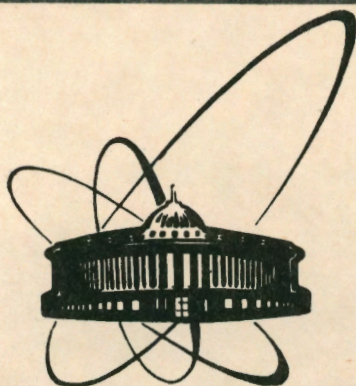


90-382



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P11-90-382

Т. Жанлав, И. В. Пузынин

МНОГОКАНАЛЬНАЯ ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ
В ПОСТАНОВКЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ГРАНИЧНОЙ
ЗАДАЧИ

1990

1. Постановка многоканальной задачи рассеяния как нелинейной краевой задачи

Задача о многоканальном рассеянии возникает, например, при описании процессов столкновения составных частиц^{/1-3/}, с учетом связи различных каналов реакций. В настоящее время существует ряд численных методов ее решения^{/1,4-7/}. В данной работе предлагается обобщение подхода, примененного нами ранее к одноканальной задаче рассеяния^{/8,9/}, на многоканальный случай.

Рассмотрим N -канальную задачу с m открытыми каналами, требующую при заданной энергии столкновения $E > 0$ найти m нетривиальных решений системы N дифференциальных уравнений

$$A y(z) = \left[I \frac{d^2}{dz^2} - 2Q \frac{d}{dz} + (2ME - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2}) I - U \right] y = 0, \quad (1)$$

регулярных в точке $z = 0$,

$$y(0) = 0, \quad (2)$$

и имеющих асимптотику при $z \rightarrow \infty$

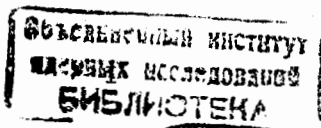
$$y(z) = \begin{cases} j_\ell(k_i z) - n_\ell(k_i z) T & \text{в открытых каналах,} \\ \exp(-|k_i|z) & \text{в закрытых каналах.} \end{cases} \quad (3)$$

Здесь I - единичная, а Q и U - матрицы потенциалов размерности $N \times N$ с известным асимптотическим поведением^{/5,6/}, y - вектор волновых функций размерности N , $j_\ell(z)$, $n_\ell(z)$ - функции Риккати-Бесселя^{/4/}, $M > 0$ приведенная масса, k_i - импульсы в i - м канале реакции:

$$k_i^2 = 2ME - U_{ii}(\infty) > 0 \quad \text{в открытых каналах (} i \leq m \text{)}$$

$$k_i^2 = U_{ii}(\infty) - 2ME > 0 \quad \text{в закрытых каналах (} i > m \text{).}$$

Полный набор решений представляет собой прямоугольную матрицу размерности $N \times m$:



$$y = y_i^{(v)} = \begin{pmatrix} y_1^{(1)} & \dots & y_1^{(m)} \\ y_2^{(1)} & \dots & y_2^{(m)} \\ \vdots & & \vdots \\ y_N^{(1)} & \dots & y_N^{(m)} \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим асимптотику решений (3) в открытых каналах. С учетом свойства функций Риккати-Бесселя при $z \rightarrow \infty$ ее можно записать в виде

$$y_i^{(v)} \rightarrow A_i^{(v)} \left[\sin(\kappa_i z - \frac{e\pi}{2} + \delta_i^{(v)}) + \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa_i z} \cos(\kappa_i z - \frac{e\pi}{2} + \delta_i^{(v)}) \right] + O(z^{-2}),$$

где

$$A_i^{(v)} = \delta_{iv} + (1 + \delta_{iv}) \sqrt{\frac{\kappa_i}{\kappa_i}} t_{iv} \cos \delta_v(E),$$

$$\delta_i^{(v)} = \delta_v(E) \delta_{iv} + \frac{\pi}{2} (1 - \delta_{iv}), \quad \delta_v(E) = \arctg t_{vv}(E).$$

Отсюда ясно, что

$$y_v^{(v)} \rightarrow \sin(\kappa_v z - \frac{e\pi}{2} + \delta_v) + \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa_v z} \cos(\kappa_v z - \frac{e\pi}{2} + \delta_v) + O(z^{-2}), \quad 1 \leq v \leq m \quad (4)$$

$$y_i^{(v)} \rightarrow A_i^{(v)} (\sin \beta_i + \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa_i z} \cos \beta_i) + O(z^{-2}), \quad i \neq v, \quad 1 \leq i \leq m,$$

$$\beta_i = \kappa_i z + \frac{\pi}{2} (1 - \ell).$$

Из (4) легко получаем равенства при $z \rightarrow \infty$

$$\kappa_v^2 (y_v^{(v)})^2 + (y_v^{(v)')^2} - \kappa_v^2 = 0, \quad 1 \leq v \leq m, \quad (5)$$

$$d_i \kappa_i y_i^{(v)} - c_i y_i^{(v)'} = 0, \quad i \neq v, \quad 1 \leq i \leq m,$$

