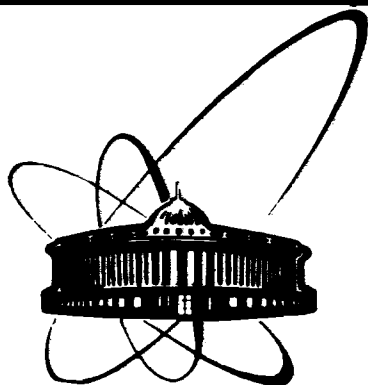


89-558



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

В 486

P4-89-558

С.И.Виницкий, С.П.Меркурьев *, И.В.Пузынин,
В.М.Суслов *

МАТРИЧНАЯ СТРУКТУРА УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА
В КООРДИНАТНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

* Ленинградский государственный университет

1989

Введение

В задачах, связанных с расчетом различных физических характеристик 3х-частичных систем на основе дифференциальных уравнений Фаддеева, в последнее время достигнут значительный прогресс. В работах^{/1-2/} впервые был выполнен детальный теоретический анализ уравнений Фаддеева для ряда 3-частичных систем, таких, как $e^-e^+e^-$, ppp , ${}^3\text{He}$, а также приведены результаты расчетов, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными и данными других авторов, полученными на основе других подходов. Однако получающиеся в конечном итоге матричные уравнения достаточно сложны, что требует для проведения численных расчетов применения суперкомпьютеров (см., например,^{/3/}).

Данная работа посвящена исследованию матричной структуры уравнений Фаддеева, возникающей при использовании той или иной вычислительной схемы, что позволит использовать для расчетов наиболее оптимальную их численную реализацию. В первом разделе приводятся дифференциальные уравнения Фаддеева в полярных координатах в бисферическом базисе. Во втором разделе предлагается способ аппроксимации интегральных операторов с помощью разложения по системе фундаментальных сплайнов, что позволяет нелокальные операторы представить в виде приближенных локальных. В третьем разделе исследуются матричные структуры уравнений, возникающие после конечно-разностной аппроксимации с различным выбором упорядочения. В четвертом разделе описывается алгоритм численного решения задачи на собственные значения, на основе метода обратных итераций с начальным собственным вектором, полученным в адиабатическом приближении. В пятом разделе приводятся результаты численных расчетов для энергии связи мезомолекулы $tt\mu$ и $P\bar{S}-e\bar{e}e^-$, обсуждаются перспективы применения предложенного метода к некоторым ядерным системам.

1. Уравнения Фаддеева в координатном пространстве

Компоненты Фаддеева Ψ_α в пространстве $L_2(\mathbb{R}^6)$ удовлетворяют системе дифференциальных уравнений Фаддеева

$$\{-\Delta_x + V_\alpha(x_\alpha) + \sum_{\beta \neq \alpha} V_\beta^{(0)}(x_\beta, y_\beta) - E\} \Psi_\alpha = -\hat{V}_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) \sum_{\beta \neq \alpha} \Psi_\beta. \quad (1)$$

Здесь \hat{V}_α и $V_\alpha^{(0)}$ - короткодействующие и далекодействующие части парных потенциалов $V_\alpha = \hat{V}_\alpha + V_\alpha^{(0)}$, $\alpha, \beta = 1, 2, 3$ и $x_\alpha \oplus y_\alpha = X \in \mathbb{R}^6$, где x_α - якобиевский вектор в паре α . При получении уравнений, используемых для численных расчетов, необходимо провести в (I) парциальный анализ, т.е. отделить спин-изоспиновые и угловые переменные (см., например, [1]). В итоге находим систему интегро-дифференциальных уравнений, которая в полярных координатах $\rho^2 = x_\alpha^2 + y_\alpha^2$, $\tan \theta = |x_\alpha|/|y_\alpha|$ имеет вид ($\theta = \theta_\alpha$):

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V_\alpha(\rho, \theta) + \sum_{\beta \neq \alpha} V_\beta^{(0)}(\rho, \theta) - E \right\} \Psi_\alpha^{\lambda \ell}(\rho, \theta) = -\hat{V}_\alpha(\rho, \theta) \left(\hat{h}_{\lambda \ell, \lambda' \ell'}^L \Psi_\alpha^{\lambda' \ell'} \right)_\alpha(\rho, \theta). \quad (2)$$

