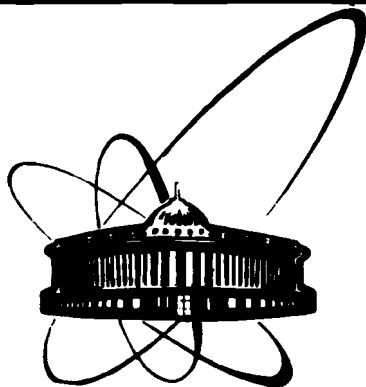


89-865



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

В 486

P11-89-865

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, Ю.С.Смирнов

**РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА ОСНОВЕ
МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ НЬУТОНОВСКИХ СХЕМ
Одноканальное рассеяние**

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1989

1. Введение

Многоканальная задача рассеяния для системы радиальных уравнений Шредингера

$$(\mathcal{H}-k^2)\psi = \left(-\Gamma \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r, \gamma) - k^2\right) \psi(r, k) = 0 \quad (1)$$

заключается в нахождении регулярных решений $\psi(r, k)$ с асимптотическими условиями:

$$\psi(r, k) \approx r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0, \quad (2)$$

$$\psi(r, k) \approx A \sin(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta), \quad r \rightarrow \infty, \quad (3)$$

где Γ - единичная матрица, l и k - диагональные матрицы орбитальных моментов и импульсов ($k^2 > 0$), $V(r, \gamma)$ - симметричная матрица потенциалов, $\gamma > 0$ - константа взаимодействия ^{/1/}. Искомыми параметрами являются фазы рассеяния δ и амплитуды A . Для решения этой задачи применяются как прямые методы численного интегрирования, так и вариационные подходы ^{/2/}.

Вариационные постановки задачи (1) - (3) на полуоси $r \in [0, \infty)$ вытекают из свойства стационарности функционала

$$\mathcal{F}(\psi) = \langle \psi, (\mathcal{H} - k^2) \psi \rangle \quad (4)$$

на классе функций $\psi(r, k)$ со скалярным произведением в смысле ^{/1/} относительно любой вариации, сохраняющей амплитуды A и фазы δ . Наиболее удобной является формулировка Хальтена, в которой используется дополнительное условие ^{/3/}

$$\mathcal{F}(\psi) = 0 \quad (5)$$

Это обстоятельство дает возможность рассматривать задачу (1)-(5) как нелинейное функциональное уравнение

$$\mathcal{F}(z) = 0 \quad (6)$$

относительно неизвестной $z = \{\psi, A, \delta\}$ и применить для его решения метод Ньютона ^{/4/}:

$$\begin{cases} \Phi'_z(z_n) \Delta z_n = -\mathcal{F}(z_n), \\ z_{n+1} = z_n + \tau_n \Delta z_n. \end{cases}$$

где $\Phi'_z(z_n)$ - производная Фреше функции Φ ,
 τ_n - итерационный параметр.

Ограничимся одноканальной задачей рассеяния. Тогда для $A=1$ ньютоновская итерационная схема (7) при $\tau_n=1$ реализует на каждой итерации уточнение фазы в соответствии с вариационным принципом (4)

$$\delta_{n+1} = \delta_n + k^{-1} (\psi_n, (\mathcal{H} - k^2) \psi_n) \quad (8)$$

и уточнение "пробной" функции $\psi_t = \psi_n$ по формуле

$$\psi_{n+1} = \psi_n + \Delta \psi_n \quad (9)$$

Поправка $\Delta \psi_n$ находится из краевой задачи

$$(\mathcal{H} - k^2) \Delta \psi_n = -(\mathcal{H} - k^2) \psi_n \quad (10)$$

с граничными условиями, следующими из (2), (3).

В рамках той же схемы можно получить уточнение величины $K = \text{tg} \delta$:

$$K_{n+1} = K_n - (\psi_n, (\mathcal{H} - k^2) \psi_n) \quad (11)$$

если положить $A = (\sqrt{K} \cos \delta)^{-1}$ и рассматривать регулярные решения $\psi(r, k)$ с асимптотикой

$$\psi(r, k) \approx \frac{1}{\sqrt{K}} \left[\sin(kr - \frac{\pi l}{2}) + \cos(kr - \frac{\pi l}{2}) K \right] \quad (12)$$

При орбитальном моменте $l=0$ величина $a^0 = -k^{-1} \text{tg} \delta$ в пределе $k \rightarrow 0$ имеет смысл длины рассеяния, и соотношение (11) принимает вид

$$a^0_{n+1} = a^0_n + (\psi_n, \mathcal{H} \psi_n) \quad (13)$$

для регулярных решений $\psi(r)$ с асимптотикой

$$\psi(r) \approx -a^0 + r \quad (14)$$

Вариационный принцип для длины рассеяния дает одностороннюю оценку ^{/1/}

$$a^0 \leq a^0_t + (\psi_t, \mathcal{H} \psi_t) \quad (15)$$

Рассмотренная итерационная схема позволяет вычислить величину фазы δ при фиксированном значении $k=k_*$ (или энергии $E=E_*$, $k^2=2ME$, где M - приведенная масса сталкивающихся фрагментов). Однако в задаче рассеяния реальный интерес представляет изучение зависимости $\delta = \delta(k)$ (или $\delta = \delta(E)$). Для построения такой кривой число точек по k можно значительно уменьшить, если известна производная $\partial \delta / \partial k$ (или $\partial \delta / \partial E$). С помощью производной $\partial \delta / \partial k$ можно контролировать точность вычислений и качество "пробных" функций $\psi = \psi_t$, используя теорему вириала ^{/3/}

$$A^2 k^2 \frac{\partial \delta}{\partial k} = (\psi, (2V + r \frac{\partial V}{\partial r}) \psi) . \quad (16)$$

