ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-93-21

УДК 519.6,530.145,
539.12,539.19

СМИРНОВ
Юрий Сергеевич

НЬЮТОНОВСКИЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВАРИАЦИОННЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Специальность: 05.13.16 — применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1993

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

Научный руководитель :

доктор физико - математических наук
ведущий научный сотрудник ВИНИЦКИЙ Сергей Ильич

Официальные оппоненты :

доктор физико - математических наук РОДИОНОВ Игорь Дмитриевич

доктор физико - математических наук КУПЕРИН Юрий Александрович

Ведущее научно - исследовательское учреждение :

Научно-исследовательский институт ядерной физики Московского государственного университета им.М.В.Ломоносова, Москва

Защита диссертации состоится "5" марта 1993 г. в 10,30 часов на заседании Специализированного ученого совета Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна, Московской области, конференц - зал ЛВТА.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "2" февраля 1993 г.

Ученый секретарь
Специализированного совета
кандидат физико - математических наук Ив... З.М.Иванченко

Общая характеристика работы

В диссертации разработана новая итерационная схема решения многоканальной задачи рассеяния, описываемой системой радиальных уравнений Шредингера. В основу итерационной схемы положена модификация непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН), в которой исходный оператор представлен в виде суммы основной части, имеющей простую структуру, и ее возмущения [1,2]. В качестве дополнительного условия в постановке задачи рассеяния рассмотрено функциональное условие, соответствующее вариационному принципу Хюльтена. В эволюционном ньютоновском процессе используется функция включения возмущения. Применение такой модификации НАМН позволяет строить итерационные схемы, в которых на каждой итерации обращается оператор более простой структуры, чем полученный из исходного. Это свойство можно успешно использовать как при решении систем большой размерности в задачах, которые позволяют выделить "главную" часть дифференциального оператора, так и при использовании многоточечных разностных аппроксимаций высокого порядка точности, сводя обращение ленточных матриц с большой шириной ленты к последовательному обращению лишь трехдиагональных матриц.

Актуальность

Задача рассеяния является одной из важнейших задач квантовой механики, имеющей многочисленные приложения. Исследования,

[1] Puzynin I.V.,Vinitsky S.I.-Muon Catalyzed Fusion,1988,v.3,p.307.

[2] Жанлав Т.,Пузынин И.В. - ЖВМ и МФ,1992,т.31,с.3

проведенные в диссертации, инициированы потребностями теории, планирования и обработки экспериментов в таких интенсивно развиваемых областях, как мюонный катализ, атомная и ядерная физика. Особую важность представляют задачи низкоэнергетического и резонансного рассеяния мезоатомов на ядрах изотопов водорода и электронов на атомах. К специфике рассматриваемых задач рассеяния, имеющих практический интерес, следует отнести тот факт, что потенциалы в системе радиальных уравнений задаются таблично [3] на некоторой кусочноравномерной (в дальнейшем - квазиравномерной) сетке узлов. Исследование точности результатов, полученных численными методами на сетках такого типа, в задачах рассеяния является актуальной проблемой. В низкоэнергетическом рассеянии нулевая энергия представляет собой, как правило, особую точку спектра [4]. Поэтому для достижения необходимой точности требуются корректная постановка граничных условий и построение устойчивых вычислительных алгоритмов, что также является актуальной задачей.

Ряд специальных численных методов решения данного класса задач дает хорошие результаты только для конкретных видов взаимодействия квантовых систем. Переход к новым моделям, как правило, требует значительной доработки имеющихся вычислительных схем или разработки принципиально новых алгоритмов.

Таким образом, построение эффективных вычислительных процедур, свободных от указанных недостатков, представляет собой актуальную задачу, обусловленную потребностями теории и математических моделей эксперимента. В данной диссертации получены новые итерационные схемы, имеющие следующие свойства:

- устойчивость,

[3]Ponomarev L.I.,Puzynina T.P. JINR Comm.,E4-83-778,Dubna,1983.

[4]Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир,1969.

- экономичность (в смысле использования ресурсов ЭВМ),
- высокая точность.

Кроме того, они позволяют получить в процессе вычислений полезные функциональные зависимости для искомых параметров рассеяния.

