ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р7-99-194

Р.С.Курманов[1], Г.И.Косенко, Г.Д.Адеев[2]

НОВАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ КУЛОНОВСКОЙ ЭНЕРГИИ В МОДЕЛИ ЖИДКОЙ КАПЛИ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

[1]Омский государственный университет путей сообщения
[2]Омский государственный университет

1999

Введение

Уже несколько десятков лет модель жидкой капли (МЖК) верой и правдой служит ядерной физике. Предложенная еще на заре развития ядерной физики Френкелем [1] и Бором и Уиллером [2], она служит основой и в модели оболочечных поправок Струтинского [3]. Энергия ядра в МЖК определяется как:

$$E_{tot}^{LD} = B_s^{LD} E_s^{(0)} + B_c^{LD} E_c^{(0)} + B_R^{LD} E_R, \tag{1}$$

где первое слагаемое – поверхностная энергия ядра, второе – кулоновская, третье – вращательная. Безразмерные величины B_s^{LD}, B_c^{LD} и B_R^{LD} – функционалы зависящие от формы ядра. $E_s^{(0)}$ и $E_c^{(0)}$ значения поверхностной и кулоновской энергии сферического ядра, а E_R – зависящая от углового момента часть вращательной энергии. Наиболее трудоемкая часть этих расчетов — нахождение B_c^{LD}. Новый способ расчета этой величины и будет описан далее.

Постановка задачи и решение

По определению кулоновской энергии это шестикратный интеграл, который вычисляется по объему ядра.

$$E_c = E_c^{(0)} B_c^{LD} = E_c^{(0)} \frac{15}{R_0^5 32\pi^2} \int dV dV' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{2}$$

Здесь R_0 – радиус сферического ядра.

Многократное повторение вычисления интегралов кулоновской энергии в расчетах типа ланжевеновской динамики [4] приводит к необходимости оптимизации методов вычисления и расчетных формул. Предполагая, что заряд равномерно распределен по объему ядра, можно упростить расчеты. Так, уже известен способ перехода от двойных объемных интегралов к двойному поверхностному [5]. Интегрирование производится по поверхности ядра, а форма ядра зависит параметров. Таким образом, получается, что интеграл является функционалом от формы поверхности ядра. Преобразование к поверхностному интегралу позволяет избавиться от двух интегрирований, но платой за это является усложнение подынтегральной функции.

$$\int dV dV' \frac{1}{\sigma} = -\frac{1}{6}\int (d\mathbf{S}\sigma)(d\mathbf{S}'\sigma)\frac{1}{\sigma}, \tag{3}$$

где $\sigma = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и $\sigma = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$.

Приведеная выше формула наглядно демонстрирует это. Появляется угловая зависимость от ориентации элемента поверхности и разности радиусов-векторов. Двойное интегрирование ведется по всей поверхности, и кажется, что это должно приводить к независимости от углов. Такой усложненный вид подынегральной функции появился из-за сложного выбора скалярного произведения. Мы должны из четырех векторов образовать скаляр, потому что энергия является скалярной величиной. Но в то же время, более простое скалярное произведение дает нам произведение двух элементов поверхности, которое мы должны умножить на некоторую функцию, зависящую от модуля разности радиусов-векторов.

$$\int dV dV' \frac{1}{\sigma} = \int (d\mathbf{S}d\mathbf{S}')f(\sigma). \tag{4}$$

Математическая постановка вопроса звучит так: можно ли найти такую функцию $f(\sigma)$ и как это можно сделать наиболее простым способом. Для примера, если использовать формулу (3) для поверхностного интегрирования, то для нахождения подынтегральной функции необходимо делать фурье-преобразование, затем перейти в комплексную плоскость, чтобы найти фурье-образ. Способ является регулярным, но не эффективным при призвольной интегрируемой функции в двойном объемном интеграле.