Здесь L - полный орбитальный момент системы $\vec{L} = \vec{\lambda} + \vec{\ell}$, ℓ - орбитальный момент пары α ($\alpha = 1, 2, 3$), λ - орбитальный момент частицы-спектратора относительно центра масс пары α . Интегральный оператор в биосферическом базисе имеет вид

$$\left(\hat{h}_{\lambda \ell, \lambda' \ell'}^L \Psi_\alpha^{\lambda' \ell'} \right)_\alpha(\rho, \theta) = \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{-1}^1 du \frac{\sin \theta \cos \theta}{\sin \theta' \cos \theta'} h_{\lambda \ell, \lambda' \ell'}^{L, \alpha, \beta}(\theta, \theta') \Psi_\beta^{\lambda' \ell'}(\rho, \theta'), \quad (3)$$

где

$$\cos^2 \theta'(u, \theta) = C_{\alpha\beta}^2 \cos^2 \theta + 2 C_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} \sin \theta \cos \theta \cdot u + S_{\alpha\beta}^2 \sin^2 \theta \quad (4)$$

дает связь между различными якобиевскими парами $X = x_\alpha \oplus y_\alpha \in \mathbb{R}^6$, u - якобиевский вектор, соединяющий частицу β с центром масс пары α .

Переход от пары α к паре β , $\beta \neq \alpha$ осуществляется ортогональным преобразованием в \mathbb{R}^6 :

$$\begin{aligned} x_\beta &= C_{\beta\alpha} x_\alpha + S_{\beta\alpha} y_\alpha, \\ y_\beta &= -S_{\beta\alpha} x_\alpha + C_{\beta\alpha} y_\alpha, \\ C_{\beta\alpha}^2 + S_{\beta\alpha}^2 &= 1, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (5)$$

Коэффициенты $C_{\beta\alpha}$, $S_{\beta\alpha}$ выражаются в терминах масс частиц m_α

$$C_{\alpha\beta} = - \left(\frac{m_\alpha m_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)(m_\beta + m_\gamma)} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

$$S_{\alpha\beta}^2 = 1 - C_{\alpha\beta}^2, \quad S_{\alpha\beta} > 0.$$

Стандартная подстановка $\Psi_\alpha = \rho^{-1/2} U_\alpha$ позволяет исключить первую производную по радиусу и привести уравнение (2) к виду

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V_\alpha(\rho, \theta) + \sum_{\beta \neq \alpha} V_\beta^{(0)}(\rho, \theta) - \frac{1}{4\rho^2} E \right\} U_\alpha^{\lambda \ell}(\rho, \theta) = -\hat{V}_\alpha(\rho, \theta) \left(\hat{h}_{\lambda \ell, \lambda' \ell'}^L U_\alpha^{\lambda' \ell'} \right)_\alpha(\rho, \theta). \quad (7)$$

Для решения задачи на собственные значения в области $\rho \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi/2]$ уравнение (7) следует дополнить граничными условиями:

$$\begin{aligned} U_\alpha(0, \theta) &= U_\alpha(\infty, \theta) = 0, \\ U_\alpha(\rho, 0) &= U_\alpha(\rho, \pi/2) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

2. Сплайн-аппроксимация интегральных операторов

Численное решение краевой задачи (7-8) представляет собой сложную проблему, в частности, из-за наличия нелокальных операторов $\hat{h}_{\lambda \ell, \lambda' \ell'}^L$. Чтобы упростить задачу, разложим компоненту Фаддеева U_α по системе фундаментальных кубических сплайнов, которая обладает свойствами полноты и ортогональности:

$$\sum_{j=1}^{N_\theta} S_j(\theta) = 1, \quad S_j(\theta_i) = \delta_{ij}, \quad (9)$$

