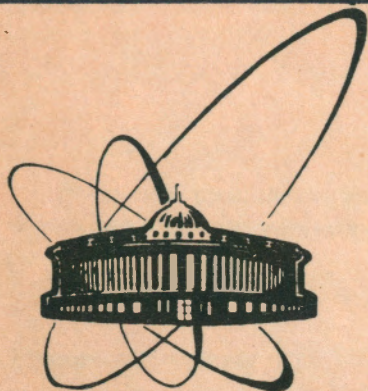


91-254



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-91-254

В.Б.Беляев, О.И.Картавцев*, В.И.Кочкин

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА
ДЛЯ СИСТЕМЫ ТРЕХ ТОЖДЕСТВЕННЫХ
БЕССПИНОВЫХ ЧАСТИЦ

Направлено в сборник трудов Университета, Тверь

*Ташкентский государственный университет

1991

Алгоритм решения уравнений Фаддеева для системы
трех тождественных бесспиновых частиц

Создана математическая программа на языке Фортран для решения однородного уравнения Фаддеева на определение энергии связи 3 бесспиновых тождественных частиц. В основе численного метода лежит конечно-мерная аппроксимация дифференциального оператора, впервые использованная авторами в данном цикле исследований. В работе проведено обстоятельное исследование погрешности метода и погрешности промежуточных вычислений. Задача носит более методический характер, но может быть применена к решению многих конкретных квантово-механических проблем системы нескольких тел.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод авторов

The Algorithm for the Solution of the Faddeev Equation
for a System of Three Identical Spinless Particles

The homogeneous Faddeev equation for three identical spinless particles is numerically solved for finding the binding energy. The algorithm based on the finite-dimensional approximation of the differential operator. Estimation of errors of this method has been analysed exactly. This task has a more methodical character, but can be applied to the solution of many specific problems of quantum mechanics for a few-body system.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Решается уравнение Фаддеева^{1,2'} на определение энергии связи в системе 3 тождественных бесспиновых частиц:

$$[\Delta + E - V(x) (1 + \hat{K})] \psi(x, y) = 0. \quad (1)$$

Граничные условия имеют вид

$$\psi(0, y) = \psi(x, 0) = \psi(x, \infty) = \psi(\infty, y) = 0, \quad (2)$$

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}, \quad (3)$$

$$V(x) = -V_0 v(x), \quad v(x) = e^{-\beta x^2}, \quad (4)$$

$$\hat{K} \psi(x, y) = xy \int_{-1}^{+1} \frac{dv}{x' y'} \psi(x', y'), \quad (5)$$

$$x' = \frac{1}{2} \sqrt{x^2 - 2\sqrt{3} x y v + 3y^2}, \quad y' = \frac{1}{2} \sqrt{y^2 + 2\sqrt{3} x y v + 3x^2}. \quad (6)$$

В безразмерных единицах уравнение (1) принимает вид

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \kappa^2 + v(x) (1 + \hat{K}) \right] \psi(x, y) = 0 \quad (7)$$

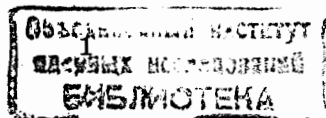
с теми же граничными условиями, как и в (2).

Вводим полярные координаты ρ, α :

$$x = \rho \cos \alpha, \quad y = \rho \sin \alpha, \quad (8)$$

$$\phi(\rho, \alpha) = \sqrt{\rho} \psi(x, y), \quad (9)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{4} \right) - \kappa^2 + v(\rho \cos \alpha) (1 + \hat{K}) \right] \phi(\rho, \alpha) = 0. \quad (10)$$



с граничными условиями:

$$\Phi(\rho, 0) = \Phi(\rho, \frac{\pi}{2}) = \Phi(\infty, \alpha) = 0. \quad (11)$$