Кроме того, знание $\delta\delta/\partial E$ полезно для качественного определения ширины Γ резонансных состояний /5/ с энергией $E=E_0 - i\Gamma/2$:

$$\Gamma \approx 2 \frac{\partial \delta(E)}{\partial E} \Big|_{E=E_0} . \quad (17)$$

Последнее следует из представления фазы рассеяния в области резонанса

$$\delta(E) = \delta_{\text{pot}}(E) - \text{arctg} \frac{\Gamma}{2(E-E_0)} \quad (18)$$

при дополнительном предположении $\partial \delta_{\text{pot}}/\partial E \ll 2/\Gamma$ /1/. Энергия резонанса $E \gg \Gamma$ находится при этом из условий

$$\delta(E_0) = \pi(n+1/2), \quad \partial \delta/\partial E \Big|_{E=E_0} > 0, \quad (19)$$

где $n=\delta(0)/\pi$ - число связанных состояний в потенциале $V(r, l) = l(l+1)r^{-2} + V(r, r)$. В частности, если $V(r, r) = 2\mu U(r)$, то в качестве r можно рассматривать $r=M$ /6/.

В данной работе для решения одноканальной задачи рассеяния (1)-(5) применяется многопараметрическая итерационная схема, которая обобщает метод (7). Представленный алгоритм позволяет находить регулярное решение $\phi(r, k)$ и его производную $\partial \phi(r, k)/\partial k$, значения фазы $\delta(k)$ и ее производных $\partial \delta/\partial k$ и $\partial \delta/\partial E$, а также зависимости $\delta(k)$, $\delta(E)$ и длину рассеяния $a^0 \approx -\partial \delta/\partial k \Big|_{k \rightarrow 0}$. Результаты вычислений для некоторых потенциалов сравниваются с известными.

2. Многопараметрическая ньютоновская итерационная схема

Основная идея построения обобщенной итерационной схемы, сформулированная в работе /7/, состоит в использовании зависимости от физических параметров g исходной задачи (6):

$$\phi(g, z) = 0 . \quad (20)$$

Нужное значение $g=g_*$, при котором требуется найти искомое z , фиксируется в слабом смысле дополнительным асимптотическим условием

$$\mathcal{F}(g_*, z) = 0 . \quad (21)$$

Решение переформулированной таким образом исходной задачи (6)

$$\Phi(g, z) = \left\{ \begin{array}{l} \phi(g, z) \\ \mathcal{F}(g_*, z) \end{array} \right\} = 0 \quad (22)$$

осуществляется с помощью многопараметрической ньютоновской итерационной схемы

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi'_g \Delta g_n + \Phi'_z \Delta z_n = -\Phi(g_n, z_n) , \\ g_{n+1} = g_n + \tau_n \Delta g_n , \quad z_{n+1} = z_n + \tau_n \Delta z_n , \end{array} \right. \quad (23)$$

в которой стремление $g \rightarrow g_*$ обеспечивается присоединением асимптотической компоненты (21) к (20). Данная схема в отличие от стандартной (7) позволяет находить наряду с неизвестной z ее производную $\partial z/\partial g \Big|_{g=g_*}$. Это обстоятельство в дальнейшем дает возможность при вычислении элемента z_* траектории $z_*(g)$ в точке $g=g_*+\Delta g_*$ использовать хорошее начальное приближение $z_0(g) = z_*(g) \Big|_{g=g_*} + \Delta g_* \partial z_*/\partial g \Big|_{g=g_*}$, что позволяет сократить число итераций в процессе (23).

Для задачи рассеяния в качестве g можно выбрать, например, параметр k . Тогда условие (21) приобретает вид

$$\mathcal{F}(k_*, \phi) = (\phi, (\mathcal{K}-k_*^2)\phi) . \quad (24)$$

При этом итерации по параметру k в окрестности $k=k_*$ служат для определения интересующих нас производных по этому параметру. Другая возможность, которая детально исследована в /7/, состоит в выборе в качестве g константы взаимодействия γ (см. (1)). Тогда условие (21) имеет вид

$$\mathcal{F}(\gamma_*, \phi) = (\phi, (\mathcal{K}(\gamma_*)-k^2)\phi) . \quad (25)$$

Оно позволяет контролировать согласно теореме Гельмана - Фейнмана величину

$$\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \gamma} = -(\phi, \frac{\partial}{\partial \gamma} V(r, r)\phi) , \quad (26)$$

а также получать односторонние оценки элементов K -матрицы /8/.

Рассмотренные итерационные схемы можно применять для уточнения различных вариационных расчетов в задаче рассеяния. В них используется формулировка всех уравнений на полуоси $r \in [0, \infty)$.

3. Реализация итерационной схемы

Рассмотрим краевую задачу для радиального уравнения Шредингера на отрезке $[0, R]$, $R \rightarrow \infty$

$$\phi^{(1)} = \left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r, r) + k^2 \right\} \phi(r) = 0 \quad (27)$$

с однородными граничными условиями

$$\phi^{(2)} = \lim_{r \rightarrow 0} \left[a \phi_r' + b \phi \right] = 0, \quad (28)$$

$$\phi^{(3)} = \lim_{r \rightarrow \infty} \left[c \phi_r' + d \phi \right] = 0, \quad (29)$$

где константы a, b, c и d определяются асимптотическими условиями (2), (3). Задача (27)-(29), аппроксимирующая при $kR > 1$ задачу (1)-(3) на полуоси $r \in [0, \infty)$, доопределяется вариационным условием

$$\phi^{(4)} = \mathcal{F}(k, \phi) = (\phi, \phi^{(1)}(k, \phi)) = 0 \quad (30)$$

и асимптотическим условием

$$\phi^{(5)} = \mathcal{F}(k_*, \phi) = (\phi, \phi^{(1)}(k_*, \phi)) = 0, \quad (31)$$

фиксирующим в слабом смысле значение $k = k_* > 0$. В результате имеем нелинейную задачу

$$\phi(z) = 0, \quad (32)$$

где $\phi = \{ \phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \phi^{(3)}, \phi^{(4)}, \phi^{(5)} \}$ - пятикомпонентная нелинейная функция, а неизвестный элемент z представляет собой тройку $z = \{k, \phi, \delta\}$.

