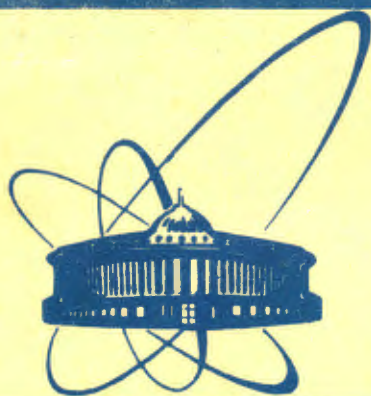


81-386

+



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
Дубна

4502/2-81

7/9-81

11-81-386

Д.Баатар, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ  
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА,  
СОДЕРЖАЩЕГО ВПОЛНЕ  
НЕПРЕРЫВНЫЙ ОПЕРАТОР

1981

1. О трех методах решения уравнения Шредингера в области непрерывного спектра

Как правило, в области непрерывного спектра задача решения уравнения Шредингера

$$y''(z) + [k^2 - V(z)]y(z) = 0 \quad (1.1)$$

с условием

$$y(0) = 0$$

и асимптотическим поведением

$$y(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \xi \sin(kz + \delta(k)) \quad (1.2)$$

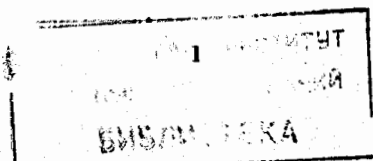
рассматривается как задача Коши с начальными условиями:

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = C, \quad (1.3)$$

где  $C$  - произвольная константа, определяющая нормировку решения\*.

Методы численного решения задачи Коши обладают тем недостатком, что накопление ошибок округления приводит к увеличению относительной погрешности в асимптотической области решения. Попытка устранить указанный недостаток приводит к сильному усложнению алгоритма вычислений, к увеличению требуемой памяти программы и времени счета. Также при численной реализации этого подхода возникает проблема выхода из сингулярной точки  $z=0$ , для чего необходимо с достаточной точностью установить асимптотику волновой функций  $y(z)$  в ее окрестности. Ошибки в асимптотике и в оценке области применимости асимптотического представления решения могут привести к значительным пог-

\* Предполагается, что потенциал  $V(z)$  удовлетворяет условиям, при которых существует непрерывный спектр энергий, то есть решения уравнения (1.1), удовлетворяющие условиям (1.3), (1.2), существуют для всех  $E > 0$  ( $E = k^2$ ).



решностям при извлечении параметров рассеяния из асимптотики (I.2) при заданном значении  $K^2$ .

Один из способов устранения указанных трудностей состоит в переформулировке задачи Коши для некоторых дифференциальных уравнений в задачу с краевыми условиями. Здесь мы остановимся на трех способах переформулировки задачи Коши (I.1), (I.3) для уравнения Шредингера в задачу с известными краевыми условиями.

А. Формулировка задачи определения непрерывного спектра как задачи на собственные значения.

Данный метод был разработан в работах<sup>/1/</sup>. Суть метода заключается в том, что вместо прямой зависимости  $\delta = \delta(k)$  ищется обратная зависимость

$$K = K(\delta).$$

Таким образом, в граничных условиях задается значение фазы рассеяния  $\delta$ , а значение  $K$  находится как собственное значение. Задание значения фазы рассеяния  $\delta$  позволяет сформулировать следующие краевые условия для уравнения (I.1):

$$\left. \begin{aligned} y(0) &= 0, \\ \frac{y'(z)}{y(z)} &= \frac{K \cos(kz + \delta)}{\sin(kz + \delta)} \Big|_{z=R}. \end{aligned} \right\} \quad (I.4)$$

Задав еще условие нормировки волновой функции, например, в форме

$$\int_0^R y^2(z) dz = 1, \quad (I.5)$$

приходим к обычной формулировке задачи на собственное значение. Для решения (I.1), (I.4), (I.5) можно применять известные методы решения, разработанные для задачи на собственные значения. В работах<sup>/1/</sup> применяется непрерывный аналог метода Ньютона, который приводит к решению последовательности линейных краевых задач. Метод А является наиболее эффективным вблизи подбарьерных резонансных значений энергии. С методической точки зрения он как бы объединяет задачи определения непрерывного и дискретного спектра в единую вычислительную схему, что представляет интерес в многоканальных задачах рассеяния с учетом закрытых каналов.

