

P11-2001-61

О.Чулуунбаатар, И.В.Пузынин, С.И.Виницкий

**НЬЮТОНОВСКАЯ ИТЕРАЦИОННАЯ СХЕМА
С ВАРИАЦИОННЫМ ФУНКЦИОНАЛОМ
ШВИНГЕРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ**

Направлено в «Journal of Computational Methods
in Sciences and Engineering»

1 Введение

Задачи рассеяния в ядерной физике связаны с вычислением амплитуды рассеяния, фазовых сдвигов и параметров смешивания, входящих в определение асимптотической волновой функции уравнения Шредингера с короткодействующим потенциалом V . Для решения задачи рассеяния используются различные методы. Одним из распространенных подходов является вариационный метод Швингера. В этом подходе используется следующее выражение для вариационного функционала:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi} \frac{(\mathbf{k}'|V|\eta_{\mathbf{k}}^{(+)}) (\eta_{\mathbf{k}'}^{(-)}|V|\mathbf{k})}{(\eta_{\mathbf{k}'}^{(-)}|V - \mathbf{V}G_0V|\eta_{\mathbf{k}}^{(+)})}, \quad (1)$$

которое позволяет вычислять амплитуды и фазы рассеяния с большей точностью, чем в борновском приближении [1, 2]. Здесь $|\eta\rangle$ – пробные функции, G_0 – свободная функция Грина. В работах [3, 4] было показано, что можно достаточно эффективно находить решения задачи рассеяния с помощью различных итерационных схем, построенных на основе вариационного функционала Швингера (1), используя сепарабельное приближение для короткодействующего потенциала:

$$\begin{cases} V^{(N)} = \sum_{i,j=1}^N V|\eta_i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle\eta_j|V; \\ d_{ij}^{-1} = (\eta_i|V|\eta_j). \end{cases} \quad (2)$$

Тем не менее проблемы построения устойчивых итерационных схем, позволяющих получить решения с заданной точностью, являются актуальными и в настоящее время.

В работе [5] была построена устойчивая итерационная схема решения задачи рассеяния для уравнения Шредингера на основе непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) с помощью дополнительного вариационного функционала Хьюлтена. В данной работе этот метод применен для решения задачи рассеяния с заданной точностью, в рамках интегрального уравнения используется вариационный функционал Швингера (1).

Структура работы следующая. Во втором разделе представлены общие положения, необходимые для построения устойчивых итерационных схем решения

спектральных задач на основе НАМН. Показана возможность вывода различных известных итерационных схем для спектральных задач на единой основе НАМН.

В третьем разделе с помощью вариационного функционала Швингера задача рассеяния сформулирована как задача на собственные значения относительно пары неизвестных: фазового сдвига и волновой функции. Построена устойчивая итерационная схема на основе НАМН и его модификаций в окрестности решения.

В четвертом разделе эффективность предложенной итерационной схемы продемонстрирована на численных решениях задачи упругого рассеяния с потенциалом Морзе и со сферической ямой.

2 Непрерывный аналог метода Ньютона

Рассмотрим схему решения спектральных задач на основе непрерывного аналога метода Ньютона, которая заключается в замене исходной нелинейной стационарной задачи

$$\varphi(a, \lambda, y) = 0 \quad (3)$$

относительно неизвестной $z = (\lambda, y) \in R^n \times Y$, $Y \subseteq B$, при фиксированном наборе физических вектор-параметров $a \in R^m$ эволюционной задачей Коши [6]:

$$\varphi'(a, z(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\varphi(a, z(t)), \quad (4)$$

$$z(0) = z_0. \quad (5)$$

Здесь t ($0 \leq t < \infty$) - непрерывный параметр, от которого зависит траектория $z(t)$, φ' - производная Фреше, z_0 - элемент в окрестности искомого решения $z^* = (\lambda^*, y^*)$ уравнения (3). Доказательство сходимости непрерывной траектории $z(t)$ при $t \rightarrow \infty$ к решению z^* при условии непрерывности φ и φ' и существовании ограниченного оператора $(\varphi')^{-1}$ в окрестности z^* основано на существовании интеграла задачи Коши (4)-(5):

$$\varphi(a, z(t)) = e^{-t} \varphi(a, z_0). \quad (6)$$

Дискретная аппроксимация по параметру t задачи (4)-(5) на основе метода Эйлера сводит ее к решению последовательности линейных задач:

$$\begin{aligned}\varphi'(a, z_k)\Delta z_k &= -\varphi(a, z_k), \\ z_{k+1} &= z_k + \tau_k\Delta z_k,\end{aligned}\tag{7}$$

