

8751

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



С341а1  
Г-202

30/11/75

P4 - 8751

Ф.А.Гареев, С.А.Гончаров, Е.П.Жидков,  
И.В.Пузынин, Б.Н.Хоромский, Р.М.Ямалеев

2368/2-75

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ  
НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ  
ДЛЯ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ  
В ТЕОРИИ ЯДРА

**1975**

P4 - 8751

Ф.А.Гареев, С.А.Гончаров, Е.П.Жидков,  
И.В.Пузынин, Б.Н.Хоромский, Р.М.Ямалеев

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ  
НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ  
ДЛЯ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ  
В ТЕОРИИ ЯДРА

## I. ВВЕДЕНИЕ

Задачи на собственные значения для систем интегро-дифференциальных уравнений возникают при решении многих физических проблем, связанных с исследованием уравнения Шредингера. В теории ядра эта задача появляется при рассмотрении уравнения Шредингера с нелокальным обобщенным потенциалом /1/ или с локальным потенциалом, если учитывать принцип Паули /2,3/.

Рассматриваемая в данной работе задача может быть сформулирована следующим образом. Для системы интегро-дифференциальных уравнений

$$\varphi^{(k)}(\lambda, \vec{y}) \equiv y_k''(\tau) + \sum_{j=1}^N \mathcal{H}_{kj}(\tau) y_j(\tau) + \int_0^{\infty} \mathcal{Q}_{kj}(\tau, \xi) y_j(\xi) d\xi - \lambda y_k(\tau) = 0 \quad (I.1)$$

$k = 1, 2, \dots, N$

требуется найти некоторое собственное значение  $\lambda$  (энергию) и соответствующее собственное решение  $\vec{y}(\tau) = (y_1(\tau), \dots, y_N(\tau))$  (волновые функции), удовлетворяющее граничным условиям

$$y_k(0) = y_k(\infty) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (I.2)$$

Разработанный алгоритм численного решения задачи (I.1)-(I.2) применяется для вычисления факторов реакций одноуклонных переходов. Следует отметить, что существующие методы приближенного решения этой задачи (см., напр., /4/) построены в рамках выбранной физической модели, т.е. зависят от аналитической формы потенциала. Изменение физических предпосылок, например, переход к новому потенциалу, приводит к необходимости изменения метода решения задачи. Поэтому более предпочтительной является разработка алгоритма численного решения задачи, свободного от ограничений, накладываемых физической моделью.

Непрерывный аналог метода Ньютона, успешно применяемый к численному решению широкого круга физических задач /5/, в том числе и задач на собственные значения /6,7/, представляет достаточно перспективную основу для разработки требуемого алгоритма. Во-первых, переход от стационарной задачи к динамическому процессу с некоторым начальным условием позволяет полностью использовать для построения начального приближения всю априорную информацию о физическом решении задачи. Во-вторых, дискретное представление непрерывного процесса на основе метода приближенного решения задачи Коши (метод Эйлера) позволяет получить устойчивые вычислительные схемы. В-третьих, алгоритм строится при условии существования искомого решения, что вполне естественно при рассмотрении многих физических проблем и что существенно ослабляет ограничения его применимости. Наконец, некоторая модификация алгоритма в рамках общей схемы позволяет для решения задачи (I.1)-(I.2) применить схему численного решения задачи на собственные значения для систем дифференциальных уравнений /8/.

## 2. Непрерывный аналог метода Ньютона в задачах на собственные значения

Результаты данной работы основаны на применении непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН)<sup>/9/</sup> к задачам на собственные значения. Согласно<sup>/10/</sup>, задача на собственные значения с условием нормировки собственного элемента представляет нелинейное уравнение

$$\varphi(z) \equiv \begin{cases} Ay - \lambda y \\ (y, y) - 1 \end{cases} = 0, \quad (2.1)$$

где  $z = (\lambda, y)$  - элемент прямой суммы  $\mathcal{L} = \mathbb{R} \oplus H$ ,  $\mathbb{R}$  - числовая прямая,  $H$  - вещественное гильбертово пространство,  $A$  - линейный симметрический замкнутый оператор ( $A \in \{H \rightarrow H\}$ ). Процесс НАМН для уравнения (2.1) соответствует решению дифференциального уравнения

$$\varphi'(z(t)) \frac{dz}{dt} = -\varphi(z(t)), \quad 0 \leq t < \infty \quad (2.2)$$

с начальным условием  $z(0) = z^0 = (\lambda^0, y^0)$ . (2.3)

Пусть банахово пространство  $B \in H$ , оператор  $A$  ограничен в  $B$ , а единичная сфера компактна в  $B$ . Положим  $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \oplus B$ .

Справедливо следующее утверждение.

**Теорема.** Предположим, что решение уравнения (2.1)  $z^* = (\lambda^*, y^*)$  существует, причем  $\lambda^*$  - простое изолированное собственное значение, а  $y^* \in B$ .