В общем случае потенциал содержит дальнедействующий член. В уравнении Шредингера это так называемый центробежный потенциал:

$$V_\ell = \frac{\ell(\ell+1)}{z^2}, \quad \ell = 1; 2; \dots, \quad (I.6)$$

или кулоновский потенциал:

$$V_k = \frac{\alpha}{z}, \quad \alpha = \frac{2mze^2}{\hbar^2} \quad (I.7)$$

( $Z$  - заряд ядра;  $e, m$  - заряд и масса электрона;  $\hbar$  - постоянная Планка).

Решение уравнения Шредингера с потенциалами (I.6) и (I.7) известно. Обозначим через  $F_\ell(kz)$  и  $G_\ell(kz)$  регулярное и нерегулярное решения уравнения

$$y'' + (k^2 - V_\ell - V_k)y = 0 \quad (I.8)$$

с асимптотическим поведением при  $z \rightarrow \infty$

$$F_\ell(kz) = \sin(kz - \frac{\ell\pi}{2} - \delta_k),$$

$$G_\ell(kz) = \cos(kz - \frac{\ell\pi}{2} - \delta_k),$$

$$\delta_k = \frac{eZ}{\hbar v} \ln(2kz).$$

При наличии в потенциале дальнедействующих членов  $V_\ell$  и  $V_k$  асимптотику решения уравнения

$$\left. \begin{aligned} y''(z) + (k^2 - V(z) - V_\ell - V_k)y(z) &= 0, \\ y(0) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (I.9)$$

целесообразно определить относительно решения уравнения (I.8). Она имеет вид

$$y(z) = \alpha(k) [\cos \delta(k) F_\ell(kz) - \sin \delta(k) G_\ell(kz)]. \quad (I.10)$$

Здесь  $\delta(k)$  - фаза рассеяния, относящаяся к короткодействующей части потенциала  $V(z)$ . Соответственно, обобщается и краевое условие (I.4):

$$\frac{y'(z)}{y(z)} = \frac{K [\cos \delta(k) F_\ell'(kz) - \sin \delta(k) G_\ell'(kz)]}{[\cos \delta(k) F_\ell(kz) - \sin \delta(k) G_\ell(kz)]}. \quad (I.4')$$

Б. Задача определения непрерывного спектра как задачи с нелинейными краевыми условиями.

Метод был предложен в<sup>/2/</sup>. В выражении (I.2) неизвестными являются  $\alpha(k)$  и  $\delta(k)$ . Используя выражение для производной  $y'(z)$  при  $z \rightarrow \infty$ :

$$y'(z) = K \alpha(k) \cos(kz + \delta(k)), \quad (I.11)$$

исключим из (I.2), (I.11) неизвестную  $\delta(k)$ .

Получим

$$\alpha^2(\kappa) = \frac{1}{\kappa^2} (y'^2 + \kappa^2 y^2), \quad z=R. \quad (I.12)$$

В данном случае условие нормировки

$$\alpha^2(\kappa) = C$$

одновременно будет и нелинейным краевым условием для уравнения (I.1).

В общем случае, т.е. для уравнения (I.9), формула (I.12) обобщается следующим образом:

$$\alpha^2(\kappa) = \frac{1}{\kappa^2} (G_\epsilon(\kappa z) y'(R) - \kappa G'_\epsilon(\kappa z) y(R))^2 + \frac{1}{\kappa^2} (F_\epsilon(\kappa z) y'(R) - \kappa F'_\epsilon(\kappa z) y(R))^2. \quad (I.12')$$

Для решения уравнения (I.1) в постановке Б также применяется непрерывный аналог метода Ньютона, сводящий решение к решению последовательности линейных граничных задач. В отличие от А в данном случае находится прямая зависимость

$$\delta = \delta(\kappa)$$

путем последующего извлечения этого параметра из асимптотики (I.2).

