86-85

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-86-85

В.В.Пупышев

РЕШЕНИЕ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИ ПОМОЩИ БИКУБИЧЕСКИХ В-СПЛАЙНОВ

1986

ВВЕДЕНИЕ

Целью настоящей работы является построение алгоритмов численного решения дифференциальных трехчастичных уравнений [1] методами сплайн-функций [2]. Основная идея заключается в аппроксимации искомых фаддеевских компонент трехчастичной волновой функции бикубическими сплайнами класса C^2, а не класса C^1 в отличие от работы [3], записанными через B-сплайны. Использование такого представления не только существенно упрощает предложенный ранее [4] алгоритм решения задачи на связанные состояния, сохраняя все его преимущества по сравнению с конечно-разностной аппроксимацией [1], но и позволяет единообразно решить задачу рассеяния при любом значении полной энергии системы трех тел. Использование более гладкой сплайн-аппроксимации, как уже отмечалось в предыдущей работе [4], приводит к уменьшению ширины ленты матрицы системы линейных уравнений, к которой сводятся уравнения Фаддеева, но требует детального знания граничных условий.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Только для простоты описания предположим, что частицы тождественны, взаимодействуют посредством s-волновых потенциалов, а все орбитальные моменты λ, ℓ, L равны нулю. В этом случае волновая функция трех частиц полностью симметрична, ее фаддеевские компоненты ψ_i имеют одну и ту же функциональную зависимость от собственных координат

$$\psi_i(\rho,\phi_i) = \rho^{-5/2}\operatorname{coses} 2\phi_i\, \Phi(\rho,\phi_i),\quad i=1,2,3, \qquad /1/$$

а система уравнений Фаддеева сводится к одному уравнению [3,4,5]

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

для неизвестной в области $\Omega = \{\rho,\phi : 0\le\rho\le\infty, 0\le\phi\le\pi/2\}$ функции Φ. Матричный элемент оператора $\hat{h}$, действующего только на угловую переменную, имеет вид [6]

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

где $\gamma = \pi/3$, $c(\phi) = |\phi-\gamma|$, $d(\phi) = \min(\gamma+\phi, \pi-\gamma-\phi)$.

Предположим, что потенциал является непрерывной и ограниченной функцией при $0 < x < \infty$, удовлетворяет условиям $\lim\limits_{x\to 0} xV(x) = 0$, $\lim\limits_{x\to\infty} x^3 V(x) = 0$, а парный гамильтониан $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ имеет только одно связанное состояние $u(x)$ с энергией связи ϵ $(\epsilon > 0)$.

Фаддеевские компоненты /1/ будем искать в классе ограниченных и дважды непрерывно дифференцируемых всюду в области Ω функций. Из регулярности компонент /1/ на границе этой области следуют граничные условия для искомой функции Φ:

$$\Phi(\rho,\phi) = 0, \quad \phi = 0, \pi/2, \quad 0 \le \rho \le \infty, \qquad /4/$$

$$\Phi(0,\phi) = 0, \quad 0 \le \phi \le \pi/2. \qquad /5/$$

Для задачи на связанные трехчастичные состояния с энергией $E < -\epsilon < 0$ компоненты /1/ экспоненциально убывают[7] при $\rho\to\infty$, и граничное условие при $\rho = \infty$ имеет вид

$$\Phi(\infty,\phi) = 0, \quad 0 \le \phi \le \pi/2, \qquad /6/$$

а неоднородный член уравнения /2/ тождественно равен нулю, т.к. $Z(\rho,\phi) = 0$, $(\rho,\phi) \in \Omega$. Для задачи s-волнового рассеяния частицы, налетающей с импульсом $\vec{q}$ на пару других частиц, находящихся в связанном состоянии $u(x)$, асимптотика имеет вид [1,5]

$$\Phi(\rho,\phi) = (A(q) + O(y^{-1}))\sqrt{\rho}\, u(x)\exp(iqy) +$$
$$+ (A^\circ(q,\phi) + O(\rho^{-1}))\exp(i\sqrt{E}\rho), \quad \rho\to\infty, \qquad /7/$$

а функция $Z = \frac{1}{q}\sin qy\, u(x)$ описывает начальное состояние системы. Здесь $x = \rho\cos\phi$, $y = x\,\mathrm{tg}\phi$, $E = q^2 - \epsilon$, а через A и A° обозначены соответственно компоненты амплитуд упругого рассеяния /2→2/ и развала /2→3/.

