

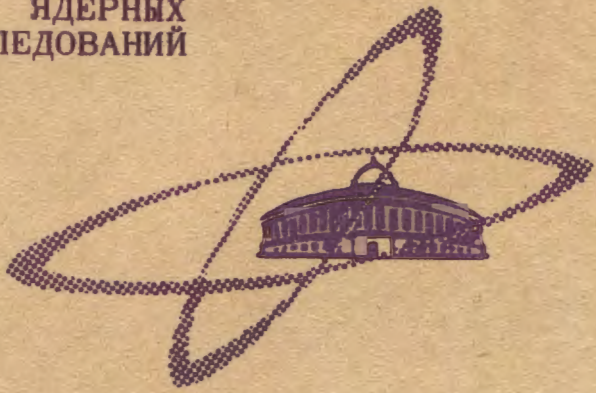
С323
3-383

13/VIII-7

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 5168



Б.Н. Захарьев, В.Л. Шмонин

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

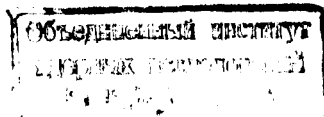
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ
ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ

1970

P4 - 5168

Б.Н. Захарьев, В.Л. Шмонин

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ
ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ



І. В В Е Д Е Н И Е

Решение задач теории многоканального рассеяния основано на использовании аппарате прямых методов математической физики. Получение высокой степени приближения сопряжено с громоздкими расчетами, доступными лишь современным ЭВМ. Однако некоторая погрешность результата расчетов присутствует неизбежно, причём её нельзя *a priori* считать малой. Для того, чтобы результат мог служить источником информации, необходимо установить его достоверность, т.е. оценить возможные границы его погрешности. Эти границы указывают степень неопределенности соответствия между результатами теоретического расчёта и исходными данными. Фиксирование такой неопределенности позволяет, например, из сравнения теории с экспериментом решать "обратную" задачу (сужение класса приемлемых потенциалов) с известной достоверностью. Наглядной иллюстрацией того, как важно иметь хотя бы односторонние оценки, служат известные следствия, извлекаемые из верхних вариационных границ для энергетических уровней. К сожалению, в теории рассеяния пока не найдены эффективные методы получения даже таких односторонних оценок^{х)}. В данном обзоре рассматриваются источники погрешности в различных подходах теории сильной связи каналов и механизм их влияния на результат.

Общая схема методов теории многоканального рассеяния состоит в следующем. Искомая волновая функция Ψ представля-

х) Имеются оценки для длин рассеяния l/I . В общем случае ненулевой энергии попытки^{/2/} получить строгие оценки нельзя считать полностью успешными.

ется в виде разложения по некоторому набору $\{ \varphi_i \}$ известных функций

$$\Psi = \sum a_i \varphi_i \quad (I)$$

Задача сводится к нахождению неизвестных коэффициентов a_i , для которых получается бесконечная система уравнений, эквивалентная уравнению Шредингера. Невозможность решения бесконечных систем приводит к необходимости оборвать разложение (I) на конечном числе членов. Первое требование, которому должен удовлетворять метод — сходимость приближенных решений. Это означает, что при неограниченном увеличении числа членов разложения приближенное решение должно сходиться к точному. (Предполагается, что все расчеты производятся абсолютно точно). Сходимость достигается полнотой и линейной независимостью базиса в соответствующем гильбертовом пространстве.

Обычно под сходимостью понимается равномерная сходимость приближенного решения к функции, строго удовлетворяющей уравнению и граничным условиям. Однако нас интересуют не сами волновые функции, а наблюдаемые величины, которые являются функционалами от Ψ . Сходимость же функционалов — более слабое требование на приближенные решения, чем равномерная сходимость. И может оказаться, что требования на базисные функции φ_i , необходимые для равномерной сходимости $\Psi_{\text{прибл.}} \rightarrow \Psi$, следует ослабить.

