

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

88-912
С 506

P11-88-912

Ю.С.Смирнов

АЛГОРИТМ И ПРОГРАММА
ДЛЯ РЕШЕНИЯ МНОГОКАНАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ
РАССЕЯНИЯ С МАТРИЦАМИ ПОТЕНЦИАЛОВ
СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

1988

I. Введение

При исследованиях проблемы мюонного катализа ядерных реакций синтеза приходится решать задачу о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц: рассеяние мезоатома на ядре изотопа водорода /1/. В адиабатическом представлении она сводится к решению многоканальной задачи рассеяния вида:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(z) = \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} \vec{Y}(R) + (\lambda - \hat{W}(R)) \vec{Y}(R) = 0 \end{array} \right. \quad (I.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_2(z) = \vec{Y}(R) \Big|_{R=0} = 0 \end{array} \right. \quad (I.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_3(z) = \hat{F}_1(\lambda, \delta, R) \frac{d}{dR} \vec{Y}(R) + \hat{F}_2(\lambda, \delta, R) \vec{Y}(R) \Big|_{R=R_m} = 0 \end{array} \right. \quad (I.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_4(z) = (\vec{Y}(R), \vec{Y}(R)) - 1 = 0 \end{array} \right. \quad (I.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_5(z) = (\vec{Y}(R), \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} \vec{Y}(R) + (\lambda - \hat{W}(R)) \vec{Y}(R)) = 0. \end{array} \right. \quad (I.5)$$

В системе (I.1)-(I.5) используются следующие обозначения:

$\lambda = k_1^2 \hat{I} = 2M(\epsilon - E_1) \cdot \hat{I}$ - диагональная матрица размерности $n \times n$,
 $\epsilon - E_1$ - энергия в i - м канале реакции, ϵ - заданная энергия,
 M - приведенная масса системы;

$\vec{Y}(R)$ - вектор волновых функций размерности n ;

матрица потенциалов $\hat{W}(R) = \frac{J(J+1)}{R^2} \cdot \hat{I} + \hat{U}(R) + 2\hat{Q}(R) \frac{d}{dR}$ размерности $n \times n$ строится из эффективных потенциалов задачи трех кулоновских частиц, исходные данные для построения которых приведены в /2/; J - орбитальный момент.

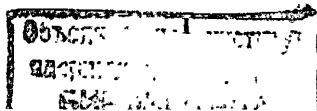
Диагональные $n \times n$ матрицы $\hat{F}_1(\lambda, \delta, R)$ и $\hat{F}_2(\lambda, \delta, R)$ определяются из асимптотики волновых функций с учетом номеров открытых и закрытых каналов /3/;

δ - фаза рассеяния.

Соотношения (I.4)-(I.5) являются условиями нормировки.

Традиционно задача рассеяния формулируется следующим образом: определить фазу рассеяния $\delta(\epsilon)$ при заданной энергии $\epsilon = \epsilon_x = \frac{K_x^2}{2M}$.

Систему (I.1)-(I.5) рассмотрим как нелинейное функциональное уравнение $\varphi^{(v)}(z) = 0$, где



$$\varphi^{(\nu)}(z) = \{ \varphi_1^{(\nu)}(z), \varphi_2^{(\nu)}(z), \varphi_3^{(\nu)}(z), \varphi_4^{(\nu)}(z), \varphi_5^{(\nu)}(z) \}; \nu=1,2,\dots,s.$$

Здесь s - число открытых каналов.

n - канальная задача рассеяния с s открытыми каналами тогда формулируется следующим образом^{/3/}: при заданной энергии

$$\lambda_{\mathbf{x}} = (k_{\mathbf{x}}^2)^{-1} \hat{\mathbf{I}} = 2M | \hat{\mathbf{E}}_{\mathbf{x}} - E_{\mathbf{x}} | \hat{\mathbf{I}} \quad \text{найти } s \text{ нетривиальных решений}$$

$z_{\mathbf{x}}^{(\nu)} = \{ \tilde{y}_{\mathbf{x}}^{(\nu)}, \varepsilon_{\mathbf{x}}, \delta_{\mathbf{x}}^{(\nu)} \}; \nu=1,2,\dots,s$, s систем дифференциальных уравнений (I.I)-(I.5), отличающихся друг от друга лишь краевым условием на правом конце (I.3). В результате решения мы получим соответствующие волновые функции $\tilde{y}_{\mathbf{x}}^{(\nu)}(\lambda_{\mathbf{x}}, R)$ и фазы рассеяния $\delta_{\mathbf{x}}^{(\nu)}(\lambda_{\mathbf{x}}); \nu=1,2,\dots,s$.