С другой стороны, используя интегральную теорему о градиенте ([6], стр. 175), можно преобразовать новую формулу (4).

$$\int (d\mathbf{S}d\mathbf{S}')f(\sigma) = \int dV'(d\mathbf{S}\ grad_{\mathbf{r}'})f(\sigma) \tag{5}$$

Теперь появился объемный интеграл и скалярное произведение появившегося вектора градиента и оставшегося второго поверхностного интеграла. Применим интегральную теорему дивергенции вектора.

$$\int dV'(d\mathbf{S}\ grad_{\mathbf{r}'})f(\sigma) = \int dV dV' div_{\mathbf{r}}\ grad_{\mathbf{r}'} f(\sigma). \tag{6}$$

Получаем двойной объемный интеграл, а подынтегральная функция это склярное произведеие двух операторов "набла", дифференцирующих по разным переменным неизвестную функцию. Поскольку это было написано для произвольной поверхности интегрирования, то подынтегральные функции должны быть равны.

$$div_{\mathbf{r}}\ grad_{\mathbf{r}'} f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{7}$$

Заменим переменные $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$, по которым дифференцируем, на $\sigma = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. вектор разности двух радиусов-векторов.

$$-div_{\mathbf{r}}\ grad_{\mathbf{r}} f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -\Delta_r f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \tag{8}$$

Тогда получим лапласиан искомой функции, который должен быть равен электростатическому потенциалу. Вообще, это уравнение в электростатике называется уравнением Пуассона.

$$-\Delta_\sigma f(\sigma) = \rho(\sigma), \tag{9}$$

где $\rho(\sigma) = \frac{1}{\sigma}$

Поскольку "распределение заряда" $\rho(\sigma)$ сферически-симметрично. то и "потенциал" $f(\sigma)$ должен быть таким же. Переходя в сферическую систему координат, получаем дифференциальное уравнение второго порядка на искомую функцию.

$$-\frac{1}{\sigma^2}\frac{d}{d\sigma}\left[\sigma^2 \frac{d}{d\sigma} f(\sigma)\right] = \rho(\sigma). \tag{10}$$

Подставляем новую функцию в уравнение Пуассона

$$f(\sigma) = \frac{u(\sigma)}{\sigma} \tag{11}$$

и получаем

$$-\frac{1}{\sigma}\frac{d^2}{d\sigma^2}u(\sigma) = \frac{1}{\sigma}. \tag{12}$$

Проинтегрируем выражение (12)

$$u(\sigma) = -\frac{\sigma^2}{2} + C_1\sigma + C_2 \tag{13}$$

и положим константы равными нулю, т.е. $C_1 = C_2 = 0$. Получаем решение $f(\sigma) = -\frac{\sigma}{2}$.

Итак, мы получили новый переход от двойного объемного интеграла к двойному поверхностному:

$$\int dVdV'\frac{1}{\sigma} = -\frac{1}{2}\int (d\mathbf{S}d\mathbf{S}')\sigma. \tag{14}$$

Проверим его аналитически для сферически-симметричного случая. Делая простое интегрирование, получаем обычный результат:

$$-\frac{1}{2}\int (d\mathbf{S}d\mathbf{S}')\sigma = \frac{R_0^5 32\pi^2}{15}, \tag{15}$$

где $B_c^{LD} = 1$, как и должно быть для сферического ядра.

Запишем полученную формулу в цилиндрических координатах. Ограничиваясь только формами, обладающими аксиальной симметрией, т.е. $\rho = \rho(z)$, получаем

$$\int (d\mathbf{S}d\mathbf{S}')|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \tag{16}$$

$$2\pi \int_{z_{min}}^{z_{max}} dz \int_{z'_{min}}^{z'_{max}} dz' \int_0^{2\pi} d\phi \{\rho(z)\rho(z')cos\phi + \rho(z)\frac{d\rho(z)}{dz}\rho(z')\frac{d\rho(z')}{dz'}\} \times$$
$$\{\rho^2(z) + \rho^2(z') - 2\rho(z)\rho(z')cos\phi + (z - z')^2\}^{1/2}.$$