Однако сходимости еще недостаточно. По мере получения более высоких приближений (учет большего числа членов в разложении (I)), на точность результата оказывают влияние две противоположные тенденции. С одной стороны, уменьшается погреш-

ность, связанная с ограниченностью базиса, на котором ищется решение. С другой – увеличивается количество погрешностей вычислительного процесса. Начиная с некоторого приближения, вторая тенденция может оказаться преобладающей. Тогда, увеличивая число членов разложения с целью уточнить результат, мы в действительности ухудшим его.

Определение оптимального числа членов разложения (I), выбор базиса $\{ \varphi_i \}$, полная оценка погрешности представляют собой сложные, многосторонние задачи. Ниже они будут обсуждаться с различных точек зрения.

Степень влияния тех или иных погрешностей на результат определяется устойчивостью метода по отношению к данному типу погрешностей.

Все погрешности, неизбежно сопутствующие методам теории многоканального рассеяния, можно разбить на две категории.

1. Погрешности, связанные с ограниченностью базиса.
2. Погрешности вычислительного процесса: ошибки округления, приближенное интегрирование и т.д.

Исследованию устойчивости приближенных методов по отношению к погрешностям второй категории посвящена обширная литература (3/, 4/, 5/ и т.д.) Разработаны методы оценки влияния этих погрешностей на результат. Краткий обзор их содержится в разделе III. Учет погрешностей первой категории является, по существу, еще открытой задачей. Некоторых её аспектов мы коснемся ниже.

Основу решения задач теории многоканального рассеяния составляют проекционные методы. Анализ их структуры производится в разделе II. Раздел IV посвящен устойчивости проекционных методов.

П. Проекционные методы

Современные методы многоканальной теории рассеяния существенно различаются по способу выбора базисных функций. Кроме того, они приводят к системам уравнений разного типа: алгебраическим, дифференциальным, интегродифференциальным и интегральным. Однако все они укладываются в рамки общей теории проекционных методов.

Схема подходе этой теории к решению уравнения следующая. Уравнение Шредингера рассматривается как векторное уравнение $(H-E)\Psi = 0$ в бесконечномерном пространстве. В задачах рассеяния волновая функция Ψ удовлетворяет неоднородным асимптотическим условиям. Как известно, от волновой функции Ψ можно перейти к такой новой функции X , что эта неоднородность перейдет в уравнение.

$$(H-E)X = f, \quad (2)$$

где f - некоторая известная функция.

Если бы мы имели дело с векторным уравнением в конечномерном пространстве, то его решение сводилось бы к решению системы конечного числа сцепленных уравнений для отдельных компонент. Мы же должны решать бесконечномерное векторное уравнение (2). Ему соответствует бесконечная система связанных уравнений. Решать такие системы мы не умеем. На практике приходится ограничиваться такими решениями X , которые удовлетворяют лишь проекции уравнения (2) на конечномерное подпространство:

$$P_n (H-E)X = P_n f \quad (3)$$

(Здесь P_n - проекционный оператор). Обычно это подпространство задается n - мерным базисом χ_j ($j = 1, 2, \dots, n$), где χ_j - известные функции из произвольного полного набора в области значений оператора $H-E$. Тогда явный вид оператора P_n :

$$P_n = \sum_{j=1}^n |\chi_j\rangle \langle \chi_j| \quad (4)$$

Решения X уравнения (3) не являются обычными гладкими решениями уравнения (2), так как удовлетворяют лишь n - мерной проекции этого уравнения. Такие решения принято называть обобщенными.

Заметим, что граничным условиям тоже не обязательно удовлетворять точно. Можно ограничиться их выполнением в том или ином обобщенном смысле.