где N_θ - число точек по угловой переменной θ . Графически эти сплайны изображены на рис.1. При построении сплайнов, обладающих свойствами (9), необходимо для каждого θ_i , где $i \in [1, N_\theta]$ и N_θ - число точек разбиения промежутка $[0, \pi/2]$, решить систему алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. Чтобы удовлетворить асимптотическим граничным условиям на компоненты Фаддеева U_α для кулоновских потенциалов, в окрестностях граничных точек интервала $[0, \pi/2]$, мы дополняем выбранную систему сплайнов двумя сплайнами, имеющими следующие свойства:

$$\begin{aligned} S'(0) &= S'(\pi/2) = 0, \\ S''(0) &= S''(\pi/2) = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Разложение для компонент U_α выбираем в виде

$$U_\alpha^{\lambda \ell}(\rho, \theta) = \sin \theta \cos \theta \sum_{j=1}^{N_\theta} \frac{U_\alpha^{\lambda \ell}(\rho, \theta_j) S_j(\theta)}{\sin \theta_j \cos \theta_j}. \quad (11)$$

Тогда, подставляя (11) в (7), находим для интегрального оператора $\hat{h}_{\lambda \ell, \lambda' \ell'}^L$:

$$\begin{aligned} (\hat{h}_{\lambda\ell, \lambda'\ell'}^\perp U^{\lambda'\ell'})_\alpha(\rho, \theta_i) &= \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{j=1}^{N_\rho} \frac{\sin \theta \cos \theta}{\sin \theta_j \cos \theta_j} U_\beta^{\lambda'\ell'}(\rho, \theta_j) \\ &\times \int_{-1}^1 du h_{\lambda\ell, \lambda'\ell'}^{L \times R}(\theta_i, \theta'(u, \theta_i)) S_j(\theta'(u, \theta_i)) \end{aligned} \quad (I2)$$

и интегралы в (I2) можно вычислить, используя, например, квадратуры Гаусса.

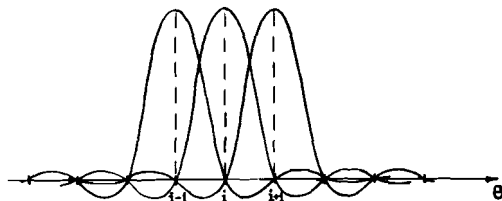


Рис.1. Кубический фундаментальный сплайн $S_i(\theta)$, $\theta \in [0, \pi/2]$.

3. Матричная структура алгебраической задачи на собственные значения для уравнений Фаддеева

Матричная структура уравнений определяется точностью конечно-разностной аппроксимации (в данной работе $O(h^2)$) и выбором упорядочения компонент Фаддеева $U_\alpha^{\lambda\ell}(\rho, \theta)$. Это упорядочение определяется тем, какая из координат в \mathbb{R}^6 изменяется быстро.

В задачах, связанных с расчетами физических характеристик "жестких" трехчастичных систем, такой координатой для уравнения (7) в \mathbb{R}_+^2 является угол θ [5,6], а для нежестких систем ситуация может измениться на противоположную. В наших расчетах, ориентированных на такие системы, как ppm , ddm , ttm или Ps^- , 3He , для которых гиперрадиус ρ является медленной переменной, следует использовать упорядочение типа

$$U_\alpha^{\lambda\ell}(\rho, \theta) \rightarrow F(\rho, \alpha, \theta), \quad (I3)$$

где $\alpha = \{\lambda\ell\}$ - мультииндекс, связанный с каждой компонентой $\alpha = 1, 2, 3$.

Данный выбор, после конечно-разностной аппроксимации уравнения (7), приводит к следующей структуре матриц алгебраической задачи на собственные значения:

$$\left(\begin{array}{ccc} D_1 & R_1 & \\ L_2 & D_2 & R_2 \\ & & \ddots \\ & L_{N_\rho-1} & D_{N_\rho-1} & R_{N_\rho-1} \\ & & L_{N_\rho} & D_{N_\rho} \end{array} \right) F = \left(\begin{array}{ccc} B_1 & & \\ & B_2 & \\ & & \ddots \\ & & & B_{N_\rho-1} \\ & & & & B_{N_\rho} \end{array} \right) F \quad (I4)$$

Здесь матрицы D_i , R_i , L_i , B_i имеют размерность $(N_\alpha \times N_\theta) \times (N_\alpha \times N_\theta)$, N_α - полное число парциальных волн, а индекс i пробегает все значения от 1 до N_ρ , в соответствии с выбором сетки по гиперрадиусу ρ (ступающей к нулю). Матрицы R_i и L_i являются диагональными, матрицы D_i - блочно-трехдиагональными, а матрицы B_i в общем случае заполнены целиком. Структура матрицы D_i изображена на рис.2.