Цели и задачи исследований

В диссертационой работе рассматриваются задача рассеяния и задача на связанные состояния для квантовомеханических систем в рамках системы радиальных уравнений Шредингера

$$(L-\lambda I)y(x) = (I\frac{d^2}{dx^2} + Q(x,\gamma)\frac{d}{dx} + U(x,\gamma) - \lambda(\gamma)I)y(x,\gamma) = 0, \quad (1)$$

$$x_{min} < x < x_{max}.$$

Соответствующие краевые условия получаются при помощи переноса асимптотических условий для волновых функций из сингулярной области на конечную область интегрирования $[x_{min}, x_{max}]$:

$$\begin{aligned} l_1(x,a,y(x,\gamma)) &= 0, \quad x=x_{min}, \\ l_2(x,b,y(x,\gamma)) &= 0, \quad x=x_{max}. \end{aligned} \quad (2)$$

Функции l_1, l_2 в краевых условиях (2) нелинейно зависят от векторов параметров a и b, в число компонент которых входят в задаче на связанные состояния неизвестный спектральный параметр λ - энергия связи системы, а в задаче рассеяния - λ и δ - заданная энергия столкновения и неизвестные фазы рассеяния. В уравнении (1) I - единичная матрица, Q и U - заданные матрицы потенциалов взаимодействия, которые могут зависеть от физических параметров γ, $y(x,\gamma)$ - искомые вектор-функции. В задаче на связанные состояния требуется определить собственные значения λ и соответствующие собственные функции y, а в задаче рассеяния по заданному значению энергии столкновения λ необходимо найти фазы рассеяния δ и волновые функции y.

Задачи (1)-(2) можно рассматривать как нелинейное уравнение относительно неизвестного элемента z

$$\phi(z) = 0, \qquad (3)$$

где $z=(\lambda,y)$ в задаче на связанные состояния и $z=(\lambda,y,\delta)$ в задаче рассеяния. При этом в задаче на связанные состояния граничная задача (1)-(2) дополняется условием нормировки собственной функции:

$$(y(x),y(x)) - 1 = \int_{x_{min}}^{x_{max}} y^2(x)dx - 1 = 0, \qquad (4)$$

При решении задачи рассеяния целесообразно воспользоваться известным в теоретической физике вариационным принципом Хюльтена [5], следствием которого является следующее функциональное соотношение

$$(y(x),(L-\lambda I)y(x)) = 0, \qquad (5)$$

При этом спектральный параметр λ можно не фиксировать $(\lambda=\lambda_*)$ в основном уравнении (1) и граничных условиях (2), а использовать для этой цели дополнительное интегральное соотношение, фиксирующее энергию в "слабом" смысле:

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} y(x)(L-\lambda_* I)y(x)dx = 0. \qquad (6)$$

Таким образом в уравнении (3) компонетами оператора ϕ являются левые части уравнения (1), краевых условий (2), а также одно или несколько из соотношений (5),(6) и (4).

Оператор ϕ в уравнении (3) допускает разбиение на две части:

$$\phi = \phi_0 + \phi_1. \qquad (7)$$

[5] Демков Ю.Н. Вариационные принципы теории столкновений. М.: Физматгиз, 1958.

Здесь ϕ_0 является главной частью оператора ϕ и имеет достаточно простую структуру, а ϕ_1 рассматривается как возмущение. Модификация НАМН, используемая в диссертации для решения уравнения (3) предполагает введение непрерывного параметра t $(0\le t<\infty)$ и функции включения возмущения вида

$$g(t) = 1 - e^{-t},\ g(0)=0,\ g(\infty)=1 \qquad (8)$$

в нелинейный оператор ϕ, заданный в виде (7) :

$$\phi(t,z(t)) = \phi_0(z(t)) + g(t)\phi_1(z(t)). \qquad (7')$$

Эволюционный ньютоновский процесс (ЭНП) представляет собой задачу Коши в банаховом пространстве $(z\in Z)$:

$$\frac{d}{dt}\phi(t,z(t)) = -\phi(z(t)),\quad z(0) = z_0, \qquad (9)$$

которая решается методом Эйлера на неравномерной сетке $t_{k+1}=t_k+\tau_k$, $t_0=0$, $k=1,2,\ldots$ Это приводит на каждом шаге по параметру t к решению задачи с запаздыванием в правой части:

$$\begin{cases} \phi_0'^{(k)}\Delta z_k = -[\phi^{(k)} + g_k\phi_1'^{(k)}\Delta z_{k-1}], \\ z_0 = 0, \end{cases} \qquad (10)$$

