сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-90-135

В.Б.Беляев, В.И.Кочкин

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА ДЛЯ СВЯЗАННОГО СОСТОЯНИЯ ТРЕХ БЕССПИНОВЫХ ЧАСТИЦ МЕТОДОМ КОНЕЧНОМЕРНОЙ АППРОКСИМАЦИИ

1990

Уравнение Фаддеева для связанного состояния трех тождественных бесспиновых частиц с S -волновым парным потенциалом взаимодействия имеет вид /I/:

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+E-V(x)\left(1+\hat{K}\right)\right]\Psi(x,y)=0, \qquad (I)$$

$$\hat{K}\Psi(x,y)=xy\int_{-1}^{+1}\frac{dv}{x'y'}\Psi(x',y'), \qquad (2)$$

$$x'=\tfrac{1}{2}\sqrt{x^2-2\sqrt{3}\,xyv+3y^2}, \qquad (3)$$

$$y'=\tfrac{1}{2}\sqrt{y^2+2\sqrt{3}\,xyv+3x^2}. \qquad (4)$$

Граничные условия:

$$\Psi(0,y)=\Psi(x,0)=\Psi(x,\infty)=\Psi(\infty,y)=0. \qquad (5)$$

Вводя обозначения

$$E=-k^2,\quad V(x)=-V_0 v(x),\quad v(x)=e^{-\beta x^2}, \qquad (6)$$

для уравнения (I) получаем

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-k^2+v(x)\left(1+\hat{K}\right)\right]\Psi(x,y)=0. \qquad (7)$$

Вводя операторы

$$W=v(x)\left(1+\hat{K}\right)-k^2, \qquad (8)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \tag{9}$$

окончательно имеем

$$(\Delta + W)\psi = 0. \tag{10}$$

Суть метода конечномерной аппроксимации /2,3–5/ состоит в замене

$$\Delta \sim \tilde{\Delta} \tag{11}$$

таким образом, чтобы

$$\tilde{\Delta}\,\Delta^{-1}\chi_i = \chi_i, \quad i = 1,2,\dots,M. \tag{12}$$

Выбираем счетный базис пробных функций χ_i так, чтобы

$$\psi = W^{-1}\left(\sum_{i=1}^{M} c_i \chi_i\right), \quad M = 1,2,\dots \tag{13}$$

или, переходя к функциям φ_i :

$$\chi_i = W\varphi_i, \tag{14}$$

для искомого решения получаем разложение

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\psi} = \sum_{i=1}^{M} c_i \varphi_i, \tag{15}$$

где c_i – неизвестные, определяемые в расчете константы.
Из уравнения (10) с помощью соотношений (12),(13,(14) получаем систему алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^{M} A_{\ell i}(k^2)\, c_i = 0, \tag{16}$$

где

$$A_{li} = \langle \varphi_l | w + w\Delta^{-1} w | \varphi_i \rangle. \tag{17}$$

Для того, чтобы уравнение (16) имело нетривиальное решение, надо, чтобы

$$\det A_{li}(k^2) = 0. \tag{18}$$

Из этого же условия (18), решая его как нелинейное уравнение относительно k^2, находим, с заданной точностью, собственное значение k^2, проводя отбор оптимального искомого решения с помощью функционалов оценки метода конечномерной аппроксимации (см. ниже).

Функции φ_i выбирались в форме:

$$\varphi_i(x,y) = \Phi_i(\rho)\,\eta_{n_i}(\alpha), \tag{19}$$

$$\Phi_i(\rho) = e^{-\alpha_i \rho}\left(1 - e^{-\alpha_i \rho}\right)^{n_i}, \tag{20}$$

$$\eta_{n_i}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin 2 n_i \alpha, \tag{21}$$

$$\rho = \sqrt{x^2+y^2}, \quad \alpha = \operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right), \tag{22}$$

$$\Delta^{-1} = g(x,y,x',y') = \frac{1}{4\pi} \ln \frac{\left[(x-x')^2+(y-y')^2\right]\left[(x+x')^2+(y+y')^2\right]}{\left[(x-x')^2+(y+y')^2\right]\left[(x+x')^2+(y-y')^2\right]}. \tag{23}$$

Элементы матрицы $|A_{li}|$ имеют вид

$$A_{li} = k^4 R_{li} - k^2 Q_{li} + P_{li}, \tag{24}$$

$$R_{li}=\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty dx\,dy\,dx'dy'\,\varphi_l(x,y)\varphi_i(x',y')\,g(x,y,x',y'), \tag{25}$$

$$Q_{li}=\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty dx\,dy\,dx'dy'\,\varphi_l(x,y)\varphi_i(x',y')\,g(x,y,x',y')\left[v(x)(1+\lambda_{n_l})+v(x')(1+\lambda_{n_i})\right]-\int_0^\infty\int_0^\infty dx\,dy\,\varphi_l(x,y)\varphi_i(x,y), \tag{26}$$

где $$\lambda_{n_k}=\frac{4}{\sqrt{3}\,n_k}\sin\frac{2}{3}\pi n_k,$$

$$P_{li}=\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty dx\,dy\,dx'dy'\,\varphi_l(x,y)\varphi_i(x',y')\,g(x,y,x',y')\,v(x')(1+\lambda_{n_i})\,v(x)(1+\lambda_{n_l})+\int_0^\infty\int_0^\infty dx\,dy\,\varphi_l(x,y)\varphi_i(x,y)\,v(x)(1+\lambda_{n_i}). \tag{27}$$

Алгоритм расчета состоит в следующем.