Тогда:

- 1) для оператора  $\varphi'(z^*)$  существует обратный  $\varphi'(z^*)^{-1}$  и  $\|\varphi'(z^*)^{-1}\| \leq c$ ;

Если числа  $\alpha, \beta \geq 0$  таковы, что  $4\alpha^2 + \beta^2 < c^2$ , и элемент  $z^0$  из (2.3) удовлетворяет соотношениям

$$\|y^* - y^0\| \leq \frac{\alpha}{\sqrt{2}}, \quad \|\lambda^* - \lambda^0\| \leq \frac{\beta}{2\sqrt{2}},$$

$$\|p(z^0)\| \frac{c}{1 - c\sqrt{4\alpha^2 + \beta^2}} \leq \sqrt{\frac{\alpha^2}{2} + \frac{\beta^2}{8}},$$

а в окрестности  $\|\lambda^* - \lambda\| \leq \sqrt{4\alpha^2 + \beta^2}$  нет точек спектра оператора  $A$ , то процесс НАМН, рассматриваемый в пространстве  $\mathcal{Y}(z^0 \in \mathcal{Y})$ , сходится при  $t \rightarrow \infty$  к решению  $z^*$  со скоростью

$$\|z(t) - z^*\| \leq \sqrt{\frac{\alpha^2}{2} + \frac{\beta^2}{8}} \exp(-t). \quad (2.4)$$

Доказательство существования оператора  $\Phi'(z^*)^{-1}$  легко провести, повторив рассуждения, аналогичные приведенным в [12] (стр. 474-476). Однако для доказательства ограниченности  $\Phi'(z^*)^{-1}$  в рассматриваемом случае требуется дополнительное условие изолированности собственного значения. Разобьем пространство  $\mathcal{L}$  на два ортогональных подпространства:  $\mathcal{L} = N_1 + N_2$ , где  $N_1 = (\bar{H}, 0)$ ,

$$N_2 = (\alpha y^*, R).$$

Здесь  $\alpha$  — произвольное вещественное число, а пространство  $\bar{H}$  таково, что  $\bar{H} = \{h \in H, (h, y^*) = 0\}$ . Заметим, что оператор  $A - \lambda^* E$ , область значений которого лежит в пространстве  $\bar{H}$ , рассматриваемый как оператор из  $\bar{H}$  в  $\bar{H}$ , имеет ограниченный линейный обратный оператор, такой, что  $\|(A - \lambda^* E)^{-1}\| \leq B < \infty$ .

Это следует, например, из [13] (стр. 228-229). Далее, пусть

$$z_1 = (\alpha y^*, \beta) \in N_2, \quad \text{тогда} \quad \|\Phi'(y^*, \lambda^*) z_1\|^2 = \|\alpha A y^* - \alpha \lambda^* y^* - \beta y^*\|^2 +$$

$$+ |2\alpha (y^*, y^*)|^2 = |\beta|^2 + 4|\alpha|^2 \geq \|z_1\|^2.$$

Если же  $z_2 = (h, 0) \in N_1$ , то  $\|\Phi'(y^*, \lambda^*) z_2\|^2 = \|Ah - \lambda^* h\|^2 \geq \frac{1}{B} \|z_2\|^2$ .

Теперь для любых  $z = \alpha z_1 + \beta z_2$  ввиду ортогональности  $N_1$  и  $N_2$

будет следовать  $\|\Phi'(y^*, \lambda^*)z\|^2 \geq c^2 \|z\|^2$ , где  $c^2 = \min(1, \frac{1}{\beta^2})$ .

По известной теореме об обратной операции имеем:

$$\|\Phi'(y^*, \lambda^*)^{-1}\| \leq \frac{1}{c}.$$

Рассмотрим далее в некоторой окрестности  $\|\bar{z} - z^*\| \leq \varepsilon$

$$\varphi'(\bar{z})z = \begin{Bmatrix} Ay - \bar{\lambda}y - \lambda \bar{y} \\ 2(\bar{y}, y) \end{Bmatrix} = \varphi'(z^*)z + \varphi_1(z),$$

где

$$\varphi_1(z) = \begin{Bmatrix} -(\bar{\lambda} - \lambda^*)y - \lambda(\bar{y} - y^*) \\ 2(\bar{y} - y^*, y) \end{Bmatrix}.$$

Легко получить следующую оценку

$$\|\varphi_1\|^2 \leq 4\|\bar{y} - y^*\|^2 + \|\bar{\lambda} - \lambda^*\|^2.$$

Поэтому, если  $\|\bar{y} - y^*\| \leq \alpha$  и  $\|\bar{\lambda} - \lambda^*\| \leq \beta$ , то, согласно теореме из [12] (стр.157), оператор  $\varphi'(\bar{z})$  обратим. Кроме того, справедлива оценка [12] (стр.157):

$$\|\varphi'(\bar{z})^{-1}\| \leq \frac{\|\varphi'(z^*)^{-1}\|}{1 - \|\varphi'(z^*)^{-1}\|\|\varphi_1\|} \leq \frac{c}{1 - c\sqrt{4\alpha^2 + \beta^2}}$$

Из соотношений (2.2)-(2.3) следует, что

$$\varphi(z(t)) = \varphi(z^0)e^{-t}.$$

Следовательно,

$$\|z(t) - z^*\|^2 \leq \|z(t) - z^0\|^2 + \|z^0 - z^*\|^2 \leq (\|\varphi(z^0)\| \frac{c}{1 - c\sqrt{4\alpha^2 + \beta^2}})^2 (t e^{-t})^2 + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\beta^2}{8} \leq \alpha^2 + \frac{\beta^2}{4}.$$

Таким образом, интегральная кривая  $z(t) = (\lambda(t), y(t))$  не выйдет из области  $4\|y(t) - y^*\|^2 + \|\lambda(t) - \lambda^*\|^2 \leq 4\alpha^2 + \beta^2$ , поскольку  $4\|z(t) - z^*\|^2 \leq 4\alpha^2 + \beta^2$ . Поэтому решение задачи (2.2)-(2.3) продолжаемо для всех  $t$ ,  $0 \leq t < \infty$ . Так как в окрестности

$\|\lambda - \lambda^*\| \leq \sqrt{\beta^2 + 4\alpha^2}$  нет точек спектра, то  $\lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t) - x^*\| = 0$ , причем скорость сходимости, как легко показать, оценивается соотношением (2.4).

