

5395

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

5 - 5395

Экз. чит. зала

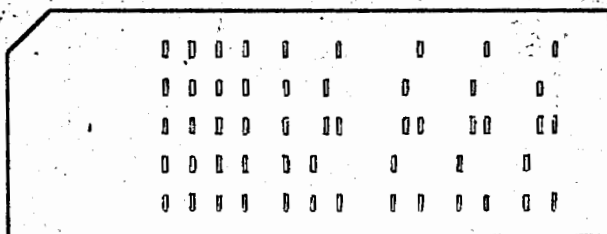


ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ  
И АВТОМАТИЗАЦИИ

А.М. Газетова, Е.П. Жидков,  
Г.И. Макаренко, А.В. Ракитский

ПРОГРАММА РАСЧЕТА ПРЕДЕЛЬНОЙ ФАЗЫ  
ПО ЗАДАННОЙ МОДЕЛИ ПОТЕНЦИАЛА

1970



5 - 5395

А.М. Газетова, Е.П. Жидков,  
Г.И. Макаренко, А.В. Ракитский

ПРОГРАММА РАСЧЕТА ПРЕДЕЛЬНОЙ ФАЗЫ  
ПО ЗАДАННОЙ МОДЕЛИ ПОТЕНЦИАЛА

Настоящая программа составлена для решения так называемой прямой задачи теории рассеяния, т.е. для нахождения предельной фазы  $\delta(\kappa)$  по заданной модели потенциала  $V(x)$ .

Как известно [1], [2], [3], уравнение Шрёдингера

$$u''(x) + [\kappa^2 - V(x)]u(x) = 0 \quad (1)$$

с начальными условиями

$$u(0) = 0, \quad u'(0) = 1 \quad (2)$$

можно преобразовать в нелинейное уравнение первого порядка

$$\frac{dy(x, \kappa)}{dx} = - \frac{V(x)}{\kappa} \sin^2(\kappa x + y) \quad (3)$$

с начальным условием

$$y(0, \kappa) = 0. \quad (4)$$

Тогда предельная фаза  $\delta(\kappa)$  находится так:

$$\delta(\kappa) = \lim_{x \rightarrow \infty} y(x, \kappa). \quad (5)$$

Программа составлена на языке FORTRAN-63 и оформлена как подпрограмма VORF.

По заданному потенциалу

$$V(x_j), \quad j = 1, 2, \dots, n$$

эта подпрограмма вычисляет соответствующую ему расчетную предельную фазу

$$\delta_p(\kappa_i), \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Кроме того, если в точках  $\kappa_i$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) известны значения  $\delta_3(\kappa)$  экспериментальной фазы и  $\Delta \delta_3(\kappa_i)$  — абсолютные ошибки этих значений в точках  $\kappa_i$ , то программа вычисляет величины

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m [\delta_p(\kappa_i) - \delta_g(\kappa_i)]^2}{m}} \quad (6)$$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m \left[ \frac{\delta_p(\kappa_i) - \delta_g(\kappa_i)}{\Delta \delta_g(\kappa_i)} \right]^2 \quad (7)$$

Величины  $\sigma_p$  и  $\chi^2$  характеризуют близость расчетной предельной фазы  $\delta_p(\kappa_i)$  к заданной экспериментальной фазе  $\delta_g(\kappa_i)$ .

Например, если  $\sigma_p \leq \sigma_0$ , где

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m [\Delta \delta_g(\kappa_i)]^2}{m}}$$

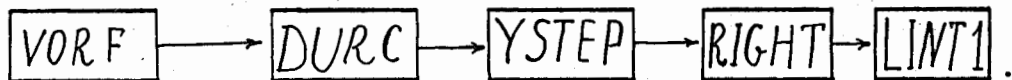
то близость  $\delta_p$  к  $\delta_g$  можно считать хорошей, и, следовательно, рассматриваемая модель потенциала  $V(x_j)$  вполне удовлетворительно соответствует экспериментальной фазе  $\delta_g(\kappa_i)$ . Отметим, что при решении уравнения (3) для значений аргумента  $x \in (0, x_1)$  мы брали

$$V(x) = \frac{x_1 \cdot V(x_1)}{x}$$

а в промежутках  $(x_s, x_{s+1})$  значения  $V(x)$  определялись с помощью линейной интерполяции. В предельном переходе (5) предполагается, что

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x, \kappa) \approx y(x_n, \kappa).$$

Подпрограмма *VORF* работает в комплексе с другими подпрограммами. Блок-схема этого комплекса имеет следующий вид:



*LINT1* осуществляет линейную интерполяцию потенциала  $V(x)$  при решении уравнения (3).