относительно итерационной поправки Δz_k. Введение разбиения (7') позволяет на каждой ньютоновской итерации обращать операторы простой структуры, связанные с ϕ_0. При дискретизации уравнения (10) по независимой переменной $x\in[x_{min},x_{max}]$ эта же идея может быть использована для повышения порядка точности соответствующей разностной схемы. Выбор итерационного параметра τ_k позволяет приблизить к оптимальной скорость сходимости итерационного процесса (10).

Целью диссертационной работы является:

- разработать эффективную вычислительную схему и программное обеспечение, позволяющие единообразно решать многоканальные задачи рассеяния и задачи на связанные состояния большой размерности;

- построить модификацию ньютоновского итерационного алгоритма с включением возмущения для решения задачи рассеяния на основе использования вариационных функционалов и разностных схем повышенного порядка точности;
- исследовать эффективность построенных вычислительных схем;
- применить разработанные пакеты прикладных программ для практических расчетов в теории мезокатализа, атомной и ядерной физике.

Работы, положенные в основу диссертации, выполнены в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ Объединенного института ядерных исследований.

Научная новизна

Представленный в диссертации подход к решению задачи рассеяния впервые строится на основе сочетания широко известных в теоретической физике вариационных соотношений и использования модифицированного НАМН, что позволяет достаточно просто решать задачи некоторого класса, описываемые системой уравнений большой размерности, и применять многоточечные разностные схемы для аппроксимации дифференциальных операторов высокой точности без существенного усложнения алгоритмов. На основе полученных при помощи системы аналитических вычислений REDUCE многоточечных конечноразностных аппроксимаций разработаны эффективные вычислительные алгоритмы решения краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка на равномерных и квазиравномерных сетках, а также исследованы их свойства применительно к задаче рассеяния.

Численно решены задачи рассеяния, актуальные в различных областях современной физики. Использование аппроксимации повышенной точности в сочетании с проведенными исследованиями области интегрирования и ее влияния на точность вычисляемых

характеристик позволяет в области энергий, близких к нулю, с высокой точностью вычислять характеристики процессов упругого и неупругого рассеяния в задачах теории мезокатализа. Впервые получены более точные по сравнению с другими работами характеристики процессов рассеяния $(d\mu)_{1s}+t$ и $(t\mu)_{1s}+d$ при низких энергиях столкновения E вблизи порогового значения в диапазоне $0.001эВ \le E \le 0.3эВ$ и значениях полного орбитального момента системы $l=0,1,2,3$.

Построенные на основе НАМН высокоточные итерационные схемы на равномерных и квазиравномерных сетках продемонстрировали устойчивость, экономичность и возможность дополнительно получать полезные функциональные зависимости параметров рассеяния в окрестности энергии столкновения для указанного класса задач низкоэнергетического рассеяния.

Разработан новый графический интерфейс, позволяющий строить начальные приближения, которые используются при решении спектральных задач и задач рассеяния итерационными методами, в частности НАМН. Программное обеспечение написано на языке FORTRAN-77, что дает возможность присоединять к нему различные модули пользовательских программ,а также строить и корректировать кривые, применяя стандартное оборудование персональных копьютеров.

Практическая ценность

На основе предложенных методов и алгоритмов разработан пакет прикладных программ, который позволяет находить численное решение с заданной точностью для спектральных задач и задач рассеяния на ЭВМ, включая персональные копьютеры с небольшой оперативной памятью.

