

УДК 530.145, 519.1+519.6

МЕТОДЫ СПЛАЙН-ФУНКЦИЙ В ПРОБЛЕМЕ НЕСКОЛЬКИХ ТЕЛ

В. В. Пупышев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	257
ИНТЕГРАЛЬНЫЕ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА	259
ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О СПЛАЙНАХ	274
ДИСКРЕТНЫЕ АНАЛОГИ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА В БИСФЕРИЧЕСКОМ БАЗИСЕ	294
НОВЫЕ ЭТАЛОННЫЕ РЕШЕНИЯ	324
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	342
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	344

УДК 530.145, 519.1+519.6

МЕТОДЫ СПЛАЙН-ФУНКЦИЙ В ПРОБЛЕМЕ НЕСКОЛЬКИХ ТЕЛ

В. В. Пупышев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В обзоре обсуждаются преимущества фаддеевской дифференциальной формулировки задачи трех квантовых частиц, дается введение в теорию сплайн-функций, анализируются известные и предлагаются новые сплайн-алгоритмы решения уравнений Фаддеева в бисферическом базисе. Особое внимание уделяется проблемам поточечной сплайн-аппроксимации и тестирования сплайн-алгоритмов.

In the review, the advantages of the Faddeev differential formulation of three-body problem are discussed, an introduction into the spline-function theory is given, known and new spline-algorithms for solving the Faddeev equations in the bispherical basis are analyzed and proposed. A special attention is paid to the problems of the point-by-point spline-approximation and a testing of the spline-algorithms.

*Светлой памяти
С. П. Меркурьева
посвящается*

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, исследования Л. Д. Фаддеева [1, 2] и О. Я. Якубовского [3] оказались фундаментом для становления математически корректной теории рассеяния для систем нескольких частиц [4, 5], подчиняющихся законам квантовой механики [6]. Дифференциальная формулировка этой теории неразрывно связана с именем профессора Станислава Петровича Меркурьева. Его основополагающий вклад [7–15] в спектральную теорию дифференциальных уравнений Фаддеева [5–18] для систем нескольких нейтральных [7] и заряженных [8–15] частиц и его вклад [7, 19–24] в развитие численных методов решения таких уравнений невозможно переоценить. К этим методам относятся алгоритмы [5, 7, 19–22, 25–29], стартующие с классической конечно-разностной аппроксимации дифференциальных операторов [31, 32], и алгоритмы [24, 33–47], основанные на сплайн-функциях [32, 48–52]. Сравнительный анализ сплайн-алгоритмов [33–39] решения двумерных уравнений Фаддеева в координатном пространстве и описание новых модификаций этих алгоритмов — главная цель настоящей работы, написанной в па-

мать о С. П. Меркурьеве и продолжающей серию обзоров [53–56], посвященных соответственно дальнедействующим потенциалам [53], низкоэнергетическим асимптотикам [54], аналитическим методам [55] и особым разложениям [56] в проблеме нескольких квантовых частиц. Анализ сплайн-алгоритмов [24, 40–47] решения трехмерных дифференциальных уравнений Фаддеева предполагается дать в следующем обзоре. Большинство обозначений, принятых в предыдущих обзорах [53–56] и других работах [35–37, 57–69] автора, посвященных функциональным и асимптотическим разложениям для уравнений Фаддеева в координатном пространстве, сохранены в настоящем обзоре.

Данный в разд. 1 краткий хронологический обзор развития квантовой теории рассеяния для систем нескольких частиц, стартующей с основополагающих работ Л. Д. Фаддеева [1, 2] и О. Я. Якубовского [3], представляется необходимым по двум причинам: во-первых, для пояснения преимуществ уравнений Фаддеева–Якубовского по сравнению с многочастичным уравнением Шредингера и некоторыми его переформулировками; во-вторых, для последующего сравнительного анализа сплайн-алгоритмов решения двумерных уравнений Фаддеева в координатном пространстве трех частиц.

Для сравнения алгоритмов необходимо введение в теорию сплайнов. Разд. 2 предлагается читателю как элементарное введение, написанное в виде изложения известных, но избранных, принципиально важных с вычислительной точки зрения свойств сплайнов [32, 48–52].

Чтобы максимально расширить круг возможных читателей, в разд. 3 описаны только алгоритмы решения самой простой двумерной трехчастичной задачи, а именно задачи на связанное состояние трех тождественных бозонов с нулевым полным угловым моментом. Такое ограничение ни в коей мере не сужает общность последующих выводов, но существенно упрощает и последовательное описание, и понимание преимуществ и недостатков известных дискретных аналогов [7, 19–27, 33–47] дифференциальных уравнений Фаддеева. Для этих аналогов до сих пор не установлены ни критерий, ни достаточные условия какой-либо сходимости вычисляемого на заданной сетке узлов решения к искомому. До тех пор пока теоремы сходимости не доказаны, представляется актуальным и необходимым численное тестирование дискретных аналогов на поточечную сходимость.

В п. 3.7 представлены оригинальные результаты одного из возможных тестов двух сплайн-алгоритмов [36, 37]. Тест заключается в поточечном сравнении вычисленных решений задачи трех частиц с потенциалами центробежного типа с известными точными решениями [66] этой же задачи. Таким образом, демонстрируется прикладная значимость точных решений уравнений Фаддеева как эталонных для отладки и анализа численных алгоритмов.

В разд. 4 выводятся новые точные решения дифференциальных уравнений Фаддеева и одномерного уравнения Шредингера, возникающего при расшире-

нии [64–67] дифференциальной формулировки задачи трех частиц на случай взаимодействий центробежного типа.

В настоящем обзоре особое внимание уделено тем вопросам, которые физики-теоретики, из-за желания иметь дело с максимально простой численной схемой, обычно не обсуждают. Сформулируем два таких вопроса: соответствует ли вычисленное решение искомому физическому решению, каковы порядки *поточечной* сходимости вычисляемого решения и его производных к точному решению и его соответствующим производным в разных областях изменения аргументов?

Для большей ясности анализа довольно объемного материала обсуждаемые свойства сплайнов и сплайн-алгоритмов поясняются авторскими замечаниями, методическими примерами и рисунками.

1. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА

Как подробно пояснено в монографии [4], основное препятствие, задержавшее обобщение спектральной теории для оператора Шредингера

$$H = H_0 + V, \quad V = \sum_{i < j} V_{ij}$$

на случай трех и более квантовых частиц p_1, p_2, \dots, p_N со свободным гамильтонианом H_0 и парными взаимодействиями V_{ij} , $i < j = 1, 2, \dots, N$, связано с нефредгольмовостью уравнений Липпмана–Швингера для состояний рассеяния и для резольвенты $R \equiv (H - z)^{-1}$:

$$R(z) = R_0(z) - R_0(z)VR(z), \quad R_0(z) \equiv (H_0 - z)^{-1}. \quad (1)$$

В 60-х гг. эту трудность впервые преодолел Л. Д. Фаддеев, предложивший в [1, 2] фредгольмовы интегральные уравнения для системы (p_1, p_2, p_3) трех частиц p_1, p_2 и p_3 с короткодействующими потенциалами V_i в каждой паре (p_j, p_k) , $(i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)$ и полной энергией E . В предложенном подходе парные потенциалы — заранее заданные функции, парные t -матрицы t_i — решения незацепляющихся уравнений

$$t_i(z) = V_i - V_i R_0(z) t_i(z), \quad i = 1, 2, 3, \quad z = E + i0, \quad (2)$$

а три компоненты T_i трехчастичной T -матрицы $T = T_1 + T_2 + T_3$ — решения системы трех уравнений

$$T_i(z) = t_i(z) - t_i(z) R_0(z) \sum_{k \neq i} T_k, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3)$$

В импульсном представлении уравнения (2) и (3) являются шестимерными интегральными уравнениями. Угловая редукция таких уравнений подробно описана в [4] и выполняется в два этапа. Сначала функции V_i , t_i и T_i заменяются их рядами по бисферическим гармоникам $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{k}_i, \hat{q}_i)$, зависящим от сферических углов трехмерных импульсов Якоби \mathbf{k}_i и \mathbf{q}_i . Затем получившиеся уравнения проецируются на такие гармоники. В итоге все угловые переменные отделяются явно и получаются интегральные уравнения для бисферических компонент матриц t_i и T_i . В самом простом случае трех тождественных бозонов с нулевым полным угловым моментом и S -волновыми потенциалами единственные нетривиальные матричные элементы $t \equiv \langle Y_{00} | t_i | Y_{00} \rangle$ и $\tilde{T} \equiv \langle Y_{00} | T_i | Y_{00} \rangle$ парных t -матриц и компонент матрицы T подчиняются соответственно одномерному интегральному уравнению

$$t \left(k, k'; z - \frac{3q^2}{4m} \right) = V_1(k - k') + \int_0^\infty \frac{ds s^2 V_1(k - s)}{z - s/m - 3q^2/4m} t \left(s, k'; z - \frac{3q^2}{4m} \right) \quad (4)$$

и двумерному интегральному уравнению

$$\begin{aligned} \tilde{T}(k, q, k', q'; z) &= t \left(k, k'; z - \frac{3q^2}{4m} \right) \delta(q - q') + \\ &+ 2 \int_0^\infty s^2 ds \int_0^\infty dp p^2 t \left(k, s; z - \frac{3p^2}{4m} \right) \frac{\tilde{T}(s, p, k', q'; z)}{z - s/m - 3p^2/4m}. \end{aligned} \quad (5)$$

В работе [2] Л. Д. Фаддеев предложил для T -матрицы разбиение

$$T = \sum_{i,j=1}^3 M_{ij} \quad (6)$$

и уравнения для ее девяти компонент M_{ij}

$$M_{ij}(z) = t_i(z) \delta_{ij} - t_i(z) R_0(z) \sum_{k \neq i} M_{kj}(z), \quad i, j, k = 1, 2, 3. \quad (7)$$

Оказалось, что уже после *одной* итерации эти уравнения становятся компактными, резольвента R выражается через их единственное решение:

$$R(z) = R_0(z) - R_0(z) \sum_{i,j=1}^3 M_{ij}(z) R_0(z), \quad (8)$$

а по ее свойствам определяются все спектральные свойства оператора H .

Ключевым приемом фаддеевского подхода были *разбиения* T -матрицы на компоненты T_i и M_{ij} , а принципиально важными моментами — доказательство однозначной разрешимости систем уравнений (3) и (7) и доказательство эквивалентности однородной системы (7) уравнению Шредингера

$$(H_0 + V)\Psi = E\Psi. \quad (9)$$

Впоследствии разбиение (6) и система (7) оказались особо плодотворным средством для изучения T -матрицы.

В 1967 г. О. Я. Якубовский, используя те же приемы, реализовал в [3] непосредственное обобщение уравнений (3) и (7) на случай четырех и более частиц с короткодействующими парными потенциалами.

Авторы последовавших альтернативных подходов [70–75] к задаче нескольких частиц не привели никаких доказательств эквивалентности предложенных ими интегральных уравнений исходным уравнениям Шредингера. Доказательство такой эквивалентности является непременным условием математической корректности теории и выгодно отличает теорию Фаддеева–Якубовского от всех других известных к настоящему времени интегральных формулировок задачи нескольких квантовых частиц.

Стоит подчеркнуть, что именно благодаря математической корректности уравнений Фаддеева–Якубовского эта задача еще в 60-х гг. стала выделяться в особую и довольно широкую область исследований, в которой возможна математически строгая и безмодельная, если не считать определения парных взаимодействий, постановка проблемы.

Следующим и особенно сложным этапом развития теории малочастичных систем оказалось обобщение интегральных уравнений Фаддеева–Якубовского на случай кулоновских взаимодействий, когда ядра этих уравнений становятся нефредгольмовыми. В 1967 г. Дж. В. Нобл в работе [76] предложил модифицировать уравнения Фаддеева путем включения кулоновских взаимодействий в свободную резольвенту R_0 . Но полученная таким образом кулоновская резольвента R_0^c оставалась неизвестной. Поэтому модификация Нобла оказалась чисто формальным приемом, не позволившим найти точное решение исходной трехчастичной задачи. Тем не менее в дальнейшем главная идея Нобла (*явное выделение кулоновских сингулярностей*) оказалась весьма плодотворной.

В методе [77, 78], предложенном А. М. Веселовой, проводится прямая регуляризация ядер уравнений Фаддеева с устранением их наиболее сингулярных слагаемых. С этой целью из исходных ядер выделяются части, содержащие кулоновское взаимодействие заряженной частицы и центра масс пары других частиц с суммарным зарядом этой пары. Затем выделенные части обращаются, а ядра новых уравнений выражаются через двухчастичные решения. В итоге получаются уравнения с компактными ядрами, но лишь если полная энергия E не превышает порог развала на три частицы.

Описанная процедура выделения кулоновских сингулярностей явно или неявно использовалась в работах [79–81], однако обобщить ее для энергий, превышающих порог развала на три частицы, в общем случае так и не удалось. Тем не менее попытки переформулировать интегральные уравнения Фаддеева с кулоновскими взаимодействиями так, чтобы полученные уравнения фаддеевского типа имели компактные ядра при любой энергии, продолжают. Например, в случае трех одноименно заряженных частиц такая переформулировка представлена в недавних работах [82, 83].

Наряду с упомянутыми выше трудностями теоретического характера непостоянным оказалось и практическое решение трехчастичных интегральных уравнений. Основные причины, затрудняющие их численный анализ, поясним на примере уравнений (4), (5).

Первый и *неизбежный* этап реализации интегральной формулировки — вычисление вспомогательных объектов — парных t -матриц. Их бисферические компоненты зависят от трех переменных и подчинены, вообще говоря, бесконечной системе зацепляющихся интегральных уравнений. Численное интегрирование даже конечной подсистемы таких уравнений становится особенно сложным при $E > 0$, когда их ядра имеют сингулярность Коши (см. (4)). *Достигнутая при этом точность определяет точность всех последующих вычислений.* На следующем этапе приходится опять ограничиться решением «обрезанной» системы, но уже двумерных интегральных уравнений для бисферических компонент трех матриц T_i . Эти уравнения (см. (5)) содержат найденные ранее парциальные парные t -матрицы. Даже при самой простой дискретизации, заключающейся в аппроксимации интегралов квадратурными суммами Гаусса, двумерные интегральные уравнения сводятся к линейным системам уравнений с неразреженными матрицами большой размерности. Достижение удовлетворительной точности при численном обращении таких матриц — довольно сложная проблема [84]. При энергиях, превышающих порог трехчастичного развала, возникает еще одна существенная трудность: в этом случае ядра интегральных уравнений содержат «движущиеся» сингулярности [4].

Интегральные уравнения заметно упрощаются при сепарабельной аппроксимации двухчастичных потенциалов [4]. Такая аппроксимация непригодна для дальнедействующих потенциалов, в частности кулоновских, но большая часть явлений в атомной и ядерной физике происходит с участием заряженных частиц. При наличии в потенциалах кулоновских слагаемых ядра интегральных уравнений Фаддеева некомпактны, а модифицированные на этот случай уравнения приводят к очень сложным задачам численного интегрирования.

По этим причинам решение проблемы учета кулоновских взаимодействий стало следующим этапом развития теории. На этом этапе исследования С. П. Меркурьева [8–15] сыграли решающую роль, а одним из ключевых

моментов оказался выбор координатного (конфигурационного) пространства \mathcal{R}^6 вместо импульсного. Это пространство образуют шестимерные векторы $\mathbf{r}_i \equiv (\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$. Их трехмерные компоненты — приведенные векторы Якоби \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i , которые выражаются через радиусы-векторы \mathbf{a}_i и массы m_i частиц p_i , $i = 1, 2, 3$, по формулам (1.9) монографии [5]:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{ij}}(\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i), & \mu_{ij} &\equiv \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}; \\ \mathbf{y}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{k,ij}} \left(\frac{m_i \mathbf{a}_i + m_j \mathbf{a}_j}{m_i + m_j} - \mathbf{a}_k \right), & \mu_{k,ij} &\equiv \frac{m_k(m_i + m_j)}{m_1 + m_2 + m_3}, \end{aligned} \quad (10)$$

где индексы i, j, k образуют циклическую перестановку триады индексов (1, 2, 3): индекс i переходит в k , j — в i , а k — в j . Формулы (10) приняты в методе гипергармоник [85] и предыдущих обзорах [55, 56]. Нередко (см., например, формулу (1) обзорной работы [18]) все векторы y_i вводятся с противоположным знаком. Наряду с «декартовыми» координатами (10) часто используются гиперсферические координаты (r, Ω_i) , где $r \equiv (x_i^2 + y_i^2)^{1/2}$ — гиперрадиус, а $\Omega_i \equiv (\hat{x}_i, \hat{y}_i, \varphi_i)$ — набор из пяти гиперсферических углов: \hat{x}_i и \hat{y}_i — пары сферических углов векторов \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i , а $\varphi_i \equiv \arctg(y_i/x_i)$. Разные ($k \neq i$) координатные представления $\langle \mathbf{r}_i |$ и $\langle \mathbf{r}_k |$, где $\langle \mathbf{r}_i | = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$ или $\langle \mathbf{r}_i | = \langle r_i, \Omega_i |$, кинематически связаны [55, 59]. Связь зависит от соответствующего кинематического угла:

$$\gamma_{ki} \equiv g_{ki} \arctg [m_j(m_1 + m_2 + m_3)/m_k m_i]^{1/2}. \quad (11)$$

По определению для всех $(k, i) = (1, 2), (3, 1), (2, 3)$

$$g_{ki} = -g_{ik} = 1, \quad 0 \leq \gamma_{ki} \leq \pi/2, \quad \sum_{(k,i)} \gamma_{ki} = \pi. \quad (12)$$

В работах [8–15] С. П. Меркурьев обобщил подход [1, 2] Л. Д. Фаддеева на случай гамильтонианов H с парными потенциалами, содержащими дальное действие кулоновского типа, и исследовал асимптотические свойства резольвенты R и собственных функций Ψ . Удачно объединенные подходы Л. Д. Фаддеева и С. П. Меркурьева представлены ими в монографии [5].

Альтернативный к цепочке уравнений (2)–(8) путь [5] основан на компактных уравнениях

$$\begin{aligned} R_{ij}(z) &= [R_i(z) - R_0(z)]\delta_{ij} - R_i V_i \sum_{k \neq i} R_{kj}, \\ R_i(z) &\equiv (H_0 + V_i - z)^{-1} \end{aligned} \quad (13)$$

для девяти компонент $R_{ij}(z)$ резольвенты $R(z)$:

$$R(z) = R_0(z) + \sum_{ij} R_{ij}(z); \quad R_{ij}(z) \equiv -R_0(z) M_{ij}(z) R_0(z), \quad i, j = 1, 2, 3,$$

и приводит к дифференциальной формулировке задачи трех частиц. Ключевые уравнения (13) обладают замечательным свойством: их решения подчиняются уравнениям

$$(H_0 - z)R_{ij}(z) + V_i \sum_{k=1}^3 R_{kj}(z) = I\delta_{ij},$$

а соответствующие однородные уравнения

$$(H_0 - E)\Psi_i = -V_i\Psi = -V_i \sum_{k=1}^3 \Psi_k, \quad i = 1, 2, 3, \quad (14)$$

записанные в их собственных координатных представлениях (i -е уравнение — в i -х координатах, например $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ или (r, Ω_i)), называются дифференциальными уравнениями Фаддеева. Их сумма приводит к исходному уравнению Шредингера (9) для функции Ψ , которая выражается суммой ее трех фаддеевских компонент Ψ_i :

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3. \quad (15)$$

Чтобы завершить дифференциальную формулировку задачи трех частиц, уравнения (14) следовало дополнить подходящими граничными условиями для компонент Ψ_i . Главной проблемой оказался вывод именно тех асимптотических граничных условий при больших расстояниях между частицами, которые позволяют получить полный набор решений уравнений Шредингера. Эта проблема была решена С. П. Меркурьевым сначала в работе [7] для случая короткодействующих парных потенциалов $V_i = V_i^s$, а затем в цикле работ [8–15] для потенциалов $V_i = V_i^s + n_i/x_i$ с кулоновским дальнодействием n_i/x_i . В работе [8] для модификации уравнений Фаддеева (14) на этот случай использовался прием, близкий к идее Нобла [76] о включении кулоновского дальнодействия в свободную функцию Грина. Сначала парные взаимодействия V_i при помощи гладких «срезов» χ_i разбивались на короткодействующие \hat{V}_i и дальнодействующие $V_i^{(0)}$ части:

$$V_i = \hat{V}_i + V_i^{(0)}, \quad \hat{V}_i \equiv V_i^s + \frac{n_i}{x_i} \chi_i, \quad V_i^{(0)} \equiv \frac{n_i}{x_i} (1 - \chi_i), \quad i = 1, 2, 3.$$

Затем выводились модифицированные уравнения Фаддеева

$$(H_0^{as} - E)\Psi_i = -\hat{V}_i\Psi = -\hat{V}_i \sum_{k=1}^3 \Psi_k, \quad (16)$$

$$H_0^{as} \equiv H_0 + \sum_{k=1}^3 V_k^{(0)}, \quad i = 1, 2, 3,$$

в которых дальнедействующие части $V_i^{(0)}$ потенциалов включались по определению в асимптотический трехчастичный гамильтониан H_0^{as} . В ряде случаев, например когда все частицы заряжены одноименно, более удобны дифференциальные уравнения Нобла–Фаддеева [15]

$$(H^c - E)\Psi_i = -V_i^s\Psi = -V_i^s \sum_{k=1}^3 \Psi_k, \quad (17)$$

$$H^c \equiv H_0 + \sum_{k=1}^3 \frac{n_k}{x_k}, \quad i = 1, 2, 3,$$

где в отличие от уравнений (16) все кулоновское взаимодействие включено в «невозмущенный» гамильтониан H^c .

Если взаимодействия V_i быстро возрастают ($V_i(x_i) \gg 1$, $x_i \leq b_i$) в областях малых ($x_i \leq b_i$) расстояний между частицами, то фаддеевские компоненты $\Psi_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ быстро убывают. Поэтому в этих областях при реализации любой схемы численного решения исходных уравнений Фаддеева (14) приходится одновременно оперировать и с довольно большими значениями взаимодействий, и с довольно малыми искомыми значениями фаддеевских компонент, что заметно затрудняет вычисление с приемлемой точностью. Эту трудность можно преодолеть, используя сформулированные и исследованные в работах [86, 87] дифференциальные уравнения Фаддеева в модели твердого кора. В этой модели сумма (15) трех фаддеевских компонент Ψ_i полагается равной нулю в любой из трех областей $x_i \leq b_i$, в которых соответствующее парное взаимодействие V_i достаточно велико:

$$\Psi = \sum_{k=1}^3 \Psi_k = 0, \quad x_i \leq b_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (18)$$

Поэтому в этих областях уравнения (14) имеют нулевые правые части и принимают вид незацепляющихся свободных уравнений Шредингера:

$$(H_0 - E)\Psi_i = 0, \quad x_i \leq b_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (19)$$

Затем доказывается, что при всех $x_i > b_i$ компоненты Ψ_i определяются исходными уравнениями Фаддеева (14), а их сумма дает нетривиальное решение Ψ уравнения Шредингера (9). С вычислительной точки зрения преимущество полученных таким образом уравнений Фаддеева в модели твердого тела

$$(H_0 - E)\Psi_i = \begin{cases} -V_i(\Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3), & x_i > b_i, \\ 0, & x_i \leq b_i, \end{cases} \quad i = 1, 2, 3, \quad (20)$$

очевидно: во-первых, эти уравнения не содержат взаимодействий именно в тех областях, в которых их вычисление требует операций с большими числами, и, во-вторых, в тех же областях искомые функции подчинены свободному уравнению Шредингера (19), весь спектр которого известен.

Комплексный скейлинг многочастичного уравнения Шредингера в случае аналитических парных потенциалов давно известен как эффективный метод исследования многочастичных резонансов. Комплексный скейлинг уравнений Фаддеева в том же случае впервые предложен в недавней работе [30], в которой полученные масштабированные уравнения Фаддеева использовались для вычисления положений резонансов в модельной системе трех тождественных бозонов с нуклонными массами.

Существование и единственность решения дифференциальных уравнений Фаддеева (14), (16), (17) и (20) установлены при любых значениях энергии E как в случае нейтральных, так и в случае заряженных частиц [5], взаимодействующих посредством локальных потенциалов довольно широкого класса. В этом заключается первое и несомненное с теоретической точки зрения преимущество дифференциальных уравнений по сравнению с интегральными уравнениями (2), (3), для которых, как пояснялось выше, проблема корректного учета кулоновских взаимодействий до сих пор не решена в полном объеме. Второе, также не вызывающее сомнений преимущество обуславливается отсутствием в дифференциальных уравнениях Фаддеева каких-либо вспомогательных и требующих предварительного анализа объектов, какими в интегральных уравнениях являются парные t -матрицы. Действительно, дифференциальные уравнения Фаддеева, кроме искомого фаддеевского компонента Ψ_i , содержат лишь инвариантный к выбору набора векторов Якоби оператор H_0 , спектральные свойства которого хорошо изучены, и парные, причем заранее заданные, взаимодействия. Благодаря такому строению шестимерных дифференциальных уравнений Фаддеева не столь сложной оказалась и их редукция (угловой анализ) к двумерным интегродифференциальным уравнениям [5, 7, 55] в области

$$\mathcal{R}_+^2 \equiv \{x_i, y_i : x_i \geq 0, y_i \geq 0\} = \{r, \varphi_i : r \geq 0, 0 \leq \varphi_i \leq \pi/2\}$$

к одномерным дифференциальным уравнениям [55, 57, 58] на полуоси $\mathcal{R}_+^1 \equiv \{r : r \geq 0\}$ и в частном, но особо важном случае центральных парных

потенциалов к трехмерным дифференциальным уравнениям [16,17] в области

$$\mathcal{R}^3 \equiv \{x_i, y_i, \theta_i : x_i \geq 0, y_i \geq 0, 0 \leq \theta_i \leq \pi\},$$

где θ_i — угол между векторами Якоби \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i . Для редукции в первом случае используются разложения искомым шестимерных фаддеевских компонент Ψ_i по базису бисферических гармоник $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$, во-втором — по базису гипергармоник $\mathcal{Y}_{Lab}^{\ell m}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \varphi_i)$, а в-третьем — по D -базису, составленному из D -функций Вигнера $D_{mm'}^{\ell \sigma}$ или же из их определенных линейных комбинаций $D_{mm'}^{\ell \sigma*}$, обладающих заданной пространственной четностью $\sigma = \pm 1$ и часто используемых в адиабатическом подходе [88]. Полученные в результате редукции двумерные, одномерные и трехмерные уравнения называются соответственно уравнениями Фаддеева в бисферическом, гиперсферическом базисе и уравнениями Фаддеева в представлении полного углового момента или же уравнениями Фаддеева в D -базисе.

Следующее, особо важное для постановки и численного решения задачи трех частиц преимущество исходных шестимерных и всех перечисленных редуцированных уравнений Фаддеева заключается в том, что при любых значениях аргументов решения этих уравнений — более простые функции, чем соответствующие решения уравнения Шредингера. Этот известный факт [5] стоит пояснить более подробно. Исходные и редуцированные уравнения Фаддеева и содержащиеся в них парные взаимодействия записываются в собственных координатных представлениях, а уравнение Шредингера и, следовательно, сумма трех парных взаимодействий — только в одном из них. Взаимодействие $V_k(\mathbf{x}_k)$ в собственном координатном представлении $\langle \mathbf{r}_k |$ зависит только от одного вектора Якоби, а в несобственном ($k \neq i$) представлении $\langle \mathbf{r}_i |$ аргумент \mathbf{x}_k и само взаимодействие зависят уже от обоих векторов Якоби и поэтому $V_k(\mathbf{x}_k)$ становится более сложной функцией: $\langle \mathbf{r}_i | V_k \rangle = V_k(\mathbf{x}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i))$. По той же причине решение Ψ уравнения Шредингера в выбранном координатном представлении $\langle \mathbf{r}_i |$ — более сложная функция, чем любая из его фаддеевских компонент. Действительно, сумма $\Psi(\mathbf{r}_i)$ содержит две компоненты, аргументы которых \mathbf{r}_j и \mathbf{r}_k зависят от \mathbf{r}_i :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_i | \Psi \rangle &= \Psi(\mathbf{r}_i) = \Psi_i(\mathbf{r}_i) + \sum_{k \neq i} K(\gamma_{ki}) \Psi_k(\mathbf{r}_k) = \\ &= \Psi_i(\mathbf{r}_i) + \sum_{k \neq i} \Psi_k(\mathbf{r}_k(\mathbf{r}_i)). \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь и далее K — инвариантный относительно выбора координатного представления оператор кинематического преобразования [55,59]:

$$\begin{aligned} K(\gamma) &= P \exp(-i\gamma J), \quad J = -i(\mathbf{x}\nabla_{\mathbf{y}} - \mathbf{y}\nabla_{\mathbf{x}}), \\ \gamma &= \gamma_{ki}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_i, \quad \mathbf{y} = \mathbf{y}_i, \quad \forall k \neq i = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (22)$$

где P — оператор инверсии $Pf(\mathbf{r}_i) \equiv f(-\mathbf{r}_i)$ шестимерного аргумента \mathbf{r}_i произвольной функции f , а J — оператор инфинитезимального поворота в плоскости \mathcal{P} трех частиц. Необходимо особо отметить, что разбиение (21), (22) допускает следующую интерпретацию: так как уравнение Шредингера эквивалентно уравнениям Фаддеева, то из его любого решения $\Psi(\mathbf{r}_i)$ можно выделить сравнительно простое слагаемое Ψ_i и довольно сложную сумму двух оставшихся фаддеевских компонент. К сожалению, физически прозрачная интерпретация фаддеевских компонент неизвестна.

1.1. Уравнения Фаддеева в бисферическом базисе. Как известно [7] и как подробно пояснялось в [55], в случае парных взаимодействий, включенных в конечном числе волн, система уравнений Фаддеева в бисферическом базисе *конечна*, в то время как шестимерное уравнение Шредингера проецированием на этот же базис сводится к *бесконечной* системе двумерных интегродифференциальных уравнений. Поэтому в этом типичном для ядерной физики низких энергий случае незаряженных частиц фаддеевские бисферические уравнения, дополненные известными [5] и соответствующими рассматриваемому трехчастичному процессу граничными условиями, оказываются наиболее простой для численного анализа интегродифференциальной краевой задачей. При использовании гиперсферических координат (r, Ω_i) уравнения Фаддеева в бисферическом базисе обладают еще одним, и немаловажным для их практического применения, преимуществом. Только при таком выборе координат интегральные операторы $h_{aba'b'}^\ell$, содержащиеся в этих интегродифференциальных уравнениях, являются локальными по переменной r и нелокальными по одной из переменных φ_i . Благодаря локальности всех остальных операторов интегродифференциальные уравнения после дискретизации сводятся к системе линейных уравнений с разреженной, а именно ленточной, матрицей [84], что существенно упрощает численный анализ такой системы. Немаловажным для дискретизации и сокращения объема вычислений является знание аналитических свойств ядер операторов $h_{aba'b'}^\ell$ и их наиболее простых представлений. Эти свойства и удобные для вычисления компактные представления исследованы в статьях [57–59] и в оригинальном разд. 2 обзорной работы [55].

Чтобы привести пример уравнений Фаддеева в бисферическом базисе, рассмотрим самый простой случай. Пусть частицы p_1, p_2 и p_3 — тождественные бозоны в состоянии с полным угловым моментом $\ell = 0$. Пусть парные взаимодействия включены лишь в S -волнах:

$$V_i(\mathbf{x}_i) = V_i(x_i)I_i^0, \quad I_i^0 \equiv |Y_{00}(\hat{x}_i)\rangle\langle Y_{00}(\hat{x}_i)|, \quad i = 1, 2, 3,$$

где x_i — расстояние между бозонами p_j и p_k , а I_i^0 — проектор на их S -волновое состояние, выраженный через сферические функции $Y_{00}(\hat{x}_i)$. То-

гда подстановкой

$$\Psi_i = 2r^{-2} \operatorname{cosec} \varphi_i U(r, \varphi_i) \mathcal{Y}_{00}^{00}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (23)$$

учитывающей симметрию волновой функции Ψ относительно любых перестановок бозонов, уравнения (14) сводятся к одному уравнению

$$\begin{aligned} \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 + E \right] U(r, \varphi) = \\ = V_1(r \cos \varphi) [U(r, \varphi) + 2 \langle r, \varphi | h^0 | U(r, \varphi') \rangle], \end{aligned} \quad (24)$$

в котором матричный элемент оператора $h^0 \equiv h_{0000}^0$ — интеграл

$$\langle r, \varphi | h^0 | U(r, \varphi') \rangle \equiv \frac{2}{\sqrt{3}} \int_{C_-(\varphi)}^{C_+(\varphi)} d\varphi' U(r, \varphi'), \quad \varphi \equiv \varphi_2, \quad (25)$$

с пределами, зависящими от аргумента $\varphi \equiv \varphi_1$:

$$C_-(\varphi) = \left| \frac{\pi}{3} - \varphi \right|, \quad C_+(\varphi) = \frac{\pi}{2} - \left| \frac{\pi}{6} - \varphi \right|. \quad (26)$$

Согласно (23) все три фаддеевские компоненты Ψ_i , а значит, и соответствующее им решение (15) уравнения Шредингера (9) регулярны при $r = 0$ и $\varphi_i = 0, \pi/2$, если

$$U(0, \varphi) = 0, \quad \forall \varphi, \quad U(r, 0) = U(r, \pi/2) = 0; \quad \forall r. \quad (27)$$

Особо значимым представляется анализ уравнения (24) при физически допустимых (в смысле сохранения тока плотности вероятности) условиях:

$$\sqrt{r} U \rightarrow 0, \quad r \rightarrow 0; \quad \sqrt{\varphi} U \rightarrow 0, \quad \varphi \rightarrow 0; \quad \sqrt{\pi/2 - \varphi} U \rightarrow 0, \quad \varphi \rightarrow \pi/2.$$

В случае парных взаимодействий, содержащих центральные потенциалы в качестве слагаемых, постановка задачи трех частиц в виде бесконечной системы уравнений Фаддеева в бисферическом базисе с соответствующими известными граничными условиями не завершена. Дело в том, что на практике возможно численное интегрирование лишь конечной подсистемы бесконечной системы таких уравнений. Вопрос о сходимости вычисляемого спектра к точному при увеличении размерности подсистемы, т. е. числа учитываемых парных парциальных волн, теоретически не исследован. В частных случаях расчеты трехчастичных связанных состояний и упругого рассеяния частицы на связанной паре двух других частиц (см., например, [26–29, 38]) демонстрируют довольно быструю сходимость.

