УДК 519.6; 539.1.

С.Б. ДУБОВИЧЕНКО

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ ЯДЕРНОЙ АСТРОФИЗИКИ

II. Альтернативный метод решения обобщенной матричной задачи на собственные значения

Рассмотрены некоторые не стандартные методы численного решения уравнения или системы уравнений Шредингера с тензорными силами в задачах ядерной физики низких энергий и ядерной астрофизики, применимые для анализа связанных состояний атомных ядер в потенциальной кластерной модели.

Продолжая описание нестандартных методов решения уравнения Шредингера в различных задачах ядерной физики низких энергий [1] и ядерной астрофизики [2] рассмотрим альтернативный метод решения этого уравнения при нахождении собственных значений в матричной задаче.

Рассмотрим уравнение Шредингера с центральными ядерными силами для волновой функции системы двух частиц [1]

$$\chi''(r) + [\, k^2 - V_c(r) - V_{cul}(r) - L(L+1)/r^2 \,]\chi(r) = 0,$$

где $\chi(r)$ – скалярная волновая функция для центральных потенциалов, а остальные обозначения даны в (1).

Решения этого уравнения для связанных состояний, т.е. при $k^2 < 0$, на бесконечности и в нуле подчиняются условиям

$$\chi_L(0) = \chi_L(\infty) = 0 .$$

Однако это уравнение, на расстояниях больших, чем радиус действия ядерных сил R_0, т.е. когда $V_c(r>R_0) = 0$, имеет аналитическое решение, называемое его асимптотикой. Поэтому условие на бесконечности можно заменить на требование неразрывности логарифмической производной на границе области ядерного взаимодействия, т.е. при $r = R_0$ [1]

$$\frac{\chi'_L(R_0)}{\chi_L(R_0)} = \frac{W'_{\eta L}(2kR_0)}{W_{\eta L}(2kR_0)} = f(\eta, L, Z) ,$$

где $W_{hL}(Z)$ - функция Уиттекера для связанных состояний, которая является решением приведенного уравнения при $k^2<0$ без ядерного потенциала V_c; $Z = 2kR$; $\eta = \frac{\mu Z_1 Z_2}{k\hbar^2}$ - кулоновский параметр.

В том случае, когда в ядерном потенциале не учитывается кулоновское взаимодействие, асимптотика ВФ может быть представлена в наиболее простом виде

$$\chi(r>R_0) = e^{-kr} , \quad \chi'(r>R_0) = -\, ke^{-kr},$$

где $k = \sqrt{|k^2|}$ и логарифмическая производная будет просто равна -k.

Волновая функция связанного состояния любых частиц должна удовлетворять и условию

$$\int_0^\infty \chi^2(r)dr = 1 ,$$

которое определяет ее нормировку.

Волновые функции в уравнении Шредингера для основных и резонансных состояний представимы в виде разложения по не ортогональному гауссовому базису вида [3]

$$R_L(r) = N_0 r^L \sum_i C_i \exp(-\alpha_i r^2) = \frac{\chi_L(r)}{r} ,$$

где α_i и C_i - вариационные параметры и коэффициенты разложения, которые находятся вариационным методом для связанных состояний или аппроксимацией гауссойдами численных волновых функций резонансных уровней; N_0 – нормировка функции.

Сами вариационные параметры α_i могут быть получены, например, из квадратурной сетки вида [3]

$$a_i = a_0 \, tg^2 \{ p\,(2i - 1) / 4N \} ,$$

где i – меняется от 1 до N, которое обычно принимает значения 30-50.

Для определения спектра собственных значений энергии и волновых функций в стандартном вариационном методе при разложении ВФ по ортогональному базису решается обычная матричная задача на собственные значения [4]

$$\sum_i (H_{ij} - EI_{ij})C_i = 0 ,$$

где H - симметричная матрица гамильтониана; I - единичная матрица; E - собственные значения и C - собственные вектора задачи.

В данном случае, при не ортогональном базисе гауссойд, мы приходим к обобщенной матричной задаче на собственные значения типа [3]

$$\sum_i (H_{ij} - EL_{ij})C_i = 0,$$

где L - симметричная матрица интегралов перекрывания, которая не сводится к единичной матрице I.

Рассмотрим эту обобщенную матричную задачу на собственные значения и собственные функции для матрицы гамильтониана уравнения Шредингера в задачах ядерной физики

$$(H-EL)C=0 \qquad (1)$$

Представляя, в таком случае, матрицу L в виде произведения нижней N и верхней V треугольных матриц [5]

$$L = NV$$

находим

$$HC = ENVC, \qquad H'C' = EIC',$$

где

$$H' = N^{-1}HV^{-1}, \qquad C' = VC$$

или

$$C = V^{-1}C',$$

I - единичная матрица и N^{-1} обозначает обратную матрицу.

Тем самым, мы получаем стандартную матричную систему для задачи поиска собственных функций и значений [4] вида

$$(H' - EI)C' = 0,$$

которую можно решать известными методами в общем матричном виде. Процедура перехода, от обобщенной к стандартной задаче, называется ортогонализацией по Шмидту [4].

