объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-85-78

В.В.Пупышев

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИКУБИЧЕСКИХ СПЛАЙНОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1985

ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на корректность трехчастичных интегральных уравнений, впервые сформулированных Л.Д.Фадеевым [1], их решение затруднено рядом обстоятельств.

Интегральные уравнения Фадеева после разложения компонент волновой функции в ряд по бисферическим гармоникам, отвечающим различным наборам якобиевских импульсов, сводятся к бесконечной системе двумерных интегральных уравнений [2]. При численном решении таких уравнений приходится оперировать с неразреженными матрицами большой размерности. Достижение удовлетворительной точности при обращении таких матриц на ЭВМ является сложной проблемой [3]. Ядра интегральных уравнений, при энергиях, превышающих порог трехчастичного развала, содержат "движущиеся" сингулярности, что также существенно усложняет численное решение [4]. Интегральные уравнения упрощаются при сепарабельной аппроксимации двухчастичных потенциалов [4-6]. Однако использованием сепарабельных потенциалов невозможно объяснить всю совокупность экспериментальных данных. Большая часть явлений в атомной и ядерной физике происходит с участием заряженных частиц. При наличии кулоновских взаимодействий ядра интегральных уравнений Фадеева некомпактны.

В работах [7] предложен метод выделения из этих ядер сингулярных двухчастичных кулоновских вкладов и получены модифицированные уравнения с компактными ядрами. Однако такая процедура развита только для энергий, не превышающих порог развала на три частицы. Интегральные уравнения содержат в качестве известных двухчастичные t-матрицы, для нахождения которых по заданным потенциалам необходимо аккуратно решить уравнения Липпмана-Швингера, имеющие сингулярные ядра.

В работах [8,9] была предложена дифференциальная формулировка задачи трех частиц. Дифференциальные уравнения Фаддеева записываются в координатном пространстве и содержат в качестве известных двухчастичные потенциалы, которые предполагаются локальными. Существование и единственность решения этих уравнений при любых энергиях установлены как в случае нейтральных [9,10], так и заряженных частиц [11]. Разложением искомых компонент $\psi_i(\vec{x}_i, \vec{y}_i)$ $i = 1,2,3$ волновой функции $\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$ по бисферическим гармоникам $Y_{\lambda\ell}^{LM}(\hat{y}_i, \hat{x}_i)$ трехчастичные дифференциальные уравнения сводятся к системе интегродифференциальных уравнений для функций, зависящих лишь от двух переменных x_i, y_i [9]. Интегральные операторы, содержащиеся в таких уравнениях, записанных в полярных координатах $\rho = (x_i^2 + y_i^2)^{1/2}$, $\phi_i = \mathrm{arc\,tg}\, y_i/x_i$, действуют только на угловую переменную [9,12,13]. Благодаря локальности всех остальных операторов интегродифференциальные уравнения после дискретизации сводятся к системе линейных уравнений с ленточной матрицей. Таким образом, дифференциальная формулировка задачи трех частиц сочетает все сильные стороны интегральных уравнений с простотой численных методов решения и является, по-видимому, наиболее удобной для описания широкого круга явлений в атомной и ядерной физике.

Поэтому актуальной проблемой является построение эффективных методов решения интегродифференциальных уравнений Фаддеева. Метод, основанный на трехточечной конечно-разностной аппроксимации дифференциальных операторов, был развит в работе [9] и применен для решения задач на связанные состояния трех нуклонов, а также задач nd- и pd-рассеяния [14]. Несмотря на предельную простоту, использование такого алгоритма для решения задач рассеяния, где асимптотики искомых решений являются осциллирующими функциями, требует большого числа точек сетки. Кроме того, после вычисления узловых значений трехчастичной волновой функции возникает проблема ее интерполяции. В значительной мере избавиться от перечисленных недостатков позволяет аппроксимация искомых компонент волновой функции сплайнами, теория которых бурно развивается в последнее время [15,16]. В работе [13] волновая функция основного состояния системы трех тождественных частиц искалась в виде эрмитового бикубического сплайна, вторые частные производные которого разрывны в узлах сетки [15]. Такая аппроксимация позволила авторам сократить число узлов сетки в полтора раза по сравнению с конечно-разностной и свести исходную задачу к системе линейных уравнений с ленточной матрицей. Ширина ленты матрицы оказалась равной $6(N_\rho - 1)$, где N_ρ - число узлов радиальной сетки.

