, в которых все p_i с заданным i имеют одинаковую четность, то как $p'_i = p_i + 2, p'_j = p_j - 2$. Здесь p_i, p_j — показатели степени базового элемента. Проверяем, что этот элемент принадлежит какому-либо отрезку, причем базовый элемент этого отрезка не помечен в дереве как выражаемый через элемент исходного отрезка. Далее проверяем модуль коэффициента в выражении базового элемента через родительский т. е. $\frac{\alpha_i p_j}{\alpha_j (p_i + 1)}$ или $\frac{\alpha_i^2 p_j (p_j - 1)}{\alpha_j^2 (p_i + 1)(p_i + 2)}$. Если эта величина меньше единицы, то родительский элемент найден, и работа с данным базовым элементом заканчивается, иначе испытываем другую пару индексов i, j . Целесообразно следующей проверяемой парой считать пару j, i . Вычисления с помощью построенного дерева характерны тем, что абсолютная величина части ошибки, связанной с решением однородного разностного уравнения убывает. Если $i > j$, и порядок вычислений идет в сторону понижения значения p_i , то и относительная ошибка убывает. Однако если вычисления идут в обратном порядке, то, ввиду убывания значений W , уменьшение относительной ошибки не гарантировано.

Мы рассмотрели случай при котором P_n для всех величин W_n одинаковы. Однако при вычислении матричных элементов оператора Лапласа возникают массивы интегралов W_n , отличающиеся только параметрами p . Набор значений параметров p элементов таких массивов можно получить из параметров элементов некоторого исходного массива, вычитая из какого-либо параметра p_i единицу или двойку. Таким образом элементы всех таких массивов можно получить взяв какой-либо массив за исходный и применив ко всем его элементам формулу (7) или ее обращение не более чем два раза. Для уменьшения ошибок округления можно по аналогии с описанной ранее процедурой определить порядок вычисления элементов массивов, при этом при переходе между элементами с разными P_n будем считать, что переход хороший, если меньше единицы коэффициент перехода между величинами F_n из (16). Этот коэффициент равен $\frac{\alpha_i (P_n + n - 2)}{B_n p_i}$ при переходе от p_i к $p_i - 1$ и обратной величине при переходе от $p_i - 1$ к p_i .

7. Численные результаты. В упрощенном виде наш алгоритм был успешно использован для расчетов энергии основного состояния атома лития, результаты которых приведены в работе [14].

Для проверки предлагаемого алгоритма был проделан ряд численных экспериментов. Были вычислены массивы W_4 , необходимые для расчета четырех-частичных интегралов. Вычисления проводились в восьмибайтовой арифметике с использованием (17) и по формулам (12). Для разнообразных комбинаций значений параметров наблюдалось совпадение результатов, полученных двумя методами с относительной ошибкой не превосходящей 10^{-12} .

Таблица 4

Сравнение методов экстраполяции и вычислений W функций

q_{12}	q_{13}	q_{23}	l_1	l_2	l_3	q_1	q_2	q_3	n_{12}	n_{13}	n_{14}	m_{12}	m_{13}	m_{14}	δ
-1	1	3	2	2	0	1	11	3	7	10	8	6	9	-	-1.6
-1	1	3	2	2	0	1	11	3	7	10	8	6	9	-	-1.6
1	1	1	0	0	0	1	11	11	7	8	-	7	8	9	-1.6
1	1	1	2	2	2	1	11	11	8	9	-	9	10	11	-1.6
3	1	1	0	0	0	1	11	11	6	7	-	6	7	7	-1.6
3	1	1	0	0	0	3	3	3	8	8	9	7	7	8	-1.6
3	1	1	0	0	0	1	5	5	7	8	9	6	7	8	-1.6
3	1	1	2	2	2	1	5	5	10	11	12	9	10	11	-2.32
3	1	1	2	2	2	1	5	5	9	10	11	9	10	11	-1.6
3	1	1	4	4	4	1	5	5	13	14	-	15	16	-	-2.32
3	1	1	4	4	4	1	5	5	14	15	-	15	16	-	-1.6
1	1	1	2	2	2	3	4	4	10	11	12	11	12	-	-1.6
1	1	-1	2	2	2	3	4	4	12	13	14	13	-	-	-1.6
1	1	-1	0	0	0	3	4	4	10	11	12	9	10	-	-1.6
-1	-1	1	0	0	0	3	3	3	10	11	12	11	-	-	-0.5
-1	-1	1	2	2	2	3	3	3	14	14	16	-	-	-	-1.1

Полное представление о точности предлагаемого алгоритма дают результаты расчетов представленные в таблице 4. Вычисления проводились для набора интегралов $I(1, \alpha_2, \alpha_3, q_{12}, q_{13}, q_{23}, p_1, p_2, p_3, l_1, l_2, l_3)$, где α_2 и α_3 пробегали набор значений $i/13$ ($i = 1 \dots 13$) при фиксированных остальных параметрах.