Отметим, что для получения однозначного решения уравнения /2/ конечно-разностным методом [1,5] достаточно граничных условий /4/-/6/ или /4/, /5/, /7/. При решении задачи /2/, /4/-/6/ или /2/, /4/, /5/, /7/ методами сплайн-функций необходимы дополнительные граничные условия. В качестве таких условий, в силу сделанных ранее предположений о гладкости компонент /1/ и потенциала, можно использовать равенства [4]

$$\Phi_{\phi\phi}(\rho,\phi) = 0, \quad \phi = 0, \pi/2, \quad 0 \le \rho \le \infty, \qquad /8/$$

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

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

Еще два дополнительных граничных условия, необходимых для решения методами сплайн-функции задачи на связанные состояния, имеют простой вид

$$\Phi_{\rho\rho}(\infty,\phi) = 0, \quad \Phi_{\rho\phi}(\infty,\phi) = 0, \quad 0 \le \phi \le \pi/2, \qquad /11/$$

а для решения задачи рассеяния требуется более детальное исследование асимптотики /7/.

В случае $E < 0$, т.е. $q^2 < \epsilon$, второе слагаемое этой асимптотики экспоненциально убывает, поэтому пренебрегаем им по сравнению с первым. Дифференцируя это доминирующее слагаемое по угловой переменной, получим асимптотику Φ_ϕ при $\rho\to\infty$. Исключив из асимптотик функции Φ и ее частной производной Φ_ϕ неизвестную компоненту амплитуды A, получим граничное условие

$$\Phi_\phi(\rho,\phi) + x[\mathrm{tg}\phi\, u'(x)/u(x) - iq]\Phi(\rho,\phi) = 0,$$
$$\rho\to\infty, \quad 0 \le \phi \le \pi/2. \qquad /12/$$

Рассмотрим случай $q^2 \ge \epsilon$, т.е. ситуацию, когда энергетически возможен процесс /2→3/. Из равенства /7/, в котором уже нельзя пренебречь вторым, осциллирующим при $E > 0$ слагаемым, описывающим развал, вычислим асимптотики частных производных первого и второго порядков по радиальной переменной. Исключив из полученных равенств и асимптотики /7/ неизвестные A и A°, получим, пренебрегая членами порядка $O(\rho^{-1/2})$, граничное условие

$$(i\sqrt{E}u - a_1)\Phi_{\rho\rho} + (Eu + a_2)\Phi_\rho - (Ea_1 + i\sqrt{E}a_2)\Phi = 0,$$
$$\rho\to\infty, \quad 0 \le \phi \le \pi/2, \qquad /13/$$

где

$$a_k(\rho,\phi) = \exp(-iqy)\frac{\partial^k}{\partial\rho^k}[u(x)\exp(iqy)], \quad k = 1,2$$

- неосциллирующие функции.

Построенные граничные условия /12/, /13/ не содержат осциллирующих множителей перед неизвестной функцией и ее частными производными и тем самым не накладывают дополнительных ограничений на выбор сетки узлов при дискретизации задачи.

Итак, в случае задачи на связанные состояния необходимо решить однородное уравнение /2/ с граничными условиями /4/-/6/, /8/-/11/, а в случае задачи рассеяния - неоднородное уравнение /2/ с условиями /4/, /5/, /8/, /10/ и /12/ или /13/ в зависимости от значения полной энергии системы трех частиц.

2. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Перед тем как перейти к описанию алгоритма численного решения уравнения /2/ определим кубические B-сплайны и перечислим их основные свойства. Пусть на отрезке $0 \le \rho \le R$ задана сетка из $M+1$ узлов

$$\Delta_\rho: \quad 0 = \rho_0 < \rho_1 < \ldots < \rho_N = R; \qquad /14/$$

расширим ее, добавив еще шесть узлов

$$\rho_{-3} < \rho_{-2} < \rho_{-1} < \rho_0, \quad \rho_{N+3} > \rho_{N+2} > \rho_{N+1} > \rho_N,$$