Вначале находим матрицы N и V, выполняя триангуляризацию симметричной матрицы L [5], например, методом Халецкого [4]. Затем находим обратные матрицы N^{-1} и V^{-1} и вычисляем элементы матрицы $H' = N^{-1}H\,V^{-1}$. Находим далее полную диагональную по E матрицу (H' – EI) и вычисляет ее детерминант det(H' – EI) при некоторой энергии E. Та энергия, которая приводит к нулю детерминанта, является собственной энергией задачи, а соответствующие ей вектора C' - собственные вектора матричной системы. Зная C', не трудно найти и собственные вектора исходной задачи C, поскольку матрица V^{-1} уже известна.

В двухтельной задаче ядерной физики легких атомных ядер с одним вариационным параметром α_i такой метод оказывается сравнительно устойчив. Но в трехтельной ядерной системе, при некоторых значениях двух вариационных параметров α_i и β_i, метод нахождения обратных матриц иногда приводит к существенной неустойчивости и переполнению при работе компьютерной программы [6], что представляет не малую проблему для решения задач такого типа.

Однако можно предложить альтернативный метод решения обобщенной задачи на собственные значения. Матричное уравнение (1) это однородная система линейных уравнений и она имеет не тривиальные решения, только если ее детерминант

$$\det(H - EL) = 0.$$

Значении E, которые приводят к нулевому детерминанту, будут собственными значениями. Решения *C* такой системы при найденных собственных значениях являются собственными векторами исходной матрицы.

Для численных методов, реализуемых на компьютере, не обязательно разлагать матрицу L на треугольные и находить новую матрицу H' и новые вектора C', определяя обратные матрицы, как это было описано выше. Можно сразу разлагать на треугольные недиагональную, симметричную матрицу (H - EL) и численными методами искать энергии, которые приводят к нулю ее детерминанта.

Тем самым, сама матрица (H - EL) разлагается на две треугольные

$$A = H - EL = NV$$

и вычисляется ее детерминант (поскольку det(V)=1)

$$\det(A) =$$
$$= \det(N)\det(V)=\det(N)=n_{11}n_{22}\ldots n_{ii}\ldots n_{mm}$$

по нулю, которого ищутся собственные значения энергии E системы. Здесь m – размерность матриц.

Здесь мы имеем довольно простую задачу поиска нуля некоторого функционала одной переменной

$$F(E) = 0,$$

решение, которой не представляет большой сложности. Обычными численными методами ищется ноль детерминанта нижней треугольной матрицы, который равен произведению ее диагональных элементов, зависящих от E.

Таким образом, мы избавляемся от необходимости искать две обратные матрицы и выполнять несколько матричных умножений, чтобы вначале получить новую матрицу H', а затем, конечную матрицу собственных векторов C.

Для оценки точности решения т.е. точности разложения исходной матрицы на две треугольные, можно использовать метод невязок [7]. После разложения матрицы A на треугольные, вычисляется матрица невязок, как разность исходной матрицы A и матрицы

$$S = NV,$$

где V и N найденные, таким образом, численные треугольные матрицы. Теперь берется разность по всем элементам с исходной матрицей A

$$AN = S - A.$$

Матрица AN невязок дает отклонение приближенной величины S, найденной численными методами, от истинного значения каждого элемента исходной матрицы A.

Такой метод позволил получить хорошую устойчивость алгоритма решения этой задачи, не приводящего к переполнению при работе компьютерных программ, поскольку теперь не требует определения обратных к V и N матрицы [8].

Для контроля работы метода мы рассматривали модельную физическую трехтельную задачу, в которой функция в уравнении Шредингера разлагается по не ортогональному гауссову базису

$$R_{l,\lambda}(r,R) = N_0 r^{\lambda} R^{l} \sum_i C_i \exp(-\alpha_i r^2 - \beta_i R^2).$$

При каждом значении вариационных параметров α_i и β_i находим некоторую энергию системы (которая дает ноль детерминанта), а затем, варьируя эти параметры, проводим поиск минимума этой энергии. Затем увеличивается размерность базиса N и повторяем все вычисления, до тех пор пока величина собственного значения, т.е. энергии связи E_N, на очередном шаге N не станет отличаться от предыдущего значения E_{N-1} на величину ε, которая обычно задается на уровне 0.5-0.1%. В соответствии с теоремой Хилерааса – Ундгейма [9] эта минимальная энергия и будет верхним пределом реальной энергией связи в такой системе.

В наших работах [10] приведен полный текст компьютерной программы на языке Turbo Basic, которая предназначена для расчета энергии трехтельной системы на основе описанных выше методов. Для проверки метода расчета и компьютерной программы рассматривалась модельная задача для трех частиц, взаимодействующих в потенциале Афнана - Танга [11] с усреднением триплетных и синглетных состояний.

