ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 4099

Т.Г.Ефименко, В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРЯМЫХ МЕТОДОВ В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

1968

P4 - 4099

Т.Г.Ефименко, В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев

О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРЯМЫХ МЕТОДОВ В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

1. Введение

Задача рассеяния требует решения уравнения Шредингера в частных производных со сложными граничными условиями. Современная вычислительная математика не располагает алгоритмами непосредственного решения такой задачи. Однако в математической физике существует группа прямых (вариационных) методов, которые сводят решение уравнений в частных производных к конечным системам алгебраических или обыкновенных дифференциальных уравнений/1,2,3/. В квантовой механике успешно использовался метод Ритца при описании связанных состояний.

В данной работе мы рассмотрим применение методов Ритца, Бубнова-Галеркина и наименьших квадратов (МНК) для решения задач рассеяния.

В настоящее время существует ряд вариационных формулировок задачи рассеяния (Хюльтен, Коон, Швингер/4/), но условия сходимости приближенных решений к истинному и устойчивости получающихся систем уравнений относительно погрешностей, возникающих при вычислении коэффициентов и неоднородностей уравнений применительно к этим методам не исследованы. В прямых же методах эти условия чётко сформулированы. К тому же вариационные принципы/4/ не применялись для описания реакций с перераспределением частиц/3/. Следует отметить, что в частном случае рассеяния без перераспределения в методе Ритца и Бубнова-Галеркина получаются уравнения, совпадающие с уравнениями метода Коона, а также оказывается, что приближенные длины рассеяния являются верхними границами для точных значений. Для простоты изложения мы ограничимся рассмотрением задач рассеяния на примере систем 2-х и 3-х тел.

Будет показано, что известная трудность метода Коона, связанная с появлением нефизических особенностей в амплитуде рассеяния при численных расчётах, не имеет принципиального характера и может быть легко устранена.

2. Метод Ритца

Рассмотрим неоднородное уравнение в частных производных

$$A y = j \tag{1}$$

с однородными граничными условиями. Справедлива теорема /1/ о том, что,если оператор A положителен, то нахождение решения (1) эквивалентно отысканию функций из области определения D_A оператора A, сообщающей минимум функционалу

$$F(y) = (A y, y) - 2(y, j). \tag{2}$$

Уравнение Шредингера однородно , а граничные условия в задаче рассеяния неоднородны. Чтобы можно было воспользоваться теоремой, произведем следующее преобразование. Представим волновую функцию Ψ в виде:

$$\Psi = Y + \Phi_o \quad , \tag{3}$$

где Φ_o – падающая волна во входном канале. Используя (3), можно записать уравнение Шредингера следующим образом:

$$(H-E)Y = j \equiv (E-H)\Phi_o \quad , \tag{4}$$

где Y удовлетворяет однородным граничным условиям. Действительно, по направлениям, соответствующим открытым каналам, выполняется условие излучения:

$$\left(\frac{\partial}{\partial\Gamma_\alpha} - ik_\alpha\right)Y \underset{\Gamma_\alpha\to\infty}{\to} 0, \tag{5}$$

и по остальным направлениям $Y \to 0$.

Если отсутствуют связанные состояния у системы с гамильтонианом H, кинетическая энергия равна нулю, а в случае 3-х частиц энергия связи пары во входном канале больше или равна энергии связи пар в других каналах, то оператор $A = H - E$ будет положителен. Покажем это. В данном случае $E = -\epsilon_0$, где ϵ_0 – энергия связи пары. Нам нужно показать, что $(Ay, y) > 0$. Разложим Y по собственным функциям H:

$Y = \int_{-\epsilon_0}^{\infty} a_E \Psi_E dE$ и получим $(Ay, y) = \int_{-\epsilon_0}^{\infty} (E + \epsilon_0)|a_E|^2 dE > 0$.

Итак, условия теоремы выполнены. Строго говоря, для существования решения с конечной нормой требуется показать выполнение неравенства/2/ (см. стр. 213) $|(Ay, j)| \le C(Ay, y)$.

Перейдем к построению функции, сообщающей минимум функционалу (2).