где

$$d_i = \cos \beta_i - \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa_i z} \sin \beta_i; \quad c_i = \sin \beta_i + \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa_i z} \cos \beta_i.$$

Равенства (5) выполняются в конечной точке z с точностью $O(z^{-2})$.

Из (3) ясно, что в закрытых каналах при $z \rightarrow \infty$ выполняются равенства

$$|\kappa_j| y_j^{(v)} + y_j^{(v)'} = 0, \quad m < j \leq N. \quad (6)$$

Итак, при каждом фиксированном v ($1 \leq v \leq m$) необходимо решать нелинейную краевую задачу (1), (2), (5), (6) относительно неизвестного вектора-столбца $y^{(v)} = (y_1^{(v)}, \dots, y_N^{(v)})^T$.

Пусть найдено решение нелинейной задачи (1), (2), (5), (6). Тогда фазы рассеяния определяются через значения волновых функций и их производных по формуле

$$\operatorname{tg} \delta_v = \frac{(\sin \alpha_v + \rho_v \cos \alpha_v) y_v^{(v)'} - \kappa_v (\cos \alpha_v - \rho_v \sin \alpha_v) y_v^{(v)}}{(\rho_v \sin \alpha_v - \cos \alpha_v) y_v^{(v)'} - \kappa_v (\sin \alpha_v + \rho_v \cos \alpha_v) y_v^{(v)}}, \quad (7)$$

$$v = 1, \dots, m,$$

$$\text{где } \alpha_v = \kappa_v z - \frac{e\pi}{2}; \quad \rho_v = \frac{\ell(\ell+1)}{2\kappa_v z}.$$

2. Численное решение нелинейных краевых задач

Задачу (1) с граничными условиями (2), (5) и (6) можно записать в виде

$$\Phi(y) = 0, \quad \Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3), \quad (8)$$

где

$$\Phi_1(y) = Ay, \quad \Phi_2(y) = y(0),$$

$$\Phi_3(y) = \begin{cases} \kappa_v^2 (y_v^{(v)})^2 + (y_v^{(v)')^2} - \kappa_v^2, \\ d_i \kappa_i y_i^{(v)} - c_i y_i^{(v)'}, \quad i \neq v, \quad 1 \leq i \leq m, \\ |\kappa_j| y_j^{(v)} + y_j^{(v)'}, \quad m < j \leq N. \end{cases}$$

Нелинейная задача (8) решается на конечном интервале $(0, R)$ с помощью итерационной схемы, которая подробно описана в [8] для одноканальной задачи рассеяния. Приведем лишь основные формулы итерационного процесса. На шаге с номером n проводится уточнение приближенного решения y_n по формуле

$$y_{n+1} = y_n + \tau_n v_n, \quad n = 0, 1, \dots \quad (9)$$

Итерационная поправка v_n является решением линейной задачи

$$A^{(2)} v_n = -A^{(2)} y_n - (A^{(4)} - A^{(2)}) (y_n^{(v)} + g_n v_{n-1}^{(v)}), \quad z \in \Delta_n,$$

$$v_n^{(v)} = -y_n^{(v)}, \quad z = 0,$$

$$K_{\nu}^2 y_{\nu n}^{(\nu)} \cdot V_{\nu n}^{(\nu)} + y_{\nu n}^{(\nu)'} \cdot V_{\nu n}^{(\nu)'} = (K_{\nu}^2 (1 - y_{\nu n}^{(\nu)2}) - y_{\nu n}^{(\nu)2}) / 2, \quad (10)$$

$$K_i d_i y_{in}^{(\nu)} V_{in}^{(\nu)} - C_i y_{in}^{(\nu)'} \cdot V_{in}^{(\nu)'} = C_i y_{in}^{(\nu)'} - K_i d_i y_{in}^{(\nu)}, \quad i \neq \nu, \quad 1 \leq \nu \leq m,$$

$$(K_j d_j y_{jn}^{(\nu)} V_{jn}^{(\nu)} + y_{jn}^{(\nu)'} V_{jn}^{(\nu)'}) = -(K_j d_j y_{jn}^{(\nu)} + y_{jn}^{(\nu)'}), \quad m \leq j \leq N.$$