### 3. Применение НАМН к приближенному решению задачи (I.1)-(I.2)

При численном решении задачу (I.1)-(I.2), заданную на полуоси  $0 \leq z < \infty$ , необходимо аппроксимировать на некотором отрезке  $0 \leq z \leq \ell$ .

Однородные краевые условия

$$\mathcal{Y}^{(N+\kappa)}(\lambda, \vec{y}) \equiv d_{1\kappa}(\lambda)y'_\kappa(0) + f_{1\kappa}(\lambda)y_\kappa(0) = 0 \quad (3.1)$$

$$\mathcal{Y}^{(2N+\kappa)}(\lambda, \vec{y}) \equiv d_{2\kappa}(\lambda)y'_\kappa(\ell) + f_{2\kappa}(\lambda)y_\kappa(\ell) = 0 \quad d_{i\kappa}^2 + f_{i\kappa}^2 > 0 \quad (3.2)$$

$i = 1, 2; \quad \kappa = 1, 2, \dots, N,$

аппроксимирующие условия (1.2) на отрезке  $0 \leq z \leq \ell$  ( $\ell$  - достаточно велико), позволяют с необходимой точностью учесть известную асимптотику искомого волнового функции. Кроме того,  $\ell$  необходимо выбрать так, чтобы интегральный оператор в (I.1), заданный на полуоси, можно было бы достаточно точно приблизить на  $[0, \ell]$ .

Приближенная таким образом задача (I.1), (3.1), (3.2) доопределяется условием нормировки волновых функций, подобным условию, приведенному в работе /8/:

$$\mathcal{Y}^{(3N+1)}(\lambda, \vec{y}) \equiv \sum_{\kappa=1}^N \int_0^\ell y_\kappa^2(z) dz - 1 = 0. \quad (3.3)$$

Это условие является приближенным, поскольку в реальной задаче нормировка рассматривается на полуоси  $0 \leq z < \infty$ .



Заметим, что условие (3.3) и приближенный интегральный оператор на отрезке  $[0, \ell]$ , аппроксимирующий интегральный оператор в (1.1), могут быть существенно уточнены за счет учета поправки от известной асимптотики волновых функций, как это сделано в работах /6,8/. Это позволяет сузить отрезок  $[0, \ell]$ . Такое уточнение выполнено и при решении данной задачи. Однако, чтобы не усложнять изложение, предположим, что интегралы на отрезке  $[0, \ell]$  достаточно точно аппроксимируют соответствующие интегралы на полуоси.

В рассмотренной приближенной постановке задача (1.1), (3.1)–(3.3) представляет нелинейное функциональное уравнение (2.1), где  $z = (\lambda, \vec{y}(\tau) \in R \oplus L_1^n[0, \ell]$ , а  $\varphi(z) = \{\varphi^{(k)}(z)\}$ ,  $k=1, 2, \dots, 3n+1$ .

Предполагается, что эта задача имеет некоторое решение  $z^* \in \bar{U} = R \oplus B^n$ ,  $\|\varphi(z)\|_0 = \sum_{k=1}^{3n+1} \max_{0 \leq \tau \leq \ell} |\varphi^{(k)}(z)| \tau^{\alpha_k}$ ,  $\bar{U} = \text{int}\{\text{констант Липшица } \varphi^{(k)}(z)\}$ . В системе (1.1) с достаточно гладкими коэффициентами матрицы  $K_{kj}(\tau)$  симметричны, и  $Q_{kj}(\tau, \xi) = Q_{jk}(\xi, \tau)$ . Тогда можно показать, что при достаточно хорошем начальном приближении к искомому решению  $z^*$

$$z(0) = (\lambda^0, \vec{y}^0(\tau)) \quad (3.4)$$

выполняются условия теоремы о локальной сходимости НАНН.

Эти утверждения можно распространить на конечноразностную задачу, аппроксимирующую непрерывную задачу (1.1), (3.1)–(3.3) с сохранением свойств симметрии, и получить результаты, аналогичные теореме Н.Н.Калиткина /II/.

Введение параметра  $t$  в соответствии с (2.2), от которого непрерывно зависят неизвестные  $\lambda = \lambda(t)$ ,  $\vec{y} = \vec{y}(t, \tau)$

в приближенной задаче (1.1), (3.1)–(3.3) приводит к эволюционной системе :

$$\mu(t) = \frac{d}{dt} \lambda(t), \quad v_n(\tau, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right) y_n(\tau, t); \quad (3.5)$$

$$v_n'(\tau, t) + \sum_{j=1}^N (K_{nj}(\tau) v_j'(\tau, t) + \int_0^{\ell} Q_{nj}(\tau, \xi) v_j(\xi, t) d\xi) - \lambda(t) v_n(\tau, t) = -\varphi^{(N)}(\lambda(t), \vec{y}(\tau, t); \ell) + \mu(t) y_n(\tau, t); \quad (3.6)$$

$$d_{i\kappa}(\lambda(t)) v_{i\kappa}'(\tau, t) + f_{i\kappa}'(\lambda(t)) v_{i\kappa}(\tau, t) = -\varphi^{(N+\kappa)}(\lambda(t), \vec{y}(\tau, t)) - \mu(t) (d_{i\kappa-1}(\lambda(t)) y_{i\kappa}'(\tau, t) + f_{i\kappa}(\lambda(t)) y_{i\kappa}(\tau, t)); \quad (3.7)$$

$$\sum_{\kappa=1}^N \int_0^{\ell} y_{i\kappa}(\tau, t) v_{i\kappa}(\tau, t) d\tau = -\frac{1}{2} \varphi^{(2N+1)}(\lambda(t), \vec{y}(\tau, t)) \quad (3.8)$$

$$\kappa = 1, 2, \dots, N; \quad i = 1, 2; \quad y_{i1} = 0, \quad y_{i2} = \ell;$$

с начальными условиями (3.4). Здесь штрихами обозначены частные производные по  $\tau$ , а дополнительный аргумент  $\ell$  в операторе  $\varphi^{(N)}$  (формула (3.6)) означает аппроксимацию интегрального оператора в (I.1) на отрезке  $[0, \ell]$ .

