

913953

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

P 605

На правах рукописи

УДК 517:518.12

УДК 519.624

Родионов Игорь Дмитриевич

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНЫХ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ГАЗОВОЙ И КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗАХ

Специальность 05.13.16 – применение вычислительной  
техники, математического моделирования и математи-  
ческих методов для научных исследований

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

Диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Дубна - 1987

Работа выполнена в Институте прикладной математики им. М.В.Келдыша АН СССР

Официальные оппоненты

- доктор физико-математических наук, профессор Г.В.Галияк
- доктор физико-математических наук, профессор А.В.Гулин
- доктор физико-математических наук, профессор Е.П.Мидков

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Московский радиотехнический институт АН СССР

Защита диссертации состоится 18 февраля 1988 года на заседании Специализированного совета Д047.01.04 Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна, Московская область.

Автореферат разослан 15 янв 1988 года.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета кандидат физико-математических наук Иван З.М.Иванченко

Базисом математического моделирования при конструировании современной техники является совокупность данных о свойствах веществ в широком диапазоне термодинамических параметров. Наличие такого базиса позволяет организовать вычислительный эксперимент, резко удешевляющий и ускоряющий процесс создания новых техники и технологий.

Пополнение этого базиса происходит двумя путями; во-первых, проведением расчетов по упрощенным теоретическим моделям, развитым в атомной физике, и их совершенствованием на базе развития численных методов и вычислительной техники. Во-вторых, созданием новых экспериментальных установок и проведением эмпирических исследований.

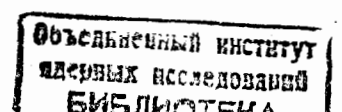
В последнее время, однако, такое разделение становится все более условным. Автоматизация экспериментальных исследований приводит к резкому увеличению объема поступающей эмпирической информации. Для ее обработки и интерпретации необходимо создание работающих в режиме реального времени математических моделей изучаемых процессов и исследующих их приборов. Разработка таких моделей является предметом самостоятельного вычислительного эксперимента.

С другой стороны, теоретические модели вещества часто сами включают в себя экспериментальные константы или подгоночные параметры. Кроме того, вследствие обилия упрощающих предположений при построении моделей, они нуждаются в независимой экспериментальной проверке.

Особое значение такой комплексный подход приобретает при исследовании физико-химических свойств вещества (ФХСВ) в экстремальных условиях высоких температур или давлений, для изучения быстропотекающих неравновесных процессов. В этих случаях прямое экспериментальное изучение процессов затруднено или требует больших материальных затрат.

Именно практические потребности математического моделирования динамики сплошных сред в количественных данных о ФХСВ в экстремальных условиях и стимулировали работу над предлагаемой диссертацией. Работа выполнялась в Институте прикладной математики им.М.В.Келдыша АН СССР

Это обусловило математическую направленность работы, акцент которой в диссертации смещен в сторону развития численных



алгоритмов решения конкретных задач атомной физики, возникающих при исследованиях ФХСВ.

Кроме того, автор в течении ряда лет проводил совместные работы с экспериментальной группой, изучавшей методом рассеяния быстрых пучков межатомные взаимодействия в диапазоне энергий, отвечающих экстремальным состояниям вещества. Это обусловило развитие численных методов решения прямых и обратных задач рассеяния и приложения полученных данных к исследованию ФХСВ реальных веществ.

#### ЦЕЛЬ ДИССЕРТАЦИИ

Целью диссертации является исследование математических моделей и разработка численных методов решения задач атомной физики, возникающих при теоретических расчетах физико-химических свойств вещества и при экспериментальных исследованиях атомных взаимодействий методом рассеяния молекулярных пучков, а также приложение развитых методов к решению прикладных задач.

Рассматриваются два круга вопросов.

Первый круг связан с разработкой эффективных численных методов решения нелинейных краевых и спектральных задач математической физики, к которым сводится значительное число математических моделей вещества и решением на основе построенных алгоритмов актуальных спектральных задач атомной физики и других областей.

Ко второму кругу вопросов относится разработка численных методов решения прямых и обратных задач рассеяния, ориентированных на интерпретацию экспериментов по рассеянию молекулярных пучков, приложение развитых методов к интерпретации имеющихся и планированию перспективных экспериментов.

Полученные здесь данные используются для описания сильно сжатого вещества и анализа физической точности моделей такого вещества, рассматриваемых в первом круге вопросов.

#### АКТУАЛЬНОСТЬ РАБОТЫ

Первый круг вопросов, рассматриваемых в диссертации, свя-

зан с построением численных методов решения краевых и спектральных задач для дифференциальных уравнений и систем, возникающих при математическом моделировании ФХСВ.

Типичные примеры таких задач - модель сжатого вещества Томаса-Ферми и ее температурное обобщение Р.Фейнмана, М.Метрополиса, Е. Теллера; квантостатистическая модель, развитая Д.А.Киржницем и Н.Н. Калиткиным; зонная модель, развитая группой Г.М. Гандельмана, и другие варианты моделей самосогласованного поля: Д. Цинка, В. Рожная, Г.В. Силько, А.Ф. Никифорова и др.

Итерационные методы решения таких задач развивались в СССР в работах А.Н. Тихонова, А.А. Самарского, Н.С. Бахвалова, А.А. Абрамова, Е.С. Николаева, Р.П. Федоренко, А.В. Тулина и др. Специфика задач, возникающих при исследованиях ФХСВ, заключается в необходимости расчета большого количества задач одного типа, но отличающихся значениями физических параметров, входящих в коэффициенты уравнений и граничные условия. Это накладывает жесткие ограничения на эффективность используемых численных методов решения таких задач и стимулирует разработку новых эффективных подходов.

Необходимость многовариантных расчетов однотипных задач вместе с тем создает и принципиальные возможности повышения эффективности методов за счет учета опыта решения близких задач. Принципиальной основой этого является метод продолжения, восходящий к идее аналитического продолжения.

Различные варианты метода продолжения применительно к задачам математической физики развивались в СССР в работах В.А. Амбарцумяна, А.А. Дородницына, Д.Ф. Давиденко, Е.П. Жидкова, И.В. Пузынина и др. Подробные обзоры работ данного направления содержатся в монографиях Р. Беллмана с соавторами, П. На, Дж. Ортега и В. Рейнфолдта, сборнике под редакцией Х. Уэжера, обзорах Е.П. Жидкова с соавторами и др. Критический обзор ряда работ этого направления дан в работах Р.П. Федоренко. Эти подходы расширяют область сходимости и повышают порядок сходимости итераций.

Однако в условиях многовариантных расчетов эти методы также предъявляют повышенные требования к быстродействию ЭВМ и актуальным является дальнейшее совершенствование численных методов с целью улучшения выбора начального приближения, ускорения сходимости итераций и понижения размерности задачи.

Второй круг вопросов, рассматриваемых в диссертации, связан с одним из экспериментальных направлений исследования теплофизических свойств вещества – рассеянием быстрых пучков нейтральных атомов и молекул на малые углы. Именно этот метод, главным образом в работах групп И. Амдура в США и В. Б. Леонаса в СССР, позволил в 60 – 70<sup>х</sup> годах впервые получить достоверные данные о потенциалах взаимодействия большого числа атомов и молекул в диапазоне энергий взаимодействия 0,1 – 20 эВ. Эти данные явились основой описания свойств реальных газов при высоких температурах.

Типичная точность полученных эмпирических потенциалов составляла не более 30 – 50% по значению потенциала. Для приложений к описанию переносных свойств горячих газов этого было в те времена достаточно, имея в виду и ограниченные возможности газодинамических расчетов на маломощных ЭВМ.

В настоящее время стремительно растущие мощности ЭВМ позволяют уже переходить от модельных оценочных расчетов к точным инженерным, которые стимулируются задачами гиперзвукового обтекания, создания и транспортировки пучков направленной энергии в газовых средах и их взаимодействием с поверхностью, задачами плазменно-химической технологии и т.д.

Эти технические приложения требуют существенно более детальных и точных данных о межмолекулярных потенциалах, зависимости межмолекулярных сил от внутренних квантовых состояний сталкивающихся реагентов, данных о неравновесных химических реакциях замещения и диссоциации, выяснения роли многочастичности взаимодействий.

Наиболее прямым способом получения такой информации являются эксперименты по рассеянию молекулярных пучков. Однако и эти измерения также являются косвенными, т.к., например, измеряются не потенциалы взаимодействия, а сечения рассеяния, причем в методе быстрых пучков – при энергиях столкновения частиц в  $10^2$  –  $10^3$  раз превышающей энергии столкновения, характерные для газодинамических приложений.

Таким образом, принципиальным для данного подхода является разработка численных методов решения прямых и обратных задач молекулярного рассеяния.

