ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-82-310

БААТАР
Данзангийн

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ЗАДАЧ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ В ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1982

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:
доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник И.В.ПУЗЫНИН
кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник Р.М.ЯМАЛЕЕВ

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
профессор В.А.МОРОЗОВ
кандидат физико-математических наук
доцент С.Ю.СЛАВЯНОВ

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Институт физики высоких энергий, г. Серпухов.

Защита диссертации состоится "___"__________1982 года в "___" часов на заседании Специализированного совета Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г. Дубна Московской области.

Автореферат разослан "___"__________1982 года.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Специализированного совета
кандидат физико-математических наук
З.М.ИВАНЧЕНКО

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. К численному решению многопараметрических задач на собственные значения приводят исследования физических систем в рамках ряда математических моделей, описываемых функциональными и, в общем случае, нелинейными уравнениями.

В теоретической физике важным классом многопараметрических задач являются спектральные задачи для обыкновенных дифференциальных операторов второго порядка и интегродифференциальных операторов в пространстве действительных функций, определенных на всей числовой оси или полуоси. Своим появлением они обязаны исследованиям состояний различных квантовомеханических или иных систем, описываемых уравнением Шредингера или другими, подобными ему уравнениями. Аналитическое исследование спектров таких операторов зачастую представляет большую сложность. Поэтому разработка эффективных методов численного анализа даже локализованных частей многопараметрических спектров указанных сингулярных задач на собственные значения является актуальной для современных физических исследований задачей вычислительной математики.

Работы, положенные в основу диссертации, выполнены в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ ОИЯИ.

Цели и задачи исследований. Объектом исследований в данной диссертации являются следующие три типа сингулярных задач на собственные значения, объединенные понятием "многопараметрические".

I. Задача для системы N дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dr_i^2}+Q_i(\lambda_1,\dots,\lambda_N,r_i)\right]u_i(r_i)=0\,; \qquad i=\overline{1,N}, \tag{I}$$

связанных N вещественными параметрами $\lambda_1,\dots,\lambda_N$. По крайней мере для некоторых i область изменения независимой переменной r_i является числовой осью $(-\infty<r_i<\infty)$ или полуосью $(0<r_i<\infty)$.

Требуется найти такие значения параметров $\lambda_1,\dots,\lambda_N$, которым соответствуют нетривиальные ограниченные решения $u_1(r_1),\dots, u_N(r_N)$ системы.

П. Задача для системы N дифференциальных уравнений с выделенным линейно спектральным параметром λ

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+Q_i(\nu_1,\dots,\nu_K,r)-\lambda\right]u_i(r)+\sum_{j=1}^{N}P_{ij}(\nu_1,\dots,\nu_K,r)\,u_j(r)=0, \tag{2}$$

коэффициенты Q_l, P_{ij} которой зависят от K действительных параметров $\nu_1, \dots, \nu_K$. Областью изменения независимой переменной r является числовая ось $(-\infty < r < \infty)$ или полуось $(0 < r < \infty)$.

При заданных значениях параметров $\bar{\nu}^0 = (\nu_1^0, \dots, \nu_K^0)$ необходимо найти значения λ, которым соответствуют нетривиальные ограниченные решения системы, и исследовать зависимость собственных значений и решений от параметров $\nu_1, \dots, \nu_K$ в некоторой окрестности $\bar{\nu}^0$.

Ш. Задача для интегродифференциального уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + V(r) - \lambda\right]u(r) + \int_0^\infty K(r,r')\,u(r')\,dr' = 0;\quad 0<r<\infty, \tag{3}$$

в котором ядро интегрального оператора представимо в виде

$$K(r',r) = \sum_{i=1}^{N} \Psi_i(r)\,\Phi_i(r'), \tag{4}$$

а $\Psi_i(r)$ и $\Phi_i(r')$ – известные функции.

Необходимо найти значения λ, для которых уравнение имеет нетривиальные ограниченные решения.

Задачу можно включить в класс "многопараметрических" путем введения неизвестных параметров

$$C_i = \int_0^\infty \Phi_i(r)\,u(r)\,dr, \qquad i = \overline{1,N}. \tag{5}$$

Предполагается, что задачи (I)-(Ш) имеют решения. Искомые спектральные параметры могут одновременно принадлежать дискретным и непрерывным спектрам различных операторов в исследуемых системах уравнений. Выделение требуемых решений осуществляется на основе априорной информации о структурах спектров изучаемых операторов, существовании локализации и свойствах этих решений. Указанная информация может быть получена как путем детального анализа свойств изучаемого физического процесса, так и с помощью рассмотрения упрощенных уравнений, поддающихся аналитическим или качественным исследованиям.