При помощи разработанных прикладных программ численно решены задачи рассеяния из различных разделов современной физики, таких как мюонный катализ, атомная и ядерная физика. Вычислены энергии связанных состояний мезомолекул $tt\mu$, $dt\mu$, $dd\mu$, $pp\mu$, $pd\mu$, $pt\mu$ с аномальной пространственной четностью $\xi = -(-1)^J$ и орбитальным моментом $J=1$ в двухуровневом приближении адиабатического подхода. Проведен расчет положения E_R и ширины Γ_R резонанса формы $^1P^0_{0(2,1)}$ отрицательного иона водорода H^-. Рассчитана ширина резонанса Γ в реакции упругого рассеяния нейтрона на ядре свинца ^{208}Pb. Вычислены волновые функции, фазы и сечения низкоэнергетического упругого и неупругого рассеяния мезоатомов $(d\mu)_{1s}$, $(t\mu)_{1s}$ и $(p\mu)_{1s}$ на ядрах изотопов водорода t, d и p.

Разработка графического интерфейса задания начальных приближений в итерационном процессе НАМН для решения различных спектральных задач и задач рассеяния представляет практический шаг в интеграции численных методов и средств компьютерной графики. Данный графический интерфейс включен в пакет прикладных программ, применен для решения ряда задач, рассмотренных в диссертации.

Кроме того, все представленные в диссертации алгоритмы и программы имеют самостоятельный методический и прикладной интерес и могут быть применены для решения других спектральных задач и задач рассеяния.

В настоящее время данный комплекс прикладных программ успешно используется в ОИЯИ,передан в ИАЭ им.Курчатова (г.Москва) и Монгольский государственный университет.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы докладывались на семинарах ЛВТА ОИЯИ, на Национальной конференции по физике нескольких тел и кварк-адронных систем, Харьков, Украина, 1992; на III Международном симпозиуме по слабым и электромагнитным взаимодействиям в ядрах, Дубна, 1992; на Международном симпозиуме по мюонному катализу, Уппсала, Швеция, 1992; на 8 Международном

совещании по нелинейным эволюционным уравнениям и динамическим системам, Дубна, 1992; на Международной летней школе по физике, Предеал, Румыния, 1992; на Международной конференции по задачам нескольких тел в физике низких энергий, Алма-Ата, Казахстан, 1992.

Публикации

Основное содержание диссертации опубликовано в 11 печатных работах, в том числе в журналах "Ядерная физика" и "Краткие сообщения ОИЯИ", в трудах научных конференций.

Структура и объем работы

Диссертация изложена на 120 страницах, состоит из введения, трех глав и заключения. Содержит 26 таблиц, 41 рисунок и список литературы из 74 наименований.

Содержание диссертации

Во введении дается краткое содержание диссертационной работы и обосновывается актуальность выбранной темы.

В первой главе описывается итерационная схема (10) решения многоканальной задачи рассеяния (1),(2) с матрицами потенциалов специального вида и приводятся результаты расчетов уровней энергии связанных состояний мезомолекул с аномальной пространственной четностью.

В §1 приводится постановка задачи рассеяния трех тел в адиабатическом представлении, которое основано на разложении Шредингеровской трехчастичной волновой функции $\Psi(\vec{R},\vec{r})$ по полному набору решений задачи двух центров $\Phi(\vec{r},R)$ [6]:

$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \sum_J \Phi_J(\vec{r},R)R^{-1}\chi_J(\vec{R}).$$

[6]Комаров И.В.,Пономарев Л.И.,Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.

Метод Канторовича позволяет привести исходное уравнение Шредингера

$$\mathcal{H}\,\Psi(\vec{R},\vec{r}) = E\,\Psi(\vec{R},\vec{r})$$

в частных производных по переменным $\vec{R},\vec{r}$ к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для неизвестных коэффициентов $y(R)$ [7]

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + 2ME - W_{ii}(R) \right) y_i(R) = \sum_{i \neq j} W_{ij}(R) y_j(R). \qquad (11)$$

В данном подходе задача рассеяния трех тел дополняется граничными условиями, в частности, следующего вида:

$$y(R) = 0, \quad R=0 \quad \text{и}$$

$$\left(f_1(\lambda,\delta,R)\frac{d}{dR} + f_2(\lambda,\delta,R) \right) y(R) = 0, \quad R=R_m$$

и двумя условиями нормировки и (или) интегральными соотношениями. Задача рассеяния формулируется следующим образом: определить фазы рассеяния δ при заданной энергии столкновения E.

