

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Ж 306

P11-88-823

Т.Жанлав, И.В.Пузынин, А.В.Ракитский

СХЕМА СПЛАЙН-КОЛЛОКАЦИИ  
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ  
ОДНОКАНАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

1988

## Введение

Рассмотрим одноканальную задачу рассеяния<sup>/1,2/</sup>:

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - V(z) \right] u_\ell(z) = 0, \quad (1)$$

$$u_\ell \sim z^{\ell+1}, \quad z \rightarrow 0, \quad (2)$$

$$u_\ell \sim \sin \left( Kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right), \quad z \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Здесь потенциал  $V(z)$  — достаточно гладкая функция, стремящаяся к нулю на бесконечности. Кроме того, она может быть слабосингулярной в точке  $z=0$ .

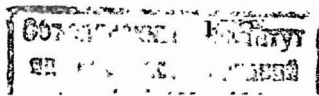
Одной из задач теории рассеяния является вычисление фазовых сдвигов  $\delta_\ell$  при заданном потенциале  $V(z)$ , орбитальном моменте  $\ell$  и энергии  $k^2$ .

Существуют различные подходы к численному решению задачи рассеяния, такие, как метод фазовых функций, метод интегрального уравнения Фредгольма, борновское приближение и др.<sup>/1-7/</sup>. Все эти подходы основаны на переходе от задачи (1)–(3) к другим задачам типа задачи Коши или интегрального уравнения относительно фазы рассеяния. Их широкое применение объясняется тем, что полученные после перехода задачи численно решаются с высокой точностью. Однако обобщение этих подходов на многоканальный случай иногда встречает затруднения<sup>/2/</sup>.

Следует отметить, что, кроме фазы рассеяния, некоторые важные параметры рассеяния приближенно выражаются через логарифмическую производную волновой функции  $u_\ell(z)$  в достаточно удаленной точке  $z=R \gg 1$ .

Из сказанного ясно, что нахождение волновой функции  $u_\ell(z)$  с высокой точностью на достаточно широком интервале изменения  $z$ , в определенном смысле, эквивалентно полному решению прямой задачи рассеяния.

В настоящей работе рассматривается подход к решению задачи рассеяния, основанный на ее постановке как задачи с нелинейными граничными условиями и применении аппроксимации сплайнами. В п.1 приведены формулы для некоторых параметров низкоэнергетического рассеяния. В п.2 предлагается численный метод решения данной задачи на основе



метода сплайн-функций. При этом полученная нелинейная схема решается с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. В п.3 приводятся численные результаты. Вычислены с высокой точностью фазы рассеяния для различных типов потенциала. Дается сравнение с результатами, полученными другими методами.

### I. Задача рассеяния как нелинейная граничная задача<sup>/3/</sup>

Прямое применение стандартного сеточного метода в задаче (I)-(3) невозможно из-за присутствия неизвестной величины  $\delta_\ell$  в краевом условии (3). Однако, благодаря специальному характеру краевого условия (3), осуществляется переход от задачи (I)-(3) к задаче с нелинейным краевым условием. Прежде всего, заметим, что, как следствие однородности уравнения Шредингера, решение задачи (I)-(3) определяется с точностью до постоянного множителя. Поэтому, без ограничения общности, можно считать, что асимптотический коэффициент при краевом условии (3) равен единице. Тогда из условия (3) сразу получаем

$$u_\ell'^2 + k^2 u_\ell^2 = k^2, \quad z \rightarrow \infty. \quad (4)$$

В результате мы имеем краевую задачу:

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - V(z) \right] u_\ell(z) = 0 \quad (5)$$

$$u_\ell = 0, \quad z = 0,$$

$$u_\ell'^2 + k^2 u_\ell^2 - k^2 = 0, \quad z \rightarrow \infty.$$

Предположим, что решение задачи (5) найдено. Рассмотрим теперь вопрос о вычислении фазовых сдвигов.