## ПУБЛИКАЦИИ

[39]. Основные результаты диссертации отражены в работах [1] –

## СТРУКТУРА ДИССЕРТАЦИИ

Диссертация состоит из введения, четырех глав, двух приложений и списка литературы, насчитывающего 295 наименований.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во-введении дан обзор литературы, обоснована актуальность темы диссертации и обсуждено современное состояние изучаемых проблем. Приведено краткое описание содержания работы, указана научная новизна полученных результатов и их практическая значимость.

В первой главе развит новый подход – метод эволюции параметра (МЭП) к построению численных алгоритмов решения нелинейных стационарных задач вычислительной математической физики, эффективность которого достигается в приложениях, где необходимо детальное исследование поведения решения в пространстве физических параметров.

Глава состоит из 8 параграфов.

В § 1.1 дается краткий библиографический обзор различных вариантов метода продолжения, применяемых для решения задач математической физики.

В § 1.2 и § 1.3 изложена концепция МЭП, являющегося специализированным вариантом общей идеи продолжения по физическому параметру. На языке функционального анализа формулируются схемы продолжения, используемые в МЭП, и приводятся теоремы сходимости.

Краевые задачи и задачи на собственные значения формально можно рассматривать как функциональные уравнения  $F(x) = 0$ , где  $X$  – это собственные значения и собственные функции. При этом в физических задачах обычно требуется найти не изоли-

рованное решение  $x(\alpha)$ , а семейство решений  $X(\alpha)$ , где  $\alpha$  - физический параметр. Именно для решения таких задач удобно использовать метод продолжения по параметру.

Лежащий в основе методов продолжения переход от единичной стационарной задачи  $F(x) = 0$  (где  $F: X \rightarrow Y$  - оператор в банаховых пространствах) к параметрическому семейству задач

$$(I) \quad \begin{cases} F(\alpha, x(\alpha)) = 0 \\ F: [0; 1] \times X \rightarrow X \quad - \text{гомотопия} \\ x(0) \quad - \text{задано} \end{cases}$$

В ЭЭП проводится, как правило, без увеличения размерности, т. е. в качестве  $\alpha$  выбираются физические параметры и в полной постановке необходимо найти всё множество решений

$\{x(\alpha)\}_{\alpha \in [0; 1]}$  задач (I). Например, это расчеты подробных таблиц, в которых каждая отдельная точка находится из решения краевой спектральной задачи, изучение реакции физической системы на внешние воздействия и т.д.

В ЭЭП обычно используется явная двухточечная схема продолжения, которая является объединением схемы Эйлера для продолжения в методе дифференцирования по параметру и схемы уточнения в методе Ньютона:

$$(2) \quad x_{i+1} = x_i + \mathcal{L}_i, \quad x_0 = x(0),$$

где оператор эволюции (ОЭ)  $\mathcal{L}_i$  определяется выражением

$$(3) \quad \mathcal{L}_i = - \left[ \frac{\partial F_i}{\partial x} \right]^{-1} \cdot \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial \alpha} \delta \alpha_i + F_i \right\}, \quad F_i \equiv F(\alpha_i, x_i)$$

При вычислении ОЭ (в рассматриваемых в главе II задачах это делается без существенных дополнительных затрат) можно одновременно вычислить

$$(4) \quad \delta x_i = - \left[ \frac{\partial F_i}{\partial x} \right]^{-1} \cdot F_i$$

Это позволяет дополнительно уточнить исходное значение  $x_i$  методом Ньютона

$$(5) \quad \tilde{x}_i = x_i + \delta x_i + O(\delta \alpha^4)$$

Разностное решение  $\{x_i\}$  сходится к точному с порядком  $O(\delta \alpha^2)$ , а уточненное решение  $\{\tilde{x}_i\}$  с порядком  $O(\delta \alpha^4)$ . Сходимость обусловлена доказанной в параграфе теоремой, условия которой аналогичны условиям известных теорем о продолжаемости по параметру и сходимости метода Ньютона.

Проведенная в (3) модификация схемы Эйлера не только повышает порядок схемы с  $O(\delta \alpha)$  до  $O(\delta \alpha^2)$ , но и обеспечивает ее свойством релаксации ошибок начальных данных, разностной аппроксимации и случайно внесенных до некоторого уровня, определяемого величиной локального шага по параметру. Большая же ошибка релаксирует к этому уровню квадратично по номеру шага.

Для эволюции с мелким шагом по  $\alpha$  при наличии повышенных требований на точность решения продолжение проводится по трехточечной схеме на квазиравномерных сетках по  $\alpha$ . Дополнительное уточнение при этом производится по формуле (5). В параграфе приведена теорема, аналогичная теореме для двухточечной схемы, при выполнении условий которой  $x_i$  сходится к  $x(\alpha)$  с порядком  $O(\delta \alpha^3)$ , а  $\tilde{x}_i$  сходится к  $x(\alpha)$  с порядком  $O(\delta \alpha^6)$  на интервале  $\alpha \in (0; 1]$ .

Трудоёмкость вычислений по всем приведенным схемам практически одинакова и соответствует трудоёмкости проведения одной ньютоновской итерации на шаг по параметру. Это минимальные затраты, на которые можно рассчитывать при использовании методов ньютоновского типа. Отметим, что использование схем более высокого порядка аппроксимации или просто проведение дополнительных уточнений по Ньютону в точке по  $\alpha$ , что дает точность  $O(\delta \alpha^{(4+4k)})$  и  $O(\delta \alpha^{(6+6k)})$  для двухточечной и трехточечной схем, в данной постановке обычно менее целесообразно; достаточно просто провести сгущение шага по  $\alpha$ .

Условие осуществимости продолжения по схеме (2) нарушается при вырождении в точке  $\{\alpha_*, x_*\}$  оператора  $L^* = \frac{\partial}{\partial x} F(\alpha_*, x_*)$ . В нелинейных задачах это может соответствовать бифуркации решения  $x(\alpha)$  в пространстве физических параметров. Продолжение через точку бифуркации проводится по специальным схемам, получаемым рассмотрением более высоких, чем первые, вариаций  $\delta \alpha$  и  $\delta x$  в уравнении  $dF(\alpha, x(\alpha)) = 0$ , в соответствии с классическим подходом А. Пуанкаре.

После прохождения точки бифуркации эволюция осуществляется по всем ветвям. При этом обычно происходит ухудшение точ-

ности решения в ближайшей окрестности точки бифуркации. Затем точность возвращается к уровню, определяемому шагом по  $\alpha$ , за счет релаксирующих свойств схемы (2).

Кроме этого, стандартного, подхода в МЭП рассматривается замена исходной гомотопии  $F(\alpha, x(\alpha)) = 0$ , содержащей точки бифуркации, на гомотопию  $\Phi_\varepsilon(\alpha, x(\alpha)) = 0$ , для которой бифуркации отсутствуют при  $\varepsilon > 0$  и  $\Phi_\varepsilon(\alpha, x) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} F(\alpha, x)$ . Приводятся примеры важных содержательных задач, где такое рассмотрение вообще позволяет избежать от проблемы бифуркаций.

Наконец, в ряде содержательных задач интерес представляет изучение эволюции точек бифуркации в пространстве нескольких физических параметров. В этом случае также в содержательных задачах удается избежать от бифуркаций, добавляя к исходному уравнению (I) соответствующее условие бифуркации и изучая эволюцию точек бифуркации в пространстве нескольких физических параметров.

Вычисление  $\left[\frac{\partial}{\partial x} F(\alpha, x)\right]^{-1}$  достаточно трудоемкая операция. Именно поэтому и вводятся схемы продолжения, в которых требуется всего одно такое вычисление на узел сетки по  $\alpha$ . В то же время, реальные расчеты требуют дальнейших упрощений, суть которых заключается в снижении размерности эволюционируемого вектора  $X$ . Функциональная схема такого понижения размерности представлена в § 1.3.

При понижении размерности учитываются еще два обстоятельства. Во-первых, если  $F$  - дифференциальный оператор, то численное дифференцирование при вычислении невязки  $F_i$  может сопровождаться нежелательной потерей точности. Во-вторых, если  $F$  - линейный по  $X$  оператор, то вычисление ОЗ будет по затратам равносильно прямому решению исходной задачи, но с дополнительными ошибками аппроксимации по  $\alpha$ .

Поэтому целесообразно выделить существенно нелинейные члены по  $X$  в  $F$ , не содержащие операции дифференцирования, обозначить их за новый вектор  $Z$  и только для него и проводить эволюцию, определяя затем  $X$  из решения линейной задачи. В § 1.3 сформулирована теорема, при выполнении условий которой возможно продолжение  $Z$  по описанным выше схемам. Формально процедура понижения размерности выглядит следующим образом.