В §2 рассматривается итерационная схема (10) решения многоканальной задачи рассеяния с использованием разбиения (7) и функции включения возмущения $g(t)$ вида (8).Строится алгоритм, в котором используется специальный вид матрицы потенциалов $W(R)$ [7]:

$$\begin{pmatrix} W_{11}(R) & W_{12}(R) & W_{13}(R) & \ldots & W_{1N_1}(R) \\ W_{21}(R) & W_{22}(R) & 0 & \ldots & 0 \\ W_{31}(R) & 0 & W_{33}(R) & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ W_{N_1 1}(R) & 0 & 0 & \ldots & W_{N_1 N_1}(R) \end{pmatrix},$$

каждый элемент при этом представляет собой матрицу размерности 2×2.

Матрица потенциалов $W(R) = U(R) + 2Q(R)\frac{d}{dR}$ представима в виде суммы $W(R) = W_0(R) + W_1(R)$, где матрицы $W_0(R)$ и $W_1(R)$

[7]Виницкий С.И.,Пономарев Л.И.- ЭЧАЯ,1982,т.13,с.556.

соответственно имеют вид:

$$W_0(R) = \begin{pmatrix} W_{11}(R) & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & W_{22}(R) & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & W_{N_1 N_1}(R) \end{pmatrix} \quad W_1(R) = \begin{pmatrix} 0 & W_{12}(R) & \ldots & W_{1N_1}(R) \\ W_{21}(R) & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ W_{N_1 1}(R) & 0 & \ldots & 0 \end{pmatrix}.$$

При этом матрицу $W_0(R)$ можно включить в невозмущенную часть дифференциального оператора ϕ_0, а "возмущение" ϕ_1 связать с матрицей $W_1(R)$ посредством функции включения $g(t)$ в разбиении (7') и использовать ЭНП (9) для построения итерационного процесса (10). Применение такого разбиения позволяет без особого труда увеличить размерность системы решаемых уравнений даже при небольшой оперативной памяти компьютера. В этом же параграфе приведено описание программы MULTCH, реализующей на ЭВМ данную итерационную процедуру. Для проверки возможностей разработанной вычислительной схемы решена шестиканальная задача рассеяния с одним открытым каналом. При помощи численного эксперимента показано, что данная вычислительная схема устойчива по отношению к ошибкам в задании начального приближения. Отметим, что алгоритм не требует обращения матриц большой размерности, т.е. он последовательно работает лишь с матрицами размерности 2×2, что существенно экономит оперативную память ЭВМ.

Особенностью описанного в §2 алгоритма является его универсальность, т.е. возможность решать с помощью программы MULTCH также частичную задачу Штурма - Лиувилля:

$$\begin{cases} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \lambda + W(R) \right) y(R) = 0, \\ y(0) = 0, \\ \frac{d}{dR}\, y(R) + f(\lambda,R)\, y(R) = 0, \\ (y(R),\, y(R)) = 1 . \end{cases}$$

В §3 при помощи программы MULTCH вычислены энергии $\varepsilon_{J\nu}$ и волновые функции связанных вращательных состояний мезомолекул $tt\mu$, $dt\mu$, $dd\mu$, $pp\mu$, $pd\mu$, $pt\mu$ с аномальной пространственной четностью $\xi=-(-1)^J$ и орбитальным моментом J=1 в рамках двухканального адиабатического представления.

В главе 2 проводится построение итерационных схем решения задачи рассеяния с использованием известных вариационных принципов, а также описывается новый графический интерфейс задания начальных приближений в НАМН.

