

5351 / 2-78

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



11/411-78

C17g
Б-12

P11 - 11801

Д.Баатар, И.В.Пузынин, В.М.Семенов, Р.М.Ямалеев

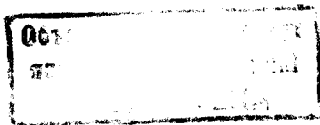
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ
ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ
НА СОБСТВЕННОЕ ЗНАЧЕНИЕ

1978

P11 - 11801

Д.Баатар, И.В.Пузынин, В.М.Семенов, Р.М.Ямалеев

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ
ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ
НА СОБСТВЕННОЕ ЗНАЧЕНИЕ



Баатар Д. и др.

P11 - 11801

Численное решение интегродифференциального уравнения на собственное значение

Предлагается численный метод решения нелинейных интегродифференциальных уравнений на собственное значение на основе непрерывного аналога метода Ньютона. С помощью параметризации интегральный член выделяется в качестве дополнительного условия, что позволяет исходное интегродифференциальное уравнение свести к неоднородному дифференциальному уравнению.

В качестве примера применения метода к решению физических задач вычисляются волновые функции и энергии возбуждения альфа-частичных состояний в легких ядрах. Получено хорошее согласие теоретических значений энергии возбуждения с экспериментальными.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1978

Baatar D. et al.

P11 - 11801

Numerical Solution of Integrodifferential Equation of Eigenvalue Problem

A numerical method is presented for the solution of nonlinear integrodifferential equations of eigenvalue problem using a continuous analogue of the Newton method. With the help of parametrization an integral part is separated as an additional condition. This allows to reduce a primary integrodifferential equation to a nonhomogeneous differential equation. As an example of application of the method to solution of physical problems, the wave functions and excitation energies of alpha cluster states in light nuclei are calculated. A good agreement of theoretically calculated excitation energy values with experimental ones has been obtained.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД ЕЕ РЕШЕНИЯ

В работе^{/1/} был предложен метод численного решения интегродифференциальных уравнений на собственное значение на основе непрерывного аналога метода Ньютона.

Математическая постановка рассматриваемой задачи формулируется следующим образом. Для интегродифференциального уравнения

$$\Phi^{(1)}(\lambda, y(r)) \equiv \frac{d^2}{dr^2} y(r) + V(r) y(r) - \lambda y(r) + \int_0^{\ell} K(r, \xi) y(\xi) d\xi = 0 \quad /1.1/$$

с граничными условиями

$$\Phi^{(2)}(\lambda, y(r)) \equiv a^0(\lambda) y'(r) + b^0(\lambda) y(r) \Big|_{r=0} = 0,$$

$$\Phi^{(3)}(\lambda, y(r)) \equiv a(\lambda) y'(r) + b(\lambda) y(r) \Big|_{r=\ell} = 0 \quad /1.2/$$

и дополнительным условием нормировки

$$\Phi^{(4)}(\lambda, y(r)) \equiv \int_0^{\ell} y^2(r) dr - 1 = 0 \quad /1.3/$$

требуется вычислить собственное значение λ и соответствующее собственное решение $y(r)$. Предполагается, что решение задачи /1.1/-/1.3/ существует.

В работе /1/ показано, что непрерывный аналог метода Ньютона сводит исходную задачу на собственное значение к решению краевой задачи для линейного интегродифференциального уравнения на каждом шаге итерационной процедуры. При численной реализации такой процедуры на основе метода конечных разностей решение на каждом шаге итерации краевой задачи для интегродифференциального уравнения связано с обращением матриц высокого порядка. С целью устранения указанной трудности в работе /1/ предложена и реализована модификация процесса путем замены исходной системы на "возмущенную" систему. При этом неизвестные на данном шаге итерации функции в интегральном члене заменяются на известные с предыдущего шага. Подобная модификация ухудшает сходимость итерационной процедуры, что является существенным недостатком предложенного метода.