Здесь $g_n = 1 - e^{-\tau_n}$ - функция включения, а $A^{(2)}$ и $A^{(4)}$ - аппроксимации оператора A на равномерной сетке, имеющие точности $O(h^2)$ и $O(h^4)$ соответственно. Итерационный параметр τ_n в (9) выбирается из принципа уменьшения невязки $^{10/}$. Критерием прекращения итерационного процесса служит выполнение неравенства

$$\| \tau_n \|_{C_N} = \| A^{(4)} y_n \|_{C_N} \leq \varepsilon, \quad (11)$$

где ε - заданная точность, $\| \cdot \|_{C_N}$ - сеточная C -норма. Известно, что при выполнении определенных условий $^{11,12/}$ для оператора Φ и его производной в окрестности изолированного решения y_* имеет место сходимость обычного НАМН. То же самое справедливо и для обобщения НАМН.

Здесь, как в работе $^{8,9/}$, приближенное решение (12) ищется в виде кубического сплайна класса $C^2[0, R]$. Тогда задача (10) становится системой линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов сплайна. Очевидно, точность приближенного решения зависит от выбора R . Так как краевые условия в правом конце ($\tau = R$) аппроксимируются с точностью $O(R^{-2})$, то для достаточно большого значения R основную часть погрешности приближенного решения составляет погрешность аппроксимации задачи (10). А из построения схемы (10) ясно, что в случае сходимости итерации мы получаем приближенное решение, имеющее точность $O(h^4)$. Если пренебречь малым членом $(A^{(4)} - A^{(2)})(y_n + g_n V_{n=1})$ в (10), то мы получаем обычный НАМН. В этом случае задача (10) рассматривается на любой неравномерной сетке и приближенное решение найдется с точностью $O(\bar{h}^2)$, где \bar{h} - максимальный шаг сетки Δ_N :

$0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_n = R$. В отличие от метода конечных разностей, в методе сплайн-схемы повышенной точности записывается уравнение (10) в точке $\tau = 0$, в которой имеют особенность потенциалы Q и

$\bar{U} = U - \frac{\varepsilon(\varepsilon+1)}{\varepsilon^2} I$. В этом случае под $Q(0)$ и $\bar{U}(0)$ мы понимаем их значения $Q(\varepsilon)$, $U(\varepsilon)$, где $0 < \varepsilon \ll 1$. Такие замены не оказывают существенных влияний на конечный результат. В случае, когда заданы потенциалы в табличном виде, их можно с учетом специфики решаемых задач аппроксимировать на интервале $(0, \tau_1)$ по формуле

$$U(\tau) = a + \frac{b}{\tau} + \frac{c}{\tau^2}.$$

При этом коэффициенты a , b и c найдутся из условий интерполяции $U(\tau_i) = U_i$, $i=1,2,3$, где U_i - заданные значения потенциала.

Отметим, что найденные фазы рассеяния, как правило, зависят от выбора R , т.е. $\delta_{\nu} = \delta_{\nu}(R)$, и их истинные значения будут равны

$$\delta_{\nu}^* = \lim_{R \rightarrow \infty} \delta_{\nu}(R).$$

В силу ограниченности оперативной памяти используемых ЭВМ, мы не можем взять R довольно большим. Поэтому здесь имеет важное значения вопрос об экстраполяции $R \rightarrow \infty$ приближенных значений фазы. Для этой цели можно использовать асимптотику

$$\operatorname{tg} \delta_{\nu} = \operatorname{tg} \delta_{\nu}^* + \frac{C_1}{\tau} + \frac{C_2}{\tau^2} + \dots \quad (12)$$

Коэффициенты C_i в (12) можно определить с помощью метода наименьших квадратов:

$$\min_{m \leq n} \sum_{i=1}^n (\operatorname{tg} \delta_{\nu}(R_i) - \operatorname{tg} \delta_{\nu}^* - \frac{C_1}{R_i} - \dots - \frac{C_m}{R_i^m})^2. \quad (13)$$

3. Результаты численных расчетов

С целью проверки качества предложенного метода были решены как модельные задачи с $N=2$, так и двухканальное приближение задачи рассеяния трех тел с кулоновским взаимодействием.