Интегральный оператор \hat{K} действует только на угловую переменную α . Его свойства описываются заданием нормированных собственных функций $\eta_n(\alpha)$ и собственных значений λ_n :

$$\hat{K} \eta_n = \lambda_n \eta_n, \quad (12)$$

$$\eta_n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin 2n\alpha, \quad (13)$$

$$\lambda_n = \frac{4}{\sqrt{3}n} \sin \frac{2}{3} \pi n. \quad (14)$$

Методом конечномерной аппроксимации (проекторный метод типа метода Галеркина) ^{/11,12/} решение уравнения (10) ищем в виде

$$\Psi(x, y) = \sum_{i=1}^M c_i \phi_i(\rho, \alpha), \quad (15)$$

c_i — числовые коэффициенты,

$$\phi_i(\rho, \alpha) = \Phi_i(\rho) \eta_{n_i}(\alpha) = \rho^{1/2} e^{-a_i \rho} (1 - e^{-a_i \rho})^{n_i} \eta_{n_i}(\alpha). \quad (16)$$

Суть метода конечномерной аппроксимации ^{/3-10/} состоит в следующем: для уравнения

$$(\Delta + W) |\Phi\rangle = 0 \quad (17)$$

производим замену

$$\Delta \sim \tilde{\Delta} \quad (18)$$

так, что

$$\tilde{\Delta} \Delta^{-1} |\chi_i\rangle = |\chi_i\rangle, \quad i=1, \dots, M. \quad (19)$$

Решение уравнения (17) ищем в виде

$$|\Phi\rangle = W^{-1} \sum_{i=1}^M c_i |\chi_i\rangle = \sum_{i=1}^M c_i |\phi_i\rangle, \quad (20)$$

$$|\phi_i\rangle = W^{-1} |\chi_i\rangle, \quad \text{или} \quad |\chi_i\rangle = W |\phi_i\rangle, \quad (21)$$

$$(\tilde{\Delta} + W) |\Phi\rangle = 0. \quad (22)$$

Проектируем уравнение (22) на $\Delta^{-1} |\chi_i\rangle$, $i=1, \dots, M$; получим

$$\sum_{i=1}^M c_i \langle \chi_i | \Delta^{-1} + W^{-1} | \chi_i \rangle = 0, \quad (23)$$

или

$$\sum_{i=1}^M A_{\rho i} c_i = 0, \quad (24)$$

$$A_{\rho i} = \langle \phi_i | W \Delta^{-1} W + W | \phi_i \rangle. \quad (25)$$

Ошибка аппроксимации $\Delta \sim \tilde{\Delta}$ определяется с помощью функционала

$$F_1 = \frac{\langle \Phi | \Delta - \tilde{\Delta} | \Phi \rangle^2}{\langle \Phi | \Delta | \Phi \rangle^2}, \quad (26)$$

$$A_{\rho i} = \int_0^\infty \int_0^\infty d\rho d\rho' \Phi_\rho(\rho) \Phi_i(\rho') \sum_{m=1}^N [v_{n_\rho m}(\rho) (1 + \lambda_{n_\rho}) - \kappa^2 \delta_{n_\rho m}^2] g_m(\rho, \rho') [v_{m n_i}(\rho') (1 + \lambda_{n_i}) - \kappa^2 \delta_{m n_i}^2] + \int_0^\infty d\rho \Phi_\rho(\rho) \Phi_i(\rho) [v_{n_\rho n_i}(\rho) (1 + \lambda_{n_i}) - \kappa^2 \delta_{n_\rho n_i}^2], \quad (27)$$

$$\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{4} \right), \quad \Delta_1^{-1} = G_1(\rho, \rho', \alpha, \alpha') = \sum_{n=1}^\infty \eta_n(\alpha) \eta_n(\alpha') g_n(\rho, \rho'), \quad (28)$$

$$g_n(\rho, \rho') = -\frac{\sqrt{\rho\rho'}}{4n} \left[\frac{\min(\rho, \rho')}{\max(\rho, \rho')} \right]^{2n}, \quad (29)$$

$$v_{nm}(\rho) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\alpha \sin 2m\alpha \sin 2n\alpha e^{-\beta \rho^2 \cos^2 \alpha}, \quad (30)$$

$$\det A(\kappa^2) = 0, \quad (31)$$

$$A_{\ell i} = P_{\ell i} + \kappa^2 Q_{\ell i} + \kappa^4 R_{\ell i}, \quad (32)$$