Матрицы B_i определяются из соотношения (I2) и имеют структуру, изображенную на рис.3.

Матрицы H_{ik} зависят от гиперрадиуса ρ через потенциалы V и имеют размерность $N_\theta \times N_\theta$. Индексы i, k соответствуют различным значениям мультииндекса $\alpha = \{\lambda, \ell\}$.

Выбранное упорядочение является удобным для нахождения нулевого приближения при использовании метода обратных итераций с возмущением, на основе адиабатического подхода.

Также заслуживает внимания упорядочение $U_\alpha^{\lambda\ell}(\rho, \theta) \rightarrow F(\alpha, \rho, \theta)$, которое приводит к следующей структуре матричного уравнения:

$$\left(\begin{array}{ccc} M_1 & & \\ & M_2 & \\ & & \ddots \\ & & & M_{N_\alpha} \end{array} \right) F = \left(\begin{array}{ccc} \tilde{H}_{11} & & \tilde{H}_{1N_\alpha} \\ \tilde{H}_{21} & \tilde{H}_{22} & \\ & & \ddots \\ \tilde{H}_{N_\alpha 1} & & & \tilde{H}_{N_\alpha N_\alpha} \end{array} \right) F \quad (I5)$$

В этом случае матрицы имеют размерность $(N_p * N_\theta) \times (N_p * N_\theta)$. Матрицы $M_i, i \in [1, N_d]$ являются пятидиагональными и имеют структуру, изображенную на рис.4.

Матрицы \tilde{H}_{ik} являются блочно-диагональными, их структура изображена на рис.5. Традиционный выбор упорядочения $U_\alpha^{\lambda\theta}(\rho, \theta) \rightarrow F(\rho, \theta, \alpha)$, принятый во всех известных расчетах, приводит к структуре матричного уравнения, аналогичной (I5). Однако в этом случае матрицы D_i размерности $(N_d * N_\theta) \times (N_d * N_\theta)$ не имеют блочно-диагональной структуры, изображенной на рис.2, а представляют собой трехдиагональные матрицы с разнесенными диагоналями.

В вычислительном плане данный выбор упорядочения невыгоден, т.к. при увеличении числа парциальных волн он ведет к большим затратам памяти для хранения целиком заполненных обратных матриц размерности $(N_d * N_\theta) \times (N_d * N_\theta)$.

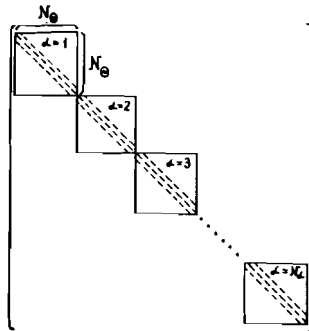


Рис.2. Матрица D_i , состоящая из трехдиагональных матриц размерности $N_\theta \times N_\theta$.

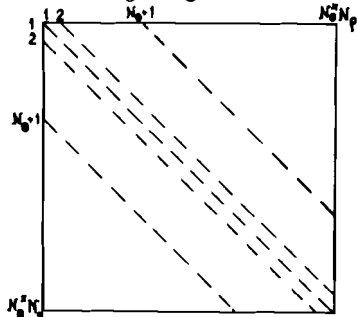


Рис.4. Структура матриц M_i . Индекс i соответствует различным значениям мультииндекса $\alpha = \{\lambda \ell\}$.

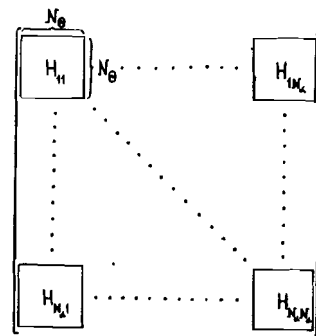


Рис.3. Матрица B_i , состоящая из $N_d \times N_d$ матриц H_{ik} размерности $N_\theta \times N_\theta$.