расположенных вне нашего отрезка. Далее, для каждого значения индекса i /$i = -1, \ldots, N+1$/ построим разделенные разности четвертого порядка от функции $f(\rho, t) = (\rho - t)_+^3$ по значениям аргумента $t = \rho_n$, $n = i-2, i-1, \ldots, i+2$ и определим функции

$$B_i(\rho) \equiv (\rho_{i+2} - \rho_{i-2})\, f[\rho, \rho_{i-2}, \ldots, \rho_{i+2}], \quad \rho_{-3} \le \rho \le \rho_{N+3}. \qquad /15/$$

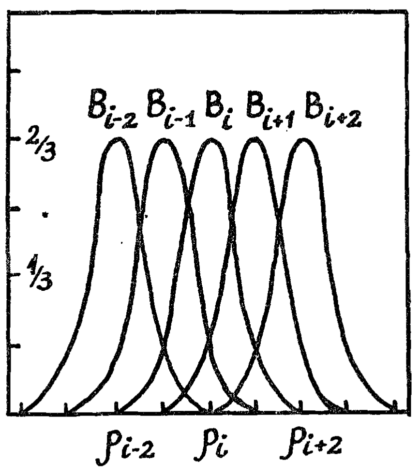

Рис.1. Кубические базисные сплайны.

Каждая функция B_i /см.рис.1/ положительно определена, отлична от нуля лишь на конечном интервале-носителе (ρ_{i-2}, ρ_{i+2}), а на концах этого интервала удовлетворяет равенствам

$$B_i^{(r)}(\rho_k) \equiv \frac{d^r}{d\rho^r} B_i(\rho_k) = 0, \qquad /16/$$

$$r = 0, 1, 2, \quad k = i-2, i+2.$$

Функция B_i, как следует из определения /15/, является кубическим сплайном класса C^2, построенным на отрезке $[\rho_{i-2}, \rho_{i+2}]$ с узлами в пяти точках ρ_n, $n = i-2, \ldots, i+2$ и удовлетворяющим граничным условиям /16/. Оказывается, что любой дважды непрерывно дифференцируемый кубический сплайн $S(\rho)$, построенный на отрезке $0 \le \rho \le R$ с узлами в точках /14/, единственным образом представим в виде суммы

$$S(\rho) = \sum_{i=-1}^{N+1} b_i B_i(\rho), \qquad 0 \le \rho \le R. \qquad /17/$$

Другими словами: функции /15/ образуют базис в пространстве таких сплайнов и называются базисными или B-сплайнами [2]. В каждом узле ρ_i сетки /14/ отличны от нуля значения производных порядка $r = 0, 1, 2$ только трех B-сплайнов с номерами $n = i-1, i, i+1$, т.е.

$$B_k^{(r)}(\rho_i) = 0, \quad r = 0, 1, 2, \quad k \ne i-1, i, i+2. \qquad /18/$$

Это свойство обуславливает удобство использования представления /17/ для решения дифференциальных уравнений второго порядка, благодаря ему матрица системы линейных уравнений для неизвестных коэффициентов b_i оказывается разреженной. Действительно, пусть некоторая функция, удовлетворяющая на отрезке $[0, R]$ обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка, ищется в виде сплайна /17/, разложенного по системе базисных функций /15/. Записав исходное уравнение в узлах сетки /14/, получим систему линейных уравнений для неизвестных коэффициентов b_i. Матрица этой системы в силу равенств /18/ будет трехдиагональной.

В полной аналогии с /14/, /15/ построим систему B-сплайнов на отрезке $0 \le \phi \le \pi/2$, введем сетку из $M+1$ узла

$$\Delta_\phi: \; 0 = \phi_0 < \phi_1 < \ldots < \phi_M = \pi/2 \qquad /19/$$

и расширим ее, добавив еще шесть узлов

$$\phi_{-3} < \phi_{-2} < \phi_{-1} < \phi_0, \quad \phi_{M+3} > \phi_{M+2} > \phi_{M+1} > \phi_M.$$

Только для того чтобы в дальнейшем различать базисные сплайны угловой и радиальной переменных, будем обозначать последние символами $\bar{B}$.