Непрерывный аналог метода Ньютона сводит решение уравнения (32) к решению задачи Коши

$$\begin{cases} \phi_2'(z) \frac{dz(t)}{dt} = -\phi(z), \\ 0 \leq t < \infty, \quad z(0) = z_0, \end{cases} \quad (33)$$

где t - дополнительный параметр погружения, от которого зависят компоненты элемента

$$z(t) = \{ k(t), \phi(r, t, k(t)), \delta(t, k(t)) \},$$

z_0 - начальное приближение к искомому решению z_* .

Известно, что при выполнении условия гладкости оператора ϕ и существования ограниченного оператора $(\phi_2')^{-1}$ в окрестности искомого решения $z = \{k_*, \phi_*(r), \delta_*\}$ справедливо соотношение /9, 10/

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z_* - z(t)\| = 0. \quad (34)$$

Ньютоновский процесс (33) для задачи (32) определяется соотношением

$$\Phi_k \frac{dk}{dt} + \Phi_\psi \frac{d\psi}{dt} + \Phi_\delta \frac{d\delta}{dt} = -\phi(k, \psi, \delta). \quad (35)$$

Производные $\frac{d\psi}{dt}$ и $\frac{d\delta}{dt}$ имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dt} &= \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial k} \frac{dk}{dt} + \frac{\partial \psi}{\partial \delta} \frac{d\delta}{dt}, \\ \frac{d\delta}{dt} &= \frac{\partial \delta}{\partial t} + \frac{\partial \delta}{\partial k} \frac{dk}{dt}. \end{aligned} \quad (36)$$

Подставляя выражения (36) в соотношение (35), находим

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\phi. \quad (37)$$

В соотношениях (35)-(36) вместо дифференцирования по k можно воспользоваться также дифференцированием по $\lambda = k^2 = 2ME$ или по $E = k^2/2M$. Перепишем покомпонентно уравнение (35):

$$\begin{cases} \Phi_\psi^{(1)} \frac{d\psi}{dt} + \Phi_k^{(1)} \frac{dk}{dt} = -\phi^{(1)}, \\ \Phi_\psi^{(2)} \frac{d\psi}{dt} = -\phi^{(2)}, \\ \Phi_\psi^{(3)} \frac{d\psi}{dt} + \Phi_k^{(3)} \frac{dk}{dt} + \Phi_\delta^{(3)} \frac{d\delta}{dt} = -\phi^{(3)}, \\ \Phi_\psi^{(4)} \frac{d\psi}{dt} + \Phi_k^{(4)} \frac{dk}{dt} = -\phi^{(4)}, \\ \Phi_\psi^{(5)} \frac{d\psi}{dt} = -\phi^{(5)}. \end{cases} \quad (38)$$

Подставляя (36) в первые три уравнения системы (38), получим две краевые задачи для нахождения поправок $\partial\psi/\partial\delta$ и $\partial\psi/\partial k$:

$$\begin{cases} \Phi_\psi^{(1)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right] = 0, \\ \Phi_\psi^{(2)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right] = 0, \\ \Phi_\psi^{(3)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right] = -\Phi_\delta^{(3)}(\psi); \end{cases} \quad (39)$$

$$\begin{cases} \Phi_\psi^{(1)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial k} \right] = -\Phi_k^{(1)}(\psi), \\ \Phi_\psi^{(2)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial k} \right] = 0, \\ \Phi_\psi^{(3)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial k} \right] = -\Phi_k^{(3)}(\psi). \end{cases} \quad (40)$$

Аналогичным образом, используя линейность четвертого

уравнения в системе (38) относительно dk/dt , получаем

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = - \frac{\Phi^{(4)}(\psi) + \Phi_{\psi}^{(4)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial t} \right]}{\Phi_{\psi}^{(4)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right]}, \quad (41)$$

$$\frac{\partial \delta}{\partial k} = - \frac{\Phi_k^{(4)}(\psi) + \Phi^{(4)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial k} \right]}{\Phi_{\psi}^{(4)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right]}. \quad (42)$$

Подставляя эти величины $\frac{\partial \delta}{\partial t}$ и $\frac{\partial \delta}{\partial k}$ в пятое уравнение системы (38), находим

$$\frac{dk}{dt} = - \frac{\Phi^{(5)}(\psi) + \Phi_{\psi}^{(5)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial t} \right] + \Phi_{\psi}^{(5)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right] \frac{d\delta}{dt}}{\Phi_{\psi}^{(5)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial \delta} \right] \frac{\partial \delta}{\partial k} + \Phi_{\psi}^{(5)} \left[\frac{\partial \psi}{\partial k} \right]}. \quad (43)$$

Метод Эйлера /10/ решения задачи (33) является полудискретным представлением рассматриваемого непрерывного процесса и аналогичен методу прямых для решения уравнения в частных производных. При его применении полуинтервала $0 \leq r < R$, $0 \leq t < \omega$ разбивается прямыми $t=t_n$ ($t_{n+1}=t_n + \tau_n$, $t_0=0$, $n=1,2,\dots$), параллельными отрезку $r \in [0, R]$. Если на прямой $t=t_n$ известны функции $k_n=k(t_n)$, $\psi_n(r)=\psi(r, t_n, k_n, \delta_n)$ и $\delta(t_n, k_n)$, то для того, чтобы определить их на следующей прямой $t=t_{n+1}$, необходимо:

- 1) решить краевые задачи (39) и (40) относительно

$$\text{поправок } u_n = \frac{\partial \psi}{\partial \delta} \Big|_{t=t_n} \text{ и } v_n = \frac{\partial \psi}{\partial k} \Big|_{t=t_n};$$

- 2) найти $\frac{\partial \delta}{\partial t} \Big|_{t=t_n}$ и $\frac{\partial \delta}{\partial k} \Big|_{t=t_n}$ из (41), (42);

- 3) определить $\frac{dk}{dt}$ из (43);

- 4) вычислить $\frac{d\delta}{dt} \Big|_{t=t_n}$ и $\frac{d\psi}{dt} \Big|_{t=t_n}$ согласно (36);

- 5) с помощью формул

$$\begin{aligned} k_{n+1} &= k_n + \tau_n \frac{dk}{dt} \Big|_{t=t_n} \\ \delta_{n+1} &= \delta_n + \tau_n \frac{d\delta}{dt} \Big|_{t=t_n} \\ \psi_{n+1} &= \psi_n + \tau_n \frac{d\psi}{dt} \Big|_{t=t_n} \end{aligned} \quad (44)$$

следующих из конечноразностных аппроксимаций соотношений (36), определить новое приближение на прямой $t=t_{n+1}$. Если заданы подходящие начальные условия k_0, ψ_0, δ_0 , то итерационный процесс

1) - 5) можно последовательно реализовать для $n=0, 1, 2, \dots$ до

достижения необходимой точности вычисления фазы δ_* и регулярных решений $\psi_*(r)$ при заданном значении $k=k_*$. Для выбора итерационного шага τ_n используем способ, основанный на минимизации невязки /11/.

4. Вычислительные детали

Решение краевых задач (39), (40) можно реализовать любым известным методом. В данной работе используется конечноразностная аппроксимация этих задач на равномерной сетке $\Omega_n = \{ 0=r_0; r_1=1h; 1=1, 2, \dots, N; r_N=R \}$ с точностью $O(h^2)$. Выбор величины R определяется условием $kR > 1$. Разностные краевые задачи, аппроксимирующие задачи (39) и (40), решаются методом прогонки. Условием окончания итерационного процесса на итерации с номером n служит следующее соотношение:

$$\max \left\{ \|\Phi(z_n)\|_n, \left| \frac{dk}{dt} \Big|_{t=t_n}, \left| \frac{d\delta}{dt} \Big|_{t=t_n} \right. \right\} < \varepsilon, \quad (45)$$

где $\|\Phi(z_n)\|_n$ - норма сеточного оператора, аппроксимирующего $\Phi(z_n)$, а $\varepsilon > 0$ - наперед заданное достаточно малое число. В расчетах задавалось $\varepsilon = 10^{-6} \div 10^{-12}$.

Представленный алгоритм реализован на языке FORTRAN-77 и адаптирован в версии RM на персональном компьютере типа IBM PC-XT.

5. Численные результаты и обсуждения

Для анализа точности вычислительной схемы удобно рассматривать примеры с известными аналитическими решениями. Одним из них является одномерная задача

$$\Phi^{(1)} = \left\{ \frac{d^2}{dx^2} - 2MU(x) + k^2 \right\} \Phi(x, k) = 0 \quad (46)$$

с потенциалом Морзе /12/

$$U(x) = D \left[e^{-2\alpha(x-x_a)} - 2e^{-\alpha(x-x_a)} \right]. \quad (47)$$

Аналитическое решение $\Phi(x, k)$, соответствующее непрерывному спектру $k > 0$, имеет вид /13/

$$\Phi(x, k) = \frac{e^{\xi/2}}{2i} \left[e^{i\omega} \xi^{-1/2} F(-d+1/2-1s, 1-21s, \xi) - \right.$$

$$- e^{-i\omega} \xi^{1s} \Gamma(-d+1/2+ts, 1+2ts, \xi) \Big], \quad (48)$$

где Γ - вырожденная гипергеометрическая функция ;

$$\xi = 2d e^{-\alpha(x-x_a)} ; \quad d = \sqrt{2MD}/\alpha ; \quad s = k/\alpha ; \quad (49)$$

$$\omega = \arg \Gamma(1+2ts) + \arg \Gamma(-d+1/2-ts),$$

здесь Γ - гамма-функция.

Особенностью рассматриваемой задачи является то обстоятельство, что независимая переменная x изменяется на всей оси $-\infty < x < +\infty$, причем

$$U(x) \Big|_{x \rightarrow -\infty} \rightarrow +\infty, \quad (50)$$

$$U(x) \Big|_{x \rightarrow +\infty} \rightarrow 0,$$

а функция $\psi(x, k)$ имеет асимптотику вида

$$\psi(x, k) \Big|_{x \rightarrow -\infty} \rightarrow 0, \quad (51)$$

$$\psi(x, k) \Big|_{x \rightarrow +\infty} \rightarrow \sin(kx + \delta).$$

Здесь величина

$$\delta = -kx_a - s \ln(2d) + \omega \quad (52)$$

соответствует фазе рассеяния в радиальной задаче (1)-(3).

Задачу рассеяния для уравнения (46) с потенциалом Морзе (47) можно аппроксимировать на конечном интервале $x_{min} \leq x \leq x_{max}$ с однородными граничными условиями

$$\psi^{(2)} = \psi(x, k) \Big|_{x=x_{min}} = 0, \quad (53)$$

$$\psi^{(3)} = [c\psi'_x - d\psi] \Big|_{x=x_{max}} = 0, \quad (54)$$

где константы c и d определяются из асимптотического условия (51). В численном примере значения параметров

$$M = 8.876, \quad D = 0.104, \quad \alpha = 0.67, \quad x_a = 2.09 \quad (55)$$

соответствуют работе [14]. Этот потенциал изображен на рис.1.