Система уравнений (I.I)-(I.5) в подходе^{/3/}, использующем метод Ньютона, сводится к решению двух краевых задач:

$$(D - \lambda_n) \tilde{y}_n^{(1)} = - \tilde{F}_n^{(1)} \quad (I.6)$$

$$(D - \lambda_n) \tilde{y}_n^{(2)} = - \tilde{F}_n^{(2)}, \quad (I.7)$$

где вид оператора D определяется уравнениями (I.I)-(I.3) в разностном представлении, $\tilde{y}_n^{(1)}$ и $\tilde{y}_n^{(2)}$ - неизвестные на n -й итерации поправки. Причем в состав оператора D входят матрицы потенциалов специального вида.

Для решения системы (I.I)-(I.5) ранее использовался модифицированный метод Ньютона^{/4/}, позволяющий обойти особенность $(D - \lambda_n)^{-1}$ при $\lambda_n \rightarrow \lambda_{\mathbf{x}}$ и решать три краевые задачи, аналогичные задачам вида (I.6), (I.7), итерационным способом. Однако недостатком такого подхода является достаточно малая область сходимости.

В данной работе предлагается модификация ньютоновского итерационного метода с включением возмущений, применявшаяся ранее^{/5,6/} для решения задачи на собственные значения (т.е. для определения уровней энергии и волновых функций мезомолекул), и с оптимальным выбором итерационного шага^{/7/}, которая позволяет расширить область сходимости задачи (I.I)-(I.5) для матриц потенциалов специального вида.

2. Итерационный метод

Рассмотрим нелинейное функциональное уравнение:

$$\varphi(z) = 0 \quad (2.I)$$

относительно тройки $z = \{ \lambda, y, \delta \}$.

Предположим, что существует решение $z_{\mathbf{x}}$ задачи (2.I) и оно является изолированным, т.е. имеется окрестность точки $z_{\mathbf{x}}$ вида $\|z - z_{\mathbf{x}}\| < \varepsilon$, где $\varepsilon > \delta$, в которой $\varphi(z) \neq 0$. Пусть известно $z_0 = \{ \lambda_0, y_0, \delta_0 \}$ - начальное приближение к искомому решению. Для отыскания решения

$z_{\mathbf{x}}$ задачи (2.I) воспользуемся непрерывным аналогом метода Ньютона.

Для этого введем непрерывный параметр $t \in [0, \infty)$ и параметризуем функцию $z = z(t)$. Тогда стационарное уравнение (2.I) заменится эволюционным процессом:

$$\begin{cases} \varphi'_z(z(t)) \cdot z'(t) = - \varphi(z(t)), & 0 \leq t < \infty \\ z(0) = z_0. \end{cases} \quad (2.2)$$

Здесь $\varphi'_z(z(t))$ - производная ядром, z_0 - начальное приближение.

Если функции $\varphi(z)$ и $\varphi'_z(z)$ непрерывны, а $\varphi'_z(z)^{-1}$ ограничена в некоторой окрестности точки $z_{\mathbf{x}}$, то^{/8,9,10/} при $t \rightarrow \infty$ получаем сходимость непрерывной траектории $z(t)$ к точному решению $z_{\mathbf{x}}$.

Рассмотрим модификацию^{/6/} уравнения (2.2) в предположении, что функция φ явным образом зависит от t :

$$\begin{cases} \varphi'_t(t, z(t)) + \varphi'_z(t, z(t)) z'(t) = - \varphi(t, z(t)), & 0 \leq t < \infty \\ z(0) = z_0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Оператор φ можно представить в виде суммы $\varphi = \psi + \theta$ невозмущенной и возмущенной частей. Введем функцию включения возмущения $g(t)$, тогда оператор φ запишется в виде

$$\varphi(t, z(t)) = \psi(z(t)) + g(t)\theta(z(t)). \quad (2.4)$$

Здесь $g(t)$ - непрерывная функция, удовлетворяющая условиям $g(0) = 0, g(\infty) = 1$.