Преобразуем $F(y)$, прибавим и вычтем в (2) (Ay_0, y_0), где y_0 решение уравнения (1):

$$F(y) = (A(y - y_0), y - y_0) - (Ay_0, y_0). \tag{6}$$

Из (6) видим, что поскольку второй член есть постоянная, и минимум F достигается, когда первый член обращается в нуль, естественно за меру близости функции y к истинной y_0 взять $(A(y - y_0), y - y_0) \equiv [y - y_0]^2$. Тем самым в области определения оператора A введена норма. Она удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к норме, поскольку A положителен. Если решение (1) отыскивается в виде ряда

$$y = \sum_n^N a_n \phi_n, \qquad \phi_n \subset D_A, \tag{7}$$

то из сказанного выше видно, какое условие нужно наложить на ϕ_n.

чтобы можно было сколь угодно точно аппроксимировать y_0. Таким условием является полнота системы $\{\phi_n\} \subset D_A$ с введенной нормой.

Подстановка (7) в (2) и требование минимума $F(y_N)$ дает следующую систему алгебраических уравнений на коэффициенты разложения a_n:

$$\sum_m (A\phi_m, \phi_n) a_m = (j, \phi_n) \tag{8}$$

Определитель $|A_{mn}|$ системы (8) является определителем Грамма системы линейно-независимых функций $\{\phi_n\}$ в метрике $[y]^2 = (Ay,y)$ и отличен от нуля, поэтому система (8) имеет однозначное решение/1/.

Если в качестве первого элемента базиса $\{\phi_n\}$ выбрать функцию, описывающую асимптотику открытого канала:

$$\phi_1 = \Psi_0(\rho_{ij}) \frac{1}{R} (1 - e^{-\beta R}), \tag{9}$$

где $\Psi_0(\rho_{ij})$ -функция связанного состояния пары (i, j) а R - расстояние между центром масс пары и третьей частицей, то коэффициент при этом элементе $a_1 \equiv q$ является амплитудой рассеяния, и q находится непосредственно решением системы (8). Уравнение (8) совпадает с системой уравнений Коона/4/. Иллюстрацией быстрой сходимости метода в одном частном примере может служить расчёт Шварца/5/ рассеяния частицы потенциалом Юкавы. Зависимость длины рассеяния от числа членов в сумме (7) дается следующей таблицей:

$N = 1$	$-q = 7{,}92155$
$= 2$	$= 7{,}91142$
$= 3$	$= 7{,}91139$
$= 4$	$= 7{,}91138$
$= 5$	$= 7{,}91138$

В задаче 3-х тел длина рассеяния $e^{\pm} + H$ в работах/6/, вычислялась по методу Коона.

Решение системы (8) будет устойчиво при условии сильной минимальности $\{\phi_n\}$ /2/. Для устойчивости самих коэффициентов разложения a_n, а, следовательно, и q, по-видимому, достаточно просто минимальности $\{\phi\}$. Для задачи 2-х тел с положительным потенциалом, спадающим быстрее, чем $\frac{1}{R^2}$, системой полной и сильно минимальной с соответствующей нормой является система функций: $\phi_k(R) = \int_0^R \frac{e^{-t/2} L_k}{k!} dt$ (L_k – полиномы Ляггера).

Покажем теперь, что функционал $F(y)$ дает верхнюю границу для длины рассеяния $-q$, что было получено несколько более сложным путем в методике Коона/7/. С точностью до констант имеем, согласно (6), (1):

$$\min F(y) = -(Ay_0, y_0) = -(j, y_0) = (V\Phi_0, y_0) = \frac{1}{2}(-q + q_B), \tag{10}$$

где q_B – борновская амплитуда. Аналогично

$$\min F(y_N) = \frac{1}{2}(q_B - q_N), \qquad F(y_N) > F(y_0) \tag{11}$$

$$q_N \le q \quad .$$

Распространим изложенные выше результаты на случай существования связанных состояний оператора H всей системы.