причем специальным выбором параметра τ_k можно оптимизировать скорость и устойчивость сходимости $z_k \rightarrow z^*$ [7, 8]. Для классической спектральной задачи относительно пары $z = \{\lambda, \Psi\} \in R^n \times Y$ нелинейное уравнение (3) можно представить в виде

$$\varphi(a, \lambda, \Psi) = \begin{pmatrix} (H(a) - \lambda I)\Psi \\ F(a, \lambda, \Psi) \end{pmatrix} = 0.\tag{8}$$

Здесь $H(a)$ - оператор в гильбертовом пространстве, а $F(a, \lambda, \Psi)$ - дополнительный функционал, например:

$$\begin{aligned}\text{а) } (\Psi, \Psi) - 1 &= 0 && \text{условие нормировки,} \\ \text{б) } (\Psi, (H(a) - \lambda I)\Psi) &= 0 && \text{условие ортогональности.}\end{aligned}\tag{9}$$

Для решения спектральных задач (8) применима итерационная схема (7). Двухкомпонентная структура функции φ и возможность изменения вида функционала F в итерациях позволяют получить широкий набор итерационных процессов с регулируемыми свойствами, в том числе и известные методы обратных итераций, обратные итерации с рэлеевским сдвигом и другие.

Итерационная схема (7) для уравнения (8) при фиксированном значении вектор-параметра a представляет на каждом шаге итераций систему относительно итерационной поправки $\Delta z_k = \{\Delta \lambda_k, \Delta \Psi_k\}$:

$$\begin{aligned}(H - \lambda_k I)\Delta \Psi_k &= -(H - \lambda_k I)\Psi_k + \Delta \lambda_k \Psi_k, \\ F'_\lambda(\lambda_k, \Psi_k)\Delta \lambda_k + F'_\Psi(\lambda_k, \Psi_k)\Delta \Psi_k &= -F(\lambda_k, \Psi_k).\end{aligned}\tag{10}$$

В зависимости от способа решения этой системы и выбора формы функционала F можно получить разные известные итерационные схемы решения спектральных задач. Представляя $\Delta \Psi_k$ в виде

$$\Delta \Psi_k = -\Psi_k + \Delta \lambda_k U_k,\tag{11}$$

где U_k - решение задачи

$$(H - \lambda_k I)U_k = \Psi_k,$$

получаем следующее выражение для $\Delta\lambda_k$:

$$\Delta\lambda_k = \frac{1 + (\Psi_k, \Psi_k)}{2(\Psi_k, U_k)}.$$

При $\tau_k = 1$ получаем следующее выражение для новых приближений:

$$\begin{aligned} \Psi_{k+1} &= \Delta\lambda_k (H - \lambda_k I)^{-1} \Psi_k, \\ \lambda_{k+1} &= \lambda_k + \frac{1 + (\Psi_k, \Psi_k)}{2(\Psi_k, (H - \lambda_k I)^{-1} \Psi_k)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Отсюда видно, что получена известная схема обратных итераций.

При использовании функционала F в форме (96) получаем следующую систему относительно итерационных поправок:

$$\begin{aligned} (H - \lambda_k I)\Delta\Psi_k - \Delta\lambda_k \Psi_k &= -(H - \lambda_k I)\Psi_k, \\ (\Delta\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k) + (\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Delta\Psi_k) - (\Psi_k, \Delta\lambda_k \Psi_k) &= -(\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k). \end{aligned}$$

Используя первое уравнение этой системы, получаем из второго уравнения

$$(\Delta\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k) = 0.$$

Если оператор H самосопряженный, то

$$(\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Delta\Psi_k) = 0. \quad (13)$$

Подстановка выражения для $\Delta\Psi_k$:

$$\Delta\Psi_k = -\Psi_k + \Delta\lambda_k (H - \lambda_k I)^{-1} \Psi_k, \quad (14)$$

в соотношение (12) дает

$$-(\Psi_k, (H - \lambda_k I)\Psi_k) + \Delta\lambda_k (\Psi_k, \Psi_k) = 0.$$

Отсюда имеем при $\tau_k = 1$

$$\Delta\lambda_k (\Psi_k, \Psi_k) = (\Psi_k, H\Psi_k) - \lambda_k (\Psi_k, \Psi_k)$$

или

$$\begin{aligned} \Psi_{k+1} &= \Delta\lambda_k (H - \lambda_k I)^{-1} \Psi_k, \\ \lambda_{k+1} &= \frac{(\Psi_k, H\Psi_k)}{(\Psi_k, \Psi_k)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Эта формула вместе с выражением (12) для приближения λ_{k+1} приводит к известной схеме обратных итераций с рэлеевским сдвигом.