Цель настоящей диссертации заключается в разработке на единой основе эффективных вычислительных схем решения сформулированных спектральных задач (I)-(Ш), учитывающих их специфику. В качестве такой основы выбран непрерывный аналог метода Ньютона (НАМН)/I/.

При разработке конкретных вычислительных схем в рамках указанного единого подхода в диссертации были решены следующие задачи.

I. Аппроксимация условий регулярности собственных функций сингулярных операторов и их ограниченности при $|r_i| \to \infty$ однородными граничными условиями

$$\left[f_{ij}(\bar{\lambda}_g, r_i)\frac{d}{dr_i} + g_{ij}(\bar{\lambda}_g, r_i)\right]u_i(r_i)\Big|_{r_i = r_{ij}} = 0, \qquad j = 1,2, \tag{6}$$

на конечных интервалах $r_{i1} \le r_i \le r_{i2}$. Здесь $\bar{\lambda}_g$ – вектор параметров, в компоненты которого входят и неизвестные спектральные параметры.

Условия (6) позволяют единообразно аппроксимировать граничные условия для собственных функций дискретного и непрерывного спектров/2/. Сформулирована краевая задача, аппроксимирующая задачу непрерывного спектра для уравнения (3) и дающая возможность построить устойчивый алгоритм вычисления волновых функций.

2. Единообразная постановка регулярных краевых задач на собственные значения, приближающих исходные многопараметрические задачи (I-Ш), в виде нелинейного уравнения

$$\varphi(z) = 0 \tag{7}$$

относительно элемента $z = \{\bar{\lambda}, \bar{u}\}$, где $\bar{\lambda}$ – вектор искомых параметров, а $\bar{u}$ – вектор собственных функций. Для построения функции φ используются исследуемые уравнения, однородные граничные условия (6) и дополнительные условия нормировки собственных функций. Таким образом, оператор φ имеет многокомпонентную структуру.

3. Построение ньютоновских итераций и их модификаций на основе эволюционного уравнения непрерывного аналога метода Ньютона/I/

$$\varphi'(z(t))\frac{d}{dt}z(t) = -\varphi(z(t)), \qquad 0 \le t < \infty, \tag{8}$$

$$z(0) = z_0 \tag{9}$$

и метода Эйлера для приближенного решения задачи (7)-(8) на сетке $\omega_{\tau_k} = \{t_{k+1} = t_k + \tau_k;\ k = \overline{0,L};\ t_0 = 0,\ t_L = T\}$/3/,

$$\varphi'(z_k)\,v_k = -\varphi(z_k), \tag{10}$$

$$z_{k+1} = z_k + \tau_k v_k. \tag{11}$$

Область сходимости ньютоновских итераций можно расширить путем выбора шага τ_k интегрирования/3,4/. Многокомпонентная структура оператора φ позволяет построить модификации итераций (10)-(11), обладающие устойчивостью при решении конкретных задач теоретической физики. При построении начальных приближений (9) в этих задачах эффективно использовалась имеющаяся априорная информация об искомых решениях.

4. Численная реализация разработанных итерационных схем. Дискретная аппроксимация исследуемых задач выполнена с помощью разностного метода. Для сингулярных операторов этот метод устраняет необходимость исследования асимптотики собственных функций в окрестностях сингулярных точек путем построения разностных схем, не использующих значения коэффициентов операторов в сингулярных точках.

Теория разностных схем в задачах на собственные значения разработана А.Н.Тихоновым, А.А.Самарским и их учениками.

5. Анализ точности вычислительных схем и оценка точности полученных с их помощью численных решений ряда задач теоретической физики. Ошибка численного решения складывается из ошибки аппроксимации асимптотических условий краевыми условиями (6), ошибки дискретного представления и погрешности приближенного нахождения сеточных решений с помощью конечного числа ньютоновских итераций. Как правило, первая из этих компонент может быть исследована только численно. Исследование второй компоненты опирается на общую теорию разностной задачи Штурма-Лиувилля[5] и методы уточнения разностных решений[6]. Анализ третьей компоненты основан на общей теории сходимости метода Ньютона[7] и его непрерывного аналога[1].