В. Формулировка задачи (I.1)-(I.3) в виде краевой задачи, которую мы здесь приведем, является самой простой из рассмотренных выше. Суть этой постановки заключается в замене (I.2) на краевое условие

$$y(z) \Big|_{z=R} = C, \quad (I.13)$$

где C, как и прежде, произвольная константа. Условие (I.13), как и условие (I.3), определяет нормировку решения с точностью до функции

$$f(\kappa z) = \sin(\kappa z + \delta)$$

или функции

$$f(\kappa z) = (\cos \delta \cdot F_\epsilon - \sin \delta \cdot G_\epsilon)$$

в общем случае. Предполагается, что  $z=R$  не является нулем функции (I.2).

Для решения задачи в постановке В наиболее эффективным является метод прогонки<sup>3/</sup>. После того как решение найдено, с помощью формул (I.12), (I.12') и

$$\delta(\kappa) = \arctg \left\{ \frac{F_\epsilon(\kappa z) y'(z) - \kappa F'_\epsilon(\kappa z) y(z)}{G_\epsilon(\kappa z) y'(z) - \kappa G'_\epsilon(\kappa z) y(z)} \right\}_{z=R} \quad (I.14)$$

находим  $\alpha(\kappa)$  и  $\delta(\kappa)$ .

Функции  $\alpha(\kappa)$  и  $\delta(\kappa)$  в задачах рассеяния, собственно, и являются теми функциями, которые требуется найти. Однако, как видно из формул (I.12) и (I.14), точность вычисления этих функций находится в прямой зависимости от точности решения в асимптотической области. В отличие от алгоритмов, реализующих задачу Коши, погрешности вычисления в которых растут именно в асимптотической области, в конечно-разностных алгоритмах, реализующих решение линейных краевых задач, относительная точность вычислений является равномерной во всей заданной области определения решения.

## 2. Метод решения уравнения Шредингера, содержащего вполне непрерывный оператор

Рассмотренные выше методы нетрудно распространить и на случай уравнения Шредингера, содержащего вполне непрерывный оператор. В общем случае такое уравнение можно записать в виде

$$\mathcal{L}y + \mathcal{T}y = 0, \quad (2.1)$$

где операторы  $\mathcal{L}$  и  $\mathcal{T}$  определены следующим образом:

$$\mathcal{L} \equiv \frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 - V(z), \quad (2.2)$$

$$\mathcal{T} \equiv \sum_{\kappa=1}^{\infty} (\cdot, \beta_\kappa(z)) a_\kappa(z). \quad (2.3)$$

Здесь  $a_\kappa(z), \beta_\kappa(z) \in L_2(0, R)$  являются базисными функциями,  $(\dots)$  - соответствующее скалярное произведение. Предполагается, что асимптотика решения (2.1) так же, как и (I.1), определяется выражением

$$y(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \alpha(\kappa) \sin(\kappa z + \delta(\kappa)). \quad (2.4)$$

Для преобразования задачи (2.1)-(2.4) в соответствующую краевую задачу можно применить все три выше рассмотренных метода. Однако мы здесь ограничимся применением только метода В, то есть поставим граничные условия

$$y(0) = 0, \quad y(R) = C \quad (2.5)$$

для уравнения (2.1).

Как известно, вполне непрерывный оператор с желаемой точностью можно аппроксимировать вырожденным оператором:

$$\mathcal{T}_{1N} \equiv \sum_{\kappa=1}^N (\cdot, \beta_\kappa(z)) a_\kappa(z), \quad (2.6)$$

так что

$$T = T_{in} + T_{N\infty},$$

где  $T_{N\infty} \equiv \sum_{k=N+1}^{\infty} (\cdot, b_k(z)) a_k(z)$

удовлетворяет условию

$$\|T_{N\infty}\| < \varepsilon,$$

а  $\varepsilon \rightarrow 0$  при  $N \rightarrow \infty$ .