Дискретная аппроксимация эволюционной задачи (3.5)–(3.8) с начальными условиями (3.4) по параметру  $t$  реализуется с помощью метода Эйлера, аналогично работам [6, 8]. Полуось  $0 \leq t < \infty$  разбивается узловыми точками:  $t_n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ )

$$t_{n+1} = t_n + \tau_n, \quad (t_0 = 0). \quad (3.9)$$

(Далее в обозначениях величин, зависящих от  $t$ , при  $t = t_n$  используется индекс  $n$ ).

Выражения (3.5) заменяются разностными соотношениями)

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + \tau_n \mu_n, \quad y_{\kappa, n+1}(\tau) = y_{\kappa, n}(\tau) + \tau_n v_{\kappa, n}(\tau). \quad (3.10)$$

Если при  $t = t_n$  известны  $\lambda_n$  и  $\vec{y}_n(\tau)$ , то задачу (3.6)–(3.7) можно рассматривать как однопараметрическое семейство краевых задач

для системы интегро-дифференциальных уравнений с параметром  $\mu_n$  относительно  $\bar{v}_n(\tau)$ .

$$v_{\kappa,n}''(\tau) + \sum_{j=1}^n (K_{\kappa j}(\tau) v_{j,n}(\tau) + \int_0^l Q_{\kappa j}(\tau, \xi) v_{j,n}(\xi) d\xi) - \lambda_n v_{\kappa,n}(\tau) = \Phi_n^{(i)}(\tau) + \mu_n \Phi_n^{(i)}(\tau), \quad (3.11)$$

$$d_{i\kappa,n} v_{\kappa,n}'(0) + f_{i\kappa,n} v_{\kappa,n}(0) = g_{i,n}^{(1)} + \mu_n g_{i,n}^{(2)}, \quad (3.12)$$

$$d_{i\kappa,n} v_{\kappa,n}'(l) + f_{i\kappa,n} v_{\kappa,n}(l) = g_{i,n}^{(1)} + \mu_n g_{i,n}^{(2)}, \quad \text{где} \quad (3.13)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{1,n}^{(i)}(\tau) &= -(y_{\kappa,n}''(\tau) + \sum_{j=1}^n (K_{\kappa j}(\tau) y_{j,n}(\tau) + \int_0^l Q_{\kappa j}(\tau, \xi) y_{j,n}(\xi) d\xi) - \lambda_n y_{\kappa,n}(\tau)), \\ \Phi_{2,n}^{(i)}(\tau) &= y_{\kappa,n}(\tau), \\ g_{i,n}^{(1)} &= -(d_{i\kappa,n} y'_{\kappa,n}(\tau_i) + f_{i\kappa,n} y_{\kappa,n}(\tau_i)), \\ g_{i,n}^{(2)} &= -(\frac{\partial}{\partial \lambda} d_{i\kappa,n} y'_{\kappa,n}(\tau_i) + \frac{\partial}{\partial \lambda} f_{i\kappa,n} y_{\kappa,n}(\tau_i)), \\ n &= 0, 1, 2, \dots; \quad \kappa = 1, 2, \dots, N; \quad i = 1, 2; \quad \tau_i = 0, \tau_i = l. \end{aligned} \right\} \quad (3.14)$$

Решение этой задачи представимо в виде

$$v_{\kappa,n}(\tau, \mu_n) = v_{\kappa,n}^{(1)}(\tau) + \mu_n v_{\kappa,n}^{(2)}(\tau), \quad (3.15)$$

причем функции  $v_{\kappa,n}^{(i)}(\tau)$  ( $i=1,2$ ) - решения граничных задач с левыми частями задачи (3.11)-(3.13). В правую часть уравнений, определяющих данные краевые задачи, входят функции  $\Phi_n^{(i)}(\tau)$ ,  $g_{i,n}^{(1)}$  и  $g_{i,n}^{(2)}$ . (3.14).

Определив функции  $v_{\kappa,n}^{(i)}(\tau)$  и подставляя при  $t = t_n$  выражение (3.16) в формулу (3.8), можно найти значение  $\mu_n$ :

$$\mu_n = -\frac{1}{2} \left( \sum_{\kappa=1}^n \int_0^l (y_{\kappa,n}^2(\tau) + 2 y_{\kappa,n}(\tau) v_{\kappa,n}^{(1)}(\tau) d\tau) \left( \sum_{\kappa=1}^n \int_0^l y_{\kappa,n}^2(\tau) v_{\kappa,n}^{(1)}(\tau) d\tau \right)^{-1} \right). \quad (3.16)$$

Это дает возможность определить функцию  $v_{\kappa,n}(\tau)$  (3.15) и с помощью соотношений (3.9), (3.10) перейти к новому значению  $t = t_{n+1}$ , вычислив  $\lambda_{n+1}$  и  $y_{n+1}(\tau)$ .

Поскольку начальные значения  $\lambda_0, \bar{y}_0(\tau)$  предполагаются заданными, процесс вычисления  $\lambda_n, \bar{y}_n(\tau)$  определен для всех  $n=1, 2, \dots$ . Доказательство сходимости этого процесса для общего уравнения вида (2.2), (2.3) приведено, например, в работе<sup>/5/</sup>.