Если мы имеем неявную зависимость координат $\rho(x)$ и $z(x)$, то формула выглядит следующим образом:

$$\int (d\mathbf{S}d\mathbf{S}')|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| =$$

$$2\pi \int_{-1}^{1} dx \int_{-1}^{1} dx' \int_0^{2\pi} d\phi \{\rho(x)\rho(x')cos\phi\frac{dz(x)}{dx}\frac{dz(x')}{dx'} +$$
$$\rho(x)\frac{d\rho(x)}{dx}\rho(x')\frac{d\rho(x')}{dx'}\} \times$$
$$\{\rho^2(x) + \rho^2(x') - 2\rho(x)\rho(x')cos\phi + (z(x) - z(x'))^2\}^{1/2}.$$

Перейдем теперь к обсуждению численных результатов, какова точность и быстрота вычисления по этой формуле. Численное сравнение нашей формулы проводилось с формулой из [7](стр. 73).

$$B_c^{LD} = \frac{15}{4\pi}\int_{z_{min}}^{z_{max}} dz \int_{z_{min}}^{z} dz' \int_0^{\pi} d\phi \frac{\rho^2\rho'^2 sin^2\phi}{z - z' + f}, \tag{17}$$

здесь введены обозначения $f = \sqrt{(z - z')^2 + \rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' cos\phi}$ и $\rho' = \rho(z')$.

Мы хотим обратить внимание на еще одно преимущество полученной нами формулы — подынтегральная функция не имеет особенности в знаменателе, как это имеет место в аналогичных формулах в [5, 7, 8]. Это очень хорошо с точки зрения численных расчетов. Не нужно специально обходить эту особенность.

Сравнение результатов представлено в таблице. Для формы ядра мы выбрали $\{c,h,\alpha\}$-параметризацию [3], полагая для простоты, два параметра равными нулю $h = 0, \alpha = 0$, и изменяя только удлинение ядра c. Видно, что расхождение в результатах наблюдается в пятой значащей цифре, при интегрировании методом Гаусса с 32 узлами, и в седьмой — с 96. На примере сферы ($c = 1, B_c^{LD} = 1$) хорошо видно, наша формула переоценивает точный результат, а прежняя недооценивает его. Отметим также, что расчет по новой формуле занимает на $10 - 15\%$ меньше времени, в зависимости от параметризации формы ядра.

Заключение

Представлен новый способ перехода от двойных объемных к двойным поверхностным интегралам. Дан простой и регулярный способ

Таблица 1: Сравнение результатов расчета по старой (стар) – (17) и новой (нов) – (16) формулам. c - параметр удлинения в $\{c, h, \alpha\}$-параметризации. Цифры означают количество узлов при интегрировании методом Гаусса.