Точность численных результатов зависит от параметров разностной сетки $\Omega_n = \{x_{min}=x_0; x_i+ih; i=1,2,\dots,N; x_N=x_{max}\}$. Необходимые значения параметров x_{min} , x_{max} , h определялись путем вычислений на последовательности различных сеток.

В таблице 1 представлена зависимость величины δ от значения x_{max} . Из таблицы следует, что при указанном шаге сетки h точность вычислений порядка 10^{-4} устанавливается при $x_{max} \geq 25$.

Таблица 1. Фазы рассеяния $-\delta$ в зависимости от значения x_{max} ($x_{min}=-5.0, h=0.025$)

k	$x_{max}=15.0$	$x_{max}=20.0$	$x_{max}=25.0$	$x_{max}=30.0$	$x_{max}=35.0$
1.E-4	6.65490E-4	6.56611E-4	6.55896E-4	6.55851E-4	6.55849E-4
0.08	0.5270446	0.5212865	0.5209382	0.5209233	0.5209225
0.10	0.6552786	0.6489196	0.6485982	0.6485880	0.6485883
0.14	0.9052332	0.8989743	0.8987987	0.8988000	0.8988011
0.20	1.261918	1.258192	1.258188	1.258179	1.258174

Таблица 2. Фазы рассеяния $-\delta$ в зависимости от значения x_{min} ($x_{max}=30.0, h=0.025$)

k	$x_{min}=-5.0$	$x_{min}=-3.0$	$x_{min}=-1.0$	$x_{min}=-0.5$	$x_{min}=0.0$
1.E-4	6.55851E-4	6.55851E-4	6.55851E-4	6.55869E-4	6.58407E-4
0.08	0.5209233	0.5209233	0.5209233	0.5209371	0.5228852
0.10	0.6485880	0.6485880	0.6485880	0.6486049	0.6509868
0.14	0.8988000	0.8988000	0.8988000	0.8988223	0.9019789
0.20	1.258179	1.258179	1.258179	1.258208	1.262287

Таблица 3. Фазы рассеяния $-\delta$ для потенциала Морзе при $x \in [-5.0, 35.0]$

k	$h=0.1$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$	$\delta_{аналит.}$	$\delta^{14/}$
1.E-4	6.54553E-4	6.55590E-4	6.55849E-4	6.55935E-4	6.55936E-4	-
0.08	0.5199085	0.5207200	0.5209225	0.5209900	0.5209912	0.5202
0.10	0.6473459	0.6483402	0.6485883	0.6486710	0.6486725	-
0.14	0.8971780	0.8984769	0.8988011	0.8989091	0.8989100	0.8897
0.20	1.255900	1.257720	1.258174	1.258325	1.258328	1.233

В таблице 2 приведена зависимость фазы δ от параметра x_{min} . Точность $\approx 10^{-5}$ достигается уже при значениях $x_{min} = -1$.

В таблице 3 представлены величины δ , вычисленные на последовательности сгущающихся разностных сеток Ω_h при фиксированных значениях $x_{min} = -5$, $x_{max} = 35$, и выполнена экстраполяция по Ричардсону для $h \rightarrow 0$ ^{15/}. Сходимость сеточных

решений соответствует теоретической $O(h^2)$, так как величина $\sigma = (\delta_h - \delta_{h/2}) / (\delta_{h/2} - \delta_{h/4}) \in [4.004; 4.009]$.

В этой же таблице экстраполированные значения величины δ сравниваются с аналитическими значениями, вычисленными по формуле (52), а также с результатами численного расчета ^{14/}. Анализ результатов показывает, что экстраполированные значения обеспечивают точность вычисления фазы $\approx 10^{-4} \div 10^{-5}$. Результаты работы ^{14/} совпадают с аналитическими лишь с двумя верными знаками, что обусловлено неверной постановкой задачи на полуоси.

На рис.2 представлено поведение фазы рассеяния δ в зависимости от величины $\lambda = k^2$, изменяющейся в интервале от 0.01 до 4.0. На рис.3 (эпюр) изображена зависимость $\delta(\lambda)$ при более низких "энергиях" $\lambda \in [0.000001; 0.09]$. На рис.4 и 5 представлены соответствующие зависимости $tg(\delta(\lambda))$. На рис.6 изображена сходимость приближений к волновой функции $\psi(x, k)$ для $k=0.2$ ($\lambda=0.04$); отметим, что уже после первой итерации ($n=1$) волновая функция принимает форму, близкую к решению, и отличается величиной амплитуды A . При $n=5$ приближенная амплитуда достаточно близка к искомой с заданной точностью амплитуде решения ($n=12$). На рис.7 изображена сильно осциллирующая волновая функция $\psi(x, k)$, вычисленная при $k=2.0$. На рис.8 показано поведение производной $\frac{\partial \delta}{\partial k}$. График $\frac{\partial \delta}{\partial k}$ при низких энергиях $\lambda \in [0.000001; 0.09]$ представлен на рис.9 (эпюр рис.8). При энергиях, близких к нулю, можно оценить длину рассеяния по формуле

$$a^0 = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{tg \delta_0(k)}{k} \approx - \frac{\partial \delta}{\partial k} \Big|_{k=0} \quad (56)$$

Длина рассеяния, вычисленная для потенциала Морзе (47), (55) при $\lambda=0.000001$ ($k=0.001$), равна $a^0 = 6.5715 \geq 2\pi$, что подтверждает вариационную оценку (15). Из рис.9 видно, что при малых k ($k \leq 0.05$) величина производной $\frac{\partial \delta}{\partial k}$ стабилизируется именно в этом интервале, что подтверждает корректность проведенных расчетов.

Численные расчеты проводились также для некоторых модельных потенциалов ^{11, 12/}, вид которых указан в заголовках к таблицам.