Помимо непрерывного аналога метода Ньютона можно рассмотреть непрерывный аналог модифицированного метода Ньютона. Он представляется эволюционным процессом:

$$\varphi'(a, \tilde{z}(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\varphi(a, z(t)), \quad (16)$$

$$z(0) = z_0, \quad (17)$$

где \tilde{z} - некоторый фиксированный элемент из окрестности искомого решения z^* . Этот подход дает итерационные схемы типа (7), в которых оператор $\varphi'(a, \tilde{z}(t))$ требуется обратить лишь один раз. В спектральных задачах, когда неизвестное z состоит из двух компонент λ и Ψ , можно фиксировать как обе, так и одну из этих компонент, в зависимости от того, насколько хорошо известно соответствующее приближение к искомому решению. Например, при фиксированном значении $\lambda_k = \tilde{\lambda}$ из системы (10) с функционалом F в форме (9а) получаем

$$(H - \tilde{\lambda}I)\Delta\Psi_k = -(H - \lambda_k I)\Psi_k + \Delta\lambda_k\Psi_k, \quad (18)$$

$$2(\Psi_k, \Delta\Psi_k) = 1 - (\Psi_k, \Psi_k). \quad (19)$$

Решение уравнения (18) можно представить в виде

$$\Delta\Psi_k = v_k + \Delta\lambda_k w_k. \quad (20)$$

При этом v_k равно

$$v_k = -\Psi_k - (H - \tilde{\lambda}I)^{-1}(\tilde{\lambda} - \lambda_k)\Psi_k, \quad (21)$$

а w_k равно

$$w_k = (H - \tilde{\lambda}I)^{-1}\Psi_k. \quad (22)$$

Подставляя выражения (21) и (22) в (20), получаем

$$\Delta\Psi_k = -\Psi_k + (\lambda_{k+1} - \tilde{\lambda})(H - \tilde{\lambda}I)^{-1}\Psi_k.$$

При $\tau_k = 1$ имеем

$$\begin{aligned}\Psi_{k+1} &= (\lambda_{k+1} - \tilde{\lambda})(H - \lambda_k I)^{-1} \Psi_k, \\ \lambda_{k+1} &= \tilde{\lambda} + \frac{1 + (\Psi_k, \Psi_k)}{2(\Psi_k, (H - \tilde{\lambda}I)^{-1} \Psi_k)},\end{aligned}\tag{23}$$

что является схемой обратных итераций с фиксированным сдвигом. Эту схему целесообразно использовать в сочетании с ортогонализацией найденного приближения Ψ_{k+1} ко всем уже найденным собственным элементам $\{\Psi_m^*\}$, где m - номер собственного элемента, при условии, что этот набор представляет ортогональную систему с некоторым весом.

3 Формулировка задачи рассеяния как задачи на собственные значения на основе вариационного функционала Швингера и устойчивая итерационная схема

1. Рассмотрим задачу рассеяния для радиального уравнения Шредингера на полуоси $0 < r < \infty$ с короткодействующим потенциалом $V(r)$ при заданном импульсе k :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) \Psi(r) = 2V(r)\Psi(r),\tag{24}$$

которая заключается в нахождении регулярных решений $\Psi(r)$ с асимптотическими условиями:

$$\Psi(r) \approx r^l, \quad r \rightarrow 0,\tag{25}$$

$$\Psi(r) \approx A \frac{\sin(kr - \pi l/2 + \delta_l)}{r}, \quad r \rightarrow \infty,\tag{26}$$

и вычисления фазы δ_l . Здесь l - орбитальный момент. Положив $A = (k \cos \delta_l)^{-1}$ и рассматривая регулярные решения $\Psi(r)$ с асимптотикой:

$$\Psi(r) \approx \frac{\sin(kr - \pi l/2) + \cos(kr - \pi l/2) \operatorname{tg} \delta_l}{kr}, \quad r \rightarrow \infty,\tag{27}$$

заметим, что они представимы в виде [1, 2]

$$\Psi(r) = j_l(kr) - 2k \int_0^\infty j_l(kr_<) h_l^+(kr_>) V(r') \Psi(r') r'^2 dr',\tag{28}$$

где

$$h_l^+(r) = -y_l(r) + ij_l(r), \quad r_< = \min\{r, r'\}, \quad r_> = \max\{r, r'\}, \quad (29)$$

$j_l(r)$ - сферические функции Бесселя, $y_l(r)$ - функция Неймана.