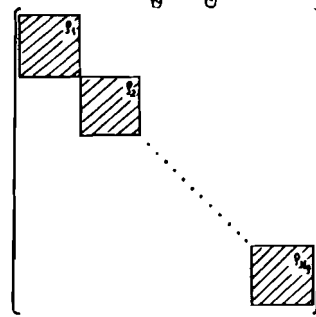


Рис.5. Структура матриц $\tilde{H}_{ik}, i, k \in [1, N_d]$. Матрицы размерности $N_\theta \times N_\theta$, расположенные на диагонали, целиком заполненные.

4. Метод обратных итераций с возмущением и адиабатическое приближение

После конечно-разностной аппроксимации и выбора упорядочения краевая задача (7) с граничными условиями (8) сводится к алгебраической задаче на собственные значения, которая имеет структуру (I4) и в матричной форме записывается в виде

$$(A - IE)F = BF. \quad (I6)$$

Матрицы A и B размерности $(N_p * N_d * N_\theta)^2$ имеют разреженную блочную структуру с размерами блоков $(N_d * N_\theta)^2$ (см. I4) и рис.2-3).

Для решения спектральной задачи типа (I6) существуют разнообразные методы, позволяющие найти минимальное собственное значение, из которых наиболее простым является метод обратной итерации с релевским сдвигом [7]:

$$(A - B - I\sigma_k)Y_{k+1} = X_k, \\ X_{k+1} = \frac{Y_{k+1}}{\|Y_{k+1}\|}, \\ \sigma_k = \frac{(X_k, (A-B)X_k)}{(X_k, X_k)}. \quad (I7)$$

Решение задачи (I7) представляет собой сложную в вычислительном плане проблему. Это прежде всего связано с обращением и хранением N_θ матриц $(N_p \sim 100)$ большой размерности $((N_d * N_\theta)^2 \sim 1000 \times 1000$ и более). Принципиальная трудность возникает в связи с численной неустойчивостью алгебраической задачи (I7) большой размерности, особенно для несимметричных матриц.

Конструктивный подход заключается в следующем: во-первых, в переходе к новой алгебраической задаче вида (метод обратной итерации с возмущением):

$$(A - I\sigma_k)Y_{k+1}^1 = BY_{k+1}^{1-1} + X_k, \\ X_{k+1} = \frac{Y_{k+1}^1}{\|Y_{k+1}^1\|_{1 \rightarrow \infty}}, \\ \sigma_k = \frac{(X_k, (A-B)X_k)}{(X_k, X_k)} = \sigma_{k-1} + \frac{(X_k, X_{k-1})}{(X_k, X_k)}, \quad (I8)$$

когда не требуется обращения матрицы B размерности $(N_d * N_\theta) \times (N_d * N_\theta)$. Для решения алгебраической задачи (I8) используем внутренний итерационный процесс по индексу l с матричной прогонкой, на каждом k -м шаге метода обратной итерации;

во-вторых, в предложении способа нахождения нулевого приближения для собственного вектора и соответствующего ему собственного значения, связанных со спецификой рассматриваемой задачи. Переход к адиабатическому пределу в уравнениях Фаддеева (7) позволит расщепить алгебраическую задачу большой размерности (I8) на последовательность N_ρ задач малой размерности $(N_\alpha * N_\theta)^2$, соответствующих для каждого фиксированного ρ_k уравнению

$$\left\{ -\frac{1}{\rho_k^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V_\alpha(\rho_k, \theta) + \sum_{\beta \neq \alpha} V_\beta^{(0)}(\rho_k, \theta) - \frac{1}{4\rho_k^2} - E(\rho_k) \right\} \tilde{U}_\alpha^{\lambda_e}(\rho_k, \theta) = -\hat{V}_\alpha(\rho_k, \theta) (\hat{h}_{\lambda_e, \lambda_e'}^L \tilde{U}^{\lambda_e'})_\alpha(\rho_k, \theta) \quad (I9)$$

с граничными условиями

$$\tilde{U}_\alpha(\rho_k, 0) = \tilde{U}_\alpha(\rho_k, \pi/2) = 0. \quad (20)$$

Переход к адиабатическому приближению (I9)–(20) обусловлен тем обстоятельством, что, как указывалось выше, гиперрадиус ρ является медленной переменной для "жестких" трехчастичных систем. В этом случае $E(\rho_k)$ имеет смысл адиабатической потенциальной кривой (терма), в которой происходит медленное вибрационное движение системы. Краевым задачам (I9)–(20) соответствует, как и раньше, алгебраическая задача типа (I6) при фиксированном значении ρ_k :

$$(\tilde{D}_k - I E(\rho_k)) \tilde{F}(\rho_k) = B_k \tilde{F}(\rho_k). \quad (2I)$$

Структура матриц \tilde{D}_k и B_k изображена на рис.2–3.