Пусть Ψ_o – функция связанного состояния системы. (Мы рассмотрим случай единственного связанного состояния. Обобщение на большее их число не представляет трудности). Будем искать y в виде:

$$y = Z + \alpha\Psi_0, \qquad Z \perp \Psi_0 . \tag{12}$$

В этом случае оператор A положителен на множестве функций, ортогональных Ψ_o: $(AZ, Z) > 0$. Поэтому Z мы можем искать по прежнему из принципа Ритца

$$\min F(Z) = (AZ, Z) - 2(Z, j); \tag{13}$$

а коэффициент a можно найти, например, из требования ортогональности невязки к Ψ_0 (как в методе Бубнова-Галеркина):

$$(A(Z + a\Psi_0) - j, \Psi_0) = 0. \tag{14}$$

Поскольку $(AZ, \Psi_0) = (Z, A\Psi_0) = E_0(Z, \Psi_0) = 0$, согласно (12) и $a(A\Psi_0, \Psi_0) = (j, \Psi_0)$, то из (14) получим:

$$a = \frac{1}{E_0}(j, \Psi_0). \tag{15}$$

Аналогично случаю без связанных состояний получаем:

$$q = q_B - 2F(Z_0) - 2a(V\Psi_0, \Phi_0) = q_B - 2F(Z_0) - 2a(j, \Psi_0) =$$

$$= q_B - 2F(Z_0) - \frac{2}{E_0}|(j, \Psi_0)|^2 > q_B - 2F(Z_N) - \frac{2}{E_0}|(j, \Psi_0)|^2 = \tag{16}$$

$$= q_N - \frac{2}{E}|(j, \Psi_0)|^2 .$$

В качестве Ψ_0 можно брать функцию, найденную с помощью вариационных расчётов, при этом только должно быть выполнено условие: $E_{\text{вариац.}} - \epsilon_0 < 0$.

3. Метод Бубнова-Галеркина

При кинетической энергии, отличной от нуля, оператор $A = H - E$ уже не является положительным, и мы не можем использовать для решения уравнения (1) метод Ритца. В этом случае мы можем использовать метод Бубнова-Галеркина (Б-Г), применимость которого не связана с положительностью оператора A .

В методе Б-Г[1,2] решение отыскивается также в виде разложения (7), но уравнения на коэффициенты a получаются из нового требования: ортогональности невязки $Ay - j$ ко всем элементам ϕ_n $(n=1...N)$

$$(Ay_N - j, \phi_n) = 0, \tag{17}$$

что дает алгебраические уравнения, формально совпадающие с (8). Те же уравнения получаются в задаче рассеяния без перераспределения частиц и из метода Коона[4], согласно которому функция Ψ отыскивается из условия стационарности функционала

$$F(\Psi) = q_{st} = ((H-E)\Psi, \Psi) \quad \text{где} \quad q_{st} = a_1 , \tag{18}$$

если Ψ искать в виде (3), (7). При этом стационарное значение функционала (18) дает амплитуду рассеяния (по Коону).

В расчётах[5,6], выполненных по методу Коона, была обнаружена следующая трудность. Если Ψ выбирать в виде[x]

$$\Psi_\ell = \phi_0 + q_\ell \phi_1 + \sum_{n\neq 1} a_n \phi_n ; \qquad (q_\ell \equiv a_1) \tag{19}$$

и вначале искать $a_n (n \neq 1)$ как решение системы уравнений, получающихся из условия стационарности функционала (18) относительно $a_{n\neq 1}$, то оказывается, что детерминант Δ матрицы, соответствующей однородной системе

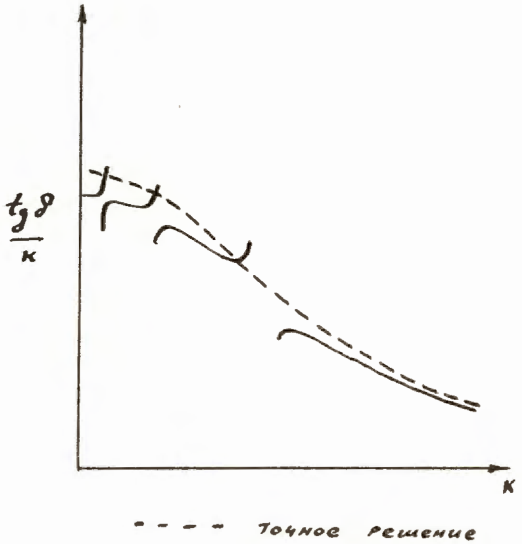
$$\sum_{m\neq 1}^{N} (A\phi_m , \phi_n) a_m = 0 \qquad (n \neq 1), \tag{20}$$

---

[x] Для простоты рассмотрим двухчастичную задачу рассеяния для парциальной волны Ψ_ℓ (q_ℓ – парциальная амплитуда).