3.1. Рассматривается система

$$\left. \begin{aligned} y'' + y + (1 - e^{-\tau})(y' - v) &= 0 \\ v'' + v + (1 - e^{-\tau})(v' + y) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

с известным решением

$$y = \sin(\tau + \delta), \quad v = \sin \tau; \quad \delta = -\pi/2. \quad (15)$$

Решение (15) удовлетворяет условиям

$$y(0) = -1, \quad v(0) = 0, \quad (I6)$$

$$y^2 + y'^2 - 1 = 0, \quad v - \sin v = 0, \quad 0 < v < \infty.$$

Полагая δ в (I5) неизвестной, мы переходим к задаче (I4); (I6), которая численно решена на отрезке (0,10) с помощью итерационного процесса (9), (10). Уже на сетке с шагом $h = 0,1$ было получено

$\delta_n = -1.570795979$, которое совпадает с истинным значением δ с точностью до шестого десятичного знака.

3.2. Рассмотрим задачу рассеяния с аналитическим потенциалом

$$y_1'' + (2ME - 2MU_A)y_1 - 2MU_C y_2 = 0, \quad (I7)$$

$$y_2'' + (2ME - (2MU_A + D))y_2 - 2MU_B y_1 = 0,$$

$$y_i(\tau) = 0, \quad i = 1, 2, \quad \tau \rightarrow -\infty \quad (I8)$$

$$y_1 \sim \sin(k_1 \tau + \delta), \quad \tau \rightarrow +\infty$$

$$y_2 \sim \exp(-k_2 \tau),$$

где

$$U_A = A \{ e^{-2\alpha(\tau-\tau_0)} - 2e^{-\alpha(\tau-\tau_0)} \},$$

$$k_1 = \sqrt{2ME}, \quad k_2 = \sqrt{-2M \cdot W_{A-B}},$$

$$D = 2M(E - W_{A-B}) > 0, \quad 2MW_A = -\alpha^2(d - n - 1/2)^2,$$

$$d = \frac{\sqrt{2MA}}{\alpha},$$

n - потенциальное целое число, не превышающее $d - 1/2 / |3|$.

В численных расчетах параметры потенциала выбраны следующим образом: $A=0,1025$, $B=0,0555$, $C=0,2$, $\alpha=0,67$; $\tau_0=2,15$, $M=8.876$, $n=0$. Асимптотические условия (I8) заменены соответствующими условиями типа (5), (6) на отрезке $(-5,35)$, и экспериментально установлено, что дальнейшее расширение интервала интегрирования не оказывает влияния на значение искомой величины δ . Сходимость волновых функций и фазы рассеяния проверена на последовательности вложенных сеток. В таблице I приведены значения фазы, а в таблице 2 - значения волновых функций в последовательности y_1, y_2 при $k_1 = 0,2$ и различных значениях x .

Величина σ определяется соотношением

$$\sigma = \frac{z_h - z_{h/2}}{z_{h/2} - z_{h/4}}, \quad z = \{\delta, y\},$$

теоретическое значение которой должно быть равным I6 для схемы, имею-

щей порядок аппроксимации $O(h^4)$. Как видно из таблиц I и 2, оно близко к теоретическому.

Таблица I

K_1	$h=0,2$	$h/2$	$h/4$	σ
0,08	-I,2421118	-I,2419289	-I,2419174	I5,90
0,14	I,2371170	I,2373014	I,2373131	I5,76
0,20	0,71373500	0,71390470	0,71391543	I5,81

Таблица 2

x	$h=0,2$	$h/2$	$h/4$	σ
-3	0,17539885-02* -0,92386204-03	0,17539282-02 -0,92383028-03	0,17539243-02 -0,92382827-03	I5,50 I5,80
3	-0,15105200 -0,12802719	-0,15108103 -0,12803994	-0,15108287 -0,12804075	I5,78 I5,74
9	0,57829057 0,48638453-01	0,57816547 0,48635867-01	0,57815755 0,48635703-01	I5,79 I5,77
I5	-0,54026513 0,11524363-02	-0,54040769 0,11520464-02	-0,54041671 0,11520217-02	I5,80 I5,78
21	-0,97978095 -0,27045201-05	-0,97974700 -0,27163982-05	-0,97974485 -0,27171495-05	I5,79 I5,81
27	-0,16864070 -0,44419633-06	-0,16847343 -0,44442528-06	-0,16846285 -0,44443976-06	I5,81 I5,81
35	0,99018155 -0,12184844-08	0,99020526 -0,12197615-08	0,99020676 -0,12198423-08	I5,80 I5,80

$$0,17539885-02^* = 0,17539885 \cdot 10^{-2}$$

3.3. Рассмотрим двухканальную задачу рассеяния с эффективными потенциалами U_{ij} , Q_{ij} , которые возникают в двухуровневом приближении адиабатического представления задачи трех тел с кулоновским взаимодействием^{/14/} и эффективной массой M , соответствующей процессу рассеяния $t_{ij} + d$ ^{/15/}. Значения потенциалов заданы на сетке Δ_N : $0 = x_0 < x_1 \dots < x_N = 60$ с шагом $h = 0,1$. В таблице 3 приведены результаты численного расчета. Для сравнения также в ней приведены результаты из работы^{/16/}.