#### 4. Модификация НАМН

Реализация описанной выше схемы приближенного решения задачи (1.1)-(1.2) приводит к решению на каждом шаге при  $t=t_n, n=0, 1, 2, \dots$  двух краевых задач для систем линейных интегро-дифференциальных уравнений. Численное решение этой задачи является сложным, поскольку при дискретной аппроксимации приходится оперировать с полными матрицами высокого порядка.

В настоящей работе с целью устранения указанной трудности предлагается замена системы (3.II) на аппроксимирующую "возмущенную" систему. При этом неизвестные на данном шаге  $n$  функции  $\bar{y}_{j,n}(\tau)$  в интегральном члене заменяются на известные  $\tilde{y}_{j,n}(\tau) = \bar{y}_{j,n-1}(\tau)$  с предыдущего шага. Определенный таким образом интегральный член может быть перенесен в правую часть системы (3.II). Заметим, что существуют различные возможности выбора  $\tilde{y}_{j,0}(\tau)$ . При решении рассматриваемых в работе задач  $\tilde{y}_{j,0}(\tau) \equiv 0$ .

В результате замены получается однопараметрическое семейство краевых задач для систем дифференциальных уравнений, решение которого также можно представить в виде (3.I5), где функции  $\bar{y}_{i,n}^{(i)}(\tau)$  ( $i=1, 2$ ) - решения краевых задач

$$v_{\kappa, n}^{(i)'}(\tau) + \sum_{j=1}^n K_{\kappa_j}(\tau) v_{j, n}^{(i)}(\tau) - \lambda_n v_{\kappa, n}^{(i)}(\tau) = \bar{\Phi}_n^{(i)}(\tau), \quad (4.1)$$

$$d_{m\kappa, n} v_{\kappa, n}^{(i)'}(\gamma_m) + f_{m\kappa, n} v_{\kappa, n}^{(i)}(\gamma_m) = g_{m, n}^{(i)}; \quad (4.2)$$

Здесь

$$\bar{\Phi}_n^{(i)}(\tau) = \Phi_n^{(i)}(\tau) - \sum_{j=1}^n \int_0^{\tau} \Phi_{\kappa_j}(\tau, \xi) v_{j, n-1}(\xi) d\xi,$$

$$\bar{\Phi}_n^{(2)}(\tau) = \Phi_n^{(2)}(\tau),$$

а остальные величины определены формулами (3.14).

Таким образом, решение краевой задачи для систем интегро-дифференциальных уравнений в дискретной по параметру  $t$  схеме реализации НАМН заменено решением граничной задачи для систем дифференциальных уравнений, которое легко выполнить численно с помощью алгоритма матричной прогонки, как и в работах [6, 8]. Схема вычисления  $\lambda_n$ ,  $\bar{J}_n(\tau)$ , описываемая формулами (4.1)-(4.2), (3.16), (3.9), (3.10), осуществляется в последовательности, приведенной в п.3.

**Замечание I.** Для локальной сходимости этого процесса требуются некоторые дополнительные ограничения по сравнению с условиями, сформулированными в п.2. Здесь приводятся основные идеи доказательства сходимости модифицированного процесса. Детальное описание является предметом отдельного рассмотрения.

Оператор  $A$  в уравнении (2.1) для общей интегро-дифференциальной задачи можно представить в виде  $A = D + S$ , где  $D$  - дифференциальный оператор задачи, а  $S$  - интегральный. Следуя системе обозначений, аналогичной (3.10), можно представить дискретный процесс, полученный на основании метода Эйлера с постоянным шагом  $\tau$ , в виде

$$(D - \lambda_n E) v_n + S v_n - y_n \mu_n = (D - \lambda_n E + S) y_n,$$

$$\mathcal{L}(y_n, v_n) = -((y_n, y_n) - 1),$$

$$v_n = \mathcal{C}^{-1}(y_{n+1} - y_n), \quad \mu_n = \mathcal{C}^{-1}(\lambda_{n+1} - \lambda_n),$$

или  $\mathcal{F}'(\lambda_n, y_n)(\mu_n, v_n) = -\mathcal{F}(\lambda_n, y_n)$ .

Для модифицированного процесса имеем

$$(D - \lambda_n E) v_n + S \frac{y_n - y_{n-1}}{\tau} - y_n \mu_n = (D - \lambda_n E + S) y_n, \quad (4.3)$$

$$\mathcal{L}(y_n, v_n) = -((y_n, y_n) - 1).$$

Преобразуем систему (16) к более удобному виду. Определим оператор

$$\bar{S} \in \{\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}\} \quad (\text{см. п. 2}), \quad \text{так что} \quad \bar{S}(\lambda, y) = (0, Sy).$$

Ясно, что  $\|\bar{S}\| = \|S\|$ . Тогда систему (16) можно представить в виде

$$\mathcal{F}'(\lambda_n, y_n)(\mu_n, v_n) - \bar{S}(\mu_n, v_n) = -\mathcal{F}(\lambda_n, y_n) - \bar{S}(\mu_n, \frac{y_n - y_{n-1}}{\tau}).$$

Учитывая, что в окрестности решения  $z^* = (\lambda^*, y^*)$  уравнения (3) существует  $\mathcal{F}'(z_n)^{-1}$ , где  $z_n = (\lambda_n, y_n)$ , получим

$$\mathcal{C}^{-1}(z_{n+1} - z_n) - \mathcal{F}'(z_n)^{-1} \bar{S} \mathcal{C}^{-1}(z_{n+1} - z_n) = \mathcal{F}'(z_n)^{-1} (\mathcal{F}(z_n) + \bar{S} \mathcal{C}^{-1}(z_n - z_{n-1})).$$

Обозначим  $\mathcal{U}(z_n) = \mathcal{F}'(z_n)^{-1} \bar{S}$ . Необходимым условием разрешимости

последнего уравнения, а, следовательно и (16), является обратимость

оператора  $E - \mathcal{U}(z_n)$  в окрестности решения  $z^*$ . Положим  $\Gamma = (E - \mathcal{U}(z^*))^{-1}$ .