при некоторых значениях вариационных параметров и энергии обращается в нуль. Это приводило к тому, что функционал (18) при численных расчётах обнаруживал вблизи этих точек сингулярное поведение.

Приведенный на рис. 1 график дает типичный пример такого поведения.



Тот факт, что детерминант Δ имеет нулевые значения (при $k^2 > 0$), объясняется тем, что оператор A в подпространстве с базисом $\{\phi_n\}(n=2..N)$ является симметричным и имеет $N-1$ вещественных собственных значений. Легко видеть, что (20) совпадает с системой уравнений, получаемой обычно в задаче на связанные состояния. При этом нижние из полученных собственных значений соответствуют связанным состояниям, а остальные оказываются лежащими в области непрерывного спектра и приводят к указанным выше трудностям.

Покажем, что эта трудность не имеет принципиального характера и ее можно просто обойти. Для этого достаточно решать систему сразу для всех коэффициентов разложения (19), рассматривая амплитуду q наравне с остальными a_n .

Докажем, что соответствующая однородная система алгебраических уравнений не имеет решения, а, значит, ее детерминант всегда отличен от нуля.

Умножим систему для коэффициентов a_m:

$$\sum_{m=1}^{N} A_{nm} a_m = 0 \tag{21}$$

на a^*_n , а соответствующую систему для a^*_m умножим на a_n , вычтем одно из другого и просуммируем по n . Получим:

$$\sum_{n,m\neq 1} (A_{nm} a^*_n a_m - A^*_{nm} a_n a^*_m) + \sum_{m\neq 1} (A_{1m} a^*_1 a_m - A^*_{1m} a_1 a^*_m) +$$
$$+ \sum_{n\neq 1} (A_{n1} a^*_n a_1 - A^*_{n1} a_n a^*_1) + A_n |a_{11}|^2 - A^*_{11} |a_1|^2 = 0. \tag{22}$$

Сумма $\sum_{m,n\neq 1}$ в (22) равна нулю в силу вещественности и симметричности A_{mn} $(m, n \neq 1)$:

$$A^*_{nm} = A_{nm} = A_{mn} .$$

Суммы же $\sum_{m\neq 1}$ и $\sum_{n\neq 1}$ взаимно сокращаются благодаря тому, что $A^*_{m1} = A_{1m} (m \neq 1)$. Последнее легко проверяется интегрированием по частям. Оставшиеся члены дают:

$$[(A \phi_1 , \phi_1) - (A \phi_1 , \phi_1)^*] |a_1|^2 =$$

$$= [(-\phi_1'' , \phi_1) - (-\phi_1'' , \phi_1)^*] |a_1|^2 = |a_1|^2 \int_0^\infty (\phi_1 \phi_1^{*\prime\prime} - \phi_1'' \phi_1^*) \, dr = \tag{23}$$

$$= |a_1|^2 \int_0^\infty (\phi_1 \phi_1'^* - \phi_1' \phi_1^*)' \, dr = |a_1|^2 \int_0^\infty J' \, dr = |a_1|^2 (J_0 - J_\infty).$$

Величина J имеет физический смысл плотности потока. Поскольку $\phi_1(0)=0$, то и $J_0=0$. С другой стороны, $J_\infty \approx k \neq 0$. Таким образом, мы приходим к противоречию с нашим первоначальным предположением, что однородная система (21) имеет решение, что и требовалось.

Иногда может оказаться более удобным другой способ решения уравнений, позволяющий также обойти указанные выше трудности/7/.

В этом подходе сначала находятся "опасные" собственные значения E_1 системы (20). Знание E_1 позволяет нам аналитически раскрыть в выражении для амплитуды неопределенности типа $\frac{\infty}{\infty}$, которые при численном расчёте приводили к сингулярному поведению амплитуды рассеяния. Проделаем это подробнее.