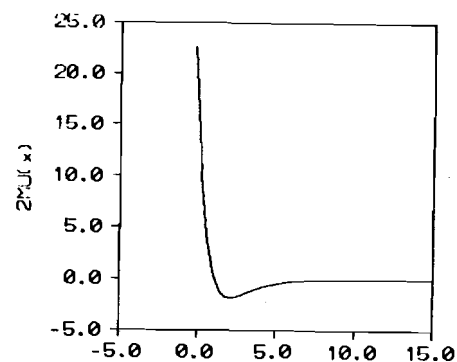


Рис. 1. Вид потенциала Морзе $2MU(x)$ с параметрами (55)

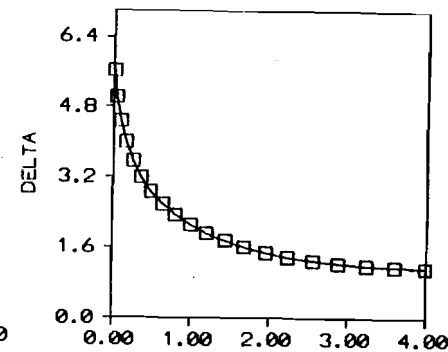


Рис. 2. Зависимость фазы рассеяния δ от $\lambda = k^2 \in [0.01; 4.0]$

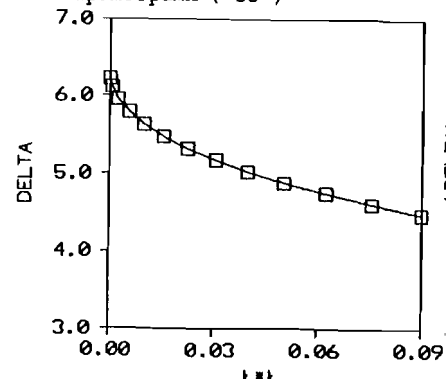


Рис. 3. Зависимость фазы рассеяния δ от $\lambda = k^2 \in [0.000001; 0.09]$

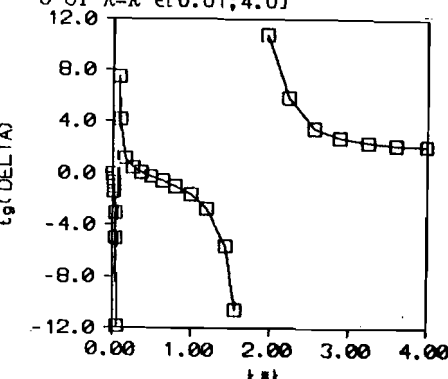


Рис. 4. Зависимость $tg(\delta)$ от $\lambda = k^2 \in [0.01; 4.0]$

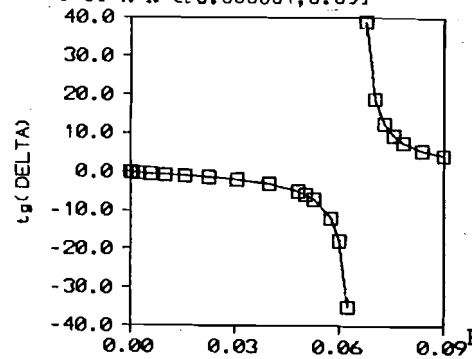


Рис. 5. Зависимость $tg(\delta)$ от $\lambda = k^2 \in [0.000001; 0.09]$

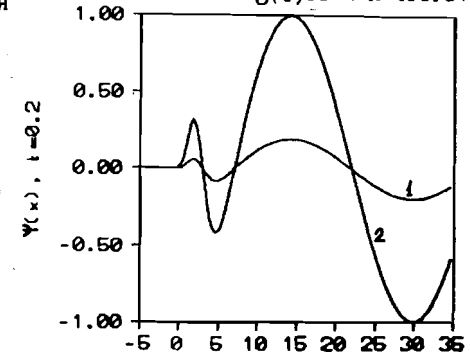


Рис. 6. Сходимость волновой функции $\psi(x, k)$ при $k=0.2$ ($\lambda=0.04$). Кривые: 1 — после 1-й итерации ($n=1$); 2 — после 5-й, 12-й итераций ($n=5, 12$)

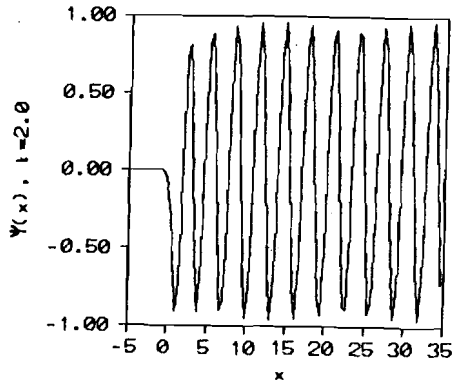


Рис. 7. Волновая функция $\psi(x, k)$ при $k=2.0$ ($\lambda=4.0$)

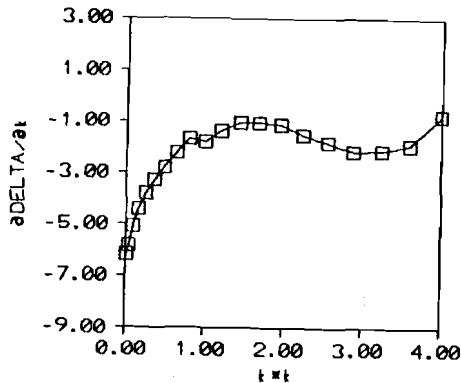


Рис. 8. Зависимость $\partial\delta/\partial k$ от $\lambda=k^2 \in [0.01; 4.0]$

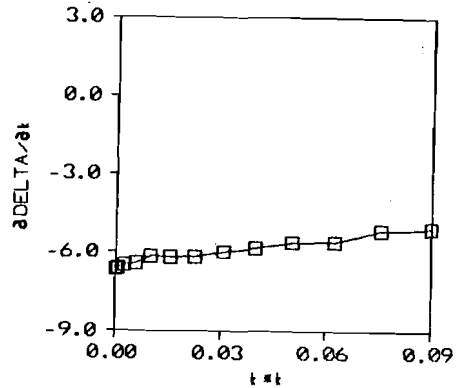


Рис. 9. Зависимость $\partial\delta/\partial k$ от $\lambda=k^2 \in [0.000001; 0.09]$