Рассмотрим сначала метод решения уравнения (2.1) с вырожденным оператором (2.6).

Введем обозначения

$$d_k = (y, b_k). \quad (2.7)$$

Будем искать решение в следующем виде:

$$y = y_0 + \sum_{n=1}^N d_n y_n, \quad (2.8)$$

где  $y_n$  - некоторые элементы  $L_2$ , а  $d_n$  - неизвестные коэффициенты.

Подставив (2.8) в (2.1), получим

$$\mathcal{L}y_0 + \sum_{n=1}^N d_n \mathcal{L}y_n + \sum_{n=1}^N d_n a_n = 0,$$

$$y_0(0) + \sum_{n=1}^N d_n y_n(0) = 0,$$

$$y_0(R) + \sum_{n=1}^N d_n y_n(R) = 0.$$

Приравнявая члены при  $d_n$  к нулю, получим следующую систему несвязанных уравнений:

$$\mathcal{L}y_0 = 0, \quad (2.9)$$

$$y_0(0) = 0, \quad y_0(R) = c_0,$$

$$\mathcal{L}y_n = -a_n, \quad (2.10)$$

$$y_n(0) = 0, \quad y_n(R) = c_n \quad (n=1, 2, \dots, N).$$

Здесь  $c_0, c_n$  - константы, удовлетворяющие соотношению

$$c_0 + \sum_{n=1}^N c_n d_n = c.$$

Решения краевых задач (2.9), (2.10) находятся с помощью метода конечных разностей и алгоритма прогонки. После того как решения уравнений (2.9), (2.10) найдены, для определения коэффициентов  $d_n$  обра-

тимся к соотношению (2.7). Подставив в (2.7) выражение (2.8), получим систему алгебраических уравнений для определения  $d_n$ :

$$d_n - \sum_{k=1}^N D_{nk} d_k = f_n, \quad (2.11)$$

где  $f_n = (y_0, b_n)$ ,  $D_{nk} = (y_k, b_n)$ . (2.12)

Далее, подставляя  $d_n$  из (2.11) и  $y_0(z)$ ,  $y_n(z)$  из (2.9)-(2.10) в (2.8), находим полное решение уравнения (2.1) с вырожденным оператором.

Из выше рассмотренного метода решения следует, что если уравнение (2.1) содержит вполне непрерывный оператор, то вместо уравнений (2.10) будем иметь бесконечное число подобных уравнений. В этом случае решение (2.8) будет представлено в виде бесконечного ряда:

$$y = y_0 + \sum_{n=1}^{\infty} d_n y_n, \quad (2.13)$$

и, таким образом, будет стоять вопрос о сходимости ряда (2.13). Можно показать, что если оператор  $T$  вполне непрерывный, то ряд (2.13) сходится к точному решению уравнения (2.1). Если  $\|a_n\| \leq M_1$  ( $M_1 > 0$ ), то из существования решения уравнения (2.10) следует существование ограниченного обратного оператора:

$$\mathcal{L}^{-1} \equiv G,$$

так что

$$y_n = G a_n.$$

Пусть  $\|G\| < M_2$ , тогда

$$\left\| \sum_{n=1}^{\infty} d_n y_n \right\| = \left\| \sum_{n=1}^{\infty} d_n G a_n \right\| \leq \|G\| \cdot \left\| \sum_{n=1}^{\infty} d_n a_n \right\| = \|G\| \cdot \|T_{N\infty}\|.$$

Согласно определению вполне непрерывного оператора можно выбрать  $N$  такое, что

$$\|T_{N\infty}\| < \varepsilon / M_2.$$

Тогда

$$\left\| \sum_{n=1}^{\infty} d_n y_n \right\| < \varepsilon, \quad (2.14)$$

где  $\varepsilon > 0$  - сколь угодно малое число. Неравенство (2.14) доказывает сходимость ряда (2.13). Теперь покажем, что ряд (2.13) сходится к точному решению уравнения (2.1).