Произвольный бикубический сплайн $S(\rho, \phi) \in C^2_\omega$, построенный в прямоугольной области $\omega = \{\rho, \phi : 0 \le \rho \le R, 0 \le \phi \le \pi/2\}$ с узлами в точках двумерной сетки

$$\Delta_\omega = \Delta_\rho \times \Delta_\phi = \{(\rho_i, \phi_j), \; i = 0, \ldots, N, \; j = 0, \ldots, M\}, \qquad /20/$$

единственным образом представим в виде

$$S(\rho, \phi) = \sum_{n=-1}^{N+1} \sum_{m=-1}^{M+1} b_{nm} \bar{B}_n(\rho) B_m(\phi), \quad (\rho, \phi) \in \omega. \qquad /21/$$

В силу свойств /18/ частные производные сплайна /21/ в узлах сетки /20/ записываются в виде суммы, содержащей лишь девять слагаемых

$$S^{(r,s)}(\rho_i, \phi_j) = \sum_{n=i-1}^{i+1} \sum_{m=j-1}^{j+1} b_{nm} \bar{B}^{(r)}_{ni} B^{(s)}_{mj}, \quad r, s = 0, 1, 2. \qquad /22/$$

Здесь $\bar{B}^{(r)}_{ni} \equiv \frac{d^r}{d\rho^r}\bar{B}_n(\rho_i)$, и аналогичные обозначения приняты для производных от B-сплайнов угловой переменной.

Перейдем к построению алгоритма численного решения уравнения /2/. Ограничим интервал изменения переменной ρ конечным, но достаточно большим значением R. Неизвестную функцию Φ будем искать в области ω в виде бикубического сплайна /21/ с узлами на сетке /20/. Задача сведется к вычислению неизвестных коэффициентов b_{nm}. Сначала рассмотрим матричный элемент /3/. В узлах сетки /20/ он запишется в виде

$$\langle\rho_i, \phi_j|\hat{h}|S\rangle = s\sum_{n=i-1}^{i+1}\bar{B}_{ni}\sum_{m=-1}^{M+1} b_{nm}\int_{c(\phi_j)}^{d(\phi_j)} d\xi\, B_m(\xi), \qquad /23/$$

где радиальный индекс n, в силу равенств /18/, принимает лишь три значения. Вычислив интегралы от кусочно-кубических полиномов, которыми являются функции $B_m(\xi)$, получим равенства

$$\langle\rho_i, \phi_j|\hat{h}|S\rangle = s\sum_{n=i-1}^{i+1}\bar{B}_{ni}\sum_{m=-1}^{M+1} H_{jm} b_{nm},$$

где $s = 4/\sqrt{3}$, $i = 0,\dots,N$, $j = 0,\dots,M$.

Вообще говоря, неразреженная матрица H, размерности $(M+1)\times(M+3)$ очевидно, не зависит от значения радиального индекса i а определяется только выбором сетки /19/ /см. Приложение/.

Подставим вместо искомой функции сплайн /21/ в граничные условия /5/, /8-10/, одинаковые как для задачи на связанные состояния, так и для задачи рассеяния, и запишем их в точках $\rho = \rho_0$, $\phi = \phi_j$, $j = 0,\dots, M$. Таким образом, мы получим $2(M+3)$ уравнения, которые расположим в определенном порядке. Первый блок из $M+3$ уравнений построим так: первое уравнение - граничное условие /10/ в точке (ρ_0, ϕ_0), далее в порядке возрастания индекса j расположим $M+1$ уравнений, следующих из равенства /9/, записанного в точках (ρ_0, ϕ_j), $j=0,\dots M$. Последнее уравнение следует из условия /10/ в точке (ρ_0, ϕ_M). Итак, первый блок образуют уравнения:

$$\sum_{n,m=-1}^{1}\bar{B}'_{no}B'_{mo}b_{nm} = 0, \qquad \sum_{n=-1}^{1}\bar{B}''_{no}\sum_{m=j-1}^{j+1}B_{mj}b_{nm} = 0, \quad j = 0,\dots,M,$$
$$\sum_{n=-1}^{1}\bar{B}'_{no}\sum_{m=M-1}^{M+1}B'_{nM}b_{nm} = 0. \qquad /24/$$

Введя столбцы $b^i = (b_{i-1}, b_{i0},\dots,b_{iM+1})^T$ из неизвестных коэффициентов, запишем уравнения /24/ в матричном виде

$$C_{-1}b^{-1} + C_0 b^0 + C_1 b^1 = 0. \qquad /25/$$

$$\begin{bmatrix} + & + & + & & & & \\ + & + & + & & & 0 & \\ & + & + & + & & & \\ & & + & + & + & & \\ & & & \ddots & & & \\ & 0 & & & + & + & + \\ & & & & + & + & + \\ & & & & + & + & + \end{bmatrix}$$