1.2. Уравнения Фаддеева в гиперсферическом базисе. Независимо от того, являются ли парные взаимодействия центральными потенциалами или же действуют в конечном числе парциальных волн, система уравнений Фаддеева в гиперсферическом базисе, вообще говоря, содержит бесконечное число зацепляющихся одномерных дифференциальных уравнений. Эти уравнения выводятся двумя способами [55]: проектированием уравнений Фаддеева в бисферическом базисе на известные собственные функции [57, 59] интегральных операторов или же проектированием исходных шестимерных уравнений Фаддеева (14) на подходящий базис трехчастичных гипергармоник [85]. Для численного интегрирования полученных уравнений приходится ограничиться их конечной подсистемой и решить сначала две вспомогательные задачи. Первая из них — вычисление матричных элементов потенциалов в соответствующем одномерном угловом базисе собственных функций $\tilde{W}_{La'b'}$ интегральных операторов $h_{aba'b'}^\ell$. Вторая задача — вычисление коэффициентов Рейнала–Реваи [85], являющихся собственными для этих операторов числами [55, 59]. Предложенный в [59] способ вычисления этих чисел достаточно прост и заключается в решении конечных неоднородных систем линейных уравнений с невырожденными матрицами. В частных случаях собственные числа и функции операторов $h_{aba'b'}^\ell$ известны в явном виде [55]. Например, для оператора φ

$$\begin{aligned} \langle \varphi | h^0 | \tilde{W}_L(\varphi') \rangle &= \lambda_n \tilde{W}_L(\varphi), \quad n = 1, 2, \dots, L = 2(n-1); \\ \tilde{W}_L(\varphi) &\equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin 2n\varphi, \quad \lambda_n = \frac{\sin 2n\pi/3}{n \sin 2\pi/3}. \end{aligned} \quad (28)$$

Использование гипергармоник и функций \tilde{W}_{Lab} в качестве базисных оказалось весьма плодотворным для исследования некоторых аналитических свойств решений уравнений Фаддеева в бисферическом базисе и исходных дифференциальных уравнений Фаддеева (14), например для построения [60, 61] фоковских разложений фаддеевских бисферических компонент в окрестности точки тройного удара ($r \rightarrow 0$), для вывода явных представлений ложных решений уравнений Фаддеева с S -волновыми [55] или центральными [62, 63] потенциалами произвольной формы и для анализа точных решений [56, 64–67] в случае взаимодействий центробежного типа $V_i(x_i) \sim x_i^2$, $i = 1, 2, 3$. Как показано в [65, 66], если такие взаимодействия включены в конечном числе парциальных волн, то уравнения Фаддеева в гиперсферическом базисе имеют вид однородной системы линейных уравнений для неизвестной постоянной p^2 разделения переменных r и Ω_i и коэффициентов разложения фаддеевских компонент Ψ_i по базису гипергармоник. Только при $p^2 = (t+2)^2$ и целом t такие разложения являются конечными суммами и приводят к точным решениям уравнений Фаддеева. Например, в случае S -волновых взаимодействий

центробежного типа

$$V_i(\mathbf{x}_i) = \frac{c}{x_i^2} I_i^0 = \frac{c}{(r \cos \varphi_i)^2} I_i^0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (29)$$

при любой положительной энергии E и значениях $c = 4$, $t = 4$ и $p^2 = 36$ краевая задача (24)–(27) имеет очень простое точное решение [64]

$$U(r, \varphi) = J_p(z) \sin 2\varphi F_1(\varphi), \quad z \equiv r\sqrt{E},$$

$$F_1(\varphi) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \operatorname{cosec} 2\varphi \left[\sin 2\varphi - \frac{4}{5} \sin 4\varphi - \sin 6\varphi \right], \quad (30)$$

которому согласно (15) и (23) соответствует точное, но довольно сложное решение уравнения Шредингера (9)

$$\Psi(\mathbf{r}_1) = z^{-2} J_p(z) [F_1(\varphi_1) + F_1(\varphi_2) + F_1(\varphi_3)],$$

$$\varphi_k = \arccos \left[\cos^2(\gamma_{k1} - \varphi_1) + \frac{1}{2}(u - 1) \sin 2\gamma_{k1} \sin 2\varphi_1 \right]^{1/2}, \quad k = 2, 3. \quad (31)$$

Действительно, приведенная фаддеевская компонента (30) зависит от двух переменных r и φ , причем зависимость от гиперрадиуса r описывается известной функцией Бесселя J_6 , а зависимость от гиперугла φ — линейной комбинацией трех первых собственных функций (28) оператора h^0 . Решение (31) уравнения Шредингера зависит уже не от двух, а от трех переменных r , $\varphi_1 \equiv \varphi$ и $u \equiv \cos \theta$, где θ — угол между якобиевскими векторами \mathbf{x}_1 и \mathbf{y}_1 . Приведенное сравнение еще раз поясняет тот факт, что задачу трех частиц выгоднее решать в рамках дифференциальных уравнений Фаддеева.

За исключением взаимодействий осцилляторного (см. [55]) и центробежного типов система уравнений Фаддеева в гиперсферическом базисе неудобна для численного решения из-за ее бесконечного ранга. Для таких систем вопрос о сходимости вычисляемого спектра конечной подсистемы к точному является открытым. Достоверный численный анализ такой сходимости еще не выполнен, но представляется вполне возможным в рамках недавно предложенного подхода [89–92] к интегрированию больших систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Этот подход — изящное объединение непрерывного аналога метода Ньютона и вариационного принципа Швингера.

В рассматриваемой ниже дифференциальной формулировке [16] задачи трех частиц с *центральными* парными потенциалами упоминавшаяся проблема сходимости просто не возникает, потому что исходные шестимерные уравнения Фаддеева удается точно свести к конечным системам трехмерных дифференциальных уравнений со смещенными аргументами.

1.3. Уравнения Фаддеева в D -базисе. Если парные взаимодействия описываются центральными потенциалами, например кулоновскими, то полный

трехчастичный гамильтониан H инвариантен относительно положения плоскости \mathcal{P} трех частиц. Поэтому три угла Эйлера, задающие ориентацию плоскости \mathcal{P} , можно точно отделить от остальных трех внутренних координат \mathbf{q} , описывающих взаимное расположение трех частиц в этой плоскости. С этой целью еще в 30-х гг., а именно в работах [93, 94], было предложено использовать разложение искомой волновой функции Ψ по конечному базису из D -функций Вигнера, зависящих от углов Эйлера. Детальное описание такой редукции уравнения Шредингера с кулоновскими взаимодействиями к конечным системам трехмерных уравнений дано в обзорной работе [88], а подробный вывод явных представлений всех операторов, содержащихся в таких системах при выборе в качестве внутренних сфероиальных, гиперсферических и декартовых координат, приведен соответственно в работах [95], [96], [97].

Точное отделение трех углов Эйлера от внутренних «декартовых» координат $\mathbf{q}_i = (x_i, y_i, \theta_i)$ в дифференциальных уравнениях Фаддеева (14) с центральными потенциалами впервые выполнено в работе [16]. Полученные таким образом трехмерные дифференциальные уравнения Фаддеева исследовались в последовавших обзорах [17, 18]. При выводе этих уравнений ключевыми были два правила. Первое — каждая фаддеевская компонента Ψ_i — ряд по D -функциям Вигнера $D_{mm'}^{\ell*}$. Второе — при данном i аргументы функций $D_{mm'}^{\ell*}$ — углы Эйлера, характеризующие положение подвижной системы координат S_i^x с осью OZ , коллинеарной вектору \mathbf{x}_i .

Выбор углов Эйлера в качестве внешних координат и выбор систем S_i^x не являются единственными. Согласно [17] вместо углов Эйлера можно использовать любую другую трехмерную параметризацию \mathbf{g} группы трехмерных вращений $SO(3)$. Как отмечалось в [69], для вывода разложений компонент Ψ_i вблизи соответствующих точек парных ударов ($x_i \rightarrow 0, y_i > 0$) удобнее в качестве подвижных систем координат выбрать системы S_i^y с осями OZ , коллинеарными векторам \mathbf{y}_i .

В случае $\ell = 0$ при любой параметризации \mathbf{g} функция D_{00}^{0*} — константа, поэтому система шестимерных уравнений Фаддеева (14) подстановкой

$$\Psi_i(\mathbf{q}_i) = f(\mathbf{q}_i)U_i(\mathbf{q}_i)D_{00}^0(\mathbf{g}), \quad i = 1, 2, 3,$$

редуцируется к системе трех трехмерных уравнений

$$[\tilde{H}_0(\mathbf{q}_i) - E]U_i(\mathbf{q}_i) = -f^{-1}(\mathbf{q}_i)V_i(x(\mathbf{q}_i)) \sum_{k=1}^3 f(\mathbf{q}_k)U_k(\mathbf{q}_k). \quad (32)$$

Здесь оператор \tilde{H}_0 , порожденный оператором H_0 , инвариантен относительно набора \mathbf{q}_i трех координат в плоскости частиц и в зависимости от выбора множителя f и трех относительных координат $\mathbf{q} = \mathbf{q}_i$ для каждой пары (p_j, p_k) частиц имеет разный вид.

Как пример приведем использованную в работах [44–46] формулировку краевой задачи для основного ($\ell = 0$) связанного состояния системы трех тождественных бозонов, любые два из которых могут иметь только одно связанное состояние с угловым моментом $b = 0$, энергией $e > E$ и волновой функцией ψ . В этом случае три уравнения (32) эквивалентны одному трехмерному уравнению, которое при выборе

$$\begin{aligned} f &= 1/xy, \quad \mathbf{q} = (x, y, u) \equiv (x_1, y_1, u), \\ u &\equiv \cos \theta, \quad \theta = (\mathbf{x}_1 \mathbf{y}_1)/(x_1 y_1), \quad U \equiv U_1 \end{aligned}$$

записывается как

$$\begin{aligned} [\tilde{H}_0(\mathbf{q}) - E]U(\mathbf{q}) &= -xyV_1(x) \left\{ [I + P^+ + P^-] \frac{U(\mathbf{q})}{xy} \right\}, \\ \tilde{H}_0(\mathbf{q}) &\equiv -\partial_x^2 - \partial_y^2 - \frac{x^2 + y^2}{x^2 y^2} \partial_u (1 - u^2) \partial_u, \end{aligned} \quad (33)$$

где операторы $P^\pm = K(\pm\pi/3)$ циклической и антициклической перестановки трех бозонов заменяют x, y и u на x^\pm, y^\pm и u^\pm :

$$\begin{aligned} P^\pm[U(\mathbf{q})/xy] &= U(x^\pm, y^\pm, u^\pm)/(x^\pm y^\pm), \\ 2x^\pm &= [x^2 \mp 2\sqrt{3}uxy + 3y^2]^{1/2}, \quad 2y^\pm = [3x^2 \pm 2\sqrt{3}uxy + y^2]^{1/2}, \\ u^\pm &= [\pm\sqrt{3}(x^2 - y^2) - 2uxy]/(4x^\pm y^\pm). \end{aligned}$$

Искомая функция U подчиняется однородным краевым условиям

$$U(x, y, u) = 0, \quad x = 0, \quad \forall(y, u); \quad y = 0, \quad \forall(x, u),$$

обеспечивающим регулярность фаддеевских компонент Ψ_i , и асимптотическому при $r \rightarrow \infty$ условию

$$U \sim \psi(x) \exp(-y\sqrt{e-E}) + A^0(\varphi, u)r^{-1/2} \exp(-r\sqrt{-E}), \quad \forall(u, \varphi),$$

выделяющему из всех регулярных решений уравнения (33) единственное решение, при котором сумма (15) является волновой функцией Ψ трехбозонного связанного состояния с энергией $E < e$ и амплитудой A^0 виртуального развала такого состояния на три свободных бозона.

В недавней работе [47] уравнение (33) впервые использовано для численного анализа упругого рассеяния атома гелия ${}^4\text{He}$ на димере гелия (связанном состоянии двух атомов ${}^4\text{He}$) при ультранизких энергиях.

Настоящий раздел завершим вытекающими друг из друга выводами. Дифференциальная формулировка задачи трех частиц в виде редуцированных

уравнений Фаддеева, дополненных соответствующими граничными условиями, сочетает все сильные стороны интегральных уравнений с простотой численных методов решения и удобна для качественного и численного исследования широкого круга явлений в атомной и ядерной физике. Поэтому построение надежных и эффективных численных алгоритмов решения уравнений Фаддеева в координатном пространстве является актуальной проблемой. Одна из граней ее решения — сравнительный анализ уже известных алгоритмов. Такой анализ невозможен без введения в теорию сплайн-функций.

2. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О СПЛАЙНАХ

Перед обсуждением основных определений и свойств сплайнов [32, 48–52] стоит отметить, наверно, неслучайное совпадение: период становления и интенсивного развития теории малочастичных систем совпал с началом исследований в Новосибирском научном центре АН СССР по теории сплайн-функций и ее приложениям в вычислительной математике и инженерном деле. Эти исследования, как упоминают авторы известной монографии [48] по методам сплайн-функций, «пользовались неизменной поддержкой академиков Г. И. Марчука, С. Л. Соболева и Н. Н. Яненко».

По сравнению с классическим аппаратом приближения многочленами [32] сплайны обладают по крайней мере двумя главными преимуществами: сплайны имеют лучшие аппроксимативные свойства, а алгоритмы, основанные на сплайн-аппроксимации, отличаются простотой, гибкостью и удобством реализации на компьютерах. Сплайны, получив распространение в 60-х гг. сначала как средство интерполяции сложных кривых, стали мощным способом решения разнообразных задач вычислительной математики. К таким задачам относятся практически все задачи, возникающие при численном исследовании проблемы нескольких частиц, например задача интерполяции функций, кривых и поверхностей, заданных таблицами, задачи численного дифференцирования и интегрирования, а также численный анализ интегральных и дифференциальных трехчастичных уравнений. При решении всех перечисленных задач хорошо зарекомендовали себя сплайны невысоких степеней (первой, третьей и пятой). Для численного анализа трехчастичных уравнений наиболее широко применяются сплайны третьей и пятой степеней. Используя их, удастся оптимальным образом сочетать удовлетворительный порядок аппроксимации искомых решений с минимальным числом численных операций.

2.1. Сетки, колебания и классы функций. Начнем с определений сеток по одной и двум переменным. В качестве таковых используем гиперрадиус r и один из трех ($i = 1, 2, 3$) гиперуглов $\varphi \equiv \varphi_i$. Необходимо отметить, что все приведенные ниже определения и свойства сеток и сплайнов не зависят ни от физического смысла переменных, ни от интервалов их изменения.

Пусть на отрезках $0 \leq r \leq R < \infty$ и $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ заданы некоторые, вообще говоря, нерегулярные одномерные разбиения (сетки):

$$\Delta_r : 0 = r_0 < r_1 < \dots < r_N = R, \quad \Delta_\varphi : 0 = \varphi_0 < \varphi_1 < \dots < \varphi_M = \pi/2,$$

порождающие в прямоугольнике $\mathcal{B}^2 \equiv [0, R] \otimes [0, \pi/2]$ с границей \mathcal{G} ячейки $\mathcal{B}_{ij}^2 \equiv [r_i, r_{i+1}] \otimes [\varphi_j, \varphi_{j+1}]$ и двумерную сетку $\Delta_{r\varphi} \equiv \Delta_r \otimes \Delta_\varphi$ узлов (r_i, φ_j) . Пусть h и g — максимальные значения шагов h_i и g_j сеток Δ_r и Δ_φ ,

$$h_i \equiv r_{i+1} - r_i, \quad i = 0, \dots, N-1; \quad g_j \equiv \varphi_{j+1} - \varphi_j, \quad j = 0, \dots, M-1.$$

Одномерная сетка, все шаги которой одинаковые, называется равномерной или регулярной. Кроме сеток Δ_r и Δ_φ потребуются их расширения δ_r и δ_φ

$$\begin{aligned} \delta_r : r_{-3} < r_{-2} < r_{-1} < r_0 < \dots < r_N < r_{N+1} < r_{N+2} < r_{N+3}, \\ \delta_\varphi : \varphi_{-3} < \varphi_{-2} < \varphi_{-1} < \varphi_0 < \dots < \varphi_M < \varphi_{M+1} < \varphi_{M+2} < \varphi_{M+3} \end{aligned}$$

дополнительными узлами r_i, φ_j с номерами $i, j < 0; i > N, j > M$. Потребуются и гауссовы сетки $\tilde{\Delta}_r, \tilde{\Delta}_\varphi$, составленные из узлов r_i^\pm и φ_j^\pm двухточечной квадратурной формулы Гаусса [98] для каждого отрезка $[r_i, r_{i+1}]$ и $[\varphi_j, \varphi_{j+1}]$:

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_r : \tilde{r}_i = r_i^-, \quad \tilde{r}_{i+1} = r_i^+, \quad r_i^\pm \equiv r_i + \frac{h_i}{2} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \right), \quad i = 0, \dots, N-1; \\ \tilde{\Delta}_\varphi : \tilde{\varphi}_j = \varphi_j^-, \quad \tilde{\varphi}_{j+1} = \varphi_j^+, \quad \varphi_j^\pm \equiv \varphi_j + \frac{g_j}{2} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \right), \quad j = 0, \dots, M-1. \end{aligned}$$

Двумерные расширенная и гауссова сетки определяются как прямые произведения соответствующих одномерных сеток: $\delta_{r\varphi} \equiv \delta_r \otimes \delta_\varphi$ и $\tilde{\Delta}_{r\varphi} \equiv \tilde{\Delta}_r \otimes \tilde{\Delta}_\varphi$.

Пример. Пусть $R = 1$, а $N = 4$, тогда на отрезке $[0, R] = [0, 1]$ регулярная сетка Δ_r имеет шаг $h = R/N = 1/4$ и состоит из пяти $(N+1 = 5)$ узлов:

$$\Delta_r : r_i = hi, \quad i = 0, \dots, N = 4, \quad R = 1, \quad h = R/N = 1/4. \quad (34)$$

Регулярное расширение δ_r сетки Δ_r содержит одиннадцать узлов:

$$\delta_r : r_i = hi, \quad i = -3, \dots, N+3 = 7, \quad N = 4, \quad R = 1, \quad h = R/N = 1/4, \quad (35)$$

причем три дополнительных узла ($i = -3, -2, -1$) расположены на числовой оси левее точки $r_0 = 0$, три других дополнительных узла ($i = 5, 6, 7$) — правее точки $r_4 = 1$, а пять основных узлов ($i = 0, \dots, 4$) — узлы исходной сетки Δ_r . Этой сетке соответствует гауссова сетка $\tilde{\Delta}_r$ из $2N = 8$ узлов:

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_r : \tilde{r}_i = r_i^-, \quad \tilde{r}_{i+1} = r_i^+, \quad r_i^\pm \equiv h \left(i + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2\sqrt{3}} \right), \quad (36) \\ i = 0, \dots, N-1 = 3, \quad N = 4, \quad R = 2, \quad h = R/N = 1/4. \end{aligned}$$

На сетке Δ_r функцию $F \in C^0([0, R])$ удобно характеризовать наибольшим значением $\omega(F, \Delta_r)$ ее колебаний $\omega_i(F)$ на каждом из отрезков $[r_i, r_{i+1}]$. Колебание $\omega_i(F)$ — это максимальное значение $|F(r') - F(r'')|$ для $r', r'' \in [r_i, r_{i+1}]$. Пусть $C^k C_{\Delta_r}^p([0, R])$ — класс функций, таких, что

$$F(r) \in C^k([0, R]), \quad F(r) \in C^p([r_i, r_{i+1}]), \quad i = 0, \dots, N-1.$$

а $\mathcal{L}_p([0, R])$ — пространство измеримых на $[0, R]$ функций F , для которых функция $|F|^p$ измерима по Лебегу:

$$\|F(r)\|_{L_p([0, R])} \equiv \left(\int_0^R dr |F(r)|^p \right)^{1/p} < \infty.$$

Класс функций $F(r)$, имеющих на $[0, R]$ абсолютно непрерывную производную порядка $k-1$ и k -ю производную из $\mathcal{L}_p([0, R])$, $1 \leq p \leq \infty$, обозначим символом $\mathcal{W}_p^k([0, R])$. Символом $C^k \mathcal{W}_{\Delta_r, p}^q$, $p > k$, обозначим функции класса $C^k([0, R])$, принадлежащие на каждом отрезке классу $\mathcal{W}_p^q([r_i, r_{i+1}])$ более гладких функций. Наконец, пусть $\mathcal{H}_2^1([0, R])$ — пространство функций, обладающих первыми производными, квадраты которых интегрируемы на $[0, R]$. Напомним, что $\|F\|_C = \|F\|_\infty$, если $F \in C^0([0, R])$.

Колебания и классы функций $F(r, \varphi)$ двух переменных определяются по аналогии с функциями одной переменной. В пространстве $\mathcal{L}_p(\mathcal{B}^2)$ измеримых на \mathcal{B}^2 функций норма определена как

$$\|F(r, \varphi)\|_{L_p} \equiv \left(\int_0^R dr \int_0^{\pi/2} d\varphi |F(r, \varphi)|^p \right)^{1/p}.$$

Через $C^{p,q}(\mathcal{B}^2)$ обозначим множество функций $F(r, \varphi)$, имеющих на \mathcal{B}^2 непрерывные частные и смешанные производные $D^{(s,t)}F \equiv F^{(s,t)} \equiv \partial_r^s \partial_\varphi^t F$, $s \leq p, t \leq q$. Пусть $\mathcal{W}_p^k(\mathcal{B}^2)$ — класс функций, имеющих на \mathcal{B}^2 абсолютно непрерывные производные $F^{(p,q)}$, $p+q=k$ из $\mathcal{L}_p(\mathcal{B}^2)$, $1 \leq p \leq \infty$. По аналогии со случаем одной переменной используем обозначения $C^k C_\delta^p(\mathcal{B}^2)$ и $C^k \mathcal{W}_{\delta, p}^q(\mathcal{B}^2)$, $q > k$, и т.д. для классов функций, которые имеют более высокую гладкость в ячейках \mathcal{B}_{ij} , чем во всей области \mathcal{B}^2 .

2.2. Определения сплайнов. Пусть n и ν — целые числа, причем $0 \leq \nu \leq n+1$. Функция $S_{n\nu}(r)$ называется сплайном степени n дефекта ν с узлами на сетке Δ_r и коэффициентами a_α^i , если $S_{n\nu}(r) \in C_{[0, R]}^{n-\nu}$ и на каждом отрезке $[r_i, r_{i+1}]$

$$S_{n\nu}(r) = \sum_{\alpha=0}^n a_\alpha^i (r - r_i)^\alpha. \quad (37)$$

Производные $S_{n\nu}^{(p)}$ порядка $p = n - \nu + 1, \dots, n$ терпят разрывы в точках r_i . Для определенности полагается, что в этих точках $S_{n\nu}^{(p)}$ непрерывна справа. Сплайны $S_{m\mu}(\varphi)$ с узлами на сетке Δ_φ вводятся аналогичным образом.

Функция $S_{nm\nu\mu}(r, \varphi)$ называется двумерным сплайном степени n и дефекта ν , $0 \leq \nu \leq n + 1$, по r и степени m и дефекта μ , $0 \leq \mu \leq m + 1$, по φ , если $S_{nm\nu\mu}(r, \varphi) \in C^{n-\nu, m-\mu}(\mathcal{B}^2)$ и в каждой ячейке \mathcal{B}_{ij}^2

$$S_{nm\nu\mu}(r, \varphi) = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=0}^m a_{\alpha\beta}^{ij} (r - r_i)^\alpha (\varphi - \varphi_j)^\beta, \quad \forall a_{\alpha\beta}^{ij} = \text{const.} \quad (38)$$

По определению (37) на каждом отрезке $[r_i, r_{i+1}]$ сплайны S_{31} и S_{32} — полиномы третьей степени, причем их производные S_{32}' , S_{31}' и S_{31}'' непрерывны всюду на $[0, R]$, а производная S_{32}'' терпит разрыв во внутренних узлах r_i , $i = 1, \dots, N - 1$, сетки Δ_r . Сплайны S_{31} и S_{3311} называются кубическим и бикубическим сплайнами класса \mathcal{C}^2 , а сплайны S_{32} и S_{3322} — эрмитовыми кубическим и бикубическим сплайнами. Значения сплайна и его производных в узлах сетки называют их узловыми значениями.

2.3. Кусочно-полиномиальное представление и локальность сплайнов.

Для сплайнов $S_{3\nu}$ и $S_{33\nu\nu}$ вместо представлений (37) и (38) удобно использовать эквивалентные кусочно-полиномиальные представления, коэффициенты которых являются узловыми значениями сплайнов и их производных. Приведем такие представления. Пусть $r \in [r_i, r_{i+1}]$ и

$$S_i \equiv S_{3\nu}(r_i), \quad n_i \equiv S'_{3\nu}(r_i), \quad N_i \equiv S''_{3\nu}(r_i), \quad s \equiv (r - r_i)/h_i.$$

Тогда в случае $\nu = 1$ сумму (37) можно переписать в виде

$$S_{31}(r) = \eta_1(s)S_i + \eta_2(s)S_{i+1} - (h_i^2/6)[\eta_3(s)N_i + \eta_4(s)N_{i+1}], \quad (39)$$

$$\eta_1(s) \equiv 1 - s, \quad \eta_2(s) \equiv s, \quad \eta_3(s) \equiv s(1 - s)(2 - s), \quad \eta_4(s) \equiv s(1 - s^2) \quad (40)$$

или же в обоих случаях $\nu = 1$ и $\nu = 2$ — в виде

$$S_{3\nu}(r) = \xi_1(s)S_i + \xi_2(s)S_{i+1} + h_i[\xi_3(s)n_i + \xi_4(s)n_{i+1}], \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \xi_1 &\equiv (1 - s)^2(1 + 2s), & \xi_2 &\equiv s^2(3 - 2s), \\ \xi_3 &\equiv s(1 - s)^2, & \xi_4 &\equiv -s^2(1 - s). \end{aligned} \quad (42)$$

При любых S_i , N_i и n_i , $i = 0, \dots, N$, представление (39), (40) или (41), (42) обеспечивает выполнение соответственно условий $S_{31}, S_{31}'' \in C^0([0, R])$ или условий $S_{3\nu}, S'_{3\nu} \in C^0([0, R])$, $\nu = 1, 2$.

Обсудим сплайн S_{31} . При записи (39) или (41) производная S'_{31} или S''_{31} соответственно, вообще говоря, разрывна во внутренних узлах сетки Δ_r .

Поэтому в обоих случаях условие $S_{31} \in \mathcal{C}^2([0, R])$ сводится к $N - 1$ условию непрерывности соответствующих производных в этих узлах:

$$S_{31}^{(k)}(r_i - 0) = S_{31}^{(k)}(r_i + 0), \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad (43)$$

где $k = 1$ и $k = 2$ соответственно для сумм (39) и (41). Если эти соотношения дополнить двумя ограничениями, наложенными на сплайн или его производные в виде краевых условий одного из двух ($p = 1, 2$) типов:

$$S_{31}^{(p)}(r) = F^{(p)}(r), \quad r = 0, R; \quad p = 1, 2, \quad (44)$$

где $F^{(p)}(0)$ и $F^{(p)}(R)$ известны, то получится система из $N + 1$ уравнений для $N + 1$ неизвестных N_i или же n_i . Матрица \mathbf{A} такой системы трехдиагональная и невырожденная, так как имеет диагональное преобладание при любой сетке Δ_r . Поэтому все коэффициенты N_i или n_i однозначно выражаются как линейные комбинации, вообще говоря, всех коэффициентов S_k . Из-за такой связи сплайн S_{31} является нелокальным сплайном в том смысле, что его значения в точках, отличных от узлов сетки Δ_r , зависят от всей совокупности величин S_i , $i = 0, \dots, N$, а в случае краевых условий (44) — еще и от краевых значений производных соответствующего порядка. Тем не менее сплайн S_{31} обладает ярко выраженными локальными свойствами, обусловленными диагональным преобладанием матрицы \mathbf{A} . Локальные свойства проявляются в том, что существенное влияние на величину $S_{31}(r)$ оказывают лишь те значения S_i , которые заданы в узлах r_i , близких к r . Поэтому сплайн $S_{31}(r)$ в точках, удаленных от концов отрезка $[0, R]$, устойчив по отношению к ошибкам в задании краевых условий (44). Свойства локальности и устойчивости сплайна S_{31} представляют большой практический интерес.

Пример. Рассмотрим случай, когда сплайн (39) и его вторые производные равны нулю при $r = 0, R$, т. е. $S_0, S_N = 0$ и $N_0, N_N = 0$. Запишем уравнения (43) с $p = 1$ в порядке возрастания индекса $i = 1, \dots, N - 1$:

$$\nu_i N_{i-1} + 2N_i + (1 - \nu_i) N_{i+1} = d_i \equiv \frac{6\nu_i}{h_{i-1}} \left[\frac{S_{i+1} - S_i}{h_i} - \frac{S_i - S_{i-1}}{h_{i-1}} \right], \quad (45)$$

где $\nu_i \equiv h_{i-1}/(h_i + h_{i-1})$. Если \mathbf{A} — матрица такой системы уравнений, то

$$S_{31}''(r_i) = N_i = \sum_{k=1}^{N-1} A_{ik}^{-1} d_k = 6 \sum_{k=1}^{N-1} B_{ik}^r S_k, \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad (46)$$

$$B_{ik}^r = \nu_{k-2} (h_{k-1} h_{k-2})^{-1} A_{i,k-1}^{-1} - (h_k h_{k-1})^{-1} A_{ik}^{-1} + \nu_{k+1} h_k^{-2} A_{i,k+1}^{-1}, \quad (47)$$

где по определению $A_{i0}^{-1}, A_{iN}^{-1} \equiv 0$, а $i, k = 1, \dots, N - 1$. Так как \mathbf{A} имеет

диагональное преобладание, то $|A_{ij}^{-1}| \leq 2^{-|i-j|}$ для всех i и j и поэтому

$$\left| N_i - \sum_{j=i-k}^{i+k} A_{jk}^{-1} d_k \right| \leq 3(1/2)^{k-1} \max_{i=1, \dots, N-1} d_i.$$

Следовательно, если пренебрегать информацией (коэффициентами d_i) в узлах r_j , удаленных от r_i на $|j-i| > k$, то допустимая при этом погрешность в определении M_i будет порядка $(1/2)^{k-1}$.