Рассмотрим часть системы (8) без первого уравнения:

$$\sum_{m\neq 1} A_{nm}\, a_m = (j, \phi_n) - q A_{n1}\ ; \ (n \neq 1). \tag{24}$$

Обозначим $(a_2^{(1)}, \ldots a_N^{(1)})$ собственный вектор однородной системы (20), соответствующий собственному значению E_1. Теперь мы можем записать решение системы (24) в виде

$$a_n = \sum_{1,m\neq 1} \frac{a_n^{(1)}\,(j,\phi_m)\,a_m^{(1)}}{E_1 - E} - q \sum_{1,m\neq 1} \frac{a_n^{(1)}\,A_{m1}\,a_m^{(1)}}{E_1 - E}. \tag{25}$$

Подстановкой (24) в первое уравнение

$$A_{11} q + \sum_{n\neq 1} A_{1n}\, a_n = (j, \phi_n); \quad (n \neq 1) \tag{26}$$

получаем для q следующее выражение, где в явном виде выделены особенности:

$$q = \frac{(j,\phi_n) - \sum\limits_{m,n\neq 1;1} \frac{A_{1n}\, a_n^{(1)}\,(j,\phi_m)\,a_m^{(1)}}{E_1 - E}}{A_{11} - \sum\limits_{m,n\neq 1;1} \frac{A_{1n}\, a_n^{(1)}\, A_{m1}\, a_m^{(1)}}{E_1 - E}} \tag{27}$$

Умножая числитель и знаменатель (27) на $\prod_{j=1}^{N-1}(E_j - E)$, мы тем самым аналитически раскрываем неопределенность типа $\frac{\infty}{\infty}$, которая возникает, когда E близко к одному из E_i.

В частном случае, когда E совпадает с E_1, формула (27) переходит в

$$q(E_1) = -\frac{(A\Phi_0, \Psi_1)}{(A\phi_1, \Psi_1)}, \qquad \Psi_1 = \sum_{n \neq 1} a_n^{(1)} \phi_n . \tag{28}$$

В этом частном случае изложенная выше схема приводит к тем же результатам, что и подход, предложенный Харрисом[8] в задаче 2-х тел.

Формула (28) удобна тем, что, решив однородную систему (21), мы сразу получаем значения амплитуды в интервале энергий от E_1 до E_{N-1}. В заключение этого раздела отметим, что отсутствие свойства положительности оператора A не позволяет ввести здесь понятие нормы аналогично тому, как это делалось нами в методе Ритца, и сделать строгое заключение об условиях сходимости метода. Исключением является случай, когда область взаимодействия всех частиц системы конечна. Тогда можно найти[7] в задаче положительно определенный оператор, и ввести понятие нормы. При этом системой полной и сильно минимальной во введенной метрике оказывается система собственных функций оператора кинетической энергии системы.

4. Метод наименьших квадратов (МНК)

В МНК решение уравнения (1) и (4) заменяется вариационной задачей о минимуме функционала[1]

$$F(y) = (Ay - j, Ay - j). \tag{29}$$

При этом в отличие от метода Ритца не накладывается никаких ограничений на оператор A. Непосредственной проверкой (учитывая $Ay_0 = j$) легко убедиться, что функционал $F(y)$ может быть представлен в виде:

$$F(y) = (A(y-y_0), A(y-y_0)) \equiv [y-y_0]^2. \qquad (30)$$

Рассуждая аналогично тому, как это делается в методе Ритца (после (6)), мы получаем, что в качестве меры близости (новая норма) следует выбрать $[y-y_0]^2$. Отсюда следует, что если y отыскивается в виде (7), то условием сходимости будет полнота системы $\{\phi_n\}$ с введенной новой метрикой. Доказательство такой полноты требует специального исследования.