Рис.2. Матрицы C

Квадратные матрицы C_n, $n = -1,0,1$, размерности $(M+3)$, очевидно, разрежены и имеют вид, изображенный на рис.2, где "крестами" отмечены их ненулевые элементы. Получим следующие $M+3$ уравнения, т.е. второй блок. Первое и последнее уравнения этого блока - граничное условие /8/, записанное соответственно в точках (ρ_0, ϕ_0) и (ρ_0, ϕ_M). Остальные уравнения, порождаемые условием /5/, записанным в точках (ρ_0, ϕ_j), расположим в порядке возрастания индекса $j = 0,\dots, M$. Заметим, что второй блок $C'_{-1}b^{-1} + C'_0 b^0 + C'_1 b^1 = 0$, так же, как и первый /25/, образуют однородные уравнения для неизвестных столбцов b^n, $n = -1,0,1$, а матрицы C'_n имеют ту же структуру /см. рис.2/, что и матрицы C_n. Построенные блоки назовем блоками граничных условий при $\rho = \rho_0$.

Теперь подставим сплайн /21/ в уравнение /2/, которое затем запишем во внутренних узлах сетки /20/. Используя равенства /22/, /23/, для каждого значения радиального индекса $i = 1,\dots,N-1$ получим $M-1$ уравнений

$$\sum_{n=i-1}^{i+1}\bar{B}_{ni}\Big[\sum_{m=j-1}^{j+1}B_{mj}\Big(B''_{ni}/B_{ni} + \frac{1}{\rho_i^2}\Big(\frac{1}{4} + B''_{mj}/B_{mj}\Big) + E - V_{ij}\Big)b_{nm} -$$
$$- sV_{ij}\sum_{k=-1}^{M+1}H_{jk}b_{nk}\Big] = V_{ij}\langle\rho_i, \phi_j|\hat{h}|Z\rangle \equiv \chi_{ij}, \qquad /26/$$

отвечающих фиксированному значению углового индекса $j = 1,\dots,M-1$. Здесь V_{ij} χ_{ij} - узловые значения потенциала и, соответственно, неоднородного члена. Для каждого фиксированного значения индекса $i\,(i = 1,\dots,N-1)$ построим блок из $M+3$ уравнений, записав граничные условия /8/, /4/ и уравнения /26/ в определенном порядке. Такие блоки будем называть внутренними. Первое уравнение i-го внутреннего блока - условие /8/ в точке (ρ_i, ϕ_0)

$$\sum_{n=i-1}^{i+1}\bar{B}_{ni}\sum_{m=-1}^{1}B''_{mo}b_{nm} = 0, \qquad /27/$$

второе уравнение следует из граничного условия /4/, записанного в той же точке,

$$\sum_{n=i-1}^{i+1}\bar{B}_{ni}\sum_{m=-1}^{1}B_{mo}b_{nm} = 0. \qquad /28/$$

Далее запишем в порядке возрастания индекса j еще $(M-1)$ уравнений /26/, отвечающих выбранному значению индекса i. Предпоследнее и последнее уравнения блока дадут, соответственно, граничные условия /4/ и /8/, записанные в точке (ρ_i, ϕ_M). Эти уравнения получаются, соответственно, из /28/, /27/ заменой индексов $0 \to M$, $/m = -1, 0, 1/ \to /m = M-1, M, M+1/$. Уравнения i-го внутреннего блока можно записать в виде

$$L^i b^{i-1} + D^i b^i + R^i b^{i+1} = \chi^i \equiv (0, 0, \chi_{i1}, \ldots, \chi_{iM-1}, 0, 0)^T .$$

Здесь L, D, R - квадратные матрицы, размерности $(M+3)$. Они содержат матрицу H и поэтому не разрежены в отличие от матриц C /25/. Остается построить еще два блока, т.е. блоки граничных условий при $\rho = \rho_N$. Эти последние $2(M+3)$ уравнения, очевидно, различны для задачи на связанные состояния и задачи рассеяния.