Обсудим теперь эрмитов кубический сплайн (37), представленный суммой (41) с $\nu = 2$. При любых значениях S_i и n_i такое представление обеспечивает нужную гладкость: $S_{32}(r) \in C^1([0, R])$. Так как коэффициенты S_i и n_i независимы, то сплайн S_{32} — локальный, а его производная S''_{32} , вообще говоря, разрывна во внутренних узлах сетки, причем

$$|S''_{32}(r_i + 0) - S''_{32}(r_i - 0)| = O(h^{-2}), \quad h \rightarrow 0, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Кусочно-полиномиальные представления сплайнов $S_{3\mu}(\varphi)$ с узлами на сетке Δ_φ аналогичны представлениям (39)–(42). Если положить

$$S_j \equiv S_{3\mu}(\varphi_j), \quad m_j \equiv S'_{3\mu}(\varphi_j), \quad M_j \equiv S''_{3\mu}(\varphi_j), \quad t \equiv (\varphi - \varphi_j)/g_j$$

и использовать функции (40) и (42) переменной $s = t$, то на каждом отрезке $[\varphi_j, \varphi_{j+1}]$ для сплайна $S_{3\mu}$, $\mu = 1$, можно получить два кусочно-полиномиальных представления

$$S_{31}(\varphi) = \eta_1(t)S_j + \eta_2(t)S_{j+1} - (g_j^2/6)[\eta_3(t)M_j + \eta_4(t)M_{j+1}], \quad (48)$$

$$S_{3\mu}(\varphi) = \xi_1(t)S_j + \xi_2(t)S_{j+1} + g_j[\xi_3(t)m'_j + \xi_4(t)m'_{j+1}], \quad (49)$$

в которых M_j и m_j — линейные комбинации коэффициентов S_j . Условия непрерывности производной $S'_{31}(\varphi)$ сплайна (48) похожи на равенства (45):

$$\mu_j M_{j-1} + 2M_j + (1 - \mu_j)M_{j+1} = \frac{6\mu_j}{g_{j-1}} \left(\frac{S_{j+1} - S_j}{g_j} - \frac{S_j - S_{j-1}}{g_{j-1}} \right), \quad (50)$$

где $j = 1, \dots, M-1$ и $\mu_j \equiv g_{j-1}/(g_{j-1} + g_j)$. Пусть \mathbf{A} — матрица этих условий в случае $S_{31}(\varphi)$, $S''_{31}(\varphi) = 0$ при $\varphi = 0, \pi/2$, т. е. в случае $S_0, S_M = 0$ и $M_0, M_N = 0$. Тогда аналоги формул (46) и (47) записываются как

$$S''_{31}(\varphi_j) = M_j = 6 \sum_{k=1}^{M-1} B_{jk}^\varphi S_k, \quad j = 1, \dots, M-1, \quad M_0 = M_M = 0; \quad (51)$$

$$B_{jk}^\varphi = \mu_{k-2}(g_{k-1}g_{k-2})^{-1}A_{j,k-1}^{-1} - (g_k g_{k-1})^{-1}A_{jk}^{-1} + \mu_{k+1}g_k^{-2}A_{j,k+1}^{-1}, \quad (52)$$

где $j, k = 1, \dots, M - 1$ и по определению $A_{j0}^{-1}, A_{jM}^{-1} = 0$.

В отличие от коэффициентов S_i и M_i сплайна S_{31} коэффициенты S_j и m_j эрмитового сплайна $S_{32}(\varphi)$, заданного формулой (49) с $\mu = 2$, независимы.

В каждой ячейке \mathcal{B}_{ij}^2 вместо представления (38) сплайна S_{3311} гораздо удобнее использовать матричное кусочно-полиномиальное представление

$$\begin{aligned} S(r, \varphi) &\equiv S_{3311}(r, \varphi) = \mathbf{P}(s)\mathbf{TP}^T(t), \\ \mathbf{P}(q) &\equiv (\eta_1(q), \eta_2(q), \sigma\eta_3(q), \sigma\eta_4(q)). \end{aligned} \quad (53)$$

Здесь $\sigma \equiv (h_i^2/6)$ при $q = s \equiv (r - r_i)/h_i^2$ и $\sigma \equiv (g_j^2/6)$ при $q = t \equiv (\varphi - \varphi_j)/g_j$, функции η_1, \dots, η_4 заданы равенствами (42), а элементы матрицы \mathbf{T} — пока неизвестные коэффициенты, совпадающие со значениями сплайна и его производных в вершинах (r_n, φ_m) ячейки \mathcal{B}_{ij}^2 :

$$\begin{aligned} T_{kp} &= S_{nm} = S(r_n, \varphi_m), \quad T_{k,p+2} = N_{nm} = \partial_r^2 S(r_n, \varphi_m), \\ T_{k+2,p} &= M_{nm} = \partial_\varphi^2 S(r_n, \varphi_m), \quad T_{k+2,p+2} = K_{nm} = \partial_r^2 \partial_\varphi^2 S(r_n, \varphi_m), \end{aligned} \quad (54)$$

где $k = 1(2)$, если $n = i(i+1)$, а $p = 1(2)$, если $m = j(j+1)$. При любых S_{ij}, N_{ij}, M_{ij} и K_{ij} представление (53), (54) обеспечивает выполнение условий $S, \partial_\varphi^2 S, \partial_r^2 S \in \mathcal{C}^0(\mathcal{B}^2)$. Условия непрерывности производных $\partial_r S, \partial_\varphi S, \partial_r \partial_\varphi S$ во внутренних узлах (r_i, φ_j) , $i = 1, \dots, N - 1$, $j = 1, \dots, M - 1$, сетки $\Delta_{r\varphi}$ в совокупности с линейными ограничениями, наложенными на сплайн на границе \mathcal{G} области \mathcal{B}^2 , позволяют однозначно выразить все M_{ij}, N_{ij} и K_{ij} через S_{ij} . Такие выражения (связи) являются линейными, а входящие в них коэффициенты определяются только сеткой $\Delta_{r\varphi}$ и граничными условиями. Согласно (38) и (53) при любом фиксированном значении одного аргумента бикубический сплайн становится кубическим сплайном другой переменной. Это свойство позволяет найти M_{ij}, N_{ij} и K_{ij} наиболее экономным способом. Поясним его примером, использованным в [35].

Пример. Пусть на \mathcal{G} сплайн (53) подчинен тривиальным условиям

$$\begin{aligned} S, \partial_r^2 S, \partial_\varphi^2 S, \partial_r \partial_\varphi S &= 0, \quad r = 0, R, \quad \varphi \in [0, \pi/2]; \\ r \in [0, R], \quad \varphi &= 0, \pi/2. \end{aligned} \quad (55)$$

Пусть $\varphi = \varphi_j$, где j — одно из чисел $1, \dots, M - 1$. Условия непрерывности производной $\partial_r S$ во внутренних узлах (r_i, φ_j) , $i = 1, \dots, N - 1$, выбранного отрезка $r \in [0, R]$, $\varphi = \varphi_j$ дают систему из $N - 1$ уравнений

$$\nu_i N_{i-1,j} + 2N_{ij} + (1 - \nu_i) N_{i+1,j} = \frac{6\nu_i}{h_{i-1}} \left(\frac{S_{i+1,j} - S_{ij}}{h_i} - \frac{S_{ij} - S_{i-1,j}}{h_{i-1}} \right), \quad (56)$$

которая отличается от системы (45) лишь наличием углового индекса j , нумерующего неизвестные N_{ij} и S_{ij} . Согласно (55) $\partial_r^2 S(r) = 0$ при $r = r_0$ и

$r = r_N$. Поэтому в системе (56) положим $N_{0j}, N_{Nj} = 0$ и получим систему уравнений с матрицей \mathbf{A} , совпадающей с матрицей \mathbf{A} в ранее рассмотренном одномерном случае (45). Поэтому при выбранном и любом другом j

$$N_{ij} = 6 \sum_{k=1}^{N-1} B_{ik}^r S_{kj}, \quad i = 1, \dots, N-1; \quad N_{0j} = 0, \quad N_{Nj} = 0, \quad (57)$$

где матрица \mathbf{B}^r не зависит от $j = 1, \dots, M-1$ и задана равенствами (47).

Коэффициенты M_{ij} сплайна (53) определим из условий непрерывности производной $\partial_\varphi S$ во внутренних узлах (r_i, φ_j) каждого $(i = 1, \dots, N-1)$ отрезка $r = r_i, \varphi \in [0, \pi/2]$. Эти условия порождают системы

$$\begin{aligned} \mu_j M_{i,j-1} + 2M_{ij} + (1 - \mu_i) M_{i,j+1} &= \\ &= \frac{6\mu_j}{g_{j-1}} \left(\frac{S_{i,j+1} - S_{ij}}{g_j} - \frac{S_{ij} - S_{i,j-1}}{g_{j-1}} \right), \end{aligned} \quad (58)$$

где $j = 1, \dots, M-1$ для каждого $i = 1, \dots, N-1$. Исключив из каждой такой системы известные в силу условий (55) коэффициенты $M_{i0}, M_{iM} = 0$, получаем системы с одинаковой матрицей \mathbf{A} . Так как система (50) имеет ту же матрицу, то при каждом $i = 1, \dots, N-1$ существует двумерный аналог связи (51), (52):

$$M_{ij} = 6 \sum_{k=1}^{M-1} B_{jk}^\varphi S_{ik}, \quad j = 1, \dots, M-1; \quad M_{i0} = 0, \quad M_{iM} = 0. \quad (59)$$

Остается найти коэффициенты K_{ij} сплайна (53) из условий непрерывности производной $\partial_r \partial_\varphi S$ во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$. Для каждого $j = 1, \dots, M-1$ такие условия — системы линейных уравнений по индексу $i = 1, \dots, N-1$, которые получаются из систем (58) заменой

$$N_{ij} \rightarrow K_{ij}, \quad S_{ij} \rightarrow M_{ij}, \quad i = 0, \dots, N.$$

Каждую ($j = 1, \dots, M-1$) из таких систем дополним соответствующими первым и последним уравнениями

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

которые следуют из условий (55), а именно из равенства $\partial_r \partial_\varphi S(r, \varphi_j) = 0$ при $r = r_0, r_N$. Все ($j = 1, \dots, M-1$) полученные таким образом системы имеют одинаковую матрицу \mathbf{A} с диагональным преобладанием. Поэтому при любой сетке Δ_φ коэффициенты K_{ij} однозначно выражаются через коэффициенты M_{ij} , а значит, в силу связей (59) и через коэффициенты S_{ij} :

$$K_{ij} = 6 \sum_{k=1}^{N-1} B_{ik}^{r\varphi} M_{kj} = 36 \sum_{k=1}^{N-1} B_{ik}^{r\varphi} \sum_{p=1}^{M-1} B_{jp}^\varphi S_{kp}. \quad (60)$$

Приведенный пример демонстрирует важные для практического применения свойства представления (53), (54) сплайна S_{3311} : при любой сетке $\Delta_{r\varphi}$ все N_{ij} , M_{ij} и K_{ij} однозначно выражаются через S_{ij} . Более того, для вывода таких связей необходимо найти всего три матрицы: \mathbf{V}^r , \mathbf{V}^φ и $\mathbf{V}^{r\varphi}$. Не меньший интерес представляют свойства локальности и устойчивости сплайна S_{3311} , обусловленные тем, что определение его коэффициентов N_{ij} , M_{ij} и K_{ij} сводится к независимым сериям построений коэффициентов $N_i = S_{31}''(r_i)$ или $M_j = S_{31}''(\varphi_j)$ одномерных сплайнов и на каждом из трех этапов обращается матрица с диагональным преобладанием.

В каждой ячейке \mathcal{B}_{ij}^2 сплайны S_{3311} и S_{3322} можно представить как

$$\begin{aligned} S(r, \varphi) &\equiv S_{33\nu\nu}(r, \varphi) = \mathbf{P}(s)\mathbf{TP}^T(t), \\ \mathbf{P}(q) &\equiv (\xi_1(q), \xi_2(q), \sigma\xi_3(q), \sigma\xi_4(q)). \end{aligned} \quad (61)$$

Здесь $\sigma \equiv h_i$ при $q = s \equiv (r - r_i)/h_i^2$ и $\sigma \equiv g_j$ при $q = t \equiv (\varphi - \varphi_j)/g_j$; ξ_1, \dots, ξ_4 — функции (42), а элементы матрицы \mathbf{T} — узловые значения сплайна и его производных более низкого, чем в представлении (54), порядка:

$$\begin{aligned} T_{kp} &= S_{nm} = S(r_n, \varphi_m), & T_{k,p+2} &= n_{nm} = \partial_r S(r_n, \varphi_m), \\ T_{k+2,p} &= m_{nm} = \partial_\varphi S(r_n, \varphi_m), & T_{k+2,p+2} &= k_{nm} = \partial_r \partial_\varphi S(r_n, \varphi_m), \end{aligned} \quad (62)$$

где $k = 1(2)$, если $n = i(i+1)$, а $p = 1(2)$, если $m = j(j+1)$.

При любых коэффициентах n_{nm} , m_{nm} и k_{nm} и индексе $\nu = 1, 2$ представление (61), (62) обеспечивает непрерывность сплайна $S \equiv S_{33\nu\nu}$, $\nu = 1, 2$, и его производных $\partial_r S, \partial_\varphi S$ всюду в \mathcal{B}^2 . Следовательно, это представление верно для любого эрмитового сплайна S_{3322} . Его коэффициенты n_{ij} , m_{ij} и k_{ij} не зависят от коэффициентов S_{ij} . Для сплайна $S = S_{3311}$ условие $S \in \mathcal{C}^2(\mathcal{B}^2)$ сводится к условиям непрерывности производных $\partial_r^2 S, \partial_\varphi^2 S$ и $\partial_r^2 \partial_\varphi^2 S$ на внутренних отрезках сетки $\Delta_{r\varphi}$. Эти соотношения в совокупности с краевыми условиями позволяют однозначно представить все коэффициенты n_{ij} , m_{ij} и k_{ij} как линейные комбинации узловых значений S_{ij} сплайна S . Наиболее экономный способ вычисления таких комбинаций аналогичен способу, поясненному выше примером: сначала коэффициенты n_{ij} и m_{ij} выражаются через коэффициенты S_{ij} независимым образом, затем строятся коэффициенты k_{ij} как линейные комбинации уже найденных коэффициентов m_{ij} .

2.4. Разложения сплайнов единичного дефекта по фундаментальным сплайнам. Сначала опишем известное решение следующей задачи: пусть кроме сетки Δ_r имеется другая сетка $\Delta_\xi : -\infty < \xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_{N-n}$ и в пространстве $\mathcal{S}_{n1}(\Delta_\xi)$ сплайнов с узлами на этой сетке необходимо построить сплайн S_{n1} , удовлетворяющий интерполяционным условиям

$$S_{n1}(r_i) = F_i, \quad r_i \in \Delta_i, \quad i = 0, \dots, N, \quad (63)$$

где F_i — заданные вещественные числа. Такой сплайн называется интерполяционным, а исчерпывающий ответ на вопрос о разрешимости поставленной задачи дает следующий критерий. Для того чтобы существовал единственный интерполяционный сплайн S_{n1} , необходимо и достаточно, чтобы $r_{i-1} < \xi < r_{i+n}$, $i = 1, \dots, N - n$. Пусть эти условия выполнены, а система сплайнов $f_k \in \mathcal{S}_{n1}(\Delta_\xi)$, $k = 0, \dots, N$, подчиняется условиям интерполяции

$$f_k(r_i) = \delta_{ki}, \quad r_i \in \Delta_r. \quad (64)$$

Для пространства $\mathcal{S}_{n1}(\Delta_\xi)$ такие сплайны называются фундаментальными, потому что образуют в нем полный базис: если $S_{n1} \in \mathcal{S}_{n1}(\Delta_\xi)$ и $S_{n1}(r_i) = F_i$ для $r_i \in \Delta_r$, то существует единственное разложение

$$S_{n1}(r) = \sum_{k=0}^N F_k f_k(r). \quad (65)$$

Если $\Delta_r = \Delta_\xi$, то существует не один, а множество сплайнов S_{n1} , удовлетворяющих условиям (63), а полная система фундаментальных сплайнов, подчиненных условиям (64), содержит более чем $N + 1$ сплайн f_k . Для построения единственного интерполяционного сплайна кроме условий (63) требуется задать дополнительные условия.

Пример. Пусть $n = 3$ и условия (63) дополнены граничными условиями $S''_{31}(r_0) = F''(r_0)$ и $S''_{31}(r_N) = F''(r_N)$, где $F''(r_0)$ и $F''(r_N)$ — известные действительные числа. Тогда в пространстве $\mathcal{S}_{31}(\Delta_r)$ сплайнов, подчиненных обоим типам условий, базис образуют $N + 3$ следующих фундаментальных сплайна f_k . Сплайны с номерами $k = 0, \dots, N$ удовлетворяют условиям (64) и, кроме того, имеют нулевые вторые производные в концевых точках:

$$f_k(r_i) = \delta_{ki}, \quad f''_k(r_0) = f''_k(r_N) = 0, \quad i, k = 0, \dots, N. \quad (66)$$

Оставшиеся сплайны f_k , $k = -1$ и $k = N + 1$, равны нулю во всех узлах сетки Δ_r , а в ее крайних точках имеют единичные вторые производные:

$$f_k(r_i) = 0, \quad f''_k(r_j) = \delta_{|k|-1, j}, \quad i = 0, \dots, N, \quad j = 0, N.$$

Разложение искомого интерполяционного сплайна имеет вид

$$S_{31}(r) = \sum_{k=0}^N F_k f_k(r) + F''(r_0) f_{-1}(r) + F''(r_N) f_{N+1}(r).$$

Пример. Если $F''(r_0) = F''(r_N) = 0$, то полную систему образуют сплайны f_k , $k = 0, \dots, N$, со свойствами (66). Для случая (34), когда $R = 1$ и $N = 4$, такая система состоит из пяти сплайнов и изображена на рис. 1, а, а

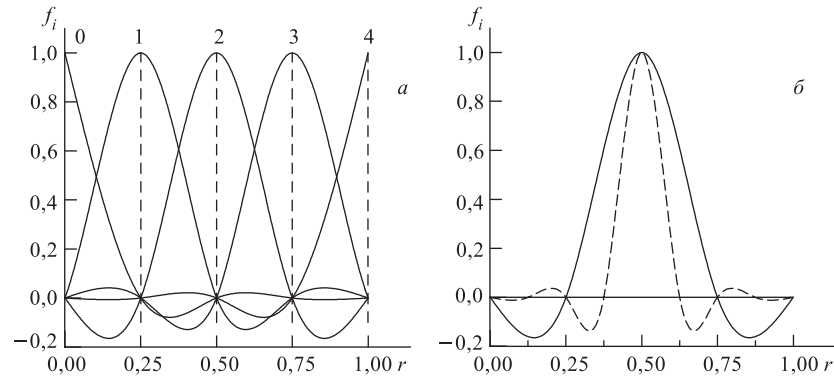


Рис. 1. Фундаментальные сплайны $f_i(r)$ в случае (34): а) сплошные кривые — сплайны f_i ; цифра над кривой — номер i сплайна f_i ; б) сплошная кривая — сплайн $f_2(r)$; штриховая кривая — сплайн $f_4(r)$ в случае $N = 8$

ее сплайн f_2 представлен сплошной кривой на рис. 1, б, на этом же рисунке штриховой кривой показан график сплайна f_4 системы, образованной девятью фундаментальными сплайнами, в случае равномерной ($h = 1/8$) сетки Δ_r из девяти ($N + 1 = 9$) узлов. Оба рисунка иллюстрируют основные свойства фундаментальных кубических сплайнов: каждый сплайн f_k — осциллирующая функция, не равная нулю на всем отрезке $[0, R]$ за исключением узлов r_i с $i \neq k$, амплитуда ее осцилляций быстро убывает при удалении аргумента r от положения главного максимума ($r = r_k$), производные f'_k и f''_k — тоже осциллирующие функции, причем производная f'_k в точке $r = r_k$ равна нулю, а в малой окрестности этой точки (см. рис. 1, б) резко возрастает по модулю при измельчении сетки.

Благодаря простоте представления (65) решения S_{n1} интерполяционной задачи фундаментальные сплайны широко применяются в теоретических исследованиях в качестве базисных, но из-за перечисленных осцилляционных свойств, порождающих большие ошибки округления, неудобны с вычислительной точки зрения. Действительно, при увеличении числа узлов сетки Δ_r численное суммирование ряда (65) в любой точке r , отличной от узловой, затрудняется и тем, что число его знакопеременных слагаемых растет, и тем, что их модули быстро убывают.

2.5. Разложения сплайнов по базисным сплайнам с конечными носителями. Рассмотренное кусочно-многочленное представление кубических сплайнов во многих случаях является удобным средством как при решении теоретических вопросов, так и в вычислительном отношении. В целом

ряде приложений вместо кусочно-полиномиального представления кубических сплайнов или их разложений по фундаментальным сплайнам более эффективным и удобным оказывается представление кубических сплайнов через базисные сплайны. Удобство обеспечивается в первую очередь тем, что базисные сплайны — финитные функции, отличные от нуля только на своих интервалах-носителях. Имеется два эквивалентных определения базисных сплайнов: аксиоматическое и конструктивное. Изложим последнее для кубических базисных сплайнов класса $C^2([0, R])$.

Пусть на отрезке $[r_{-3}, r_{N+3}]$ задана расширенная сетка δ_r . Сплайн $S_{31}(r)$, равный нулю вне интервала (r_{i-2}, r_{i+2}) , имеющий узлы в пяти точках $r = r_p$, $p = i \pm 2, i \pm 1, i$, и принимающий в средней точке $r = r_i$ значение

$$S_{31}(r_i) \equiv 1 - \frac{1}{r_{i+1} - r_{i-1}} \left(\frac{h_i^2}{r_{i+1} - r_{i-2}} + \frac{h_{i-1}^2}{r_{i+2} - r_{i-1}} \right), \quad (67)$$

называется *нормализованным* кубическим базисным сплайном класса C^2 или сокращенно B -сплайном и обозначается символом $B_i(r)$. На каждом $(i = -1, \dots, N + 1)$ промежутке $[r_{i-2}, r_{i+2}]$ существует только один сплайн B_i . Чтобы в этом убедиться, построим сплайн B_i . По определению B_i — сплайн S_{31} . Значит, на каждом $(p = i - 2, \dots, p = i + 1)$ из пяти промежутков $[r_p, r_{p+1}]$ для B_i верно представление (39), (40):

$$B_i(r) = B_{ip}\eta_1(s) + B_{i,p+1}\eta_2(s) + (h_p^2/6)[B_{ip}''\eta_3(s) + B_{i,p+1}''\eta_4(s)], \quad (68)$$

где $s \equiv (r - r_p)/h_p$ и для сокращения записи обозначено

$$B_{ip} \equiv B_i(r_p), \quad B'_{ip} \equiv \partial_r B_i(r_p), \quad B''_{ip} \equiv \partial_r^2 B_i(r_p) \equiv N_p.$$

Также по определению на концах интервала-носителя (r_{i-2}, r_{i+2})

$$\partial_r^q B_i(r_k) \equiv B_{ik}^{(q)} = 0, \quad q = 0, 1, 2, \quad k = i \pm 2. \quad (69)$$

Остальные узловые значения $B_{ik}^{(p)}$ сплайна B_i ($p = 0$) и его производных ($p = 1, 2$) единственным образом определяются равенствами (67) и (69) и условиями непрерывности его первой производной в трех узлах r_i и $r_{i\pm 1}$:

$$\begin{aligned} B_{ii}^{(p)} &= \delta_{p0} - (1 - 4\delta_{p1} + 5\delta_{p2})(r_{i+1} - r_{i-1}) \times \\ &\quad \times (h_i^{2-p}/(r_{i+1} - r_{i-2}) + (-1)^p h_{i-1}^2/(r_{i+2} - r_{i-1})), \\ B_{i,i-1}^{(p)} &= h^{p-2}(1 + 2\delta_{p1} + 5\delta_{p2})(r_i - r_{i-2})(r_{i+1} - r_{i-2}), \\ B_{i,i+1}^{(p)} &= h_{i+1}^{p-2}(1 - 4\delta_{p1} + 5\delta_{p2})(r_{i+2} - r_i)(r_{i+2} - r_{i-1}). \end{aligned} \quad (70)$$

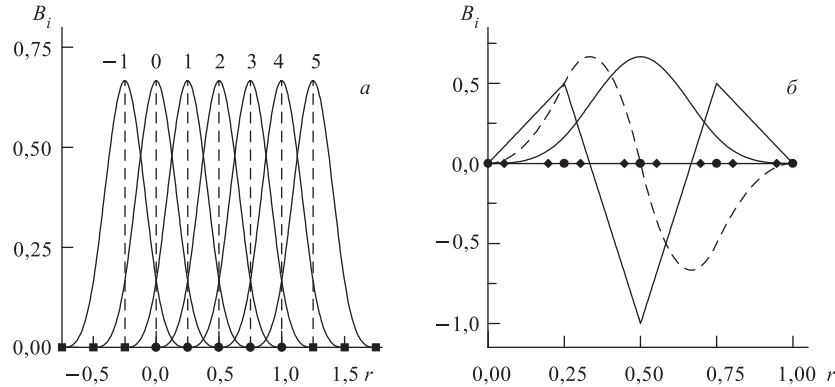


Рис. 2. B -сплайны $B_i(r)$ с узлами на сетке (34) (сплошные кривые), ее основные (кружки) и дополнительные (квадраты) узлы: a) цифра над кривой — номер i сплайна B_i ; b) сплошная кривая — сплайн $B_2(r)$; штриховая кривая — $hB'_2(r)$; ломаная линия — $h^2B''_2(r)/2$; ромбы — гауссовы узлы

Для любой сетки δ_r формулы (68) и (70) однозначно определяют сплайн B_i всюду на отрезке $[r_{-3}, r_{N+3}]$. Если сетка δ_r регулярная, то узловые значения B -сплайнов и их производных не зависят от номера узла:

$$\begin{aligned} 4B_{i,i+1} = B_{ii} = \frac{2}{3}; \quad B'_{i,i+1} = \pm \frac{1}{2h}, \quad B''_{ii} = 0; \\ 2B''_{i,i+1} = -B''_{ii} = \frac{2}{h^2} \end{aligned} \quad (71)$$

и поэтому формула (68) становится предельно простой: на отрезке $[r_p, r_{p+1}]$, $p = i - 2, \dots, i + 1$, сплайн B_i зависит от аргумента $s = (r - r_p)/h$ как

$$\begin{aligned} B_i = \frac{1}{6}s^3, \quad B_i = \frac{1}{2}s(-s^2 + s + 1) + \frac{1}{6}, \\ B_i = \frac{1}{2}s^2(s - 1) + \frac{2}{3}, \quad B_i = \frac{1}{6}(1 - s)^3. \end{aligned}$$

Пример. Для обсуждения финитных свойств B -сплайнов и их производных рассмотрим случай (35), когда имеется всего семь B -сплайнов. Их графики изображены на рис. 2, a , а на рис. 2, b представлены сплайн B_2 (сплошная кривая) и его масштабированные производные: hB'_2 — штриховая кривая и $h^2B''_2/2$ — ломаная линия. Пять основных узлов ($r_i = hi$, $i = 0, \dots, 4$) сетки (35) отмечены кружками, дополнительные узлы показаны квадратами,

а ромбами помечены узлы гауссовой сетки (36). Как видно, каждый сплайн B_i и обе его производные B'_i и B''_i равны нулю вне интервала-носителя (r_{i-2}, r_{i+2}) . На этом интервале $B_i \neq 0$, $B'_i = 0$ только в узле r_i , а $B''_i = 0$ только в двух точках $a_i^\pm = r_i \pm 2h/3$. В любом узле r_i не равны нулю значения трех B -сплайнов B_k , $k = i, i \pm 1$, и их производных B'_k . В любой точке интервала (r_i, r_{i+1}) не обращаются в нуль только четыре B -сплайна B_k , $k = i - 1, \dots, i + 2$, а их производные B'_k и B''_k отличны от нуля за исключением случаев $k = i$, $r = r_k$ и $k = i$, $r = a_k^\pm$. Нули второй производной B''_k , вообще говоря, не совпадают с узлами гауссовой сетки $\tilde{\Delta}_r$.

Система всех сплайнов B_i обладает свойствами

$$\sum_{i=-1}^{N+1} B_i(r) = 1, \quad r \in [0, R] \implies \sum_{p=i-1}^{i+1} \partial_r^n B_p(r_i) = 0, \quad \forall i, \quad n = 1, 2,$$

и является полным базисом в линейном пространстве $\mathcal{S}_{31}(\Delta_r)$ сплайнов S_{31} с узлами на сетке Δ_r . Любой сплайн из этого пространства — линейная комбинация B -сплайнов и однозначно определяемых коэффициентов X_i :

$$S_{31}(r) = \sum_{i=-1}^{N+1} X_i B_i(r), \quad 0 \leq r \leq R. \quad (72)$$

Базисные сплайны $B_j(\varphi)$ с узлами на сетке δ_φ строятся аналогично. Чтобы отличать их от сплайнов $B_i(r)$, полагаем $\bar{B}_j(\varphi) \equiv B_j(\varphi)$.

Произведения $B_i(r)\bar{B}_j(\varphi)$ образуют базис пространства сплайнов $S_{3311}(r, \varphi)$ с узлами на сетке $\Delta_{r\varphi}$: любой бикубический сплайн $S_{3311}(r, \varphi)$ можно однозначно представить двойной суммой с коэффициентами X_{nm} :

$$S_{3311}(r, \varphi) = \sum_{n=-1}^{N+1} \sum_{m=-1}^{M+1} X_{nm} B_n(r) \bar{B}_m(\varphi), \quad (r, \varphi) \in \mathcal{B}^2. \quad (73)$$

Из-за такого представления и финитности B -сплайнов сплайн $S = S_{3311}$ и все его частные производные в узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ — суммы девяти слагаемых:

$$\partial_r^p \partial_\varphi^q S_{3311}(r_i, \varphi_j) = \sum_{n=i-1}^{i+1} \sum_{m=j-1}^{j+1} X_{nm} B_n^{(p)} \bar{B}_m^{(q)}, \quad p, q = 0, 1, 2. \quad (74)$$

Так как коэффициенты S_i и $n_i \equiv S'_i$ эрмитового сплайна (41) не зависят друг от друга, то базисные эрмитовы кубические сплайны строятся и выглядят более просто, чем B -сплайны класса C^2 . Пусть при некотором i , подчиненном неравенствам $0 \leq i \leq N$, функции $\phi_i(r)$ и $\psi_i(r)$ — эрмитовы кубические сплайны со следующими значениями в узле r_p :

$$\phi_{ip} = \delta_{ip}, \quad \phi'_{ip} = 0; \quad \psi_{ip} = 0, \quad \psi'_{ip} = \delta'_{ip}, \quad p = i, i \pm 1. \quad (75)$$

Тогда из (41) и (42) следует, что ϕ_i и ψ_i равны нулю вне своего интервала-носителя (r_{i-1}, r_{i+1}) , а на подмножествах $[r_{i-1}, r_i)$ и $[r_i, r_{i+1}]$ этого интервала совпадают с соответствующими функциями (42):

$$\begin{aligned} \phi_i(r) &= \xi_2(s), \quad \psi_i(r) = h_{i-1} \xi_4(s), \quad s = \frac{r - r_{i-1}}{h_{i-1}}, \quad r \in [r_{i-1}, r_i); \\ \phi_i(r) &= \xi_1(s), \quad \psi_i(r) = h_i \xi_3(s), \quad s = \frac{r - r_i}{h_i}, \quad r \in [r_i, r_{i+1}]. \end{aligned} \quad (76)$$

Значит, условия (75) однозначно определяют систему сплайнов ϕ_i, ψ_i , $i = 0, \dots, N$, на отрезке $[r_{-1}, r_{N+1}]$. Эта система — полный базис в пространстве сплайнов S_{32} с узлами на той же сетке Δ_r . Действительно, вследствие (75) и (76) для любого сплайна S_{32} существует единственное представление

$$S_{32}(r) = \sum_{i=0}^N S_i \phi_i(r) + \sum_{i=0}^N n_i \psi_i(r), \quad r \in [0, R], \quad (77)$$

или в обозначениях работы [38]

$$\begin{aligned} S_{32}(r) &= \sum_{n=0}^{2N+1} X_n s_n(r), \quad X_{2i} \equiv S_i, \quad X_{2i+1} \equiv n_i, \\ s_{2i}(r) &\equiv \phi_i(r), \quad s_{2i+1}(r) \equiv \psi_i(r). \end{aligned} \quad (78)$$

Пример. Рис. 3 иллюстрирует конечные свойства сплайнов $s_n(r)$. Кружками отмечены пять основных узлов равномерной сетки (35), а ромбами — узлы гауссовой сетки (36). На рис. 3, *a, в* изображены полные системы сплайнов с четными и нечетными номерами n соответственно. На рис. 3, *б, г* сплошными кривыми представлены сплайны s_4 и s_3 , а штриховыми и ломаными линиями — их масштабированные первые ($hs'_4, hs'_3/8$) и вторые ($h^2 s''_4/24, h^2 s''_3/16$) производные. Как видно, в каждом узле r_i отличен от нуля только сплайн s_n с четным индексом $n = 0, 2, \dots$, а в любой точке подынтервала (r_i, r_{i+1}) не равны нулю только четыре сплайна $s_{2k} = \phi_k$, $k = i, i+1$; $s_{2i+1} = \psi_i$ и их производные.

Базисные эрмитовы сплайны $s_m(\varphi)$, $m = 0, \dots, 2M$, строятся на отрезке $[\varphi_{-1}, \varphi_{M+1}]$, так же как и сплайны $s_n(r)$. Далее полагаем $\bar{s}_m(\varphi) \equiv s_m(\varphi)$.