В §1 рассматривается задача рассеяния в постановке (3):

$$\phi = \begin{cases} \phi^{(1)} = \left\{ \dfrac{d^2}{dr^2} - \dfrac{l(l+1)}{r^2} - V(r,\gamma) + k^2 \right\} \psi(r) = 0, \\ \phi^{(2)} = \lim\limits_{r\to 0} \left[a\,\psi'_r + b\,\psi \right] = 0, \\ \phi^{(3)} = \lim\limits_{r\to\infty} \left[c(k,\delta,r)\,\psi'_r + d(k,\delta,r)\,\psi \right] = 0, \\ \phi^{(4)} = (\psi\ ,\ \phi^{(1)}(k,\psi)) = 0 \\ \phi^{(5)} = (\psi\ ,\ \phi^{(1)}(k_*,\psi)) = 0, \end{cases}$$

Представлена новая многопараметрическая ньютоновская итерационная схема решения этой задачи. В разработанной схеме используются известные вариационные функционалы задачи рассеяния (Хюльтена, Гельмана-Фейнмана, длины рассеяния). Конкретная реализация вычислительной процедуры реализует уточнение параметров рассеяния в соответствии с варационным принципом Хюльтена (5).

В §2 рассматривается применение построенной в §1 многопараметрической схемы к конкретным задачам одноканального рассеяния с различными потенциалами взаимодействия. Схема позволяет находить регулярные в нуле волновые функции, значения фазы рассеяния,ее производных относительно энергии и импульса, а также

длины рассеяния и ширины резонансных состояний. На последовательности сгущающихся сеток проведены расчеты тангенса фазы $tg\delta$ для экспоненциального потенциала $V(r)=-2e^{-r}$ и орбитального момента $l=0$, для потенциала Юкавы $V(r)=-2e^{-r}/r$, статического потенциала атома водорода $V(r)=-2(1+1/r)e^{-2r}$, сферически - симметричного потенциала $V(r) = -\lambda e^{-r/b}$, а также для уравнения (1),(2) с потенциалом Морзе $V(x) = D(e^{-2\alpha(x-x_a)} - 2e^{-\alpha(x-x_a)})$. Представлен расчет сечения рассеяния нейтрона на ядре свинца ^{208}Pb в окрестности резонанса,определена ширина резонанса Γ квазистационарного состояния $1h_{11/2}$. Проведены вычисления сечений реакции упругого рассеяния мезоатомов трития на дейтронах в двухканальной задаче с одним открытым каналом. Показана эффективность разработанной вычислительной схемы по сравнению с существующими.

В §3 представлен графический интерфейс задания начальных приближений в итерационном процессе НАМН для решения спектральных задач. Он представляет из себя интерактивную систему пользователь - IBM PC AT/386, позволяющую выполнять построение начальных приближений графическим способом в диалоговом режиме. Для ввода данных используется стандартное устройство - "мышь". Программное обеспечение написано на языке FORTRAN-77, что дает возможность присоединять к пакету различные пользовательские программы, находясь в среде NDP-FORTRAN. Интерфейс снабжен удобным меню, позволяет генерировать разнообразные координатные сетки. Исходная информация вводится либо с помощью устройства мышь, либо из входного файла данных. Для построения кривых, проходящих через заданные точки используется кубическая сплайн - аппроксимация. Предусмотрена возможность корректировки построенных кривых в соответствии с анализом невязки. Интерактивно-графическая система включена в разработанный пакет программ решения спектральных задач, при помощи которого решен ряд задач, рассмотренных в диссертации. Еще одним примером применения данной разработки является его использование при решении задачи из теории полярона.

В главе 3 рассматривается построение ньютоновской схемы повышенного порядка точности для решения задачи рассеяния, проводится анализ точности вычисленных фаз рассеяния и волновых функций, приводятся результаты расчетов характеристик упругого и неупругого рассеяния в мезокатализе.

В §1 представлена вычислительная схема решения одноканальной задачи рассеяния (1),(2). Дискретное представление уравнения (3) осуществляется конечноразностными схемами шестого порядка точности относительно шага h равномерной сетки Ω_h по независимой переменной x. Соответствующие семи- и восьмиточечные формулы численного дифференцирования в узлах сетки Ω_h для первой и второй производных [8] были получены при помощи программы аналитических вычислений REDUCE. Вычислительная схема (10) для решения уравнения (3) на сетке Ω_h построена на основе модификации НАМН (9) с использованием функции включения возмущения $g(t)$ вида (8'). При этом дифференциальный разностный оператор n-го порядка точности (n=4,6) разбивается согласно соотношению (7') на две части следующим образом:

$$D_h^{(n)} = D_h^{(2)} + g(t)(D_h^{(n)} - D_h^{(2)})$$

Такая процедура позволяет обращать на каждой ньютоновской итерации (10) трехточечный оператор простой структуры ϕ_0,связанный с разностным дифференциальным оператором второго порядка точности - $D_h^{(2)}$, рассматривая при этом разность $D_h^{(n)} - D_h^{(2)}$как возмущение ϕ_1. Эффективность описанного алгоритма подтверждена решением одноканальной задачи рассеяния с аналитическим потенциалом Морзе.