c	$32^{стар}$	$32^{нов}$	разница	$96^{стар}$	$96^{нов}$	разница
1.00	0.999999	1.00001	-1.64E-5	0.99999999	1.0000006	-6.26E-7
1.01	0.999977	0.99999	-1.66E-5	0.99997771	0.9999783	-6.35E-7
1.02	0.999911	0.99992	-1.69E-5	0.99991133	0.9999119	-6.44E-7
1.03	0.999801	0.99981	-1.71E-5	0.99980155	0.9998022	-6.54E-7
1.04	0.999649	0.99966	-1.74E-5	0.99964902	0.9996496	-6.64E-7
1.05	0.999454	0.99947	-1.77E-5	0.99945435	0.9994550	-6.75E-7
1.06	0.999218	0.99923	-1.79E-5	0.99921811	0.9992188	-6.85E-7
1.07	0.998940	0.99895	-1.82E-5	0.99894084	0.9989415	-6.97E-7
1.08	0.998623	0.99864	-1.85E-5	0.99862304	0.9986237	-7.08E-7
1.09	0.998265	0.99828	-1.88E-5	0.99826517	0.9982658	-7.20E-7
1.10	0.997867	0.99788	-1.91E-5	0.99786765	0.9978683	-7.32E-7
1.11	0.997430	0.99745	-1.95E-5	0.99743087	0.9974316	-7.45E-7
1.12	0.996955	0.99697	-1.98E-5	0.99695520	0.9969559	-7.58E-7
1.13	0.996440	0.99646	-2.02E-5	0.99644095	0.9964417	-7.71E-7
1.14	0.995888	0.99590	-2.05E-5	0.99588843	0.9958892	-7.84E-7
1.15	0.995297	0.99531	-2.09E-5	0.99529790	0.9952987	-7.98E-7
1.16	0.994669	0.99469	-2.12E-5	0.99466959	0.9946704	-8.13E-7
1.17	0.994003	0.99402	-2.16E-5	0.99400371	0.9940045	-8.27E-7
1.18	0.993300	0.99332	-2.20E-5	0.99330044	0.9933012	-8.42E-7
1.19	0.992559	0.99258	-2.24E-5	0.99255991	0.9925607	-8.58E-7
1.20	0.991782	0.99180	-2.28E-5	0.99178227	0.9917831	-8.74E-7
1.21	0.990967	0.99099	-2.32E-5	0.99096760	0.9909684	-8.90E-7
1.22	0.990115	0.99013	-2.37E-5	0.99011599	0.9901169	-9.06E-7
1.23	0.989227	0.98925	-2.41E-5	0.98922748	0.9892284	-9.23E-7
1.24	0.988302	0.98832	-2.46E-5	0.98830210	0.9883030	-9.40E-7
1.25	0.987339	0.98736	-2.50E-5	0.98733985	0.9873408	-9.58E-7
1.26	0.986340	0.98636	-2.55E-5	0.98634073	0.9863417	-9.76E-7
1.27	0.985304	0.98533	-2.60E-5	0.98530469	0.9853056	-9.94E-7
1.28	0.984231	0.98425	-2.65E-5	0.98423169	0.9842327	-1.01E-6
1.29	0.983121	0.98314	-2.70E-5	0.98312165	0.9831226	-1.03E-6
1.30	0.981974	0.98200	-2.75E-5	0.98197449	0.9819755	-1.05E-6

вычисления подынтегральных функций в поверхностном интеграле. Необходимо провести лишь два интегрирования от функции, стоящей в объемном интеграле. В новой формуле подынтегральная функция не имеет особенностей типа деления на нуль, что позволяет не применять специальных численных приемов. Данный метод был применен к вычислению кулоновской энергии атомного ядра в МЖК с резким краем. Проведено численное сравнение результатов расчетов по новой и одной из применявшихся ранее формул. Кулоновский функционал, рассчитанный по новой формуле, имеет достаточную точность, которая растет с увеличением числа узлов интегрирования. Время вычисления по новой формуле меньше на 10 – 15%, чем по ранее используемым.

Авторы благодарят В.В.Пашкевича за полезные дискуссии и ряд консультаций.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Я. Френкель // ЖЭТФ, 1939. Т.9. С.641.

[2] N.Bohr and J.A.Wheeler // Phys.Rev. 1939. V.56. P.426.

[3] M.Brack, J.Damgaard, A.S.Jensen, H.C.Pauli, V.M.Strutinsky, C.Y.Wong // Rev.Mod.Phys. 1972. V.44. No.2. P.320.

[4] Г.И.Косенко, И.Г.Гончар, О.И.Сердюк, Н.И.Писчасов // ЯФ. 1992, Т.55, С.920.

[5] K.T.R.Davies, J.R.Nix // Phys.Rev. 1976. V.C14. No.5. P.1977; H.J.Krappe, J.R.Nix, A.J.Sierk // Phys.Rev. 1979. V.C20. No.3 P.992.

[6] Г.Корн, Т.Корн // Справочник по математике для научных работников и инженеров, М. "Наука", 1984, ред. И.Г.Арамановнч; G.Korn, T.Korn //Mathematical Handbook for scientists and engineers, McGrow-Hill Book Company, 1968.

[7] R.W.Hasse and W.D.Myers // "Geometrical Relationships of Macroscopic Nuclear Physics", Berlin: Springer-Verlag, 1988.

[8] J.N.P.Lawrence // Phys.Rev. 1965. V.139. No.5B. P.B1227.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июля 1999 года.