Асимптотика решения $\Psi(r)$ при $r \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\Psi(r) \rightarrow j_l(kr) - 2k \int_0^\infty j_l(kr')V(r')\Psi(r')r'^2 dr' h_l^+(kr). \quad (30)$$

Обозначим

$$\nu_l^{-1}(\delta_l) = 2 \int_0^\infty j_l(kr')V(r')\Psi(r')r'^2 dr'. \quad (31)$$

С помощью этого выражения можно получить следующее тождество:

$$\Psi(r) + 2k \int_0^\infty j_l(kr_<)h_l^+(kr_>)V(r')\Psi(r')r'^2 dr' = j_l(kr)\nu_l(\delta_l)2 \int_0^\infty j_l(kr')V(r')\Psi(r')r'^2 dr' \quad (32)$$

или

$$\Psi(r) - 2k \int_0^\infty j_l(kr_<)y_l(kr_>)V(r')\Psi(r')r'^2 dr' = \lambda(\delta_l)2j_l(kr) \int_0^\infty j_l(kr')V(r')\Psi(r')r'^2 dr'. \quad (33)$$

Здесь

$$\lambda(\delta_l) \equiv -k \cot \delta_l = \nu_l(\delta_l) - ik \quad (34)$$

определяет значение искомого фазового сдвига $\delta_l = \delta_l(k)$ при фиксированном значении импульса k .

Введем интегральные операторы

$$\begin{aligned} A(r, r')\Psi(r) &= \Psi(r) - 2k \int_0^\infty j_l(kr_<)y_l(kr_>)V(r')\Psi(r')r'^2 dr', \\ B(r, r')\Psi(r) &= 2j_l(kr) \int_0^\infty j_l(kr')V(r')\Psi(r')r'^2 dr'. \end{aligned} \quad (35)$$

Тогда (33) примет вид

$$(A(r, r') - \lambda B(r, r'))\Psi(r') = 0, \quad (36)$$

где $\lambda = -k \cot \delta_l$ спектральный параметр. Дополним уравнение (36) условием ортогональности

$$F(\lambda, \Psi) = (\Psi(r)V(r)r^2, (A(r, r') - \lambda B(r, r'))\Psi(r')) = 0. \quad (37)$$

Из условия ортогональности следует, что

$$\lambda = \frac{(\Psi(r)V(r)r^2, A(r, r')\Psi(r'))}{(\Psi(r)V(r)r^2, B(r, r')\Psi(r'))}. \quad (38)$$

Эта формула аналогична рэлеевскому частному в задаче дискретного спектра оператора энергии, однако, имеет лишь свойство стационарности, а не экстремальности. В отличие от стандартной постановки задачи рассеяния уравнения (36), (37) позволяют сформулировать спектральную задачу относительно пары $z = \{\lambda, \Psi\}$, причем собственный элемент Ψ определен с точностью до константы:

$$\varphi(z) = \left\{ \begin{array}{l} (A - \lambda B)\Psi \\ (\Psi V r^2, (A - \lambda B)\Psi) \end{array} \right\} = 0. \quad (39)$$

Эволюционное уравнение (4) для этой задачи приобретает форму

$$(A - \lambda B) \frac{d\Psi}{dt} - B\Psi \frac{d\lambda}{dt} = -(A - \lambda B)\Psi. \quad (40)$$

Если оператор $V(A - \lambda B)\Psi$ самосопряженный и выполняется условие

$$(\Psi r^2, V(A - \lambda B)\Psi) = (\Psi V r^2, (A - \lambda B)\Psi),$$

то имеет место соотношение

$$\left(\Psi r^2, V(A - \lambda B) \frac{d\Psi}{dt} \right) + \left(\Psi r^2, V \left((A - \lambda B) \frac{d\Psi}{dt} - B\Psi \frac{d\lambda}{dt} \right) \right) = -(\Psi r^2, V(A - \lambda B)\Psi). \quad (41)$$

Используя (40) из (41), имеем

$$\left(\Psi r^2, V(A - \lambda B) \frac{d\Psi}{dt} \right) = 0. \quad (42)$$

Тогда, используя представление

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} \quad (43)$$

из (40), имеем

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\Psi, \\ (A - \lambda B) \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} = B\Psi. \end{array} \right. \quad (44)$$

Подстановка (43), (44) в соотношение (42) дает

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{(\Psi V r^2, (A - \lambda B)\Psi)}{(\Psi V r^2, B\Psi)} \quad (45)$$

или в интегральном виде

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{\int_0^\infty \Psi_l^2(r) V(r) r^2 dr - 2k \int_0^\infty \int_0^\infty \Psi(r) V(r) j_l(kr) y_l(kr) V(r') \Psi(r') r'^2 r^2 dr' dr}{2 \left(\int_0^\infty j_l(kr') V(r') \Psi(r') r'^2 dr' \right)^2} - \lambda. \quad (46)$$

Функционал правой части (46) совпадает с вариационным функционалом Швингера (1).