Исходное уравнение  $F(\alpha, x) = 0$  заменяется эквивалентной системой двух уравнений (конкретные способы такой замены

определяются в последующих параграфах для узких классов задач):

$$(6) \quad L[\alpha, Z]x = B(\alpha, Z); \quad [0; 1] \times Z \times X \xrightarrow{L} Y$$

$$(7) \quad Z = P(\alpha, x); \quad [0; 1] \times X \xrightarrow{P} Z,$$

где  $L$  - оператор, допускающий экономичное решение уравнения (6) при заданном  $Z$  и содержащий  $\alpha$  и  $Z$  в виде коэффициентов уравнений, а оператор  $P$  не содержит операции дифференцирования. Замена делается таким образом, чтобы размерность пространства  $Z$  по возможности была минимальной. Задача (I) при этом заменяется задачей

$$(8) \quad H(\alpha, Z) = Z - P(\alpha, L^{-1}[\alpha, Z])B(\alpha, Z), \quad H(\alpha, Z(\alpha)) = 0,$$

решение которой проводится по схеме (2) - (5) с начальным условием  $Z(0) = P(0, x(0))$ .

Следующие параграфы главы посвящены построению конкретных алгоритмов. В § 1.4 рассматривается краевая задача общего вида для системы  $N$  нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка.

Исходный вектор  $Z(t)$  задан в пространстве  $(W_{[0;1]})^M$ . Выделяются существенно нелинейные члены задачи (в общем виде - это правые части уравнений), которые принимаются за вектор  $Z$ , заданный в пространстве  $Z = (W_{[0;1]}^{i,1})^M$ , где  $M \leq N$ . При заданном  $Z$  решение линейной системы (6) проводится одним из стандартных методов решения краевых задач для систем линейных ОДУ первого порядка; если система уравнений является жесткой, то методами, ориентированными на решение жестких систем. Аналогично определяется и ОЗ. Дополнительное уточнение решения по схеме (5) требует существенно меньше затрат по сравнению с затратами на вычисление ОЗ.

В параграфе на примере обсуждаемой задачи акцентируется внимание на отличиях развиваемого в диссертации подхода от известных в литературе и на точках их соприкосновения. В частности приводится пример, когда продолжение в МЭП позволяет получать точное решение при большом шаге по параметру, а продолжение на основе метода Ньютона (называемое иногда квазилинейной) возможно только при очень малых шагах по параметру.

Примеры применения МЭП к решению прикладных краевых за-

дач для ОДУ первого порядка в диссертации не приводятся. Задачи данного класса, причем уже сложные — для жестких систем уравнений с внутренними пограничными слоями, успешно решаются при помощи МЭП в группе В.Я. Гольдина в ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР.

В § 1.5 рассматривается спектральная задача для ОДУ 2-го порядка. Исходная задача формулируется относительно вектора  $x(\alpha) = \{\lambda, \psi\} \in X = \mathbb{C} \oplus W_{[0;1]}^{2,1}$  где  $\lambda(\alpha)$  — собственное число, а  $\psi_\alpha(t)$  — собственная функция. Нелинейность задачи связана с входением собственного числа в коэффициенты уравнения и граничные условия.

Вследствие этого определим  $Z = \{\lambda\} \in \mathbb{C}$ . Это максимально возможное для данной задачи сужение пространства  $X$ . Решение линейной задачи (6) осуществляется при этом следующим образом: полагается  $\lambda(\alpha) = Z(\alpha)$ , а  $\psi_\alpha(t)$  находится встречной дифференциальной прогонкой для логарифмической производной  $D(t) = \frac{1}{\psi(t)} \frac{d}{dt} \psi(t)$  из краев отрезка  $[0; 1]$  в точку сшивания  $t_c \in (0; 1)$ . В параграфе предложены нелинейные разностные схемы второго и более высоких порядков точности, обеспечивающие сквозной счет через точки сингулярности функции  $D(t)$  при решении задачи Коши для  $D(t)$  и затем вычисления  $\psi(t)$ . Доказана теорема о сходимости разностной функции  $D_i = D(t_i)$  по  $\delta t$  к точному решению с порядком сходимости, равным порядку аппроксимации, при условии гладкости коэффициентов уравнения. Аналогичное утверждение доказано для  $\psi_j$ , полученной обратной прогонкой разностной функции  $D_j$  из точки сшивки  $t_c$  в края отрезка  $[0; 1]$  при условии согласованности разностных схем прямой и обратной прогонки. Невязка  $H$  задается выражением

$$(9) \quad H(\alpha, Z) = \Delta(t_c) \cdot [\psi_\alpha(t_c)]^2,$$

$$\text{где} \quad \Delta(t_c) = D(t_c + 0) - D(t_c - 0)$$

Хорошая обусловленность линейной задачи (6) (при хорошей обусловленности исходной спектральной задачи) достигается выбором точки сшивания  $t_c$  из условия

$$(10) \quad |\Delta(t_c)| \xrightarrow{0 < t_c < 1} \min$$

Вычисление ОЭ  $\mathcal{L}(\alpha, \lambda)$  сводится при этом к вычислению отношения  $\mathcal{L}(\alpha, \lambda) = \mathcal{L}_1(\alpha, \lambda) / \mathcal{L}_2(\alpha, \lambda)$ , где  $\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2$  — аналитические функции  $\alpha$  и  $\lambda$ . Их вычисление требует взятия двух одномерных интегралов от  $[\psi_\alpha(t)]^2$  по  $t$ . Для задания ОЭ по схеме второго порядка точности по пространственной переменной требуется 17 арифметических операций на узел сетки по  $t$ . Из них 12 операций расходуется на вычисление собственной функции описанным выше способом. Вычисление дополнительно уточненного собственного числа производится при этом по формуле  $\tilde{\lambda}_i = \lambda_i - H(\alpha_i, \lambda_i) / \mathcal{L}_2(\alpha_i, \lambda_i)$  и требует всего одной операции деления.

Признаком бифуркации решения по параметру для рассматриваемых в диссертации задач является равенство  $\mathcal{L}_2(\alpha_*, \lambda_*) = 0$ . В окрестности точки бифуркации  $\{\alpha_*, \lambda_*\}$  ОЭ определяется разложением  $\mathcal{L}_1$  и  $\mathcal{L}_2$  в ряд Тейлора по  $\delta\alpha = \alpha - \alpha_*$  и  $\delta\lambda = \lambda - \lambda_*$ . Так, для бифуркации второго порядка собственного числа в пространстве физических параметров, при  $\mathcal{L}_1(\alpha_*, \lambda_*) \neq 0$  и  $\frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{L}_2(\alpha_*, \lambda_*) \neq 0$  справедливо выражение

$$(II) \quad \lambda(\alpha) = \lambda_* - \frac{AC}{3}(\alpha - \alpha_*) \pm \sqrt{2A(\alpha - \alpha_*)} + O((\alpha - \alpha_*)^{3/2})$$

$$A = \mathcal{L}_1(\alpha_*, \lambda_*) / \frac{\partial \mathcal{L}_2(\alpha_*, \lambda_*)}{\partial \lambda}; \quad C = \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathcal{L}_2(\alpha_*, \lambda_*).$$

В ряде многопараметрических задач интерес представляет эволюция точки бифуркации в зависимости от другого физического параметра  $\beta$ . В данном случае это означает необходимость решения уравнения  $\mathcal{L}_2(\alpha(\beta), \lambda(\beta), \beta) = 0$  при условии, что  $\lambda(\beta)$  есть собственное число исходной задачи. Эволюционными переменными здесь являются  $\{\alpha(\beta), \lambda(\beta)\}$ . Для них записывается аналогичным образом система двух линейных ОДУ первого порядка, в которой также возможны точки бифуркаций (бифуркации точек бифуркации). Для последних можно в свою очередь записать эволюционное уравнение и т.д.

Такой способ изучения бифуркационных поверхностей в пространстве физических параметров сводит численный алгоритм к счету по схемам (2) — (5) при выполнении условий их сходимости и не требует приближения с малым шагом по параметру к точке бифуркации, в которой эти условия нарушаются. Данный подход особенно полезен в сложных задачах, в которых практическая реа-

лизации выражений, аналогичных (II), может вызвать определенные затруднения.

В § I.6 рассматривается система  $N$  линейных ОДУ второго порядка для вектора собственных функций  $\Psi_\alpha(t) = \{\Psi_\alpha^1(t), \dots, \Psi_\alpha^2(t)\}$ , связанных между собой только восхождением вектора собственных чисел  $\tilde{\lambda}(\alpha) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}_\alpha$  в коэффициенты и граничные условия каждого уравнения. Исходный вектор  $\alpha = \{\tilde{\lambda}, \psi\}$  задан в пространстве  $X = \mathbb{C}^N \otimes (W_{[0;1]}^{2,1})^N$ . Вектор  $Z = \lambda$  задан в пространстве меньшей размерности  $\mathbb{C}^N$ . При решении линейной задачи (6) полагается  $\tilde{\lambda}(\alpha) = Z(\alpha)$ , а  $\Psi_\alpha(t)$  находится для каждого уравнения отдельно аналогично способу, описанному в § I.5. Уравнение (7) при этом представляет собой  $N$  соотношений типа (9). Определение ОЭ сводится к решению системы  $N$  линейных уравнений, коэффициенты которого являются одномерными интегралами от  $\Psi(t)$  по  $t$ . Вычисление ОЭ требует не более  $15N + 2N^2$  арифметических операций на узел сетки по  $t$ . Равенство нулю детерминанта линейной системы уравнений определяет поверхность бифуркации в пространстве физических параметров.

