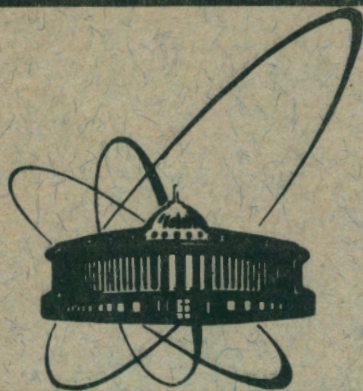


99-141



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P11-91-141

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

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ
С ПОВЫШЕННЫМ ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТИ
КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ**

1991

1. Введение

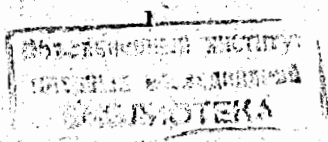
В адиабатическом представлении задачи трех тел исходное уравнение Шредингера сводится к системе радиальных уравнений:

$$\left(I \frac{d^2}{dr^2} + 2Q(r) \frac{d}{dr} + (k^2 - U(r)) \right) \psi(r) = 0, \quad (1)$$

$$\left(A_1 \frac{d}{dr} + B_1 \right) \psi(r) \Big|_{r=r_{\min}} = 0, \quad (2)$$

$$\left(A_2 \frac{d}{dr} + B_2 \right) \psi(r) \Big|_{r=r_{\max}} = 0, \quad (3)$$

где I - единичная матрица, k - диагональная матрица импульсов, $Q(r)$ и $U(r)$ - матрицы эффективных потенциалов задачи трех кулоновских частиц^{1/}, заданных на сетке узлов Ω_n ; $\psi(r)$ - вектор волновых функций; диагональные матрицы $A_1(k^2, \delta, r)$, $B_1(k^2, \delta, r)$, A_2 , B_2 , $i=1,2$ определяются видом асимптотик волновых функций, δ - фаза рассеяния. В работах^{2,3/} были предложены алгоритмы решения задачи рассеяния (1)-(3), позволяющие находить $\psi(r)$ и δ при заданном значении k . Однако в ряде случаев разностная аппроксимация порядка $O(h^2)$ (h - шаг разностной сетки Ω_n) дифференциальных операторов задачи (1)-(3) оказывается явно недостаточной для получения решений с необходимой точностью (6-7 значащих цифр). В настоящей работе реализована вычислительная схема повышенного порядка точности - $O(h^6)$ конечно-разностной аппроксимации, построенная на основе непрерывного аналога метода Ньютона с включением возмущения и позволяющая на каждой итерации обращать трехточечный оператор простой структуры. Предложенный алгоритм наиболее эффективен в низкоэнергетической задаче рассеяния, что демонстрируется примером с аналитически заданным потенциалом. Проведено численное исследование сходимости на последовательности вдвое сгущающихся сеток, а также зависимости результатов от границ отрезка $[r_{\min}, r_{\max}]$, на котором производится решение задачи (1)-(3).



равномерную сетку $\Omega_n = \{ r_{\min}=r_1; r_i+1h; i=2,3,\dots,N; r_N=r_{\max} \}$ с шагом $h=r_{i+1}-r_i=\text{const}$. В отличие от работ [2,3], где использовалась разностная аппроксимация операторов дифференцирования порядка $O(h^2)$, воспользуемся аппроксимацией порядка $O(h^6)$. Введем следующие обозначения:

$$D^{(6)}(\psi_1) = \frac{d^2}{dr^2} \psi_1 + 2Q_1 \frac{d}{dr} \psi_1 + O(h^6); \quad i=2,3,\dots,N-1 \quad (14)$$

$$D^{(2)}(\psi_1) = \frac{d^2}{dr^2} \psi_1 + 2Q_1 \frac{d}{dr} \psi_1 + O(h^2); \quad i=2,3,\dots,N-1 \quad (15)$$

$$d^{(6)}(\psi_1) = \frac{d}{dr} \psi_1 + O(h^6); \quad i=1,N \quad (16)$$

$$d^{(2)}(\psi_1) = \frac{d}{dr} \psi_1 + O(h^2); \quad i=1,N, \quad (17)$$

где $\psi_1 = \psi(r_1)$, $Q_1 = Q_1(r)$ - значения в точках сетки Ω_n . Явный вид операторов численного дифференцирования порядка $O(h^6)$ в зависимости от выбора узла сетки r_i приводится в приложении.