При дискретизации выражение (33) принимает вид

$$\tilde{\Psi}(r_i) - 2k \sum_{j=1}^N G_{ij} V(r_j) r_j^2 \xi_j \tilde{\Psi}(r_j) = \bar{\lambda}(\delta_i) 2j_l(kr_i) \sum_{j=1}^N j_l(kr_j) V(r_j) r_j^2 \xi_j \tilde{\Psi}(r_j), \quad i = \overline{1, n}, \quad (47)$$

где ξ_j - коэффициенты квадратурной формулы и r_j - ее узлы,

$$G_{ij} = j_l(k \min\{r_i, r_j\}) y_l(k \max\{r_i, r_j\}).$$

Далее можно записать

$$(\bar{A} - \bar{\lambda} \bar{B}) \tilde{\Psi}(r) = 0, \quad (48)$$

где

$$\{\bar{A}\}_{ij} = \delta_{ij} - 2k G_{ij} V(r_j) r_j^2 \xi_j, \quad (49)$$

$$\{\bar{B}\}_{ij} = 2j_l(kr_i) j_l(kr_j) V(r_j) r_j^2 \xi_j. \quad (50)$$

В этом случае получаем следующий итерационный процесс:

$$\begin{cases} v_n = -\Psi_n, \\ (\bar{A} - \bar{\lambda}_n \bar{B}) u_n = \bar{B} \Psi_n, \\ \mu_n = \frac{(\Psi_n V r^2, \bar{A} \Psi_n)}{(\Psi_n V r^2, \bar{B} \Psi_n)} - \lambda_n, \\ \Psi_{n+1} = \Psi_n + \tau_n (v_n + u_n \mu_n), \\ \bar{\lambda}_{n+1} = \bar{\lambda}_n + \tau_n \mu_n, \end{cases} \quad (51)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$; $\{\lambda_0, \Psi_0\}$ заданы, и для выбора итерационного шага τ_n используем способ, основанный на минимизации невязки [8]. При численном решении, на самом деле, плохо обусловленной ($0.41 \cdot 10^7 \leq cond \leq 0.30 \cdot 10^{10}$) системы (51) использованы программы нового пакета JINRLINPACK [12].

2. Отдельно рассмотрим задачу рассеяния для одномерного уравнения Шредингера на всей оси $(-\infty, \infty)$ с короткодействующим потенциалом $V(x)$ при заданном импульсе k :

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \Psi(x) = 2V(x) \Psi(x), \quad (52)$$

которая заключается в нахождении регулярных решений $\Psi(x)$ с асимптотическими условиями:

$$\Psi(x) \approx 0, \quad x \rightarrow -\infty, \quad (53)$$

$$\Psi(x) \approx A \sin(kx + \delta), \quad x \rightarrow \infty, \quad (54)$$

и вычисления фазы δ . В этом случае сложно написать решение в интегральном виде с помощью первого граничного условия (53). Рассмотрим следующее граничное условие вместо (53):

$$\Psi(x) \rightarrow 0, \quad x \rightarrow a, \quad a < 0. \quad (55)$$

Заметим, что решения представимо в виде

$$\Psi(x) = \sin(k(x-a)) - \frac{2}{k \cos(ka)} \int_a^\infty \sin(k(x_< - a)) \cos(kx_>) V(x') \Psi(x') dx'. \quad (56)$$

Здесь $x_< = \min\{x, x'\}$, $x_> = \max\{x, x'\}$. Асимптотики решения $\Psi(x)$ имеют вид

$$\Psi(x) \rightarrow 0, \quad x \rightarrow a; \quad (57)$$

$$\Psi(x) \rightarrow \sin(k(x-a)) - \frac{2}{k \cos(ka)} \cos(kx) \int_a^\infty \sin(k(x' - a)) V(x') \Psi(x') dx', \quad x \rightarrow \infty. \quad (58)$$

Обозначим

$$\nu(\delta) = -\frac{2}{k \cos(ka)} \int_a^\infty \sin(k(x' - a)) V(x') \Psi(x') dx'. \quad (59)$$

Тогда можно написать следующее тождество:

$$\begin{aligned} \Psi(x) + \frac{2}{k \cos(ka)} \int_a^\infty \sin(k(x_< - a)) \cos(kx_>) V(x') \Psi(x') dx' = \\ = \lambda(\delta) \frac{2}{k \cos(ka)} \sin(k(x-a)) \int_a^\infty \sin(k(x' - a)) V(x') \Psi(x') dx'. \end{aligned} \quad (60)$$

Здесь

$$\lambda(\delta) = -1/\nu(\delta) = \frac{-1}{\cos(ka) \tan(\delta) + \sin(ka)} \quad (61)$$

определяет значение искомого фазового сдвига $\delta = \delta(k)$. Отсюда $A = \frac{\cos(ka)}{\cos(\delta)}$.

Далее мы можем использовать предложенный выше метод.