С помощью разработанных вычислительных схем в диссертации решен ряд многопараметрических задач вида (I)-(Ш), относящихся к различным областям теоретической физики: квантовой механике, теории конденсированных сред, нелинейным полевым моделям и теории ядра. Существенно, что все вычислительные схемы разработаны на основе единого подхода.

НАУЧНАЯ НОВИЗНА И ПРАКТИЧЕСКАЯ ЦЕННОСТЬ

Впервые на основе непрерывного аналога метода Ньютона и метода сеток разработаны и реализованы алгоритмы численного решения сингулярных многопараметрических задач на собственные значения для дифференциальных и интегродифференциальных уравнений, возникающих в различных разделах теоретической физики. Рассмотрены вопросы сходимости полученных схем и точности численных результатов в зависимости от параметров аппроксимации сингулярных краевых задач. В рамках общего подхода разработан новый численный метод решения задачи на собственные значения для интегродифференциальных уравнений с вырожденным ядром интегрального оператора, который сводит решение исходной задачи к решению граничных задач для неоднородных дифференциальных уравнений. В случае непрерывного спектра даны простые краевые условия для волно-

вой функции, позволяющие свести исследуемую задачу к краевой и построить устойчивые алгоритмы ее решения.

В результате выполненных исследований созданы алгоритмы и программы, успешно использованные для решения ряда задач теоретической физики. С их помощью получены физические результаты, представляющие самостоятельный интерес.

Впервые сформулирована и исследована квантовомеханическая задача об эффекте Штарка как двухпараметрическая спектральная задача. Показана эффективность разработанного метода, не зависящего от значений параметров задачи.

Проведено численное исследование уравнения Шредингера с целью оценки точности теории возмущений для потенциала в виде суммы гармонической части и центрального барьера гауссовского типа. Вычислены низшие уровни энергии, которые сравниваются с результатами теории возмущений и приближением самосогласованного фононного поля, что необходимо для оценки области их применимости.

Численно исследован фазовый переход в модели связанных ангармонических осцилляторов. Вычислены энергии одночастичных возбуждений, обусловленных квантовым туннелированием частицы в двухъямном потенциале для двухуровневого приближения.

Установлена поперечная неустойчивость солитонного решения уравнения Шредингера с нелинейностью $\Psi|\Psi|^2$ относительно возмущений специального вида в широкой области изменения параметров задачи.

Решены задача об альфа-частичных состояниях в легких ядрах и задача нуклон-нуклонного рассеяния.

Апробация работы. Работы, положенные в основу диссертации, докладывались на научных семинарах Лаборатории вычислительной техники и автоматизации и Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 9 печатных работах (список прилагается).

Объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и содержит 125 страниц, включая 6 рисунков, 26 таблиц и список цитируемой литературы, насчитывающий 97 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении дано краткое описание постановок рассматриваемых многопараметрических задач (I)-(Ш) на собственные значения и отмечена целесообразность разработки единого метода их численного решения. Содержится также обзор наиболее распространенных методов приближенного решения подобных многопараметрических задач, обсуждение которых подтверждает эту целесообразность. Приведено описание структуры диссертации.

Глава I посвящена разработке вычислительных схем решения системы (I) с граничными условиями (6). Предполагается гладкость коэффициентов, входящих в операторы, и существование изолированного простого решения $z^* = \{\bar\lambda^*, \bar u^*\}$, для которого известно некоторое приближение $z_0 = \{\bar\lambda_0, \bar u_0\}$. Однородную задачу (I), (6) доопределим условиями нормировки собственных функций, например, в виде

$$\int_{a_i}^{b_i} u_i^2(z)\,dz - 1 = 0,$$

что позволяет сформулировать рассматриваемую задачу как нелинейное функциональное уравнение (7). Предполагается, что для рассматриваемого уравнения (7) выполнены условия сходимости решения $z(t)$ задачи (8)-(9) к его решению z^* /3/.