Цель настоящей работы - построение метода решения задачи на связанное состояние трех частиц, основанного на аппроксимации искомых функций дважды непрерывно дифференцируемыми бикубическими сплайнами и приводящего к матрице с шириной ленты, равной $3(N_\phi - 2)$, где N_ϕ - число узлов сетки по угловой переменной. Для сравнения рассматриваются три различных сеточных метода решений интегродифференциальных уравнений Фаддеева. Только для простоты описания предполагается, что частицы тождественны, взаимодействуют посредством s-волновых парных потенциалов $V(x)$, а полный орбитальный момент системы L равен нулю. Использование всех описанных методов в иных случаях принципиальных затруднений не вызывает. Необходимо лишь применить соответствующие аппроксимации к каждому элементу столбца неизвестных функций и упорядочить полученную систему линейных уравнений, следуя работе [9].

1. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

Волновая функция $\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$ основного состояния $(L=0)$ трех одинаковых частиц полностью симметрична. Ее компоненты в полярных координатах $\rho = (x_i^2 + y_i^2)^{1/2}$, $\phi_i = \mathrm{arc\,tg}(y_i/x_i)$ $i = 1,2,3$ имеют вид

$$\psi_i(\rho, \phi_i) = \rho^{-5/2} \operatorname{coses} 2\phi_i \; \Phi(\rho, \phi_i). \qquad /1/$$

Система трех уравнений Фаддеева сводится к одному [13]

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho^2}\left(\frac{1}{4} + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + E - V(\rho\cos\phi)\right]\Phi(\rho,\phi) = V(\rho\cos\phi)\langle\rho,\phi|\hat{h}|\Phi\rangle. \qquad /2/$$

Интегральный оператор действует только на угловую переменную [12]

$$\langle\rho,\phi|\hat{h}|\Phi\rangle = 2\operatorname{coses} 2\gamma \int_{c(\phi)}^{d(\phi)} d\xi\, \Phi(\rho, \xi), \qquad /3/$$

где $c(\phi) = |\phi - \gamma|$, $d(\phi) = \min(\gamma + \phi, \pi - \gamma - \phi)$, $\gamma = \pi/3$, а все остальные операторы, содержащиеся в уравнении /2/, локальные. Компоненты ψ_i предполагаются дважды непрерывно дифференцируемыми функциями [9] всюду, в области $\Omega = \{\rho, \phi: 0 \le \rho \le \infty, \; 0 \le \phi \le \pi/2\}$. Предположим также, что потенциал $V(x) \in C^2_{(0,\infty)}$ и удовлетворяет условию $\lim_{x\to 0} x V(x) = 0$. Из непрерывности компонент ψ_i и представления /1/ получим

$$\Phi(\rho, \phi) \to \rho^{5/2} a(\phi), \quad \rho \to 0, \quad 0 \le \phi \le \pi/2, \qquad /4/$$

$$\Phi(\rho, \xi) \to \xi\, b(\rho), \quad \xi \to 0, \quad 0 \le \rho \le \infty, \qquad /5/$$

где a и b - некоторые функции, а $\xi = \phi, \pi/2 - \phi$. При больших значениях гиперрадиуса искомая функция экспоненциально убывает [10]

$$\Phi(\rho, \phi) \to \exp(-\sqrt{|E|}\,\rho) f(\phi), \quad \rho \to \infty, \quad 0 \le \phi \le \pi/2. \qquad /6/$$

Из асимптотик /4/-/6/ следуют граничные условия

$$\Phi(\rho, 0) = \Phi(\rho, \pi/2) = 0, \quad 0 \le \rho \le \infty, \qquad /7/$$

$$\Phi(0, \phi) = \Phi(\infty, \phi) = 0, \quad 0 \le \phi \le \pi/2. \qquad /8/$$

Покажем, что вторые частные производные функции Φ равны нулю на границах области Ω. Действительно, из асимптотик /4/-/6/ следуют равенства

$$\Phi_{\rho\phi}(\rho, \phi) = \Phi_{\rho\rho}(\rho, \phi) = 0, \quad \rho = 0, \infty, \quad 0 \le \phi \le \pi/2. \qquad /9/$$

Записав уравнение /2/ в пределе $\phi \to 0$ $(\phi \to \pi/2)$, учтя равенства /3/, /7/ и ограничения, наложенные на потенциал, получим

$$\Phi_{\phi\phi}(\rho, \phi) = 0, \quad \phi = 0, \pi/2, \quad 0 \le \rho \le \infty. \qquad /10/$$

Для численного решения уравнения /2/ необходимо ограничить область изменения гиперрадиуса достаточно большим , но конечным значением R. Итак, решение уравнения /2/ ищется в прямоугольной области $\omega = \{\rho, \phi : 0 \le \rho \le R, \ 0 \le \phi \le \pi/2\} = [0, R] \times [0, \pi/2] \subset \Omega$.