4 Численные примеры и обсуждение

Для анализа точности вычислительной схемы удобно рассматривать примеры с известными аналитическими решениями.

4.1 Потенциал Морзе

Рассмотрим уравнение (52) с потенциалом Морзе [10]:

$$V(x) = MD \left(e^{-2\alpha(x-x_\alpha)} - 2e^{-\alpha(x-x_\alpha)} \right). \quad (62)$$

Аналитическое решение $\Psi(x)$, соответствующее непрерывному спектру $k > 0$, имеет вид [11]

$$\Psi(x) = \frac{e^{-0.5\xi}}{2i} \left(e^{i\omega\xi - is} F(-d + 0.5 - is, 1 - 2is, \xi) - e^{-i\omega\xi + is} F(-d + 0.5 + is, 1 + 2is, \xi) \right), \quad (63)$$

где F - вырожденная гипергеометрическая функция,

$$\xi = 2de^{-\alpha(x-x_\alpha)}, \quad d = \frac{\sqrt{2MD}}{\alpha}, \quad s = \frac{k}{\alpha}, \quad \omega = \arg\Gamma(1+2is) + \arg\Gamma(-d+0.5-is) \quad (64)$$

и Γ - гамма-функция.

Особенностью рассматриваемой задачи является то, что независимая переменная x изменяется на всей оси $-\infty < x < \infty$, причем

$$V(x) \rightarrow +\infty, \quad x \rightarrow -\infty, \quad V(x) \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \infty, \quad (65)$$

а функция $\Psi(x)$ имеет асимптотики вида

$$\Psi(x) \rightarrow 0, \quad x \rightarrow -\infty, \quad \Psi(x) \rightarrow \sin(kx + \delta), \quad x \rightarrow \infty. \quad (66)$$

Здесь δ - искомая фаза рассеяния - имеет вид

$$\delta = -kx_\alpha - s \ln(2d) + \omega. \quad (67)$$

Поэтому ниже представлены результаты двух расчетов с граничными условиями (25) и (53), позволяющие оценить вклад потенциала $V(x)$ на отрезке $x \in [-a, 0]$ в решение.

В численном примере значения параметров

$$M = 8.876, \quad D = 0.104, \quad \alpha = 0.67, \quad x_\alpha = 2.09 \quad (68)$$

соответствуют значениям параметров в работе [5]. Этот потенциал изображен на рис. 1. Точность численных результатов зависит от параметров разностной сетки $\Omega_h = \{x_{\min} = x_0; x_j = x_0 + jh; j = \overline{1, N}; x_n = x_{\max}\}$. В табл. 1 и

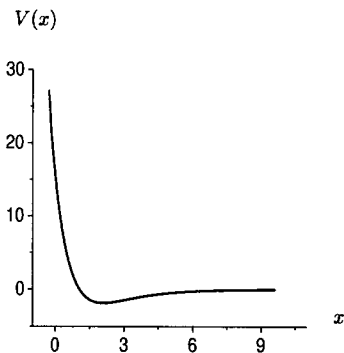


Рис. 1. Вид потенциала Морзе $V(x)$ с параметрами $M=8.876$, $D=0.104$, $\alpha=0.67$, $x_\alpha=2.09$

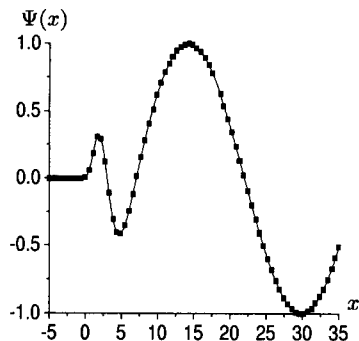


Рис. 2. Вид функции $\Psi(x)$ при $k=0.20$. сплошная линия - расчет по формуле (63), пунктирная линия - численный результат

Таблица 1: Фазы рассеяния $-\delta$; $x \in (0, 35)$

k	$h = 0.1$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$	$-\delta[5]$
0.20	1.2599077	1.2618001	1.2622719	1.2624285	1.262287
0.14	0.9000893	0.9015871	0.9019605	0.9020844	0.9019789
0.10	0.6495453	0.6506877	0.6509724	0.6510669	0.6509868
0.08	0.5217001	0.5226381	0.5228720	0.5229496	0.5228852
$1.E-4$	$6.568483E-4$	$6.580794E-4$	$6.583863E-4$	$6.584882E-4$	$6.58407E-4$

Таблица 2: Фазы рассеяния $-\delta$; $x \in (-5, 35)$

k	$h = 0.1$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$	$-\delta_{AH}$
0.20	1.2557224	1.2576763	1.2581631	1.2583246	1.2583252
0.14	0.8968501	0.8983957	0.8987808	0.8989086	0.8989090
0.10	0.6471009	0.6482795	0.6485731	0.6486705	0.6486709
0.08	0.5197008	0.5206686	0.5209097	0.5209897	0.5209899
$1.E-4$	$6.542430E-4$	$6.555129E-4$	$6.558293E-4$	$6.559343E-4$	$6.559345E-4$

2 представлены численные результаты величин $-\delta$, для вычисления которых использовались формулы (28) и (56) соответственно. Вклад интервала $x \in [-5, 0]$ в δ составляет величину порядка 10^{-2} .