Первые три компонента оператора (12) с учетом введенных обозначений (14)-(17) примут следующий вид:

$$\begin{cases} [D^{(2)} + g(t)(D^{(6)} - D^{(2)}) + (\lambda - U)] \psi_1, & i=2,3,\dots,N-1 \\ [A_1(D^{(2)} + g(t)(D^{(6)} - D^{(2)})) + B_1] \psi_1 \\ [A_2(D^{(2)} + g(t)(D^{(6)} - D^{(2)})) + B_2] \psi_N. \end{cases}$$

Таким образом, решение задачи (4)-(8) сводится к решению следующих трех разностных краевых задач относительно итерационных поправок $v_k^{(1)}, v_k^{(2)}, v_k^{(3)}$ на k -й итерации ньютоновского итерационного процесса:

$$\begin{cases} (D^{(2)} + \lambda_k - U(r_i)) v_k^{(1)}(r_i) = -(g_k' + g_k)(D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_i) - \\ - g_k (D^{(6)} - D^{(2)}) v_{k-1}(r_i); \quad i=2,\dots,N-1; \\ (A_1 d^{(2)} + B_1) v_k^{(1)}(r_1) = -(g_k' + g_k) A_1 (D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_1) - \\ - g_k [A_1 (D^{(6)} - D^{(2)}) v_{k-1}(r_1) + \frac{\partial A_1}{\partial \lambda} (D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_1) \mu_{k-1} + \\ + \frac{\partial A_1}{\partial \delta} (D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_1) \eta_{k-1}]; \\ (A_2 d^{(2)} + B_2) v_k^{(1)}(r_N) = -(g_k' + g_k) A_2 (D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_N) - \\ - g_k [A_2 (D^{(6)} - D^{(2)}) v_{k-1}(r_N) + \frac{\partial A_2}{\partial \lambda} (D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_N) \mu_{k-1} + \\ + \frac{\partial A_2}{\partial \delta} (D^{(6)} - D^{(2)}) \psi_k(r_N) \eta_{k-1}]; \end{cases} \quad (18)$$

$$\begin{cases} (D^{(2)} + \lambda_k - U(r_i)) v_k^{(2)}(r_i) = -\psi_k(r_i); \quad i=2,\dots,N-1; \\ (A_1 d^{(2)} + B_1) v_k^{(2)}(r_1) = [-\frac{\partial A_1}{\partial \lambda} d^{(2)} - \frac{\partial B_1}{\partial \lambda}] \psi_k(r_1); \\ (A_2 d^{(2)} + B_2) v_k^{(2)}(r_N) = [-\frac{\partial A_2}{\partial \lambda} d^{(2)} - \frac{\partial B_2}{\partial \lambda}] \psi_k(r_N); \end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{cases} (D^{(2)} + \lambda_k - U(r_i)) v_k^{(3)}(r_i) = 0; \quad i=2,\dots,N-1; \\ (A_1 d^{(2)} + B_1) v_k^{(3)}(r_1) = [-\frac{\partial A_1}{\partial \delta} d^{(2)} - \frac{\partial B_1}{\partial \delta}] \psi_k(r_1); \\ (A_2 d^{(2)} + B_2) v_k^{(3)}(r_N) = [-\frac{\partial A_2}{\partial \delta} d^{(2)} - \frac{\partial B_2}{\partial \delta}] \psi_k(r_N). \end{cases} \quad (20)$$