Система функций $s_n(r)\bar{s}_m(\varphi)$ — полный базис в пространстве эрмитовых бикубических сплайнов (38) с узлами на сетке $\Delta_{r\varphi}$: любой такой сплайн — двойная сумма с однозначно определяемыми коэффициентами X_{nm} :

$$S_{3322}(r, \varphi) = \sum_{n=0}^{2N+1} \sum_{m=0}^{2M+1} X_{nm} s_n(r) \bar{s}_m(\varphi), \quad (r, \varphi) \in \mathcal{B}^2. \quad (79)$$

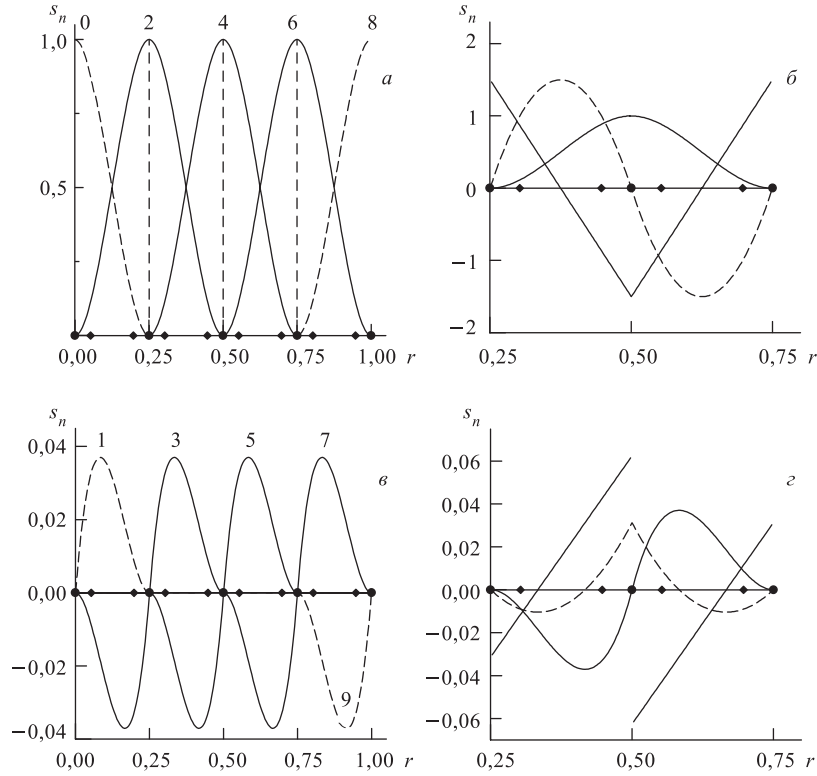


Рис. 3. Эрмитовы сплайны $s_n(r)$ с узлами на сетке (34) (сплошные кривые), ее основные узлы (кружки), гауссовы узлы (ромбы): а) и в) цифра над кривой — номер n сплайна s_n ; штриховые кривые — сплайны с экстремальными четными и нечетными номерами; б) и з) сплошные кривые — сплайны $s_4(r)$ и $s_3(r)$; штриховые кривые — $hs'_4(r)$ и $hs'_3(r)/8$; ломаные линии — $h^2s''_4(r)/24$ и $h^2s''_3(r)/16$

Из-за финитных свойств функций s_n и \bar{s}_m сплайн и его производные в любой внутренней точке (r, φ) ячейки \mathcal{B}_{ij} — суммы четырех слагаемых:

$$\partial_r^p \partial_\varphi^q S_{3322}(r, \varphi) = \sum_{n=2i-1}^{2i+2} \sum_{m=2j-1}^{2j+2} X_{nm} s_n^{(p)}(r) \bar{s}_m^{(q)}(\varphi), \quad p, q = 0, 1, 2. \quad (80)$$

2.6. Задачи интерполяции и численного дифференцирования. Интерполяционным эрмитовым сплайном $S_{32}(r; F)$ для функции F называется сплайн,

подчиненный условиям

$$S_{32}(r_i; F) = F_i, \quad S'_{32}(r_i; F) = F'_i, \quad i = 0, \dots, N,$$

где F_i и F'_i — заданные узловые значения функции F и ее производной. Если положить $S_i = F_i$ и $n_i = F'_i$, то на каждом отрезке $[r_i, r_{i+1}]$ сплайн $S_{32}(r; F)$ однозначно определится формулами (41) и (42) с $\nu = 2$.

Для построения представления (39) или (41), $\nu = 1$, сплайна $S_{31}(r; F)$, интерполирующего функцию F , требуется меньшая информация: узловые значения функции и два крайних условия. Построение выполняется по простой схеме: сначала полагается $S_i = F_i$, $i = 0, \dots, N$, затем все коэффициенты N_i определяются из системы уравнений, полученной дополнением уравнений (45) двумя дискретными аналогами крайних условий. При граничных условиях (44) существует единственный сплайн $S_{31}(r; F)$.

Точность аппроксимации функций $F^{(p)}$ сплайном $S_{3\nu}(r; F)$, $\nu = 1, 2$,

$$\varepsilon_{p\nu} \equiv \|S_{3\nu}^{(p)}(r; F) - F^{(p)}(r)\|_\infty \quad (81)$$

зависит от гладкости функции F . Например, для сплайна $S_{32}(r; F)$ имеют место *неулучшаемые* оценки

$$\varepsilon_{02} = 3h\omega(F')/8, \quad F \in \mathcal{C}^1([0, R]); \quad \varepsilon_{02} = h^2\omega(F'')/32, \quad F \in \mathcal{C}^1\mathcal{C}_{\Delta_r}^2.$$

Порядки погрешностей аппроксимаций сплайнами $S_{3\nu}(r; F)$, $\nu = 1, 2$, в соответствующем классе $\mathcal{C}^{3-\nu}\mathcal{W}_{\Delta_r, \infty}^4([0, R])$ являются наивысшими:

$$\varepsilon_{p\nu} \leq K_{p\nu} h^{4-p} \|F^{(4)}\|_\infty, \quad p = 0, 1, 2; \quad \nu = 1, 2, \quad (82)$$

где $K_{p\nu}$ — известные константы, причем такие, что все эти оценки за исключением случаев $\nu = 1$, $p = 2, 3$ — неулучшаемые. Дальнейшее увеличение гладкости функции не приводит к повышению порядка аппроксимации по норме на всем отрезке $[0, R]$. Однако если $F \in \mathcal{C}^k([r_i, r_{i+1}])$, $k > 4$, то при интерполяции сплайном S_{32} поточечные оценки аппроксимации производных F' , F''' и F'' улучшаются на порядок в середине \bar{r}_i отрезка $[r_i, r_{i+1}]$ и в двух принадлежащих ему гауссовых узлах r_i^\pm соответственно:

$$\begin{aligned} F'(\bar{r}_i) &= S'_{32}(\bar{r}_i; F) - \frac{h_i^4}{1920} F^{(4)}(\bar{r}_i) + O(h_i^5), \\ F'''(\bar{r}_i) &= S'''_{32}(\bar{r}_i; F) + \frac{1}{40} h^2 F^{(5)}(\bar{r}_i) + O(h_i^3), \\ F''(r_i^\pm) &= S''_{32}(r_i^\pm; F) \pm \frac{\sqrt{3}}{540} h_i^3 F^{(5)}(r_i^\pm) + O(h_i^4). \end{aligned} \quad (83)$$

В случае интерполяции функции F сплайном S_{31} точность приближения ее производных F' , F''' и F'' также улучшается на порядок в тех же точках, но при более жестких условиях: $F \in \mathcal{W}_\infty^5([0, R])$, а сетка Δ_r — регулярная.

Опишем еще один известный случай, когда порядок поточечной аппроксимации производных интерполируемой сплайном S_{31} и достаточно гладкой функции $F \in C^k([0, R])$, $k > 8$, можно заметно улучшить, но только в узлах r_i равномерной сетки Δ_r . Пусть сплайн S_{31} интерполирует функцию F на такой сетке, причем эта функция удовлетворяет периодическим граничным условиям $\partial_r^p S_{31}(F; 0) = \partial_r^p S_{31}(F; 0)$, $p = 1, 2$, или на концах отрезка $[0, R]$ известны ее производные второго и четвертого порядков, или же в тех же точках известны ее первая и пятая производные. Тогда во внутренних узлах r_i верны формулы дифференцирования повышенной точности

$$\begin{aligned} F'_i &= S'_i + O(h^4) = \frac{S_{i+1} - S_i}{h} - h \frac{2N_{i+1} + N_i}{6} + O(h^4), \\ F''_i &= \frac{1}{12} (N_{i-1} + 10N_i + N_{i+1}) - \frac{h^4}{360} F_i^{(4)} - \frac{h^6}{6048} F_i^{(8)} + O(h^8), \\ F'''_i &= \frac{1}{2h} (N_{i+1} - N_{i-1}) - \frac{h^2}{12} F_i^{(5)} + \frac{h^4}{360} F_i^{(7)} + O(h^6), \\ F_i^{(4)} &= \frac{1}{h^2} (N_{i+1} - 2N_i + N_{i-1}) + \frac{h^4}{720} F_i^{(8)} + O(h^6). \end{aligned} \quad (84)$$

Первая из них означает, что обычная формула для производной первого порядка аппроксимирует производную функции F в узле равномерной сетки с точностью $O(h^4)$, что на порядок выше, чем в случае неравномерной сетки. Последняя формула является наиболее неожиданной. Действительно, производная $\partial_r^4 S$ равна нулю, если $r \neq r_i$, и не определена при $r = r_i$, но разнесенная разность второго порядка, составленная из узловых значений N_k , $k = i, i \pm 1$, второй производной сплайна приближает производную $\partial_r^4 F$ с максимально возможной для сплайна третьей степени точностью $O(h^4)$.

Сплайны $S_{33\nu\nu}(r, \varphi; F)$, $\nu = 1, 2$, интерполирующие в области \mathcal{B}^2 функцию $F(r, \varphi)$ двух переменных, определяются по аналогии с одномерным случаем. Интерполяционный сплайн $S_{3322}(r, \varphi; F)$ — функция, представляемая в виде (61), (62) или (79) и удовлетворяющая условиям интерполяции

$$D^{(p,q)} S_{3322}(r_i, \varphi_j; F) = F_{ij}^{(p,q)} \equiv \partial_r^p \partial_\varphi^q F(r_i, \varphi_j), \quad p, q = 0, 1,$$

где $F_{ij}^{(p,q)}$ — заданные в каждом узле сетки $\Delta_{r\varphi}$ значения функции F и ее производных первого порядка. Построение сплайна $S_{3322}(r, \varphi; F)$ сводится к подстановке $S_{ij} = F_{ij}$, $n_{ij} = F_{ij}^{(1,0)}$, $m_{ij} = F_{ij}^{(0,1)}$ и $k_{ij} = F_{ij}^{(1,1)}$ в формулы (61) и (62). Для построения интерполяционного сплайна $S_{3311}(r, \varphi; F)$ по формулам (53), (54) или (73) требуется меньшая информация. Достаточно задать все $(N + 1)(M + 1)$ узловых значения сплайна $S_{3311}(r, \varphi; F)$:

$$S_{3311}(r_i, \varphi_j; F) = F_{ij}, \quad \forall (r_i, \varphi_j) \in \Delta_{r\varphi} \quad (85)$$

и подчинить его дополнительным $2(N+M+2)$ условиям на границе \mathcal{G} области \mathcal{B}^2 , например двумерным аналогам условий (44) с $p = 1$ или $p = 2$:

$$\begin{aligned} D^{(p,0)} S_{3311}(r_i, \varphi_j; F) &= F_{ij}^{(p,0)}, \quad i = 0, N, \quad j = 0, \dots, M; \\ D^{(0,p)} S_{3311}(r_i, \varphi_j; F) &= F_{ij}^{(0,p)}, \quad i = 0, \dots, N, \quad j = 0, M; \\ D^{(p,p)} S_{3311}(r_i, \varphi_j; F) &= F_{ij}^{(p,p)}, \quad i = 0, N, \quad j = 0, \dots, M. \end{aligned} \quad (86)$$

При условиях (85) и (86) имеется единственный интерполяционный сплайн $S_{3311}(r, \varphi; F)$. Его коэффициенты N_{ij} , M_{ij} и K_{ij} последовательно выражаются через заданные узловые значения $S_{ij} = F_{ij}$ функции F и значения ее производных на границе \mathcal{G} . Пример, поясняющий такое построение в случае (55), приведен в разд. 1.

Погрешности интерполяции функции $F(r, \varphi)$ сплайном $S_{33\nu\nu}(r, \varphi; F)$ являются наилучшими в соответствующем классе $\mathcal{C}^{3-\nu, 3-\nu} \mathcal{W}_{\Delta, \infty}^{44}(\mathcal{B}^2)$:

$$\begin{aligned} \|D^{(p,q)} [S_{33\nu\nu}(r, \varphi; F) - F(r, \varphi)]\|_{\infty} &\leq K_{p\nu} h^{4-p} \|D^{(4,q)} F\|_{\infty} + \\ &+ K_{q\nu} g^{4-q} \|D^{(p,4)} F\|_{\infty} + K_{p\nu} K_{q\nu} h^{4-p} q^{4-q} \|D^{(4,4)} F\|_{\infty}, \end{aligned} \quad (87)$$

где $K_{p\nu}$ и $K_{q\nu}$ — константы; $\nu = 1, 2$, а $p, q = 0, \dots, 3$. Дальнейшее увеличение гладкости функций не приводит к улучшению аппроксимации во всей области \mathcal{B}^2 . Однако поточечные оценки могут быть улучшены. Если $F \in \mathcal{C}^{k,k}(\mathcal{B}_{ij}^2)$, $k > 4$, то, как следует из (83), на средних ($r = \bar{r}_i$ или $\varphi = \bar{\varphi}_j$) и гауссовых ($r = r_i^{\pm}$ или $\varphi = \varphi_j^{\pm}$) отрезках (точках) ячейки \mathcal{B}_{ij}^2 погрешности приближения производных интерполяционным сплайном S_{3322} на порядок выше соответствующих погрешностей по норме (87). Погрешность на порядок выше для $D^{(1,0)} F$ и $D^{(3,q)} F$, $q = 0, 1, 2$, — на отрезке $r = \bar{r}_i$; для $D^{(p,3)} F$ и $D^{(0,1)} F$ — на отрезке $\varphi = \bar{\varphi}_j$; для $D^{(2,q)} F$, $q = 0, 1$, — на отрезке $r = r_i^{\pm}$; для $D^{(p,2)} F$, $p = 0, 1$, — на отрезке $\varphi = \varphi_j^{\pm}$; для $D^{(p,p)} F$, $p = 1, 3$, — в одной точке ($\bar{r}_i, \bar{\varphi}_j$) и, наконец, для $D^{(2,2)} F$ — в четырех точках ($r_i^{\pm}, \varphi_j^{\pm}$). При интерполяции сплайном S_{3311} такое же улучшение точности имеет место при более жестких условиях: $F \in \mathcal{C}^{k,k}(\mathcal{B}^2)$, $k > 6$, и хотя бы одна из сеток Δ_r и Δ_{φ} — регулярная. Если регулярна сетка Δ_r , то погрешности приближения производных интерполяционным сплайном S_{3311} на порядок выше соответствующих погрешностей по норме (87): при $r = \bar{r}_i, r_i^{\pm}$ и любых $\varphi = \varphi_j$. Если же регулярна сетка Δ_{φ} , — то при $\varphi = \bar{\varphi}_j, \varphi_j^{\pm}$ и любых $r = r_i$.

Докажем, что поточечные оценки можно улучшить еще в двух случаях. Пусть $F \in \mathcal{C}^{k,k}(\mathcal{B}^2)$, $k > 8$, одна из сеток Δ_r или Δ_{φ} — равномерная, а граничные условия по r и φ — периодические. Тогда, но только для внутренних узлов сетки $\Delta_{r\varphi}$, имеются формулы дифференцирования повышенной точности, которые являются двумерными аналогами формул (84). Это утвер-

ждение справедливо, потому что при каждом $r = r_i$ или же $\varphi = \varphi_j$ бикубический сплайн $S = S_{3311}$ становится сплайном оставшейся одной переменной $S_i(\varphi) = S_{31}(\varphi) = S(r_i, \varphi)$ или же $S_j(r) = S_{31}(r) = S(r, \varphi_j)$. Чтобы дать примеры аналогов формул (84), положим для краткости записи $S = S_{3311}$ и

$$\tau_{nm} \equiv O(h^n + g^m), \quad h, g \rightarrow 0.$$

Пример. Пусть сетка Δ_r — регулярная, а сетка Δ_φ — произвольная. Формулы дифференцирования повышенной точности по r в точке (r_i, φ_j) получаются из формул (84) заменой $S_k \rightarrow S_{kj}$, $N_k \rightarrow N_{kj}$, т. е. добавлением индекса j , нумерующего одномерные сплайны $S_j(r) \equiv S(r, \varphi_j)$. Во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ вместо обычной формулы дифференцирования

$$\partial_r^2 F(r_i, \varphi_j) = N_{ij} + \tau_{22}, \quad N_{ij} \equiv \partial_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j),$$

выгоднее использовать формулу дифференцирования повышенной на два порядка по шагу h точности

$$\begin{aligned} \partial_r^2 F(r_i, \varphi_j) &= \bar{\partial}_r^2 S(r_i, \varphi_j) + \tau_{44}, \\ \bar{\partial}_r^2 S(r_i, \varphi_j) &\equiv \frac{1}{12}(N_{i-1,j} + 10N_{ij} + N_{ij}). \end{aligned} \quad (88)$$

Пример. Пусть теперь, наоборот, сетка Δ_φ — регулярная, а сетка Δ_r — произвольная. Формулы дифференцирования повышенной точности по φ в точке (r_i, φ_j) получаются из формул (84) заменой $S_k \rightarrow S_{ik}$ и $N_k \rightarrow M_{ik}$, т. е. добавлением индекса i , нумерующего одномерные сплайны $S_i(\varphi) \equiv S(r_i, \varphi)$. Сравним формулы дифференцирования обычной и повышенной точности. Во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ вместо формулы

$$\partial_\varphi^2 F(r_i, \varphi_j) = M_{ij} + \tau_{42}, \quad M_{ij} = \partial_r^2 S(r_i, \varphi_j),$$

выгоднее использовать формулу дифференцирования повышенной на два порядка по шагу g точности

$$\begin{aligned} \partial_\varphi^2 F(r_i, \varphi_j) &= \bar{\partial}_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j) + \tau_{44}, \\ \bar{\partial}_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j) &\equiv \frac{1}{12}(M_{i-1,j} + 10M_{ij} + M_{ij}), \end{aligned} \quad (89)$$

а вместо формулы

$$\partial_\varphi^3 F(r_i, \varphi_j) = \partial_\varphi^3 S(r_i, \varphi_j) + \tau_{41}, \quad \partial_\varphi^3 S(r_i, \varphi_j) = (M_{i,j+1} - M_{ij})/g \quad (90)$$

выгоднее применять формулу дифференцирования повышенной на порядок по шагу g точности

$$\partial_\varphi^3 F(r_i, \varphi_j) = \bar{\partial}_\varphi^3 S(r_i, \varphi_j) + \tau_{42}, \quad \bar{\partial}_\varphi^3 S(r_i, \varphi_j) \equiv \frac{1}{2g}(M_{i,j+1} - M_{i,j-1}). \quad (91)$$

Только во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ определено приближение для производной четвертого порядка:

$$\begin{aligned}\partial_{\varphi}^4 F(r_i, \varphi_j) &= \bar{\partial}_{\varphi}^4 S(r_i, \varphi_j) + \tau_{44}, \\ \bar{\partial}_{\varphi}^4 S(r_i, \varphi_j) &\equiv \frac{1}{g^2}(M_{i,j+1} - 2M_{ij} + M_{i,j-1}),\end{aligned}\quad (92)$$

и только в этих же узлах формула

$$\begin{aligned}\partial_{\varphi} F(r_i, \varphi_j) &= \bar{\partial}_{\varphi} S(r_i, \varphi_j) + \tau_{44}, \\ \bar{\partial}_{\varphi} S(r_i, \varphi_j) &\equiv \partial_{\varphi} S(r_i, \varphi_j) = (S_{i,j+1} - S_{ij})/g - (g/6)(2M_{ij} + M_{i,j+1})\end{aligned}\quad (93)$$

позволяет приблизить первую производную с лучшей на порядок по шагу g точностью, чем в случае неравномерной сетки Δ_{φ} .

Замечания. Сплаины класса C^2 широко применяются в вычислительной практике по простой причине: для достаточно гладких функций оценки (82) и (87) приближения интерполяционными сплайнами класса C^2 сравнимы с соответствующими оценками для эрмитовых интерполяционных сплайнов, но для построения сплайнов $S_{31}(r; F)$ и $S_{3311}(r, \varphi; F)$ не требуется задание производных в узлах сетки — обстоятельство крайне важное для решения многих практических задач, в частности для построения дискретных сплайн-аналогов уравнений Фаддеева.

3. ДИСКРЕТНЫЕ АНАЛОГИ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА В БИСФЕРИЧЕСКОМ БАЗИСЕ

Сначала напомним необходимые определения из теории матриц [84] и общую схему метода сплайн-коллокации [32, 48, 52].

На рис. 4, *а, б* некоторая квадратная матрица \mathbf{A} представлена как решетка из отрезков горизонтальных и вертикальных прямых (строк и столбцов). По определению узлы этой решетки (точки пересечения отрезков), помеченные ромбами и кружками, вообще говоря, ненулевые элементы матрицы \mathbf{A} . Все остальные равны нулю. Матрица, имеющая нулевые элементы, называется разреженной. Разреженная матрица, изображенная на рис. 4, *а*, будет трехдиагональной матрицей, если ее элементы, представленные ромбами, и элементы, указанные стрелками, окажутся нулевыми. На рис. 4, *в, г* изображено произведение $\mathbf{A} \times \mathbf{X}$ квадратной матрицы \mathbf{A} на блок-столбец \mathbf{X} . Матрица \mathbf{A} представлена квадратной сеткой, каждая ее ячейка (блок), помеченная буквой, — квадратная матрица размерностью $M \geq 1$ с хотя бы одним отличным от нуля элементом, а пустая ячейка — матрица, размерность которой та же, но все элементы нулевые. Совокупность всех ячеек, попарно соприкасающихся сторонами, к которым можно провести перпендикулярную горизонтальную (вертикальную) прямую, называется блок-строкой (блок-столбцом).

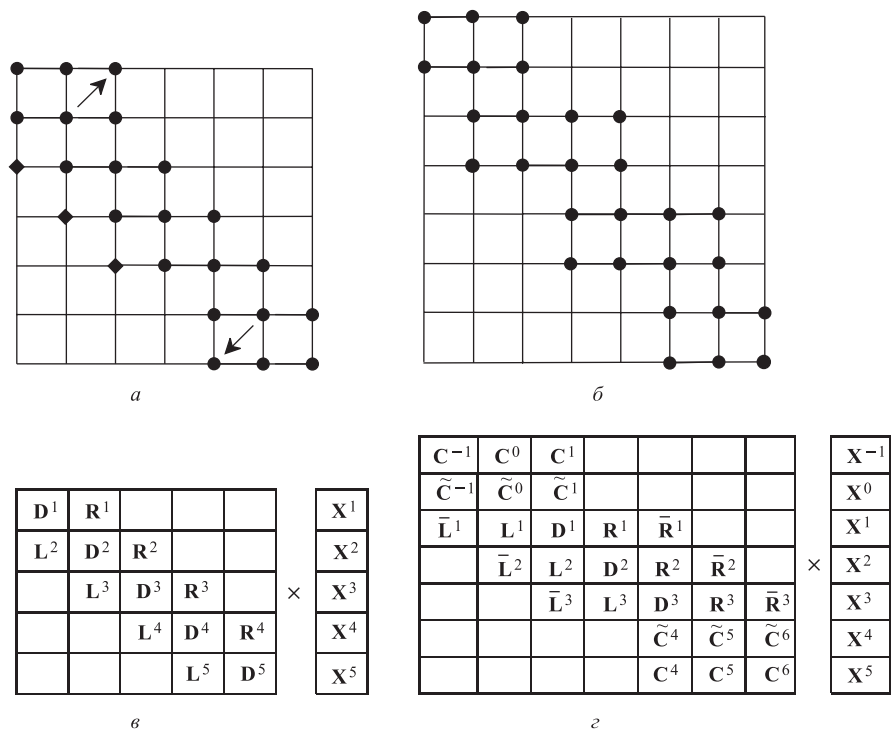


Рис. 4. Примеры разреженных матриц A (a , b) и их произведений $A \times X$ на блок-столбец X (v , z)

Например, первая блок-строка матрицы A на рис. 4, v есть $D^1, R^1, 0, 0, 0$, а набор пяти блоков X^i — блок-столбец X . Все ячейки, противоположные углы которых лежат на одной прямой, образуют блок-диагональ. Для матрицы A на рис. 4, v главную блок-диагональ образуют блоки D^1, \dots, D^5 , блоки L^2, \dots, L^5 составляют нижнюю блок-диагональ, а блоки R^1, \dots, R^4 — верхнюю блок-диагональ. Все оставшиеся блок-диагонали нулевые, поэтому матрица A называется блочно-трехдиагональной. Так как при $|i - j| > 3M$ все матричные элементы A_{ij} равны нулю, то эта матрица A — ленточная, а ширина ее ленты — $3M$. Матрица A на рис. 4, z тоже ленточная, но уже в общем случае блочно-пятидиагональная матрица.

Пусть функция $F(r, \varphi)$ в области B^2 удовлетворяет некоторому дифференциальному (интегродифференциальному) уравнению в частных производных, а на границе G этой области подчиняется некоторым граничным условиям. Совокупность уравнения и граничных условий называется краевой за-

дачей. В методе сплайн-коллокации искомое решение $F(r, \varphi)$ краевой задачи в области \mathcal{B}^2 заменяется сплайном $X(r, \varphi) = S(r, \varphi)$ с неизвестными коэффициентами, но с узлами на заданной сетке $\Delta_{r\varphi} \in \mathcal{B}^2$. Затем сплайн подчиняется той же краевой задаче, но лишь на выбранном дискретном множестве $\Delta_{r\varphi}^c \in \mathcal{B}^2$ точек (r_i^c, φ_j^c) , называемых узлами коллокации. Таким образом выводится конечная система линейных уравнений $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{Q}$. В ней \mathbf{X} — столбец из неизвестных коэффициентов сплайна, \mathbf{A} — всегда известная матрица, \mathbf{Q} — либо известный столбец, либо $\mathbf{Q} \equiv E\mathbf{B}\mathbf{X}$, где E — искомое собственное значение, а \mathbf{B} — известная, но не всегда единичная матрица. Система $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{Q}$ называется дискретным аналогом исходной краевой задачи. Из всех дискретных аналогов оптимальным представляется тот, в котором числа узлов сетки, искомых коэффициентов, ненулевых элементов и размерность матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} минимальны, а порядки аппроксимации $D^{(p,q)}F \approx D^{(p,q)}S$ наивысшие для выбранного способа дискретизации.

Далее после постановки в области \mathcal{B}^2 самой простой двумерной краевой интегродифференциальной задачи трех частиц кратко описываются и сравниваются девять алгоритмов ее дискретизации. Первый из них основан на трехточечной конечно-разностной аппроксимации [32] производных $\partial_r^2 F$ и $\partial_\varphi^2 F$ искомой функции $F(r, \varphi)$. Второй алгоритм — объединение такой аппроксимации по переменной r и метода сплайн-коллокации по переменной φ . Все остальные алгоритмы — различные реализации метода сплайн-коллокации [32, 48, 52].

3.1. Постановка самых простых краевых задач. Применяя квантовую теорию рассеяния [5] и следуя работам [35, 36], сформулируем краевые задачи для системы трех тождественных бозонов в случае $\ell = 0$ и не сингулярных S -волновых парных взаимодействий. Пусть $x \equiv x_1$ и

$$V_1(x) \in \mathcal{C}_{(0, \infty)}^2, \quad \lim_{x \rightarrow 0} xV_1(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} x^2V_1(x) = 0, \quad (94)$$

а парный S -волновой гамильтониан $-\partial_x^2 + V_1(x)$ имеет только одно связанное состояние с энергией e и радиальной волновой функцией $u(x)$.

Подстановкой $U(r, \varphi) = r^{-1/2}F(r, \varphi)$ сведем уравнение (24) к уравнению, не содержащему оператор ∂_r . В интегральную часть получившегося уравнения, следуя общей теории [5], добавим функцию F^{in} , описывающую начальное состояние трехчастичной системы. В результате получим уравнение

$$\left[\partial_r^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{4} + \partial_\varphi^2 \right) + E - V_1(r \cos \varphi) \right] F(r, \varphi) = \\ = 2V_1(r \cos \varphi) \langle r, \varphi | h^0 | F(r, \varphi') + F^{in}(r, \varphi') \rangle, \quad (95)$$

в котором действие оператора h^0 определено формулами (25) и (26):

$$2\langle r, \varphi | h^0 | F(r, \varphi') \rangle \equiv \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{C_-(\varphi)}^{C_+(\varphi)} d\varphi' F(r, \varphi'). \quad (96)$$

Известно, что уравнение (95) с потенциалом, подчиненным условиям (94), имеет единственное решение в $C^2(\mathcal{R}_+^2)$ — классе функций, удовлетворяющих при $r \rightarrow \infty$ вполне определенным условиям, которые принято называть физическими граничными условиями или *физическими асимптотиками*. Для задачи на связанное ($E < e < 0$) трехчастичное состояние $F^{in} \equiv 0$, а физическая асимптотика содержит гладкую функцию A^0 :

$$F(r, \varphi) = \exp(-r\sqrt{|E|}) A^0(\varphi; \sqrt{-E}) \left[1 + O(r^{-5/2}) \right], \quad r \rightarrow \infty, \quad \forall \varphi. \quad (97)$$

Для задачи S -волнового рассеяния частицы, налетающей с импульсом q на пару других частиц, находящихся в связанном состоянии с волновой функцией $u(x)$, $E = q^2 + e$, начальное состояние описывается функцией

$$F^{in}(x; q) = q^{-1} \sqrt{r} u(x) \sin(qy), \quad x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi,$$

а физическая асимптотика [7] содержит заранее неизвестные амплитуды A и A^0 упругого рассеяния ($2 \rightarrow 2$) и развала ($2 \rightarrow 3$):

$$F(r, \varphi) = [A(q) + O(y^{-1})] \sqrt{r} u(x) \exp(iqy) + [A^0(\varphi; q) + O(r^{-1})] \exp(ir\sqrt{E}), \quad r \rightarrow \infty. \quad (98)$$

Перечислим условия на границах $\varphi = 0, \pi/2$ и в точке $r = 0$, определяющиеся ограничениями на гладкость искомого решения F и потенциала V_1 и поэтому являющиеся общими для задач на связанные состояния и задач рассеяния. Из соотношений $F = r^{1/2} U \in C^2(\mathcal{R}_+^2)$ и условий (27) следует, что

$$\begin{aligned} |r^{-5/2} F(r, \varphi)| &< \infty, \quad r \rightarrow 0, \quad \forall \varphi; \\ |\varphi^{-1} F(r, \varphi)| &< \infty, \quad \varphi \rightarrow 0; \quad |(\pi/2 - \varphi)^{-1} F(r, \varphi)| < \infty, \quad \varphi \rightarrow \pi/2, \quad \forall r. \end{aligned}$$

Поэтому имеют место точные равенства

$$F(r, 0) = F(r, \pi/2) = 0, \quad 0 \leq r \leq R, \quad \forall R < \infty; \quad (99)$$

$$F(0, \varphi) = 0, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2; \quad (100)$$

$$\partial_r^2 F(r, \varphi) = 0, \quad r = 0, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2; \quad (101)$$

$$\partial_r \partial_\varphi F(r, \varphi) = 0, \quad r = 0, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2. \quad (102)$$

В силу (94), (96) и (99) уравнение (95) при $\varphi \rightarrow 0, \pi/2$ вырождается в равенства

$$\partial_\varphi^2 F(r, \varphi) = 0, \quad \varphi = 0, \pi/2, \quad \forall r. \quad (103)$$

Теперь сформулируем граничные условия при $r \rightarrow \infty$. Эти условия зависят от типа исследуемой трехчастичной конфигурации. Для задачи на связанное состояние из асимптотики (97) получаем приближенные равенства

$$F(R, \varphi) = 0, \quad \forall \varphi \in [0, \pi/2]; \quad (104)$$

$$\partial_r^2 F(R, \varphi) = \partial_r \partial_\varphi F(R, \varphi) = 0, \quad \forall \varphi \in [0, \pi/2], \quad (105)$$

которые в пределе $R \rightarrow \infty$ становятся точными. Для задачи рассеяния необходимо рассмотреть два случая. Если $q^2 \leq |e|$, то $E \leq 0$ и второе слагаемое асимптотики (98) экспоненциально убывает, поэтому пренебрегаем им. Дифференцируя это доминирующее слагаемое по φ , получаем асимптотику $\partial_\varphi F$ при $r \rightarrow \infty$. Исключив из асимптотик функций F и $\partial_\varphi F$ неизвестную амплитуду A , находим граничное условие

$$\partial_\varphi F(r, \varphi) + x \left[\operatorname{tg} \varphi \frac{\partial_x u(x)}{u(x)} - iq \right] F(r, \varphi) = 0, \quad r \rightarrow \infty, \quad \forall \varphi \in [0, \pi/2]. \quad (106)$$

Пусть $q^2 > -e$, тогда $E > 0$, энергетически возможен процесс ($2 \rightarrow 3$) и в (98) уже нельзя пренебречь вторым слагаемым, описывающим развал. Дифференцируя сумму (98), вычислим асимптотики производных $\partial_r^n F$, $n = 1, 2$. Исключив из асимптотик функций $\partial_r^n F$, $n = 0, 1, 2$, неизвестные A и A^0 , получим, пренебрегая членами порядка $O(r^{-1/2})$, граничное условие

$$\left\{ \left[iu\sqrt{E} - a_1 \right] \partial_r^2 + [Eu + a_2] \partial_r - \left[Ea_1 + ia_2\sqrt{E} \right] \right\} F = 0, \quad (107)$$

$$a_n \equiv \exp(-iqy) \partial_r^n [u(x) \exp(iqy)], \quad n = 1, 2, \quad r \rightarrow \infty, \quad \forall \varphi.$$

Итак, краевая задача на связанное трехбозонное состояние — однородное ($F^{in} \equiv 0$) уравнение (95) с условиями (99)–(105), а краевая задача рассеяния — неоднородное ($F^{in} \neq 0$) уравнение (95) с условиями (99)–(103) и (106), если $E < 0$, и с условиями (99)–(103) и (107), если $E > 0$.