После подстановки представления (2.4) в уравнение (2.3) получим уравнение для невозмущенной части оператора φ , которое решается методом Эйлера:

$$\begin{cases} \varphi'_z(z(t)) \cdot z'(t) = - [\psi(z(t)) + (g'(t) + g(t)) \theta(z(t)) + \\ + g(t) \theta'_z(z(t)) z'(t - \tau)] \\ z(0) = z_0, \quad z'_t = \{ \lambda'_t, y'_t, \delta'_t \} = \{ \mu(t), \nu(t), \eta(t) \} \end{cases} \quad (2.5)$$

на неравномерной сетке с шагом τ_k : $t_{k+1} = t_k + \tau_k, t_0 = 0, k=0,1,2,\dots$

функцию включения возмущения на интервале $0 \leq t < \infty$ зададим формулой: $g(t) = 1 - e^{-\alpha t}, 0 < \alpha \leq 1$.

В результате дискретизации параметра t на каждом k -м ($t = t_k$) шаге полученного итерационного процесса решается краевая задача:

$$\begin{cases} \varphi'_k \cdot \Delta z_k = - [\psi_k + (g'_k + g_k) \theta_k + g_k \theta'_z(z_k) \Delta z_{k-1}] \\ \psi_k = \psi(z_k), \quad \theta_k = \theta(z_k), \quad g(t_k) = g_k, \quad z(0) = z_0 \end{cases} \quad (2.6)$$

относительно итерационной поправки $\Delta z_k = \{\mu_k, v_k, \eta_k\}$.
 При этом из предыдущей итерации известны значения Δz_{k-1} и z_k .
 Затем находится новое приближение $z_{k+1} = \{\lambda_{k+1}, y_{k+1}, \delta_{k+1}\}$
 к искомому решению z_k по формуле:

$$\begin{aligned} z_{k+1} &= z_k + \tau_k \cdot \Delta z_k, \text{ т.е. : } \lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k \cdot \mu_k \\ & y_{k+1} = y_k + \tau_k \cdot v_k \\ & \delta_{k+1} = \delta_k + \tau_k \cdot \eta_k. \end{aligned}$$

Для выбора итерационного шага τ_k применим способ, предложенный в работе [7], который основан на минимизации невязки (вместо всей невязки ограничимся лишь ее главной компонентой, т.е. невязкой по уравнению (I.I)):

$$D_k^{(1)}(\tau) = \|\varphi_1(\lambda_k + \tau \cdot \mu_k, y_k + \tau \cdot v_k, \delta_k + \tau \cdot \eta_k)\|.$$

При этом невязка аппроксимируется квадратичным по τ полиномом, точка минимума которого определяет оптимальный шаг на k -й итерации:

$$\tau_k = \tau_{\text{opt}} = \max\left(\xi, \frac{D_k^{(1)}(0)}{D_k^{(1)}(0) + D_k^{(1)}(1)}\right). \quad (2.7)$$

Здесь для улучшения сходимости вводится константа $\xi = 0,1$, такая, что $\xi \leq \tau_k \leq 1$.

Рассмотрим для задачи (I.I)-(I.5) матрицу потенциалов $\hat{W}(R)$ специального вида:

$$\begin{pmatrix} \hat{W}_{11}(R) & \hat{W}_{12}(R) & \hat{W}_{13}(R) & \dots & \hat{W}_{1N_1}(R) \\ \hat{W}_{21}(R) & \hat{W}_{22}(R) & 0 & \dots & 0 \\ \hat{W}_{31}(R) & 0 & \hat{W}_{33}(R) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{W}_{N_1 1}(R) & 0 & 0 & \dots & \hat{W}_{N_1 N_1}(R) \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

каждый элемент которой \hat{W}_{ij} представляет собой матрицу размерности 2×2 , при этом размерность задачи (I.I)-(I.5) $N = 2N_1$.

Матрицу $\hat{W}(R) = \frac{J(J+1)}{R^2} \hat{I} + \hat{U}(R) + 2Q \frac{d}{dR}$ представим в виде суммы $\hat{W}(R) = \hat{W}_0(R) + \hat{W}_1(R)$, где матрицы $\hat{W}_0(R)$ и $\hat{W}_1(R)$, соответственно, имеют вид:

$$\hat{W}_0(R) = \begin{pmatrix} \hat{W}_{11}(R) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \hat{W}_{22}(R) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \hat{W}_{N_1 N_1}(R) \end{pmatrix}, \quad \hat{W}_1(R) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{W}_{12}(R) & \dots & \hat{W}_{1N_1}(R) \\ \hat{W}_{21}(R) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{W}_{N_1 1}(R) & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