[8] Березин И.С.,Жидков Н.П. Методы вычислений. М.: Наука,1966,т.1.

Исследована сходимость вычисленных фаз рассеяния к аналитическому решению на последовательности вдвое сгущающихся сеток, а также на последовательности расширяющихся интервалов интегрирования.

В §2 дается обобщение представленного в §1 алгоритма повышенного порядка точности на квазиравномерной сетке. Получены соответствующие разностные формулы численного дифференцирования и интегрирования. На примере задачи рассеяния с потенциалом Морзе проведено детальное исследование зависимости точности вычисленных фаз рассеяния от структуры квазиравномерной сетки. Даны оценки сверху на характерный шаг разностной сетки в зависимости от энергии столкновения. При помощи представленного алгоритма произведен расчет положения E_R и ширины Γ_R резонанса формы ${}^1P^0_{0(2,1)}$ отрицательного иона водорода H^-. В заключении параграфа проводится анализ точности решений задачи рассеяния, полученных с помощью итерационных схем, построенных в диссертации на основе НАМН и его модификаций. Выполненные численные исследования сходимости решений по границе интервала интегрирования и по шагу разностной сетки Ω_h хорошо согласуются с теоретическими оценками.

В §3 ньютоновская схема повышенного порядка точности обобщается на многоканальную задачу рассеяния для системы радиальных уравнений Шредингера в адиабатическом подходе (11). Представлены результаты численного решения многоканальной задачи рассеяния для системы дифференциальных адиабатических уравнений при помощи многопараметрических ньютоновских схем, использующих конечноразностную аппроксимацию дифференциального оператора шестого порядка точности $O(h^6)$ относительно характерного шага h квазиравномерной сетки Ω_h. Вычислены волновые функции, фазы и сечения упругого и неупругого рассеяния мезоатомов $(d\mu)_{1s}$, $(t\mu)_{1s}$ и $(p\mu)_{1s}$ на ядрах изотопов водорода t, d и p в простом подходе двухуровневого адиабатического приближения при энергиях столкновения 0.001эВ ÷ 50эВ. Построены графики соответствующих волновых функций и сечений. Получены более точные по сравнению с другими работами[9,10] характеристики процессов рассеяния $(d\mu)_{1s}+t$ и $(t\mu)_{1s}+d$ при низких энергиях столкновения E вблизи порога в диапазоне $0.001эВ \le E \le 0.3эВ$. Вычисленные элементы парциальных матриц реакции K^l в указанной области энергии при значениях полного орбитального момента $l = 0,1,2,3$ имеют правильное монотонное поведение.

В заключении приводятся основные результаты диссертации:

1. На основе обобщения НАМН разработан алгоритм для решения задачи рассеяния большой размерности в многоуровневом адиабатическом приближении.
2. Построена вычислительная схема решения задачи рассеяния как нелинейного функционального уравнения с использованием дополнительного интегрального соотношения, соответствующего вариационному принципу Хюльтена.
3. В рамках модификации НАМН разработана итерационная схема решения задачи низкоэнергетического рассеяния с применением многоточечных конечноразностных аппроксимаций повышенного порядка точности на равномерных и квазиравномерных сетках.
4. Проведено обобщение представленных алгоритмов на спектральные задачи. Создан комплекс прикладных программ, реализующий разработанные вычислительные алгоритмы, который позволяет единообразно с заданной точностью решать спектральные задачи и задачи рассеяния на ЭВМ различных типов.
5. Разработан графический интерфейс задания начальных приближений в итерационном процессе НАМН для решения различных спектральных

[9] Bubak M.,Faifman M.P. JINR Comm.,E4-87-469,Dubna,1987.