Пусть на отрезках $[0, R]$, $[0, \pi/2]$ заданы некоторые, вообще говоря, нерегулярные разбиения:

$$\Delta_\rho : 0 = \rho_0 < \rho_1 < \ldots < \rho_N = R, \quad \Delta_\phi : 0 = \phi_0 < \phi_1 < \ldots < \phi_M = \pi/2, \qquad /11/$$

порождающие в области ω сетку узлов

$$\Delta_\omega = \Delta_\rho \times \Delta_\phi = \{\rho_i, \phi_j, \ i = 0, \ldots N, \ j = 0, \ldots, M\}.$$

Через $\bar{h}(\bar{\ell})$ обозначим максимальное значение шагов

$$h_i = \rho_{i+1} - \rho_i, \ i = 0, \ldots, N-1 \ (\ell_j = \phi_{j+1} - \phi_j, \quad j = 0, \ldots, M-1).$$

Из уравнения /2/ в случае регулярных разбиений /11/ получим систему уравнений для неизвестных значений сеточной функции $u_{ij} \equiv \Phi(\rho_i, \phi_j)$. Условия /7/, /8/ означают, что в граничных узлах сетки имеют место равенства

$$u_{0j} = u_{Nj} = 0, \ j = 0, \ldots, M, \quad u_{i0} = u_{iM} = 0, \ i = 0, \ldots, N. \qquad /12/$$

Для внутренних узлов сетки используем трехточечную конечно-разностную аппроксимацию /16, 17/

$$\Phi_{\rho\rho}(\rho_i, \phi_j) = (u_{i-1j} - 2u_{ij} + u_{i+1j})/h^2, \qquad /13/$$

$$\Phi_{\phi\phi}(\rho_i, \phi_j) = (u_{ij-1} - 2u_{ij} + u_{ij+1})/\ell^2, \qquad /14/$$

где $i = 1, \ldots, N-1$, $j = 1, \ldots, M-1$, а интегральный оператор /3/ заменим квадратурной суммой трапеций; тогда, учтя равенства /12/, получим

$$\langle \rho_i, \phi_j | \hat{h} | \Phi \rangle = s \sum_{k=1}^{M-1} H_{jk} u_{ik}, \qquad s = 4/\sqrt{3}. \qquad /15/$$

Квадратная матрица H размерности $M-1$ определяется только значением шага ℓ, а ненулевые элементы ее j-й строки $(j = 1, \ldots, M-1)$ равны

$$H_{jk} = \frac{\ell}{2}(a_j^2 \bar{\delta}_{n1} \delta_{kn-1} + (1 + 2a_j - a_j^2)\delta_{kn}), \quad k = n, n-1,$$

$$H_{jk} = \frac{\ell}{2}(b_j^2 \bar{\delta}_{Mm+1} \delta_{km+1} + (1 + 2b_j - b_j^2)\delta_{km}), \quad k = m, m+1,$$

$$H_{jk} = \ell, \quad k = n+1, \ldots, m-1.$$

Здесь n, m - целые числа, зависящие от значения индекса j и удовлетворяющие неравенствам

$$(n-1)\ell \le c(\phi_j) \le n\ell, \quad m\ell \le d(\phi_j) \le (m+1)\ell,$$

$$a_j = c(\phi_j)/\ell - n, \ b = d(\phi_j)/\ell - m.$$

Аппроксимируя операторы уравнения /2/ соответствующими равенствами /13/-/15/, получим систему уравнений для неизвестных значений u_{ij}

$$\sum_{k=1}^{M-1} (L^i_{jk} u_{i-1k} + D^i_{jk} u_{ik} + R^i_{jk} u_{i+1k}) = 0, \qquad /16/$$

$$i = 1, \ldots, N-1, \ j = 1, \ldots, M-1.$$

Здесь матрицы L^i, R^i пропорциональны единичной матрице $L^i_{jk} = R^i_{jk} = \delta_{jk}/h^2$, а матрицы D имеют вид

$$D^i_{jk} = (-2/h^2 + 1/4\rho_i^2 + E - V_{ij})\delta_{jk} + (\delta_{j-1k} - 2\delta_{jk} + \delta_{j+1k})/\rho_i^2 \ell^2 - sV_{ij} H_{jk},$$

где $V_{ij} = V(\rho_i \cos\phi_j)$, $j, k = 1, \ldots, M-1$.

$$\begin{bmatrix} L^1 & D^1 & & & & \\ L^2 & D^2 & R^2 & & 0 & \\ & L^3 & D^3 & R^3 & & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & 0 & & L^{N-2} & D^{N-2} & R^{N-2} \\ & & & & L^{N-1} & D^{N-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} U^1 \\ U^2 \\ U^3 \\ \vdots \\ U^{N-2} \\ U^{N-1} \end{bmatrix} = 0$$