Если искать решение X в произвольном подпространстве из области определения оператора $H-E$, а именно - в виде разложения по базису этого подпространства

$$X = \sum_{i=1}^k a_i \varphi_i, \quad (5)$$

то подстановка (5) в (3) дает систему линейных алгебраических уравнений с матрицей $M_{ji} = \langle \chi_j | H-E | \varphi_i \rangle$ размерности $n \times k$. Очевидно, при $k > n$ решение системы не единственно, а при $k < n$ оно вообще может не существовать. Для $k = n$ решение существует и единственно при условии, что детерминант системы $\text{Det } M$ отличен от нуля. Это требование накладывает на выбор базиса $\{\varphi_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) некоторое ограничение. Например, проекция любого вектора $(H-E)\varphi_i$ на подпространство функций χ_j ($j = 1, 2, \dots, n$) должна быть

отлично от нуля. Иначе детерминант $\text{Det } M$ будет иметь нулевой столбец.

Ясно, что выбрать n функций φ_i для разложения (5) можно бесконечным числом способов. Заметим, что можно брать не только n первых функций любого полного базиса, но также любые n функций или n линейных комбинаций функций этого базиса.

Разумеется, всю эту свободу нужно использовать так, чтобы как можно точнее приблизиться в своем описании к изучаемому процессу. Поскольку он описывается исходным уравнением (2), вполне естественно требовать от приближенного решения возможно более точного удовлетворения этому уравнению. Мерой того, насколько уравнение не удовлетворяется приближенным решением, служит невязка δ данного решения:

$$\delta = (N-E)X - f. \quad (6)$$

Посмотрим, как влияет на невязку тот или иной выбор базисных функций^{1/6/}.

Оператор $(N-E)$, действуя на функции φ_i ($i=1, 2, \dots, n$) из области его определения, преобразует их в функции $(N-E)\varphi_i$ из области значений оператора $N-E$. Поскольку оператор линейный, функции $(N-E)\varphi_i$ ($i=1, 2, \dots, n$) линейно независимы, как и φ_i . Набор функций $(N-E)\varphi_i$ задает в области значений оператора n -мерное подпространство E_n . Так как в (6) $(N-E)X$ - конечномерный, а f - бесконечномерный вектор, $(N-E)X$ может равняться только той части f , которая лежит в подпространстве E_n , - проекции f на E_n . Пусть R_n - проекционный оператор на подпро-

пространство E_n . Очевидно, функция $(1 - R_n)f$ обязательно войдет в невязку и при решении будет потеряна. Однако $(H - E)X$ не всегда будет совпадать с проекцией f на подпространство E_n , так как само уравнение

$$(H - E)X = f$$

решается не в подпространстве E_n , а будучи спроектированным на подпространство \mathcal{U}_n функций χ_j ($j = 1, 2, \dots, n$). При этом потеря $(1 - R_n)f$ может оказать различное влияние на решение X , а следовательно, на невязку. Невозможно точно указать это влияние, однако границы нормы невязки могут быть найдены. Поскольку причиной возможного роста ошибки является проектирование уравнения (2) на подпространство \mathcal{U}_n , этот рост будет тем меньше, чем более схожи \mathcal{U}_n и E_n .

Количественной характеристикой близости двух подпространств является их раствор $\theta(\mathcal{U}_n, E_n)$ [6].
 Определим операторы $P^{(n)}$ и $R^{(n)}$

$$P^{(n)} = 1 - P_n \quad ; \quad R^{(n)} = 1 - R_n$$

Тогда раствор подпространств \mathcal{U}_n и E_n :

$$\theta(\mathcal{U}_n, E_n) = \max \left\{ \sup_{\substack{z \in \mathcal{U}_n \\ \|z\|=1}} \|P^{(n)}z\|, \sup_{\substack{z \in E_n \\ \|z\|=1}} \|R^{(n)}z\| \right\}$$

$\theta(\mathcal{U}_n, E_n) = 0$ только когда \mathcal{U}_n и E_n полностью совпадают.