Пусть  $y^*$  - точное решение (2.1). Представим его в виде

$$y^* = y^N + y^{N\infty}.$$

Здесь

$$y^N = y_0 + \sum_{n=1}^N d_n y_n, \quad y^{N\infty} = \sum_{n=1}^{N\infty} d_n y_n,$$

$$\begin{aligned} \Delta &= \|Zy^* + Ty^* - (Zy^N + T_{1N}y^N)\| = \|Zy^{N\infty} + T_{1N}y^{N\infty} + T_{N\infty}y^N + \\ &+ T_{N\infty}y^{N\infty}\| \leq \|Zy^{N\infty}\| + \|T_{1N}y^{N\infty}\| + \|T_{N\infty}y^N\| + \|T_{N\infty}y^{N\infty}\| \leq \\ &\leq \|\sum_{n=1}^{\infty} d_n a_n\| + \|T_{1N}\| \cdot \|y^{N\infty}\| + \|T_{N\infty}\| \cdot \|y^N\| + \|T_{N\infty}\| \cdot \\ &\cdot \|y^{N\infty}\|, \end{aligned}$$

Здесь при  $N \rightarrow \infty$  каждое из слагаемых стремится к нулю, поскольку

$$\|\sum_{n=1}^{\infty} d_n a_n\| = \|T_{N\infty}\| < \varepsilon/4s_0, \quad \|y^N\| < s_0,$$

$$\|y^{N\infty}\| < \varepsilon/4s_1, \quad \|T_{1N}\| < s_1.$$

Следовательно,

$$\Delta < \varepsilon$$

и стремится к нулю при  $N \rightarrow \infty$ . Таким образом, приближенное решение  $y^N$  при  $N \rightarrow \infty$  стремится к точному решению уравнения (2.1).

### 3. Численное решение уравнения Шредингера с потенциалом Риды, содержащим нелокальный член

Для описания как связанных, так и несвязанных состояний мало-нуклонных систем в последнее время широко используется феноменологический потенциал Риды<sup>/4/</sup>, полученный в результате процедуры подгонки на многочисленных экспериментах по нуклон-нуклонному рассеянию. С целью улучшения описания экспериментальных данных при больших энергиях по нуклон-нуклонному рассеянию потенциал Риды видоизменяют, вводя нелокальный член на малых расстояниях<sup>/5/</sup>.

Для канала рассеяния  $S^1$  потенциал Риды имеет вид

$$V(r) = \frac{c}{2} (-10,463 e^{-r} - 1650,6 e^{-4r} + 6484,2 e^{-7r}). \quad (3.1)$$

Здесь  $C = -938,93/(197,329)^2$ . Нелокальный член представляет собой вырожденный оператор, состоящий из двух слагаемых:

$$\sum_{k=1}^2 (c_k, y) \Psi_k(r) = \Psi_1(r) \int_0^{\infty} c_1(r') y(r') dz' + \Psi_2(r) \int_0^{\infty} c_2(r') y(r') dz'.$$

В настоящей работе функции  $c_1, c_2$  и  $\Psi_1, \Psi_2$  выбраны следующим образом<sup>/5/</sup>:

$$\begin{aligned} c_1(r) &= F(r) + [V_c(r) + V(r)]G(r), \\ c_2(r) &= G(r), \quad G(r) = P(A, B) r(1-Br)e^{-Ar}, \\ P(A, B) &= 2A^{3/2} / \sqrt{1 - \frac{3B}{A}(1 - B/A)}, \\ F(r) &= e^{-Ar} [-2(A+B) + A(A+4B)R - A^2 B r^2], \\ \Psi_1(r) &= -2G(r), \quad V_c(r) = c c_1/r, \quad c_1 = 0,7 \cdot 197,329/137,036, \\ \Psi_2(r) &= -2c_2(r) + 4G(r) \int_0^r c_1(r') G(r') dz'. \end{aligned}$$