Для определения  $\tilde{\lambda}_i$  согласно (5) эту же систему уравнений необходимо решить с правой частью, равной вектору невязок (9). Возникающие при этом дополнительные затраты пренебрежимы по сравнению с затратами на вычисление ОЭ.

В § I.7 рассматривается обобщение рассмотренной в § I.6 задачи на случай, когда связь между уравнениями происходит не только через собственные числа, но и благодаря вхождению собственных функций в коэффициенты уравнений. В этом случае нелинейность задачи будет определяться не только  $\tilde{\lambda}$ , но и  $\Psi$ . В качестве переменных эволюции необходимо брать полный вектор  $\alpha = \{\tilde{\lambda}, \Psi\}$ , или, что может быть более предпочтительным, вектор собственных функций и коэффициентов уравнений. Оператор эволюции при этом необходимо определять из решения интегрального уравнения ( типа Фредгольма второго рода, в общем случае).

На практике, однако, ситуация может быть много проще.

Так в практически важных задачах квантовой механики нередко существенная нелинейность задачи обусловлена одной функцией ( типа самосогласованного потенциала  $U(t)$  ). В этом случае размерность пространства  $X$  понижается до размерности пространства  $Z = \mathbb{C}^N \otimes W_{[0;1]}^{2,1}$ . Коэффициенты линейного уравнения

(6) являются при этом функциями  $\tilde{\lambda}, \alpha, U(t), t$ .

Следующее существенное упрощение, справедливое для широкого класса задач квантовой механики, достигается, когда  $U(t)$  можно представить в виде

$$(I2) \quad U(t) = \sum_{m=1}^M a_m^t[\tilde{\lambda}, \alpha, t, \Psi(t)] \int_0^t a_m^2[\tilde{\lambda}, \alpha, t', \Psi(t')] dt' + \sum_{k=1}^K C_k^t[\tilde{\lambda}, \alpha, t, \Psi(t)] \int_0^t C_k^2[\tilde{\lambda}, \alpha, t', \Psi(t')] dt'$$

В этом случае определение ОЭ сводится к решению линейной системы алгебраических уравнений  $K$ -ого порядка. Промежуточными этапами такого сведения являются определение собственных функций  $\Psi(t)$  аналогично § I.5–I.6, и решение  $M+1$  интегральных уравнений типа Вольтерра. Вырожденность упомянутой системы алгебраических уравнений является критерием наличия точки бифуркации по параметру.

Столь существенное упрощение ОЭ является следствием того, что (I2) не содержит интегралов, характерных для невырожденных уравнений Фредгольма. В то же время, это достаточно общее выражение, которое можно использовать и для аппроксимации более общих зависимостей  $U(t)$  от  $\Psi(t)$ .

В § I.8 рассматривается методика решения многомерного аналога спектральной задачи, рассмотренной в § I.5. Понижение размерности эволюционируемого вектора  $x = (\lambda, \psi(\vec{t})) \in X = \mathbb{C} \otimes W_G^{2,1}$  переходом к вектору  $Z = \{\lambda\} \in Z = \mathbb{C}$  проводится аналогично § I.5. Вид ОЭ и исследование его бифуркационных свойств проводится аналогично § I.5.

Отличие от одномерного случая заключается в том, что при заданном значении  $\lambda$  уравнению и граничным условиям могут удовлетворять несколько линейно независимых функций. Кроме того, решение линейной задачи (6), даже если оно и единственно, необходимо находить итерационным методом. Поэтому в параграфе рассматривается способ избавления не только от нелинейности, свойственной спектральным задачам, но и от необходимости итерационного решения уравнения (6), которое может быть вырожденным. Это достигается включением в число эволюционируемых переменных функции Грина оператора  $L[\lambda, Z]$  (точнее, массива собственных чисел и функции  $\{\gamma_m, x_m\}$  оператора  $L$ ).

Решая принципиальные вопросы нахождения решений исходной



задачи, такое расширение вектора эволюционных переменных может потребовать большой оперативной памяти и большого числа операций на шаг эволюции. Эту проблему предлагается преодолеть заданием  $\{x_m(t)\}$  на редкой сетке по пространственным переменным. Затем для определения оператора эволюции на заданной густой сетке по пространственным переменным предлагается воспользоваться экономичным методом Шмидта.

Во второй главе МЭП используется для решения актуальных спектральных задач квантовой механики.

Глава состоит из 4 параграфов.

В § 2.1 рассмотрена задача о связанных состояниях в потенциальном поле. Это наиболее популярная спектральная задача квантовой механики. Простота задачи позволяет решать ее на современных ЭВМ практически любым методом. Однако, эта задача часто входит, как постоянно встречающийся элемент, в более сложные расчеты, что и стимулирует совершенствование алгоритмов ее решения.

Быстрота алгоритма и скромные требования к оперативной памяти ЭВМ позволяют решать методом эволюции параметра такие задачи в режиме реального времени на малопроизводительных персональных ЭВМ. Так, расчеты на ЭВМ ДЕК-2М ( $\sim 1500$  операций/сек) требуют  $\sim 1$  сек расчетного времени на точку спектра при 100 узлах сетки по пространственной переменной.

В § 2.2, на основе развитого в § 1.6 алгоритма решается задача эффекта Штарка для атома водорода. Эволюционным параметром в данном случае является внешнее электрическое поле. К особенностям задачи можно отнести достаточно сложные граничные условия для одного из уравнений и наличие большого числа близко расположенных решений для возбужденных состояний.

В параграфе приводятся расчеты для двух распространенных постановок: задачи на квазистационарные состояния с комплексным спектром и задачи резонансного рассеяния.

В рамках МЭП алгоритм решения практически не отличается от алгоритма определения связанных состояний в потенциальной яме. Расчеты на ДЕК-2М занимают  $\sim 4$  мин на точку спектра, позволяя определять с несколькими верными знаками времена жизни квазистационарных состояний величиной от  $10^{-10}$  а.е. до  $\sim 1$  а.е.

В § 2.3 на основе МЭП решается спектральная задача для нелинейного ОДУ четвертого порядка с малым параметром при стар-

шей производной и решением типа пограничного слоя. Именно к такой задаче сводится квантовостатистическая модель вещества, развитая Н.Н. Калиткиным и Д.А. Киржницем. Это одна из основных моделей физики сжатого конденсированного вещества. Интерес к моделям такого типа прослеживается с 50-х годов.

Однако, применение экономичных методов типа "стрельбы" для ее решения оказалось очень трудоемким. Решение было получено Н.Н. Калиткиным на основе метода дополненного вектора. Однако оно требовало  $\sim 30$  сек счетного времени на БЭСМ-6 для расчета одной точки в пространстве термодинамических параметров.

В рамках МЭП аналогичные расчеты заняли  $\sim 0,2$  сек. При этом в качестве параметра эволюции выбран радиус атомной ячейки. Эволюционными переменными выбраны функция  $U(t)$ , имеющая смысл полной энергии электрона на расстоянии  $t$  от ядра, и химический потенциал.

Результатом расчета является изотерма - зависимость давления в веществе от степени его сжатия. В качестве начального решения используется модель однородного электронного газа или асимптотические разложения Н.Н. Калиткина. Эти приближения дают приемлемую точность только при достаточно сильном сжатии. Однако, возникающая в начальной точке ошибка релаксирует за несколько шагов эволюции до уровня, определяемого плотностью используемых сеток, за счет релаксирующих свойств оператора эволюции.

В расчетах эволюция проводилась для всех элементов периодической таблицы от сильных сжатий, соответствующих давлениям  $p \sim 10^7$  а.е., до газовой области, в которой уже действует сила притяжения, давление отрицательно и достигает величин  $p \sim -10^{-10}$  а.е. Ясно, что эволюция в столь широком диапазоне изменения величин возможна только при наличии хороших релаксационных свойств алгоритма, что и показывали специальные расчеты, в которых исключались релаксационные добавки из ОЭ.

Отметим, что несколько более простая модель вещества Фейнмана-Метрополиса-Теллера потребовала в рамках МЭП  $\sim 0,02$  сек счетного времени БЭСМ-6 для вычисления одного значения давления вещества при заданном объеме и температуре в расчете на один элемент смеси элементов, образующих вещество. Общее время счета пропорционально числу элементов смеси. Это примерно на

порядок быстрее известных из литературы расчетов.