В общем случае раствор подпространств может быть любым числом от нуля до единицы. В монографии [6] показано, что оценка невязки может быть выражена через раствор подпространств \mathcal{U}_n и E_n следующим образом:

$$\|R^{(n)}f\| \leq \| (H-E)X-f \| \leq \frac{1}{\sqrt{1-\theta^2(\mathcal{G}_n, E_n)}} \|R^{(n)}f\|$$

Заметим, что описанная выше схема является хорошо известной, часто употребляемой в квантовомеханических расчетах процедурой. Волновая функция ищется в виде конечного разложения с известными коэффициентами, которое подставляется в исходное уравнение (2). Умножение и интегрирование (проектирование P_n) приводит к системе уравнений для неизвестных коэффициентов.

Частный случай, когда χ_j совпадают с φ_j , соответствует методу Бубнова-Галеркина, который лежит в основе методов смешивания конфигураций, Фэно-Блоха, Фешбаха и других. Общий случай произвольных χ_j соответствует методу Петрова-Галеркина. Свобода выбора χ_j дает дополнительные возможности, которыми физикам еще предстоит воспользоваться.

Выше мы предполагали, что задача сводится к системе алгебраических уравнений. Однако многие приведенные положения остаются справедливыми и в более общем случае. Пространство \mathcal{H} функций, зависящих от r переменных, может быть разбито на прямое произведение пространства функций от s переменных \mathcal{H}_s и пространства функций от $r-s$ переменных \mathcal{H}_{r-s} .

$$\mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_{r-s} = \mathcal{H}$$

Уравнение (2) проектируется на прямое произведение пространства \mathcal{H}_s и некоторого n -мерного подпространства

$$E_n(r-s) \subset \mathcal{H}_{r-s}$$

$$P_n(r-s) (H-E)X = P_n(r-s) f \quad (6)$$

Решение уравнения (6) определяется выбором n - мерного базиса функций φ_i ($\varphi_i \in \mathcal{H}_{(r-\bar{s})}$) и наложением на X асимптотических условий по переменным $1, 2, \dots$. Практический интерес представляют случаи $S = 0$ и $S = 1$.

При $S = 0$ коэффициенты разложения в (5) не зависят от координат и задача сводится к системе алгебраических или интегральных^{х)} уравнений (Фоно-Блох^{/7/}). При $S = 1$ коэффициенты в разложении (5) зависят от одной координаты и нужно решать систему обыкновенных дифференциальных уравнений (Фешбах^{/8/}).

Из бесконечного числа возможных решений (выбор $\{x_i\}$, $\{\varphi_i\}$ и n) мы стремимся выбрать то, которое дает наилучшее приближение искомой физической величины. Важным критерием для этого служит устойчивость вычислительной процедуры. Наиболее подробно этот вопрос разработан для системы алгебраических уравнений.

х) В задачах рассеяния в разложении (5) сумма по дискретным состояниям дополняется интегралом по непрерывному спектру.

Ш. Устойчивость алгебраических систем и методов их решения^{х)}

После проектирования уравнения (2) задача сводится к решению системы алгебраических уравнений

$$Aa = b, \quad (7)$$

где A - матрица коэффициентов A_{ij} ; - системы, a - вектор -столбец неизвестных a_i , b - вектор с известными компонентами b_i .

Существует немало разнообразных методов решения алгебраических систем. Выбор метода для конкретной задачи определяется следующими характеристиками:

1. Затраты машинного времени.
2. Необходимый объем оперативной памяти.
3. Удобство программирования.
4. Устойчивость вычислительного алгоритма.

Изложение большинства методов приведено в монографиях /3/, /10/. В /10/ для каждого метода указан возможный предельный порядок системы при данном объеме памяти, формулы для расчета затрат машинного времени, а также особенности программирования.

Практически элементы матрицы A и вектора b получаются с ошибками. Это объясняется тем, что указанные величины часто

х) Устойчивость систем дифференциальных уравнений и методов их решения рассматривалась в работах /9/. Однако здесь не достигнуто столь удобных для практических приложений результатов, как для алгебраических систем.

представляют собой сложные интегральные выражения, которые приближенно вычисляются с помощью ЭВМ. Даже в тех редких случаях, когда для A_{ij} и b_j получаются аналитические выражения, неизбежны ошибки округления при записи их в память машины.