$$R_{\ell i} = \delta_{n_{\ell} n_i} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d\rho d\rho' \Phi_{\ell}(\rho) \Phi_i(\rho') g_{n_{\ell}}(\rho, \rho'), \quad (33)$$

$$Q_{\ell i} = - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d\rho d\rho' \Phi_{\ell}(\rho) \Phi_i(\rho') [v_{n_{\ell} n_i}(\rho) (1 + \lambda_{n_{\ell}}) g_{n_{\ell}}(\rho, \rho') + v_{n_{\ell} n_i}(\rho') (1 + \lambda_{n_i}) g_{n_{\ell}}(\rho, \rho')] - \delta_{n_{\ell} n_i} \int_0^{\infty} d\rho \Phi_{\ell}(\rho) \Phi_i(\rho), \quad (34)$$

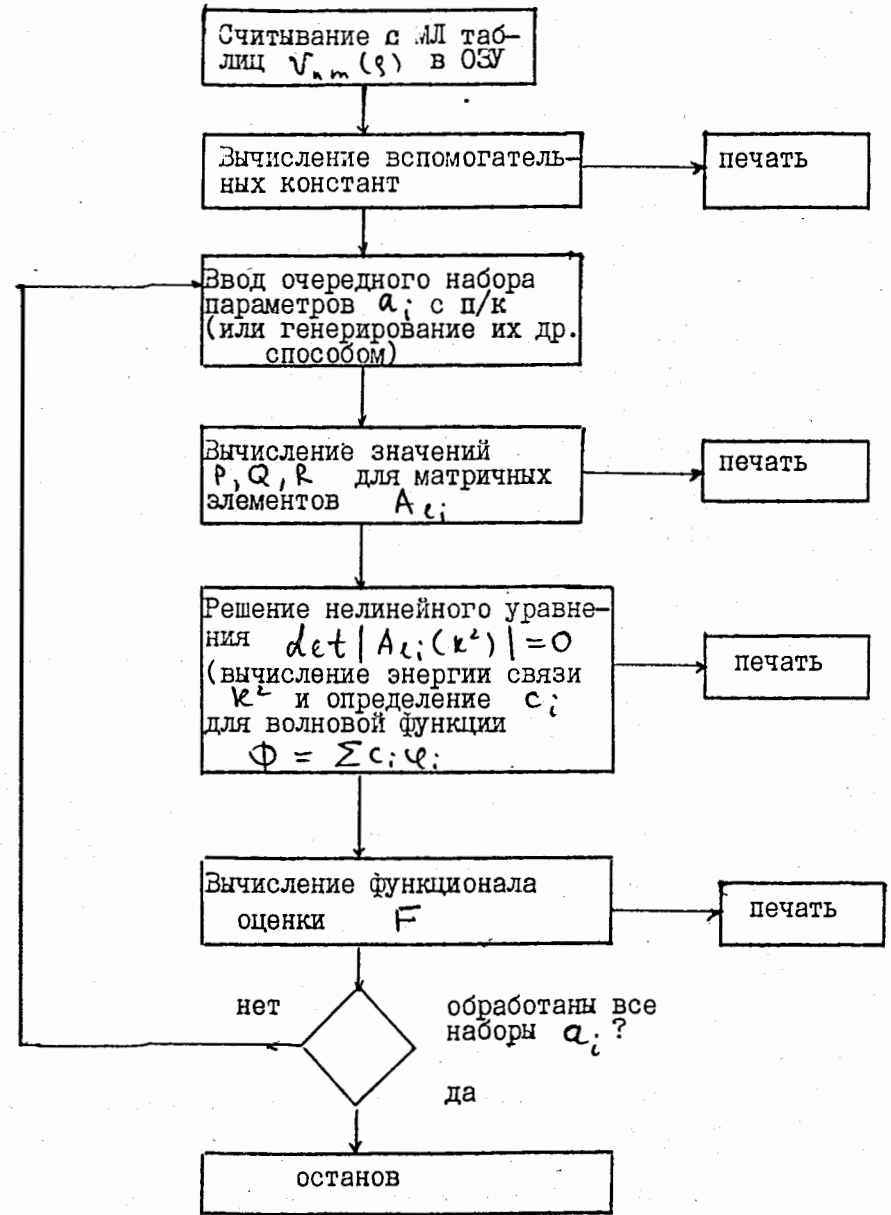
$$P_{\ell i} = (1 + \lambda_{n_{\ell}}) (1 + \lambda_{n_i}) \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d\rho d\rho' \Phi_{\ell}(\rho) \Phi_i(\rho') \times \sum_{m=1}^N v_{n_{\ell} m}(\rho) v_{m n_i}(\rho') g_m(\rho, \rho') + (1 + \lambda_{n_i}) \int_0^{\infty} d\rho \Phi_{\ell}(\rho) \Phi_i(\rho) v_{n_{\ell} n_i}(\rho), \quad (35)$$