Дополнив систему /16/ дискретными аналогами /12/ граничных условий /7/, /8/, запишем неизвестные в виде столбца /9/ $u = (u^1, u^2, \ldots, u^{N-1})^T$, составленного из блок-столбцов $u^i = (u_{i1}, \ldots, u_{iM-1})^T$, $i = 1, \ldots, N-1$, тогда матрица этой системы примет блочно-трехдиагональный вид с шириной ленты $3(M-1)$ /см. рисунок/. Следует отметить, что порядки аппроксимаций /13/, /14/ в случае $\Phi(\rho, \phi) \in C^4_\omega$ равны соответственно $O(h^2)$, $O(\ell^2)$ для регулярных и $O(\bar{h})$, $O(\bar{\ell})$ - для нерегулярных сеток. Увеличение порядка аппроксимации второй частной производной по гиперрадиусу использованием $n > 3$ точечных формул требует дополнительных предположений о гладкости искомой функции Φ /17/ и приводит к матрице с шириной ленты $n(M-1)$.

2. СПЛАЙН-АППРОКСИМАЦИЯ

Решим вспомогательную задачу. Пусть в узлах сетки Δ_ϕ заданы значения некоторой функции $u(\phi_j)=u_j$, $j=0,\dots,M$. Функцию $u(\phi)$, $\phi\in[0,\pi/2]$ необходимо интерполировать кубическим сплайном единичного дефекта. Таким сплайном называется дважды непрерывно дифференцируемая функция $S(\phi)\in C^2_{[0,\pi/2]}$, представимая на каждом отрезке $[\phi_j,\phi_{j+1}]$, $j=0,\dots,M-1$ в виде кубического полинома $S(\phi)=\sum_{\beta=0}^{3} a^j_\beta(\phi-\phi_j)^\beta$ и удовлетворяющая равенствам $S(\phi_j)=u_j$, $j=0,\dots,M$. Выполнение этих равенств и условия $S''(\phi)\in C^0_{[0,\pi/2]}$ обеспечивает запись сплайна в виде [15]

$$S(\phi)=\eta_1(t)u_j+\eta_2(t)u_{j+1}+\ell_j^2(\eta_3(t)M_j+\eta_4(t)M_{j+1})/6, \qquad /17/$$

где $\phi\in[\phi_j,\phi_{j+1}]$, $j=0,\dots,M-1$; функции η_i переменной $t=(\phi-\phi_j)/\ell_j$ равны

$$\eta_1(t)=1-t,\quad \eta_2(t)=t,\quad \eta_3(t)=3t^2-t^3-2t,\quad \eta_4(t)=t^3-t. \qquad /18/$$

Остается найти $M+1$ значение неизвестных коэффициентов $M_j=S''(\phi_j)$, $j=0,\dots,M$. Условия непрерывности первой производной

$$S'(\phi_j-0)=S'(\phi_j+0),\quad j=1,\dots,M-1$$

во внутренних узлах сетки дают $M-1$ соотношение [15]

$$\mu_jM_{j-1}+2M_j+(1-\mu_j)M_{j+1}=r_j=\frac{6}{\ell_{j-1}+\ell_j}\left(\frac{u_{j+1}-u_j}{\ell_j}-\frac{u_j-u_{j-1}}{\ell_{j-1}}\right), \qquad /19/$$

где $\mu_j=\ell_{j-1}/(\ell_{j-1}+\ell_j)$.

Два дополнительных условия задаются в виде различных ограничений на значения сплайна и его производных в граничных точках ϕ_0, ϕ_M. Пусть $u''(0)=u''(\pi/2)=0$, тогда соотношения /19/ дополним двумя равенствами $S''(\phi_0)=M_0=0$, $S''(\phi_M)=M_M=0$ и получим систему уравнений с трехдиагональной матрицей Γ^{-1}

$$\sum_{k=1}^{M-1}\Gamma^{-1}_{jk}M_k=r_j,\quad j=1,\dots,M-1. \qquad /20/$$

Матрица Γ^{-1} имеет диагональное преобладание, что обеспечивает существование и единственность решения системы /20/ для любой сетки Δ_ϕ. Обратив матрицу системы /20/, выразим коэффициенты M_j через узловые значения сплайна, в случае $u_0=u_M=0$ получим

$$S''(\phi_j)=M_j=6\sum_{k=1}^{M-1}B_{jk}u_k,\quad j=1,\dots,M-1,\quad M_0=M_M=0. \qquad /21/$$

Квадратная матрица B определяется только выбором сетки и равна

$$B_{jk}=\mu_{k-2}(\ell_{k-1}\ell_{k-2})^{-1}\Gamma_{jk-1}-(\ell_k\ell_{k-1})^{-1}\Gamma_{jk}+\mu_{k+1}\ell_k^{-2}\Gamma_{jk+1}, \qquad /22/$$

где $j,k=1,\dots,M-1$, а матрица Γ только для удобства записи дополнена нулевыми столбцами $\Gamma_{j0}=\Gamma_{jM}=0$, $j=1,\dots,M-1$.