Для энергии такой системы в [11] получено -7.74 МэВ, а в работах [12], где использовался не ортогональный вариационный метод с изменением параметров волновой функции на основе тангенциальной сетки, найдено -7.76 МэВ. Нами, на основе изложенных методов, при независимом варьировании всех параметров и размерности базиса N = 5, получено -7.83 МэВ, т.е. энергия изменилась примерно на 1% относительно результатов [11,12].

Далее рассматривалась реальная трехтельная задача для атомного ядра ^{7}Li в ^{4}He^{2}Hn канале с межкластерными потенциалами, согласованными с фазами ядерного рассеяния и чистыми по схемам Юнга для связанных состояний. Результаты расчета вариационной энергии ядра ^{7}Li, полученные изложенным методом, с использованием потенциалов из работ [10] и в зависимости от размерности вариационного базиса N даны в табл.1

Таблица 1. **Результаты вычисления трехтельной энергии**

N	3	5	7	9	10	11
E(^{7}Li), МэВ	-7.68	-8.63	-8.66	-8.678	-8.706	-8.713

Экспериментальная трехтельная энергия ядра ^{7}Li в этом канале составляет 8.725 МэВ [13]. Из таблицы видно, что при размерности N=9-11, энергия системы практически сходится, и дальнейшее увеличение базиса может привести, по - видимому, к ее изменению на величину порядка 0.01 - 0.02 МэВ.

Во всех выполненных нами расчетах не наблюдалось какой-либо неустойчивости численных решений или переполнения при работе компьютерных программ, как это неоднократно было, при использовании стандартного метода решения обобщенной матричной задачи на собственные значения и функции.

Таким образом, рассмотренный и, как нам кажется, вполне очевидный альтернативный метод решения обобщенной матричной задачи на

собственные значения и функции позволяет получить вполне устойчивые и достаточно точные результаты при решении определенного круга задач трехтельной ядерной физики низких энергий и ядерной астрофизики.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Хюльтен Л., Сугавара М.* Проблема взаимодействия двух нуклонов. Строение атомного ядра. М.: ИЛ, 1959, С.9-98.

2. *Хойл Ф., Бербидж Е.М., Бербидж Дж.Р.* Ядерная астрофизика. М.: Мир, 1986, 519с.

3. *Kukulin V.I., Krasnopol'sky V.M., Voronchev V.T., Sazonov P.B.* Detailed study of the cluster structure of light nuclei in a three - body model. I. Ground state of ^{6}Li. Nucl. Phys., 1984, V.A417, P.128-156.

4. *Скорняков Л.А.* Справочная математическая библиотека. Общая алгебра. М.: Наука, 1990, 591с.

5. *Попов Б.А., Теслер Г.С.* Вычисление функций на ЭВМ. Киев, Наукова думка, 1984, 598с.

6. *Дубовиченко С.Б., Чечин Л.С.* Методы решения обобщенной задачи на собственные значения. Вестник АГУ, физ.-мат. сер., Алматы, 2003, №.1(7), С.110-115.

7. *Михлин С.Г., Смолицкий Х.Л.* Приближенные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. М.: Наука, 1965, 383с.

8. *Дубовиченко С.Б. Чечин Л.М.* Современные методы программирования актуальных физических задач. Труды конф. Современные проблемы и задачи информатизации в Казахстане., КазНТУ, Алматы, Казахстан, 6 - 10 октября 2004, С.358-390.

9. *Мотт Н., Месси Г.* Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969, 756с.

10. *Дубовиченко С.Б.* Вариационные методы в трехтельной модели. Вестник Каз.ГАСА, 2003, №9/10, С.227-232; Дубовиченко С.Б. Компьютерная программа для расчета характеристик ядра ^{7}Li. Вестник Каз.НТУ, Алматы, 2004, №5, С.174-182.

11. *Afnan I.R., Tang Y.C.* Investigation of nuclear three and four body system with soft core NN potentials. Phys. Rev., 1968, V.175, P.1337-1351.

12. *Krasnopolsky V.M., Kukulin V.I.* A new many particle variational method Czech. J. Phys., 1977, V.B27, P.290-304; Krasnopolsky V.M., Kukulin V.I. A stochastic variational method for few body systems. J. Phys., 1977, V.G3, P.795-811.

13. *Ajzenberg-Selove F.* Energy levels of light nuclei: A=5-10. Nucl. Phys., 1979, V.A320, P.1.

Резюме

Потенциалдық кластерлік модель атомдық ядролармен байланысты күйін талдау үшін қолданылған Шредингер теңдеуі немесе төмен энергиялардың ядролық физикасы мен ядролық астрофизиканың есептеріндегі тензорлық күштермен оның теңдеулері жүйесінің сандық шешім шығаруының кейбір стандартсыз әдістері қарастырылды.

Summary

Some non-standard methods of numerical solution of equation or system of Schredinger's equations with tensor forces in nuclear physics at low energies and nuclear astrophysics problems are considered. These methods can be applied for analysis of binding states of light atom nuclei in potential cluster model.

Астрофизический институт
им. В.Г. Фесенкова МОН РК
г. Алматы

Поступила 25.04.07.