Сходимость сеточных решений δ_h соответствует теоретической $O(h^2)$, так как величина

$$\sigma = (\delta_h - \delta_{h/2}) / (\delta_{h/2} - \delta_{h/4}) \approx 4. \quad (69)$$

В табл. 2 экстраполированные значения величины $-\delta$ сравниваются с аналитическими значениями $-\delta_{АН}$, вычисленными по формуле (67). Анализ результатов показывает, что экстраполяция при $h \rightarrow 0$ обеспечивает точность вычисления фазы $\approx 10^{-5} \div 10^{-6}$. На рис. 2 приведены точное и численное решения $\Psi(x)$, при $k = 0.2$. Они находятся в хорошем согласии.

4.2 Потенциал сферической ямы

Рассмотрим уравнение (24) при $l = 0$ с потенциалом сферической ямы

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 < 0, & r < r_0, \\ 0 & r > r_0. \end{cases} \quad (70)$$

Аналитическое решение $\Psi(r)$ при $k \rightarrow 0$ на интервале $r \in (0, r_0)$ имеет вид

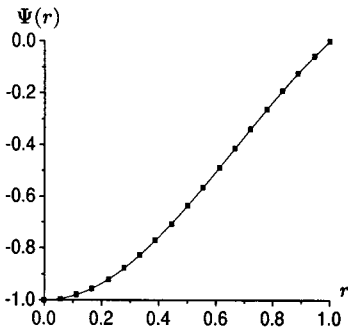
$$\Psi_0(r) \rightarrow \frac{1}{\cos(\sqrt{2V_0}r_0)} \frac{\sin(\sqrt{2V_0}r)}{\sqrt{2V_0}r}. \quad (71)$$

Величина a_0 - длина рассеяния - определяется через δ_0 по формуле

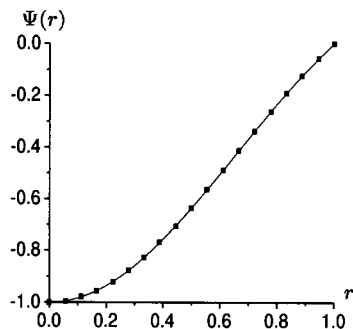
$$a_0 = -\lim_{k \rightarrow 0} (k \cot(\delta_0)) = -\left(\left(\frac{\tan(\sqrt{2V_0}r_0)}{\sqrt{2V_0}r_0} - 1 \right) r_0 \right)^{-1}. \quad (72)$$

В этом примере нам достаточно вычислить a_0 на интервале $(0 \leq r \leq r_0)$. Обозначим $b_0 = \sqrt{2V_0}r_0$ и в расчетах используем $r_0 = 1$. В табл. 3 и 4 представлены численные результаты величины a_0 , полученной при использовании формулы (28). Сходимость сеточных решений δ_h соответствует теоретической $O(h^2)$, так как величина

$$\sigma = (\delta_h - \delta_{h/2}) / (\delta_{h/2} - \delta_{h/4}) \approx 4. \quad (73)$$



а



б

Рис. 3. Вид функции $\Psi(r)$ при $b_0 = \pi$ и а) $k=1.E-2$, б) $k=1.E-5$. Сплошная линия - расчет по формуле (71), пунктирная линия - численный результат

Таблица 3: Численные результаты при $a_0, r \in (0, 1)$; $k=1.E-5$

b_0	$h = 0.02$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$	a_0^{AH}
0.2π	-6.3966702	-6.3967619	-6.3967848	-6.3967924	-6.3967925
0.4π	-0.6899402	-0.6900324	-0.6900554	-0.6900630	-0.6900631
0.6π	0.3799557	0.3798608	0.3798371	0.3798292	0.3798292
0.8π	0.7758865	0.7757809	0.7757545	0.7757457	0.7757457
1.0π	1.0002012	1.0000502	1.0000125	1.0000000	1.0000000