В § I - § 2 рассмотрены ньютоновская итерационная схема решения уравнения (7) и модифицированная схема. Если при $t = t_K$, то есть на шаге с номером K итерационного процесса, известны приближения $\bar\lambda_K = (\lambda_{1K}, \dots, \lambda_{NK})$ к вектору собственных значений и $\bar u_K = \{u_{1K}(z), \dots, u_{NK}(z)\}$ к вектору собственных функций, то для нахождения поправок к этим приближениям необходимо:

а) решить граничные задачи

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\bar\lambda_K, z)\right] v_{il,K}(z) = P_{il,K}(z), \quad i = \overline{1,N}, \tag{12}$$

$$\left[f_{ij}(\bar\lambda_K, z)\frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar\lambda_K, z)\right] v_{il,K}(z)\Big|_{z=z_{ij}} = S_{ijl,K}(z)\Big|_{z=z_{ij}} \tag{13}$$

с известными коэффициентами

$$P_{il,K}(z) = -\frac{\partial}{\partial\bar\lambda_l} Q_i(\bar\lambda_K, z)\, u_{iK}(z), \quad i = \overline{1,N},$$

$$S_{ij0,K}(z) = -\left[f_{ij}(\bar\lambda_K, z)\frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar\lambda_K, z)\right] u_{iK}(z),$$

$$S_{ijl,K}(z) = -\frac{\partial}{\partial\bar\lambda_l}\left[f_{ij}(\bar\lambda_K, z)\frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar\lambda_K, z)\right] u_{iK}(z);$$

Задавая значения фазы δ в окрестности резонанса /2/, получаем зависимость $E = E(\delta)$, которая согласно формуле Вигнера /8/ приближается по методу наименьших квадратов к кривой

$$E = \frac{\Gamma}{2}\,\mathrm{ctg}(\delta - \delta_0) + E_0 .$$

При этом параметры E_0, δ_0, Γ будем считать искомыми параметрами резонанса.

Рассмотренный метод решения задачи об эффекте Штарка является более общим по сравнению с другими использующимися в этой задаче вычислительными схемами. Полученные численные результаты хорошо согласуются с известными, однако сходимость предложенной схемы не зависит от параметров задачи.

Глава II посвящена численному анализу трех сингулярных спектральных задач типа (II), две из которых возникли в теории конденсированных сред, и одна - при изучении устойчивости солитонных решений нелинейного уравнения Шредингера.

В § I рассмотрена схема численного анализа этих задач. Задача (П) аппроксимируется граничной задачей на конечном интервале, которая формулируется как

$$\varphi(z) = \begin{pmatrix} [\mathcal{D}(\bar\nu) - \lambda]u \\ (u,u) - 1 \end{pmatrix} = 0, \tag{19}$$

где $\mathcal{D} \in (H \to H)$, $u \in H$, $\lambda \in R$, $z = \{\lambda(\bar\nu), u(\bar\nu)\}$, а H - гильбертово пространство. На основе НАМН и метода Эйлера строится итерационный ньютоновский процесс, численная реализация которого получается путем аппроксимации (19) с помощью метода сеток. В задаче (П) его эффективность повышается благодаря возможности построения хороших начальных условий для ньютоновских итераций. Если при заданных значениях параметров $\bar\nu^0$ решение задачи (П) существует и коэффициенты системы (2) являются достаточно гладкими функциями независимой переменной и параметров, решение этой задачи существует и является гладкой функцией параметров в некоторой окрестности точки $\bar\nu^0$ /7/. Поэтому в локальной окрестности параметров, для которых решения уже вычислены, целесообразно начальные условия итерации находить с помощью некоторой непрерывной экстраполяции найденных решений. Это может значительно сократить число итераций для вычисления решений.

В ряде физических задач возникает необходимость в решении уравнения Шредингера для потенциала с несколькими минимумами. Решение этих задач в рамках теории возмущения (ТВ) затруднено ввиду плохой сходимости ряда ТВ для сильно ангармонического потенциала.

В § 2 проведено численное исследование уравнения Шредингера, которое позволяет оценить точность ТВ при выборе потенциала в виде суммы гармонической части и центрального барьера гауссовского типа. Вычислены низшие уровни энергии, которые сравниваются с результатами ТВ и приближением самосогласованного фононного поля. Из сравнения с результатами численного эксперимента видно, что самосогласованная ТВ дает достаточно точную оценку в случае большой энергии нулевых колебаний, когда нижние уровни E_0, E_1 лежат выше или вблизи центрального барьера. Для глубоких уровней приближение эффективного гармонического потенциала неудовлетворительно – в этом случае следует пользоваться моделью туннелирующей частицы. В § 3 численно исследована модель структурного фазового перехода, которая представляет собой систему связанных ангармонических осцилляторов с одночастичным двухъямным ангармоническим потенциалом. Для описания фазового перехода получена самосогласованная система уравнений для параметра порядка P. В рамках системы была решена задача на собственные значения при различных значениях параметров модельного гамильтониана и внешнего параметра – температуры. Вычислены энергии одночастичных возбуждений, обусловленные квантовым туннелированием частицы в двухъямном потенциале для двухуровневого приближения.