Численное решение уравнения (95) возможно лишь при конечных ($r \leq R < \infty$) значениях гиперрадиуса r . Поэтому далее и уравнение (95), и граничные условия рассматриваются в области \mathcal{B}^2 . Первые три алгоритма дискретизации задачи на связанное состояние опишем, следуя работе [35].

3.2. Алгоритм 1: конечно-разностная аппроксимация по r и φ . Пусть сетки Δ_r и Δ_φ — регулярные, а $X_{ij} \equiv X(r_i, \varphi_j)$ — узловые значения некоторой функции X . Подчиним ее вместо функции F краевой задаче (95), (99), (100), (104), но на сетке $\Delta_{r\varphi}$. Удобно сначала удовлетворить условиям (99),

(100) и (104), т. е. положить равными нулю значения X_{ij} в граничных узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$:

$$X_{i0} = X_{iM} = 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad X_{0j} = X_{Nj} = 0, \quad j = 0, \dots, M. \quad (108)$$

Осталось найти значения X_{ij} во всех внутренних узлах (r_i, φ_j) . В этих узлах используем трехточечную конечно-разностную аппроксимацию [31, 32]

$$\partial_r^2 F(r_i, \varphi_j) \rightarrow \partial_r^2 X(r_i, \varphi_j) = (X_{i-1,j} - 2X_{ij} + X_{i+1,j})/h^2 + O(h^2), \quad (109)$$

$$\partial_\varphi^2 F(r_i, \varphi_j) \rightarrow \partial_\varphi^2 X(r_i, \varphi_j) = (X_{i,j-1} - 2X_{ij} + X_{i,j+1})/g^2 + O(g^2), \quad (110)$$

а интеграл (96) аппроксимируем формулой трапеций [98]:

$$2\langle r_i, \varphi_j | h^0 | F \rangle \rightarrow 2\langle r_i, \varphi_j | h^0 | X \rangle = \frac{4}{\sqrt{3}} \sum_{k=1}^{M-1} h_{jk}^0 X_{ik} + O(g^3). \quad (111)$$

В этой формуле ненулевые элементы j -й строки ($j = 1, \dots, M-1$) матрицы h^0 довольно просто зависят от шага g :

$$\begin{aligned} 2h_{jk}^0 &= g [a_j^2 \delta_{n1} \delta_{k,n-1} + (1 + 2a_j - a_j^2) \delta_{kn}], \quad k = n, n-1, \\ 2h_{jk}^0 &= g [b_j^2 \delta_{m,M+1} \delta_{k,M+1} + (1 + 2b_j - b_j^2) \delta_{km}], \quad k = m, m+1, \\ h_{jk}^0 &= g, \quad k = n+1, \dots, m-1, \end{aligned}$$

где целые и вещественные числа m, n и a_j, b_j определяются соотношениями

$$\begin{aligned} n-1 &\leq C_-(\varphi_j)/g \leq n, \quad m \leq C_+(\varphi_j)/g \leq m+1; \\ a_j &\equiv C_-(\varphi_j)/g - n, \quad b_j \equiv C_+(\varphi_j)/g - m. \end{aligned}$$

Запишем уравнение (95) во внутренних узлах (r_i, φ_j) . Выполним замены $F \rightarrow X$ и (109)–(111) и отбросим остаточные члены $O(h^2)$, $O(g^2)$ и $O(g^3)$. В результате получим конечно-разностный аналог исходной краевой задачи, т. е. систему линейных уравнений для неизвестных X_{ij} :

$$\sum_{k=1}^{M-1} (L_{jk}^i X_{i-1,k} + D_{jk}^i X_{ik} + R_{jk}^i X_{i+1,k}) = 0, \quad (112)$$

где $i = 1, \dots, N-1$; $j, k = 1, \dots, M-1$, а число уравнений $(N-1)(M-1)$ равно числу неизвестных X_{ij} . Далее числовые коэффициенты

$$L_{jk}^i \equiv R_{jk}^i = \delta_{jk}/h^2,$$

$$D_{jk}^i \equiv (-2/h^2 + 1/4r_i^2 + E - V_{ij})\delta_{jk} + (\delta_{j-1,k} - 2\delta_{jk} + \delta_{j+1,k})/(r_i^2 g^2) - (4/\sqrt{3})V_{ij}h_{jk}^0, \quad (113)$$

где $V_{ij} \equiv V_1(r_i \cos \varphi_j)$, считаем элементами квадратных матриц $\mathbf{L}^i = \mathbf{R}^i$ и \mathbf{D}^i размерностью $M - 1$. Собрав X_{ij} в столбец $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2, \dots, \mathbf{X}^{N-1})^T$, составленный из блок-столбцов $\mathbf{X}^i \equiv (X_{i1}, \dots, X_{i,M-1})^T$, представим систему (112) однородным матричным уравнением $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ или эквивалентным уравнением $\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X} = E\mathbf{B}\mathbf{X}$, где $\mathbf{B} = -\mathbf{I}$, а \mathbf{I} — единичная матрица:

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{0}; \quad \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X} = E\mathbf{B}\mathbf{X}, \quad \tilde{\mathbf{A}} \equiv \mathbf{A} - E\mathbf{B}. \quad (114)$$

Матрицы \mathbf{A} и $\tilde{\mathbf{A}}$ блочно-тредиагональные, \mathbf{A} зависит от E , а $\tilde{\mathbf{A}}$ не зависит. Произведение $\mathbf{A}\mathbf{X}$ в случае (34), когда $N = 4$, изображено на рис. 4, *в*.

Перейдем к анализу алгоритма. Указанные в (109) и (110) оценки остаточных членов, вообще говоря, верны [32] при условии $X \in C^4(\mathcal{B}^2)$ и только в случае равномерных сеток Δ_r и Δ_φ . При том же условии, но в случае неравномерных сеток порядок конечно-разностной аппроксимации понижается на единицу, но точность приближения (111) остается прежней. Поэтому дискретный аналог (112) исходного уравнения (95) близок к этому уравнению, но лишь в узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ с точностью τ_{nn} , где $n = 2$ в случае равномерных и $n = 1$ в случае неравномерных сеток. Однако из такой близости еще не следует близость точного решения F к найденной сеточной функции X . Можно лишь предполагать, что при измельчении сеток $|F_{ij} - X_{ij}| = \tau_{nn}$ для всех i, j и $n = 2$ или $n = 1$. Такая сходимость теоретически до сих пор не доказана ни при каком отношении h/g , но наблюдается при вычислениях. Основная трудность доказательства сходимости обусловлена наличием в уравнении (95) нелокального (интегрального) члена. Из-за него матрица \mathbf{h}^0 и все содержащие ее как слагаемое диагональные блоки \mathbf{D}^i матрицы \mathbf{A} — неразрезанные матрицы. Поэтому при использовании вместо формул (110) и (111) других аппроксимаций по переменной φ , например конечно-разностных аппроксимаций более высокого порядка [32], эти блоки останутся неразрезанными матрицами, но блочно-тредиагональное строение и размерность матрицы \mathbf{A} не изменятся. Увеличение порядка аппроксимации оператора ∂_r^2 использованием n -точечных конечных разностей формул с $n > 3$ приводит к менее разреженной матрице \mathbf{A} с шириной ленты $n(M - 1)$. Любая конечно-разностная аппроксимация имеет существенный недостаток: если столбец \mathbf{X} найден, но приближение функции F требуется и вне узлов сетки $\Delta_{r\varphi}$, то в области \mathcal{B}^2 приходится решать отдельную задачу интерполяции уже известной, но только на этой сетке, функции X .

Метод решения конечных систем интегродифференциальных уравнений Фаддеева, основанный на классической трехточечной конечно-разностной аппроксимации дифференциальных операторов (109) и (110), был развит в ра-

боте [7] и применен для решения задач на связанные состояния трех нуклонов [19], а также задач *nd*- и *pd*-рассеяния [20–22]. Позже этот же метод использовался в серии работ [25–29] для численного интегрирования двумерных интегродифференциальных уравнений, полученных проектированием уравнений (20) на бисферический базис. В работах [25–27] рассчитывались энергии связи основного и возбужденного состояний трех атомов ${}^4\text{He}$ (тримера гелия) и фазы рассеяния атома гелия на димере гелия.

В недавних работах [28, 29] представлены фазы рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере гелия, впервые полученные численным решением таких же двумерных уравнений на сетке $\Delta_{r\varphi}$ с $N = M = 405$. Несмотря на предельную простоту метода конечно-разностной аппроксимации, его использование для решения задачи на слабосвязанные состояния или задачи рассеяния, когда асимптотики искомых функций медленно убывают или же осциллируют, требует сеток с большим числом узлов. Например, для расчета [27] этим методом энергии связи основного и возбужденного состояния тримера с точностью до двух значащих цифр пришлось использовать сетки $\Delta_{r\varphi}$ с довольно большим числом узлов — $N = M = 555$ и $N = M = 805$ соответственно.

Забегая вперед, отметим, что сплайн-аппроксимация хотя бы по угловой переменной позволяет в значительной мере избавиться от перечисленных недостатков конечно-разностной аппроксимации.

3.3. Алгоритм 2: сплайн-аппроксимация по переменной φ . Пусть сетка Δ_r — равномерная, а сетка Δ_φ — произвольная. Как и в алгоритме 1, вместо решения F задачи (95), (99), (100), (104) будем искать функцию X , подчиняющуюся этой задаче на сетке $\Delta_{r\varphi}$. Но теперь считаем, что на каждом ($i = 1, \dots, N - 1$) отрезке $r = r_i$, $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ функция X — кубический сплайн S_i класса $C^2(B^2)$ с узлами на сетке Δ_φ и номером i . Сразу отметим, что в отличие от алгоритма 1 потребуются дополнительные граничные условия (103), но, как и прежде, для $\partial_r^2 F$ используется замена (109), а из условий (99) и (100) следуют равенства (108), означающие, что каждый сплайн $S_i(\varphi)$ равен нулю в узлах $\varphi_0 = 0$ и $\varphi_M = \pi/2$.

По определению при каждом i искомые значения X_{ij} являются узловыми значениями $S_{ij} = S_i(\varphi_j)$ сплайна S_i , причем $S_{i0}, S_{iM} = 0$. Обозначим $M_{ij} \equiv S_i''(\varphi_j)$, тогда явное выражение для сплайна $S_i(\varphi)$ получится из (48) заменой

$$S_{31}(\varphi) \rightarrow S_i(\varphi), \quad S_i \rightarrow X_{ij}, \quad M_j \rightarrow M_{ij}, \quad (115)$$

т. е. добавлением индекса i , нумерующего сплайны. Теперь неизвестны и $X_{ij} \equiv S_{ij}$, и M_{ij} . Исключим M_{ij} , используя условия непрерывности производной S_i' для каждого i . Эти условия и равенства (108) дают систему (58) из $M - 1$ уравнений, которая выводится из системы (50) заменой (115). Систему (58) дополним равенствами $S_{i0}, S_{iM} = 0$ и равенствами $M_{i0}, M_{iM} = 0$, следующими из (103). Оставшиеся M_{ij} с индексами $i = 1, \dots, N - 1$ и

$j = 1, \dots, M - 1$ выразим через $X_{ij} = S_{ij}$ по формулам (52) и (59):

$$\partial_\varphi^2 X(r_i, \varphi_j) = \partial_\varphi^2 S_i(\varphi_j) = M_{ij} = 6 \sum_{k=1}^{M-1} B_{jk}^\varphi X_{ik}. \quad (116)$$

Интеграл (96) при $r = r_i$, $i \neq 0, N$, и $\varphi = \varphi_j$, $j = 1, \dots, M - 1$, представим суммой интегралов по отрезкам, где интегрируемая функция $X(r_i, \varphi') = S_i(\varphi')$ является кубическим полиномом (48). Найдём интегралы от функций (40) по таким отрезкам. Выразим в получившейся сумме M_{ij} через X_{ij} равенствами (116). Тогда получим

$$2\langle r_i, \varphi_j | h^0 | S_i(\varphi') \rangle = \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{C_-(\varphi_j)}^{C_+(\varphi_j)} d\varphi' S_i(\varphi') = \frac{4}{\sqrt{3}} \sum_{k=1}^{M-1} h_{jk}^0 X_{ik}. \quad (117)$$

Ненулевые элементы j -й строки матрицы \mathbf{h}^0 таковы:

$$\begin{aligned} h_{jk}^0 &= jk, \quad k = 1, \dots, n - 2, m + 2, \dots, M - 1; \\ h_{j, n-1}^0 &= g_{n-1} a_1 + C_{j, n-1}, \quad n \neq 1; \\ h_{j, m+1}^0 &= g_m b_2 + C_{j, m+1}, \quad m \neq M - 1; \\ h_{jn}^0 &= g_{n-1} a_2 + g_n/2 + C_{jn}, \quad h_{jm}^0 = g_m(b_1 + 1/2) + C_{jm}; \\ h_{jk}^0 &= (g_{k-1} + g_k)/2 + C_{jk}, \quad k = n + 1, \dots, m - 1. \end{aligned} \quad (118)$$

Здесь для сокращения записи введена матрица \mathbf{C} :

$$\begin{aligned} C_{jk} &\equiv g_{n-1}^3 \left[a_3 B_{n-1, k}^\varphi + a_4 B_{n, k}^\varphi \right] + \\ &+ g_m^3 \left[b_3 B_{m, k}^\varphi + b_4 B_{m=1, k}^\varphi \right] - \frac{1}{4} \sum_{p=n}^{m-1} g_p^3 \left[B_{pk}^\varphi + B_{p+1, k}^\varphi \right], \end{aligned}$$

где $j, k = 1, \dots, M - 1$, целые числа n и m определяются из условий

$$C_-(\varphi_j) \in [\varphi_{n-1}, \varphi_n], \quad C_+(\varphi_j) \in [\varphi_m, \varphi_{m+1}],$$

а a_i и b_i — интегралы по соответствующим отрезкам

$$[(C_-(\varphi_j) - \varphi_{n-1})/g_{n-1}, 1], \quad [0, (C_+(\varphi_j) - \varphi_m)/g_m]$$

от соответствующих функций η_i , заданных равенствами (40).

Теперь в исходном уравнении (95) заменим F на X . Полученное уравнение запишем во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$. В этих узлах заменим производные и интеграл правыми частями соответствующих формул (109), (116)

и (117). Отбросим слагаемое порядка $O(h^2)$, порожденное остаточным членом суммы (109). Полученный таким образом дискретный аналог исходной краевой задачи — та же, что и в предыдущем алгоритме, система линейных уравнений (112). Эта система тем же упорядочением неизвестных X_{ij} в столбец \mathbf{X} сводится к матричному уравнению $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ с матрицей \mathbf{A} той же блочно-трехдиагональной структуры (см. рис. 4, σ для случая $N = 4$). Ее блоки \mathbf{L}^i и \mathbf{R}^i прежние (см. (113)), но блоки \mathbf{D}^i другие:

$$D_{jk}^i = (-2/h^2 + 1/4r_i^2)\delta_{jk} + G_{jk}^i.$$

Здесь для сокращения записи введены матрицы \mathbf{G}^i , $i = 1, \dots, N - 1$:

$$G_{jk}^i \equiv 6r_i^{-2}B_{jk}^\varphi + (E - V_{ij})\delta_{jk} - \frac{4}{\sqrt{3}}V_{ij}h_{jk}^0, \quad (119)$$

где $j, k = 1, \dots, M - 1$, а \mathbf{B}^φ и \mathbf{h}^0 — матрицы (52) и (118).

Сравним описанный алгоритм с предыдущим. Вообще говоря, $F_{ij} \neq X_{ij}$ и $F(r_i, \varphi)$ не является сплайном $S_i(\varphi)$. Предположим, что $F \in C^4(\mathcal{B}^2)$ и $F_{ij} = X_{ij}$. Тогда сплайн $S_i(\varphi)$ интерполирует точное решение F на отрезке $r = r_i$, $\varphi \in [0, \pi/2]$. На этом отрезке $\partial_\varphi^n(F - S_i) = O(g^n)$, $n = 0, 2$, при любой сетке Δ_φ . Поэтому точность аппроксимации интеграла $2\langle r_i, \varphi | h | F \rangle$ правой частью формулы (117) равна $O(g^4)$, что на порядок выше точности $O(g^3)$ формулы трапеций (111). Следовательно, теперь уже на каждом отрезке $r = r_i$, $\varphi \in [0, \pi/2]$, а не только в узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$, как в предыдущем алгоритме, можно ожидать точность τ_{22} , причем уже и для неравномерных сеток Δ_φ . Проблема интерполяции функции X частично решается на промежуточном этапе, когда по формулам (52) и (116) вычисляются коэффициенты M_{ij} сплайнов S_i . Используя M_{ij} и X_{ij} , можно гладко восполнить функцию X сплайнами S_i , но только на всех отрезках $r = r_i$, $\varphi \in [0, \pi/2]$.

Замечания. Возможны и отличные от описанного варианты объединения разностных аппроксимаций по r со сплайн-аппроксимацией по φ . Например, в работе [99] для вычисления в рамках интегродифференциальных уравнений Фаддеева амплитуд nd - и pd -развала при энергиях столкновения 14,1 и 42,0 МэВ использовалась сплайн-аппроксимация по φ и аппроксимация Нумерова [32] по r . Вычисленные значения nd -амплитуды в случае NN -взаимодействия типа МТ I–III изумительно совпадают с ее значениями, представленными ранее в [100–102], но значения pd -амплитуды заметно отличаются от значений, приведенных в [101].

3.4. Алгоритм 3: аппроксимация сплайнами $S_{3311}(r, \varphi)$. В излагаемом ниже подходе [35] к решению краевой задачи (95), (99)–(103) обе сетки Δ_r и Δ_φ — произвольные, а искомая функция X считается сплайном $S_{3311}(r, \varphi)$, представленным в кусочно-полиномиальном виде (53). Поэтому, в отличие от алгоритма 2, теперь неизвестны не только $X_{ij} = S(r_i, \varphi_j)$, $M_{ij} \equiv \partial_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j)$,

но и коэффициенты $N_{ij} \equiv \partial_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j)$ и $K_{ij} = \partial_r^2 \partial_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j)$. Тем не менее существует единственная и впервые предложенная в работе [35] последовательность исключения неизвестных M_{ij} и N_{ij} , приводящая к дискретному аналогу (114) с особой матрицей \mathbf{A} . Эта матрица имеет ту же размерность и блочно-трехдиагональную структуру, что и матрицы \mathbf{A} алгоритмов 1 и 2. Отметим, что теперь, в отличие от алгоритма 2, потребуются все граничные условия (99)–(105), и приступим к схематическому описанию.

Заменив в этих условиях F на $X = S \equiv S_{3322}$, получим для сплайна X те же граничные условия (55), что и в *примере*, рассмотренном в разд. 2:

$$X_{ij} \equiv S_{ij} = M_{ij} = N_{ij} = 0, \quad i = 0, N, \forall j; \quad \forall i, j = 0, M.$$

Используя этот пример, можно выразить N_{ij} через X_{ij} формулами (57), но эта связь далее не потребуется, а связь (59) окажется ключевой.

В уравнении (95) заменим F на $X \equiv S$. Полученное соотношение запишем во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$. Производные $\partial_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j)$, т. е. коэффициенты M_{ij} , выразим через неизвестные X_{ij} формулами (59). Интегральный оператор (96) заменим квадратурной суммой (117), в которой матрица \mathbf{h}^0 прежняя и задана формулами (118). В итоге получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \partial_r^2 S(r_i, \varphi_j) = N_{ij} = - \sum_{k=1}^{M-1} a_{jk}^i X_{jk}, \\ i = 1, \dots, N-1; \quad j = 1, \dots, M-1, \end{aligned} \quad (120)$$

где $a_{jk}^i \equiv 1/4r_i^2 + G_{jk}^i$, а матрицы \mathbf{G}^i прежние и определены соотношениями (119). Теперь неизвестные N_{ij} в виде (120) подставим в условия непрерывности (56), дополненные равенствами $N_{0j}, N_{Nj} = 0$. В результате получим дискретный аналог исходной краевой задачи — систему линейных уравнений (112). В этих уравнениях числовые коэффициенты вычисляются по более сложным, чем в алгоритмах 1 и 2, формулам

$$\begin{aligned} L_{jk}^i &\equiv \nu_i (a_{jk}^{i-1} + 6\delta_{jk}/h_{i-1}^2), & i = 2, \dots, N-1, \\ D_{jk}^i &\equiv 2a_{jk}^i + 6\delta_{jk}/(h_{i-1}h_i), & i = 1, \dots, N-1, \\ R_{jk}^i &\equiv (1 - \nu_i)(a_{jk}^{i+1} + 6\delta_{jk}/h_i^2), & i = 1, \dots, N-2, \quad j, k = 1, \dots, M-1. \end{aligned}$$

При том же порядке записи неизвестных X_{ij} , что и в алгоритме 1, полученная система сводится к системе с блочно-трехдиагональной матрицей (см. рис. 4, *в* для случая $N = 6$). Такой вид матрицы обусловлен структурой уравнений (56), а именно тем, что каждое i -е уравнение содержит неизвестные N_{nj} и X_{nj} со значениями радиального индекса $n = i, i \pm 1$ и не зависит от углового индекса j . После того как коэффициенты X_{ij} найдены, коэффициенты M_{ij} и N_{ij} вычисляются по формулам (52), (59) и (120). Затем

по формулам (60) определяются коэффициенты K_{ij} . Далее для вычисления сплайна X используется представление (53). Таким образом, во всей области \mathcal{B}^2 , а не только, как в алгоритме 2, на отрезках $r = r_i, \varphi \in [0, \pi/2]$ удастся построить функцию X в виде сплайна (53), удовлетворяющего в узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ уравнению (95) и всем граничным условиям (99)–(105). Эту задачу можно дискретизировать иным образом, а именно заменив с самого начала в уравнении (95) узловые значения вторых производных сплайна X коэффициентами N_{ij} и M_{ij} , выраженными через коэффициенты X_{ij} по формулам (57) и (59). При таком построении столбец \mathbf{X} подчинится уравнению (114) с *неразрезанной* матрицей \mathbf{A} , но ожидаемая точность приближения $F \approx X$ останется прежней. Обсудим ее.

Вообще говоря, F не является бикубическим сплайном X . Предположим, что $F \in C^{4,4}(\mathcal{B}^2)$ и $F_{ij} = X_{ij}$ для всех i, j . Тогда X интерполирует F в \mathcal{B}^2 и

$$F - X = \tau_{44}, \quad \partial_r^2(F - X) = \tau_{24}, \quad \partial_\varphi^2(F - X) = \tau_{42}$$

всюду в \mathcal{B}^2 , а не только на сетке $\Delta_{r\varphi}$ или на отрезках $r = r_i, \varphi \in [0, \pi/2]$, как в алгоритме 1 или 2. Следовательно, можно ожидать, что алгоритм 3 и его упомянутая версия будут иметь во всей области \mathcal{B}^2 точность $F - X = \tau_{22}$.

Предложим две модификации описанного алгоритма 3, в которых для аппроксимации $F \approx S_{3311}$ можно ожидать более высокую, чем τ_{22} , точность τ_{23} и τ_{24} , но лишь по переменной φ и не во всей области \mathcal{B}^2 .

Алгоритм 3^l. В алгоритмах 1–3 узлы коллокации (точки, в которых записывалось решаемое уравнение (95)) совпадали с узлами сетки $\Delta_{r\varphi}$. Пусть, как и ранее, $X \equiv S_{3311}$, но сетка Δ_φ — регулярная. В качестве узлов коллокации возьмем точки (r_i, φ_j^-) , где $i = 1, \dots, N - 1$, а φ_j^- — гауссовы узлы, принадлежащие отрезкам $[\varphi_j, \varphi_{j+1}]$, $j = 0, \dots, M - 1$. В силу (52), (53) и (59) в каждом узле (r_i, φ_j^-) имеет место связь того же типа, что и связь (59):

$$\begin{aligned} \partial_\varphi^2 X(r_i, \varphi_j^-) &= (1 - t)M_{ij} + tM_{i,j+1} = 6 \sum_{k=1}^M \tilde{B}_{jk}^\varphi X_{ik}, \\ \tilde{B}_{jk}^\varphi &\equiv (1 - t)B_{jk}^\varphi + tB_{j+1,k}^\varphi, \quad t \equiv (\varphi_j - \varphi_j^-)/g_j. \end{aligned}$$

Поэтому вывод матричного уравнения (114) для неизвестного столбца \mathbf{X} ничем не отличается от уже описанного в алгоритме 3 и сводится к замене

$$\mathbf{B}^\varphi \rightarrow \tilde{\mathbf{B}}^\varphi, \quad V_{ij} \equiv V(r_i \cos \varphi_j) \rightarrow V_{ij} \equiv V(r_i \cos \varphi_j^-).$$

Если F интерполируется сплайном X , то на отрезках $\varphi = \varphi_j^\pm, r \in [0, R]$ точность приближения $\partial_\varphi^2(F - X) = \tau_{23}$ на порядок по шагу g выше, чем точность τ_{22} при $\varphi \neq \varphi_j^-$. Поэтому в описанном алгоритме можно ожидать, что $F = X + \tau_{23}$ на указанных отрезках и $F = X + \tau_{22}$ при $\varphi \neq \varphi_j$.

Алгоритм 3''. Как и в алгоритме 3, ищется сплайн $X = S_{3311}$, узлы коллокации совпадают с узлами сетки $\Delta_{r,\varphi}$, но теперь сетка Δ_φ — регулярная. При такой сетке вместо формулы $\partial_\varphi^2 X = M_{ij}$ выгоднее использовать соответствующую формулу дифференцирования (89) повышенной точности:

$$\partial_\varphi^2 X(r_i, \varphi_j) = M_{ij} \rightarrow (M_{i,j-1} + 10M_{ij} + M_{i,j+1})/12 = 6 \sum_{k=1}^M \bar{B}_{jk}^\varphi X_{ik},$$

$$\bar{B}_{ik}^\varphi \equiv (1/12) \left[B_{j-1,k}^\varphi + 10B_{jk}^\varphi + B_{j+1,k}^\varphi \right].$$

Для этого в алгоритме 3 достаточно заменить \mathbf{B}^φ на $\bar{\mathbf{B}}^\varphi$. Тогда получится уравнение (114) с матрицей \mathbf{A} той же размерности и структуры, что и в алгоритмах 1–3'. Если F интерполируется сплайном X , то согласно (89) в узлах (r_i, φ_j) точность приближения $\partial_\varphi^2 F \approx \partial_\varphi^2 X$ есть τ_{24} , что на два порядка по шагу g выше, чем точность τ_{22} вне этих узлов. Поэтому можно ожидать, что $F = X + \tau_{24}$ в узлах (r_i, φ_j) и $F = X + \tau_{22}$ вне этих узлов.

Замечания. В отличие от всех описываемых далее алгоритмов в алгоритмах 1–3'' дискретный аналог (114) исходной задачи на трехчастичное связанное состояние является обыкновенной, а не обобщенной задачей на собственное значение E . Кроме этого, алгоритмы 2–3'' обладают свойством локальности по переменной φ . Для пояснений рассмотрим идеальный случай. Пусть при решении уравнения (114) только одно неизвестное X_{ik} вычислено с ошибкой δ , порожденной, например, округлением. Тогда все коэффициенты M_{ij} , найденные по формулам (59), будут иметь ошибки ε_j , ограниченные неравенствами $\varepsilon_j \leq O(\delta 2^{-|k-j|})$, $j = 1, \dots, M-1$, и поэтому убывающие с увеличением разности $|j-k|$. Следовательно, если сплайн $X = S_{3311}$ вычисляется в точке (r, φ) по формулам (53), (54) и (59), то ошибка округления будет подавляться как $O(\delta 2^{-|k-j|})$ по мере удаления точки (r, φ) от точки (r_i, φ_k) . В случае не сингулярных потенциалов (94) граничные условия для $\partial_\varphi^2 F$ известны точно. В общем случае приходится использовать приближенные условия, полученные из соответствующих асимптотик путем отбрасывания остаточного члена. Рассмотрим идеальный случай. Пусть из-за отброшенного остаточного члена только один коэффициент M_{i0} задан с ошибкой δ . Тогда из-за связи (59) и свойств матрицы \mathbf{B}^φ вклад этой ошибки в величину $X(r, \varphi)$ будет убывать как $O(\delta 2^{-k})$ при удалении точки (r, φ) от граничной точки (r_i, φ_0) .

3.5. Алгоритм 4: приближение сплайном S_{3311} , разложенным по B -сплайнам. Алгоритм предложен в [36] и основан на представлении искомого сплайна $X = S \equiv S_{3311}$ в виде разложения (73) по системам B -сплайнов $B_i(r)$ и $\bar{B}_j(\varphi)$ с узлами на произвольных сетках δ_r и δ_φ . Использование такого представления вместо кусочно-полиномиального приводит к более простой, чем в алгоритмах 3, 3' и 3'', схеме решения задачи на связанные трехча-

стичные состояния и, самое главное, позволяет единообразно решить задачу рассеяния при любой энергии E .

Следуя [36], опишем вывод дискретного аналога (114) задачи на связанные состояния (95), (99)–(105). Вместо ее решения F ищем сплайн $X = S \equiv S_{3311}$ в виде (73). Рассмотрим интеграл (96) в узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$:

$$\begin{aligned} 2\langle r_i, \varphi_j | h^0 | X \rangle &= \frac{4}{\sqrt{3}} \sum_{n=i-1}^{i+1} B_{ni} \sum_{m=-1}^{M+1} X_{nm} \int_{C_-(\varphi_j)}^{C_+(\varphi_j)} d\varphi' \bar{B}_m(\varphi') = \\ &= \frac{4}{\sqrt{3}} \sum_{n=i-1}^{i+1} B_{ni} \sum_{m=-1}^{M+1} h_{jm}^0 X_{nm}. \end{aligned} \quad (121)$$

Здесь радиальный индекс n , благодаря финитным свойствам сплайнов $B_i(r)$, всегда пробегает лишь три значения ($n = i, i \pm 1$), элементы h_{jk}^0 неразрезанной матрицы \mathbf{h}^0 размерностью $(M+1)(M+3)$ не зависят от индекса i и определяются только сеткой Δ_φ . Используя (68), (69) и (70), нетрудно выразить все коэффициенты h_{jk}^0 через интегралы от функций (40). Полученные довольно громоздкие выражения [36] предельно упрощаются в случае регулярной сетки δ_φ с $M = 3m$, $m \geq 1$. В этом исключительно удобном случае $C_\pm(\varphi_j) \in \Delta_\varphi$ при любом j , а ненулевые матричные элементы

$$h_{jk}^0 = g, k \neq k_\pm, k_\pm \pm 1; \quad h_{jk}^0 = \frac{1}{2}g, k = k_\pm; \quad h_{jk}^0 = \frac{g}{24}, k = k_\pm \pm 1,$$

имеют индексы j и $k = k_-, \dots, k_+$, такие, что

$$\begin{aligned} k_\pm &= 2m \pm j, \quad 1 \leq j \leq m; \\ k_- &= 2m - j, \quad k_+ = 4m - j, \quad m < j \leq 2m; \\ k_- &= j - 2m, \quad k_+ = 4m - j, \quad 2m < j \leq 3m - 1. \end{aligned}$$

Заменим F на X в граничных условиях (100), (103)–(105), одинаковых для задачи на связанные состояния и задачи рассеяния. Положив $r = r_0$, $\varphi = \varphi_j$, $j = 0, \dots, M$, получим $2(M+3)$ уравнения. Запишем их в определенном порядке. Первый блок из $M+3$ уравнений построим так: первое уравнение — граничное условие (102) в точке (r_0, φ_0) , далее в порядке возрастания индекса j расположим $M+1$ уравнений, следующих из равенства (102), записанного в точках (r_0, φ_j) , $j = 0, \dots, M$. Последнее уравнение — условие (102) в точке

(r_0, φ_M) . Первый блок построен в виде

$$\begin{aligned} \sum_{n=-1}^1 B'_{n0} \sum_{m=-1}^1 \bar{B}'_{m0} X_{nm} &= 0, \\ \sum_{n=-1}^1 B''_{n0} \sum_{m=j-1}^{j+1} \bar{B}_{mj} X_{nm} &= 0, \quad j = 0, \dots, M, \\ \sum_{n=-1}^1 B'_{n0} \sum_{m=M-1}^{M+1} \bar{B}'_{nM} X_{nm} &= 0 \end{aligned}$$

или в матричном виде

$$\mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}^{-1} + \mathbf{C}^0 \mathbf{X}^0 + \mathbf{C}^1 \mathbf{X}^1 = 0, \quad \mathbf{X}^i \equiv (X_{i,-1}, X_{i0}, \dots, X_{i,M+1})^T. \quad (122)$$

Квадратные матрицы \mathbf{C}^n , $n = 0, \pm 1$, размерностью $M + 3$ разрежены: их первые две и последние две строки имеют по три ненулевых элемента, а все остальные строки содержат по четыре ненулевых элемента. В случае $M = 4$ эти матрицы заполнены так же, как и матрица, изображенная на рис. 4, *a*, на котором кружками и ромбами отмечены ее ненулевые элементы. Получим следующие $M + 3$ уравнения, т. е. второй блок. Первое и последнее уравнения этого блока — граничное условие (103), записанное соответственно в точках (r_0, φ_0) и (r_0, φ_M) . Остальные уравнения, порождаемые условием (100), записанным в точках (r_0, φ_j) , расположим в порядке возрастания индекса $j = 0, \dots, M$. Заметим, что второй блок

$$\tilde{\mathbf{C}}^{-1} \mathbf{X}^{-1} + \tilde{\mathbf{C}}^0 \mathbf{X}^0 + \tilde{\mathbf{C}}^1 \mathbf{X}^1 = 0,$$

так же как и первый блок (122), образуют однородные уравнения для неизвестных столбцов \mathbf{X}^n , $n = 0, \pm 1$, а матрицы $\tilde{\mathbf{C}}^n$ имеют ту же структуру (см. рис. 4, *a*), что и матрицы \mathbf{C}^n . Два найденных блока назовем блоками граничных условий при $r = r_0 = 0$.