Из (3) при больших  $z$  получаем

$$\sin \alpha \cdot \cos \delta_\ell + \cos \alpha \cdot \sin \delta_\ell = u_\ell(z),$$

$$k \cos \alpha \cdot \cos \delta_\ell - k \sin \alpha \cdot \sin \delta_\ell = u_\ell'(z), \quad \alpha = kz - \frac{\ell\pi}{2}.$$

Отсюда при  $k \neq 0$  имеем

$$\cos \delta_\ell = \frac{k \sin \alpha \cdot u_\ell(z) + \cos \alpha \cdot u_\ell'(z)}{k},$$

$$\sin \delta_\ell = \frac{k \cos \alpha \cdot u_\ell(z) - \sin \alpha \cdot u_\ell'(z)}{k},$$

и тем самым получаем

$$\operatorname{tg} \delta_\ell = \frac{k \cos \alpha \cdot u_\ell(z) - \sin \alpha \cdot u_\ell'(z)}{k \sin \alpha \cdot u_\ell(z) + \cos \alpha \cdot u_\ell'(z)} \quad (6)$$

Это есть предельное выражение для фазовых сдвигов при  $z \rightarrow \infty$ . Формулу (6) можно использовать в различных целях. Если рассмотреть  $\delta_\ell$  как функцию от  $z$  (при фиксированном  $k$ ), то из соотношения (6) путем дифференцирования получаем уравнение

$$\frac{d}{dz} \delta_\ell(z) = -\frac{1}{k} \left( \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} + V(z) \right) \sin^2 \left( kz - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right), \quad (7)$$

при выводе которого было учтено, что  $u_\ell$  удовлетворяет уравнению (I). Начальное условие  $\delta_\ell(0) = 0$  для уравнения (7) следует из предположения, что при  $z=0$  взаимодействие отсутствует, т.е.  $V \equiv 0$ . Отметим, что при  $\ell=0$  уравнение (7) превращается в известное фазовое уравнение<sup>/2/</sup>

$$\frac{d}{dz} \delta_0(z) = -\frac{V}{k} \sin^2(kz + \delta_0)$$

или в уравнение Калоджеро

$$\frac{d}{dz} t = -\frac{V}{k} (\sin kz + t \cos kz)^2, \quad t = \operatorname{tg} \delta_0(z).$$

Теперь рассмотрим  $\delta_0$  как функцию от  $k$ . Тогда из соотношения (6) видно, что  $\delta_0(k)$  является нечетной функцией от  $k$ , т.е.  $\delta_0(-k) = \delta_0(k)$ . Введем обозначение

$$a_0 = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\operatorname{tg} \delta_0(k)}{k}. \quad (8)$$

Тогда из соотношения (6) нетрудно получить

$$a_0 = z - \frac{u_0(z)}{u_0'(z)}, \quad k \rightarrow 0. \quad (8')$$

Величина  $a_0$  называется длиной рассеяния. Таким образом, длина рассеяния определяется через решение задачи (5) при достаточно большом  $z$ . Как известно<sup>/2/</sup>, параметры низкоэнергетического  $S$ -рассеяния ( $\ell=0$ ), длина рассеяния  $a_0$ , эффективный радиус  $r_0$ , параметр формы  $P$  и другие определяются соотношением

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = \frac{1}{a_0} + \frac{1}{2} r_0 k^2 - P r_0^3 k^4 + \dots \quad (9)$$

Используя (6), из (9) получаем

$$a_0 = r - \frac{u_0}{u_0'} = r - \frac{1}{f} \quad f = \frac{u_0'(r)}{u_0(r)}, \quad \kappa \rightarrow 0 \quad (10)$$

$$r_0 = -\frac{2r}{a_0} \left\{ \frac{1}{f} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) - \frac{r}{2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \right\}$$

$$\rho = \frac{r^2}{4a_0 r_0^3} \left\{ -\frac{2r}{3} \left(1 - \frac{r}{4a_0}\right) \frac{1}{f} + \frac{r^2}{6} \left(1 - \frac{r}{5a_0}\right) + r_0 \left(\frac{1}{f} - \frac{r}{3}\right) \right\}.$$

