ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-84-210

КАЗАЧА
Галина Стефановна

О РАЗЛОЖЕНИЯХ МИТТАГ-ЛЕФФЛЕРА ФУНКЦИЙ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА И ВЫЧИСЛЕНИИ РЕЗОНАНСНЫХ ФУНКЦИЙ

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1984

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук С.И.СЕРДЮКОВА

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук Н.И.ПЯТОВ
кандидат физико-математических наук С.Я.ИЩЕНКО

Ведущее научно-исследовательское учреждение – Киевский институт кибернетики АН УССР.

Автореферат разослан "4" мая 1984 года.

Защита состоится "14" июня 1984 года в "10^{30}" часов на заседании Ученого Совета Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук З.И.ИВАНЧЕНКО

<u>Актуальность</u>. Разложения функций непрерывного спектра по дискретным базисам представляют большой интерес для развития численных методов решения задач теоретической ядерной физики. Задача учета непрерывного спектра актуальна как с точки зрения структурных ядерных расчетов, так и с точки зрения изучения ядерных реакций. Например, при использовании метода диагонализации полного гамильтониана на базисе одночастичных состояний среднего поля ядер состояния континуума необходимо учитывать, чтобы сохранить полноту базиса разложения. Кроме того, эти состояния играют важную роль как конечные или промежуточные состояния во многих ядерных реакциях. Спектр состояний с положительной энергией является непрерывным, а соответствующие волновые функции не являются квадратично-интегрируемыми. Это приводит к ряду трудностей при учете состояний континуума в реальных расчетах.

Интересную возможность учета непрерывного спектра представляют разложения функций континуума по дискретному базису. Для этих целей был предложен ряд базисов (базисы Айзенбуда и Вигнера, Капура и Пайерлса, функция Вайнберга и Штурма-Лиувилля). Однако волновые функции этих дискретных базисов зависят от энергии. Часто более удобно, чтобы от энергии зависели только коэффициенты разложения. В этом случае можно использовать систему резонансных функций.

Прежде чем использовать разложения функций непрерывного спектра в реальных расчетах необходимо исследовать сходимость разложений и свойства базиса резонансных функций. Для практического применения этих разложений необходимо также уметь вычислять резонансные функции для реальных физических потенциалов.

<u>Цель работы</u>.

I) Исследование сходимости разложений Миттаг-Леффлера функций непрерывного спектра по системе резонансных функций в случае одноканального потенциального рассеяния на сферически-симметричном потенциале конечного радиуса действия.

2) Разработка алгоритмов вычисления резонансных функций.

Научная новизна работы. I) Доказана теорема о равномерной сходимости разложений Миттаг-Леффлера одночастичной волновой функции рассеяния и функции Грина.

2) На основе интегральных представлений получены новые разложения S -матрицы и одночастичной функции рассеяния по системе резонансных функций.

3) Доказана сходимость соотношений полноты для системы резонансных функций в слабом смысле и теорема о суммируемости в среднем рядов, входящих в эти соотношения.

4) Разработаны численные алгоритмы вычисления резонансных функций. Предложен алгоритм определения комплексных собственных значений, позволяющий последовательно вычислять нужное число собственных значений.

5) Доказано, что итерационный процесс, положенный в основу алгоритма, сходится к одному из собственных значений при любом начальном приближении.

Практическая ценность работы. Предложенные в работе разложения функций непрерывного спектра и алгоритмы вычисления резонансных функций могут быть использованы при решении задач теоретической ядерной физики, в которых необходимо учитывать влияние непрерывного спектра. Например, в структурных ядерных расчетах и при вычислении сечений ядерных реакций.

Апробация работы. Работы, положенные в основу диссертации, докладывались на XXIX Всесоюзном совещании по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра (Рига, I979 г.), У Международном совещании по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач (Дубна, I983 г.), а также на научных семинарах ЛВТА и ЛТФ ОИЯИ.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 6 работах, в том числе в трудах совещаний, в Nucl. Phys. и в сообщениях ОИЯИ.

Объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Содержит 98 страниц машинописного текста, 9 рисунков, 5 таблиц, список литературы, содержащий 77 наименований.

Содержание работы. Во введении дается обзор литературы по тематике диссертации, а также изложение основных результатов диссертации по главам.

Глава I посвящена исследованию сходимости разложений Миттаг-Леффлера функций непрерывного спектра и соотношений полноты резонансных функций. Рассматривается случай одноканального потенциального

рассеяния бесспиновой незаряженной частицы на сферически-симметричном потенциале конечного радиуса действия ($q(x)=0,\ x>a$).