$$\langle \phi_i | \Delta_1 | \phi_{\ell} \rangle = \delta_{n_i n_{\ell}} \int_0^{\infty} d\rho \left[\frac{1}{\rho^2} \left(\frac{1}{4} - 4n_i^2 \right) \Phi_i(\rho) \Phi_{\ell}(\rho) - \frac{\partial \Phi_i}{\partial \rho} \frac{\partial \Phi_{\ell}}{\partial \rho} \right], \quad (36)$$

$$\langle \Phi | \Delta - \tilde{\Delta} | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^M \sum_{\ell=1}^M c_i c_{\ell} \langle \phi_i | \Delta + W | \phi_{\ell} \rangle, \quad (37)$$

$$F = \frac{\langle \Phi | \Delta_1 - \tilde{\Delta} | \Phi \rangle^2}{\langle \Phi | \Delta_1 | \Phi \rangle^2}, \quad (38)$$

$$\Phi = \sum_{i=1}^M c_i \phi_i. \quad (39)$$



Принципиальная блок-схема программы S3E

Вычисление матричных элементов $A_{\rho i}$ ведется по стандартной п/п SIMPS (метод Симпсона) с автоматическим выбором шага интегрирования для заданной (в нашей задаче) относительной точности $REPS = 10^{-1}$, или 10^{-2} , или 10^{-3} (по усмотрению пользователя).

Таблица $v_{nm}(\rho)$, которая хранится на МЛ (магнитная лента) и при работе программы S3E считывается в оперативную память (ОЗУ), вычислена для $0 \leq \rho \leq 30$ с шагом $h = 0,01$, что позволяет при использовании кубической интерполяции вычислять элементы матрицы $A_{\rho i}$ с максимальной возможной для данной программы относительной точностью $\epsilon_{отн.} = 10^{-3}$.

Пример результатов вычислений по программе S3E

a_1	a_2	a_3	κ^2	F	κ^2	F
0,2	0,5	0,7	0,2641	$4,5 \cdot 10^{-3}$	0,4677	$3,4 \cdot 10^{-1}$
0,2	0,5	0,75	0,2369	$2,2 \cdot 10^{-2}$	0,5605	$6,5 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,5	0,75	0,2328	$3,5 \cdot 10^{-2}$	0,6319	$7,7 \cdot 10^{-1}$

Для набора (0,2; 0,5; 0,7) $\left\{ \begin{array}{l} c_1 = 1,0 \\ c_2 = -6,762 \\ c_3 = 4,664. \end{array} \right.$

Уместно сделать еще несколько замечаний. Во-первых, явный вид оператора Δ не выписывается, существование Δ^{-1} для Δ постулируется. Во-вторых, т.к. решение уравнения Фаддеева ищется в виде

$$\Psi = \sum_{i=1}^M c_i \phi_i(x, y),$$

как разложение Галеркина^{11, 12}, где M — конечная величина, то счет по программе S3E при нахождении κ^2 и волновой функции $\Psi(x, y)$ идет в зависимости от M .