При этом матрицу $\hat{W}_0(R)$ можно выключить в невозмущенную часть дифференциального оператора Ψ , а "возмущение" Θ связать с матрицей $\hat{W}_1(R)$. Задачу (I.I)-(I.5) аппроксимируем на квазиравномерной сетке $\omega_{[0, R_m]}$ с постоянным шагом h_i на i -м подинтервале (при этом $h_{i+1} = m_i h_i$, $m_i \geq 1$ - целые числа) ее сеточным аналогом с точностью $O(h^2)$. В результате из (I.I)-(I.5), учитывая (2.6), в разностном представлении получим 3 краевые задачи относительно итерационных поправок $\vec{v}_k^{(1)}, \vec{v}_k^{(2)}, \vec{v}_k^{(3)}$:

$$\begin{cases} \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} \vec{v}_k^{(1)}(R_i) + (\lambda_k - \hat{W}_0(R_i)) \vec{v}_k^{(1)}(R_i) = (g_k' + g_k) \hat{W}_1(R_i) \vec{y}_k(R_i) + g_k \hat{W}_1(R_i) \vec{v}_{k-1} \\ \vec{v}_k^{(1)}(R_i) \Big|_{R_i=0} = 0 \\ \hat{f}_1 \frac{d}{dR} \vec{v}_k^{(1)}(R_i) + \hat{f}_2 \vec{v}_k^{(1)}(R_i) \Big|_{R_i=R_m} = 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\begin{cases} \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} \vec{v}_k^{(2)}(R_i) + (\lambda_k - \hat{W}_0(R_i)) \vec{v}_k^{(2)}(R_i) = -\vec{y}_k(R_i) \\ \vec{v}_k^{(2)}(R_i) \Big|_{R_i=0} = 0 \\ \hat{f}_1 \frac{d}{dR} \vec{v}_k^{(2)}(R_i) + \hat{f}_2 \vec{v}_k^{(2)}(R_i) \Big|_{R_i=R_m} = -\frac{\partial \hat{f}_1}{\partial \lambda} \frac{d}{dR} \vec{y}_k(R_i) - \frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \lambda} \vec{y}_k(R_i) \Big|_{R_i=R_m} \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\begin{cases} \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} \vec{v}_k^{(3)}(R_i) + (\lambda_k - \hat{W}_0(R_i)) \vec{v}_k^{(3)}(R_i) = 0 \\ \vec{v}_k^{(3)}(R_i) \Big|_{R_i=0} = 0 \\ \hat{f}_1 \frac{d}{dR} \vec{v}_k^{(3)}(R_i) + \hat{f}_2 \vec{v}_k^{(3)}(R_i) \Big|_{R_i=R_m} = -\frac{\partial \hat{f}_1}{\partial \delta} \frac{d}{dR} \vec{y}_k(R_i) - \frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \delta} \vec{y}_k(R_i) \Big|_{R_i=R_m} \end{cases} \quad (2.12)$$

Так как матрица $\hat{W}_0(R_i)$ размерности $N_1 \times N_1$ имеет достаточно простой вид (2.9), причем на диагонали располагаются матрицы размерности 2×2 , то на каждой k -й итерации нам придется N_1 раз решать краевые задачи (2.10)-(2.12), работая с матрицами размерности 2×2 , что существенно экономит оперативную память ЭВМ при расчетах, а начиная с некоторого N_1 - и машинное время.

В результате решения задач (2.10)–(2.12) методом матричной прогонки, модифицированной для квазиравномерной сетки $\omega_{[0, R_m]}$, получим значения итерационных поправок $\vec{v}_k^{(1)}, \vec{v}_k^{(2)}, \vec{v}_k^{(3)}$. После этого из разностной аппроксимации уравнений (1.4)–(1.5) получим систему двух алгебраических уравнений для определения итерационных поправок μ_k и η_k :

$$\begin{cases} a_{11}^{(k)} \mu_k + a_{12}^{(k)} \eta_k = b_1^{(k)} \\ a_{21}^{(k)} \mu_k + a_{22}^{(k)} \eta_k = b_2^{(k)} \end{cases}, \quad (2.13)$$