Необходимым и достаточным условием существования решения с конечной нормой является (см. стр. 213/2/)

$$|(Ay, j)| \leq C(Ay, Ay). \qquad (31)$$

Из неравенства Коши-Буняковского $(j, A\ ) \leq (j, j)\ (Ay, Ay\ )$ и (31) следует требование $(j,j) < \infty$ или иначе $(V\Phi_0\ ,\ V\Phi_0) < \infty$. Из (7) и требования минимума $F(y)$ получаем систему алгебраических уравнений:

$$\sum_m (A\phi_m, A\phi_n) a_m = (j, A\phi_n). \qquad (32)$$

Система (32) однозначно разрешима, так как матрица системы совпадает с матрицей Грамма линейно-независимых элементов во введенной метрике. Как и в методе Ритца, для устойчивости решения требуется выполнение условия сильной минимальности $\{\phi_n\}$ /2/.

Если в числе элементов базиса $\{\phi_n\}$ использовать функции, описывающие асимптотику открытых каналов, то искомые амплитуды рассеяния будут являться коэффициентами разложения (7) и определяются непосредственно решением (32).

5. Сведение задачи к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

До сих пор мы предполагали, что коэффициенты разложения (7) являются константами.

В методе Канторовича/1/ (см. стр. 98) минимум функционала (2) (напомним, что задача о минимуме (3) имеет смысл при нулевой кинетической энергии) отыскивается с использованием вместо (7) разложения:

$$y_N(\bar{\rho}, \bar{R}) = \sum_{k=1}^{N} a_k(\bar{R})\,\phi_k(\bar{\rho}, R). \tag{33}$$

Разложение (33) написано для частного случая задачи трех тел, где $\phi_k(\bar{\rho}; R)$ являются собственными функциями двухцентровой задачи: R – расстояние между центрами, а $\bar{\rho}$ – радиус-вектор 3-ей частицы относительно центра масс двух других. Для радиальной части коэффициентов $a_k(R)$ получается система обыкновенных дифференциальных уравнений. Эта система отличается от уравнений метода Борна-Оппенгеймера/9/ тем, что неоднородность граничных условий переведена в неоднородность системы уравнений. Минимум функционала (2) по-прежнему имеет физический смысл длины рассеяния и поэтому остается справедливым вывод о том, что $F(y_N)$ дает границу сверху для истинной длины рассеяния.

Функцию y можно искать также в "смешанном" виде

$$y = a_0\phi_0 + \sum_{k=1}^{N} a_k(R)\,\phi_k \,, \tag{34}$$

где ϕ_0 – есть функция, описывающая асимптотику открытого канала, константа a_0 – длина рассеяния, а в остальной части разложения коэффициенты являются функциями от одной выделенной переменной. Например, в задаче рассеяния нуклона на дейтроне в качестве ϕ_k удобно выбрать "K -гармоники"/10/, учитывающие тождественность частиц. В этом случае для коэффициентов разложения получается система одного алгебраического и N обыкновенных дифференциальных уравнений. И здесь остается справедливым вывод об оценке сверху длины рассеяния.

Аналогично, используя разложение типа (34), можно модифицировать методы Бубнова-Галеркина и МНК.

Литература

1. *С.Г.Михлин. Вариационные методы в математической физике, Гостехиздат, Москва, 1957.*
2. *С.Г.Михлин. Численная реализация вариационных методов. Физматгиз, Москва, 1968.*
3. *T.G.Efimenko, B.N.Zakhariev, V.P.Zhigunov, Ann. of Phys. 47, No.2 275 (1968).*
4. *Ю.Н.Демков. Вариационные принципы в теории рассеяния. Физматгиз, 1958, Москва. Г.Ф.Друкарев. Теория столкновений электронов с атомами, Физматгиз, Москва, 1963.*
5. *C. Schwartz. Ann. of Phys., 16, 36 (1961). K.R.Brownstein, W.A.Mc Kinley. Phys. Rev., 170, 1255 (1968).*
6. *Harris. Phys. Rev. Lett., 19, No . 4, 173 (1967).*
7. *В.П.Жигунов, И.С.Лупашина. Препринт ИФВЭ СВМ 67-61-К-1967.*
8. *Harris. Phys. Rev. Lett., 19, No.4, 173 (1967).*
9. *А.С.Давыдов. Квантовая механика, стр. 520, Физматгиз, М., 1963.*
10. *Б.Н.Захарьев, В.В,Пустовалов, В.Д.Эфрос. ЯФ 8, №2 (1968).*

Рукопись поступила в издательский отдел

9 октября 1968 года.