Существенным является то, что для получения давления с точностью не хуже 1% в приведенных примерах густота сетки по параметру не превышала 2-8 точек при изменении объема в десятикратном. Это соответствует густоте сеток в табличных уравнениях состояния, используемых на практике в газодинамических расчетах.

В §2.4 в рамках МЭП решается спектральная задача для уравнений самосогласованного поля Д.Хартри. Это основная модель физики атома, молекул и твердого тела. После небольших модификаций в рамках подхода Дж. Слэтера или функционала плотности эта модель в ряде случаев дает лучшее описание свойств вещества, чем более сложная модель Хартри-Фока.

Обсуждаемая задача и ее разнообразные аналоги привлекают внимание исследователей с 20-х годов. Практически все это время задача решалась на основе метода самосогласования Хартри (в последнее время в ряде работ - непрерывным аналогом метода Ньютона), в котором сначала итерационно определяется спектр для уравнения Шредингера при заданном потенциале, а затем методом простых итераций добиваются самосогласования потенциала.

Такая процедура часто расходится. Для устранения расходимости Д.Хартри предложил многослойные итерационные схемы, обеспечивающие линейную сходимость.

Развитый в параграфе алгоритм позволяет при решении практических задач вообще отказаться от итераций, как внешних по самосогласованию потенциала, так и внутренних - по определению спектра уравнения для заданного потенциала. Это повышает эффективность алгоритма в 10 + 100 раз.

На основе МЭП в параграфе проводятся расчеты сжимаемости атома в непроницаемой сфере. Параметром эволюции, как и в §2.3, выбран радиус атомной ячейки, а переменными эволюции - собственные числа и самосогласованный потенциал. Рассмотрены: а) эволюция заданной электронной конфигурации; б) постановка, в которой учитывается термическое возбуждение - модель среднего атома.

На примере численных расчетов обсуждаются релаксационные свойства алгоритма и временные характеристики. Проведены сквозные расчеты из области сверхсильных сжатий в область разреженного вещества. Шаг сетки по параметру эволюции, при точности определения термодинамических величин не хуже 1%, также соответствует густоте таких сеток в табличных уравнениях состояния.

Недостатком способа эволюции заданной электронной конфигурации является необходимость определять, какая из конфигураций обеспечивает при заданном сжатии минимум полной энергии. Это преодолевается переходом к эволюции температуры  $T$  при заданной электронной плотности или совместной вариацией температуры и плотности. В этом случае в число эволюционируемых переменных включается химический потенциал.

Такая модель среднего атома, в которой отсутствует проблема выбора конфигураций, в пределе  $T \rightarrow 0K$  переходит в самосогласованные уравнения Хартри для конфигурации с минимальной энергией.

В третьей главе собраны основные результаты по численным методам решения прямой квантовомеханической задачи рассеяния.

В §3.1 предлагается способ построения эффективных разностных схем для пространственно-одномерных квантовомеханических задач - метод монотонной функции. Вводится класс преобразований волновой функции к новым переменным, области монотонности которых совпадают с областями монотонности коэффициентов уравнения.

Это свойство монотонности используется при построении разностных схем хорошо аппроксимирующих задачу, даже в случае, когда волновая функция на шаге разностной сетки совершает несколько осцилляций, причем частота этих осцилляций существенно изменяется на шаге сетки. Приведены примеры конкретных расчетов, демонстрирующие заметное преимущество методики по точности аппроксимации не только по сравнению с разностными схемами, построенными на основе полиномиальной аппроксимации, но и со схемами, использующими квазианалитическую интерполяцию бегущими волнами.

Предложенная формулировка задачи позволила получить ряд новых оценок для коэффициента надбарьерного прохождения. Построенная на ее основе теория возмущений является абсолютно сходящейся, а не асимптотической.

В §3.2 для решения задачи потенциального рассеяния предложен метод выделенной области, соединяющий в рамках единого алгоритма метод парциальных волн и высокоэнергетические приближения.

Метод эффективен в области промежуточных энергий, где применение этих приближений вызывает затруднения и переходит в них соответственно в пределах больших и малых энергий.

На основе метода создан комплекс программ, который в те -

чение  $\sim 10$  лет используется в ряде организаций для решения задач рассеяния атомных и ядерных частиц.

Поиски более удобных для численных расчетов формулировок задач рассеяния привели нас к рассмотрению вместо краевой задачи для уравнения Шредингера задачи Коши для матрицы амплитуды рассеяния, где в качестве параметра эволюции выступает радиус обрезания потенциала.

Для упругого рассеяния при специальных способах построения гомотопии (I) данный подход впервые был развит в работах В.В. Бабикова, Р.М. Мир-Касимова, М.Х. Ханхасаева. Новым является указание общего вида гомотопий (I) и рассмотрение процессов с неупругими каналами.

Глава IV диссертации посвящена интерпретации экспериментов по рассеянию быстрых пучков, выполненных в ИКИ АН СССР.

В § 4.1 решается задача восстановления потенциала атомно-атомного взаимодействия между частицами с замкнутыми электронными оболочками.

Известно, что ключом к однозначному решению обратной задачи рассеяния является определение так называемого "полного набора" эмпирических данных. Основываясь на существовавшей экспериментальной установке, с необходимостью пришлось включить в такой полный набор абсолютные измерения, что, как обычно, сильно усложняет эксперимент и оставляет возможность наличия неуценной систематической ошибки.

Ключевым для дальнейшего развития направления является разработанный в параграфе метод восстановления потенциалов только из относительных измерений дифференциальных сечений рассеяния в ограниченном угловом диапазоне, основанный на использовании эффектов квантового дифракционного рассеяния. Приведены примеры интерпретации первых измерений, в которых разрешена дифракционная структура.

Однако, точность таких измерений пока невысока и они еще не являются надежным источником потенциалов.

Поэтому была проведена оптимизация существовавшей методики измерений. Она явилась основой для проведения специальной серии измерений, интерпретация которых позволила почти на порядок по-

высить точность эмпирических сферически-симметричных потенциалов в диапазоне энергий взаимодействия  $I - 20$  эВ.

В § 4.2 анализируется качество определяемых потенциалов путем сравнения нового потенциала наиболее изученной системы  $He-He$  с совокупностью имеющихся теоретических и экспериментальных данных. Показано, что полученный новый потенциал согласуется с наиболее надежными теоретическими и эмпирическими данными в пределах точности последних. Найдено, что считавшиеся ранее наиболее достоверными эмпирические потенциалы Форемана и Рола превышают значения потенциала на  $10 - 50\%$  в диапазоне энергий  $I - 20$  эВ.

В § 4.3 в рамках приближений внезапных возмущений и искаженных волн анализируется возможность извлечения полезной информации о молекулярном рассеянии из величин измеряемых в проводимых в ИКИ АН СССР экспериментах.

Взаимодействие молекулярных систем сопровождается обменом энергией между поступательными и внутримолекулярными степенями свободы, определяемым зависимостью потенциала взаимодействия от внутримолекулярных координат. Эта информация является основой теоретического описания релаксационных процессов в газовых средах.

Показано, что усредненные по начальным и конечным вращательным состояниям сечения рассеяния быстрых пучков практически не содержат информации об анизотропии потенциала молекулярного взаимодействия, и их можно интерпретировать посредством сферически-симметричной части потенциала.

Таким образом, трудно было ожидать, что из экспериментов по рассеянию без селекции начальных и конечных состояний молекул можно извлечь больше, чем эффективный сферически-симметричный потенциал взаимодействия. Именно такая точка зрения и была признанной.

В § 4.4 обосновывается другая точка зрения.

При изучении высокоэнергетического рассеяния с участием молекул в 70-х годах были обнаружены структуры радужного типа на кривых дифференциального сечения рассеяния, отсутствующие в аналогичных сечениях атом-атомного рассеяния.

В соответствии с имевшимися представлениями о высокоэнергетическом рассеянии структуры интерпретировались в рамках модели сферически-симметричного потенциала и объяснялись небольшой неплывностью его зависимости от рассеяния между частицами.

Автором была высказана гипотеза, связывающая эти структуры с зависимостью потенциала от колебательной переменной. Соответственно, эффект был назван высокоэнергетической колебательной радугой.

Теория эффекта, которая связывает образование радужных структур с возмущением налетающей частицей колебательных движений другой частицы и обратным влиянием этого возбуждения на динамику рассеяния, предложена в § 4.4. Приведены также основные результаты специальной серии экспериментов, согласующихся с предсказаниями теории.

В § 4.5 полученные при изучении рассеяния пучков эмпирические потенциалы используются для описания холодного сжатия конденсированных газов при мегабарных давлениях.