Вместо функции F подчиним сплайн (73) уравнению (95) во внутренних узлах (r_i, φ_j) . Используя (74) и (121), для каждого $i = 1, \dots, N - 1$ имеем

$$\begin{aligned} \sum_{n=i-1}^{i+1} B_{ni} \left\{ \sum_{m=j-1}^{j+1} \bar{B}_{mj} \left[\frac{B''_{ni}}{B_{ni}} + \frac{1}{r_i^2} \left(\frac{1}{4} + \frac{\bar{B}''_{mj}}{B_{mj}} \right) + E - V_{ij} \right] X_{nm} - \right. \\ \left. - \frac{4}{\sqrt{3}} V_{ij} \sum_{k=-1}^{M+1} h_{jk}^0 X_{nk} \right\} = V_{ij} \langle r_i, \varphi_j | h^0 | F^{in} \rangle \equiv Q_{ij}, \quad (123) \end{aligned}$$

где $j = 1, \dots, M - 1$, а V_{ij} и Q_{ij} — узловые значения потенциала и неоднородного члена. Чтобы для каждого $i = 1, \dots, N - 1$ построить блок из $M + 3$ уравнений, запишем граничные условия (99) и (103) и уравнения (123) в определенном порядке. Полученные блоки назовем внутренними. Первое уравнение i -го внутреннего блока — условие (103) в точке (r_i, φ_0) :

$$\sum_{n=i-1}^{i+1} B_{ni} \sum_{m=-1}^1 \bar{B}'_{m0} X_{nm} = 0, \quad (124)$$

второе уравнение следует из условия (99), записанного в той же точке:

$$\sum_{n=i-1}^{i+1} B_{ni} \sum_{m=-1}^1 \bar{B}_{m0} X_{nm} = 0. \quad (125)$$

Далее запишем в порядке возрастания индекса j еще $M - 1$ уравнений (123), отвечающих выбранному значению индекса i . Предпоследнее и последнее уравнения блока дадут соответственно граничные условия (99) и (103), записанные в точке (r_i, φ_M) . Эти уравнения получаются соответственно из уравнений (125) и (124) заменой индексов $0 \rightarrow M$ и $(m = 0, \pm 1) \rightarrow (m = M, M \pm 1)$. Уравнения i -го внутреннего блока запишем в матричном виде

$$\mathbf{L}^i \mathbf{X}^{i-1} + \mathbf{D}^i \mathbf{X}^i + \mathbf{R}^i \mathbf{X}^{i+1} = \mathbf{Q}^i, \quad (126)$$

$$\mathbf{Q}^i \equiv (0, 0, Q_{i1}, \dots, Q_{i, M-1}, 0, 0)^T.$$

Квадратные матрицы \mathbf{L}^i , \mathbf{D}^i и \mathbf{R}^i размерностью $M + 3$ содержат матрицу \mathbf{h}^0 и поэтому не разрежены в отличие от всех матриц \mathbf{C}^n и $\tilde{\mathbf{C}}^n$.

Последние два блока уравнений будем искать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^{N-1} \mathbf{X}^{N-1} + \mathbf{C}^N \mathbf{X}^N + \mathbf{C}^{N+1} \mathbf{X}^{N+1} &= \mathbf{Q}^N, \\ \tilde{\mathbf{C}}^{N-1} \mathbf{X}^{N-1} + \tilde{\mathbf{C}}^N \mathbf{X}^N + \tilde{\mathbf{C}}^{N+1} \mathbf{X}^{N+1} &= \tilde{\mathbf{Q}}^N \end{aligned} \quad (127)$$

и определим как блоки граничных условий при $r = r_N$. Для задачи на связанные состояния эти блоки находим таким же образом, как и блоки граничных условий при $r = r_0$, с той лишь разницей, что граничные условия (104) и (105) записываем в точках (r_N, φ_j) , $j = 0, \dots, M$. Матрицы \mathbf{Q}^N и $\tilde{\mathbf{Q}}^N$ окажутся нулевыми. 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 — условие (103) в точке (r_N, φ_0) , далее в порядке возрастания индекса j расположим $M + 1$ уравнений, следующих из граничных условий (106) или (107) (в зависимости от значения

энергии), записанных в точках (r_N, φ_j) , $j = 2, \dots, M$. Последнее уравнение — условие (103) в точке (r_N, φ_M) . Так как граничные условия (106) и (107) не содержат осциллирующих множителей перед неизвестной функцией и ее частными производными, то при описанной выше дискретизации задачи рассеяния в области \mathcal{B}^2 не возникает дополнительных ограничений на выбор сетки $\Delta_{r\varphi}$.

Теперь запишем все найденные блоки уравнений в следующем порядке: сначала первый, затем второй блок граничных условий при $r = r_0$, далее в порядке возрастания индекса $i = 1, \dots, N - 1$ расположим внутренние блоки. Полученную систему уравнений в случае задачи на связанные состояния дополним блоками граничных условий (127) при $r = r_N$, а в случае задачи рассеяния — внутренним блоком $i = N$ и блоком граничных условий (103), (106) или (103), (107). При таком порядке записи уравнений исходные задачи сводятся к системам линейных уравнений для неизвестных коэффициентов X_{nm} сплайна (73). Матрицы \mathbf{A} этих систем разрежены, а правые части $\mathbf{A}\mathbf{X}$ в случае $N = 4$ символически изображены на рис. 4, *г*. Исключив из двух первых и последних блоков уравнений соответственно неизвестные столбцы \mathbf{X}^{-1} и \mathbf{X}^{N+1} , получим систему с блочно-трехдиагональной матрицей (см. рис. 4, *е*).

Отметим, что дискретный аналог исходной задачи на связанное состояние представляется матричными уравнениями (114), во втором из них матрица \mathbf{B} , в отличие от всех алгоритмов $1-3''$, не является единичной и для вычисления энергии E связанного состояния приходится решать не обычную, а более сложную обобщенную задачу на собственные значения.

Сформулируем основные выводы. Итак, уравнение (95) при аппроксимации искомой функции F бикубическим сплайном класса \mathcal{C}^2 , разложенным по базисным сплайнам, сводится к системе линейных уравнений с ленточной матрицей, что существенно упрощает решение. Ожидаемая точность алгоритма та же, что для алгоритма 3, а именно: $F - X = \tau_{22}$ всюду в \mathcal{B}^2 , но объем вычислений значительно меньше, в частности не требуется вычислять матрицы \mathbf{V}^φ и $\mathbf{V}^{r\varphi}$. Узловые значения B -сплайнов, их производных и функций V и Q вычисляются быстро, построение ленточной матрицы требует хранения в оперативной памяти компьютера сравнительно малого объема информации: матрицы \mathbf{h}^0 и массива узлов сетки $\Delta_{r\varphi}$.

Стоит отметить, что в случае регулярных сеток δ_r и δ_φ алгоритм становится предельно простым: его ключевые формулы (73) и (74) благодаря равенствам (71) содержат минимум заранее известных числовых множителей. Действительно, в узлах (r_i, φ_j) сам сплайн — сумма

$$S(r_i, \varphi_j) = \frac{1}{36} \sum_{p=i-1}^{i+1} (1 + 3\delta_{pi}) \sum_{s=j-1}^{j+1} (1 + 3\delta_{sj}) X_{ps}, \quad (128)$$

а его вторые частные производные — суммы

$$\begin{aligned}\partial_r^2 S(r_i, \varphi_j) &= N_{ij} = \frac{1}{6h^2} \sum_{p=i-1}^{i+1} (1 - 3\delta_{pi}) \sum_{s=j-1}^{j+1} (1 + 3\delta_{sj}) X_{ps}, \\ \partial_\varphi^2 S(r_i, \varphi_j) &= M_{ij} = \frac{1}{6g^2} \sum_{p=i-1}^{i+1} (1 + 3\delta_{pi}) \sum_{s=j-1}^{j+1} (1 - 3\delta_{sj}) X_{ps}.\end{aligned}\tag{129}$$

Столь же просты и представления остальных производных. Например,

$$\begin{aligned}\partial_\varphi S(r_i, \varphi_j) &= \frac{1}{12g} \sum_{p=i-1}^{i+1} (1 + 3\delta_{pi})(X_{p,j+1} - X_{p,j-1}), \\ \partial_\varphi^3 S(r_i, \varphi_j) &= \frac{1}{6g^3} \sum_{p=i-1}^{i+1} (1 + 3\delta_{pi}) [3(X_{pj} - X_{p,j+1}) + \\ &\quad + (X_{p,j+2} - X_{p,j-1})].\end{aligned}\tag{130}$$

Теперь представим две простые модификации алгоритма 4, в которых вывод всех блоков уравнений и упорядочение осуществляются по уже описанной схеме, но имеются принципиальные отличия. Обсудим только их.

Алгоритм 4'. Пусть обе сетки δ_r и δ_φ — регулярные. Все блоки граничных условий построим тем же способом, что и в алгоритме 4. Для этого используем те же формулы (74), но в их упростившемся за счет регулярности сеток виде (128) и (129). Чтобы вывести блоки уравнений, подчиним искомый сплайн X вместо функции F уравнению (95), но уже не во внутренних узлах сетки $\Delta_{r,\varphi}$, а в точках

$$\begin{aligned}(r_i^c, \varphi_j^c) &= (r_{i-1}^-, \varphi_{j-1}^-), \\ i &= 1, \dots, N-1, \quad j = 1, \dots, M-1.\end{aligned}$$

Если в узле $r = r_i$ отличны от нуля три сплайна $B_k(r)$, $k = i, i \pm 1$, и их производные, то в гауссовом узле $r = r_i^-$ не равен нулю и сплайн $B_{i-2}(r)$ и все его производные (см. рис. 2). В гауссовом узле $\varphi = \varphi_j^-$ не равны нулю четыре сплайна $\bar{B}_k(\varphi)$, $k = j-2, j \pm 1$. Поэтому формулы дифференцирования сплайна S в узле (r_i^c, φ_j^c) содержат шестнадцать, а не девять, как в суммах (74), коэффициентов X_{nm} и производные B -сплайнов, но уже в

гауссовых узлах:

$$\partial_r^p \partial_\varphi^q S(r_i^c, \varphi_j^c) = \sum_{n=i-2}^{i+1} \sum_{m=j-2}^{j+1} X_{nm} B_{ni}^{(p)} \bar{B}_{mj}^{(q)}, \quad p, q = 0, 1, 2,$$

$$B_{ni}^{(p)} \equiv B_{ni}^{(p)}(r_{i-1}^-), \quad \bar{B}_{mj}^{(q)} \equiv \bar{B}_{mj}^{(q)}(\varphi_{j-1}^-).$$

По той же причине теперь каждый i -й блок уравнений содержит четыре, а не три, как раньше (см. (126)), неизвестных столбца \mathbf{X}_k :

$$\bar{\mathbf{L}}^i \mathbf{X}^{i-2} + \mathbf{L}^i \mathbf{X}^{i-1} + \mathbf{D}^i \mathbf{X}^i + \mathbf{R}^i \mathbf{X}^{i+1} = \mathbf{Q}^i,$$

где $\bar{\mathbf{L}}^i = \mathbf{L}^{i-1}$ — ненулевая матрица, а матрицы \mathbf{L}^i , \mathbf{D}^i и \mathbf{R}^i вычисляются по прежним формулам (123), в которых $V_{ij} \equiv V(r_{i-1}^- \cos \varphi_j^-)$. Строение матриц \mathbf{A} и $\bar{\mathbf{A}}$ полученных дискретных аналогов (114) в случае $N = 5$ поясняет рис. 4, 2. На нем, как и для алгоритма 4, все пустые клетки и матрицы $\bar{\mathbf{R}}^i$ нулевые, а матрицы $\bar{\mathbf{L}}^i$, в отличие от алгоритма 4, ненулевые. Чтобы оценить ожидаемую точность, предположим, что $F = X$ в узлах коллокации (r_i^c, φ_j^c) . Тогда в этих узлах $\partial_r^2(F - X) = \tau_{34}$ и $\partial_\varphi^2(F - X) = \tau_{43}$, поэтому исходное уравнение (95) будет отличаться от своего дискретного аналога (114) на величину τ_{33} . Следовательно, можно ожидать, что $F = X + \tau_{33}$ в узлах коллокации, но $F = X + \tau_{22}$ во всех других точках области \mathcal{B}^2 .

Алгоритм 4''. Основная идея этого алгоритма впервые высказана в [37], а его подробное описание приводится ниже. Пусть обе сетки δ_r и δ_φ — регулярные, а $S = S_{3311}$ — сплайн с узлами на сетке $\Delta_{r\varphi}$. В пространстве таких сплайнов введем операторы $\bar{\partial}_\varphi^n$. Пусть $\bar{\partial}_\varphi^n S = \partial_\varphi^n S$, если $n = 0, 1$ и $\forall(r, \varphi)$ или же если $n = 2, 3$, но $(r, \varphi) \notin \Delta_{r\varphi}$. В оставшемся случае, т. е. в каждом из узлов (r_i, φ_j) , определим операторы $\bar{\partial}_\varphi^n S$ соответствующими формулами дифференцирования повышенной точности (89)–(93). Таким же способом введем операторы $\bar{\partial}_r^n S$. По определению $\bar{\partial}_\varphi^n S \neq \partial_\varphi^n S$ только при $n = 2, 3, 4$ и только в узлах сетки Δ_r . Пусть искомым сплайном $X = S = S_{3311}$ — сумма (73). Тогда в каждом узле верны формулы дифференцирования (74). Чтобы выразить узловые значения производных $\bar{\partial}_r^2 S$ и $\bar{\partial}_\varphi^q S$ через коэффициенты X_{nm} , в формулах (88)–(93) заменим коэффициенты N_{ij} и M_{ij} их представлениями (129). Тогда в каждом внутреннем узле (r_i, φ_i) получим

$$\begin{aligned} \bar{\partial}_r^2 S &= \sum_{s=j-1}^{j+1} \frac{1 + 3\delta_{sj}}{72h^2} [X_{i-2,s} + 8X_{i-1,s} - 18X_{is} + 8X_{i+1,s} + X_{i+2,s}], \\ \bar{\partial}_\varphi^2 S &= \sum_{p=i-1}^{i+1} \frac{1 + 3\delta_{pi}}{72g^2} [X_{p,j-2} + 8X_{p,j-1} - 18X_{pj} + 8X_{p,j+1} + X_{p,j+2}], \end{aligned} \quad (131)$$

а производные по φ третьего и четвертого порядков представим как

$$\begin{aligned}\bar{\partial}_\varphi^3 S &= \sum_{p=i-1}^{i+1} \frac{1+3\delta_{pi}}{12g^3} [2(X_{p,j-1} - X_{p,j+1}) + (X_{i,j+2} - X_{i,j-2})], \\ \bar{\partial}_\varphi^4 S &= \sum_{p=i-1}^{i+1} \frac{1+3\delta_{pi}}{g^4} [X_{i,j-2} - 4X_{i,j-1} + 6X_{i,j} - 4X_{i,j+1} + X_{i,j+2}].\end{aligned}\tag{132}$$

Повторим все построения, поясняющие алгоритм 4. Все блоки граничных условий оставим прежними, но при записи уравнения (95) во внутренних узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$ обычные производные $\partial_r^2 S$ и $\partial_r^2 S$ заменим производными $\bar{\partial}_r^2 S$ и $\bar{\partial}_r^2 S$. Согласно (131) в каждом внутреннем узле такие производные содержат пятнадцать, а не девять, как обычные производные, неизвестных X_{nm} , причем индексы суммирования n и m принимают в отличие от сумм (129) и значения $n = i \pm 2$ и $m = j \pm 2$. Поэтому каждый i -й блок уравнений теперь содержит не три, как в алгоритме 4, а пять неизвестных столбцов \mathbf{X}^k :

$$\bar{\mathbf{L}}^i \mathbf{X}^{i-2} + \mathbf{L}^i \mathbf{X}^{i-1} + \mathbf{D}^i \mathbf{X}^i + \mathbf{R}^i \mathbf{X}^{i+1} + \bar{\mathbf{R}}^i \mathbf{X}^{i+2} = \mathbf{Q}^i,$$

а матрица \mathbf{A} полученного таким образом дискретного аналога имеет пять полностью заполненных блок-диагоналей. Ее строение в случае $N = 5$ поясняет рис. 4, з, на котором все матрицы $\bar{\mathbf{L}}^i$ и $\bar{\mathbf{R}}^i$ ненулевые. Оценим ожидаемую точность. Предположим, что $F = X$ в узлах коллокации (r_i, φ_j) . Тогда в этих узлах $\bar{\partial}_r^2(F - X) = \tau_{44}$ и $\bar{\partial}_\varphi^2(F - X) = \tau_{44}$, поэтому исходное уравнение (95) будет отличаться от своего дискретного аналога (114) на величину τ_{44} . Следовательно, можно ожидать, что в узлах коллокации $F = X + \tau_{44}$.

3.6. Алгоритм 5: приближение сплайном S_{3322} , разложенным по эрмитовым сплайнам s_n и \bar{s}_m . Обсуждаемый ниже алгоритм дискретизации уравнений Фаддеева в бисферическом базисе в его начальной версии описан в [34], был развит в [38] и имеет два принципиальных отличия от уже рассмотренных алгоритмов 2–4''. Во-первых, вместо базисных сплайнов (68) класса C^2 используются эрмитовы базисные сплайны (76) и разложения (78), (79). Во-вторых, узлы коллокации всегда совпадают с гауссовыми узлами. Чтобы сократить описание других особенностей алгоритма 5, применим его сначала тем же самым образом, как это делалось в работе [38], к одномерной краевой задаче Шредингера с целым параметром $b = 0, 1, \dots$ и искомыми собственными значениями $E < 0$ и функцией $F(r)$:

$$\begin{aligned}[-\partial_r^2 + b(b+1)r^{-2} + V_1(r) - E]F(r) &= 0, \quad 0 < r < \infty; \\ F(0) &= 0; \quad F(r) \rightarrow \exp(-r\sqrt{-E}), \quad r \rightarrow \infty.\end{aligned}\tag{133}$$

Пусть $r \in [0, R]$, $R < \infty$, а Δ_r — произвольная сетка. Примем граничные условия $F(0) = 0$ и $\partial_r F(r) = -\sqrt{|E|}F(r)$, где $r = R$. Используя (75),

подчиним искомый сплайн $X(r) = S_{32}(r)$, представленный суммой (78), этим условиям. Так как $X(0) = 0$, то $X_0 = 0$ и сплайн s_0 исключается из этой суммы. Условие $X' = -\sqrt{|e|}X$ при $r = R$ дает связь $X_{2N+1} = -\sqrt{|E|}X_{2N}$ и удовлетворится заменой $s_{2N} \rightarrow s_{2N} - \sqrt{|E|}s_{2N+1}$ и исключением сплайна s_{2N+1} . Для случая (34), когда $N = 4$, сплайны s_0 , $s_{2N} = s_8$ и $s_{2N+1} = s_9$ изображены штриховыми кривыми на рис. 3, а, б. После исключения и замены сплайнов сумма (78) примет вид

$$X(r) = \sum_{n=1}^{2N} X_n s_n(r). \quad (134)$$

Так как $F \sim r^{b+1}$, $r \rightarrow 0$, то $F'(0) = 0$, если $b > 0$. В этом случае в сумме следует положить $X_1 = 0$, т.е. исключить сплайн s_1 . Для случая (34) этот сплайн изображен на рис. 3, в штриховой кривой.

Итак, эрмитов сплайн X , представленный суммой (78), подчиняется граничным условиям для функций F и $\partial_r F$ исключительно простым способом, но число оставшихся после этого неизвестных коэффициентов X_n , $n = 1, \dots, 2N$, суммы (134) примерно вдвое превышает число узлов $N + 1$ сетки Δ_r и совпадает с числом $2N$ узлов \tilde{r}_i гауссовой сетки $\tilde{\Delta}_r$. Сплайн (134) выгодно подчинить вместо функции F уравнению (133) именно в гауссовых узлах, потому что тогда согласно (83) можно ожидать повышения точности приближения $F'' \approx X''$ со второго до третьего порядка по шагу h . Более того, если $F^{(5)}(\tilde{r}_i) = 0$ для всех i , то можно ожидать, что $F'' = X'' + O(h)^4$ при $r \in [0, R]$. При выборе гауссовых узлов в качестве узлов коллокации для столбца $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_{2N})$ получается дискретный аналог (114) исходной задачи (133) с пятидиагональной матрицей \mathbf{A} . В узлах \tilde{r}_i с номерами $i = 1, 2$ и $i = 2N - 1, 2N$ отличны от нуля три сплайна s_n , а во всех остальных узлах — четыре сплайна. Поэтому первые и последние пары строк матрицы \mathbf{A} содержат по три ненулевых элемента, а все остальные — по четыре. Для случая (34) строение матрицы \mathbf{A} поясняет рис. 4, б. Описанная схема дискретизации уравнения (133) — пример реализации известного метода *ортогональной сплайн-коллокации* [48, 52].

Предложенное в обсуждаемой работе [38] преобразование

$$r \rightarrow \xi = 1 - \exp(-\lambda r), \quad \lambda = \operatorname{Re} \lambda, \quad (135)$$

с заранее неизвестным действительным параметром λ сводит задачу (133) к более сложной задаче на отрезке $0 \leq \xi \leq 1$:

$$\begin{aligned} \{\lambda^2(1 - \xi)[(1 - \xi)\partial_\xi^2 - \partial_\xi] - b(b + 1)\xi^{-2} - V_1(r(\xi)) + E\}f(\xi) &= 0, \\ f(\xi) \sim \xi^{b+1}, \quad \xi \rightarrow 0; \quad f(\xi) \sim (1 - \xi)^{\sqrt{-E}/\lambda}, \quad \xi \rightarrow 1, \end{aligned} \quad (136)$$

но имеет два достоинства: новая неизвестная функция f убывает при $\xi \rightarrow 0$ как целая степень ξ , а ее асимптотика при $\xi \rightarrow 1$, когда $r \rightarrow \infty$, не содержит экспоненты с бесконечно убывающим аргументом. Поэтому при решении уравнения для функции f удастся преодолеть типичные трудности численного интегрирования уравнения (133), а именно избавиться от ошибок округления и более точно учесть поведение функции $V_1(r)$ при больших r .

При $b \leq 3$ и $\lambda = \sqrt{-E}/n$, $n = 1, 2, 3$, старшие слагаемые обоих асимптотик функции f , как и сплайны S_{32} , являются кубическими полиномами. Поэтому, но только при указанных b и λ , сплайн $S_{32}(\xi)$, интерполирующий функцию f , точно воспроизводит ее поведение вблизи границ $\xi = 0$ и $\xi = 1$. Для оригинала F функции f такого сплайна не существует, так как F убывает при $r \rightarrow R$ экспоненциально. Уравнение (133) содержит одну производную $\partial_r^2 F$, а уравнение (136) содержит обе производных $\partial_r f$ и $\partial_r^2 f$. Согласно (83) точность их аппроксимации производными интерполяционного сплайна S_{32} повышается на порядок в разных точках: $\tilde{r}_i \neq \tilde{r}_i$. Поэтому если сплайн $X = S_{32}$ подчиняется уравнению (136) вместо функции f в узлах гауссовой сетки $\tilde{\Delta}_{r\varphi}$, то в общем случае можно ожидать, что $f = X + O(h^3)$, даже если $f^{(5)}(r_i^\pm) = 0$ для всех i .

Перейдем к задаче трех частиц. В обсуждаемом алгоритме 5, в отличие от алгоритма 3, для вывода дискретного аналога простейшей задачи на трехчастичное связанное состояние требуется гораздо меньше граничных условий: уравнение (95) достаточно дополнить прежними точными условиями $F = 0$ на границах $r = 0$ и $\varphi = 0, \pi/2$ и наложить приближенное условие $\partial_r F = -\sqrt{|E|}F$, $r = R$, следующее из (97). Искомый сплайн $X = S_{3322}$, представленный в виде (79), сначала подчиняется всем граничным условиям. В итоге получается разложение

$$X(r, \varphi) = \sum_{n=1}^{2N} \sum_{m=1}^{2M} X_{nm} s_n(r) \bar{s}_m(\varphi), \quad (137)$$

где символом s_{2N} обозначена разность $s_{2N} - s_{2N+1}\sqrt{-E}$, а символом \bar{s}_{2M} — сплайн \bar{s}_{2M+1} . Затем сплайн (137) подчиняется вместо функции F уравнению (95) во всех узлах $(\tilde{r}_i, \tilde{\varphi}_j)$ гауссовой сетки $\tilde{\Delta}_{r\varphi}$ и с помощью финитных свойств (80) этого сплайна выводится система линейных уравнений

$$\begin{aligned} & \sum_{n=2i-1}^{2i+1} \left\{ s_{ni} \sum_{m=2j-1}^{2i+1} \bar{s}_{mj} \left[\frac{s''_{ni}}{s_{ni}} + \frac{1}{\tilde{r}_i^2} \left(\frac{\bar{s}''_{mi}}{\bar{s}_{mi}} + \frac{1}{4} \right) + E - V_{ij} \right] \right\} X_{nm} = \\ & = \frac{4}{\sqrt{3}} V_{ij} \sum_{n=2i-1}^{2i+1} s_{ni} \sum_{k=1}^{2M} h_{jk}^0 X_{nk}, \quad i = 1, \dots, 2N; \quad j = 1, \dots, 2M. \end{aligned} \quad (138)$$

Здесь s_{ni}, s''_{ni} и $\bar{s}_{mj}, \bar{s}''_{mi}$ — значения сплайнов s_n, \bar{s}_m и их вторых производных в гауссовых узлах \tilde{r}_i и $\tilde{\varphi}_j$, $V_{ij} \equiv V_1(\tilde{r}_i \cos \tilde{\varphi}_j)$, при каждом j элементы h_{jk}^0 матрицы \mathbf{h}^0 , т. е. дискретного аналога интеграла уравнения (95), выражаются через интегралы от сплайнов $\bar{s}_m(\varphi)$ по отрезку $[C_-(\tilde{\varphi}_j), C_+(\tilde{\varphi}_j)]$.

Вследствие финитных свойств сплайна (137) в системе (138) при каждом $i = 1, \dots, 2N$ радиальный индекс n принимает только четыре значения. Поэтому если все неизвестные собрать в блок-столбец $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^{2N})^T$, составленный из блоков $\mathbf{X}^i \equiv (X_{i1}, \dots, X_{i,2M})^T$, то из системы (138) получится матричный дискретный аналог (114) исходного уравнения (95) с блочно-пятидиагональной матрицей \mathbf{A} размерностью $4NM$. В случае $N = 4$ представление о ее строении дает рис. 4, б, на котором каждый кружок — заполненная квадратная матрица размерностью $2M$, а все неотмеченные узлы решетки — нулевые блоки с той же размерностью.

Преобразование (135) уравнения (95) не затрагивает аргумент φ и поэтому имеет те же преимущества и недостатки, что и в ранее рассмотренном случае одномерного уравнения (133).

Несомненные достижения авторов работы [38] — предложенное ими преобразование (135) и тензорное представление матрицы \mathbf{A} дискретного аналога интегродифференциальных уравнений. Особенно ценными в методическом отношении являются четко изложенные авторами их опыт масштабирования гауссовых сеток $\tilde{\Delta}_{r\varphi}$ и результаты прецизионных для интегродифференциальных уравнений расчетов слабосвязанных трехчастичных состояний в случае дальнедействующих потенциалов.

Замечания. В работе [38] базисные сплайны s_n с четным и нечетным индексом $n = 2i, 2i + 1$ и их производные вычислялись на их интерваленосителе (r_{i-1}, r_{i+1}) по следующей схеме. Сначала определялись вспомогательные функции $\phi(t)$ и $\psi(t)$ аргумента $t \in [-1, 1]$ и их производные:

$$\begin{aligned} \phi(t) &= a^2(1 + 2|t|), & \phi'(t) &= 6at, & \phi''(t) &= 6(2a + 1), \\ \psi(t) &= a^2t, & \psi'(t) &= a(3a + 2), & \psi''(t) &= 2 \operatorname{sgn}(3a + 1), \end{aligned}$$

где $a \equiv |t| - 1$. Затем переменная t заменялась функцией $t(r)$:

$$t(r) = d(r - r_i), \quad \begin{cases} d = 1/h_{i-1}, & r_{i-1} \leq r < r_i, \\ d = 1/h_i, & r_i \leq r < r_{i+1}. \end{cases}$$

Наконец, вычислялись сами сплайны s_n и их производные:

$$\begin{aligned} s_{2i}(r) &= \phi(t(r)), & s'_{2i}(r) &= d\partial_t\phi(t(r)), & s''_{2i}(r) &= 6d^2\partial_t^2\phi(t(r)), \\ s_{2i+1}(r) &= d^{-1}\psi(t(r)), & s'_{2i+1}(r) &= \partial_t\psi(t(r)), & s''_{2i+1}(r) &= d\partial_t^2\psi(t(r)). \end{aligned}$$

Заметим, что изложенная схема вычисления базисных сплайнов представляется довольно экономной, но имеет недостаток: кусочно-линейные функции $t(r)$, а значит, и сплайны s_n недифференцируемы в узле r_i , если $h_i \neq$

h_{i+1} . Поэтому эту схему не следует использовать для вычисления первой производной сплайна (137) в узлах нерегулярной сетки Δ_r .

Авторы алгоритма 5 в [38] настаивают на том, что этот алгоритм всегда обеспечивает приближение $F = X + \tau_{44}$ с точностью четвертого порядка по каждому из шагов h и g , вообще говоря, нерегулярных сеток Δ_r и Δ_φ . Заметим, что согласно (83) при выборе гауссовых узлов в качестве узлов коллокации в общем случае можно ожидать лишь точность τ_{33} . Теоретически точность алгоритма 5 дискретизации *интегродифференциального* уравнения (95) не установлена. Поэтому указанное противоречие в оценке точности необходимо разрешить путем численных экспериментов, которые можно выполнить по описываемой ниже методике сравнения алгоритмов.

3.7. Сравнение и численный анализ алгоритмов. Для численных расчетов особо важны локальные свойства алгоритмов. Как отмечалось выше, алгоритмы 2–3'' обладают локальными свойствами по аргументу φ в силу строения матрицы \mathbf{B}^φ . Аналогичные локальные свойства алгоритмов 4–5 по обоим переменным r и φ обеспечиваются финитными свойствами базисных сплайнов. Во всех алгоритмах 1–4'' число неизвестных по порядку величины равно NM и вчетверо меньше, чем в алгоритме 5. В алгоритмах 1–4 матрица \mathbf{A} дискретного аналога (114) блочно-трехдиагональная, в алгоритме 4' — блочно-четырёхдиагональная, в алгоритмах 4'' и 5 матрица \mathbf{A} имеет пять полностью заполненных блок-диагоналей. Только в алгоритме 4'', но лишь в узлах сетки $\Delta_{r\varphi}$, можно ожидать максимально возможную точность приближения τ_{44} всех производных $\partial_z^n F$, $z = r, \varphi$, $n = 0, 1, 2, 4$, соответствующими производными $\bar{\partial}_z^n X$ вычисляемого сплайна $X = S_{3311}$. Алгоритм 5, в отличие от алгоритмов 3–4'', адаптирован лишь для вычисления сплайна $X = S_{3322}$, приближающего искомое решение F в узлах гауссовой сетки $\tilde{\Delta}_{r\varphi}$. В алгоритме 5, опять же в отличие от алгоритмов 3–4'', вопрос о приближении производных решения F первого, второго и третьего порядков остался открытым.