[10] Cohen J.S.,Struensee M.S.- Phys.Rev.A.,1991,v.43,7,p.3460.

задач. Интерфейс дает возможность пользователю выполнять построение начальных приближений графическим способом в диалоговом интерактивном режиме на персональном компьютере.
6. Проведены исследования точности представленных вычислительных схем. Численно решены задачи рассеяния, актуальные в различных областях современной физики, таких как мюонный катализ, атомная и ядерная физика. Вычислены волновые функции, фазы и сечения низкоэнергетического упругого и неупругого рассеяния мезоатомов $(d\mu)_{1s}$, $(t\mu)_{1s}$ и $(p\mu)_{1s}$ на ядрах изотопов водорода t, d и p. Впервые получены более точные по сравнению с другими работами характеристики процессов рассеяния $(d\mu)_{1s}+t$ и $(t\mu)_{1s}+d$ при низких энергиях столкновения E вблизи порога в диапазоне $0.001эВ \le E \le 0.3эВ$ и значениях орбитального момента системы $l=0,1,2,3$. Проведен расчет положения E_R и ширины Γ_R резонанса формы ${}^1P^0_{0(2,1)}$ отрицательного иона водорода H^-. Вычислена ширина резонанса Γ в реакции упругого рассеяния нейтрона на ядре свинца ${}^{208}Pb$. Получены энергии связанных состояний мезомолекул $tt\mu$, $dt\mu$, $dd\mu$, $pp\mu$, $pd\mu$, $pt\mu$ с аномальной пространственной четностью $\xi=-(-1)^J$ и орбитальным моментом $J=1$ в двухуровневом адиабатическом приближении.

Работы, положенные в основу диссертации:

1. Смирнов Ю.С. Алгоритм и программа для решения многоканальной задачи рассеяния с матрицами потенциалов специального вида. Сообщения ОИЯИ, Р11-88-912, Дубна, 1988.
2. Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Вычисление энергии связанных состояний мезомолекул с аномальной пространственной четностью в адиабатическом представлении. ЯФ, 1990, т.51, в.4, с.1063-1067.
3. Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Решение задачи

рассеяния на основе многопараметрических ньютоновских схем. Одноканальное рассеяние. ЯФ, 1990, т.52, в.4(10), с.1176-1189.

4. Жанлав Т., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Алгоритм и программа решения задачи Штурма-Лиувилля с использованием сплайн-схемы повышенной точности. Сообщения ОИЯИ, Р11-90-501, Дубна, 1990.

5. Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Численное решение задачи рассеяния с повышенным порядком точности конечноразностной схемы. Сообщения ОИЯИ, Р11-91-141, Дубна, 1991.

6. Виницкий С.И.,Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Исследования разностных схем повышенного порядка точности для задачи рассеяния на квазиравномерной сетке. Сообщения ОИЯИ, Р11-91-327, Дубна, 1991.

7. Виницкий С.И., Пузынин И.В. ,Смирнов Ю.С. Повышение точности решения многоканальной задачи рассеяния. Сообщения ОИЯИ, Р11-92-126, Дубна, 1992.

8. Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Расчеты повышенной точности многоканальной задачи рассеяния. ЯФ, 1992, т.55, в.12, с.3289.

9. Puzynin I.V., Puzynina T.P., Smirnov Yu.S, Vinitsky S.I. New effective mass in adiabatic approach for the muonic three-body problem. Краткие сообщения ОИЯИ, 5(56)-92, Дубна, 1992, с.30-38.

10. Ivanov V.V., Melnikova O.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Smirnov Yu.S On possibility of initial approximaition graphics constructing for iterative Newton's scheme. The 8-th International Workshop on Nonlinear Evolution Equations and Dynamical Systems (NEEDS'92 - Thezises of talks), Dubna, 1992, p.21.

11. Puzynin I.V., Smirnov Yu.S., Vinitsky S.I. Multiparameter Newton Schemes with Control Function of Iteration Process in Multichannel Scattering Problem. The 8-th International Workshop on Nonlinear Evolution Equations and Dynamical Systems (NEEDS'92 - Thezises of talks), Dubna, 1992, p.16.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 января 1993 года.