Таблица 3 ($\ell = 0$, $E < \Delta E$)

$E(\text{эВ})$	$\text{tg } \delta_1$	$\text{tg } \delta_2$	$\text{tg } \delta_3$	$\text{tg } \delta_\infty^*$	Известные рез-ты/16/
0,001	-0,1322-01	-0,1283-01	-0,1271-01	-0,1146-01	-0,729-02
0,1	-0,9697-01	-0,9469-01	-0,9407-01	-0,880 -01	-0,869-01
1	-0,3434	-0,3428	-0,3428	-0,3415	-0,340
2	-0,5316	-0,5314	-0,5312	-0,5305	-0,529
5	-1,0414	-1,0407	-1,0406	-1,0391	-1,04
10	-2,2487	-2,2467	-2,2466	-2,2419	-2,24
20	25,9368	26,0619	26,0851	26,4055	26,5
30	2,6512	2,6520	2,6522	2,6544	2,66
40	1,4190	1,4193	1,4194	1,4203	1,42

Здесь $\delta_i = \delta(R_i)$, $R_1 = 40$, $R_2 = 50$, $R_3 = 60$, т.е. получены значения фаз соответственно на интервале $(0, R_i)$. $\text{tg } \delta_\infty^*$ - значение, найденное методом наименьших квадратов (13) с помощью значений $\text{tg } \delta_i$, $i = 1, 2, 3$.

Из таблицы 3 видно, что экстраполяция дает хороший результат.

В заключение авторы выражают благодарность Т.П.Пузыниной и Ю.С.Смирнову за предоставление значения табличных потенциалов и помощь в работе.

Литература

1. Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений. Под редакцией Б.Ольдера, С.Фернбаха и М.Ротенберга. М.: Мир, 1974.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т.13, вып.6, с.1336.
3. Тейлор Д.Р. Теория рассеяния М.: Мир, 1976.
4. Бабилов В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988.
5. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. and Somov L.N. Annals of Phys. 1978, 110, 2, p.274.
6. Melezhik V.S. J. Comput. Phys. 1986, 65, 1, p 1.
7. Смирнов Ю.С. ОИЯИ, РИИ-88-912, Дубна, 1988.
8. Жанлав Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. ОИЯИ, РИИ-88-823, Дубна, 1988.
9. Жанлав Т., Пузынин И.В. ОИЯИ, РИИ-89-643, Дубна, 1989.
10. Пузынин И.В. Автореферат докторской диссертации. ОИЯИ, ИИ-12016, Дубна, 1978.

11. Гавурин М.К. Изв. вузов. Математика, 1958, 5/6/, с.18.
12. Жидков Е.П. Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, т.4, вып.1, с.127.
13. Friedman R.S. and Jamieson M.J. Computer phys. Commun. 1989, 55, 2, p.137.
14. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20,3.с.576.
15. Матвеевко А.В., Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1975, 68,с.437.
16. Bubak M., Faifman M.P. JINR preprint E4-87-464, Dubna, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 июня 1990 года.

Жанлав Т., Пузынин И.В.

P11-90-382

Многоканальная задача рассеяния в постановке
нелинейной граничной задачи

Вычислительная схема решения задачи рассеяния, основанная на ее представлении как нелинейной граничной задачи, распространена на многоканальный случай. Для численной реализации полученной задачи используются метод сплайн-функций и непрерывный аналог метода Ньютона с включением оператора возмущения. Разработанная схема имеет точность $O(h^4)$, где h - шаг равномерной сетки. Теоретическая оценка точности подтверждена решением двухканальной задачи рассеяния для различных потенциалов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1990

Перевод авторов

Zhanlav T., Puzynin I.V.

P11-90-382

Multichannel Scattering Problem
as a Nonlinear Boundary Value Problem

Computational scheme for solving the scattering problem based on its representation as a nonlinear boundary value problem for a multichannel case is generalized. The spline-function method and the continuous analog of Newton method including the perturbation operator are used for numerical solution of obtained nonlinear problem. The proposed scheme has an accuracy of $O(h^4)$, where h is a step of an uniform mesh. The theoretical estimation of accuracy is confirmed by solving the two-channels problem 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 1990