Для задачи на связанные состояния первый и второй блоки граничных условий при $\rho = \rho_N$ строятся в полном соответствии со вторым и первым блоками граничных условий при $\rho = \rho_0$, с той лишь разницей, что соответствующие граничные условия записываются в точках (ρ_N, ϕ_j), $j = 0, \ldots, M$. Для задачи рассеяния в качестве предпоследнего блока используем внутренний блок с номером $i = N$. Последние $M+3$ уравнения, т.е. последний блок, построим так: первое уравнение - условия /8/ в точке (ρ_N, ϕ_0), далее в порядке возрастания индекса j расположим $M+1$ уравнений, следующих из граничных условий /12/ или /13/ /в зависимости от значения энергии/, записанных в точках (ρ_N, ϕ_j), $j = 0, \ldots M$. Последнее уравнение получим из условия /8/, записав его в точке (ρ_N, ϕ_M). Теперь запишем блоки уравнений в следующем порядке: сначала первый, затем второй блоки граничных условий при $\rho = \rho_0$, далее в порядке возрастания индекса $i = 1, \ldots, N-1$ расположим внутренние блоки.

Полученную систему уравнений дополним первым и вторым блоками граничных условий при $\rho = \rho_N$ в случае задачи на связанные состояния, а в случае задачи рассеяния - внутренним блоком $i = N$ и блоком граничных условий /8/, /12/ или /8/, /13/. При таком порядке записи уравнений исходные задачи сводятся к системам линейных уравнений для неизвестных коэффициентов сплайна /21/. Матрицы этих систем разрежены и символически изображены на рис.3. Исключив из двух первых и последних блоков уравнений, соответственно, неизвестные столбцы b^{-1} и b^{N+1}, получим систему с блочно-трехдиагональной матрицей, ширина ленты которой равна $3(M+3)$.

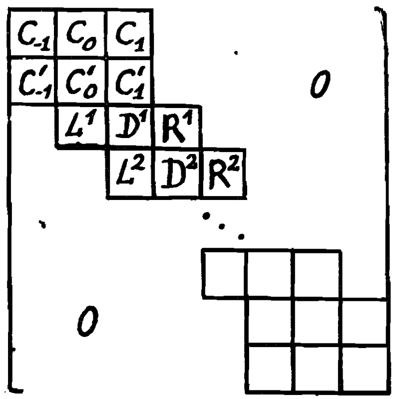

Рис.3. Матрица системы линейных уравнений для неизвестных коэффициентов b_{nm}.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, уравнение /2/ при аппроксимации искомой функции бикубическим сплайном класса C^2, разложенным по базисным сплайнам, сводится к системе линейных уравнений с ленточной матрицей, что существенно упрощает решение задачи. Порядок сплайн-аппроксимации уравнения /2/ и всех граничных условий равен $O(\bar{h}^2 + \bar{\ell}^2)$, где $\bar{h}$ и $\bar{\ell}$ - максимальные шаги сеток /14/ и /19/, соответственно. Так как узловые значения B-сплайнов, их производных и функции V, χ легко вычисляются, то построение ленточной матрицы требует хранения в памяти ЭВМ сравнительно малого объема информации: матрицы H и массивов /14/, /19/. По этим причинам рассмотренный метод удобен для решения трехчастичных уравнений в координатном пространстве.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для вычисления интегралов в сумме /23/ воспользуемся тем, что каждая функция $B_k(\phi)$ является кубическим сплайном и, следовательно, на любом отрезке $\phi_p \le \phi \le \phi_{p+1}$ своего интервала-носителя представима в виде[2,4]

$$B_k(\phi) = \sum_{r=1,2} [\eta_r(t) B_{kp+r-1} + \frac{1}{6} \ell_p^2 \eta_{r+2}(t) B''_{kp+r-1}].$$

Здесь $\ell_p = \phi_{p+1} - \phi_p$, а функции η переменной $t = (\phi - \phi_p)/\ell_p$ равны $\eta_1 = 1 - t$, $\eta_3 = t$, $\eta = 3t^2 - t^3 - 2t$, $\eta_4 = t^3 - t$. Используя эти равенства и свойства /16/, /18/, нетрудно вычислить элементы матрицы H. Пусть в точке $\phi = \phi_j$ значения верхнего и нижнего пределов интегралов /22/ принадлежат соответственно отрезкам $[\phi_m, \phi_{m+1}]$ и $[\phi_{n-1}, \phi_n]$. Через z_k обозначим усредненную сумму четырех шагов сетки /19/, $z_k = \frac{1}{4}(\ell_{k-2} + \ell_{k-1} + \ell_k + \ell_{k+1})$, а символами I_i и J_i обозначим интегралы от функции $\eta_i(t)$, $i = 1, \ldots, 4$, вычисленные соответственно в пределах

$$\{(c(\phi_j) - \phi_{n-1})/\ell_{n-1}, 1\} \qquad \{0, (d(\phi_j) - \phi_m)/\ell_m\}.$$