Потребность в таких эмпирических данных возникла из необходимости определения области применимости развиваемых в ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР и других организациях теоретических моделей сильно сжатого вещества, а также для интерпретации экспериментов по сильному сжатию.

Идея использования парных потенциалов для изучения сжимаемости известна. Однако, ее приложения с использованием недостоверных короткодействующих потенциалов в целом являются неудачными. Поэтому распространено мнение об очень большой роли неадекватности, препятствующей таким приложениям.

В § 4.5 мы показали, что для конденсированных газов это мнение основано на недостаточной точности использовавшихся ранее парных потенциалов и построили для ряда конденсированных газов кривые холодного сжатия при мегабарных давлениях, согласующиеся с широким набором теоретической и экспериментальной информацией.

Таким образом, к традиционным методам исследования сжимаемости в ударных волнах, сильных магнитных полях и алмазных наковальнях мы добавили подход, основанный на использовании данных метода рассеяния быстрых молекулярных пучков. Особенностью этого подхода явилась возможность получения эмпирической информации о холодном сжатии вещества при давлениях до 100 Мбар, что недоступно в других подходах.

Полученные новые данные о сжимаемости ряда конденсированных газов использованы в параграфе для проверки теоретических моделей сжатого вещества, рассмотренных во второй главе. Обнару-

жены, на примере сжатия конденсированного  $Ne$ , оболочечные эффекты на кривой холодного сжатия до давлений  $\sim 100$  Мбар. Эти результаты дополняют опубликованные недавно в работах Аврорина Е.Н., Водолаги Б.К. и др. результаты обнаружения оболочечных эффектов на ударных адиабатах.

Ряд вопросов, касающихся перспективных технических проектов и задач из других областей, вынесены в приложения.

В Приложение I вынесено рассмотрение вопросов интерпретации перспективных экспериментов по рассеянию быстрых пучков, призванных обеспечить упомянутые выше технические приложения необходимыми данными об элементарных процессах взаимодействия тяжелых нейтральных частиц.

Рассматриваемые предложения по постановке новых экспериментов основаны, в основном, на реальных технологических достижениях. Новые же возможности предполагается обеспечить за счет использования современной вычислительной техники и широкого внедрения математического моделирования.

Первый параграф приложения является вводным и отражает наше понимание текущего состояния и тенденций развития обсуждаемого экспериментального направления.

В экспериментах по столкновениям главными являются, как известно, две проблемы: создания достаточно интенсивных пучков частиц и разработка диагностической аппаратуры, позволяющей с достаточной для набора статистики скоростью выделять полезные события и определять кинематические характеристики рассеянных частиц.

Поскольку сечения атомных процессов относительно велики, создание пучков с необходимыми характеристиками не вызывает осложнений. Центральной является диагностика продуктов столкновения. Принципиальная схема и математический алгоритм многочастичного детектора, позволяющего организовать полный опыт в экспериментах с быстрыми пучками, предложены в § п. 1.2. В настоящее время реализуется двухчастичный вариант такого детектора.

Исходя из реальных возможностей нового типа детекторов в § п. I.3 и § п. I.4 анализируется интерпретация двух экспериментов.

Первый, реализуемый при участии ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР, предназначен для прямого изучения эффектов неаддитивности при многочастичном взаимодействии методом развала пучка кластеров на газовой мишени. Реализация эксперимента позволит выявить реальную роль эффектов неаддитивности в конденсированном сжатом веществе и, тем самым, разработать более обоснованные методики построения кривых холодного сжатия на основе парных потенциалов.

В параграфе предлагается метод извлечения информации о неаддитивности взаимодействия трех атомов благородных газов из дифференциальных сечений развала димера благородного газа, помещенного в пучок, на атоме мишени.

Показано, что если потенциал взаимодействия аддитивен, то дифференциальное сечение развала удовлетворяет некоторому дифференциальному соотношению, не зависящему от конкретного вида парного потенциала. Нарушение этого соотношения свидетельствует об обнаружении эффектов неаддитивности. Для определения части неаддитивного вклада в потенциал взаимодействия из данных по рассеянию предложена прямая численная процедура, основанная на формуле обращения Абеля.

Второй эксперимент, рассмотренный в § п. I.4, основан на изучении дифференциального сечения рассеяния скрещенных под малым углом пучков частиц. Он позволит изучать сечения химических реакций замещения и диссоциации между малоатомными нейтральными молекулами при энергиях столкновения 0,1 - 20 эВ. Его интерпретация невозможна без предложенной в § 4.1 процедуры абсолютного восстановления потенциала из относительных измерений дифференциальных сечений рассеяния.

Приложение 2 посвящено применениям МЭП в смежных областях.

В § п. 2.1 на основе разработанного в § I.5 алгоритма решаются задачи, возникающие при исследовании гидродинамической устойчивости некомпенсированных электронных пучков в вакууме в плоской и аксиально-симметричной геометриях. Интересной особенностью этих задач является бифуркация собственных чисел в пространстве физических параметров, в процессе которой и появляются обычно инкременты соответствующие неустойчивости при вариации внешних параметров задачи: волнового вектора возмущений, параметров геометрии, внешних полей, характеристик равновесного состояния пучка.

Представленные в параграфе расчеты проведены по схеме со сквозным интегрированием через точки бифуркации и автоматическим выделением ветвей. Рассматривается также эволюция точки бифуркации собственного значения в пространстве физических параметров.

Исследуемая достаточно общая постановка задачи приводит к сложной нелинейной зависимости граничных условий и коэффициентов уравнений от комплексных собственных чисел. Это осложняет аналитическое исследование задачи и проведение глобального исследования, которое позволило бы гарантировать нахождение всех возможных решений. Поэтому задача изучения асимптотик и построения упрощенных моделей, которые можно использовать для задания хотя бы приближенного начального решения (сходимость к точному обеспечивается релаксационными свойствами алгоритма), является в данном случае актуальной и МЭП выступает здесь, как инструмент вычислительного эксперимента.

На основе разработанного в параграфе алгоритма впервые проведены исследования устойчивости ряда равновесных конфигураций плоскопараллельных и трубчатых релятивистских электронных пучков в широком диапазоне изменений волновых чисел возмущений и других параметров задачи. Из анализа расчетов были сделаны практические рекомендации по повышению устойчивости транспортировки релятивистских электронных пучков в вакуумных линиях.

Поскольку симметричные линии транспортировки являются, как показали расчеты, неустойчивыми, особое значение для практических приложений имеет исследование пространственно-много-

мерных задач такого типа. Развиваемый в §1.8 подход может явиться инструментом таких исследований.

В § п.2.2 общая идеология МЭП применяется к существенно отличному от рассмотренных выше классу задач — задачам оптимального проектирования информационных систем большой размерности.

Рассматривается полnodоступная сеть массового обслуживания с числом абонентов  $=100$ . Сеть абонентов образована из однолинейных систем массового обслуживания с коэффициентами связности ( $\sim 10\ 000$  коэффициентов), разыгрываемыми в приведенных численных примерах методом Монте-Карло.

Целевой функцией задачи является среднее время доставки сообщений в сети. Необходимо выбрать маршруты передачи сообщений в сети и распределение интенсивностей потоков сообщений по ним. Таким образом, рассматривается задача дискретно-непрерывного нелинейного программирования большой размерности ( $\sim 100!$ ).

В качестве параметра эволюции выбрана полная нагрузка потока сообщений в сети и прослеживается эволюция оптимальной конфигурации системы в процессе изменения нагрузки от нулевой до предельной. При таком подходе, с одной стороны, исчезает потребность в решении оптимизационной задачи, а каждый шаг эволюции требует всего лишь решения системы  $\sim 200$  линейных алгебраических уравнений. С другой стороны, резко снижается размерность задачи, т.к. реально в оптимальных сетях сообщение передается не по всем возможным маршрутам, а лишь по нескольким. В приведенных в параграфе примерах, как оказалось, в среднем реализуется 3 маршрута.

Построенный ОЭ обладает требуемыми релаксационными свойствами, что позволяет просмотреть всю допустимую область нагрузок на систему за 10–20 шагов эволюции. При построении ОЭ дополнительно к сформулированным в §1.2 — § 1.3 требованиям использовался принцип динамического программирования Р.Беллмана. Расчет такой задачи на ЭВМ ЕС-1060 потребовал  $\sim 30$  мин счетного времени.

Эта же постановка может использоваться для управления большими системами массового обслуживания в реальном времени, вследствие возможности формирования за несколько минут управляющего воздействия в ответ на изменение внешних потоков.

Хотя возможность применения методов продолжения к решению оптимизационных задач упоминается в литературе, однако на практике такие подходы не были распространены. По-видимому, это связано с тем, что кроме общей идеи продолжения для эффективности практических алгоритмов принципиальным является удовлетворение сформулированных в §1.2 — §1.3 принципов построения таких алгоритмов и не менее существенна эффективная реализация деталей такого алгоритма.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Разработан метод эволюции параметра для численного решения нелинейных стационарных задач вычислительной математической физики.