Мерой погрешности в задании системы (7) могут служить нормы δA и вектора δb матрицы ошибок δA и вектора δb . Важно оценить влияние указанных погрешностей на результат. Ошибки в исходных данных трансформируются в ошибки δa очень сложным образом. По существу каждый элемент матрицы A принимает в этом участие (n^2 параметров!). Однако верхнюю границу для относительной ошибки решения $\|\delta a\|/\|a\|$ можно указать с помощью одного параметра C_A . Этот важный параметр называется числом обусловленности матрицы системы^{/3/, /4/}.

Рассмотрим сначала простой случай, когда $\delta A = 0$. Покажем, что

$$\frac{\|\delta a\|}{\|a\|} \leq C_A \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \quad (8)$$

Из (7) следует

$$\|b\| \leq \|A\| \|a\| \quad (9)$$

Из соотношения

$$\delta a = A^{-1} \delta b$$

следует

$$\|\delta a\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\| \quad (10)$$

Перемножая (9) и (10), и поделив обе стороны на $\|a\| \cdot \|b\|$, получим

$$\frac{\|\delta a\|}{\|a\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}, \quad (II)$$

то есть $C_A = \|A\| \|A^{-1}\|$.

Аналогично можно показать, что в случае $\delta A \neq 0$, $\delta b = 0$

$$\frac{\|\delta a\|}{\|a + \delta a\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}. \quad (I2)$$

Общий случай $\|\delta A\| \neq 0$; $\|\delta b\| \neq 0$ получается сочетанием (II) и (I2).

Пока в наших рассуждениях предполагалось, что сам процесс решения системы является точным и не вносит дополнительных ошибок. На практике, однако, каждая операция сопровождается ошибкой округления. Учет этих ошибок долгое время представлял серьезные трудности и только в последние годы здесь был достигнут существенный успех. Влияние ошибок округления удалось свести к эквивалентному возмущению исходной системы^{/5/}, а следовательно, для их учета можно воспользоваться формулой (I2).

Итак, мы видим, что одна и та же величина C_A определяет влияние ошибок на результат, независимо от их природы.

Числа обусловленности известных матриц могут быть найдены (имеются определенные алгоритмы) и использованы в конкретных задачах для оценки погрешностей.

Рассмотренные выше оценки зависят от способа введения нормы. Часто используется евклидова норма

$$\|b\| = (b_1^2 + b_2^2 + \dots + b_n^2)^{1/2} \quad (I3)$$

$$\|A\| = \max_{\{z\}} \frac{\|Az\|}{\|z\|} \quad (I4)$$

В этом случае для числа обусловленности получается формула^{/3/}

$$C_A = \sqrt{\frac{\mu_{\max}}{\mu_{\min}}}, \quad (15)$$

где μ_i - собственные числа матрицы $A^T A$ (A^T получается транспонированием A).

В различных конкретных задачах бывает целесообразно использовать другие определения нормы. Например, может оказаться предпочтительным введение такой нормы:

$$\|A\| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_i |a_{ij}|.$$

Однако в дальнейшем мы будем предполагать использование евклидовой нормы и формулы (15) для определения числа обусловленности матрицы.

Таким образом, устойчивость системы алгебраических уравнений характеризуется величиной C_A . Заметим, что величина C_A может быть очень большой даже у простых матриц малого порядка. Примеры этого приведены в работах^{/4,5/}.

IV. Устойчивость проекционных методов.

Основные положения, приведенные в предыдущем разделе, позволяют перейти к вопросам устойчивости проекционных методов. В математической литературе устойчивость проекционного метода обычно связывают с поведением числа μ_{\min} при неограниченном возрастании размерности и подпространства, на которое проектируется уравнение (2). В^{/II/} показано, что это число при увели-

чении n не возрастает. Очевидно, что при $M_{\min} \rightarrow 0$, оценка погрешности результата стремится к бесконечности ($C_A \rightarrow \infty$), так как допускаемые при вычислениях ошибки δB всегда конечны.