Функция включения возмущения на полуоси $0 < t < \infty$ может быть выбрана следующим образом:

$$g(t) = 1 - \exp(-t).$$

Краевые задачи (18)-(20) в процессе итераций решаются методом трехточечной прогонки. При этом соответствующие системы линейных алгебраических уравнений на каждой итерации отличаются лишь правыми частями, что позволяет экономить ресурсы ЭВМ. В результате решения трех краевых задач (18)-(20) на k -й итерации получим значения итерационных поправок $v_k^{(1)}, v_k^{(2)}, v_k^{(3)}$. Остальные неизвестные параметры находятся, исходя из двух условий нормировки (7)-(8), по формулам:

$$\eta_k = \eta_{1k} + \eta_{2k} \mu_k, \quad (21)$$

$$\mu_k = - \frac{\phi^{(5)}(\psi_k) + \phi^{(5)}(-\psi_k + v_k^{(1)}) + \phi^{(5)}(v_k^{(3)}) \eta_k}{\phi^{(5)}(v_k^{(3)}) \eta_{2k} + \phi^{(5)}(v_k^{(2)})}, \quad (22)$$

$$\eta_{1k} = - \frac{\phi^{(4)}(\psi_k) + \phi^{(4)}(-\psi_k + v_k^{(1)})}{\phi^{(4)}(v_k^{(3)})}, \quad (23)$$

$$\eta_{2k} = - \frac{\phi^{(4)}(\psi_k) + \phi^{(4)}(v_k^{(2)})}{\phi^{(4)}(v_k^{(3)})}. \quad (24)$$

Итерационная поправка V_k к решению ψ_k определяется следующим образом:

$$V_k = v_k^{(1)} + v_k^{(2)} \mu_k + v_k^{(3)} \eta_k - \psi_k.$$

Отметим, что в функционалах $\phi^{(4)}$ и $\phi^{(5)}$ применяется разностная аппроксимация дифференциальных операторов порядка $O(h^6)$, т.е. в выражениях (21)-(24) не используется представление (12). Соответственно при вычислении скалярных

произведений в условиях нормировки (7)-(8) и в выражениях (21)-(24) используется тот же порядок формул численного интегрирования $O(h^6)$. Одной из наиболее удобных формул является квадратура Боде /4/.

Сходимость итерационного процесса контролируется значениями невязки

$$D_k = \max \left\{ \left\| \phi_k^{(1)} \right\|_{C_h^2}, \left| \phi_k^{(2)} \right|, \left| \phi_k^{(3)} \right|, \left| \phi_k^{(4)} \right|, \left| \phi_k^{(5)} \right| \right\}.$$

Ньютоновский итерационный процесс заканчивается при выполнении условия $D_k < \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ - наперед заданное достаточно малое число. (В расчетах задавалось $\varepsilon = 10^{-10} \div 10^{-12}$). Проверку выполнения этого условия для $\left| \phi_k^{(4)} \right|$ и $\left| \phi_k^{(5)} \right|$, как следует из вариационного принципа Хюльтена, обычно заменяют условиями на соответствующие итерационные поправки /3/: $|\mu_k| = \left| \frac{dk^2}{dt} \right| < \varepsilon$ и $|\eta_k| = \left| \frac{d\delta}{dt} \right| < \varepsilon$.

Для выбора итерационного шага τ_k применим способ, предложенный в работе /5/.

4. Численные расчеты

Эффективность построенной выше вычислительной схемы продемонстрируем на примере одноканальной задачи рассеяния с потенциалом Морзе /6/, заданным аналитически:

$$U(r) = 2MD \left[e^{-2\alpha(r-r_a)} - 2e^{-\alpha(r-r_a)} \right].$$

При этом в уравнении (1) полагаем $Q(r) \equiv 0$.