Сравнение главных характеристик алгоритмов завершим следующим важным замечанием. Теорема существования и единственности [5] решения интегродифференциальных уравнений Фаддеева с известными краевыми условиями доказана в классе функций $C^{2,2}(\mathcal{R}_+^2)$. Именно в нем и представляется логичным искать приближенное решение, что и делается с использованием алгоритмов 1–4''. При реализации алгоритма 5 приближенное решение вычисляется в классе $C^{1,1}(\mathcal{R}_+^2)$ менее гладких функций и, более того, используются не все граничные условия при малых расстояниях между частицами. Поэтому для алгоритма 5 остается вопрос о том, какое отношение имеет вычисленное решение к точному, в частности является ли вычисленное решение единственным.

Пример расчета связанного состояния [35]. Для сравнения эффективности алгоритмов 1–3 решения задачи на связанное состояние трех тожде-

ственных бозонов уравнение (95) решалось в случае потенциала $V_1(a_{23}) = V_{10} \exp(-a_{23}^2/d^2)$, где a_{23} — расстояние между частицами p_2 и p_3 . Значения параметров $V_{10} = 51,5$ МэВ и $d = 1,6$ Фм брались из работы [103], в которой была получена достаточно точная оценка энергии связи системы трех тождественных частиц: $B = -E = (9,7811 \pm 0,0024)$ МэВ. Для вычислений полагалось $R = 30$ Фм \cdot ГэВ $^{1/2}$ и $\hbar^2/m = 41,4696$ МэВ \cdot Фм 2 , сетка Δ_r бралась регулярной, а сетка Δ_φ — кусочно-регулярной, а именно такой, что регулярные разбиения отрезков $[0, \pi/6]$, $[\pi/6, \pi/3]$, $[\pi/3, \pi/2]$ содержали m , $1,5m$ и $2m$ узлов. Результаты вычислений таковы: чтобы значение энергии связи, вычисленное алгоритмами 1, 2 и 3 как нуль детерминанта $\det \mathbf{A}$ матрицы \mathbf{A} , оказалось в интервале $(9,7811 \pm 0,0024)$ МэВ, необходимо брать такую сетку $\Delta_{r\varphi}$, что $(N + 1, M + 1) = (71, 43), (71, 25), (35, 25)$.

Как видно из этих чисел, сплайн-аппроксимация позволяет примерно вдвое сократить число точек сетки по сравнению с конечно-разностной. Алгоритмы 2, 3 имеют и другие преимущества, обусловленные их локальными свойствами по переменной φ , возможностью выбора произвольных сеток Δ_φ и Δ_r и блочно-трехдиагональной структурой матрицы \mathbf{A} .

Оценим, насколько такая разреженность матрицы \mathbf{A} (см. рис. 4, θ) позволяет оптимизировать вычисление энергии E связанного трехчастичного состояния как нуля $\det \mathbf{A}$. С этой целью рассмотрим циклический матричный аналог схемы исключения Гаусса при некотором данном значении E . Первый шаг цикла по номеру i ее блок-строки изобразим как

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \left| \begin{array}{ccc} \mathbf{D}^1 & \mathbf{R}^1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}^2 & \mathbf{D}^2 & \mathbf{0} \end{array} \right| \rightarrow \mathbf{U} = \\ &= \left| \begin{array}{ccc} \mathbf{U}^{11} & \mathbf{U}^{12} & \mathbf{U}^{13} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}^{22} & \mathbf{U}^{23} \end{array} \right| \rightarrow \mathbf{T} = \left| \begin{array}{ccc} \mathbf{U}^{22} & \mathbf{U}^{23} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}^3 & \mathbf{D}^3 & \mathbf{R}^3 \end{array} \right|. \end{aligned}$$

На этом шаге прямоугольная матрица \mathbf{T} заполняется вычисленными ненулевыми блоками первых блок-линий матрицы \mathbf{A} . Гауссовым исключением [84] с выбором главного элемента по строкам матрица \mathbf{T} преобразуется в «рабочую» матрицу \mathbf{U} . Ее блок U^{21} — нулевая матрица $\mathbf{0}$, а блок U^{11} — верхняя треугольная матрица. Значение d_1 произведения диагональных элементов блока U^{11} запоминается. Затем матрица \mathbf{T} заполняется блоками $\mathbf{T}^{11} = \mathbf{U}^{22}$, $\mathbf{T}^{21} = \mathbf{U}^{23}$ и вычисленными блоками третьей блок-строки матрицы \mathbf{A} и принимает тот же вид, что и в начале шага. На втором шаге запоминается произведение $d_1 d_2$, где d_2 — произведение диагональных элементов нового блока \mathbf{U}^{11} . Повторив описанный цикл $N - 1$ раз, получаем $\det \mathbf{A} = d_1 d_2 \cdots d_{N-1}$. Описанный алгоритм предлагается использовать для вычисления детерминанта блочно-трехдиагональных матриц \mathbf{A} с большой размерностью $(N - 1)(M - 1)$. Алгоритм позволяет заметно сэкономить оперативную память компьютера, потому что на каждом шаге его цикла в

общем блоке оперативной памяти компьютера достаточно хранить матрицу \mathbf{T} , содержащую всего $6(M-1)^2$ элементов и вычислять матрицу \mathbf{U} с таким же числом элементов. Алгоритм несложно обобщить и на случай блочно-пятидиагональной матрицы (см. рис. 4, z), но в этом случае придется хранить матрицы \mathbf{T} и \mathbf{U} из трех блок-строк и пяти блок-столбцов.

В случае ленточных матриц автор настоящего обзора предпочитает использовать и другие циклические матричные аналоги известных методов решения систем линейных уравнений [84], потому что сделанный им вывод из численных экспериментов с методом Ланцоша абсолютно совпадает с мнением авторов монографии [84]: «...в этом методе пока еще слишком много неясного, и его практическое использование скорее похоже на искусство, чем на обоснованные вычисления» [84, с. 245].

Пример. Алгоритмом $3''$ на сетке Δ_φ из семи узлов решалась задача

$$(\partial_\varphi^2 - E)F(\varphi) = 0, \quad \partial_\varphi^n F = 0, \quad n = 0, 2, \quad \varphi = 0, \pi/2.$$

Как оказалось, вычисленное минимальное собственное значение $\tilde{E} = 4,03$ близко к точному $E = 4$, но вычисленный сплайн $X = S_{31}(\varphi)$ заметно отличается от точного решения $F = \sin 2\varphi$ при $\varphi \in [\pi/3, \pi/2]$. В этой области $|X/F - 1| \approx 0,3$. Вывод касается любого численного алгоритма: из близости вычисленного собственного значения к точному еще не следует равномерная по аргументам близость вычисленной собственной функции к точной. Приведенный пример иллюстрирует особую значимость вопроса о поточечной сходимости численного алгоритма.

Методика оценки точности алгоритмов. Описание предлагаемой методики начнем с определений. Пусть (E, F) — точное решение задачи на связанное состояние (95), (99)–(105), а (\tilde{E}, X) — решение ее дискретного аналога, интерполированное в \mathcal{B}^2 и нормированное условием $X = F$ в какой-то одной точке $(r, \varphi) \in \mathcal{B}^2$. Для всех рассмотренных алгоритмов за исключением алгоритма $4''$ введем десятичные логарифмы χ и χ_n относительной точности приближений $E \approx \tilde{E}$ и $\partial_\varphi^n F \approx \partial_\varphi^n X$:

$$\chi(\zeta) \equiv \left| \log \left| \tilde{E}/E - 1 \right| \right|, \quad \chi_n(r, \varphi; \zeta) \equiv \log \left| \frac{|\partial_\varphi^n X(r, \varphi)|}{|\partial_\varphi^n F(r, \varphi)| + \delta} - 1 \right|, \quad (139)$$

где $n = 0, \dots, 3$, ζ — набор *варьируемых* параметров сетки $\Delta_{r\varphi}$, а δ — машинный нуль. Для алгоритма $4''$ используем ту же функцию χ и функции χ_n , $n = 0, \dots, 4$, содержащие $\bar{\partial}_\varphi^n X = \bar{\partial}_\varphi^n S$ вместо $\partial_\varphi^n X = \partial_\varphi^n S$:

$$\chi(\zeta) \equiv \left| \log \left| \tilde{E}/E - 1 \right| \right|, \quad \chi_n(r, \varphi; \zeta) \equiv \log \left| \frac{|\bar{\partial}_\varphi^n X(r, \varphi)|}{|\partial_\varphi^n F(r, \varphi)| + \delta} - 1 \right|. \quad (140)$$

Пусть при данном $r \in (0, R)$ и ζ ломаная $P_n(\varphi; r, \zeta)$ соединяет все точки $(\varphi_j, \chi_n(r, \varphi_j; \zeta))$, $j = 0, \dots, M$, абсциссы которых φ_j — узлы сетки Δ_φ , а ломаная $Q_n(\varphi; r, \zeta)$ проходит через все точки $(\varphi_k, \chi_n(r, \varphi_k; \zeta))$, $k = 0, \dots$, абсциссы которых φ_k не совпадают с узлами φ_j сетки Δ_φ .

Сформулируем гипотезу сходимости исследуемого алгоритма при данном $r \in (0, R)$ и $g \rightarrow 0$: пусть существуют настолько большие R и N , что при варьировании числа узлов $\zeta = M + 1 = M_k + 1$, $k = 1, \dots$, $M_1 < M_2 < \dots$, сетки Δ_φ при всех $M_m > M_k$ и некоторых положительных числах p , p_n и q_n выполняются приближенные разностные соотношения

$$\begin{aligned} \chi(M_m) - \chi(M_k) &= p \log \frac{M_m}{M_k}, \\ P_n(\varphi; r, M_m) - P_n(\varphi; r, M_k) &= p_n \log \frac{M_m}{M_k}, \\ Q_n(\varphi; r, M_m) - Q_n(\varphi; r, M_k) &= q_n \log \frac{M_m}{M_k}. \end{aligned} \quad (141)$$

Тогда при тех же условиях на N и R все указанные разности функций P_n и Q_n зависят только от (r, φ) , но не зависят от k и m :

$$\begin{aligned} P_n(r, \varphi; M_m) - P_n(r, \varphi; M_k) &= \log |\tilde{P}_n(r, \varphi)|, \\ Q_n(\varphi; r, M_m) - Q_n(\varphi; r, M_k) &= \log |\tilde{Q}_n(r, \varphi)|, \end{aligned} \quad (142)$$

и поэтому при $g \rightarrow 0$ верны следующие асимптотические оценки сходимости:

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= E + O(g^p); \\ \partial_\varphi^n F(r, \varphi) &= \partial_\varphi^n X(r, \varphi) + \tilde{P}_n(r, \varphi) g^{p_n}, \quad \varphi \in \Delta_\varphi; \\ \partial_\varphi^n F(r, \varphi) &= \partial_\varphi^n X(r, \varphi) + \tilde{Q}_n(r, \varphi) g^{q_n}, \quad \varphi \notin \Delta_\varphi. \end{aligned} \quad (143)$$

Порядки p_n и q_n сходимости в узлах сетки Δ_φ и вне ее узлов соответственно определяются следующим образом. Сначала при данных N, R и r вычисляются функции χ , χ_n , P_n и Q_n для некоторой возрастающей последовательности $M_1 < M_2, \dots$ параметра M сетки Δ_φ . Затем необходимо убедиться в том, что выполняются соотношения (142). Самый простой для этого способ — визуальное сравнение графиков функций P_n или Q_n при одинаковых n , но разных $M = M_k$. Если форма кривых не зависит от M , то соотношения (142) верны. Тогда остается выбрать произвольным образом точку φ и разрешить уравнения (141) относительно чисел p , p_n и q_n . Если с ростом M_m и M_k эти числа будут сходиться к целым, то высказанная гипотеза сходимости станет численно доказанной теоремой о справедливости асимптотических соотношений (143).

Замечания. Если точное решение (E, F) неизвестно, то в (139)–(142) вместо (E, F) следует использовать приближенное, но достаточно близкое к

точному решению, вычисленное при максимально возможных значениях всех трех параметров N , M и R . Порядки сходимости алгоритма при фиксированном φ и $h \rightarrow 0$ можно определить, применяя уже описанный способ, но оперируя аналогами функций χ_n , которые получаются заменой $\partial_\varphi^n \rightarrow \partial_r^n$ в формулах (139), а для алгоритма 4'' заменой $\bar{\partial}_\varphi^n \rightarrow \bar{\partial}_r^n$ в формулах (140). Можно численно определить порядки сходимости в случае $h, g \rightarrow 0$. Для этого удобно ввести функции χ_{nm} , равные правым частям определений (139) или (140) после замен $\partial_r^n \rightarrow \partial_r^n \partial_\varphi^m$ или $\bar{\partial}_r^n \rightarrow \bar{\partial}_r^n \bar{\partial}_\varphi^m$.

Сравнение алгоритмов 4 и 4''. Чтобы продемонстрировать описанную методику, определим порядки сходимости p , p_n и q_n алгоритмов 4 и 4'' в случае взаимодействий (29) с параметром $c = 4$. В этом случае уравнение (95) содержит потенциал $V_1 = 4/(r \cos \varphi)^2$ и в силу связи $U = r^{-1/2}F$ и формул (30) имеет при любой энергии $E > 0$ точное решение

$$F(r, \varphi) = \sqrt{z} J_6(z) \left[\sin 2\varphi - \frac{4}{5} \sin 4\varphi - \sin 6\varphi \right], \quad z \equiv r\sqrt{E}, \quad (144)$$

равное нулю при $z \equiv r\sqrt{E} = j_{6,1}$, где $j_{6,1}$ — первый нуль функции Бесселя J_6 . Используем этот факт, чтобы сформулировать однозначно разрешимую краевую задачу в области B^2 с границами $r = 0$ и $r = R \equiv j_{6,1}$. Искомое решение (E, F) , отвечающее собственному значению $E = 1$, подчиним прежним граничным условиям (99)–(104). Дополнительные к ним однородные условия (105), необходимые для использования алгоритмов 4 и 4'', теперь не выполняются: производные $\partial_r^2 F$ и $\partial_r \partial_\varphi F$ функции (144) при $r = R = j_{6,1}$ отличны от нуля. Поэтому алгоритмы 4 и 4'' следует модифицировать. Для этого подчиним искомый сплайн (73) не условиям (105), как ранее, а уравнению (95) в дополнительных узлах коллокации (r_{N-1}^\pm, φ_j) , где r_{N-1}^\pm — гауссовы узлы, а $j = 0, \dots, M$. Обсуждаемые ниже результаты получены модифицированными таким образом алгоритмами 4 и 4''. Сначала этими алгоритмами вычислялось приближенное решение (\tilde{E}, X) . Использовалась одна и та же сетка Δ_r с достаточно большим числом узлов $N+1 = 101$, найденным путем численных экспериментов из условия гипотезы сходимости, а число узлов $M+1$ сетки Δ_φ последовательно увеличивалось: $M = M_k = 9, 30, 102, 300, 999$; $k = 1, \dots, 5$. Каждый раз приближенное и точное решения (\tilde{E}, X) и $(E = 1, F)$ использовались для вычисления функций χ и χ_n при $r = r_{50}$ и $\delta = 10^{-13}$ по формулам (139) или (140). В алгоритме 4 производные сплайна вычислялись по формулам (129) и (130), а в алгоритме 4'' — по формулам (131) и (132).

Обсудим результаты вычислений. Если $M = M_k = 9, 30, 102, 300, 999$, то $\chi(M) \approx 2, 3, 4, 5, 6$ для алгоритма 4 и $\chi(M) \approx 3, 6, 8, 10, 12$ для алгоритма 4''. Следовательно, при достаточно большом $M \geq M_2 = 30$ функция χ удовлетворяет равенству (141) с $p = 2$ и $p = 4$ для алгоритмов 4 и 4''.

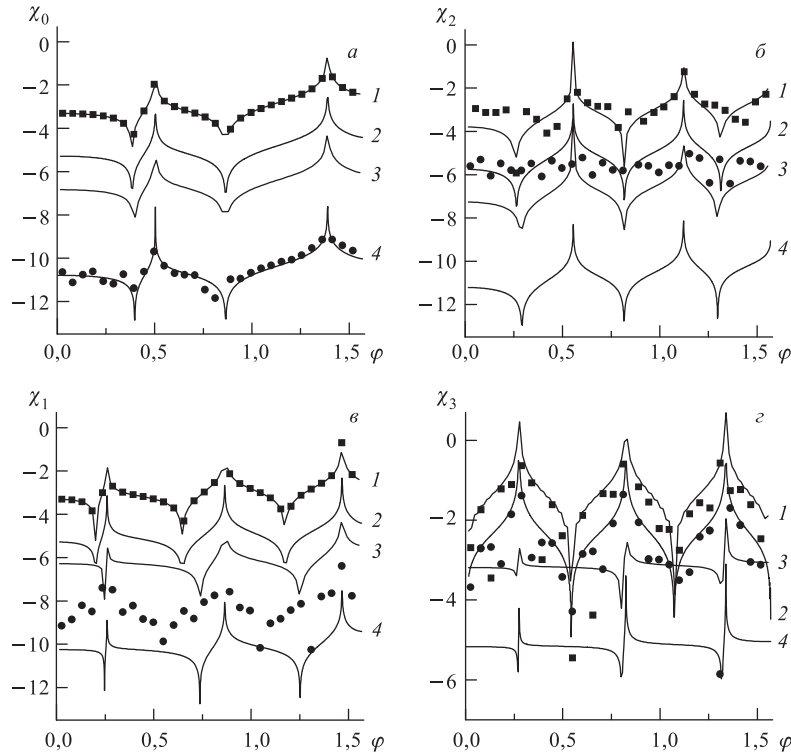


Рис. 5. Ломаные линии $P_n(\varphi; r_{50}, M)$: 1 и 2 — алгоритм 4, $M = 102$ и $M = 999$; 3 и 4 — алгоритм 4'', $M = 102$ и $M = 999$; квадраты и кружки — точки $(\varphi_k, \chi(r_{50}, \varphi_k; M))$, $\varphi_k = \pi k/58$, $k = 1, \dots, 29$, для алгоритмов 4 и 4''

Рассмотрим графики функций χ_n , изображенные на рис. 5. Цифрами 1, 2, 3, 4 обозначены ломаные линии $P(\varphi; r_{50}, M)$: 1, 2 — для $M = 102, 999$ и алгоритма 4, а 3, 4 — для $M = 102, 999$ и алгоритма 4''. Квадратами (алгоритм 4, $M = 102$) и кружками (алгоритм 4'', $M = 999$) отмечены точки $(\varphi_k = k\pi/58, \chi_n(r_{50}, \varphi_k; M))$. Точки φ_k , $k = 1, \dots$, не совпадают с узлами сетки Δ_φ . Кружки и квадраты лежат на ломаных Q_n . Эти ломаные не изображены, чтобы избежать загромождения рисунков. При каждом $n = 0, 1, 2, 3$ все кривые 1, 2, 3 и 4 имеют одну и ту же форму. Следовательно, при любом φ все функции P_n подчиняются равенствам (142). Например, согласно рис. 5, а при $\varphi = 1/8$ и $n = 0$ разность

$$d_n \equiv P_n(\varphi; r_{50}, 999) - P_n(\varphi; r_{50}, 102)$$

примерно равна $5 - 3 = 2$ для алгоритма 4 и $11 - 7 = 4$ для алгоритма 4''. Поэтому $p_0 = 2$ для первого из них и $p_0 = 4$ для второго. Используя рис. 5, б-г, вычислим остальные разности d_n , $n = 1, 2, 3$. Имеем $p_1 = 2$, $p_2 = 2$ и $p_3 = 1$ для алгоритма 4 и $p_1 = 4$, $p_2 = 4$ и $p_3 = 2$ для алгоритма 4''. Для этого же алгоритма, используя рис. 6, на котором l — ломаная $P_4(r_{50}, \varphi; 102)$, а 2 — ломаная $P_4(r_{50}, \varphi; 999)$, находим $d_4 = p_4 = 4$.

Как видно из рис. 5, для алгоритма 4 точки, отмеченные квадратами, близки к соответствующим ломаным l при всех $n = 0, 1, 2, 3$; для алгоритма 4'' точки, отмеченные кружками, близки к ломаной 4 лишь при $n = 0$, а при $n = 2, 3$ эти точки близки к ломаным 2 , вычисленным алгоритмом 4 в случае $M = 999$. Следовательно, для алгоритма 4 все порядки аппроксимации в узлах φ_j и вне узлов совпадают: $q_n = p_n$, $n = 0, 1, 2, 3$; для алгоритма 4'' только $q_0 = p_0$, а порядки $q_2 = 2$ и $q_3 = 1$ те же, что и в алгоритме 4. Из рис. 5, в для алгоритма 4'' находим $p_1 = 4$ и $q_1 = 3$. Для алгоритма 4'' все найденные порядки q_n , $n = 0, 1, 2, 3$, оказались равными разностям функций $Q_n(\varphi; r_{50}, M)$ с $M = 999$ и $M = 102$.

Более детальное представление о точности аппроксимации вне узлов сетки Δ_φ и в ее узлах дает анализ поведения функций χ_n на выбранном отрезке $[\varphi_j, \varphi_{j+1}]$. Как пример рассмотрим случай $M = 102$ и $j = 10$, когда $\varphi_{10} = 0,1386$ и $\varphi_{11} = 0,1540$. На рис. 7, а, б представлены графики функций χ_n , вычисленные алгоритмами 4 и 4'' и в соответствии с индексом $n = 0, 1, 2, 3, 4$ отмеченные кружками, треугольниками, квадратами, ромбами и крестами.

Обсудим рис. 7, а. Графики функций χ_0 и χ_1 близки друг к другу, поэтому $p_0 = p_1 = 2$ и на всем отрезке $[\varphi_{10}, \varphi_{11}]$ оба приближения $X \approx F$ и $\partial_\varphi X \approx F$ имеют второй порядок точности по шагу g . Функция χ_2 не имеет минимумов в гауссовых точках $\varphi_{10}^- = 0,1418\dots$ и $\varphi_{10}^+ = 0,1507\dots$, но функция χ_3 имеет резкий минимум в средней точке $\bar{\varphi}_{10} = 0,1463$. В этой точке точность приближения $\partial_\varphi^3 F \approx \partial_\varphi^3 X$ резко улучшается, как и в случае, когда сплайн $S_{31}(\varphi) = X(r_{50}, \varphi)$ интерполирует функцию $F(r_{50}, \varphi)$.

Теперь обсудим рис. 7, б. В средней точке $\bar{\varphi}_{10}$ обе функции χ_1 и χ_3 имеют резкие минимумы. Функция χ_2 имеет минимумы в гауссовых узлах φ_{10}^\pm . В

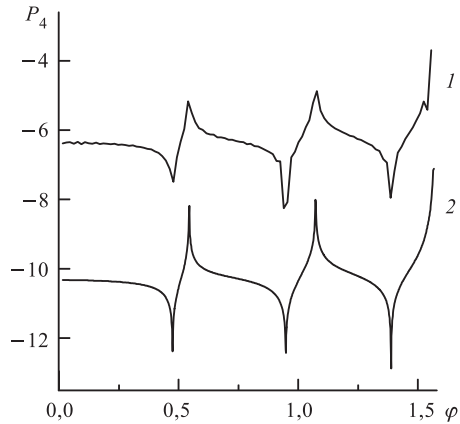


Рис. 6. Ломаная линия $P_4(\varphi; r_{50}, M)$: l — при $M = 102$ и 2 — при $M = 999$

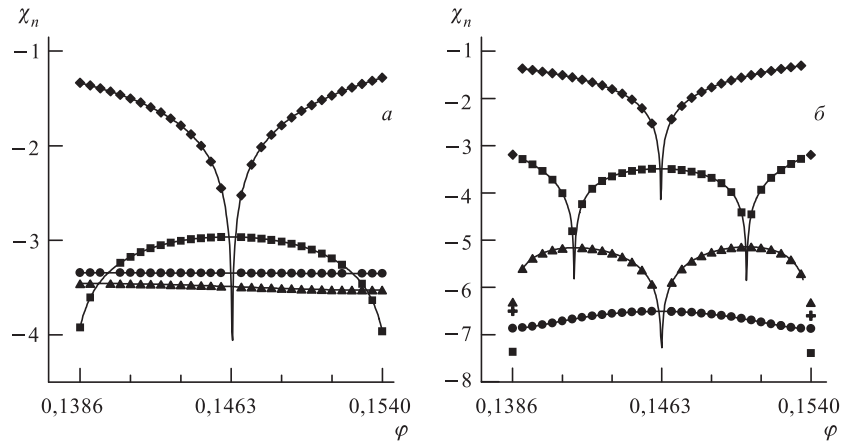


Рис. 7. Функции $\chi_n(r_{50}, \varphi; M = 102)$ на отрезке $[\varphi_{10}, \varphi_{11}] = [0,1386, 0,1540]$: а) алгоритм 4; б) алгоритм 4''. \bullet — χ_0 ; \blacktriangle — χ_1 ; \blacksquare — χ_2 ; \blacklozenge — χ_3 ; $+$ — точки $(\varphi_j, \chi_4(r_{50}, \varphi_j; 102))$, $j = 10, 11$

этих трех точках точность приближений $\partial_\varphi^n X \approx \partial_\varphi^n F$, $n = 1, 2, 3$, улучшается на порядок по шагу g по сравнению со всеми другими точками интервала $(\varphi_{10}, \varphi_{11})$. Следовательно, достигаемая в алгоритме 4'' точность $O(g^4)$ приближения $X \approx F$ настолько высока, а вычисленный сплайн $X(r_{50}, \varphi)$ настолько близок к интерполяционному сплайну $S_{31}(\varphi; F(r_{50}, \varphi))$, что удается воспроизвести все особенности приближения производных интерполяционным сплайном. Осталось рассмотреть точки с абсциссами $\varphi_{10}, \varphi_{11}$. Две из них, отмеченные ромбами, близки к кривой χ_2 , помеченной квадратами. Следовательно, в узлах $\varphi_{10}, \varphi_{11}$ точность аппроксимации третьей производной улучшается настолько, что сравнивается с точностью приближения второй производной вне узлов. Остальные обсуждаемые точки, отмеченные треугольниками, квадратами и крестами, близки к кривой χ_1 , что еще раз подтверждает равенство порядков p_n , $n = 0, 1, 2, 4$, аппроксимаций $\partial_\varphi^n F \approx \partial_\varphi^n X$ в узлах сетки Δ_φ .

4. НОВЫЕ ЭТАЛОННЫЕ РЕШЕНИЯ

Продолжая исследования [62] и [67], представим два типа универсальных эталонных решений: ложные, не зависящие от формы центральных потенциалов решения уравнений Фаддеева и решения одномерной краевой задачи Шредингера, отвечающие ее заранее заданному и сколь угодно сложному дискретному спектру собственных значений.

4.1. Ложные решения уравнений Фаддеева. Ложными решениями $S_i(\mathbf{r}_i) \equiv \Psi_i(\mathbf{r}_i)$, $i = 1, 2, 3$, уравнений (14) принято называть решения, обращающиеся в нуль и правую, и левую части этих уравнений:

$$(H_0 - E)S_i = 0, \quad S_i + \sum_{k \neq i} S_k = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (145)$$

По определению компоненты $S_i(\mathbf{r}_i)$ ложного решения — трехмерного столбца $\mathbf{S} \equiv (S_1, S_2, S_3)^T$ — подчиняются свободному уравнению Шредингера, а их сумма в любом из трех координатном представлении тождественно равна нулю. Следовательно, ложные решения уравнений Фаддеева отвечают тривиальному ($\Psi \equiv 0$) решению уравнения Шредингера (9). Ложные решения не зависят от формы парных взаимодействий, что и обуславливает их универсальность в качестве эталонных решений уравнений Фаддеева. Анализ других свойств ложных решений и их известных явных представлений дан в обзоре [55]. Как известно [62], в случае центральных парных взаимодействий ложные решения, обладающие заранее заданным набором $\varepsilon = (\ell, m, E, \sigma)$ сохраняющихся квантовых чисел, можно представить в виде, вообще говоря, бесконечного разложения по гипергармоникам $Y_{Lab}^{\ell m}$.

Выведем новое, более удобное и универсальное для приложений операторное представление $\mathbf{S} = \mathbf{P}^s \mathbf{S}_0$ ложного решения как образа решения $\mathbf{S}_0 \equiv (S_{10}, S_{20}, S_{30})^T$ свободного матричного уравнения Шредингера

$$(\mathbf{H}_0 - E\mathbf{I})\mathbf{S}_0 = 0, \quad \mathbf{H}_0 = \text{diag}(H_0, H_0, H_0), \quad \mathbf{I} = \text{diag}(I, I, I).$$

Так как его спектр известен, то остается найти оператор \mathbf{P}^s . Для этого введем матричный оператор \mathbf{K} кинематического преобразования с элементами

$$K_{ii} \equiv I/3, \quad K_{ik} \equiv K(\gamma_{ki})/3, \quad k \neq i = 1, 2, 3,$$

и, используя правила (21) действия оператора $K(\gamma)$, запишем условия (145), определяющие ложное решение, в матричном виде:

$$(\mathbf{H}_0 - E\mathbf{I})\mathbf{S} = 0, \quad \mathbf{K}\mathbf{S} = 0. \quad (146)$$

В силу (11), (12) и (22) оператор $K(\gamma)$ обладает групповыми свойствами:

$$K(\gamma_{ki})K(\gamma_{ik}) = K(\gamma_{ki})K(-\gamma_{ki}) = I, \quad K(\gamma_{ki})K(\gamma_{jk}) = K(\gamma_{ji}),$$

кроме того, $[H_0, K(\gamma)]_- = 0$ при любом γ . Значит, \mathbf{K} — коммутирующий с \mathbf{H}_0 ортогональный проектор: $[\mathbf{K}\mathbf{H}_0]_- = 0$, $\mathbf{K}\mathbf{K} = \mathbf{K}$. Оператор $\mathbf{P}^s \equiv \mathbf{I} - \mathbf{K}$ имеет те же свойства, поэтому образ $\mathbf{S} = \mathbf{P}^s \mathbf{S}_0$ любого собственного

для оператора \mathbf{H}_0 вектора \mathbf{S}_0 подчиняется обоим условиям (146) и является ложным решением уравнений Фаддеева, что и требовалось доказать.

Замечания. При $E > 0$ и выборе

$$S_{0i}(r, \Omega_i) = z^{-2} J_{L+2}(z) Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i),$$

$$z \equiv r\sqrt{E}, \quad (-1)^{a+b} = (-1)^\sigma, \quad i = 1, 2, 3,$$

ложное решение \mathbf{S} совпадает с полученным в [62] регулярным ложным решением и обладает квантовыми числами L, ℓ, m, σ, E . В частном случае трех тождественных частиц матрица \mathbf{K} вырождается в диагональную, причем $3K_{ii} = I + P^+ + P^-$, $i = 1, 2, 3$, поэтому диагональной становится и матрица \mathbf{P}^s . Каждый ее диагональный элемент $P_{ii}^s = (2I - P^+ - P^-)/3$ не что иное, как известный ортогональный проектор P^s , использованный в работе [104] для вывода операторного представления $S = P^s S_{01}$ ложных решений в случае трех тождественных частиц и $\ell = 0$. Доказанное операторное представление $\mathbf{S} = \mathbf{P}^s \mathbf{S}_0$ обобщает известные представления [62, 104] ложных решений на случай произвольного углового момента ℓ и произвольного собственного вектора \mathbf{S}_0 и на случай нетождественных частиц.

Уравнения Фаддеева (14) имеют регулярные ($S_i(r) = 0, r = 0$) ложные решения только при $E > 0$. Рассмотрим использованные в [25–27] уравнения Фаддеева (18)–(20) в модели твердого кора. Пусть $\mathcal{H} \equiv \bigcap \mathcal{H}_i$ — пересечение трех областей \mathcal{H}_i пространства \mathcal{R}^6 , в каждой из которых $x_i \leq b_i$. Тогда в \mathcal{H} уравнения (18) и (19) эквивалентны условиям (145). Следовательно, если $E > 0$, то в модели твердого кора по крайней мере в области \mathcal{H} существуют регулярные ложные решения. Исследование их роли и влияния на устойчивость численных алгоритмов представляется интересным и необходимым. В расчетах [25–27] характеристик системы трех атомов ${}^4\text{He}$ регулярные ложные решения уравнений (20) не возникали по простой причине: вычислялись регулярные компоненты Ψ_i при $E < 0$, а случай $E > 0$, когда после столкновения все три атома гелия могут быть свободными, еще не рассматривался.

4.2. Коллапсирующие эталонные решения. Исследование спектра уравнений Фаддеева (14) в случае взаимодействий центробежного типа особо интересно не только из-за наличия точных решений, но и из-за особых решений, описывающих коллапс трех частиц.