Величины m_{12}, m_{13}, m_{14} — это количество не равных нулю членов ряда T_i , которое надо учесть для получения всех интегралов набора с относительной точностью соответственно $10^{-12}, 10^{-13}, 10^{-14}$. При этом функции W вычисляются с использованием (17) и экстраполяция проводится модифицированным методом Дрейка. Параметры n_{12}, n_{13}, n_{14} определяются аналогично, но вычисление W происходит по (12), а экстраполяция делается с помощью u -преобразования Левина.

За точное значение принималось значение, полученное по схеме Левина при $l_{\max} = 25$. Вычисление этого значения проводилось с увеличенной точностью (вещественное число представлялось шестнадцатью байтами). Вычисление остальных величин велось с восьмибайтовыми вещественными числами.

Некоторые результаты эксперимента показаны, в таблице 4. Знаком “-” отмечен случай, когда заданная точность не достигается при использовании восьмибайтовой арифметики. Из таблицы 4 видно, что количество слагаемых, которые надо учесть для получения заданной точности предлагаемым методом и методом Левина, отличается не более чем на единицу, причем отмечены случаи, когда методом Левина не удается получить результат с заданной точностью, а нашим удается. Результаты, полученные с помощью более быстрого алгоритма, вычисляющего массив величин W_3 по формулам (17) практически не уступают по точности результатам, полученным с помощью вычисления всех W_3 с использованием бесконечного ряда по формулам (12).

Еще заметим, что для случая $n = 3$ известен подход, позволяющий получить аналитические выражения для величин (1) [16, 17, 15]. Однако, ввиду очень большой сложности, работ, использующих этот подход, мало. Число операций при расчете по этим формулам очень быстро растет с ростом параметров q_i, q_{ij} . В то же время в использованном нами традиционном подходе число операций растет не быстрее, чем линейно с ростом значений параметров q_{ij} и почти не зависит от параметров q_i . Поэтому можно надеяться, что даже в случае $n = 3$ наш метод требует количества операций того же порядка, что и метод, основанный на точных формулах. При $n > 3$ аналитических формул для изучаемых интегралов нет.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. James A.M., Coolidge A.S. On the Grount state of litium // Phys. Rev. 1936. **49**. 688–695.
2. Ohrn Y., Nordling J. Calculation of some atomic integrals // J. Chem. Phys. 1963. **39**.
3. Larson S. Calculation of 2S state of litium atom using wavefunctions of Hylleraas type // Phys. Rev. 1968. **169**. 49–54.

4. Berk A., Bhatia A.K., Junker B.R., Temkin A. Projection operator calculation of lowest e-He resonance // Phys Rev. 1986. **A 34**. 4591–4597.
5. Drake G.W.F., Yan Z.C. Asimptotic expansion method for evaluation of correlated three electron integrals // Phys. Rev. 1995. **A 52**, N 5. 3681–3685.
6. Frolov A.M., Smith V.H. Exact finite series for few-body auxiliary functions // Int. Journal Quantum Chem. 1997. **62**, N 1. 269–278.
7. Pelzl P.J., King F.W. Convergence acceleration approach for the high-precision evaluation of three-electron correlated integrals // Phys. Rev. 1998. **E57**, N 6. 7268–7273.
8. King F.W. Analysis of some integrals arising in the three electron problem // Phys. Rev. 1991. **A44**. 7108–7133.
9. Pelzl P.J., Smethells G.J., King F.W. Improvements of the application of convergence accelerators for evaluation of some three electron atomic integrals // Phys. Rev. 2002. **E65**. 036707–036718.
10. Forras I., King F.W. Evaluation of some atomic three electron problem using convergence accelerators // Phys. Rev. 1994. **A49**. 1637–1645.
11. Frolov A.M., Balley D.H. Highly accurate evaluation of few-body auxiliary functions and four-body integrals // J. Phys. B. 2003. **36**. 1857–1867.
12. McKoy V. Calculation of atomic integrals containing r_{12} , r_{13} , r_{23} // J. Chem. Phys. 1965. **42**.
13. Юцис А.П., Левинсон И.Б., Ванagas В.В. Математический аппарат теории момента количества движения. Вильнюс: Государственное издательство политической и научной литературы, 1960.
14. Smolenskii E.A., Aristov P.A., Ischenko S.Ya., Maximoff S.N. Role of wavefunction nodal surfaces in interpretation of Pauli principle // J. Chem inf computer sci 1996. **36**, N 5. 402–408.
15. Harris F.E. Analytic evaluation of three-electron atomic integrals with Slater wave functions // Phys Rev. 1997. **A55**. 1820–1831.
16. Fromm D.M. Analytic evaluation of three-electron integrals. 1887. **36**. 1013–1044.
17. Remeddi E. Analytic value of the atomic three-electron correlated integral with Slater wave functions // Phys Rev. 1991. **A44**. 5492–5502.

Поступила в редакцию
12.01.2006