Аналитическое решение $\phi(r, k)$ такой задачи, соответствующее непрерывному спектру $k > 0$, имеет вид

$$\phi(r, k) = \frac{e^{\xi/2}}{2t} \left[e^{t\omega} \xi^{-ts} F(-d+1/2-ts, 1-2ts, \xi) - e^{-t\omega} \xi^{ts} F(-d+1/2+ts, 1+2ts, \xi) \right].$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$\xi = 2d e^{-\alpha(r-r_a)}; \quad d = \sqrt{2MD}/\alpha; \quad s = k/\alpha; \\ \omega = \arg \Gamma(1+2ts) + \arg \Gamma(-d+1/2-ts).$$

Γ - гамма-функция, F - вырожденная гипергеометрическая функция.

При этом независимая переменная r изменяется на всей

оси $-\infty < r < +\infty$, причем потенциал Морзе и волновая функция имеют следующее асимптотическое поведение:

$$U(r) \Big|_{r \rightarrow -\infty} \rightarrow +\infty,$$

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

$$\phi(r, k) \Big|_{r \rightarrow -\infty} \rightarrow 0,$$

$$\phi(r, k) \Big|_{r \rightarrow +\infty} \rightarrow \sin(kr + \delta).$$

Здесь величина

$$\delta = -kr_a - s \ln(2d) + \omega$$

соответствует фазе рассеяния.

В рассматриваемом численном примере использовались следующие значения параметров:

$$M = 8,876; \quad D = 0,104; \quad \alpha = 0,67; \quad r_a = 2,09.$$

При разностной аппроксимации данной задачи необходимо перейти к конечному отрезку $[r_{\min}, r_{\max}]$. Как показано в работе /3/, в качестве левой границы достаточно выбрать $r_{\min} = -5,0$.

В таблице 1 представлена зависимость величины δ от значения r_{\max} . Из таблицы следует, что при указанном шаге сетки h точность вычислений порядка 10^{-10} устанавливается при $r_{\max} \geq 45$.

В таблице 2 проводится исследование изменения величины фазы δ на последовательности вдвое сгущающихся разностных сеток Ω_h при фиксированных значениях $r_{\min} = -5$, $r_{\max} = 45$, а также дается сравнение с аналитическими результатами $\delta_{\text{ан}}$. В этой же таблице приводятся значения отношений

$$\sigma = (\delta_h - \delta_{h/2}) / (\delta_{h/2} - \delta_{h/4}).$$

При этом в первой строке приводятся результаты расчетов, проведенных по схеме порядка $O(h^4)$, а во второй - порядка $O(h^6)$. О порядке сходимости свидетельствуют соответствующие значения σ : $15,93 < \sigma_4 < 15,98$, что соответствует порядку $O(h^4)$ и $63,41 < \sigma_6 < 63,64$, что соответствует порядку $O(h^6)$. Анализ результатов показывает, что уже на шаге $h=0,1$ достигается точность вычислений, гарантирующая семь верных значащих цифр в решении δ_h при значениях $0,0001 \leq k \leq 0,2$.

В таблице 3 приводятся значения волновых функций ϕ_h , вычисленные на последовательности вдвое сгущающихся сеток Ω_h при фиксированном значении импульса $k=0,1$. Сходимость разностного решения ϕ_h , как следует из таблицы, также имеет порядок $O(h^6)$.

что соответствует теоретической и согласуется с результатами расчета фаз δ_h , приведенных в таблице 2.

Представленный алгоритм реализован на языке FORTRAN-77. Расчеты проводились на персональных компьютерах типа IBM PC (XT, AT и 386).

Таблица 1. Фазы рассеяния $-\delta$ в зависимости от значения r_{max} ($r_{min}=-5,00; h=0,025$) для схемы порядка $O(h^6)$. (При $k=1.E-4$ значения δ домножаются на 10^{-4})

k	$r_{max}=30,0$	$r_{max}=35,0$	$r_{max}=40,0$	$r_{max}=45,0$	$r_{max}=50,0$
1.E-4	6,55937178	6,55934705	6,55934582	6,55934578	6,55934578
0,08	,520990399	,520989995	,520989987	,520989987	,520989987
0,10	,648671085	,648671093	,648670938	,648670938	,648670938
0,14	,898909123	,898909086	,898909079	,898909078	,898909078
0,20	1,25832539	1,25832522	1,25832522	1,25832522	1,25832522