В методе фазовых функций<sup>/2/</sup> эти параметры определяются как пределы при  $r \rightarrow \infty$  решения задачи Коши для некоторых нелинейных и линейных дифференциальных уравнений первого порядка. В данном подходе они выражаются через логарифмическую производную решения задачи (5) в достаточно удаленной точке  $r$ . Пусть  $\ell > 0$ . Тогда потенциал задачи (1) становится дальнедействующим из-за присутствия центробежного члена, и в связи с этим необходимо учитывать следующие члены в асимптотике решения. Известно, что при  $r \rightarrow \infty$  имеет место соотношение

$$u_\ell(r) \sim \sin\left(\kappa r - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) + \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa r} \cos\left(\kappa r - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right), \quad (3')$$

которое превращается в асимптотику (3) при  $\ell = 0$ . В этом случае не удается исключить фазу рассеяния  $\delta_\ell$  из краевого условия, но тем не менее можно показать, что

$$u_\ell'' + \kappa^2 u_\ell^2 - \kappa^2 = O(r^{-2}), \quad \ell > 0.$$

Отсюда ясно, что для достаточно больших  $r$  опять можно ограничиться рассмотрением граничного условия (4) при  $\ell > 0$ . Таким образом, волновая функция определяется, как и раньше, решением краевой задачи (5). Отличие состоит лишь в вычислении фазовых сдвигов. Из (3') легко найдется  $\operatorname{tg} \delta_\ell$ :

$$\operatorname{tg} \delta_\ell = \Delta_2 / \Delta_1, \quad (6')$$

где

$$\Delta_2 = \left(\sin\beta + \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa r} \cos\beta\right) u_\ell'(r) - \left[\frac{2\kappa^2 r^2 - \ell(\ell+1)}{2\kappa r^2} \cos\beta - \frac{\ell(\ell+1)}{2r} \sin\beta\right] u_\ell(r), \quad (11)$$

$$\Delta_1 = \left(\frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa r} \sin\beta - \cos\beta\right) u_\ell'(r) - \left[\frac{2\kappa^2 r^2 - \ell(\ell+1)}{2\kappa r^2} \sin\beta + \frac{\ell(\ell+1)}{2r} \cos\beta\right] u_\ell(r),$$

$$\beta = \kappa r - \ell\pi/2.$$

Формула (6') справедлива при любом  $\ell > 0$  и  $\kappa$ , за исключением  $\ell = 1$ , когда требуется  $\kappa \neq 0$ .

## 2. Численная схема решения задачи рассеяния

Для численного решения задачи (5) необходимо рассматривать ее на конечном интервале  $[0, R]$ ,  $R \gg 1$ . Выбор величины  $R$  осуществляется в зависимости от того, насколько быстро убывает потенциал  $V$  при увеличении  $r$ . С другой стороны, точность приближенного решения зависит от выбора аппроксимации задачи. Из формулы (6) ясно, что необходима вычислительная схема, дающая саму волновую функцию и ее производную с высокой точностью. Поэтому в качестве метода дискретизации задачи (5) здесь выбран метод сплайн-функций, так как сплайны обладают аппроксимативными свойствами не только для функций, но и их производных. Вводя сетку  $\Delta_N: 0 = r_0 < r_1 < \dots < r_N = R$ , мы ищем приближенное решение задачи (5) в пространстве кубических сплайнов класса  $C^2[0, R]$ , т.е.

$$u \sim S = \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j B_j(r), \quad (12)$$

где  $B_j(r)$  — нормализованные кубические B-сплайны. Очевидно, что здесь сетка  $\Delta_N$  дополняется стандартным образом<sup>/8/</sup>.

Нашей целью является построение численной схемы, не уступающей по точности упомянутым выше известным методам. Мы ограничимся рассмотрением равномерной сетки  $\Delta_N$  с шагом  $h = R/N$ .

Рассмотрим схему

$$\bar{\varphi}_h^{(4)}(s) = 0, \quad r = 0 \quad (13)$$

$$\varphi_h^{(4)}(s) = \frac{d^2}{dr^2} S + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r)\right) S + \frac{h^2}{12} A^2 \frac{d^2}{dr^2} [S] = 0, \quad (14)$$

$$r \in \Delta_N, \quad r \neq 0$$

$$S_0 = 0, \quad S_N'^2 + \kappa^2 S_N^2 - \kappa^2 = 0, \quad (15)$$

где

$$[S] = \begin{cases} (2E - T_+) T_+ S & , \quad z = 0 \\ S & z = z_i \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \\ (2E - T_-) T_- S & , \quad z = z_N \end{cases}$$

$$T_+ S = S(z+h), \quad T_- S = S(z-h), \quad \Delta^2 S(z) = (S(z+h) - 2S(z) + S(z-h))/h^2$$

$$ES = S(z), \quad h = z_{i+1} - z_i$$

Оператор  $\bar{\varphi}_h^{(4)}(s)$  имеет разный вид в зависимости от значения  $\ell$  и поведения потенциала  $V$  в точке  $z=0$ . Рассмотрим следующие случаи:

а)  $\ell=0$  и  $V$  регулярен в точке  $z=0$ . Тогда  $\bar{\varphi}_h^{(4)}(s)$  имеет такой же вид, как и  $\varphi_h^{(4)}(s)$  в точке  $z=0$ , т.е.

$$\bar{\varphi}_h^{(4)}(s) = \varphi_h^{(4)}(s) = 0 \quad z = 0.$$

б)  $\ell=0$  и  $z V(z) \rightarrow \bar{c}$  при  $z \rightarrow 0$ . Из условия (2) ясно, что в этом случае вместо уравнения (1) можно рассматривать в точке  $z=0$  уравнение

$$u'' - \bar{c} u' = 0.$$

В соответствии с этим рассматривается уравнение

$$\bar{\varphi}_h^{(4)}(s) = \frac{d^2}{dz^2} S - \bar{c} \frac{d}{dz} S + \frac{h^2}{12} \Delta^2 \frac{d^2}{dz^2} [S] = 0, \quad z = 0. \quad (I3')$$

в)  $\ell > 0$ . Тогда из условия (2) следует, что

$$u' = 0, \quad z = 0.$$

Ясно, что в этом случае можно взять

$$\bar{\varphi}_h^{(4)}(s) = S' = 0, \quad z = 0. \quad (I3'')$$

Аналогичным образом можно показать, что при  $\ell > 2$  вместо (I3'') можно взять уравнение

$$S'' + \frac{h^2}{12} \Delta^2 \frac{d^2}{dz^2} [S] = 0, \quad z = 0. \quad (I3''')$$

Используя свойства кубических интерполяционных сплайнов, нетрудно проверить, что схема (I3)-(I5) имеет аппроксимацию  $O(h^4)$ .

Нелинейную граничную задачу (I3)-(I5) мы будем решать с помощью непрерывного аналога метода Ньютона<sup>/9/</sup>. При этом с целью упрощения вычислений используем метод введения функции включения<sup>/10/</sup>, с сохранением точности схемы. Приведем окончательный вид линеаризованной системы:

$$v_k'' + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - V(z) \right) v_k = - \left[ S_k'' + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - V \right) S_k + \frac{h^2}{12} \Delta^2 F_k(z) \right], \quad z \in \Delta_N, \quad (I6)$$

$$v_k = -S_k, \quad z = 0,$$

$$S_k' v_k' + k^2 S_k v_k = - \left( S_k'^2 + k^2 S_k^2 - k^2 \right) / 2, \quad z = R,$$

$$S_{k+1} = S_k + \tau_k v_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (I7)$$

где

$$F_k(z) = \begin{cases} 2 S_k''(z+h) - S_k''(z+2h) + g_k (v_{k-1}''(z+h) - v_{k-1}''(z+2h)), & z = 0 \\ S_k''(z) + g_k v_{k-1}''(z), & z = z_i, \quad i = 1, \dots, N-1 \\ 2 S_k''(z-h) - S_k''(z-2h) + g_k (v_{k-1}''(z-h) - v_{k-1}''(z-2h)), & z = z_N. \end{cases} \quad (I8)$$

В случаях (б) и (в) в точке  $z=0$  вместо уравнения (I6) рассматриваются уравнения

$$v_k'' - \bar{c} v_k' = - \left[ S_k'' - \bar{c} S_k' + \frac{h^2}{12} \Delta^2 F_k(z) \right], \quad (I9)$$

$$v_k' = -S_k'. \quad (20)$$

Очевидно, что случаю (I3''') соответствует уравнение (I6) в точке  $z=0$  с заменой коэффициента в нем  $k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - V$  на 0. В схеме