Для решения алгебраической задачи (2I) используем метод обратной итерации с возмущением (I8), обращая трехдиагональные матрицы \tilde{D}_k на внутренних итерациях по 1 при помощи обычной прогонки. Начальное приближение X_0 к собственному вектору в итерационном процессе (I8) есть прямая сумма $\oplus \tilde{F}(\rho_k)$, а приближенное собственное значение определяется из тождества Релея:

$$\bar{\epsilon}_\alpha = \frac{(X_0, (A-B) X_0)}{(X_0, X_0)}. \quad (22)$$

Тем самым вычислительная схема решения задачи (I6) с заданной точностью при помощи итерационной процедуры (I8) определяется полностью.

5. Результаты расчетов

На основе предложенного метода были проведены численные расчеты энергий связи и компонент Фаддеева для позитрония и мезомолекулы $tt\mu$.

(в последнем случае результаты носят предварительный характер). В численных расчетах для позитрония были выбраны следующие параметры конечно-разностной аппроксимации: $N_\rho = 70, N_\theta = 40, N_\alpha = 3$, максимальное значение гиперрадиуса, на котором задавалось граничное условие (8), $\rho_{\max} = 30$ а.е. Найденное значение энергии связи $E = -0,26608$ а.е. находится в хорошем согласии с результатами других работ (см. [2]). Расчетные кривые для адиабатического терма $E(\rho_k)$ и соответствующей радиальной функции $X(\rho_k)$, удовлетворяющей уравнению

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + E(\rho) \right) X(\rho) = \lambda X(\rho) \quad (23)$$

с граничными условиями

$$X(0) = X(\rho_{\max}) = 0, \quad (24)$$

где λ – собственное значение, отвечающее вибрационной энергии трехчастичной системы, приведены на рис.6. Отметим, что значение $\lambda = -0,2705$ дает хорошее приближение E_0 для энергии связи системы E , что позволяет использовать его в качестве начального приближения для итерационной процедуры (I8). Кроме того, в качестве начального приближения F_0 к собственному вектору F для задачи (I6) можно использовать тензорное произведение

$$F_0 = X \otimes \tilde{F}. \quad (25)$$

Расчетанные линии уровня для компонент Фаддеева U_α приведены на рис.7а–в. Развита в данной работе вычислительная схема впервые позволила провести расчеты физических характеристик более сложных трехчастичных систем. Для энергии связи мезомолекулы $tt\mu$ на сетке: $N_\rho = 20, N_\theta = 10$ с $\rho_{\max} = 15$ а.е. и полным числом уравнений $N_\alpha = 11$ было получено значение $E = -0,54637$ м.а.е., которое находится в хорошем согласии с вариационными расчетами [8].

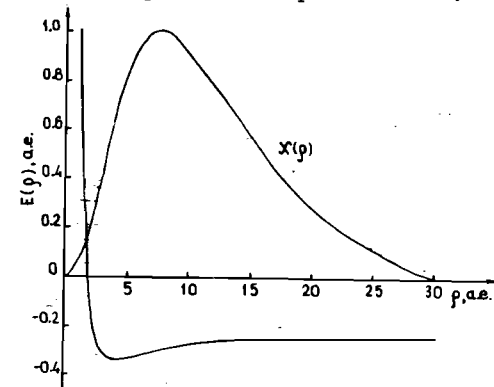


Рис.6. Адиабатический терм $E(\rho_k)$ и радиальная функция $X(\rho_k)$ для позитрония.