В § I даны определения функции рассеяния, S -матрицы, функции Грина и резонансных функций. Резонансные функции являются решениями несамосопряженной краевой задачи для радиального уравнения Шредингера

$$\varphi'' - \left\{q(x) + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right\}\varphi + k^2\varphi = 0, \qquad 0 \le x \le a,$$

$$\varphi(0) = 0, \qquad \frac{\varphi'(a)}{\varphi(a)} = \frac{h_\ell^{+\prime}(ka)}{h_\ell^{+}(ka)}, \tag{I}$$

где h_ℓ^+ – функция Риккати-Ганкеля первого рода. Резонансные функции удовлетворяют условию нормировки

$$\int_0^a \varphi_n^2(x)dx + \frac{\varphi_n^2(a)}{2k_n}\left[\frac{d}{dk}\left(\frac{h_\ell^{+\prime}(ka)}{h_\ell^{+}(ka)}\right)\right]_{k=k_n} = 1.$$

Собственные значения k_n краевой задачи (I) комплексные и являются полюсами S -матрицы, функции рассеяния $\Psi_\ell^+(k,x)$ и функции Грина $G_\ell^+(k,x,x')$.

Для потенциалов конечного радиуса действия хорошо известно расположение собственных значений (полюсов S -матрицы) на k -плоскости. В верхней полуплоскости число полюсов конечно. Они лежат на мнимой полуоси и соответствуют связанным состояниям с отрицательной энергией. В нижней полуплоскости также имеется конечное число полюсов, лежащих на мнимой полуоси и отвечающих антисвязанным состояниям. Кроме них существует бесконечное число полюсов, расположенных в Ш и IУ квадрантах симметрично относительно мнимой оси. Отвечающие им состояния принято называть квазистационарными.

Для потенциалов конечного радиуса действия известно также, что S -матрица, функция рассеяния и функция Грина являются мероморфными функциями переменной k. Предполагается, что все полюса простые.

Важную роль при исследовании сходимости разложений по системе резонансных функций играет теорема Коши, которая является частной формулировкой теоремы Миттаг-Леффлера. Согласно этой теореме, мероморфная функция $f(z)$ может быть представлена в виде суммы главных частей в полюсах z_n и некоторого полинома $Q(z)$ степени p. Если при $|z| \to \infty$ на системе правильных контуров функция $f(z)$ ведет себя как $O(z^{p_0})$, то полученное разложение сходится равномерно по z в любом замкнутом контуре, не содержащем полюсов при $p \geq p_0$.

Так как S-матрица, функция рассеяния и функция Грина являются мероморфными функциями переменной k, к ним можно применить теорему Коши.

В § 2 приведены разложения S-матрицы, функции рассеяния и функция Грина, полученные по теореме Коши. Обсуждаются свойства сходимости этих разложений. Полученные разложения функций $S_\ell(k)$, $\psi_\ell^+(k,x)$, $G_\ell^+(k,x,x')$ сходятся равномерно по k при определенных значениях параметра $p\,(p\geqslant 1)$. Однако функция рассеяния и функция Грина являются функциями не только переменной k, но x и x'. Расчеты показывают, что скорость сходимости разложений зависит от значений переменных x и x'. Оценка скорости сходимости разложений Миттаг-Леффлера функции Грина и функции рассеяния сводится к оценке контурного интеграла

$$J_N(x,x') = \oint\limits_{C_N} \frac{G_\ell^+(s,x,x')}{s^{p+1}(s-k)}\, ds \qquad \text{при} \qquad N\to\infty, \tag{2}$$

где p – порядок полинома $Q(k)$, содержащегося в разложении.

Сформулирована теорема I. Разложения Миттаг-Леффлера функции Грина

$$G_\ell^+(k,x,x') = \sum_{q=0}^{p} \frac{k^q}{q!}\, G_\ell^{+(q)}(0,x,x') + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{2k_n(k-k_n)} \tag{3}$$

и функции $\psi_\ell^G(k,x) = k^{-1} h_\ell^+(ka)\, \psi_\ell^+(k,x)$,

$$\psi_\ell^G(k,x) = \sum_{q=0}^{p} \frac{k^q}{q!}\, \psi_\ell^{G(q)}(0,x) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(x)\,\varphi_n(a)}{2k_n(k-k_n)} \tag{4}$$

сходятся равномерно по x и x' на отрезке $[0,a]$ со скоростью $O(N^{-p})$ при $p\geqslant 1$. При $p\geqslant -1$ разложение (3) сходится равномерно по x и x' для $x+x'\in[0,2a-\delta]$, а разложение (4) равномерно по x на отрезке $[0,a-\delta]$ для любого $\delta>0$ со скоростью $O(\frac{1}{\delta} N^{-1-p-\frac{\delta}{a}})$, где N – число членов, учтенных в разложениях (3), (4).