где

$$a_{11}^{(k)} = (\vec{y}_k, \vec{v}_k^{(2)})$$

$$a_{12}^{(k)} = (\vec{y}_k, \vec{v}_k^{(3)})$$

$$b_1^{(k)} = \frac{1}{2} (1 + (\vec{y}_k, \vec{y}_k)) - (\vec{y}_k, \vec{v}_k^{(1)})$$

$$a_{21}^{(k)} = (\vec{y}_k, \vec{v}_k^{(2)''} + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{v}_k^{(2)}) + (\vec{v}_k^{(2)}, \vec{y}_k'' + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{y}_k)$$

$$a_{22}^{(k)} = (\vec{y}_k, \vec{v}_k^{(3)''} + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{v}_k^{(3)}) + (\vec{v}_k^{(3)}, \vec{y}_k'' + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{y}_k)$$

$$b_2^{(k)} = (\vec{y}_k, \vec{y}_k'' + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{y}_k) - (\vec{v}_k^{(1)}, \vec{y}_k'' + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{y}_k) -$$

$$- (\vec{y}_k, \vec{v}_k^{(1)''} + (\lambda_x - \hat{w}) \vec{v}_k^{(1)}).$$

Наконец, итерационная поправка \vec{v}_k к $\vec{y}_k(R)$ определяется следующим образом:

$$\vec{v}_k = \vec{v}_k^{(1)} + \vec{v}_k^{(2)} \mu_k + \vec{v}_k^{(3)} \eta_k - \vec{y}_k. \quad (2.14)$$

Сходимость контролируется значениями $D_k = \|\varphi(z_k)\|$, $|\mu_k|$ и $|\eta_k|$. Итерационный процесс заканчивается при выполнении неравенства:

$$\max \{ |\mu_k|, |\eta_k|, D_k \} \leq \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ – заданное достаточно малое число. В расчетах принималось $\varepsilon = 10^{-6} + 10^{-12}$.

Представленный алгоритм был реализован в виде программы MULTCH на языке ФОРТРАН для ЭВМ ЕС-1061.

3. Структура программы MULTCH.

Описание подпрограмм и параметров

3.1. Программа MULTCH, реализующая описанный выше алгоритм, состоит из набора подпрограмм. Ее структура схематично изображена на рисунке 1.

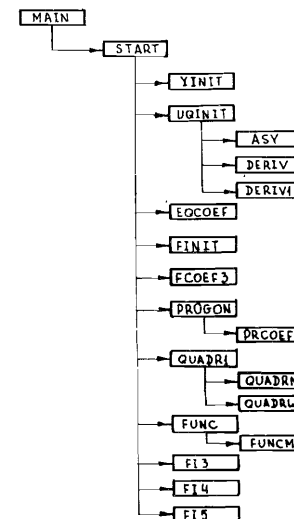


Рис. 1

3.2. Для численного решения задачи (1.1)–(1.5) необходимо иметь значения эффективных потенциалов $\hat{u}(R_1)$ и $\hat{q}(R_1)$, начальные приближения энергии, волновых функций и фазы рассеяния $\{\varepsilon_0, \vec{y}_0(R_1), \delta_0\}$, а также значение заданной энергии ε_* и некоторые другие входные параметры, которые перечисляются ниже:

- MN – число каналов в задаче, равное размерности вектора волновых функций $\vec{y}(R_1)$;
- IKS – номер открытого канала;
- NOPEN – число открытых каналов;
- EPS – точность для итерационного процесса;
- M1, M2, ..., M9, M – индексы правых концов подынтервалов квазиравномерной сетки $\omega_{[0, R_m]}$, причем m – размерность массива R_m (исключая точку R_0);
- H – шаг по R на крайнем левом подынтервале сетки $\omega_{[0, R_m]}$;

$NM1, NM2, \dots, NM10$ - множители, увеличивающие величины шагов сетки

$\omega_{[0, R_m]}$ в целое число раз (≥ 1), т.е.

$$N1=NM1 \cdot N, N2=NM2 \cdot N1, \dots, N10=NM10 \cdot N9;$$

TAU - первоначальное значение итерационного шага по параметру t ;

LJ - величина орбитального момента J ;

AMN1, AMN2, AMN3 - массы ядер; при этом приведенная масса m , входящая в уравнение (I.I), определяется по следующим формулам: $m=MO/MA$, $MO^{-1}=AMN1^{-1}+AMN2^{-1}$, $MA^{-1}=AM3^{-1}+AMN1^{-1}$;

EPSIL1= ϵ_x - заданное значение энергии (в эВ);

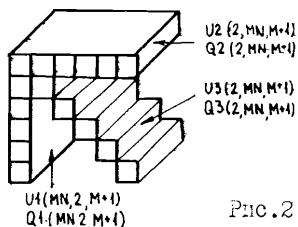
EPSILO= ϵ_o - начальное приближение к энергии;

DELTA - начальное приближение к фазе рассеяния;

BET - нормирующий коэффициент (для перевода энергии).