Можно доказать, что если  $\|E - \Gamma\| < (\frac{1+\tau}{1-\tau})^2$ , то процесс (16) локально сходится. Поскольку  $E - (E - \mathcal{U}(z^*))^{-1} = \mathcal{U}(z^*)(E - \mathcal{U}(z^*))^{-1}$ ,

то условие локальной сходимости процесса (4.3) можно записать в виде

$$\|\psi'(z^*)^{-1} \bar{S} (E - \psi'(z^*)^{-1})\| < \left(\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}\right)^2.$$

Замечание 2. При практической реализации модифицированной схемы (4.1)–(4.2), (5.16), (3.9), (3.10) в нее внесено дополнительное условие нормировки на каждом шаге  $n$  полученных функций  $y_{k, n+1}(z)$  согласно формуле

$$\sum_{k=1}^n \int_0^l y_{k, n+1}^2(z) dz - 1 = 0. \quad (4.4)$$

Это условие существенно улучшает сходимость процесса при решении рассматриваемых здесь задач.

## 5. Задача определения формфакторов реакции одноуклонных передач

Рассмотренный выше метод применен к численному решению задачи определения радиальной части формфактора реакции одноуклонных передач. Вопрос о вычислении формфактора возникает, например, при изучении реакций срыва и подхвата и извлечении из них спектроскопической информации.

В качестве примера рассмотрим здесь задачу вычисления радиальной части формфактора реакции одноуклонной передачи  $\mathcal{C}a^{42}(p, d)\mathcal{C}a^{41}$ . В работах [2, 3] показано, что в этом случае, исходя из уравнения Шредингера с учетом принципа Паули, можно получить систему связанных интегро-дифференциальных уравнений вида (I.1) с граничными условиями (I.2). Следуя обозначениям, принятым в работах [2, 3, 4],

систему для радиальной части формфактора  $f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')}$  можно представить следующим образом:

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} + V_0(r) + (E_{(n', \ell', j')} - E) \right\} f_{(n', \ell', j')}^{(n', \ell', j')} + \sum_{(n, \ell, j)} W_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} - \sum_{(n, \ell, j)} \left\{ \sum_{n_c} \chi_{n_c, \ell', j'}(r) \int_0^\infty dE \chi_{n_c, \ell', j'}(E) W_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} \right\} = 0. \quad (5.1)$$

Здесь  $(n, \ell, j), (n', \ell', j')$  пробегает состояния  $2P_{1/2}, 2P_{3/2}, 1f_{5/2}, 1f_{7/2}$ , а  $(n_c, \ell', j') - 1P_{1/2}, 1P_{3/2}$ ,

$E_{(n', \ell', j')}$  - одночастичная энергия связи нуклона в  $Ca^{41}$ ,

$E$  - искомое собственное значение.

Функции  $V_0(r)$ ,  $W_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')}$ ,  $\chi_{n_c, \ell', j'}(r)$ , а также параметры, входящие в эти функции, взяты такими же, как в работах [2, 4].

Граничные условия с учетом асимптотики радиальной части формфактора выбраны в виде

$$f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} (0) = 0 \quad (5.2)$$

$$f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} (r \rightarrow \infty) = a \exp(-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E - E_{(n', \ell', j')}|} r), \quad (5.3)$$

где  $a$  - неизвестная асимптотическая константа. При сведении данной задачи на конечный отрезок  $0 \leq r \leq R$ , для исключения константы  $a$ , в точке  $R$  ставится условие на логарифмическую производную

$$\frac{f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')} (r)}{f_{(n, \ell, j)}^{(n', \ell', j')}}, \text{ используя соотношение (5.3).}$$

Задача (5.1)-(5.3), аппроксимированная на конечном отрезке, решалась с помощью изложенного метода. Полученные результаты, представляющие самостоятельный физический интерес, свидетельствуют о больших возможностях и эффективности использования данного численного метода в задачах теории ядра.



В качестве иллюстрации на рис. I приведены графики вычисленных описанным методом формфакторов для перехода из состояний  $2P_{1,2}^{+}$  и  $2P_{3,2}^{-}$  ядра  $Ca^{40}$  в основное состояние  $0^{+}$  ядра  $Ca^{42}$ .

Сплошной линией изображен формфактор, полученный в работе /4/ при пренебрежении проектирующим (то есть интегральным) членом. Таким образом, в этом случае решалась задача для системы дифференциальных уравнений.

Пунктиром изображен формфактор, вычисленный с помощью излагаемого метода, то есть определенный из системы интегро-дифференциальных уравнений.

Для сравнения точками показан формфактор, полученный в работе /4/ с учетом проектирующего члена методом разложения по базису Штурма-Лиувилля.

Проведенное сравнение позволяет сделать вывод, что результаты, полученные численным методом, сравнительно мало отличаются от результатов, полученных в работе /4/, что обусловлено удачным выбором базиса Штурма-Лиувилля для конкретной задачи. Однако столь малые отклонения в формфакторе могут дать немалый вклад (20%-30%) в сечения срыва и в зависимости от выбранной модели могут оказаться важными при исследовании других физических задач.

## 6. Особенности вычислений и исследование

### сходимости

Развитый алгоритм, описываемый формулами (I.1), может быть легко реализован на электронной вычислительной машине (ЭВМ). Программа вычисления формфакторов реакций одно-, двух-, трех- и четырех-нейтральных передач написана на ФОРТРАНе, а решение задачи осуществлено на ЭВМ СДС-6200. Эта программа является модификацией программы, описанной в работе /8/.