В настоящей работе задача облегчается конкретным выбором вида функции:

$$K(r, r') = \sum_{i=1}^N \Psi_i(r) \phi_i(r'). \quad /1.4/$$

С учетом /1.4/ уравнение /1.1/ можно переписать в следующем виде:

$$\Phi^{(1)}(\lambda, y(r)) \equiv \frac{d^2}{dr^2} y(r) + V(r)y(r) + \lambda y(r) + \sum_{i=1}^N c_i \Psi_i(r) = 0, \quad /1.5/$$

$$\Phi^{(5)}(\lambda, y(r)) \equiv c_1 - \int_0^{\ell} \phi_1(r') y(r') dr' = 0. \quad /1.6/$$

Соотношения /1.5/, /1.6/ совместно с условиями /1.2/-/1.3/ представляют нелинейное функциональное уравнение

$$\Phi(z) = 0,$$

$$z = (\lambda, y(r)) \in R \times L_2[0, \ell] = H,$$

$$\Phi(z) \equiv \{\Phi^i\}, \quad i=1, 2, 3, 4, 5. \quad \Phi: H \rightarrow H \times R. \quad /1.7/$$

Предполагается, что λ^* - изолированное простое собственное значение, а собственные функции $y^*(r)$ принадлежат банахову пространству B с нормой

$$\|y(r)\|_B = \sum_{n=0}^2 \max |y^{(n)}(r)| + L_y,$$

где $L_y = \inf \{ \text{константа Липшица } y^{(n)}(r) \}$.

Таким образом, $z^* = (\lambda^*, y^*(r)) \in R \times B = Z$, причем $B=Y$. При таких предположениях в работе /1/ доказана локальная сходимость итерационного процесса:

$$\Phi'(\lambda_n, y_n)(\mu_n, \nu_n) = -\Phi(\lambda_n, y_n),$$

$$y_{n+1} = y_n + \nu_n \tau,$$

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + \mu_n \tau \quad /1.8/$$

/ Φ' - производная Фреше оператора Φ / с заданными начальными условиями $\lambda_0, y_0(r)$ в окрестности искомого решения.

С учетом условия /1.6/ итерационная схема /1.8/ обобщается следующим образом:

$$\Phi'(\lambda_n, \vec{c}_n, y_n(r))(\mu_n, \vec{d}_n, \nu_n(r)) = -\Phi(\lambda_n, \vec{c}_n, y_n(r)),$$

$$y_{n+1} = y_n + \nu_n \tau, \quad \lambda_{n+1} = \lambda_n + \mu_n \tau,$$

$$\vec{c}_{n+1} = \vec{c}_n + \vec{d}_n \tau.$$

Итерационные схемы /1.8/ и /1.9/ являются дискретным представлением непрерывного ньютоновского процесса на основе метода Эйлера с постоянным шагом интегрирования τ ($0 < \tau \leq 1$).

Вводя операторы

$$\hat{D} = \frac{d^2}{dr^2} + V(r), \quad \hat{S} = \int_0^{\ell} K(r, r') () dr', \quad \hat{G} = \hat{D} + \hat{S},$$

итерационную схему /1.9/ запишем в виде

$$(\hat{D} - \lambda_n E) v_n + \hat{S} v_n = -(G - \lambda_n E) y_n + \mu_n y_n,$$

$$2(y_n, v_n) = -[(y_n, y_n) - 1], \quad /1.10/$$

$$y_{n+1} = y_n + v_n \tau, \quad \lambda_{n+1} = \lambda_n + \mu_n \tau, \quad \vec{c}_{n+1} = \vec{c}_n + \vec{d} \tau.$$

Представим решение уравнения /1.10/ как сумму

$$v_n = v_{0n} + \mu_n v_{1n} + \sum_{i=1}^N d_{in} w_{in}.$$

Тогда для определения $v_{0n}, v_{1n}, w_{in}, \mu_n, d_{in}$ ($0=1,2,\dots,N$) получим следующую систему дифференциальных и алгебраических уравнений:

$$(\hat{D} - \lambda_n E) v_{0n} = -(G - \lambda_n E) y_n,$$

$$(\hat{D} - \lambda_n E) v_{1n} = y_n,$$

$$(\hat{D} - \lambda_n E) w_{in} = -\Psi_{in} \quad (i=1,2,\dots,N),$$

$$\begin{aligned} \mu_n W(y_n, v_{1n}) + \sum_{i=1}^N d_{in} (y_n, w_{in}) = \\ = -[(y_n, y_n) - 1] - 2(y_n, v_{0n}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{jn} - \mu_n (\phi_{jn}, v_{in}) + \sum_{i=1}^N d_{in} (\phi_i, w_{in}) = \\ = -[C_{jn} - (\phi_{jn}, y_n)] - (\phi_{jn}, v_{01}), \end{aligned}$$

$$y_{n+1} = y_n + v_n \tau,$$

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + \mu_n \tau,$$

$$c_{in+1} = c_{in} + d_{in} \tau \quad (i=1,2,\dots,N). \quad /1.12/$$

Система /1.12/ отличается от первоначальной системы /1.10/, а также от подобной системы, полученной в работе /1/, тем, что в уравнениях на искомые функции отсутствует интегральный член, что существенно облегчает численное решение. Таким образом, приведенная итерационная процедура сводит исходное интегродифференциальное уравнение на собственное значение к решению на каждом шаге итерации обыкновенных дифференциальных уравнений с определенными краевыми условиями.

2. ПРИЛОЖЕНИЕ К ФИЗИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ

В качестве примера физической задачи, приводящей к интегродифференциальному уравнению, рассмотрим недавно обнаруженные альфа-частичные состояния в легких ядрах, например в ^{20}Ne /2/. В первом приближении подобные состояния можно интерпретировать как движение альфа-частицы в потенциальном поле остова с учетом принципа Паули, запрещающего нуклонам альфа-кластера занимать состояния, заселенные нуклонами остова. Это приводит к необходимости выделения из функции относительного движения альфа-частицы нефизических решений, при этом правильная функция относительного движения должна быть ортогональна запрещенным функциям /3/.

В данной физической задаче уравнение для радиальной части волновой функции относительного движения имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + (\lambda - V(r)) \right] y(r) = \sum_{i=1}^N c_i U_i(r), \quad /2.1/$$

где $U_i(r)$ - так называемые запрещенные функции, которые можно взять по осцилляторной модели оболочек в виде волновых функций гармонического осциллятора; N - число запрещенных состояний.

Функционал c_i имеет вид /2/ :

$$c_i = \int_0^{\ell} U_i(r) \left[\frac{d^2}{dr^2} - V(r) \right] y(r) dr . \quad /2.2/$$

По описанному выше алгоритму проводились численные расчеты двух вращательных полос резонансных альфа-кластерных состояний ядра ^{20}Ne . Применялся потенциал типа Вудса-Саксона со следующими параметрами: глубина $V_0 = -110 \text{ МэВ}$, радиус $r_0 = 1,26 \text{ Фм} / R_{\text{Ne}} = r_0 16^{1/3}$ / и диффузность $a = 0,7 \text{ Фм}$.

Для полосы отрицательной четности, построенной на состоянии $1^- / E^* = 5,78 \text{ МэВ}$ /, теоретические и экспериментальные значения энергии возбуждения для разных значений орбитальных моментов приведены в *таблице 1*. В *таблице 2* приведены теоретические и экспериментальные значения энергии возбуждения для второй полосы

Таблица 1

ℓ	1	3	5	7
Е* теор. (МэВ)	5,77	7,63	11,04	15,77
Е* эксп. (МэВ)	5,78	7,17	10,26	15,35

Таблица 2

ℓ	0	2	4	6
Е* теор. (МэВ)	7,47	8,59	11,00	14,42
Е* эксп. (МэВ)	8,30	8,80	10,80	12,56

положительной четности, построенной на состоянии $0_2^+ / E^* = 8,3 \text{ МэВ}$ /.

Как видно из таблиц, имеется хорошее согласие теоретических значений энергии возбуждения с экспериментальными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гареев Ф.А. и др. ЖВМ и МФ, 1977, 17, с. 407.
2. Гольдберг В.З., Рудаков В.П., Тимофеев В.А. ЯФ, 1974, т. 19, с. 503.
3. Saito S. Prog. Theor. Phys., 1969, 41, p.705.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 июля 1978 года.