В § 4 численно установлена поперечная неустойчивость солитонного решения нелинейного уравнения Шредингера

$$i\Psi_t + \Psi_{xx} + \varepsilon \Psi_{yy} + \Psi|\Psi|^{\eta} = 0 \qquad (20)$$

относительно возмущений специального вида. Исследовалось линеаризованное по возмущениям уравнение (20). Анализ устойчивости сводился к исследованию зависимости спектрального параметра Γ от компонент вектора $\vec{c}$ сингулярной задачи на собственные значения для системы уравнений

$$\mathcal{D}(\vec c)\vec u(x) \equiv \left[\frac{d^2}{dx^2}\hat I + \hat Q(x,\vec c)\right]\vec u(x) = \Gamma \hat J \vec u(x)$$

с граничными условиями

$$\lim_{|x|\to\infty}\vec u(x)=0 \qquad \left(\lim_{|x|\to\infty}\frac{d}{dx}\vec u(x)=0\right).$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\hat I = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \hat J=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\quad \vec c=(\omega,\varepsilon,\rho,\kappa,\eta)\in R^5,$$

$$\hat Q(x,\vec c)=\begin{pmatrix}(1+\eta)v(x)-\alpha & 0\\ 0 & v(x)-\alpha\end{pmatrix},\quad \alpha=\omega+\varepsilon(\rho^2+\kappa^2),$$

б) решить систему алгебраических уравнений относительно $\mu_{\ell k}$:

$$\sum_{\ell=1}^{N} \mu_{\ell k}\int_{a_i}^{b_i} u_{ik}(r)\, v_{i\ell,k}(r)\,dr = \frac{1}{2}\left(1+\int_{a_i}^{b_i} u_{ik}^2(r)\,dr\right);$$

в) с помощью соотношений

$$\tau_k^{-1}(\bar\lambda_{i,k+1}-\bar\lambda_{i,k})=\mu_{ik}, \qquad \tau_k^{-1}(u_{i,k+1}(r)-u_{i,k}(r))=v_{i,k}(r),$$

где

$$v_{i,k}(r) = -u_{i,k}(r)+\sum_{\ell=1}^{N} \mu_{\ell k}\, v_{i\ell,k}(r),$$

τ_k – задано

найти новые приближения. О сходимости приближений $z_k=\{\bar\lambda_k,\bar u_k\}$ к решению $z^*=\{\bar\lambda^*,\bar u^*\}$ задачи можно судить по убыванию невязки $\|\varphi(z_k)\|$.

Численное решение задач (12)-(13) в близкой окрестности искомого вектора собственных значений $\bar\lambda^*$ может представить определенную сложность, особенно на ЭВМ с малой разрядностью машинного слова, поскольку при $\bar\lambda_k\to\bar\lambda^*$ эти задачи становятся плохо обусловленными. Избежать решения таких задач можно за счет перехода к модифицированной итерационной схеме, рассмотренной в § 2, которая получается при дискретном представлении по параметру t эволюционной задачи

$$\varphi'(\bar z(t))\, z'(t) = -\varphi(z(t)), \qquad z(0)=z_0,$$

где $\bar z(t_k)=\{\bar\lambda^0_{k'},\bar u^0_{k'}\}$ начиная с некоторого $t=t_{k'}$.