Таблица 2. Фазы рассеяния $-\delta$ для потенциала Морзе при $r \in [-5,0;45,0]$, вычисленные по схемам порядка $O(h^4)$ (первая строка каждой графы) и $O(h^6)$ (вторая строка)

k	$h=0,1$	$h/2$	$h/4$	σ	$\delta_{ан.}$
1.E-4	6,55930092E-4	6,55934297E-4	6,55934561E-4	15,93	6,559345777E-4
	6,55934549E-4	6,55934578E-4	6,55934578E-4	63,64	
0,08	0,5209865362	0,5209897709	0,5209899737	15,96	0,520989987219
	0,52098996479	0,52098998687	0,52098998721	63,60	
0,10	0,6486667124	0,6486706740	0,6486709222	15,96	0,648670938803
	0,64867091136	0,64867093838	0,64867093880	63,64	
0,14	0,898903462	0,898908727	0,898909057	15,96	0,898909078980
	0,89890904249	0,89890907841	0,89890907897	63,57	
0,20	1,258317893	1,258324763	1,258325193	15,98	1,258325222009
	1,25832517454	1,25832522126	1,25832522200	63,41	

Таблица 3. Волновые функции $\phi_n(r, k)$ при $r \in [-5,0;45,0]$, вычисленные по схеме порядка $O(h^6)$ на последовательности вдвое сгущающихся сеток Ω_h при $k=0,1$.

r	$h=0,1$	$h/2$	$h/4$	σ
-5,0	0,439395E-21	0,222568E-83	0,916682E-62	-
0,0	-,0055795971	-,0055795929	-,0055795928	62,34
5,0	0,2301104660	0,2301104655	0,2301104656	63,52
10,0	-,3208931104	-,3208930859	-,3208930855	63,68
15,0	-,7509020232	-,7509020054	-,7509020052	63,52
20,0	-,9759652545	-,9759652487	-,9759652486	63,33
25,0	-,9609066398	-,9609066473	-,9609066474	63,71
30,0	-,7105387280	-,7105387471	-,7105387470	63,64
35,0	-,2862047746	-,2862048005	-,2862048009	63,63
40,0	0,2082021179	0,2082020914	0,2082020910	63,34
45,0	0,6516338707	0,6516338502	0,6516338499	63,71

5. Заключение

Рассмотренная схема без существенных затруднений допускает прямое обобщение для многоканальной низкоэнергетической задачи рассеяния. При малых значениях импульсов можно применять аппроксимации более высокого порядка точности, чем рассмотренные в данной работе.

Приложение

Формулы численного дифференцирования в узлах сетки Ω_h для аппроксимации шестого порядка:

$$\phi'_1 = \frac{1}{60h}(-147\phi_1 + 360\phi_2 - 450\phi_3 + 400\phi_4 - 225\phi_5 + 72\phi_6 - 10\phi_7)$$

$$\psi_2'' = \frac{1}{180h^2}(126\psi_1 - 70\psi_2 - 486\psi_3 + 855\psi_4 - 670\psi_5 + 324\psi_6 - 90\psi_7 + 11\psi_8)$$

$$\psi_2' = \frac{1}{60h}(-10\psi_1 - 77\psi_2 + 150\psi_3 - 100\psi_4 + 50\psi_5 - 15\psi_6 + 2\psi_7)$$

$$\psi_3'' = \frac{1}{180h^2}(-11\psi_1 + 214\psi_2 - 378\psi_3 + 130\psi_4 + 85\psi_5 - 54\psi_6 + 16\psi_7 - 2\psi_8)$$

$$\psi_3' = \frac{1}{60h}(2\psi_1 - 24\psi_2 - 35\psi_3 + 80\psi_4 - 30\psi_5 + 8\psi_6 - \psi_7)$$