Таблица 4. $\text{tg}(\delta)$ для экспоненциального потенциала: $V(r)=-2e^{-r}$, $l=0$

k	R	$h=R/200$	$h/2$	$h/4$	$h/8$	$h \rightarrow 0$
0		8.683681	8.690930	8.692748	8.693203	8.693354
0.5		2.650367	2.641681	2.639489	2.638952	2.638774
1.0		1.002475	0.9927651	0.9903340	0.9897241	0.9895205
2.0	6π	0.5557768	0.5055433	0.4932165	0.4901458	0.4891232
3.0		0.5432090	0.3800470	0.3415384	0.3320138	0.3288480
4.0		0.7943972	0.3669275	0.2770730	0.2551244	0.2478540
5.0		1.723414	0.4334931	0.2552706	0.2128442	0.1988913

Таблица 5. $\text{tg}(\delta)$ для потенциала Юкавы: $V(r)=-2e^{-r}/r$, $l=0$

k	R	$h=R/400$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$
0		7.940155	7.918641	7.913233	7.911428
0.5		8.368551	8.427201	8.442024	8.446979
1.0		1.931457	1.929310	1.928765	1.928583
2.0	6π	1.029809	1.011460	1.006908	1.005394
3.0		0.8074907	0.7548515	0.7420618	0.7378314
4.0		0.7533266	0.6355502	0.6078951	0.5988358
5.0		0.8115805	0.5788347	0.5273115	0.5107294

Таблица 6. $\text{tg}(\delta)$ для статического потенциала атома водорода: $V(r)=-2(1+1/r)e^{-2r}$, $l=0$

k	R	$h=R/200$	$h/2$	$h/4$	$h/8$	$h \rightarrow 0$
0.1		0.8609456	0.8758981	0.8797211	0.8806822	0.8810031
0.3	5π	1.698892	1.718757	1.723801	1.725067	1.725489
0.5		1.706735	1.718113	1.720985	1.721704	1.721944
1.0		1.273307	1.274245	1.274476	1.274533	1.274552
2.0	3π	0.8420367	0.8357669	0.8341917	0.8337943	0.8336615
3.0		0.6735536	0.6519016	0.6465226	0.6451780	0.6447299
4.0		0.6026924	0.5523060	0.5399580	0.5368825	0.5358580

Таблица 7. $\text{tg}(\delta)$ для сферически - симметричного потенциала: $V(r)=-\lambda e^{-(r/b)}$, $\lambda=2.6409$, $b=0.71233$, $l=0$

k	R	$h=R/200$	$h/2$	$h/4$	$h/8$	$h \rightarrow 0$
0.25		1.989304	1.981811	1.979927	1.979455	1.979298
0.5	8π	1.361731	1.355371	1.353775	1.353374	1.353240
0.75		1.004864	0.9942671	0.9916141	0.9909492	0.9907274
1.0		0.7860342	0.7837651	0.7831950	0.7830517	0.7830040
1.5	4π	0.5643362	0.5581700	0.5566261	0.5562396	0.5561108
2.0		0.4508802	0.4372133	0.4338022	0.4329473	0.4326622

Таблица 8. $\text{tg}(\delta)$ для экспоненциального потенциала.
Сравнение результатов

k	R	Метод Р-К	Метод ИУФ	Метод С-К	Наст. раб.
0	6 π	8.694	8.6933	8.693356	8.693354
0.5		2.6388	2.6388	2.638767	2.638774
1.0		0.98952	0.98951	0.989521	0.9895205
2.0		0.48912	0.48912	0.4891233	0.4891232
3.0		0.32885	0.32885	0.3288462	0.3288480
4.0		0.24784	0.24784	0.2478449	0.2478540
5.0		0.19882	0.19882	0.1988233	0.1988913

Таблица 9. $\text{tg}(\delta)$ для потенциала Юкавы.
Сравнение результатов

k	R	Метод Р-К	Метод ИУФ	Метод С-К	Наст. раб.
0	6 π	7.9	7.9119	7.911401	7.911428
0.5		8.4469	8.4276	8.446914	8.446979
1.0		1.9286	1.9284	1.928582	1.928583
2.0		1.0054	1.0054	1.005392	1.005394
3.0		0.73783	0.73781	0.7378258	0.7378314
4.0		0.59881	0.59880	0.5988096	0.5988358
5.0		0.51058	0.51057	0.5105779	0.5107294

Таблица 10. $\text{tg}(\delta)$ для статического потенциала атома
водорода. Сравнение результатов

k	R	Метод С-К	Наст. раб.
0.1	5 π	0.8810032	0.8810031
0.3		1.725489	1.725489
0.5		1.721944	1.721944
1.0	3 π	1.274552	1.274552
2.0		0.833664	0.8336615
3.0		0.644729	0.6447299
4.0		0.535857	0.5358580

Таблица 11. $\text{tg}(\delta)$ для сферически-симметричного
потенциала. Сравнение результатов

k	R	Метод Ф Ф	Метод С-К	Наст. раб.
0.25	8 π	1.980941	1.974334	1.979298
0.5		1.353756	1.347593	1.353240
0.75		0.990984	0.9847999	0.9907274
1.0	4 π	0.783173	0.779783	0.7830040
1.5		0.556214	0.5521893	0.5561108
2.0		0.432740	0.4279238	0.4326622

В таблицах 4 - 7 приведены вычисленные значения $\text{tg}\delta$ на последовательности сгущающихся разностных сеток Ω_n при фиксированном $R=R_{max}$ и сделана экстраполяция по Ричардсону /15/ для $h \rightarrow 0$.