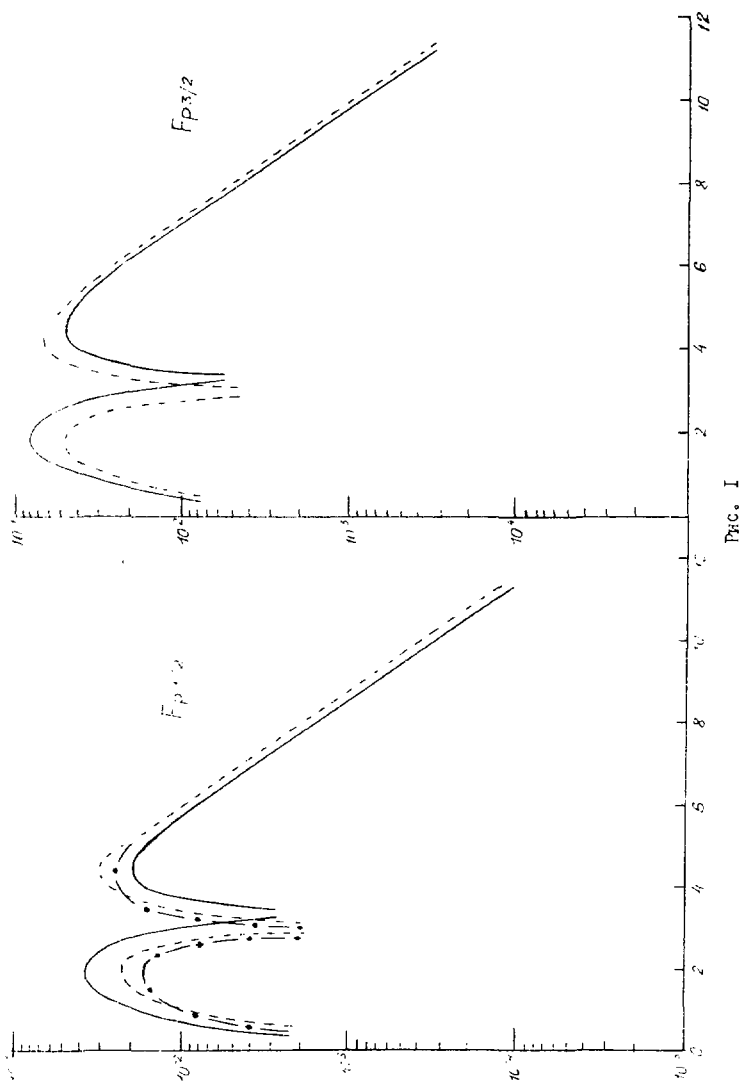


FIG. 1

При численном решении краевой задачи (4.1) - (4.2) используется конечно-разностная аппроксимация этой задачи на равномерной сетке узлов с шагом  $h$  точности порядка  $O(h^2)$ . Для приближения интегралов используются квадратурные формулы того же порядка точности. Конечно-разностная задача решается с помощью алгоритма матричной прогонки.

В качестве меры точности вычисления  $\lambda_n, \bar{y}_n(x)$  на шаге  $n$  выбрана величина

$$\delta_n = \max_{\substack{1 \leq k \leq N \\ 0 \leq m \leq M}} \left| \varphi^{(k)}(\lambda_n, \bar{y}(x_m); l) \right|, \quad (5.1)$$

являющаяся невязкой, которая подается при подстановке приближенного решения в конечно-разностный оператор, аппроксимирующий на равномерной сетке узлов  $x_m$  с шагом  $h = \frac{l}{N}$  отрезка  $[0, l]$  оператор в (1.1).

Величина  $\tau_n$  в соотношениях (3.9)-(3.10) выбирается пропорционально изменению отношения  $\frac{\delta_{n-1}}{\delta_n}$ , что обеспечивает численную устойчивость вычислительного процесса. Как видно из Замечания 1 п.4), сходимость данной схемы существенно зависит от  $\tau$ .

Кроме того, сходимость процесса зависит от выбора начальных приближений для собственного значения и собственной функции. При решении рассматриваемых здесь задач в качестве начальных приближений выбирались собственные значения и волновые функции сферического потенциала Саксона-Вудса.

Следует заметить, что довольно быстрая сходимость (15-20 шагов) в зависимости от выбранных начальных приближений к решению задачи позволяет применить предложенный метод и в качестве аппарата уточнения решений, полученных другими методами, разработанными в моделях ядерной физики.

Начальное значение невязки (6.1)  $\delta_0 \sim 1$ . В процессе уточнения конечное значение невязки  $\delta$  для различных вариантов задачи изменится в пределах  $10^{-5}$ - $10^{-6}$ .

Полное время счета одного варианта задачи с выдачей промежуточной информации и конечного результата в среднем ( $N = 6, \ell = 8, h = 0.1$ ) составляет 5 минут.

С целью исследования сходимости решения конечно-разностной системы к точному решению при уменьшении шага разностной сетки были проведены расчеты с тремя различными сетками ( $0 \leq \gamma \leq 8$ , шаг по оси  $z$   $h = 0.2, 0.1, 0.07$ ) для рассмотренной здесь физической задачи

$$Ca^4(d, P)Ca^4(0^+ \text{gr. st}).$$

В таблице I приведены в зависимости от шага  $h$  разностной сетки собственные значения  $E$  и значения собственных функций в некоторых совпадающих узловых точках сеток. В таблице 2 даны значения коэффициентов смешивания  $a_i^*$ , определенные в работе /8/ и вычисленные для данной задачи при тех же значениях.