Таблица 4: Численные результаты при $a_0, r \in (0, 1)$; $k=1.E-2$

b_0	$h = 0.02$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$	a_0^{AH}
0.2π	-6.3968484	-6.3969401	-6.3969630	-6.3969706	-6.3967925
0.4π	-0.6900041	-0.6900963	-0.6901193	-0.6901269	-0.6900631
0.6π	0.3799134	0.3798186	0.3797949	0.3797870	0.3798292
0.8π	0.7758527	0.7757471	0.7757207	0.7757119	0.7757457
1.0π	1.0001730	1.0000220	0.9999843	0.9999717	1.0000000

В табл. 3 и 4. экстраполированные значения величины a_0 сравниваются с аналитическими значениями a_0^{AN} , вычисленными по формуле (72). Анализ результатов показывает, что экстраполяция при $h \rightarrow 0$ обеспечивает точность вычисления $a_0 \approx 10^{-6} \div 10^{-7}$ при $k = 1.E - 5$ и $\approx 10^{-3}$ при $k = 1.E - 2$. На рис. 3 дано сравнение точного и численного решений $\Psi(x)$ при $b_0 = \pi$. Они находятся в хорошем согласии.

5 Заключение

В данной работе для решения задачи рассеяния с заданной точностью построена устойчивая итерационная схема на основе НАМН. Задача рассеяния формулируется как задача на собственные значения относительно пары неизвестных: фазового сдвига и волновой функции, с помощью вариационного функционала Швингера. Эффективность предложенной итерационной схемы продемонстрирована на точно решаемых примерах упругого рассеяния с потенциалом Морзе и со сферической ямой. Предложенный подход допускает прямое обобщение на многомерные и многоканальные задачи рассеяния при подходящем выборе аппроксимации решений, например с помощью сепарабельных потенциалов, аппроксимации Бейтмена, а также в виде пробных функций с заданными вариационными параметрами в области действия потенциала. Вне этой области задаются асимптотические состояния с неизвестной амплитудой рассеяния, параметры которой находятся с помощью предложенной итерационной схемы.

Литература

- [1] Мессиа А. Квантовая механика. М.: Наука, 1978. Т. 1.
- [2] Мессиа А. Квантовая механика. М.: Наука, 1979. Т. 2.
- [3] Зубарев А. Л. //ЭЧАЯ, 1978. Т. 9. Вып. 2. С. 453

- [4] Зубарев А. Л. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоиздат, 1981.
- [5] Веницкий С. И., Пузынин И. В., Смирнов Ю. С. // Ядерная физика, 1990. Т. 52. Вып. 4(10). С. 1176.
- [6] Жанлав Т., Пузынин И. В. // ЖВМиМФ, 1992. Т. 32. N. 1. С. 3.
- [7] Жанлав Т., Пузынин И. В. // ЖВМиМФ, 1992. Т. 32. N. 6. С. 846.
- [8] Ермаков В. В., Калиткин Н. Н. // ЖВМиМФ, Т. 21. С. 491, 1981.
- [9] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1.
- [10] Alhasid Y. et al. // Ann. Phys. 1983. V. 148. P. 346.
- [11] Емельяненко Г. А. и др. Препринт ОИЯИ Р11-2000-287, Дубна. 2000.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 апреля 2001 года.

Чулуунбаатар О., Пузынин И.В., Виницкий С.И.
Ньютоновская итерационная схема с вариационным
функционалом Швингера для решения задачи рассеяния

P11-2001-61

Для решения задачи рассеяния с заданной точностью построена устойчивая итерационная схема на основе непрерывного аналога метода Ньютона. Задача рассеяния формулируется как задача на собственные значения относительно пары неизвестных: фазового сдвига и волновой функции, с помощью вариационного функционала Швингера. Эффективность предложенной итерационной схемы продемонстрирована на точно решаемых примерах задачи упругого рассеяния с потенциалом Морзе и со сферической ямой.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий и Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова ОИЯИ при поддержке РФФИ, гранты № 00-01-00617, № 00-02-16337, № 00-02-81023 Bel 2000 а.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2001

Перевод авторов

Chuluunbaatar O., Puzynin I.V., Vinitzky S.I.
A Newtonian Iteration Scheme with the Schwinger Variational
Functional for Solving a Scattering Problem

P11-2001-61

A Newtonian iteration scheme has been constructed for solving a scattering problem with using the Schwinger variational functional. The scattering problem is formulated as an eigenvalue problem with respect to a pair of the unknowns: a phase shift and a wavefunction. An efficiency of the proposed iteration scheme and its accuracy are demonstrated on exact solvable examples of elastic scattering problem with Morze and spherical potentials.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies and at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, and supported by the RFBR, Grants No. 00-01-00617, No. 00-02-16337, No. 00-02-81023 Bel 2000 а.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2001

Редактор Е.Ю.Шаталова. Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 21.05.2001
Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,71
Тираж 320. Заказ 52660. Цена 2 р. 4 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области