Все значения приведенных входных параметров (за исключением $\vec{Y}_O(R_1)$, $\hat{U}(R_1)$, $\hat{Q}(R_1)$) либо определяются стандартным образом в программе MAIN, либо считываются из входного файла при помощи оператора NAMELIST в этой же программе и через COMMON-блоки передаются подпрограмме START. Значения всех входных параметров сразу же выдаются на печать.

Матрицы эффективных потенциалов $\hat{U}(R_1)$ и $\hat{Q}(R_1)$ имеют вид (2.9). В программе они хранятся в виде трех компонент соответственно: $\hat{U}_1(R_1)$, $\hat{U}_2(R_1)$, $\hat{U}_3(R_1)$ и $\hat{Q}_1(R_1)$, $\hat{Q}_2(R_1)$, $\hat{Q}_3(R_1)$. Их заполнение происходит в подпрограмме UQINIT; при этом информация, необходимая для составления матриц потенциалов, считывается с файла прямого доступа. Компоненты $\hat{U}_1(R_1)$ и $\hat{Q}_1(R_1)$ хранятся в программе в виде трехмерных массивов U1 и Q1 размерности $MN \times 2 \times (M+1)$. Размерность массивов U2, Q2, U3, Q3, соответствующих компонентам $\hat{U}_2(R_1)$, $\hat{Q}_2(R_1)$, $\hat{U}_3(R_1)$, $\hat{Q}_3(R_1)$, равна $2 \times MN \times (M+1)$. Их вид показан на рисунке 2.



В подпрограмме UINIT определяется начальное приближение волновых функций $\vec{Y}_O(R_1)$. При этом предусмотрены альтернативные возможности:

- считывание "хорошего" $\vec{Y}_O(R_1)$ из последовательного (или библиотечного) файла, расположенного на диске;

- заполнение "плохого" (грубого) начального приближения, определяемого "вручную", т.е. вычисляя его внутри цикла при помощи известных формул.

3.3. Итерационный ньютоновский процесс реализуется в подпрограмме START. При этом внешний невязный цикл (100 CONTINUE ... GO TO 100) осуществляется по итерациям. Во внутреннем цикле происходит сведение 3 краевых задач (2.I0)-(2.I2) размерности $MN \times MN$ к $MN/2$ задачам размерности 2×2 .

Подпрограмма ESOBF последовательно вычисляет для двухкомпонентных неизвестных функций краевых задач соответствующие коэффициенты разностных уравнений: $A(2,2,M-1)$, $B(2,2,M-1)$, $C(2,2,M-1)$.

В подпрограмме FSOBF3 вычисляются правые части $F(2,M-1)$ тех же уравнений, а подпрограмма CFUNC осуществляет вычисление функции включения возмущения $g(t)$ и ее производной.

Далее вычисляются коэффициенты краевых условий. При этом необходима подпрограмма FINIT, в которой происходит вычисление $\hat{f}_1(\lambda, \delta, R_m)$ и $\hat{f}_2(\lambda, \delta, R_m)$, а также их производных.

Подпрограмма PROGN осуществляет матричную 2×2 прогонку для задач (2.I0)-(2.I2), модифицированную для квазиравномерной сетки $\omega_{[0, R_m]}$. В результате работы этой программы находят поправки $\{\vec{v}_k(1), \vec{v}_k(2), \vec{v}_k(3)\}$. На этом заканчивается внутренний цикл.

На выходе подпрограммы FUNC выдается вектор, определенный на внутренних узлах квазиравномерной сетки $\omega_{[0, R_m]}$, получающийся после подстановки очередного k -го приближения к решению $\vec{Y}_k(R_1)$, ϵ_k в разностный аналог уравнения (I.I).

Выбрав максимальный по абсолютной величине элемент этого вектора, получим главную компоненту невязки.

Подпрограмма QUADR1 вычисляет скалярное произведение двух векторов, определенных во внутренних узлах сетки $\omega_{[0, R_m]}$.