(I6) функция включения  $g(t)$  является достаточно гладкой, удовлетворяющей условиям

$$g(0) = 0, \quad g(t) \rightarrow 1, \quad t \rightarrow \infty.$$

В частности, она может иметь вид  $g(t) = 1 - e^{-\alpha t}$ ,  $1 \geq \alpha > 0$ . С целью ускорения сходимости итераций (I6), (I7) выбирается периодическая функция включения<sup>/11/</sup>:

$$g(t' + nT) = 1 - e^{-t'}, \quad t' \in [0, T], \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Линейная система (I6) решается методом трехточечной прогонки. При этом можно легко показать корректность и устойчивость алгоритма для достаточно малого  $h$ . В качестве начального приближения  $S_0$  можно взять синусоиду. Итерационные параметры  $\tau_k$  в (I7) выбираются из условия уменьшения невязки<sup>/9/</sup> в сеточной  $C$ -норме и такой выбор параметров существенно расширяет область сходимости метода. Итерации прекращаются, когда невязка оказывается меньше, чем наперед заданное

число  $\varepsilon > 0$ . Из построения схемы (I6), (I7) ясно, что в случае сходимости итераций приближенное решение  $S_k = S^*$  отличается от  $u(x)$  величиной  $O(h^4)$ , а значения производной в узлах равномерной сетки  $\Delta_N$  — тоже величиной  $O(h^4)$ . Тогда из (6) ясно, что сдвиг фазы  $\delta_\ell$  вычисляется с такой же точностью, что и решение.

Замечание. Если положить  $F_k(r) \equiv 0$  в (I6), то получается обычная схема точности  $O(h^2)$  и ее можно рассматривать на неравномерной сетке  $\Delta_N$  с шагами  $h_i = r_{i+1} - r_i > 0$ . Тогда сдвиги фазы  $\delta_\ell$  вычисляются с точностью  $O(h^2)$ ,  $\bar{h} = \max h_i$ .

В процессе итераций требуется значительное время для вычисления коэффициентов и правой части системы линейных алгебраических уравнений и это становится особенно ощутимым, когда число итераций велико. Однако, в силу линейности уравнения (I) и краевого условия в точке  $r = 0$ , все коэффициенты системы (I6), за исключением только последнего уравнения, не зависят от  $k$ , т.е. если использовать представление

$$v_k = \sum_{j=1}^{N+1} y_j^{(k)} B_j(x),$$

то систему (I6) можно записать в виде

$$\begin{aligned} c_0 y_0^{(k)} - b_0 y_1^{(k)} &= f_0^{(k)}, & i=0, \\ -a_i y_{i-1}^{(k)} + c_i y_i^{(k)} - b_i y_{i+1}^{(k)} &= f_i^{(k)}, & 1 \leq i \leq N-1, \\ -a_N y_{N-1}^{(k)} + c_N y_N^{(k)} &= f_N^{(k)}, & i=N. \end{aligned} \quad (2I)$$

Следовательно, коэффициенты  $(c_i, a_i, b_i, i=0, \dots, N-1)$  системы (2I) можно вычислять лишь один раз. С другой стороны, известно [I2], что прогоночные коэффициенты  $\bar{\alpha}_i$  в формуле

$$y_m^{(k)} = \bar{\alpha}_{i+1} y_n^{(k)} + \beta_{i+1}^{(k)}, \quad i = N-1, N-2, \dots, 0$$

не зависят от правой части, а определяются только коэффициентами первых  $(N-1)$  уравнений системы (2I) и поэтому они тоже вычисляются только один раз при начальном этапе итераций. Эти обстоятельства оптимизируют алгоритм и приводят к значительному сокращению счетного времени на ЭВМ.

### 3. Численные результаты и обсуждение

С целью оценки эффективности предложенной схемы выполнены численные расчеты фазовых сдвигов для различных часто встречающихся потенциалов. Следует отметить, что величина  $R$  выбрана в зависимости от вида потенциала и числа  $k$  и  $\ell$ . Все расчеты были сделаны на равно-

мерной сетке с шагом  $h = R/N$ , при заданном уровне невязки  $\varepsilon = 10^{-6}$ . В таблицах I-3 и 5 приведены  $\text{tg } \delta_\ell$  ( $\ell=0$ ).