Как видно из приведенных таблиц, разностная сетка с шагом  $h = 0.1$  обеспечивает относительную точность результатов 0.01, необходимую при решении подобных задач.

## 7. Заключение

В последние годы при теоретических исследованиях задач ядерной физики наибольшее распространение получил так называемый алгебраический метод решения систем вида (1.1), (1.2). Суть такого подхода заключается в разложении искомых решений в ряд по определенному базису, обусловленному физической моделью, с последующей процедурой диагонализации для определения коэффициентов разложения. Подробное изложение данного вопроса можно найти в работах /2,3/.

Таблица I.

Шаг по оси $z$		0.2	0.1	0.07
$0 \leq z \leq 8$				
E		-2I.455	-2I.437	-2I.436
$y_1$ (2P $_{1/2}$ )	1.4	-2.153 E-2	-2.071 E-2	-2.045 E-2
	2.8	-6.060 E-3	-4.972 E-3	-4.581 E-3
	4.2	2.573 E-2	2.606 E-2	2.620 E-2
	5.6	1.397 E-2	1.405 E-2	1.409 E-2
	7.0	4.202 E-3	4.217 E-3	4.221 E-3
$y_2$ (2P $_{3/2}$ )	1.4	-5.180 E-2	-5.036 E-2	-4.998 E-2
	2.8	-1.442 E-2	-1.289 E-2	-1.240 E-2
	4.2	6.298 E-2	6.306 E-2	6.318 E-2
	5.6	3.439 E-2	3.439 E-2	3.441 E-2
	7.0	1.071 E-2	1.069 E-2	1.069 E-2
$y_3$ (1f $_{3/2}$ )	1.4	5.966 E-3	5.996 E-3	6.002 E-3
	2.8	4.713 E-2	4.715 E-2	4.717 E-2
	4.2	5.341 E-2	5.346 E-2	5.348 E-2
	5.7	1.948 E-2	1.955 E-2	1.957 E-2
	7.0	4.913 E-3	4.929 E-3	4.931 E-3
$y_4$ (1f $_{7/2}$ )	1.4	7.145 E-2	7.176 E-2	7.182 E-2
	2.8	5.317 E-1	5.314 E-1	5.314 E-1
	4.2	5.937 E-1	5.938 E-1	5.939 E-1
	5.6	2.279 E-1	2.286 E-1	2.287 E-1
	7.0	6.563 E-2	6.585 E-2	6.588 E-2

Таблица 2

$\eta$ $0 \leq \gamma \leq 8$	0.2	0.1	0.07
$\alpha^2 1P'_{1/2}$	1.94 E-3	1.90 E-3	1.39 E-3
$\alpha^2 2P'_{1/2}$	1.15 E-2	1.12 E-2	1.12 E-2
$\alpha^2 1f^{5/2}$	7.76 E-3	7.77 E-3	7.73 E-3
$\alpha^2 2f^{3/2}$	9.78 E-1	9.79 E-1	9.79 E-1

Опыт прямого численного решения некоторых задач ядерной физики с помощью изложенного метода показал, что на основе полученных результатов можно более адекватно описать исследуемые физические процессы, а также найти пути оптимизации применяемых физических моделей.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А.Лейн, Р.Томас. Теория ядерных реакций при низких энергиях. М., И.Л., 1960, 315-359.
2. R.H. Ibraga, V.F. Ivanov. Shell-Model Continuum in Nuclear Bound States. Phys.Rev., 1970, 2, 1, 1788-1800.
3. Е.Банг, В.Е.Бунаков, Ф.А.Гареев, Г.Шульц. Эффекты смешивания конфигураций в реакции однонуклонных передач. ЭЧАЯ, 1974, 5(2), 263-307.
4. Е.Банг, Ф.А.Гареев, Р.Шульц, Р.М.Ямалеев. Методы вычисления факторов срыва в приближении связанных каналов. Препринт ОИЯИ, Р4-6916, Дубна, 1973.
5. Е.П.Жидков, Г.И.Макаренко, И.В.Пузынин. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, 1973, 4(1), 127-166;  
Е.П.Жидков, И.В.Пузынин. О некоторых новых приложениях метода введения параметра к физическим задачам. В сборнике "Программирование и математические методы решения физических задач", Д10-7707, Дубна, 1974, 13-23.

6. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина.  
Continuous Analog of Newton's Method as Applied to the  
Calculation of the Binding Energy of Metic Molecules.  
J.Comput. Phys., 1973, 13,1, 1-14;  
Вычисление уровней энергии мезомолекул водорода с учетом адиабатических поправок на движение ядер. ЖЭТФ, 1973, 65, I, 28-34.
7. Ф.А.Гареев, Г.Шудьц, Р.М.Ямалеев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, И.Н.Кухтина. Подбарьерные реакции срыва и подхвата на ядрах в области актинидов. Препринт ОИЯИ Р4-8394, Дубна, 1974.
8. Ф.А.Гареев, Т.П.Пузынина, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев. Программа вычисления одночастичных волновых функций в деформированном ядре с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. Сообщение ОИЯИ II-808I, Дубна, 1974.
9. М.К.Гъзурин, Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итеративных методов. Изв. ВУЗов, Математика, 1958, 5(6), 18-31.
10. Л.В.Канторович. Приближенное решение функциональных уравнений. Успехи математических наук, 1956, II, 6, 99-116.
11. Н.Н.Калиткин. Решение задач на собственные значения методом дополненного вектора. Журнал "Вычислительная математика и математическая физика", 1965, 5, 6, II07-III6.
12. Л.А.Люстерник, В.И.Соболев. Элементы функционального анализа, М., Наука, 1965.
13. Т.Като. Теория возмущений линейных операторов. М., Мир, 1972.