Метод считают устойчивым, если

$$M_{\min} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} M_0 > 0 \quad (I6)$$

В монографии^{/6/} показано, что для ортогональных наборов φ_i и χ_j ($i, j = 1, 2, \dots, n$) условие (I6) выполняется, если $\lim_{n \rightarrow \infty} \theta(E_n, \varphi_n) < 1$.

Однако такой критерий недостаточно эффективен в практическом отношении. Условие (I6) не является необходимым, так как в расчетах n всегда конечно и, если C_{An} невелико, метод можно считать практически устойчивым, независимо от поведения C_{An} при $n \rightarrow \infty$. С другой стороны, условие (I6) не является достаточным для получения хороших результатов, поскольку M_0 может быть очень мало.

Как отмечалось во введении, при возрастании n на погрешность результата сказываются две противоборствующие тенденции. Рост числа членов в разложении (I) способствует уменьшению погрешности. Но с увеличением n монотонно возрастает C_A , а следовательно, и влияние всех источников погрешности.

Метод следует считать практически устойчивым, если, несмотря на вторую тенденцию, с его помощью можно получить достаточно точный результат.

Количественной характеристикой практической устойчивости могут служить строгие двухсторонние границы погрешности резуль-

тата. Недавно авторами был предложен специальный проекционный метод решения уравнения Шредингера, позволяющий произвести полный учет погрешностей и указать такие границы $\sqrt{I_2}$. Представляется перспективной также методика вариационных оценок.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При написании настоящего обзора мы преследовали две цели. С одной стороны – подчеркнуть важность вопроса о достоверности результата в многоканальной теории рассеяния, методы которой связаны с громоздкими расчетами. С другой – отразить существующие в настоящее время представления об источниках ошибок в схеме этих методов и механизме их влияния на результат.

Нам хотелось бы также привлечь внимание физиков к этой мало исследованной, но представляющей несомненный интерес области.

Наибольшая трудность заключается в оценке влияния на результат обрыва бесконечной системы уравнений.

На наш взгляд, решение этой задачи является ключом к проблеме в целом.

Получение строгих границ возможных значений результата придет качественно новый смысл теоретическим расчетам, позволит получать достоверные сведения о правильности выбранной для описания исследуемых процессов модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Spruch L., Rosenberg L., O'Malley T.
Phys.Rev. 119, 164 (1960).
 2. Y.Hahn, T.F.O'Malley, L.Spruch
Phys.Rev. 134, B397 (1964).
 3. А.К.Фаддеев, В.Н.Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз. Москва, 1960.
 4. Дж. Форсайт, К.Молер. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений "Мир", Москва, 1969.
 5. В.В.Воеводин. Ошибки округления и устойчивость в прямых методах линейной алгебры. Ротапринт ВЦ МГУ, Москва, 1969.
 6. М.А.Красносельский, Г.М.Вейникко, П.П.Забрейко, Я.Б.Рутцкий, В.Я.Стеценко. Приближенное решение операторных уравнений, гл. 4, "Наука", Москва, 1969.
 7. Bloch S.
Лекции в школе физиков. Варенна, 1956.
 8. Ефименко Т.Г., Жигунов В.П., Захарьев Б.Н.
Ann.of Phys. 47, 275, 1968.
 9. A.Kalston, H.Wilf.Mathematical Methods for Digital Computers. New York, 1961.
- Р.Э.Хвсьминский. Устойчивость систем дифференциальных уравнений при случайных возмущениях их параметров. "Наука", Москва, 1969 г.

10. В.В.Воеводин. Численные методы алгебры. "Наука", Москва, 1966
11. С.Г.Михлин. Численная реализация вариационных методов.
"Наука", Москва, 1966.
12. Б.Н. Захарьев, В.Л. Шмонин. Сообщения ОИЯИ Р4-5149,
Дубна 1970 г.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 мая 1970 года.