Отметим некоторые свойства сплайнов /17/, /21/. Если $u(\phi)\in C^4_{[0,\pi/2]}$, то $|S(\phi)-u(\phi)|=O(\bar\ell^4)$, $\phi\in[0,\pi/2]$, а коэффициенты M_j /21/ аппроксимируют соответствующие значения $u''(\phi_j)$ с точностью $O(\bar\ell^2)$ как для регулярных, так и для нерегулярных сеток Δ_ϕ, в отличие от конечно-разностной формулы /14/. Сплайны обладают свойством локальности; если некоторое значение u_k задано с ошибкой δ, то коэффициенты M_j, вычисленные по формулам /21/, будут определены с ошибками ϵ_j, ограниченными неравенствами $|\epsilon_j|<|\delta|2^{-|k-j|}O(1)$, $j=1,\dots,M-1$. Рассмотрим второй метод решения уравнения /2/, основанный на сплайн-аппроксимации угловой зависимости искомой функции. На каждой прямой $\rho=\rho_i$, $i=1,\dots,N-1$, $\phi\in[0,\pi/2]$ в области ω /или дуге в декартовых координатах x, y/ ищем функцию Φ в виде кубического сплайна $\Phi(\rho_i,\phi)=S_i(\phi)$, тогда $\Phi(\rho_i,\phi_j)=u_{ij}=S_i(\phi_j)$, $\Phi_{\phi\phi}(\rho_i,\phi_j)=S_i''(\phi_j)$, где $i=1,\dots,N-1$, $j=0,\dots,M$. Для второй частной производной по гиперрадиусу используем прежнюю аппроксимацию /13/.

Выражение для i-го сплайна на отрезке $[\phi_j,\phi_{j+1}]$ $(j=0,\dots,M-1)$ получается из /17/ заменой

$$S\to S_i,\quad u_j\to u_{ij},\quad M_j\to M_{ij},\quad r_j\to r_{ij}, \qquad /23/$$

т.е. добавлением еще одного индекса i, нумерующего сплайны. Условия непрерывности первой производной для каждого сплайна записываются в виде системы из $(M-1)$ уравнения, которая получается из /19/ заменой /23/. Дополнив каждую из таких систем равенствами $M_{i0}=M_{iM}=0$ /$i=1,\dots,N-1$/, следующими из условий /10/, и учтя равенства /12/, выразим коэффициенты M_{ij} через искомые значения u_{ij}:

$$\Phi_{\phi\phi}(\rho_i,\phi_j)=S_i''(\phi_j)=M_{ij}=6\sum_{k=1}^{M-1}B_{jk}u_{ik},\quad i=1,\dots,N-1,\quad j=1,\dots,M-1. \qquad /24/$$

В равенствах /24/ матрица B /22/ одна и та же для всех сплайнов. Интеграл /3/ для каждого внутреннего узла сетки Δ_ω представим в виде суммы интегралов по отрезкам, где интегрируемая функция является кубическим полиномом /17/. Вычислив интегралы от известных функций η_i, $i=1,\dots,4$ /18/ по таким отрезкам и выразив в получившейся сумме коэффициенты M_{ij} через u_{ij}, согласно равенствам /24/, получим

$$\langle\rho_i,\phi_j|\hat h|\Phi\rangle=s\int_{c(\phi_j)}^{d(\phi_j)}d\xi\, S_i(\xi)=s\sum_{k=1}^{M-1}H_{ik}u_{ik},\quad i=1,\dots,N-1,\quad j=1,\dots M-1. \qquad /25/$$

Матрица H, очевидно, не зависит от значения радиального индекса i, а ненулевые элементы ее j-й строки равны

$$H_{jk} = P_{jk}, \quad k = 1, \ldots, n-2, m+2, \ldots, M-1,$$

$$H_{jn-1} = \ell_{n-1} I_{1n-1} + P_{jn-1}, \quad n \neq 1,$$

$$H_{jm+1} = \ell_m I_{2m} + P_{jm+1}, \quad m \neq M-1, \qquad /26/$$

$$H_{jn} = \ell_{n-1} I_{2n-1} + \ell_n/2 + P_{jn}, \quad H_{jm} = \ell_m (I_{1m} + 1/2) + P_{jm},$$

$$H_{jk} = (\ell_{k-1} + \ell_k)/2 + P_{jk}, \quad k = n+1, \ldots, m-1.$$

Вспомогательная матрица P имеет вид

$$P_{jk} = \sum_{r=n-1,m} \ell_r^3 (I_{3r} B_{rk} + I_{4r} B_{r+1k}) -$$

$$- \frac{1}{4} \sum_{r=n}^{m-1} \ell_r^3 (B_{rk} + B_{r+1k}), \quad j, k = 1, \ldots, M-1.$$

Здесь n, m - целые числа, зависящие от значения индекса j, и такие, что $c(\phi_j) \in [\phi_{n-1}, \phi_n]$, $d(\phi_j) \in [\phi_m, \phi_{m+1}]$, а символами I_{in-1} (I_{im}), $i = 1,2,3,4$ обозначены интегралы от функций $\eta_i(t)$ /18/ в пределах $(c(\phi_j) - \phi_{n-1})/\ell_{n-1}$, $1 (0, (d(\phi_j) - \phi_m)/\ell_m)$.