В § 3 исследуется сходимость метода сеток в задаче (7). Дискретное представление итерационной схемы (а)-(в) получено с помощью метода сеток. Нелинейное уравнение (7) аппроксимируется дискретным уравнением

$$\varphi_h(z_h)=0 \qquad (h \text{ – шаг сетки}),$$

где дифференциальные уравнения заменяются разностными, а интегралы – квадратурными формулами. В рамках НАМН рассмотрены вопросы существования дискретного решения z_h и сходимости к решению z^* при $h\to 0$. Показано, что порядок сходимости равен порядку аппроксимации исходного оператора φ сеточным φ_h. В § 4 рассмотрены вычислительные схемы точности порядка $O(h^2)$ и $O(h^4)$ относительно шага h равномерной сетки. В § 5 проведены численные исследования сходимости предложенных вычислительных схем и результатов в зависимости от параметров аппроксимации сингулярной краевой задачи для систем уравнений Шредингера с известными решениями. Численные эксперименты выполнены для задач, содержащих применяемые в квантовой механике модельные потенциалы Морзе, Кулона и гармонического осциллятора [8]. Численные исследования подтверждают выводы § 3.

В § 6 рассмотрена задача об эффекте Штарка[8], которая сводится к решению системы уравнений Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{E}{2}+\frac{\beta}{\xi}+\frac{1-m^2}{4\xi^2}-\frac{F}{4}\xi\right]\Phi_{n_1m}(\xi)=0, \tag{I4}$$

$$\left[\frac{d^2}{d\eta^2}+\frac{E}{2}+\frac{1-\beta}{\eta}+\frac{1-m^2}{4\eta^2}+\frac{F}{4}\eta\right]\chi_{n_2m}(\eta)=0, \tag{I5}$$

связанных неизвестными параметрами E и β. Искомые решения должны удовлетворять условиям

$$\Phi_{n_1m}(0)=\chi_{n_2m}(0)=0 \tag{I6}$$

и при $\xi,\eta\to\infty$

$$\Phi_{n_1m}(\xi)\to\frac{\mathcal{A}}{\xi^{1/4}}\exp\left\{-\frac{\sqrt{F}}{3}\xi^{3/2}+\frac{E}{\sqrt{F}}\xi^{1/2}\right\}, \tag{I7}$$

$$\chi_{n_2m}(\eta)\to\frac{\mathcal{B}}{\eta^{1/4}}\sin\left(\frac{\sqrt{F}}{3}\eta^{3/2}+\frac{E}{\sqrt{F}}\eta^{1/2}+\delta\right). \tag{I8}$$

Особенность системы (I4)-(I5) состоит в том, что для уравнения (I4) граничные условия (I6)-(I7) определяют дискретный спектр значений энергий E, тогда как для уравнения (I5) условия (I6), (I8) соответствуют непрерывному спектру. Интерес представляют те значения энергии E, которые находятся в области резонансной зависимости сдвига фазы δ от энергии.

Задача (I4)-(I8) формулируется как двухпараметрическая спектральная задача. При заданных значениях магнитного квантового числа m, напряженности электрического поля F и фазы δ [2] энергия E и константа разделения β рассматриваются как спектральные параметры, которые должны обеспечить асимптотическое поведение решений (I7)-(I8). Сингулярная задача (I4)-(I8) аппроксимируется регулярной задачей с краевыми условиями (6). Решение сформулированной двухпараметрической задачи на собственные значения дает возможность при заданной фазе δ приближенно определить решения $\Phi_{n_1m}(\xi)$, $\chi_{n_2m}(\eta)$ и собственные параметры E и β. При этом собственные параметры E и β являются функциями δ, т.е. вместо зависимости $\delta=\delta(E)$ определяется обратная функция $E=E(\delta)$. Асимптотика решений дискретного спектра и непрерывного спектра равноправно используются при постановке краевых условий. В случае резонансной зависимости δ от E более устойчивой является процедура определения обратной функции $E=E(\delta)$[2].

$$v(x)=\frac{1}{2}(\eta+2)(\omega+\varepsilon p^2)\operatorname{sech}^2(\sqrt{\omega+\varepsilon p^2}\,x),$$

$$\vec{u}(x)=[M(x),N(x)]^T.$$

Численный анализ выполнен на основе разработанных ньютоновских итерационных схем и алгоритмов поиска начальных приближений для итераций.