Для определенного числа пробных функций M (I,2,3, ...):

I. Задаем значения параметров α_i (см. формулу (20)).

2. Вычисляем коэффициенты P_{li}, Q_{li}, R_{li}.

3. Решаем нелинейное уравнение (I8) на отрезке

$$0{,}01 \leqslant k^2 \leqslant 1{,}0.$$

Если корня нет, возвращаемся в пункт I. Если корни определяются, то для каждого из них вычисляем функционал оценки, например, в виде

$$F_1 = \frac{\langle \tilde{\phi} | \Delta - \tilde{\Delta} | \tilde{\phi} \rangle^2}{\langle \tilde{\phi} | \Delta | \tilde{\phi} \rangle^2} . \qquad (28)$$

Запоминаем значения функционалов и переходим в пункт I.

4. Обработав достаточный массив параметров α_i или организовав случайную выборку из области их определения, принимаем значение k^2, соответствующее минимальному значению F_1, за искомое решение.

Численные результаты для $M = I$ сведены и представлены в таблице I, когда расчет проводится в полярных координатах (ρ , α) с аппроксимацией функции Грина и потенциала $V(x)$, и в таблице 2, когда расчет проводится в декартовых координатах (x, y) без аппроксимации g и $V(x)$, причем возникающие многомерные интегралы вычисляются методом Монте - Карло , либо с помощью генератора псевдослучайных чисел RNDM(-1) для ЭВМ БЭСМ-6, либо с помощью стандартной п/п LPTAU квазислучайных чисел по методу И.М. Соболя (см. /6/).

Для сравнения эффективности п/п RNDM(-1.) и п/п LPTAU при вычислении многомерных интегралов было проведено вычисление двумерных интегралов P , Q , R для расчета энергии связи двух частиц тремя способами (метод Симпсона служит эталоном при сравнении). Результаты сведены в таблицу 3. При относительной точности $\varepsilon = 10^{-I}$ из таблицы 3 видно, что по затратам машинного времени п/п LPTAU не менее чем в два раза эффективнее п/п RNDM(-1.) для выбора оптимального решения.

Таблица I. Метод Симпсона. $\varepsilon = 10^{-1}$

a_1	k^2	F_1
0,10	–	
0,15	–	
0,20	–	
0,25	–	
0,30	–	
0,40	–	
0,45	–	
0,48	0,3125	0,38598
0,50	0,2757	0,38519
0,5250	0,2457	0,41048
0,5375	0,2323	0,422218
0,55	0,2194	0,42932
0,60	0,1166	0,426942
0,65	–	
0,70	–	
0,75	–	
0,80	–	
0,90		
1,00		
1,2		
2,0		

Таблица 2

Метод Монте - Карло, п/п LPTAU , число испытаний = I000

a_1	k^2	F_1	
0,I	нет корня	–	
0,2	–	–	
0,3	0,4556	0,520I54	
0,4	0,8458	0,789735	
0,5	–	–	
0,6	–	–	
0,23	0,04I4	$I,2 \cdot I0^{-2}$	
0,24	0,2I454	0,252I67	
0,25	0,2543I28	0,305I06	
0,26	0,29398	0,3548	
0,27	0,33404	0,40II776	

Таблица 3

Число испытаний	Счетное время (сек)	Рассмотрен случай M=I, a_1 = 0,25 для задачи на собственные значения для 2-х частиц: P	Q	R	
I000	2^{I}	$-I,2078824 \cdot I0^{-2}$	$8,5005488 \cdot I0^{-I}$	$-I,495226 \cdot I0^{I}$	п/п
I0000	30^{I}	$-6,9043579 \cdot I0^{-3}$	$+8,II64525 \cdot I0^{-I}$	$-I,46I34 \cdot I0^{2}$	LPTAU
I000	<< I	$-47I99499 \cdot I0^{-2}$	+I,0794649	$-I,474I229 \cdot I0^{I}$	п/п
I0000	I^{I}	$5,I73855 \cdot I0^{-3}$	$+7,848638 \cdot I0^{-I}$	$-I,4649 \cdot I0^{I}$	RNDM
I00000	5^{I}	$-7,I2726 \cdot I0^{-3}$	$7,99I6 \cdot I0^{-I}$	$-I,432868\ I0^{I}$	
		$-8,0052 \cdot I0^{-3}$	$8,408I4 \cdot I0^{-I}$	$-I,4627\ I0^{I}$	Метод Симпсона $=I0^{-I}$

Литература

1. Merkuriev S.P., Gignoux G., Laverne A.-Ann.Phys., 1976, 99, p.30.
2. V.B.Belyaev, O.I.Kartavtsev, J.Comp.Phys., 59, 493 (1985). В.Б.Беляев, О.И.Картавцев. ОИЯИ, Р4-84-28, Дубна, 1984.
3. В.Б.Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин. ОИЯИ, Р4-84-793, Дубна, 1984.
4. В.Б.Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин. ОИЯИ, Р4-85-816, Р4-86-573, Р4-88-574, Дубна, 1985, 1986, 1988.
5. Proceedings of the X European Symposium on the dynamics of few-body systems, 3-7 June, 1985, Hungary, pp.152-153; D4-87-237, ОИЯИ, 1987, стр.36.
6. И.М.Соболь, Р.Б.Статников. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. "Наука", Москва, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 февраля 1990 года.