Уравнение /2/ запишем во внутренних узлах сетки Δ_ω и аппроксимируем равенствами /13/, /24/, /25/ соответствующие операторы. Получившаяся таким образом система линейных уравнений, дополненная дискретными граничными условиями /12/, имеет тот же самый вид /16/ и аналогичным упорядочением сводится к системе с матрицей той же самой структуры /см. рисунок/. Матрицы L^i, R^i - прежние, а матрицы D^i имеют вид

$$D^i_{jk} = (-2/h^2 + 1/4\rho_i^2)\,\delta_{jk} + g^i_{jk}.$$

Здесь, только для удобства, введены матрицы

$$g^i_{jk} = 6 B_{jk} / \rho_i^2 + (E - V_{ij})\,\delta_{jk} - s V_{ij} H_{jk}, \qquad /27/$$

а матрицы B и H вычисляются соответственно по формулам /22/, /26/.

В рассмотренном методе производная $\Phi_{\phi\phi}$ /если $\Phi(\rho, \phi) \in C^4_\omega$/ аппроксимируется коэффициентами сплайнов /24/ с точностью $O(\bar{\ell}^3)$ в случае произвольной сетки, а интегральный оператор /3/ отличается от квадратурной суммы /25/ на величину порядка $O(\bar{\ell}^4)$, в отличие от /15/. Проблема интерполяции частично решается.

Действительно, разрешив систему /16/ относительно неизвестных u_{ij}, вычислим коэффициенты M_{ij} /24/ и по формулам /17/, /18/ найдем приближенные значения функции Φ на прямых $\rho = \rho_i$, $i = 1, \ldots, N-1$, $\phi \in [0, \pi/2]$.

Перейдем к третьему методу решения уравнения /2/. Неизвестную функцию Φ ищем в виде бикубического сплайна единичного дефекта по каждой переменной. Такой сплайн в каждой ячейке $\omega_{ij} = [\rho_i, \rho_{i+1}] \times [\phi_j, \phi_{j+1}]$ сетки Δ_ω определяется шестнадцатью коэффициентами

$$S(\rho, \phi) = \sum_{\alpha,\beta=0}^{3} a^{ij}_{\alpha\beta} (\rho - \rho_i)^\alpha (\phi - \phi_j)^\beta$$

и является тензорным произведением одномерных кубических сплайнов $S(\rho)$ и $S(\phi)$, заданных на сетках Δ_ρ, Δ_ϕ соответственно [15,16]. Для решения интегродифференциальных уравнений Фаддеева удобно использовать представление

$$S(\rho, \phi) = \psi(p)\, F \psi^T(t), \quad (\rho, \phi) \in \omega_{ij}. \qquad /28/$$

Здесь строки $\psi(z) = (\eta_1(z), \eta_2(z), \sigma\eta_3(z), \sigma\eta_4(z))$, где $\sigma = h_i^2/6$ при $z = p = (\rho - \rho_i)/h_i$, $\sigma = \ell_j^2/6$ при $z = t$, а функция η_j и переменная t определены равенствами /18/. Матрица $F(4\times4)$ содержит неизвестные коэффициенты, которые равны значениям сплайна и его частных производных в точках (ρ_n, ϕ_m).

$$F_{k,\ell} = u_{nm} = S(\rho_n, \phi_m), \qquad F_{k\ell+2} = N_{nm} = S_{\rho\rho}(\rho_n, \phi_m),$$

$$F_{k+2\ell} = M_{nm} = S_{\phi\phi}(\rho_n, \phi_m), \quad F_{k+2\ell+2} = K_{nm} = S_{\rho\rho\phi\phi}(\rho_n, \phi_m),$$

где $k = 1(2)$ если $n = i(i+1)$, $\ell = 1(2)$ если $m = j(j+1)$. Производные $S_{\phi\phi}$ $S_{\rho\rho}$ сплайна /28/ непрерывны всюду. При фиксированном значении одной переменной бикубический сплайн, очевидно, является кубическим сплайном другой переменной. Следовательно, коэффициенты M_{ij} выражаются через u_{ij} формулами /24/, где матрица B /22/ та же, что и во втором методе. Условия непрерывности первой производной сплайна /28/ по гиперрадиусу для каждого фиксированного значения индекса j / $j = 0, \ldots, M$ /, т.е. на каждой прямой $\phi = \phi_j$ имеют вид

$$\bar{\mu}_i N_{i-1j} + 2N_{ij} + (1 - \bar{\mu}_i) N_{ij+1} = \frac{6}{h_{i-1} + h_i}\left(\frac{u_{i+1j} - u_{ij}}{h_i} - \frac{u_{ij} - u_{i-1j}}{h_{i-1}}\right), /29/$$

где $i = 1, \ldots, N-1$, $\bar{\mu}_i = h_{i-1}/(h_{i-1} + h_i)$, и дополняются равенствами $N_{0j} = N_{Mj} = 0$, следующими из условий /9/.