<u>В главе Ш</u> рассматривается интегродифференциальное уравнение

$$(\hat{\mathcal{L}}+\hat{K})u(r)=0, \quad r\in(0,\ell), \tag{21}$$

где $\hat{\mathcal{L}}$ – дифференциальный оператор вида

$$\hat{\mathcal{L}}\equiv\frac{d^2}{dr^2}+V(r)-\lambda, \tag{22}$$

$\hat{K}$ – интегральный оператор:

$$\hat{K}\equiv\int_0^\ell K(r,\xi)(\cdot)\,d\xi, \tag{23}$$

который может быть представлен в виде

$$\hat{K}\equiv\hat{T}\equiv\sum_{k=1}^{\infty}(\cdot,b_k(r))\,a_k(r). \tag{24}$$

Здесь $a_k(r),\ b_k(r)\in L_2(0,R)$ являются базисными функциями, $(\cdot,\cdot)$ – соответствующее скалярное произведение.

Для приближенной постановки задачи (Ш) непрерывного и дискретного спектров рассматриваемое уравнение необходимо дополнить граничными условиями и условием нормировки в зависимости от того, в какой области спектра решается задача. Если ставится задача дискретного спектра, то граничные условия задаются в виде (6), а условие нормировки

$$\int_0^\ell u^2(r)\,dr-1=0. \tag{25}$$

В § 2 рассматриваются 3 типа граничных условий для собственных функций непрерывного спектра:

(А). Граничные условия для непрерывного спектра как задачи на собственные значения[2].

(Б). Граничные условия, при которых задача непрерывного спектра рассматривается как граничная задача с нелинейными краевыми условиями[9].

(В). Граничное условие, предложенное в данной работе, имеет вид

$$u(r)\Big|_{r=\ell}=c,$$

где c – произвольная константа, определяющая нормировку решения. Это краевое условие используется в данной главе при решении интегро-дифференциального уравнения в области непрерывного спектра.

Представление задачи непрерывного спектра в виде краевой задачи, в отличие от задачи Коши, традиционно применяемой в области непрерывного спектра, обеспечивает достижение равномерной относительной точности вычислений во всей заданной области определения решения.

В § 3 предлагается метод решения уравнения Шредингера, содержащего вырожденный оператор, в области непрерывного спектра. Суть метода заключается в сведении исходного уравнения вида

$$\hat{\mathcal{L}}u+\sum_{k=1}^{N}(u,b_k)a_k=0$$

к системе неоднородных дифференциальных уравнений

$$\hat{\mathcal{L}}u_0=0,$$

$$\hat{\mathcal{L}}u_n=-a_n \qquad (n=\overline{1,N})$$

с граничными условиями

$$u_0(0)=0, \quad u_0(\ell)=c_0,$$

$$u_n(0)=0, \quad u_n(\ell)=c_n,$$

где

$$u=u_0+\sum_{n=1}^{N}d_n u_n, \qquad c=c_0+\sum_{n=1}^{N}c_n d_n.$$

Для определения d_n необходимо решить систему алгебраических уравнений

$$d_n-\sum_{k=1}^{N}D_{nk}d_k=f_n, \quad n=\overline{1,N},$$

где

$$f_n=(u_0,b_n), \qquad D_{nk}=(u_k,b_n).$$

В § 4 изложен метод решения задачи на собственные значения для интегродифференциальных уравнений

$$u''(r)+V(r)u(r)-\lambda u(r)+\sum_{i=1}^{N}c_i\Psi_i(r)=0,$$

$$c_i-\int_0^{\ell}\Phi_i(r)u(r)dr=0$$

с граничными условиями (6) и условием нормировки (25), которая формулируется как нелинейное уравнение (7) относительно элемента $z=\{\lambda,\vec{c},u\}$, $\vec{c}=(c_1,\dots,c_N)$. Ньютоновская итерационная процедура сводит решение этого уравнения к последовательности итераций, на каждой из которых необходимо решить $N+2$ граничных задачи для линейных неоднородных дифференциальных уравнений второго порядка и систему $N+1$ алгебраических уравнений.

В § 5 рассматриваются условия применимости развитых методов к решению уравнения (21)-(24).

В § 6 разработанные выше методы прилагаются к решению двух задач теории ядра. Используется сеточная аппроксимация уравнений точности $O(h^2)$, h – шаг сетки.