$$\psi_i'' = \frac{1}{180h^2}(2\psi_{i-3} - 27\psi_{i-2} + 270\psi_{i-1} + 490\psi_i + 270\psi_{i+1} - 27\psi_{i+2} + 2\psi_{i+3})$$

$$\psi_i' = \frac{1}{60h}(-\psi_{i-3} + 9\psi_{i-2} - 45\psi_{i-1} + 45\psi_{i+1} - 9\psi_{i+2} + \psi_{i+3}), \quad i=4, 5, \dots, N-3$$

$$\psi_{N-2}'' = \frac{1}{180h^2}(-2\psi_{N-7} + 16\psi_{N-6} + 54\psi_{N-5} + 85\psi_{N-4} + 130\psi_{N-3} - 378\psi_{N-2} + 214\psi_{N-1} - 11\psi_N)$$

$$\psi_{N-2}' = \frac{1}{60h}(\psi_{N-6} - 8\psi_{N-5} + 30\psi_{N-4} - 80\psi_{N-3} + 35\psi_{N-2} + 24\psi_{N-1} - 2\psi_N)$$

$$\psi_{N-1}'' = \frac{1}{180h^2}(11\psi_{N-7} - 90\psi_{N-6} + 32\psi_{N-5} - 670\psi_{N-4} + 855\psi_{N-3} - 486\psi_{N-2} - 70\psi_{N-1} + 126\psi_N)$$

$$\psi_{N-1}' = \frac{1}{60h}(-2\psi_{N-6} + 15\psi_{N-5} - 50\psi_{N-4} + 100\psi_{N-3} - 150\psi_{N-2} + 77\psi_{N-1} + 10\psi_N)$$

$$\psi_N'' = \frac{1}{60h}(10\psi_{N-6} - 72\psi_{N-5} + 225\psi_{N-4} - 400\psi_{N-3} + 450\psi_{N-2} - 360\psi_{N-1} + 147\psi_N)$$

Литература

1. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. JINR Communications, E4-83-778, Dubna, 1983.
2. Смирнов Ю.С. Сообщения ОИЯИ, P11-88-912, Дубна, 1988.
3. Вилицкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. ЯФ, 1990, т.52, 4, с.1176.
4. Справочник по специальным функциям. Под ред. Абрамовица М. и Стигана И. М.: Наука, 1979.
5. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. - ЖВМ и МФ, 1981, т.21, 2, с.491.
6. Alhassid Y., Gursev F., Iachello F. - Ann.Phys., 1983, v.148, p.346.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 марта 1991 года.

Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С.
Численное решение задачи рассеяния с повышенным
порядком точности конечно-разностной схемы

P11-91-141

Представлена вычислительная схема решения низкоэнергетической задачи рассеяния. Дискретное представление осуществляется разностными схемами шестого порядка точности относительно шага равномерной сетки для независимой переменной. Используется непрерывный аналог метода Ньютона с функцией включения возмущения, позволяющий на каждой итерации обращать трехточечный оператор простой структуры. Схема допускает обобщение, позволяющее повысить порядок конечно-разностной аппроксимации до $O(h^N)$, где $N \geq 6$. Эффективность описанного алгоритма показана на примере решения задачи с потенциалом Морзе.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод авторов

Vinitsky S.I., Puzynin I.V., Smirnov Yu.S.
Numerical Solution of the Scattering Problem with
Increased Accuracy Order of Finite-Difference Scheme

P11-91-141

A computational scheme for solving the low-energy scattering problem is presented. The discrete scheme of the six order accuracy with respect to the mesh step of an independent variable has been realised. The continuous analogue of Newton's method with an inclusion perturbation function allowing to inverse a simple structure three-point operator at each iteration is used. The generalization of this scheme allows to increase the order of finite-difference approximation up to $O(h^N)$, $N \geq 6$. The efficiency of the described algorithm is demonstrated by the solution of the problem with the Morse potential.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991