В уравнение /2/ подставим $\Phi(\rho, \phi) = S(\rho, \phi)$ и запишем его во внутренних узлах сетки. Производные $S_{\phi\phi}(\rho_i, \phi_j)$ /т.е. коэффициенты M_{ij} / выразим через значения сплайна в узлах сетки /т.е. u_{ij} / формулами /24/.

Интегральный оператор /3/ заменим квадратурной суммой /25/, в которой матрица H, очевидно, та же /26/, что и во втором методе. Таким образом, получим систему уравнений

$$S_{\rho\rho}(\rho_i,\phi_j)=N_{ij}=-\sum_{k=1}^{M-1} a^i_{jk}\,u_{ik}, \quad i=1,\dots,N-1,\quad j=1,\dots,M-1, \qquad /30/$$

где $a^i_{jk}=1/4\rho_i^2+g^i_{jk}$, а матрицы g^i /27/ прежние. Коэффициенты N_{ij} в виде /30/ подставим в уравнения /29/ и получим тогда систему уравнений для неизвестных u_{ij}, которую дополним граничными условиями /12/. Полученная таким образом система имеет вид /16/, где матрицы L^i, D^i, R^i равны

$$L^i_{jk}=\bar\mu_i(a^{i-1}_{jk}+6\delta_{jk}/h^2_{i-1}), \qquad i=2,\dots,N-1,$$

$$D^i_{jk}=2a^i_{jk}+6\delta_{jk}/h_{i-1}h_i, \qquad i=1,\dots,N-1,$$

$$R^i_{jk}=(1-\bar\mu_i)(a^{i+1}_{jk}+6\delta_{jk}/h^2_i), \qquad i=1,\dots,N-2,\quad j,k=1,\dots,M-1,$$

и прежним упорядочением сводится к системе с блочно-трехдиагональной матрицей /см. рисунок/, ширина ленты которой равна $3(M-1)$. Такой вид матрицы обусловлен структурой уравнений /29/, а именно тем, что каждое i-е уравнение содержит неизвестные коэффициенты N_{nj} и u_{nj} со значениями радиального индекса $n = i-1$, i, $i+1$. После нахождения коэффициентов u_{ij} вычислим по формулам /22/, /24/ коэффициенты M_{ij}, а коэффициенты N_{ij} найдем, решив системы уравнений /29/. Матрица этих систем не зависит от значения углового индекса j, следовательно, имеют место равенства

$$N_{ij}=6\sum_{k=1}^{N-1}\bar B_{ik}u_{kj}, \quad i=1,\dots,N-1,\; j=1,\dots,M-1,\; N_{0j}=N_{Nj}=0,$$

аналогичные равенствам /24/. Условия непрерывности второй смешанной производной сплайна во внутренних узлах сетки записываются для каждого фиксированного значения $j=1,\dots,M-1$ в виде системы линейных уравнений для неизвестных коэффициентов K_{ij}, $i=1,\dots,N-1$. Такие системы получаются заменой

$$N_{ij}\to K_{ij}, \quad u_{ij}\to M_{ij}, \quad i=0,\dots,N,\quad j=1,\dots M-1$$

в системах /29/ и дополняются уравнениями

$$S_{\rho\phi}(\rho,\phi_j)=0, \quad \rho=\rho_0,\rho_N, \text{ т.е.}$$

$$2K_{0j}+K_{1j}=6M_{1j}/h_0^2, \quad K_{N-1j}+2K_{Nj}=6M_{N-1j}/h^2_{N-1},$$

следующими из граничных условий /9/. Вычисленные таким образом коэффициенты дают нам дважды непрерывно дифференцируемую всюду в области ω функцию /28/, удовлетворяющую в узлах сетки уравнению /2/ и граничным условиям /7/-/10/. Отметим, что порядок аппроксимации функции $\Phi(\rho,\phi)\in C^4_\omega$ бикубическим сплайном, интерполирующим ее на сетке Δ_ω, равен $O(\bar h^4)+O(\bar\ell^4)$, а коэффициенты M_{ij} и N_{ij} аппроксимируют узловые значения производных $\Phi_{\phi\phi}$ и $\Phi_{\rho\rho}$ соответственно с точностью $O(\bar h^2)+O(\bar\ell^2)$ как для регулярных, так и для нерегулярных сеток Δ_ρ, Δ_ϕ в отличие от конечно-разностных формул /13/, /14/.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для сравнения эффективности описанных методов решения задачи на связанное состояние трех частиц уравнение /2/ решалось в случае потенциала $v(x)=a\exp(-x^2/k^2)$. Значения параметров $a = 51{,}5$ МэВ, $k = 1{,}6$ фм брались из работ /18/, где была получена достаточно точная оценка энергии связи системы трех тождественных частиц.