*RIGHT* вычисляет правую часть уравнения (3) при фиксированных значениях  $x$ ,  $y$  и  $\kappa$ .

*DURC* и *YSTEP* решают дифференциальное уравнение (3) методом Рунге-Кутты [4].

Программа, вызывающая подпрограмму *VORF*, должна иметь одинаковый с подпрограммой *RIGHT* оператор *COMMON*.

Если, например, потенциал задан в 25 точках, то этот оператор имеет вид

COMMON /C2/ SI(25), VI(25), N.

2°. Обращение к подпрограмме и описание параметров.

CALL VORF(XI, DI, DH, M, DR, VOF, HIQ, R, SN, YN, SK, HMIN, HI, HMAX, EPSD, EPSD1)

- HI - массив точек  $K_i$ , в которых вычисляется  $\delta_p(K_i)$ ; в этих же точках задается и  $\delta_s(K_i)$ .
- DI - массив значений экспериментальной фазы  $\delta_s(K_i)$ .
- DH - массив абсолютных ошибок  $\Delta \delta_s(K_i)$ .
- M - число точек  $K_i$ .
- DR - массив значений расчетной предельной фазы  $\delta_p(K_i)$
- VOF - величина  $\sigma_p$ .
- HIQ - величина  $\chi^2$ .
- R - указатель режима решения уравнения (3):  
при  $R < 0$  счет ведется с постоянным шагом,  
при  $R = 0$  счет ведется с переменным шагом по абсолютной точности,  
при  $R > 0$  счет ведется с переменным шагом по относительной точности.
- SN - начало интервала интегрирования уравнения (3).
- YN - заданное значение искомой функции в точке SN.
- SK - конец интервала интегрирования уравнения (3).
- HMIN - наименьшее допустимое значение шага интегрирования при  $R > 0$ .
- HI - начальный шаг интегрирования.
- HMAX - наибольшее допустимое значение шага интегрирования при  $R > 0$ .
- EPSD - точность вычисления искомой функции на каждом шаге интегрирования при  $R \geq 0$ .
- EPSD1 - точность, при достижении которой шаг удваивается.

```

SUBROUTINE VORF(XI,DI,DH,H,DR,VOF,HIQ,R,SN,YN,SK,HMIN,HI,HMAX,
*EPSD,EPD1)
DIMENSION XI(M),DI(M),DR(M),FOL(4),DH(M)
COMMON /C1/X
EXTERNAL RIGHT
I1=M $ S1=R $ S2=SN $ S3=YN $ S4=SK $ S5=HMIN $ S6=HI $ S7=HMAX
S8=EPSD $ S9=EPD1 $ SUM=0. $ HIQ=0. $ SM=I1
DO 5 I=1,I1 $ X=XI(I)
CALL DURC (S1,S2,S3,S4,YK,S5,S6,S7,S8,S9,FOL,RIGHT)
DR(I)=YK $ SUM=SUM+(YK-DI(I))*2 $ HIQ=HIQ+((YK-DI(I))/DH(I))*2
5 CONTINUE $ VOF=SQRTF(SUM/SM) $ RETURN
END