### 3.I. Экспоненциальный потенциал

а.  $V(r) = -2 \cdot e^{-r}$ . В таблице I приведены значения  $\text{tg } \delta_\ell$  вместе с соответствующими данными, полученными методом Рунге-Кутты /4,7/ ( $p-k$ ) и методом интегрального уравнения Фредгольма (ММУФ).

Таблица I ( $R = 6\pi$ )

k	p-k	ММУФ	$h = \frac{6\pi}{200} = 0,0942$	h/2	h/4	h/8
0,	8,694 <sup>+</sup>	8,6933 <sup>+</sup>	8,693338 <sup>+</sup>	8,693353 <sup>+</sup>	8,693326 <sup>+</sup>	8,693347 <sup>+</sup>
0,5	2,6388	2,6388	2,638776	2,638768	2,638767	2,638767
I	0,98952	0,9895I	0,9895I9	0,98952I	0,98952I	0,98952I
2	0,489I2	0,489I2	0,489043	0,489II8	0,489I22	0,489I23
3	0,32885	0,32885	0,328296	0,3288I2	0,328844	0,328846
4	0,24784	0,24784	0,245627	0,247704	0,247835	0,247844
5	0,19882	0,19882	0,19I905	0,198404	0,198795	0,19882I

<sup>+</sup> — длина рассеяния, которая определена по формуле (8) при  $k=0,00I$ .  
б. Сферически симметричный потенциал

$$V(r) = -\lambda \cdot \exp(-r/\ell)$$

с параметрами /7/

$$S - \text{рассеяние: } \lambda = 2,6409; \quad \ell = 0,7I233.$$

Численные результаты, полученные с помощью схемы (I6) и метода фазовых функций, приведены в таблице 2.

Таблица 2

k	R	$h = 0,1256$	h/2	h/4	Метод фазовых функций +
0,25	8π	I,974459	I,974394	I,974390	I,98094I
0,5		I,3476I8	I,347594	I,347593	I,353756
0,75		0,9848I2	0,98480I	0,984800	0,990984
I	4π	0,779789	0,779783	0,779783	0,783I73
I,5		0,552I60	0,552I87	0,552I89	0,5562I4
2		0,427776	0,4279I4	0,427923	0,432740

<sup>+</sup> — эти результаты получены по программе /I3/, в которой потенциал между узлами аппроксимировался прямой.

3.2. Потенциал типа Куавы  $V = -2 e^{-z}/z$

Численные расчеты были сделаны для некоторых значений  $\ell$  и соответствующие результаты приведены в таблицах 3 и 4.

Таблица 3 ( $R=6\pi$ )

K	P-K	МНФ	$h = 6\pi/100 = 0,0471$	$h/2$	$h/4$
0	7,9 <sup>+</sup>	7,9119 <sup>+</sup>	7,911444 <sup>+</sup>	7,911763 <sup>+</sup>	7,911514 <sup>+</sup>
0,5	8,4469	8,4276	8,4468844	8,4469130	8,4469148
1	1,9286	1,9284	1,9285804	1,9285818	1,9285819
2	1,0054	1,0054	1,0053839	1,0053909	1,0053913
3	0,73783	0,73781	0,73778025	0,73782290	0,73782559
4	0,59881	0,59880	0,59863665	0,59879869	0,59880888
5	0,51058	0,51057	0,51008324	0,51054675	0,51057591

Таблица 4

Значения  $\text{tg } \delta_1$  для потенциала  $V(z) = -2 e^{-z}/z$

K	Метод решения граничной задачи				Метод Рунге-Кутты		Метод интегрального уравнения Фредгольма		
	R	N	$h = R/N$	$h/2$	$h/4$	$KR \approx 50$	$KR \approx 400$	$n=17$	$n=33$
1	10	160	0,24785651	0,24792204	0,24792607	0,24802	0,24793	0,24790	0,24793
2	10	160	0,33448073	0,33454750	0,33455292	0,33469	0,33456	0,33454	0,33455
3	10	160	0,32732513	0,32784244	0,32787545	0,32801	0,32788	0,32786	0,32788
4	10	160	0,30510368	0,30617270	0,30623921	0,30637	0,30625	0,30621	0,30624
5	10	160	0,28278950	0,28385764	0,28392335	0,28404	0,28393	0,28388	0,28393

3.3. Статический потенциал атома водорода<sup>/7/</sup>

$$V = -2 \left(1 + \frac{1}{z}\right) e^{-2z}$$

Результаты приведены в таблице 5.