$$B = /9{,}7811\pm0{,}0024/ \text{ МэВ}. \qquad /31/$$

При вычислениях полагалось $R=30$ фм·ГэВ$^{1/2}$, $\hbar^2/m_N=41{,}4696$ МэВ·фм^2, $m_N = 938{,}5$ МэВ, сетка Δ_ρ бралась регулярной, а сетка Δ_ϕ - кусочно-регулярной. Эта сетка получалась построением на каждом из отрезков $[0,\pi/6]$, $[\pi/6,\pi/3]$, $[\pi/3,\pi/2]$ регулярных разбиений с числами узлов m, $1{,}5m$, $2m$.

Таблица

Метод	1	2	3
N_ρ, N_ϕ	71,43	71,25	35,25

В таблице приведены значения $N_\rho=N+1$, $N_\phi=M+1=4{,}5m-2$ чисел узлов радиальной и узловой сеток, при которых значение энергии связи, вычисленное каждым методом попадает в интервал /31/. Из таблицы следует, что использование сплайн-аппроксимации /третий и четвертый столбцы/ позволяет вдвое сократить число точек сетки по сравнению с конечно-разностной. Этот факт, вместе с локальными свойствами, возможностью выбора произвольных сеток и блочно-трехдиагональной структурой матрицы со сравнительно малой ширины ленты, делает использование бикубических сплайнов для решения интегродифференциальных уравнений Фаддеева особенно привлекательным.

В заключение необходимо отметить, что для построения сплайна /28/ не обязательно использовать равенства /9/, /10/, граничные условия могут быть иными /15/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фаддеев Л.Д. ЖЭТФ, 1961, 12, с.1014.
2. Ahmadzadech J., Tjon J.A. Phys.Rev., 1965, B139, p.1085.
3. Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. "Наука", М., 1977.
4. Шмид Э., Цигельман Х. Проблема трех тел в квантовой механике. "Наука", М., 1976.
5. Беляев В.Б., Вжецинко Е. ЭЧАЯ, 1971, 2, с.417.
6. Зубарев А.Л. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. Энергоиздат, М., 1981.
7. Веселова А.М. ТМФ, 1970, 3, с.326; ТМФ, 1978, 35, с.180.
8. Noyes H.P., Fiedeldey H. In: Three Particle Scattering in Quantum Mechanics. W.A.Benjamin, N.Y., 1968.
9. Merkuriev S.P., Gignoux G., Laverne A. Ann.Phys., 1976, 99, p.30.
10. Меркурьев С.П. ТМФ, 1971, 8, с.235; ЯФ, 1974, 19, с.447.
11. Меркурьев С.П. ЯФ, 1976, 24, с.289; ТМФ, 1977, 32, с.187.
12. Pupyshev V.V. JINR, E4-84-808, Dubna, 1984.
13. Payne G.L. et al. Phys.Rev., 1980, 22, p.823.
14. Меркурьев С.П., Куперин Ю.А., Квицинский А.А. Вестник ЛГУ, 1981, 4, с.66; ЯФ, 1983, 37, с.1440.
15. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. "Наука", М., 1980.
16. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. "Наука", М., 1977.
17. Вазов В., Форсайт Дж. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных, ИЛ, М., 1963.
18. Fabri E., Friorio G. Nuovo Cim., 1969, 60, p.210; Nucl. Phys., 1970, A141, p.325.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 февраля 1985 года.

Пупышев В.В. Р4-85-78
Использование бикубических сплайнов
для решения интегродифференциальных уравнений Фаддеева

Компоненты волновой функции трехчастичного связанного состояния, удовлетворяющие системе интегродифференциальных уравнений Фаддеева, ищутся в виде бикубических сплайнов. Исходная задача сводится к системе линейных уравнений с разреженной матрицей, ширина ленты которой равна утроенному числу узлов сетки по угловой переменной.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод автора

Pupyshev V.V. P4-85-78
The Using of Bicubic Splines for the Solution
of Integro-Differential Faddeev Equations

In the framework of integro-differential Faddeev equations the three-body bound-state wave-function components are found in the form of bicubic splines. The problem is reduced to the system of linear equations with a band matrix. The band width is equal to the number of angular-variable grid-points factorized by three.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985