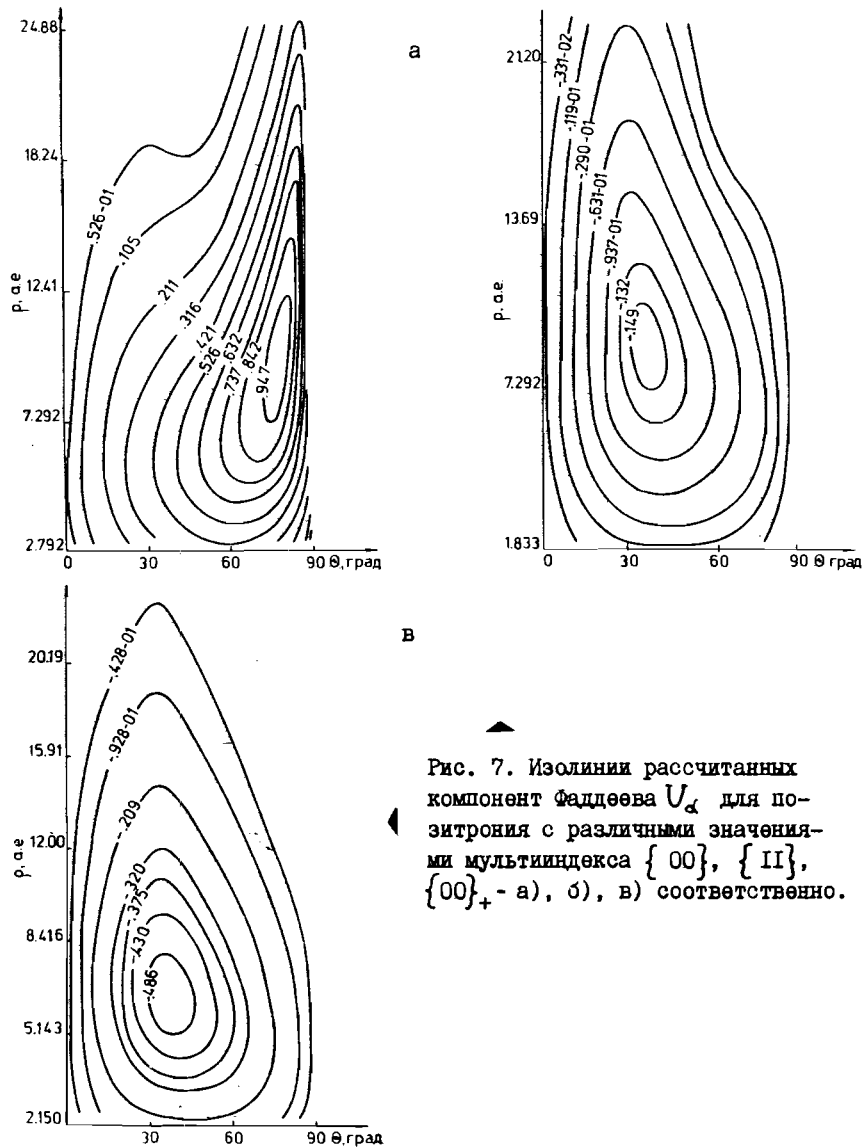


Рис. 7. Изолинии рассчитанных компонент Фаддеева U_α для позитрония с различными значениями мультиплетности $\{00\}$, $\{II\}$, $\{00\}_+$ - а), б), в) соответственно.

В настоящее время также проводятся расчеты энергии связи и компонент Фаддеева для ^3He . В ядерных системах, в отличие от кулоновских, традиционно возникает вопрос о выборе того или иного класса парных потенциалов (см., например, /9/). Предложенный подход позволя-

ет по-новому взглянуть на эту проблему, благодаря возможности легко получать дополнительную информацию о поведении потенциальных кривых (термов), радиальных функциях и компонентах Фаддеева в адиабатическом пределе (см. (19), (23) и (25)) и, следовательно, позволяет на качественном уровне решить вопрос о выборе того или иного класса парных потенциалов.

В заключение обсудим вопрос о скорости сходимости частичных разложений в бисферическом базисе

$$\Psi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) = \sum_{L, \lambda} \frac{U_\alpha^{\lambda l}(\rho_\alpha, \theta_\alpha)}{\rho_\alpha^{5/2} \sin \theta_\alpha \cos \theta_\alpha} Y_{L, \lambda l}(\hat{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha), \quad (26)$$

которые использовались в редукции уравнения (I) в \mathbb{R}^6 и уравнения (7) в \mathbb{R}_+^2 при учете конечного числа волн. Если перейти к полной волновой функции в фиксированной яковиевской паре

$$\Psi(x, y) = \sum_{\alpha=1}^3 \Psi_\alpha(x, y), \quad (27)$$

то ее можно использовать в тождестве Релея итерационной процедуры (18):

$$\tilde{b}_k = \tilde{b}_{k-1} + \frac{(\Psi_k(x, y), \Psi_{k-1}(x, y))}{(\Psi_k(x, y), \Psi_k(x, y))}, \quad (28)$$

где k - номер обратной итерации.