Параметры  $A$  и  $B$  равны:

$$A = 3, \quad B = 0,1.$$

При расчетах использовалась равномерная сетка узлов на отрезке  $0 \leq r \leq R$ , где  $R = 10$ . Задача аппроксимировалась конечно-разностной граничной задачей с использованием трехточечной симметричной разностной схемы точности порядка  $O(h^2)$  и обобщенной квадратурной формулы трапеций того же порядка точности.

Результаты вычислений с приведенным выше нелокальным потенциалом Риды при различных  $K^2$  (в единицах  $1/\text{fm}^2$ ) и при различных шагах конечно-разностной сетки приведены в таблицах 1 и 2. Из таблицы 1 видно, что для потенциала Риды ошибка вычисления фазы  $\delta(K)$  при фиксированном значении  $R$  квадратично зависит от  $h$ , что позволяет для уточнения значений фазы использовать экстраполяцию по Ричардсону<sup>/6/</sup>. Однако при учете нелокального члена при тех же значениях  $R$  и  $h$  эта зависимость нарушается при малых  $K$ . Для достижения стабилизации результатов необходимо брать более далекие значения  $R$ . При больших значениях  $K$  зависимость ошибки от  $h$  сохраняется.

Таблица 1

Значения фазы рассеяния для потенциала Рида при различных  $K^2$  и  $h$  - шагах сетки

$K^2$	$\delta(K)$					
	$h=0,1$	$h=0,05$	$h=0,025$	$\Delta_1$	$\Delta_2$	$\Delta_1/\Delta_2$
0,1	0,6994	0,6787	0,6737	207	50	4,1
0,5	0,9922	0,9758	0,9718	164	40	4,1
1,0	1,054	1,041	1,038	13	3	4,3
1,5	1,068	1,056	1,054	12	2	6,0
2,0	1,067	1,057	1,054	10	3	3,3
2,5	1,061	1,051	1,049	10	2	5,0
3,0	1,052	1,043	1,041	9	2	4,5
3,5	1,041	1,033	1,031	8	2	4,0
4,0	1,031	1,023	1,021	8	2	4,0

Таблица 2

Значения фазы рассеяния для потенциала Рида с нелокальным членом при различных  $K^2$  и  $h$

$K^2$	$\delta(K)$					
	$h=0,1$	$h=0,05$	$h=0,025$	$\Delta_1$	$\Delta_2$	$\Delta_1/\Delta_2$
0,1	0,3439	0,7804	1,030	436	250	1,7
0,5	0,6234	1,052	1,205	429	153	2,8
1,0	0,7343	1,100	1,215	366	115	3,2
1,5	0,7829	1,107	1,203	324	96	3,4
2,0	0,8075	1,102	1,186	295	84	3,5
2,5	0,8202	1,092	1,169	272	77	3,5
3,0	0,8261	1,081	1,152	255	71	3,6
3,5	0,8279	1,069	1,135	241	66	3,7
4,0	0,8271	1,056	1,119	229	63	3,6

## Литература

1. Ponomarev L.I. et al. *Ann. Phys.*, 1978, v. 110, p. 274; Bang J. et al. *Nucl. Phys.*, 1976, A 261, p. 59.
2. Гизаткулов М.Х., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. ОИЯИ, РИИ-10029, Дубна, 1976.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. "Наука", М., 1977.
4. Браун Дж.Е., Джексон А.Д. Нуклон-нуклонные взаимодействия. Атомиздат, М., 1979.
5. Sanev P.U. *Phys. Rev. Lett.*, v. 32, N° 11, p. 626.
6. Марчук Г.И., Шайдуров В.В. Повышение точности решений разностных схем. "Наука", М., 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел  
9 июня 1981 года.