Затем определяются значения поправок μ_k и η_k путем решения системы двух линейных уравнений (2.I3) и вычисляется величина оптимального шага τ_{opt} на данной итерации.

В следующем цикле находятся итерационная поправка \vec{v}_k и новые приближения к решению \vec{Y}_{k+1} , δ_{k+1} , λ_{k+1} , а также t_{k+1} .

При завершении внешнего цикла осуществляется проверка: $\max\{D_k, |\mu_k|, |\eta_k|\} \leq EPS$. Для определения невязки D_k используются подпрограммы F13, F14 и F15, вычисляющие, соответственно, невязки по уравнениям (I.3), (I.4) и (I.5).

3.4. На каждой ньютоновской итерации предусмотрен вывод на печать следующей информации:

- $N = k$ - номер итерации;
- $F_{\text{MAX}} = D_k$ - невязка;
- $UM1 = \mu_k$ и $UM2 = \eta_k$ - значения поправок;
- $\Delta LTA = \delta_k$ - фаза рассеяния на данной итерации и $\Delta TANDL$ - ее тангенс;
- $NE4, NE5$ - невязки по уравнениям (I.4) и (I.5);
- τ_k - величина итерационного шага по параметру t ;
- $ASTK = \sqrt{|\epsilon_k|}$ $AK = \sqrt{|\epsilon_k|}$ - величины заданной энергии и очередного приближения к ней.

В конце работы программы MULTCN (на последней итерации) предусмотрена полная или выборочная печать значений волновых функций $\vec{Y}_k(R_1)$.

4. Численные расчеты

В качестве примера рассматривалась шестиканальная задача рассеяния с одним и двумя открытыми каналами на квазиравномерной сетке $\omega_{[0, R_m]}$ вида: $R=0.(0.1)20.(0.5).60$. Функция включения возмущения выбиралась следующим образом: $g(t) = 1 - e^{-\alpha t}$ с коэффициентом $\alpha = 1$. Расчеты приведены для случая: $EPS = 10^{-6}$, $AMN1 = 5496.918$, $AMN2 = 3670.481$, $AM3 = 206.769$, $LJ = 0.$, $BET = 5422.36$, $EPSIL1 = 50.$, $M = 280$.

Матрицы \hat{f}_1 и \hat{f}_2 при $R = R_m$ и I -м открытом канале соответственно имеют вид:

$$\hat{f}_1 = \begin{pmatrix} \sin(k_1 R_m + \delta^{(1)}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{f}_2 = \begin{pmatrix} -k_1 \cos(k_1 R_m + \delta^{(1)}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |k_2| & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |k_3| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |k_4| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & |k_5| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & |k_6| \end{pmatrix}$$

Одним из важных результатов является достаточная устойчивость данного алгоритма по отношению к ошибкам в задании начального приближения волновых функций \vec{y}_0 и фазы рассеяния δ_0 .

На рисунке 3 схематично изображены различные "последовательно ухудшающиеся" начальные приближения первых компонент волновых функ-

Таблица 1

Начальное приближение	Число итераций			фаза рассеяния δ
	a) с τ_{opt}	b) с $\tau \equiv 1$	c) np. SYSTEM $\tau \equiv 1$	
$y^{(1)}$	16	16	4	I.23340
$y^{(2)}$	15	19	7	I.23340
$y^{(3)}$	16	57	39	I.23340
$y^{(4)}$	25	155	77	I.23340
$y^{(5)}$	23	135	79	I.23340

Таблица 2

Номер итерации	$\tau_{\text{opt}}^{(N)}$ $y_0^{(1)}$	$\tau_{\text{opt}}^{(N)}$ $y_0^{(2)}$	$\tau_{\text{opt}}^{(N)}$ $y_0^{(3)}$
0	0	0	0
I	0.325	0.100	0.100
2	0.899	0.443	0.838
3	0.935	0.911	0.734
4	0.873	0.791	0.100
5	0.737	0.959	0.154
6	0.855	0.598	0.100
7	0.825	0.774	0.219
8	0.713	0.848	0.158
9	0.876	0.822	0.167
10	0.738	0.824	0.246
11	0.777	0.834	0.368
12	0.870	0.815	0.453
13	0.737	0.833	0.598
14	0.832	0.834	0.769
15	0.827	0.823	0.883
16	0.768	0.834	0.841
17	-	-	0.730
18	-	-	0.866
19	-	-	0.763
20	-	-	0.787
21	-	-	0.864
22	-	-	0.752
23	-	-	0.836
24	-	-	0.822
25	-	-	0.780

ций $y_0^{(1)}, y_0^{(2)}, y_0^{(3)}$ **, $y_0^{(4)}$ к решению y_* шестиканальной задачи рассеяния (первый канал открыт).