В нашей задаче $0,1 \leq a_i \leq 1,0$; $0,4 \leq \kappa^2 \leq 1,00$; для других задач, естественно, области, в которых лежат искомые величины и параметры, могут быть другими. Поэтому при $M = 1$ нет проблем в минимизации функционала по единственному параметру a_i : отрезок $[0,1; 1,0]$ просто проходит с постоянным шагом и значение κ^2 для $\min F$ принимается за решение. При $M = 2$ уже нужно применять либо прием покоординатного

спуска, либо использовать иные методы минимизации. Очень эффективным оказывается прием покоординатного спуска. Например, фиксируем $a_2^{фикс.}$ и a_1 заставляем принимать значение из отрезка $[0,1; 1,0]$, по $\min F_1$ находим точку $(a_1^*, a_2^{фикс.})$. Теперь a_1^* фиксируем, а параметр a_2 заставляем пробегать ряд значений из отрезка $[0,1; 1,0]$, найдем точку по $\min F_1$ (a_1^*, a_2^*), фиксируем a_2^* и a_1 выбираем из того же отрезка $[0,1; 1,0]$, и т.д. Такой процесс в зависимости от $\min F_1$ очень быстро сходится (приводит к единственной точке при данном шаге по параметрам a_i).

Для $M = 3$ уже единственным эффективным (практически) в нашей задаче оказывается лишь метод покоординатного спуска. Далее, исследуя сходимость задачи в зависимости от параметра M , мы должны были бы, как будто, считать для $M = 4, 5, \dots$, но дальнейший численный эксперимент выявляет для задачи на собственные значения (однородное уравнение Фаддеева) замечательное обстоятельство, что, если зафиксированы концы интервалов изменения параметров a_i (a_n, a_k), то после того, как найдены для этого интервала корни κ^2 при $M = 3, 4$, дальнейшее добавление числа пробных функций (увеличение параметра M) не дает новых собственных значений (при заданных условиях), т.е. наблюдается очень быстрая сходимость конечномерной аппроксимации по M (число пробных функций). И, в-третьих, время счета на ЭВМ CDC-6500 с вполне приемлемой точностью $A_{\rho i}$ $\epsilon_{отн.} = 10^{-2}$ для одного набора параметров a_i при $M = 3$ составляет $t' = 6$ мин, а при $\epsilon = 10^{-3}$ (максимально допустимая в нашей задаче точность, конкретно для CDC-6500)¹⁴ $t' = 25$ мин, что, вообще говоря, мы считаем для таких сложных задач вполне приемлемым и даже рентабельным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Merkuriev S.P., Gignoux G., Laverne A. — Ann.Phys., 1976, 99, p.30.
2. Merkuriev S.P., Yakovlev A.L., Gignoux G. — Nucl.Phys.A, 1984, 431, p.125.
3. Belyaev V.B., Kartavtsev O.I. — Journ.of Comp.Phys., 1985, v.59, p.493; (То же: Беляев В.Б., Картавец О.И. — ОИЯИ, Р4-84-28, Дубна, 1984).
4. Беляев В.Б., Картавец О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-84-793, Дубна, 1984.
5. Беляев В.Б., Картавец О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-85-816, Дубна, 1985.
6. Беляев В.Б., Картавец О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-86-573, Дубна, 1986.
7. Беляев В.Б., Картавец О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-88-574, Дубна, 1988.
8. Беляев В.Б., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-90-135, Дубна, 1990.
9. Международное совещание по теории малочастичных и кварк-адронных систем. Дубна, 16-20 июня 1987 г. ОИЯИ, Д4-87-237, Дубна, 1987, с.36.
10. Proceedings of the X European Symposium on the Dynamics of Few-Body Systems, 3-7 June, 1985, Balatonfured, Hungary, p.152.

11. Канторович Л.В., Крылов В.И. — Приближенные методы высшего анализа. М.-Л.: ГИТТЛ, 1950, с.275.
12. Березин И.С., Жидков Н.П. — Методы вычислений. М.: Физматгиз, 1959, т.2.
13. Язык Фортран (под ред.В.П.Ширикова). ОИЯИ, ЛВТА, 1969.
14. Ширикова Н.Ю. — ОИЯИ, Р11-11739, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июня 1991 года.