Предполагается, что потенциал $q(x)$ является ограниченной бесконечно дифференцируемой на $[0,a]$ функцией, удовлетворяющей условию $q(a-0)\neq 0$.

В § 3 доказывается лемма об асимптотическом поведении нерегулярного решения уравнения Шредингера при $k\to\infty$. Нерегулярное решение $y_1(k,x)$ является решением радиального уравнения Шредингера со следующими граничными условиями:

$$y_1(k,a) = 1, \qquad y_1'(k,a) = \frac{h_\ell^{+\prime}(ka)}{h_\ell^+(ka)} .$$

Лемма I. Пусть $q(x)$ – ограниченная, бесконечно дифференцируемая на $[0,a]$ функция, удовлетворяющая условию $q(a-0)\neq 0$. Тогда при $k\to\infty$ $y_1(k,x)$ допускает асимптотическое разложение

$$y_1(k,x) = \frac{h_\ell^+(kx)}{h_\ell^+(ka)}\left\{1+O\left(\tfrac{1}{k}\right)\right\} + h_\ell^-(kx)\, h_\ell^+(ka)\, \frac{q(a)}{(2ik)^2}\left\{1+O\left(\tfrac{1}{k}\right)\right\},$$

где h_ℓ^+, h_ℓ^- – функции Риккати-Ганкеля первого и второго рода соответственно.

В § 4 доказывается теорема I. Получены равномерные по x и x' оценки интеграла (2) и, следовательно, оценка скорости сходимости разложений Миттаг-Леффлера функции рассеяния и функции Грина.

В § 5 получены новые разложения S-матрицы и функции рассеяния на основе соответствующих интегральных представлений и разложений Миттаг-Леффлера функции Грина и функции рассеяния. Показано, что эти разложения сходятся быстрее, чем разложения, полученные непосредственно по теореме Коши.

В § 6 исследуется сходимость соотношений полноты резонансных функций

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x)\,\varphi_n(x') = \delta(x-x'), \tag{5}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(x)\,\varphi_n(x')}{k_n} = 0 .$$

Доказано, что соотношение (5) сходится в слабом смысле над пространством дважды дифференцируемых функций $f(x)$ с ограниченной полной вариацией $f''(x)$ и нулевыми граничными условиями $f(0)=f(a)=f'(a)=0$.

Доказана теорема о суммируемости в среднем рядов, входящих в соотношения полноты.

Теорема 2. Ряд (5) суммируем $(C,2)$, а ряд (6) суммируем $(C,1)$ всюду на отрезке $[0,a-\delta]$ при любом $\delta>0$, за исключением $x=x'$.

Глава II посвящена вычислению резонансных функций.

В § I рассматривается алгоритм вычисления связанных и антисвязанных состояний. Поскольку в этом случае собственные значения мнимые ($k_n = \pm i\varkappa_n$), задача (I) сводится к определению вещественных собственных значений $\varkappa_n$ и вещественных собственных функций. Задача решалась конечно-разностным методом. Использовались разностные схемы второго и четвертого порядка точности (схема Нумерова). Система разностных уравнений решалась методом встречной прогонки. Собственные значения определялись из условия равенства логарифмических производных в некоторой средней точке x_0:

$$Q(k) = \frac{\varphi'}{\varphi}\Big|_{x=x_0-0} - \frac{\varphi'}{\varphi}\Big|_{x=x_0+0} = 0.$$

Для потенциалов прямоугольной ямы и Саксона-Вудса приведены для сравнения собственные значения, вычисленные с разными шагами. Показано, что при шаге $h = 0{,}02$ ($a \approx 10$) устанавливаются четыре значащие цифры как в собственных значениях, так и в собственных функциях.

В § 2 приведен алгоритм вычисления квазистационарных состояний. Уравнения Шредингера в этом случае также аппроксимировалось разностной схемой Нумерова. Определенную трудность составляет вычисление комплексных собственных значений. Оказалось, что удобнее искать нули более гладкой функции

$$Q(k) = \varphi'(x_0-0)\ \varphi(x_0+0) - \varphi'(x_0+0)\ \varphi(x_0-0) = 0 .$$

В этом случае система разностных уравнений решалась с двух концов отрезка $[0,a]$ шаг за шагом по рекуррентным формулам. Для определения собственных значений использовалась модификация метода, предложенного Воеводиным В.В. (ЖВМ и МФ, 1961, т.I, с.187) для определения нулей полинома. Доказано, что используемый метод сходится к одному из собственных значений при любом начальном приближении. Используя информацию об асимптотическом поведении собственных значений k_n при $n \to \infty$, можно таким образом подобрать значения параметров алгоритма, что собственные значения вычисляются в заданной последовательности

$$|k_1| < |k_2| < |k_3| < \ldots\ldots$$

При вычислении квазистационарных состояний при шаге $h = 0{,}01$ также устанавливаются четыре значащие цифры.