Данная формула обладает свойством монотонности как функция λ_{\max} и ρ_{\max} , что следует из вариационного принципа Релея для шредингеровской волновой функции. Таким образом, соотношение (28) позволяет в принципе контролировать сходимость итерационного процесса (18) при учете конечного числа парциальных волн и непосредственно решить вопрос о редукции из \mathbb{R}^6 в \mathbb{R}_+^2 .

Литература

1. Меркурьев С.П., Куперин Ю.А., Квицинский А.А. Модифицированные дифференциальные уравнения Фаддеева для системы n прр. Препринт ИФВЭ 82-161, Серпухов, 1982.

2. Квицинский А.А., Куперин Ю.А., Меркурьев С.П., Мотовилов А.К., Яковлев С.Л. Квантовая задача N тел в конфигурационном пространстве. ЭЧАЯ, 1986, т.17, вып.2, стр.267-317.
3. Payne A.L., Friar J.L., Gibson B.F. Phys.Rev., 1980, v. C22, p.823-831.
4. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. Наука, М., 1985, 398 с.
5. Виноцкий С.И., Дубовик В.М., Кадомцев М.Б., Марковский Б.Л., Сузько А.А. Адиабатическое представление задачи рассеяния в квантовой системе трех тел. Препринт ОИЯИ, P4-88-532, Дубна, 1988. Виноцкий С.И., Кадомцев М.Б., Сузько А.А. Адиабатическое представление задачи трех тел в гиперсферических координатах. Амплитуда рассеяния. Препринт ОИЯИ, P4-89-268, Дубна, 1989 г.
6. Kadomtsev M.B., Vinitzky S.I. J.Phys.B: At.Mol. Phys.1987, v.20, p.5723-5736.
7. Парлетт Б. Симметричная проблема собственных значений. Мир, М., 1983, 382 с.
8. Ruzynin I.V., Vinitzky S.I., Energy levels of mesic molecules. Muon Catalyzed Fusion 1988, v.3, p.307-320.
9. Machleidt R., Holinde K., Elster Ch. Phys.Rep. 1987, v.149, N.1, 89 p.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 августа 1989 года.

Виноцкий С.И. и др. P4-89-558
Матричная структура уравнений Фаддеева
в координатном пространстве

Предложена новая вычислительная схема решения уравнений Фаддеева для системы трех заряженных частиц в координатном пространстве. Дискретная аппроксимация интегральных операторов основана на известном представлении с использованием фундаментальных сплайнов. Выбрана матричная структура, которая согласована с адиабатическим пределом уравнений Фаддеева. Итерационная схема реализует метод обратных итераций со сдвигом от начальных приближений, полученных в адиабатическом пределе. Линейная задача на каждой итерации решается методом матричной прогонки. В рамках данного подхода впервые проведен расчет связанного состояния мезомолекулы $tt\bar{t}$. Для иона позитрония Ps^+ наряду с изолиниями фаддеевских компонент представлены графики адиабатического термина и соответствующего радиального решения.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Vinitzky S.I. et al. P4-89-558
Matrix Structure of Faddeev Equations
in Coordinate Space

A new computational scheme for the solution of Faddeev equations for three charged particles in the coordinate space is suggested. A discrete approximation of integral operators is based on the known representation in terms of the fundamental splines. The matrix structure is selected in agreement with the adiabatic limit of Faddeev equations. The iteration scheme realizes the inverse iteration method with a shift and initial approximations, obtained in the adiabatic limit. The linear problem at each iteration is solved by the alternation-direction implicit method. This approach is firstly applied to compute the bound state of the mesomolecule $tt\bar{t}$. For the positronium ion Ps^+ together with the isolines of Faddeev components, the plots of the adiabatic term and the corresponding radial solution are presented.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989