1. Находятся альфа-частичные состояния в легких ядрах, в частности, в ^{20}Ne. В рассматриваемой модели функционал c_i имеет вид

$$c_i=\int_0^{\ell}v_i(r)\left[\frac{d^2}{dr^2}-V(r)\right]u(r)dr.$$

Проведены численные расчеты двух вращательных полос резонансных альфа-кластерных состояний ядра ^{20}Ne. Результаты расчетов приведены в виде таблиц для энергии возбуждения, они находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

2. Проведены расчеты волновых функций и фаз рассеяния в потенциале Рида /10/. Результаты расчетов приведены в виде таблиц для фаз рассеяния. Исследована сходимость результатов по числу h шагов сетки.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ В ДИССЕРТАЦИИ

1. Впервые непрерывный аналог метода Ньютона применен к построению итерационных схем решения сингулярных многопараметрических задач на собственные значения для дифференциальных и интегродифференциальных уравнений, возникающих в различных разделах теоретической физики.

2. Разработаны численные схемы решения граничных задач для систем дифференциальных уравнений, связанных спектральными параметрами. Исследованы вопросы сходимости полученных схем и точности численных результатов в зависимости от параметров аппроксимации сингулярных краевых задач.

3. На основе итерационных ньютоновских схем предложены эффективные алгоритмы и программы для численного анализа параметрической зависимости собственных решений сингулярной задачи Штурма-Лиувилля.

4. Предложен численный метод решения сингулярной граничной задачи на собственные значения для интегродифференциального уравнения,

интегральный оператор в котором можно приблизить к вырожденным. Для непрерывного спектра даны простые краевые условия для волновой функции, позволяющие свести исследуемую задачу к краевой задаче и построить устойчивые алгоритмы.

5. С помощью разработанных в диссертации алгоритмов решен ряд задач теоретической физики. Выполнен анализ точности численных результатов, которые представляют самостоятельный физический интерес. Решение разнообразных задач, возникших в физических исследованиях, с помощью алгоритмов, разработанных на единой математической основе, служит подтверждением практической полезности и эффективности приведенных вычислительных схем.

Результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Баатар Д., Пузынин И.В. О численном решении одной двухпараметрической задачи на собственные значения. ОИЯИ, Р5-80-109, Дубна, 1980.
2. Баатар Д., Пузынин И.В. Задача об эффекте Штарка как двухпараметрическая спектральная задача. ОИЯИ, II-81-385, Дубна, 1981.
3. Баатар Д., Пузынина Т.П., Пузынин И.В. Численное решение многопараметрической задачи на собственные значения и повышение точности разностного решения. ОИЯИ, РII-82-37, Дубна, 1982.
4. Аксенов В.Л., Баатар Д., Плакида Н.М., Стаменкович С. Описание структурного фазового перехода в приближении разделения координаты. ОИЯИ, Р17-12961, Дубна, 1979.
5. Баатар Д., Плакида Н.М., Пузынин И.В. Численное исследование уравнения Шредингера для потенциала гауссовского типа с двумя минимумами. ОИЯИ, РII-81-252, Дубна, 1981.
6. Баатар Д., Катышев Ю.В., Махалдиани Н.В., Маханьков В.Г., Пузынин И.В. О неустойчивости солитонных решений уравнения Шредингера с нелинейностью $\Psi|\Psi|^2$. П. Аналитическое и численное исследование линеаризованных уравнений. ОИЯИ, II-81-350, Дубна, 1981.
7. Баатар Д., Пузынин И.В., Семенов В.М., Ямалеев Р.М. Численное решение интегродифференциального уравнения на собственные значения. ОИЯИ, РII-11801, Дубна, 1978.
8. Баатар Д., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. Численное решение дифференциальных уравнений, содержащих вполне непрерывный оператор. ОИЯИ, РII-12775, Дубна, 1979.
9. Баатар Д., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. Методы численного решения уравнения Шредингера, содержащего вполне непрерывный оператор. ОИЯИ, II-81-386, Дубна, 1981.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гавурин М.К. Изв. вузов, матем., 1958, 5(6), с. 18.
2. Ponomarev L.I. et al. Annals of Phys., 1978, 110, 2, p.274.
3. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, с. 127.
4. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. ЖВМиМФ, 1981, 21, с. 491.
5. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. "Наука", М., 1971.
6. Марчук Г.И., Шайдуров В.В. Повышение точности решений разностных схем. "Наука", М., 1979.
7. Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ. "Наука", М., 1977.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Наука", М., 1974.
9. Гизаткулов М.Х. и др. ОИЯИ, РII-10029, Дубна, 1976.
10. Браун Дж. Е., Джексон А.Д. Нуклон-нуклонные взаимодействия. Атомиздат, М., 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 апреля 1982 года.