```

```

SUBROUTINE DURC (R,XI,YI,XF,YF,HMIN,HI,HMAX,EPS,EPD1,FOLLY,RIGHT)
DIMENSION FOLLY(4) $ FOLLY(1)=XI $ FOLLY(2)=0. $ FOLLY(4)=R
FOLLY(3)=0. $ X=XI $ Y=YI $ H=HI $ IF(R)1,11,12
1 IF(XF-X-H)2,2,3
2 H=XF-X $ Y=YSTEP(H,X,Y,RIGHT) $ GO TO 201
3 Y=YSTEP(H,X,Y,RIGHT) $ X=X+H $ GO TO 1
11 ASSIGN 13 TO MR $ GO TO 101
12 ASSIGN 14 TO MR
101 ASSIGN 122 TO MF
102 IF(HMAX-H)103,104,104
103 H=HMAX
104 IF(XF-X-H)105,105,106
105 H=XF-X $ ASSIGN 201 TO MH $ GO TO 107
106 ASSIGN 102 TO MH
107 YB=YSTEP(H,X,Y,RIGHT)
108 Y1=YB $ YB=YSTEP(H/2,X,Y,RIGHT) $ Y2=YSTEP(H/2,X+H/2,YB,RIGHT)
GO TO MR,(13,14)
13 TEPS=ABSF(Y1-Y2) $ GO TO 114
14 IF(ABSF(Y1)-ABSF(Y2))109,109,110
109 YM=ABSF(Y2) $ GO TO 111
110 YM=ABSF(Y1)
111 IF(YM-1.E-16)112,112,113
112 TEPS=0. $ GO TO 114
113 TEPS=ABSF(Y1-Y2)/YM
114 IF(TEPS-EPS)115,115,118
115 X=X+H $ Y=Y2 $ IF(TEPS=EPS1)116,116,117
116 H=H+H
117 GO TO 125
118 IF(H-HMIN)119,119,120
119 X=X+H $ Y=Y2 $ H=HMIN+HMIN $ GO TO 121
120 ASSIGN 102 TO MH $ H=H/2 $ GO TO 108
121 GO TO MF,(122,123)
122 FOLLY(1)=X $ ASSIGN 123 TO MF
123 FOLLY(2)=X $ IF(TEPS=FOLLY(3))125,125,124
124 FOLLY(3)=TEPS
125 GO TO MH,(102,201)
201 YF=Y $ RETURN
END

```

```

FUNCTION YSTEP(H,X,Y,RIGHT)
A=RIGHT(X,Y) $ B=RIGHT(X+H/2.,Y+A*H/2.) $ C=RIGHT(X+H/2.,Y+B*H/2.)
D=RIGHT(X+H,Y+C*H) $ YSTEP=Y+H*(A+2.*B+2.*C+D)/6. $ RETURN
END

```

```

FUNCTION RIGHT (S,Y)
DIMENSION F(1)
COMMON /C1/ X /C2/ SI(25),VI(25),N
IF(S) 5,5,10
5 RIGHT=0. $ RETURN
10 IF(S-SI(1)) 15,20,20
15 RIGHT=- (SINF(X*S+Y))**2/S/X*VI(1)*SI(1) $ RETURN
20 CALL LINT1 (S,SI,N,VI,1,F)
RIGHT=- (SINF(X*S+Y))**2/X*F(1) $ RETURN
END

```

```

SUBROUTINE LINT1 (X,XT,N,FK,K,F)
DIMENSION XT(N),FK(2),F(K)
T=X $ N1=1 $ N2=N $ IF(XT(N2)-XT(N1))5,5,7
5 ASSIGN 11 TO MET3 $ GO TO 3
7 ASSIGN 13 TO MET3
3 IT=N1
4 IF (N2-N1-1)10,10,6
6 I=(N1+N2)/2 $ GO TO MET3,(11,13)
11 IF(XT(I)-T)8,8,9
13 IF(T-XT(I))8,8,9
8 N2=I $ GO TO 4
9 N1=I $ GO TO 3
10 T1=XT(IT) $ T2=XT(IT+1) $ DO 18 KT=1,K $ IND=IT+(KT-1)*N
FT1=FK(IND) $ FT2=FK(IND+1) $ FT=FT1+(FT2-FT1)*(T-T1)/(T2-T1)
F(KT)=FT
18 CONTINUE $ RETURN
END

```

### ЛИТЕРАТУРА

1. Г.Ф.Друкарев. ЖЭТФ, 19, 3, 1949, 247-250.
2. В.В.Бабилов. "Метод фазовых функций в квантовой механике".  
"Наука", Москва, 1968.
3. Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек.  
Препринт ОИЯИ Р5-3895, Дубна, 1968.
4. Г.И.Макаренко, А.В.Ракитский.  
Депонированное сообщение ОИЯИ Б1-11-4389, Дубна, 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел  
16 октября 1970 года.