В таблицах 8-11 экстраполированные значения сравниваются с результатами работ /16-19/. В таблицах 8 и 9 приведены значения $\text{tg}\delta$ и сравнение с результатами, полученными методом Рунге-Кутты (Р-К), методом интегрального уравнения Фредгольма (ИУФ) и методом сплайн-коллокации (С-К). В третьем столбце таблицы 11 приводятся результаты, полученные при помощи метода фазовых функций (метод Ф Ф). Причем в последних двух столбцах таблиц 8-11 даны экстраполированные значения $\text{tg}\delta$, полученные на последовательности сгущающихся сеток.

Имеется хорошее совпадение полученных результатов с известными. Однако для больших k требуется более густая сетка Ω_n , что связано с увеличением числа осцилляций волновых функций $\psi(r, k)$ в области изменения r .

6. Заключение

В работе дана новая многопараметрическая ньютоновская итерационная схема решения задачи рассеяния. Показано, что данная схема реализует уточнение параметров рассеяния в соответствии с тем или иным вариационным принципом в зависимости от формы дополнительного асимптотического вариационного условия и граничных условий в нелинейной постановке задачи рассеяния для

радиальных уравнений Шредингера. В отличие от существующих вычислительных схем, представленные алгоритмы дают возможность не только вычислить параметры рассеяния и волновые функции, но и численно проследить их эволюцию в окрестности заданного значения энергии столкновения. Разработанную схему легко распространить на многоканальный случай. Особенности многоканальной постановки будут рассмотрены в следующей работе.

Авторы выражают благодарность А.Г.Абрашкевичу за плодотворные обсуждения и Л.И.Пономареву за поддержку работы.

Литература

1. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969.
2. Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений. Ред. Олдер.Б. и др. М.: Мир, 1974.
3. Демков Ю.Н. Вариационные принципы теории столкновений. М.: ГИИМЛ, 1958.
4. Puzynin I.V., Vinitzky S.I. - Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.307.
5. Пономарев Л.И., Пузынин И.В. и др. Препринт ОИЯИ Р4-9915, Дубна, 1976; Ann. Phys. (N.Y.), 1978, v. 110, 2, p.274.
6. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Препринт ОИЯИ Р4-8884, Дубна, 1975; J. Comp. Phys., 1976, v. 22, 1, p. 125.
7. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Препринт ОИЯИ Р4-10942, Дубна, 1977.
8. Гайлитис М. - ЖЭТФ, 1964, т. 47, 7, с. 160.
9. Гавурин М.К. - Изв. высш. учебн. завед. Математика, 1958, т. 5, 6, с. 18.
10. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. - ЭЧАЯ, 1973, т. 4, 1, с. 127.
11. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. - ЖЕМ и МФ, 1981, т. 21, 2, с. 491.
12. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974, т. 1.
13. Alhassid Y., Gurgey F., Iachello F. - Ann. Phys., 1983, v. 148, p. 346.
14. Мележик В.С. Препринт ОИЯИ Р4-84-643, Дубна, 1984; J. Comp. Phys., 1986, v. 65, 1, p. 1.
15. Марчук Г.И., Шайдулов В.В. Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979.
16. Holt A.R., Santoso B. - J. Phys. B., 1972, v. 5, p. 497.
17. Llew Y.S., Quah L.S. - J. Phys. B., 1974, v. 7, p. 2495.
18. Газетова А.М., Жидков Е.П. и др. Сообщение ОИЯИ Р5-5395, Дубна, 1970.
19. Жанлаев Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. Сообщение ОИЯИ Р11-88-823, Дубна, 1988.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 декабря 1989 года.

Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С.
Решение задачи рассеяния на основе многопараметрических
ньютоновских схем. Одноканальное рассеяние

P11-89-865

Дана новая многопараметрическая ньютоновская итерационная схема решения задачи рассеяния. Установлена связь этой схемы с известными вариационными принципами задачи рассеяния. Данная схема реализует уточнение параметров рассеяния в соответствии с тем или иным вариационным принципом в зависимости от формы дополнительного асимптотического вариационного условия и граничных условий в нелинейной постановке задачи рассеяния для радиальных уравнений Шредингера. Схема позволяет находить регулярные волновые функции, значения фазы, ее производные относительно энергии и импульса, а также длины рассеяния и ширины резонансных состояний. Проведены расчеты для некоторых потенциалов и дано сравнение с известными результатами. Показана универсальность и эффективность вычислительной схемы для широкого интервала значений импульса. Программа реализована на ЭВМ ЕС-1061 и ПЭВМ типа IBM PC-XT.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Vinitzky S.I., Puzynin I.V., Smirnov Yu.S.
Solution of the Scattering Problem on the Base
of Multiparameter Newton Schemes. One-Channel Scattering

P11-89-865

New multiparameter Newton iteration scheme is suggested for solution of the scattering problem. A connection of this scheme with known variational principles of the scattering problem is determined. The scheme defines more precisely the scattering parameters according to the form of additional asymptotic variational condition and boundary conditions in the nonlinear representation of the scattering problem for the radial Schroedinger equation. The scheme allows to find regular wave functions, values of the phase and its derivatives relatively the energy and the momentum, scattering lengths and widths of the resonance states. The calculations have been performed for some potentials and comparison with the results obtained before is given. Universality and efficiency of the calculational scheme are shown. The program is realized for the ES-1061 and IBM PC-XT computers.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989