2. На основе МЭП построены и исследованы численные алгоритмы решения актуальных спектральных и краевых задач атомной физики. На основе разработанных алгоритмов решен ряд прикладных задач.

3. Развита численные методы решения прямой и обратной задач квантовомеханического рассеяния, ориентированные на интерпретацию существующих и перспективных экспериментов по рассеянию быстрых молекулярных пучков.

4. Путем интерпретации экспериментов по рассеянию получены новые данные о короткодействующих потенциалах межмолекулярного рассеяния и обнаружен новый эффект молекулярного рассеяния — колебательная радуга. Эти результаты использованы для получения кривых холодного сжатия конденсированных газов при мегабарных давлениях.

## НАУЧНАЯ НОВИЗНА

1. Развита новый эффективный метод решения краевых, спектральных и ряда других задач вычислительной математической физики, являющийся конкретным вариантом общей идеи продолжения по физическому параметру. На основе этого метода построены численные алгоритмы решения конкретных классов задач. Для решавшихся ранее задач они обеспечили выигрыш в 10–100 раз по времени счета и решен ряд задач, ранее не решавшихся.

2. Методом эволюции параметра решены актуальные спектральные задачи атомной физики, возникающие при исследовании физико-химических свойств вещества; связанные состояния в потенциальной яме; атом водорода в сильном электрическом поле; статистические модели конденсированного вещества, уравнения самосогласованного поля. Кроме того, решен ряд задач из других областей: спектральных задач гидродинамической устойчивости релятивистских электронных пучков в линейном приближении; оптимального проектирования информационных систем.

3. Развита новые методы численного решения задач квантовомеханического рассеяния: метод монотонной функции и метод выделенной области, использованные для решения прикладных задач. Задача Коши для амплитуды упругого квантовомеханического рассеяния обобщена на аналогичную задачу для матрицы амплитуды рассеяния для частиц со спином или при наличии неупругих каналов.

4. Проведена оптимизация существующей методики измерений и интерпретации экспериментов по рассеянию быстрых молекулярных пучков, позволившая улучшить точность эмпирических короткодействующих парных потенциалов взаимодействия в 5-10 раз. Достигнутая точность позволила применить эти потенциалы к описанию сжимаемости конденсированных газов при мегабарных давлениях и показать малую роль эффектов неаддитивности в изучаемом диапазоне давлений.

5. Обнаружен новый эффект в высокоэнергетическом рассеянии молекул - высокоэнергетическая колебательная радуга. Предложена математическая модель эффекта, получившая экспериментальное подтверждение. Эффект позволяет получить новую для экспериментов по рассеянию быстрых пучков информацию о зависимости межмолекулярного потенциала от межъядерных расстояний во взаимодействующих молекулах.

6. На основе развитых методик решения обратных задач рассеяния быстрых молекулярных пучков предложены и обоснованы новые экспериментальные методы исследования: а) неаддитивности короткодействующих межатомных взаимодействий; б) сечений химических реакций замещения и диссоциации между нейтральными молекулами в диапазоне энергий взаимодействия 0,1 - 20 эВ.

1. Развитый метод эволюции параметра является эффективным инструментом вычислительного эксперимента при решении краевых и спектральных нелинейных задач вычислительной физики, когда целью исследования является изучение зависимости характеристик рассматриваемых процессов от внешних физических параметров.

Метод позволил в 10 - 100 раз сократить время счета задач, возникающих при исследованиях физико-химических свойств вещества. Эффективность развитых методик позволяет оперативно проводить расчеты пространственно одномерных нелинейных спектральных задач на маломощных персональных ЭМ.

2. Метод позволяет не только повышать экономичность алгоритмов, но и является инструментом исследования нелинейных задач в которых неизвестны даже качественные свойства решения. К таким задачам относятся исследования устойчивости плоскостных и цилиндрических релятивистских пучков в линейной теории. В процессе таких численных исследований были получены новые физические результаты и даны практические рекомендации.

3. Другое практическое применение метода связано с решением задач нелинейного дискретно-непрерывного программирования, возникающих при оптимизации сетей массового обслуживания. Развита алгоритмы позволили проводить оптимизацию и управление полnodоступных сетей с числом абонентов  $\sim 100$ , в режиме реального времени на ЭМ ЕС-1060.

4. На основе развитых методов решения прямых задач квантовомеханического рассеяния создан комплекс программ, используемый в течение  $\sim 10$  лет в ряде организаций при интерпретации экспериментов по рассеянию.

5. Найденные потенциалы межатомного взаимодействия являются исходной информацией при моделировании свойств газовых и конденсированных сред в условиях высоких температур и давлений.

6. Показанная возможность использования парных потенциалов, полученных из экспериментов по рассеянию, для описания холодного сжатия конденсированных газов в диапазоне давлений 1-100 Мбар открывает для эмпирического исследования новые области в пространстве термодинамических параметров, недоступные для других методов. Такое направление является дополнительным к экспериментам по динамическому и статическому сжатию. В свя-

зи с обоснованием этого направления важна показанная в диссертации возможность изучения эффектов неаддитивности в экспериментах по рассеянию.

Методы, развитые в настоящей работе и ее результаты могут быть использованы в ряде академических (ИИМ им. М.В.Келдыша АН СССР, ИКИ АН СССР, ИИМех АН СССР, МРТИ АН СССР, ВЦ АН СССР, ФИ АН СССР, ЛЯТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, ИИПМ СО АН СССР и др.) и отраслевых институтов.

#### ЛИЧНЫЙ ВКЛАД АВТОРА

Все основные результаты диссертационной работы получены лично автором.

Приложения метода эволюции параметра к решению конкретных задач проводились совместно с В.А. Жевнеровым, Л.В. Кузьминой, В.Г. Лейманом, С.П. Литвинцевой, О.Б. Овсянниковой, И.П. Родионовой, Е.Б. Соломагиным.

Исследования атом-молекулярных столкновений проводились в сотрудничестве с А.С. Борисовым, А.П. Калининным, В.Б. Леонасом, И.П. Родионовой.

Приложения результатов исследования столкновений к определению сжимаемости вещества проводились с Н.Н. Калиткиным и В.Б. Леонасом.

#### АПРОБАЦИЯ РАБОТЫ

Основные результаты, вошедшие в диссертацию, докладывались на ряде всесоюзных и международных конференций и школ:

- на сессии Отделения общей физики и астрономии и Отделения ядерной физики АН СССР (ФИ АН, март 1985)

- на Международном симпозиуме по динамике разреженных газов (Новосибирск, 1982)

- на Всесоюзной школе по физике электронных и атомных столкновений (Бакуриани, 1980)

- на Всесоюзной конференции по физике электронных и атомных столкновений (Ленинград, 1981г.; Рига, 1984)

- на Всесоюзной школе по моделям механики сплошной среды (Батуми, 1983г.; Омск, 1985)

- на Всесоюзном симпозиуме по динамике элементарных атомно-молекулярных процессов (Черноголовка, 1985)

- на Всесоюзной конференции по динамике разреженных га -

зов (Москва, 1985)

- на Всесоюзной конференции по физике высокотемпературной плазмы (Звенигород, 1985)

- на Всесоюзном совещании по координато-чувствительным фотоприемникам и оптико-электронным устройствам на их основе (Барнаул, 1985)

- на Рабочем совещании по уравнениям состояния (Нальчик, 1984г.; 1986)

- на сессии Научного совета по физике высокотемпературной плазмы (Нальчик, 1984)

- на Всесоюзном совещании по физико-химическим свойствам вещества (Барнаул, 1986)

- на ряде отраслевых конференций и совещаний.

Кроме того, результаты, составившие основу диссертации, обсуждались на научных семинарах в

- НИИЯФ МГУ, под руководством Е.А. Романовского, 1977г

- ИАЭ, под руководством О.Б. Фирсова, 1981г

- ИКИ АН СССР, под руководством Г.И. Петрова, 1980г., 1982г., 1986 г.

- ИИМ им. М.В. Келдыша АН СССР, под руководством А.А. Самарского, 1984, 1986 г.

- ЛГУ им. А.А. Еданава, под руководством Г.В. Дубровского, 1985 г.

- ИФВД АН СССР, под руководством А.И. Лихтера, 1985г.

- ФИ АН СССР, под руководством В.Б. Розанова, 1985 г.

- ФИ АН СССР, под руководством А.А. Рухадзе, 1985г.

- ОИЯИ (г.Дубна), под руководством Е.П. Жидкова, 1986г.

- МГУ (факультет ВМК), под руководством А.А. Самарского, 1986г.

- ВЦ АН СССР, под руководством А.А. Абрамова, 1986г.

- ИИМ им. М.В. Келдыша, АН СССР, под руководством К.И. Бабенко, 1986г.