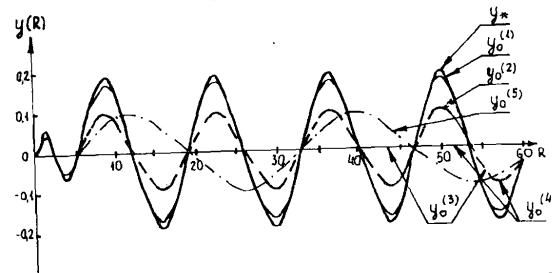


Рис.3

В таблице I приведено сравнение сходимости трех алгоритмов (по числу итераций) при старте с этих начальных приближений. Рассматриваются:

- представленный алгоритм с оптимальным выбором шага τ_{opt} ;
- тот же алгоритм, но с постоянным шагом $\tau \equiv 1$;
- программа `SYSTEM`, реализующая алгоритм из работы [3/], представляющий собой метод Ньютона без возмущения ($\tau \equiv 1$).

В таблице 2 приведены значения итерационного шага τ_{opt} , вычисленного по формуле (2.7) на каждой n -й итерации при старте с различных начальных приближений.

В заключение хотелось бы выразить благодарность В.С.Мележику и И.В.Пузынину за большую помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

- Ponomarev L.I.-Muon Catalyzed Fusion 1988, 3, p.629.
- Ponomarev L.I., Puzynina T.P.-Preprint JINR, E4-83-778.
- Melezhik V.S.-J. Comp. Phys. 1986, 65, p.1
- Melezhik V.S., Pusynin I.V., Puzynina T.P., Somov L.N.-J. Comp. Phys. 1984, 54, p.221.
- Винницкий С.И. и др.-ОИИ, P4-10942, Дубна, 1977.
- Гочева А.Д., Пузынин И.В.-СИИ, P11-87-159, Дубна, 1987.
- Ермаков В.В., Калиткин П.Н.-ИЗМ и МЭ, 1981, т.21, 2, с.491.
- Гавурин А.К.-Изв.вузов. Математика, 1958, т.5/6, с.18.
- Лидков Е.П., Пузынин И.В.-ДАН СССР, 1967, т.174, 2, с.271.
- Лидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В.-СИИ, 1973, 4, с.127.

$$\text{*) } y_0^{(3)}(R) = \begin{cases} 0, & R \leq 47 \\ y_0^{(2)}, & R > 47 \end{cases}$$

$$\text{**) } y_0^{(4)}(R) = \begin{cases} 0, & R \leq 54 \\ y_0^{(2)}, & R > 54 \end{cases}$$

Рукопись поступила в издательский отдел
28 декабря 1988 года.

Смирнов Ю.С.

P11-88-912

Алгоритм и программа для решения многоканальной задачи рассеяния с матрицами потенциалов специального вида

Представлен алгоритм численного решения многоканальной задачи рассеяния для матриц потенциалов специального вида, возникающей при описании рассеяния мезоатомов на ядрах в адиабатическом представлении. Алгоритм разработан на основе непрерывного аналога метода Ньютона с включением возмущения и оптимальным выбором итерационного шага. Приведено описание программы `MULTCH` на языке ФОРТРАН для ЕС ЭВМ, реализующей этот алгоритм. Рассмотрены примеры использования программы, демонстрирующие достаточную устойчивость итерационной схемы по отношению к ошибкам в задании начального приближения.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод О.С.Виноградовой

Smirnov Yu.S.

P11-88-912

Algorithm and Program for Numerical Solution of a Multichannel Scattering Problem with a Special Kind Potential Matrices

An algorithm is presented for numerical solution of a multichannel scattering problem with a special kind potential matrices. The problem arises when describing the mesic atom scattering on nuclei in an adiabatic representation. The algorithm is elaborated on the basis of continuous analog of Newton method with perturbation inclusion and an optimal iteration step choice. The `MULTCH` program in FORTRAN language for the ES-computer realizing the algorithm is given. Some examples of program using are considered which demonstrate a sufficient stability of iteration scheme with reference to errors in initial approximation assignment.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Technique and Automations, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988