В принятых обозначениях ненулевые элементы j-й строки матрицы H запишутся в следующем виде:

$$H_{jn-2} = \ell(I_1 + I_3) B_{n-2k},$$

$$H_{jn-1} = \ell(I_1 B_{kk} + \frac{1}{6} \ell^2 I_3 B''_{kk}) + [\frac{1}{4}\ell_n + \ell(I_2 + I_4 \ell^2/\ell_n^2)] B_{kn},$$

$$H_{jn} = z_n + \ell[(I_2 - \frac{1}{2}) B_{nn} + \frac{1}{6} \ell^2 (I_4 + \frac{1}{4}) B''_{nn}] +$$

$$+\{-\frac{1}{4}\ell_{n-2} + \ell[I_1-\frac{1}{2} + (I_3+\frac{1}{4})\ell^2 / \ell^2_{n-2}]\}B_{nk} ,$$

$$H_{jn+1} = z_{n+1} + \ell(I_2+I_4-\frac{1}{4})B_{n+1n} ,$$

где для сокращения записи полагалось $k=n-1$, $\ell=\ell_{n-1}$; далее с этой же целью обозначим $k=m+1$, $\ell=\ell_m$, тогда

$$H_{jp} = z_p, \quad p = n+2,\dots, m-2,$$

$$H_{jm-1} = z_{m-1} + \ell(J_1+J_3-\frac{1}{4})B_{m-1m} ,$$

$$H_{jm} = z_m + \ell[(J_1-\frac{1}{2})B_{mm}+\frac{1}{6}\ell^2(J_3+\frac{1}{4})B''_{mm}] +$$

$$+\{-\frac{1}{4}\ell_k + \ell[J_2-\frac{1}{2} + (J_4+\frac{1}{4})\ell^2/\ell^2_k]\}B_{mk} ,$$

$$H_{jm+1} = \ell(J_2B_{kk}+\frac{1}{6}\ell^2 J_3 B''_{kk}) + [\frac{1}{4}\ell_{m-1} + \ell(J_1+J_4\ell^2/\ell^2_{m-1})]B_{km} ,$$

$$H_{jm+2} = \ell(J_2+J_4)B_{m+2k} .$$

При выводе этих равенств использовались также следующие соотношения между узловыми значениями B-сплайнов и их производных второго порядка $6B_{kk-1} = \ell^2_{k-2} B''_{kk-1}$, $6B_{kk+1} = \ell^2_{k+1} B''_{kk+1}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Merkuriev S.P., Gignoux G., Laverne A. Ann.Phys., 1976, 99, p.30.
2. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. "Наука", М., 1980.
3. Friar J.L., Gibson B.F., Payne G.L. Phys.Rev., 1981, C24, p.2279.
4. Пупышев В.В. ОИЯИ, Р4-85-78, Дубна, 1985.
5. Gignoux G., Laverne A., Merkuriev S.P. Phys.Rev.Lett., 1974, 33, p.1350.
6. Pupyshev V.V. JINR, E4-84-808, Dubna, 1984.
7. Меркурьев С.П. ЯФ, 1974, 19, с.447.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 февраля 1986 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Пупышев В.В. P4-86-85

Решение трехчастичных дифференциальных уравнений при помощи бикубических B-сплайнов

На основе аппроксимации фаддеевских компонент бикубическими сплайнами класса C^2, разложенными по базисным сплайнам, построен алгоритм численного решения дифференциальных трехчастичных уравнений. Показано, что задача рассеяния, так же, как и задача на связанные состояния, сводится к решению системы линейных уравнений с ленточной матрицей.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Pupyshev V.V. P4-86-85

Solution of Three-Particle Differential Equations by Using Bicubic B-Splines

In the framework of approximation of Faddeev´s components by bicubic splines of C^2-class, which are expanded over basic aplines, the numerical algorithm for solving differential three-particle equations is obtained. It is shown that the scattering problem as well as the bound state problem are reduced to the solution of linear equation system with a band matrix.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986