#### РАБОТЫ АВТОРА, ОПУБЛИКОВАННЫЕ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Родионов И.Д. Комплекс программ для расчета сечений квантово-механического рассеяния: Препринт № 89. М.: ИИМатем. АН СССР, 1976. 61 С.
2. Родионов И.Д. Метод выделенной области для двумерной кван-



- товомеханической задачи рассеяния: Препринт № 139. М.: ИИМатем. АН СССР, 1975, 52 С.
3. Калиткин Н.Н., Родионов И.Д. Численный расчет одномерного квантовомеханического рассеяния//*Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1975. Т.15. №2. С. 518-521.
  4. Калиткин Н.Н., Родионов И.Д. Метод монотонной функции в одномерной квантовомеханической задаче: Препринт № 34. М.: ИИМатем. АН СССР, 1976. 58 С.
  5. Родионов И.Д. Метод монотонной функции в одномерной квантовомеханической задаче с комплексным потенциалом: Препринт № 115. М.: ИИМатем. АН СССР, 1976. 21 С.
  6. Калиткин Н.Н., Родионов И.Д. Рассеяние электронов в плотном веществе: Препринт №46. М.: ИИМатем. АН СССР, 1976. 40 С.
  7. Родионов И.Д. Расчет квантовомеханического рассеяния методом выделенной области//*Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1977. Т.17. №2. С. 1494-1507.
  8. Родионов И.Д., Родионова И.П. О возможности применения конечноразностных методов в квантовой теории рассеяния: Препринт № 569. М.: Институт Космических Исследований АН СССР, 1980. 46 С.
  9. Родионов И.Д., Родионова И.П. Комплекс программ для расчета дифференциального высокоэнергетического рассеяния молекул// Тезисы докладов УШ Всесоюзной конф. по физ. электр. и атомн. столкновений, 1981. Ленинград. С. 66.
  10. Калинин А.П., Леонас В.Б., Родионов И.Д. Состояние и перспективы использования метода рассеяния быстрых пучков на малые углы для изучения короткодействующих межмолекулярных сил//*Сб. докладов УШ Всесоюзной конф. по физ. электр. и атомных столкновений*, 1981. Ленинград. С. 55-62.
  11. Родионов И.Д. Метод эволюции параметра в одномерной задаче на связанные состояния: Препринт ИИМатем. № 23, 1982. 30С.
  12. Leonas V.B., Rodionov I.D. Effects of the initial molecular states in a high-energy scattering of molecular beams//*Selected papers from the Thirteenth International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, held 1982 in Novosibirsk, USSR, New York: Plenum Press, 1985. V.2. P. 717-724.*

13. Леонас В.Б., Родионов И.Д. Состояние и перспективы исследования короткодействующих межмолекулярных сил методом дифференциального рассеяния. Теоретические обоснования метода высокоэнергетического рассеяния: Препринт № 698. М.: Ин-т Космич. Исслед. АН СССР, 1982. 59 С.
14. Леонас В.Б., Родионов И.Д. Результаты экспериментального и теоретического определения короткодействующих потенциалов межмолекулярного взаимодействия: Препринт № 703. М.: Ин-т Космич. Исслед. АН СССР, 1982. 57 С.
15. Родионов И.Д. Теория эффекта колебательной радуги в рассеянии молекул высоких энергий: Препринт № 189, М.: ИИМатем. АН СССР, 1982. 27 С.
16. Калинин А.П., Леонас В.Б., Родионов И.Д. Обнаружение колебательной радуги для высокоэнергетического рассеяния молекул//*Доклады АН СССР*, 1983. Т. 268 №2. С. 347-350.
17. Родионов И.Д. Квантовомеханическое описание колебательной радуги в рассеянии молекул высоких энергий: Препринт №7. М.: ИИМатем. АН СССР, 1983. 20 С.
18. Leonas V.B., Rodionov I.D. High Energy Atom-Molecule Scattering at Small Angles//*Comments on atomic and molecular physics*, 1983. v. XIV. N182. P. 1-17.
19. Лейман В.Г., Овсянникова О.Б., Родионов И.Д. Исследование устойчивости электронных пучков методом эволюции параметра: Препринт № 92. М.: ИИМатем. АН СССР, 1983. 23 С.
20. Леонас В.Б., Родионов И.Д. Перспективы микроскопического подхода в исследованиях экстремальных состояний вещества: Препринт № 19. М.: ИИМатем. АН СССР, 1984. 21 С.
21. Кузьмина Л.В., Родионов И.Д. Решение систем уравнений Хартри методом эволюции параметра//*Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1985. Т. 25. №8. С. 1200-1210.
22. Лейман В.Г., Овсянникова О.Б., Родионов И.Д. Длинноволновая двокотронная неустойчивость сильнооточных релятивистских электронных пучков//*Физика плазмы*, 1984. Т. 10. Вып. 1, С. 122-125.
23. Калинин А.П., Леонас В.Б., Родионов И.Д. Исследование эффекта колебательной радуги при рассеянии быстрых молекулярных пучков//*Химическая физика*. 1985. Т. 4. №4. С. 464-469.

24. Леонас В.Б., Родионов И.Д. Исследование высокоэнергетического рассеяния атомов и молекул//Успехи физических наук, 1985. Т. 146. Вып. I. С. 7-34.
25. Лейман В.Г., Литвинцева С.П., Овсянникова О.Б., Родионов И.Д. Гидродинамическая неустойчивость электронных пучков в азимутальном магнитном поле: Препринт № 109. М.: ИФМатем. АН СССР, 1985. 27 С.
26. Лейман В.Г., Литвинцева С.П., Овсянникова О.Б., Родионов И.Д. Неустойчивость безвихревых электронных пучков в цилиндрической геометрии: Препринт № 115. М.: ИФМатем. АН СССР, 1985. 26 С.
27. Калиткин Н.Н., Леонас В.Б., Родионов И.Д. Сжимаемость гелия при высоких давлениях: Препринт № 114. М.: ИФМатем. АН СССР, 1985. 26 С.
28. Калиткин Н.Н., Леонас В.Б., Родионов И.Д. Сжимаемость водорода при высоких давлениях: Препринт № 127. М.: ИФМатем. АН СССР, 1985. 25 С.
29. Калиткин Н.Н., Леонас В.Б., Родионов И.Д. Модели экстремальных состояний вещества и их экспериментальная проверка//Успехи физических наук, 1985. Т. 147. Вып. I. С. 184-187.
30. Калинин А.П., Родионов И.Д., Родионова И.П. Определение короткодействующих потенциалов на основе измерений дифференциальных и интегральных сечений рассеяния//Тезисы докладов IX Всесоюзной конференции по физике электронных и атомных столкновений, 1984. Рига. Т. I. С. 61.
31. Калинин А.П., Родионов И.Д. О возможности экспериментального изучения эффектов неаддитивности короткодействующих межатомных сил: Препринт № 110. М.: ИФМатем. АН СССР, 1985. 29 С.
32. Калинин А.П., Родионов И.Д., Родионова И.П. Определение координат одновременно пришедших частиц координаточувствительным детектором на основе микроканальных пластин//Тезисы докладов III Всесоюзного совещания Координатно-чувствительные фотоприемники и оптико-электронные устройства на их основе, 1985, Барнаул. С. 21-22.
33. Калинин А.П., Родионов И.Д., Родионова И.П. Особенности в молекулярных поверхностях потенциальной энергии, найденные из экспериментов по рассеянию быстрых молекулярных пучков//Тезисы докладов VIII Всесоюзной конференции по

- динамике разреженных газов, 1985. Москва. Т.2. С.23.
34. Калинин А.П., Родионов И.Д., Родионова И.П. Потенциалы взаимодействия благородных газов, восстановленные из измерений абсолютных сечений рассеяния//Тезисы докладов VIII Всесоюзной конференции по динамике разреженных газов, 1985. Москва. Т. 2. С. 24.
35. Левнеров В.А., Родионов И.Д. Оптимальное проектирование информационных систем методом эволюции параметра//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. Т. 26. №3. С. 449-457.
36. Борисов А.С., Родионов И.Д. Обратная задача дифракционного рассеяния атомов высоких энергий на малые углы: Препринт № 39. М.: ИФМатем. АН СССР, 1986. 22 С.
37. Родионов И.Д., Родионова И.П. Численный расчет свойств вещества по квантостатистической модели: Препринт №37. М.:ИФМатем. АН СССР, 1986. 23 С.
38. Литвинцева С.П., Родионов И.Д. Численный алгоритм решения одномерных краевых спектральных задач методом эволюции параметра: Препринт № 75. М.: ИФМатем. АН СССР, 1986. 24 С.
39. Родионов И.Д. Об изучении сечений газофазных химических реакций методом рассеяния молекулярных пучков: Препринт № 49. М.: ИФМатем. АН СССР, 1986. 23 С.