Таблица 5

K	R	$h = R/200$	$h/2$	$h/4$
0,1	5π	0,880989	0,881002	0,881003
0,3		1,725472	1,725488	1,725489
0,5		1,721933	1,721944	1,721944
1	3π	1,274552	1,274552	1,274552
2		0,833662	0,833664	0,833664
3		0,644710	0,644728	0,644729
4		0,535779	0,535853	0,535857

Из таблиц 1-4 видно, что предложенная схема не уступает по точности методам Рунге-Кутты, интегрального уравнения Фредгольма и методу фазовых функций.

В нашей схеме при больших  $k$  требуется более сгущенная сетка по сравнению с малым  $k$  в силу осцилляционного характера волновой функции. Отметим также, что сравнительно большое значение  $R$  требуется для далекодействующих потенциалов ( $\ell > 0$ ). Для фиксированного значения  $R$  проведены расчеты на последовательности сгущающихся разностных сеток, чтобы показать порядок сходимости схемы. Преимущества нашего подхода состоят в одновременном нахождении как волновой функции, так и фазового сдвига.

Заключение

Развит численный метод решения одноканальной задачи рассеяния. При этом используется постановка задачи рассеяния как нелинейной краевой задачи. В качестве метода дискретизации выбран метод сплайн-функций с последующей линеаризацией с помощью модифицированного непрерывного аналога метода Ньютона, позволяющий найти радиальную волновую функцию с точностью  $O(h^4)$ . Как следствие, найдутся фазовые сдвиги с такой же точностью, что и волновая функция. С помощью данного метода также легко можно найти другие параметры рассеяния. Данный подход может быть распространен на случай многоканальной задачи рассеяния.

Литература

1. Давыдов А.С. Квантовая механика. - М.: Наука, 1973.
2. Бабилов В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. - М.: Наука, 1988.
3. Nuss R., Kalaba R., Vasudeven V.-J.Math. Phys., 1974, v.5, p.1285.
4. Holt A.R., Santoso B.-J.Phys. B., 1972, v.5, p.497.
5. Moiseiwitsch B.L., O'Brien T.J.-J.Phys.B., 1970, v.3, p.191.
6. Moiseiwitsch B.L.-J.Phys.B., 1970, v.3, p.1417.
7. Liew Y.C., Quah L.C.-J.Phys. B., 1974, v.7, p.2495.
8. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980.
9. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В.-ЭЧАЯ, 1973, т.4, вып.1, с.127.
10. Виницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, PII-81-837, PII-82-314, PII-82-315, Дубна,
11. Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, PII-87-459, Дубна, 1987.
12. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. - М.: Наука, 1978.
13. Газетова А.М., Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Ракитский А.В. ОИЯИ, 5-5395, Дубна, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 ноября 1988 года.

Жанлав Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. P11-88-823  
Схема сплайн-коллокации для численного  
решения одноканальной задачи рассеяния

Предложена вычислительная схема решения одноканальной задачи рассеяния, основанная на ее представлении как нелинейной граничной задачи. Последняя аппроксимируется методом сплайн-функций и решается с помощью ньютоновской итерационной схемы с включением оператора возмущения. Получены схемы точности  $O(h^4)$ , где  $h$  - шаг равномерной сетки. Оценка точности подтверждена решением задач для различных потенциалов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод О.С.Виноградовой

Zhanlav T., Puzynin I.V., Rakitskiy A.V. P11-88-823  
Spline-Collocation Scheme for Numerical  
Solution of One-Channel Scattering Problem

Calculation scheme is proposed for solving the one-channel scattering problem based on its representation as a nonlinear boundary problem. The latter is approximated by the spline-function method and is solved by Newton iterational scheme including the perturbation operator. The schemes of accuracy  $O(h^4)$ , where  $h$  is the step of a smooth grid are obtained. The accuracy estimate is confirmed by solving the problems for different potentials.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988