В § 3 излагается метод решения интегрального уравнения Вольтерра, предложенный Книрком (Knirk D.L. Journ. Comp. Phys., 1976, v.21, p.371). Для проверки полученных ранее результатов этим методом были вычислены резонансные s-состояния ($\ell = 0$). При этом уравнение Шредингера заменялось эквивалентным интегральным уравнением. Последнее аппроксимировалось схемой пятого порядка точности. Результаты, полученные двумя методами, хорошо согласуются между собой.

В главе III приводятся численные примеры, иллюстрирующие быструю сходимость полученных разложений S -матрицы и функции рассеяния.

В § I рассматривается потенциал прямоугольной ямы. В случае $\ell = 0$ выражения для S-матрицы функции рассеяния и резонансных функций можно получить аналитически. Исследовались два типа разложений: полученные непосредственно по теореме Коши и из интегральных представлений с разными значениями параметра p . Приведены графики величин, характеризующих уклонение приближенных значений от точных в зависимости от k и числа учтенных в разложениях полюсов N .

Показано, что наиболее точными являются разложения, полученные из интегральных представлений. Они хорошо согласуются с точными формулами в широком диапазоне энергии ($0 \le E \le 1250$ МэВ).

В § 2 для потенциала Саксона-Вудса приведены результаты вычисления S -матрицы и функции рассеяния по наиболее быстро сходящимся разложениям. Результаты сравнивались со значениями, полученными при численном решении задачи конечно-разностным методом. Из приведенных графиков видно, что рассматриваемые разложения дают достаточно точные результаты.

При исследовании аналитических свойств решений уравнения Шредингера важно знать зависимость собственных значений от глубины потенциальной ямы. Ранее такая зависимость изучалась для потенциала прямоугольной ямы и экранированного кулоновского потенциала. В § 2 приведены собственные значения k_n в случае потенциала Саксона-Вудса ($\ell = 0,1$) для различных значений глубины потенциала.

Основные результаты диссертации. I) Для класса потенциалов, представляющих интерес для ядерной физики, доказана теорема о равномерной сходимости по x и x' разложений Миттаг-Леффлера одночастичной волновой функции рассеяния $\Psi_\ell^+(k,x)$ и функции Грина $G_\ell^+(k,x,x')$.

2) Предложены новые виды разложений одночастичной волновой функции рассеяния и S -матрицы по резонансным функциям. Эти разложения получены из интегральных представлений для $S_\ell(k)$ и $\Psi_\ell^+(k,x)$ и разложений Миттаг-Леффлера функции Грина и функции рассеяния. Показано, что данные разложения сходятся быстрее, чем разложения, полученные непосредственно по теореме Коши.

3) Для потенциалов прямоугольной ямы и Саксона-Вудса проведены численные расчеты, иллюстрирующие быструю сходимость полученных разложений.

4) Проведено исследование сходимости соотношений полноты резонансных функций. Доказано, что соотношения полноты сходятся в слабом смысле. Доказана также теорема о суммируемости соотношений полноты в среднем.

5) Разработаны и реализованы в виде программ на Фортране на ЭВМ CDC-6500 алгоритмы вычисления резонансных функций. Задача решается методом конечных разностей. Для определения комплексных собственных значений разработан алгоритм, позволяющий последовательно вычислять нужное число собственных значений. Доказано, что итерационный процесс, положенный в основу алгоритма, сходится к одному из собственных значений при любом начальном приближении.

6) Исследована зависимость собственных значений (полюсов S -матрицы) от глубины потенциальной ямы в случае потенциала Саксона-Вудса ($\ell=0,1$).

Работы, положенные в основу диссертации:

1. Казача Г.С. ОИЯИ, I1-9462, Дубна, 1976.
2. Казача Г.С. ОИЯИ, Р11-12360, Дубна, 1979.
3. Гареев Ф.А., Ершов С.Н., Казача Г.С. Тезисы докладов XXIX совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Рига, 1979.
4. Bang J., Ershov S.N., Gareev F.A., Kazacha G.S. JINR, E-12497, JINR, E-12538, Dubna, 1979, Nucl. Phys., 1980, v. A339, p.89.
5. Казача Г.С. ОИЯИ, Р5-84-75, Дубна, 1984.
6. Казача Г.С., Сердюкова С.И. В сб."У Международное совещание по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач, Дубна, 1983".

Рукопись поступила в издательский отдел
2 апреля 1984 года.