Как известно [6], при любой действительной константе c взаимодействия $V = c/x^2$ центробежного типа, где x — расстояние между частицами, задача двух частиц имеет физически приемлемое решение. В случае нулевого полного углового момента ($b = 0$) двух частиц наиболее интересное решение существует при $c < -1/4$ и описывает коллапс — падение частиц в их центр масс. В коллапсе энергия связи частиц бесконечно велика, а среднее расстояние между ними равно нулю.

Теорема существования и единственности физически допустимых решений уравнений Фаддеева (14) для системы трех частиц p_1, p_2 и p_3 с взаимодействиями V_i центробежного типа в каждой паре частиц p_j и p_k в полном объеме не доказана. Первым этапом ее доказательства оказалось построение точных решений [64–66], представимых в виде произведений функции Бесселя J_{t+2} и конечных линейных комбинаций гипергармоник. Свойства таких решений и простые алгебраические способы их вычисления подробно обсуждались в обзорах [55, 56] и в недавней работе [66].

Как впервые заметил Авишаи [105], уравнение Фаддеева (14) для системы трех тождественных бозонов с $\ell = 0$ и взаимодействиями (29) сводится к совокупности двух одномерных краевых задач. Эти задачи связаны лишь постоянной разделения p^2 гиперрадиуса r и гиперугла $\varphi \equiv \varphi_1$. Первая задача — уравнение Бесселя с тривиальным граничным условием при $r = 0$, а вторая задача — интегродифференциальное уравнение

$$\left(-\partial_\varphi^2 + \frac{c}{\cos^2 \varphi}\right)U(\varphi; p^2) + \frac{c}{\cos^2 \varphi} \tau \int_{C_-(\varphi)}^{C_+(\varphi)} d\varphi' U(\varphi'; p^2) = p^2 U(\varphi; p^2) \quad (147)$$

с коэффициентом $\tau = 4/\sqrt{3}$, пределами интеграла (26) и условиями

$$U(0; p^2) = 0, \quad U(\pi/2; p^2) = 0. \quad (148)$$

По известному критерию [64] точные ($N < \infty$) решения

$$U(\varphi; p^2) = \sum_{n=1}^N B_n \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin 2n\varphi \right) \quad (149)$$

задачи (147), (148) существуют тогда и только тогда, когда $p^2 = (t + 2)^2$, $t = 2, 4, \dots$, $N = t/2 + 1 < \infty$, а положительный параметр c взаимодействий (29) и искомые коэффициенты B_n удовлетворяют вполне определенной обобщенной алгебраической проблеме собственных значений. Критерий имеет важное следствие [55]: если задача (147), (148) имеет решение при данном c и некотором p^2 , отличном от $4, 6, \dots$, например при $p^2 < 0$, то это решение — бесконечный ($N = \infty$) ряд (149). Его свойства неизвестны.

Численно задача (147), (148) впервые решена в [105], но только для $c = -6, -5, \dots, 0$ и, к сожалению, при неверном значении $\tau = 1$ коэффициента $\tau = 4/\sqrt{3}$. В [67] выполнен численный анализ зависимости спектра $\{p^2(c)\}$ собственных значений задачи (147), (148) с $\tau = 4/\sqrt{3}$ от параметра c в частном случае $\partial_\varphi^2 U(\varphi) = 0$ при $\varphi = 0, \pi/2$. В общем случае спектр $\{p^2, U\}$ собственных значений p^2 и отвечающих им собственных функций U

неизвестен. Первый этап исследования спектра $\{p^2, U\}$ — представленный ниже анализ спектра $\{p^2, \Phi\}$ соответствующей однородной ($\tau = 0$) задачи:

$$\left[\partial_\varphi^2 + p^2 - \frac{c}{(\cos \varphi)^2} \right] \Phi(\varphi; p^2) = 0, \quad \varphi \in [0, \pi/2], \quad (150)$$

$$\Phi(0; p^2) = 0, \quad \Phi(\pi/2; p^2) = 0, \quad \Phi(\varphi; p^2) \in C_{[0, \pi/2]}^2. \quad (151)$$

Представление функции Φ через фундаментальные решения. Для построения фундаментальной системы решений (ФСР) $\{\Phi_0^\pm\}$ уравнения (150) в малой окрестности регулярной точки $\varphi = 0$ положим в нем $\Phi(\varphi) = \varphi^\sigma(1 + o(1))$. Устремив φ к нулю, получим характеристическое уравнение $\sigma(\sigma - 1) = 0$. Его решениям $\sigma = 1$ и $\sigma = 0$ отвечают искомые функции Φ_0^+ и Φ_0^- с асимптотиками

$$\Phi_0^+(\varphi; p^2) \sim \varphi, \quad \Phi_0^-(\varphi; p^2) \sim \text{const} \neq 0, \quad \varphi \rightarrow 0. \quad (152)$$

Чтобы найти ФСР $\{\Phi^\pm\}$ исследуемого уравнения (150) в малой окрестности его особой регулярной точки $\varphi = \pi/2$, удобно сначала положить $s \equiv (\pi/2 - \varphi)$ и $\Phi(\varphi) = v(s) = s^\sigma(1 + o(1))$. Тогда получится характеристическое уравнение $\sigma(\sigma - 1) = c$. Его корням $\sigma = 1/2 \pm \nu$, где $\nu \equiv \sqrt{c + 1/4}$, соответствуют искомые решения Φ^\pm с асимптотиками

$$\begin{aligned} \Phi^\pm(\varphi; p^2) &\sim s^{1/2 \pm \nu}, \quad c \neq -1/4, \quad s \equiv (\pi/2 - \varphi) \rightarrow 0; \\ \Phi^+(\varphi; p^2) &\sim s^{1/2}, \quad \Phi^-(\varphi; p^2) \sim s^{1/2} \ln s, \quad c = -1/4, \quad s \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (153)$$

Предположим, что обе ФСР $\{\Phi_0^\pm\}$ и $\{\Phi^\pm\}$ существуют не только вблизи точек $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/2$, но и на всем отрезке $[0, \pi/2]$. Тогда любое решение уравнения (150) можно представить на этом отрезке в виде линейных комбинаций с некоторыми коэффициентами A_0, B_0 и A, B :

$$\Phi(\varphi; p^2) = A_0 \Phi_0^+(\varphi; p^2) - B_0 \Phi_0^-(\varphi; p^2) = A \Phi^+(\varphi; p^2) - B \Phi^-(\varphi; p^2). \quad (154)$$

Используя асимптотики (152) и (153), выберем из всех возможных решений (154) только решения, подчиненные условиям (151), т. е. равные нулю при $\varphi = 0$ и при $\varphi = \pi/2$. Чтобы удовлетворить первому из них, в формуле $\Phi = A_0 \Phi_0^+ - B_0 \Phi_0^-$ придется положить $B_0 = 0$ и без потери общности можно выбрать $A_0 = 1$. Тогда получим $\Phi = \Phi_0^+$ и $\Phi \sim \varphi$ при $\varphi \rightarrow 0$. Второе из условий (151) порождает спектральное уравнение $\Phi_0^+(\pi/2; p^2) = 0$, определяющее допустимые собственные значения p^2 . При использовании формулы $\Phi = A \Phi^+ - B \Phi^-$ возможны два случая: при $\varphi = \pi/2$ в нуль обращается только функция Φ^+ или же обе функции Φ^\pm . В силу (153) первый случай имеет место при $c \geq 0$, когда $\nu \geq 1/2$, а второй — при $-1/4 < c < 0$, когда

$\nu = \operatorname{Re} \nu < 1/2$, и при $c < -1/4$, когда $\nu = \operatorname{Im} \nu = i|\nu|$. Поэтому при $c \geq 0$ следует положить $A = 1$ и $B = 0$, тогда функция $\Phi = \Phi^+$ будет равной нулю при $\varphi = \pi/2$, а спектр $\{p^2\}$ определится уравнением $\Phi^+(0; p^2) = 0$.

Пусть теперь $c < 0$. Тогда любому заранее заданному p^2 отвечает единственная собственная функция $\Phi = A\Phi^+ - B\Phi^-$ с коэффициентами $A = \Phi^-(0; p^2)$ и $B = \Phi^+(0; p^2)$. Функция $\Phi = A\Phi^+ - B\Phi^-$ с заранее заданными A и B будет собственной тогда и только тогда, когда p^2 является корнем уравнения $\Phi^-(0; p^2)/\Phi^+(0; p^2) = A/B$. В частности, решение Φ может совпадать с функцией Φ^+ , если $A = 1$, $B = 0$ и p^2 — корень уравнения $\Phi^+(0; p^2) = 0$, или совпадать с функцией Φ^- , если $A = 0$, $B = -1$ и $\Phi^-(0; p^2) = 0$.

Как было показано, если фундаментальные решения Φ_0^\pm и Φ^\pm уравнения (150) существуют на всем отрезке $[0, \pi/2]$, то любое решение Φ исследуемой задачи (150), (151) имеет асимптотику $\Phi \sim \varphi$, $\varphi \rightarrow 0$, а все ее возможные и, вообще говоря, комплексные спектры $\{p^2; \Phi\}$ определяются следующим образом. Если $c \geq 0$, то

$$\Phi^+(0; p^2) = 0, \quad \Phi(\varphi; p^2) = \Phi_0^+(\varphi; p^2) = A\Phi^+(\varphi; p^2) \quad (155)$$

и в силу (153) вблизи точки $\varphi = \pi/2$ решение Φ не осциллирует:

$$\Phi(\varphi; p^2) \sim s^{1/2+\nu}, \quad s \equiv (\pi/2 - \varphi) \rightarrow 0. \quad (156)$$

Если $c < 0$, то при любом заранее заданном p^2 имеется решение

$$\Phi(\varphi; p^2) = A\Phi^+(\varphi; p^2) - B\Phi^-(\varphi; p^2) \quad (157)$$

с коэффициентами $A \equiv \Phi^-(0; p^2)$ и $B \equiv \Phi^+(0; p^2)$. В случае $-1/4 \leq c < 0$ это решение имеет неосциллирующую асимптотику

$$\Phi(\varphi; p^2) \sim s^{1/2+\nu} (A - Bs^{-2\nu}), \quad \varphi \rightarrow \pi/2, \quad (158)$$

и неограниченные в точке $\varphi = \pi/2$ производные, а в случае $c < -1/4$, когда $\nu = i|\nu|$, его асимптотика быстро осциллирует:

$$\Phi(\varphi; p^2) \sim s^{1/2} [A \cos(|\nu| \ln s) - iB \sin(|\nu| \ln s)], \quad \varphi \rightarrow \pi/2, \quad (159)$$

а производные не имеют определенных пределов при $\varphi \rightarrow \pi/2$.

В общем случае при заданных A , B и c каждому корню p^2 уравнения

$$P(c, p^2) = \frac{A}{B}, \quad P(c, p^2) \equiv \frac{\Phi^-(0; p^2)}{\Phi^+(0; p^2)} \quad (160)$$

отвечает собственная функция (157), поэтому в частных случаях $A = 1$, $B = 0$ и $A = 0$ и $B = -1$ спектр определяется формулами

$$\begin{aligned} \Phi^+(0; p^2) = 0, \quad \Phi(\varphi; p^2) = \Phi^+(\varphi; p^2), \quad A = 1, \quad B = 0; \\ \Phi^-(0; p^2) = 0, \quad \Phi(\varphi; p^2) = \Phi^-(\varphi; p^2), \quad A = 0, \quad B = -1. \end{aligned} \quad (161)$$

Если отношение A/B не принадлежит множеству изменения функции $P(c, p^2)$, то уравнение (160) не имеет корней, а функция (157) — несобственная.

Представление точного решения Φ через ряды Гаусса. Положив в исследуемом уравнении (150)

$$\Phi(\varphi; p^2) = \xi^{\sigma/2}(1-\xi)^{1/2}w(\xi), \quad \xi = (\cos \varphi)^2, \quad \sigma(\sigma-1) = c, \quad (162)$$

сведем его к гипергеометрическому уравнению Гаусса [106]

$$\xi(1-\xi)\partial_\xi^2 w(\xi) + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)\xi] \times \\ \times \partial_\xi w(\xi) - \alpha\beta w(\xi) = 0, \quad \xi \in [0, \pi/2], \quad (163)$$

с регулярными особыми точками $\xi = 0$ и $\xi = 1$ и параметрами

$$\alpha = (\sigma + 1 + p)/2, \quad \beta = (\sigma + 1 - p)/2 = \alpha - p, \\ \sigma = 1/2 + \nu; \quad \gamma = 1 + \nu. \quad (164)$$

Так как ФСР $\{w^\pm\}$ уравнения (163) известна [98] при любых α, β, γ и $\xi \in [0, 1]$, то искомые решения Φ^\pm несложно будет найти по следующим из равенств (162) формулам

$$\Phi^\pm(\varphi; p^2) = \sin \varphi (\cos \varphi)^\sigma w^\pm(\xi), \quad \xi = (\cos \varphi)^2, \quad (165)$$

а затем по формулам (155)–(161) определить и исследовать все возможные точные спектры $\{p^2, \Phi\}$. Приступим к построению ФСР $\{\Phi^\pm\}$, положив

$$\alpha^\pm \equiv \frac{3}{4} \pm \frac{\nu}{2} + \frac{p}{2}, \quad \beta^\pm \equiv \alpha^\pm - p. \quad (166)$$

• *Случай А.* Ни одно из чисел $\gamma - \alpha - \beta, \alpha - \beta = p$ и γ не является целым. Так как $\gamma - \alpha - \beta = -1/2$, то первое условие выполняется всегда. Второе и третье условия подчиняют параметры p и c соответствующим неравенствам

$$p \neq \pm n, \quad n = 0, 1, \dots; \quad c \neq \left(n^2 - \frac{1}{4}\right) = -\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{15}{4}, \dots$$

При таких ограничениях ФСР $\{w^\pm\}$ уравнения (163) задана в [98] формулами (15.5.3) и (15.5.4). Согласно (165) ей отвечает ФСР уравнения (150)

$$\Phi^\pm(\varphi; p^2) = \sin \varphi (\cos \varphi)^{1/2 \pm \nu} {}_2F_1(\alpha^\pm, \beta^\pm, 1 \pm \nu; \cos^2 \varphi), \quad (167)$$

где по признаку Раабе ряды Гаусса расходятся как $O(1/\sin \varphi)$ при $\varphi \rightarrow 0$, т. е. при $\xi \rightarrow 1$. После линейного преобразования [98]

$${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; \xi) = (1-\xi)^{\gamma-\alpha-\beta} {}_2F_1(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma; \xi)$$

эта ФСР принимает вид

$$\Phi^\pm(\varphi; p^2) = (\cos \varphi)^{1/2 \pm \nu} {}_2F_1(1/2 - \alpha^\pm, 1/2 - \beta^\pm, 1 \pm \nu; \cos^2 \varphi), \quad (168)$$

где ряды Гаусса сходятся и в точке $\varphi = 0$, т.е. при $\xi = 1$. Поэтому к ним можно применить известную формулу [98]

$${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; 1) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)}, \quad \text{Re}(\alpha + \beta - \gamma) > 1.$$

Тогда получатся выражения

$$\Phi^\pm(0; p^2) = \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(1 \pm \nu)}{\Gamma(\alpha^\pm)\Gamma(\beta^\pm)}. \quad (169)$$

Поэтому $\Phi^\pm(0; p^2) = 0$ тогда и только тогда, когда α^\pm или β^\pm — полюса $z = z_n = -n = 0, 1, \dots$ гамма-функции $\Gamma(z)$. Все эти полюса простые. По условию $\gamma = 1 + \nu$ — нецелое, следовательно, если α^\pm — целое, то β^\pm — нецелое, либо наоборот. Поэтому один из рядов (167) обрывается при

$$p^2 = p_n^2(c) \equiv \left(2n - \frac{1}{2} \pm \nu\right)^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (170)$$

и выражается через полином Якоби $P_{n-1}^{(1/2, \pm \nu)}(\cos 2\varphi)$. Если α^\pm или β^\pm — полуцелое, то один из рядов (168) обрывается при

$$p^2 = p_n^2(c) \equiv \left(2n - \frac{3}{2} \pm \nu\right)^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (171)$$

и выражается через полином $P_{n-1}^{(-1/2, \pm \nu)}(\cos 2\varphi)$.

Кроме двух указанных случаев (170) и (171) все ряды (167) и (168) бесконечные. Формулы (167) удобны как асимптотическое представление функций Φ^\pm при $\varphi \rightarrow \pi/2$, но не для их вычисления. Для вычисления следует использовать формулы (168), потому что в них все ряды сходятся всюду. Суммирование даже сходящихся рядов Гаусса с ростом $|p|$ становится все более сложной вычислительной проблемой. Ее можно частично решить, используя вместо функций (168) их асимптотики при $\varphi \neq \pi/2$ и $|p| \rightarrow \infty$

$$\Phi^\pm(\varphi; p^2) = \frac{\Gamma(1 \pm \nu)}{\sqrt{\pi p}} \frac{\Gamma(\alpha^\mp)}{\Gamma(\alpha^\pm)} \cos\left(ps - \frac{\pi}{4} \mp \frac{\pi}{2}\nu\right) [1 + O(|p^{-1}|)], \quad (172)$$

которые следуют из известных при $|\lambda| \rightarrow \infty$ асимптотик рядов Гаусса [106]

$${}_2F_1\left(a + \lambda, b - \lambda, c, \frac{1-z}{2}\right), \quad a = b = \frac{1}{4} \pm \frac{\nu}{2},$$

$$\lambda = \frac{p}{2}, \quad c = 1 \pm \nu, \quad z = -\cos 2\varphi \neq 1.$$

• *Случай Б.* Параметр γ — целое положительное число, равное $1 + m$, а параметры α и β не равны k , где $k = 0, 1, \dots, m - 1$. Равенство $\gamma = 1 + \nu = m + 1$ с $m = 0, 1, \dots$ возможно только при значениях c , запрещенных в предыдущем случае, а именно когда $c = m^2 - 1/4$. Ограничения на параметры α и β порождают условие

$$p \neq \pm \left(2k - m - \frac{3}{2} \right), \quad k = 0, 1, \dots, m - 1.$$

При таких параметрах ФСР $\{w^\pm\}$ уравнения (163) определена в [98] формулами (15.5.18) и (15.5.19). Ей отвечает ФСР (165) уравнения (150)

$$\begin{aligned} \Phi^+(\varphi; p^2) &= \sin \varphi (\cos \varphi)^{1/2+m} \times \\ &\times {}_2F_1 \left(\frac{3}{4} + \frac{m+p}{2}, \frac{3}{4} + \frac{m-p}{2}; m+1; (\cos \varphi)^2 \right), \end{aligned} \quad (173)$$

$$\begin{aligned} \Phi^-(\varphi; p^2) &= \sin \varphi (\cos \varphi)^{1/2+m} \left[\sum_{n=1}^{\infty} A_n (\cos \varphi)^{2n} + \sum_{n=1}^m B_n (\cos \varphi)^{-2n} \right] + \\ &+ 2\Phi^+(\varphi; p^2) \ln (\cos \varphi), \end{aligned}$$

где по признаку Раабе ряд Гаусса и ряд с коэффициентами A_n расходятся только при $\varphi \rightarrow 0$ как $O(1/\sin \varphi)$. Для Φ^+ верно представление (168), в котором ряд Гаусса сходится всюду. Коэффициенты A_n и B_n выражаются через пси-функцию, но все B_n равны нулю в особом случае $c = -1/4$.

В обоих случаях А и Б функции Φ^\pm имеют соответствующие асимптотики (153). Поэтому для определения всех возможных точных спектров задачи (150), (151) можно использовать формулы (155)–(161), заменив в них функции Φ^\pm и их значения при $\varphi = 0$ найденными явными выражениями (167)–(173). Опишем полученные таким способом точные спектры.

Точные спектры

• *Случай $c \geq 0, \nu \geq 1/2$.* Согласно (155) p^2 — нуль функции $\Phi^+(0; p^2)$, а $\Phi = \Phi^+$, где Φ^+ — полином $P_{n-1}^{(1/2, \nu)}$. В силу (169) все такие нули простые и заданы формулой (170), а их множество счетно. Поэтому существует только счетный ($n = 1, 2, \dots$) невырожденный и действительный спектр

$$p_n^2(c) = \left(2n - \frac{1}{2} + \nu \right)^2, \quad (174)$$

$$\Phi(\varphi; p_n^2) = \sin \varphi (\cos \varphi)^{1/2+\nu} P_{n-1}^{(1/2, \nu)}(\cos 2\varphi).$$

Его собственные значения — элементы бесконечной и возрастающей по номеру n последовательности монотонно растущих функций аргумента c :

$$\begin{aligned} \{p_n^2(c)\}_{n=1}^\infty : p_{n+1}^2(c) > p_n^2(c) > 4n^2, \\ p_n^2(c) > p_n^2(c'), \quad c > c', \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (175)$$

• *Случай* $c \in [-1/4, 0)$, $\nu \in [0, 1/2)$. Согласно (157) и (168) существует сплошной комплексный спектр: любому заранее заданному собственному значению p^2 отвечает единственная собственная функция

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi; p^2) = \sin \varphi (\cos \varphi)^{1/2+\nu} \{ A_2 F_1[\alpha^+ - 1/2, \beta^+ - 1/2, 1 + \nu; (\cos \varphi)^2] - \\ - B(\cos \varphi)^{-2\nu} {}_2F_1[\alpha^- - 1/2, \beta^- - 1/2, 1 - \nu; (\cos \varphi)^2] \}, \end{aligned} \quad (176)$$

где $A = \Phi^-(0; p^2)$, $B = \Phi^+(0; p^2)$, а $\Phi^\pm(0; p^2)$ вычисляются по формулам (169). В особом случае $c = -1/4$ для функции Φ^- в формуле (168) следует использовать представление (173). В случае $\varphi < \pi/2$ и $c \neq -1/4$ асимптотика решения (157) или (176) при $|p| \rightarrow \infty$ получается заменой функций Φ^\pm в формуле (157) их асимптотиками (172) и имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi; p^2) = -\frac{\sin \pi\nu}{\pi p} \Gamma(1 + \nu) \Gamma(1 - \nu) \times \\ \times \sin p\varphi [1 + O(|p^{-1}|)], \quad \varphi < \pi/2. \end{aligned} \quad (177)$$

Пусть теперь A , B и $c \in [-1/4, 0)$ заданы. Тогда спектр определяется уравнением (160), в котором в силу (169) функция P выражается через отношения гамма-функций:

$$P(c, p^2) = \frac{A}{B}, \quad P(c, p^2) \equiv \frac{\Phi^-(0; p^2)}{\Phi^+(0; p^2)} = \frac{\Gamma(1 - \nu) \Gamma(\alpha^+) \Gamma(\beta^+)}{\Gamma(1 + \nu) \Gamma(\alpha^-) \Gamma(\beta^-)}. \quad (178)$$

Каждому корню p^2 этого уравнения отвечает единственная собственная функция (176). Исследуем, при каких A и B имеется хотя бы один корень.

Сначала рассмотрим три частных случая. Согласно (161) в первом случае $A = 1$, $B = 0$, $\Phi^+(0; p^2) = 0$ и имеется только невырожденный и действительный спектр (174). Во втором случае $A = 0$, $B = -1$, $\Phi^-(0; p^2) = 0$ и существует другой, но также единственный и действительный спектр, который получается при выборе знака минус в (170) и имеет вид

$$p_n^2(c) = \left(2n - \frac{1}{2} - \nu \right)^2, \quad (179)$$

$$\Phi(\varphi; p_n^2) = \sin \varphi (\cos \varphi)^{1/2-\nu} P_{n-1}^{(1/2, -\nu)}(\cos 2\varphi).$$

Первый или второй случай реализуется, если p^2 — вещественный полюс $2n - 1/2 + \nu$ или же вещественный нуль $2n - 1/2 - \nu$ функции P . Оставшийся третий случай имеет место при $A = \Phi^-(0; p^2) \neq 0$, $B = \Phi^+(0; p^2) \neq 0$ и $p^2 = \tilde{p}_n^2 = p_n^2$, где p_n^2 — вещественные собственные значения (171), а Φ^\pm — отвечающие им функции. Значения \tilde{p}_n^2 перемежаются и с полюсами, и с нулями функции P . Каждому \tilde{p}_n^2 отвечает одна вещественная собственная функция Φ , определенная формулой (157).

Теперь рассмотрим общий случай. Пусть $\text{Im } p^2 = 0$, т. е. $p^2 \geq 0$ или же $p^2 < 0$. Тогда $\text{Im } P = 0$ по определению (178). Поэтому при $\text{Im}(A/B) \neq 0$ уравнение $P = A/B$ не имеет корней. Далее полагаем $\text{Im}(A/B) = 0$. При $p^2 \geq 0$ функция P не ограничена ни снизу, ни сверху, поэтому при любом вещественном отношении A/B уравнение $P = A/B$ имеет хотя бы один вещественный корень p^2 . Пусть теперь $p^2 < 0$ и $p = i|p|$. Чтобы определить свойства функции P при $p = i|p|$, потребуются известные равенства [98]

$$\Gamma(z^*) = \Gamma^*(z), \quad \left| \frac{\Gamma(x + iy)}{\Gamma(x)} \right|^2 = \prod_{n=0}^{\infty} \left(1 + \frac{y^2}{(x + n^2)} \right)^{-1}, \quad z = x + iy,$$

и равенства $(\alpha^\pm)^* = \beta^\pm$, следующие из (166). В силу указанных равенств

$$P(c, p^2) = \frac{\Gamma(1 - \nu) |\Gamma(\alpha^-)|^2}{\Gamma(1 + \nu) |\Gamma(\alpha^+)|^2},$$

$$P(c, -\infty) = \frac{\Gamma(1 - \nu)}{\Gamma(1 + \nu)} \prod_{n=0}^{\infty} \left(\frac{3 - \nu + 2n}{3 + \nu + 2n} \right)^n,$$

$$0 < P(c, -\infty) < P(c, p^2) < P(c, \tilde{p}^2) \leq P(c, 0), \quad p^2 < \tilde{p}^2 < 0.$$

Значит, при $p^2 \leq 0$ функция P не имеет полюсов и является вещественной, ограниченной снизу и сверху и монотонно убывающей при любом фиксированном $c \in [-1/4, 0)$ и уменьшающемся p^2 . Следовательно, уравнение $P = A/B$ имеет единственный, причем неположительный, корень $p^2 \leq 0$ тогда и только тогда, когда $P(c, -\infty) \leq A/B \leq P(c, 0)$.

• *Случай* $c < -1/4$, $\nu = i|\nu|$. Существуют спектры, описываемые формулами (174), (176)–(179), в которых теперь $\nu = i|\nu|$. Поэтому ранее действительные спектры (174) и (179) теперь являются дискретными комплексными спектрами, а их собственные значения являются соответственно комплексными полюсами и нулями функции P , заданной формулой (178).

Более подробно исследуем случай $\text{Im } p^2 = 0$, когда $p^2 \geq 0$ или же $p^2 < 0$ и $p = i|p|$. Так как $\nu = i|\nu|$, то параметры (166) обладают следующими свойствами: $(\alpha^+)^* = \alpha^-$, $(\beta^+)^* = \beta^-$ при $p^2 \geq 0$ и $(\alpha^+)^* = \beta^-$, $(\alpha^-)^* = \beta^+$ при $p = i|p|$. Поэтому из (168) и (169) следует, что $(\Phi^\pm)^* = \Phi^\mp$. Следовательно, функции $\text{Re } \Phi^+$ и $\text{Im } \Phi^+$ образуют вещественную ФСР, а решение (176) с

$A = \Phi^-(0; p^2)$ и $B = \Phi^+(0; p^2)$ является чисто мнимым:

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi; p^2) &= i\Phi^-(0; p^2) [\Phi^+(\varphi; p^2) - \Phi^-(\varphi; p^2)/P(c, p^2)] = \\ &= 2\text{Im} \Phi^-(0; p^2) \{ \text{Re} \Phi^+(\varphi; p^2) + \text{ctg} [(1/2) \arg P] \text{Im} \Phi^+(\varphi; p^2) \}. \end{aligned} \quad (180)$$

Из-за равенств $(\Phi^\pm)^* = \Phi^\mp$ функция P становится такой, что $|P| = 1$ и

$$\arg P(c, p^2) = 2 [\arg \Gamma(1 - \nu) + \arg \Gamma(\alpha^+) + \arg \Gamma(\beta^+)] + 2\pi n,$$

где целое n определяется из условия $\arg P \in (-\pi, \pi]$. При любом фиксированном c функция $\arg P(c, p^2)$ аргумента p^2 является однозначной и принимает все значения из интервала $(-\pi, \pi]$. Поэтому при любых заранее заданных A и B , таких, что $|A/B| = 1$, уравнение (178) имеет ровно один вещественный корень p^2 , которому отвечает единственное решение (176). Если $|A/B| \neq 1$, то нет ни корней, ни решений.

Основные выводы настоящего параграфа сформулируем в виде доказанной теоремы существования и единственности решений задачи (150), (151).

Теорема 1. Задача (150), (151) при любом $c \geq 0$ имеет только вещественные решения (174), при любом $c < 0$ и любом комплексном p^2 ее единственным и, вообще говоря, комплексным решением является функция (176) с $A = \Phi^-(0; p^2)$ и $B = \Phi^+(0; p^2)$, которая в случае $\text{Im} p^2 = 0$ принимает вид (180). Если A, B — заданные константы, а $\text{Im} p^2 = 0$, то при любых $c \in [-1/4, 0)$ и $p^2 > 0$ всегда имеется единственное решение (176); если $c \in [-1/4, 0)$ и $p^2 < 0$, то такое решение имеется при условии $P(c, -\infty) < A/B < P(c, 0)$; а если $c < -1/4$ — то при условии $|A/B| = 1$.

Представление приближенного решения Φ через функции Бесселя. Используя замену $\varphi \rightarrow s = \pi/2 - \varphi$, $\Phi(\varphi) \rightarrow v(s)$ и разложение

$$\frac{1}{(\sin s)^2} = \frac{1}{s^2} + \frac{1}{3} + \varepsilon(s), \quad \varepsilon(s) \equiv s^2 \left(\frac{1}{15} + \frac{2}{189}s^2 + \dots \right),$$

сведем исходную задачу (150), (151) к задаче шредингеровского типа

$$\begin{aligned} \left[\partial_s^2 + k^2 - \frac{c}{s^2} - c\varepsilon(s) \right] v(s) &= 0, \quad v(0) = 0, \quad v\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \\ k^2 &\equiv p^2 - \frac{c}{3}, \quad s \in [0, \pi/2]. \end{aligned} \quad (181)$$

В полученной задаче несингулярное слагаемое $c\varepsilon(s)$ потенциала $c/s^2 + c\varepsilon(s)$ можно рассматривать как возмущение, если оно намного меньше модуля полной энергии $|k^2|$. Так как $\varepsilon(s)$ — монотонно растущая функция, то

$$0 \leq \varepsilon(s) \leq \varepsilon\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{2}{3} - \frac{4}{\pi^2} = 0,261 \dots$$

Поэтому упомянутое неравенство имеет вид $|p^2| \gg |c|/3$ и является, наверное, достаточным условием для применения теории возмущений [6]. Чтобы реализовать ее в первом порядке, в уравнении (181) положим $\varepsilon(s) \equiv 0$, $z = ks$ и $v(s) = \sqrt{z} Z_\nu(z)$. Тогда получится уравнение Бесселя [98]

$$(z^2 \partial_z^2 + z \partial_z + z^2 - \nu^2) Z_\nu(z) = 0 \quad (182)$$

с, вообще говоря, комплексными индексом $\nu \equiv \sqrt{c + 1/4}$ и аргументом $z = ks$, $|z| \in [0, |k|\pi/2]$, и граничными условиями

$$\lim_{z \rightarrow 0} \sqrt{z} Z_\nu(z) \rightarrow 0, \quad Z_\nu\left(k \frac{\pi}{2}\right) = 0. \quad (183)$$

Так как ФСР $\{Z_\nu^\pm\}$ уравнения Бесселя известна при любых комплексных ν и z , то его любое решение Z_ν всегда можно представить формулой

$$Z_\nu(z) = AZ_\nu^+(z) - BZ_\nu^-(z),$$

а затем получить нужное решение $Z_\nu(z)$, выбирая константы A и B .

Итак, в приближении $\varepsilon(s) \equiv 0$ решение Φ и ФСР $\{\Phi^\pm\}$ задачи (150), (151) связаны с решением Z_ν и ФСР $\{Z_\nu^\pm\}$ задачи (182), (183) формулами

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi; p^2) &= \sqrt{z} Z_\nu(z), \quad \Phi(0; p^2) = 0, \quad \Phi\left(\frac{\pi}{2}; p^2\right) = Z_\nu\left(k \frac{\pi}{2}\right) = 0, \\ \Phi^\pm(\varphi; p^2) &= \sqrt{z} Z_\nu^\pm(z), \quad p^2 = \frac{c}{3} + k^2, \quad z = ks, \quad s = \left(\frac{\pi}{2} - \varphi\right). \end{aligned} \quad (184)$$

При любых комплексных ν и z функции Бесселя J_ν и Y_ν линейно независимы и имеют следующие асимптотики [98]:

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &\sim z^\nu, \quad \nu \neq -1, -2, \dots, \quad |z| \rightarrow 0; \\ Y_0(z) &\sim \ln z; \quad Y_\nu(z) \sim z^{-\nu}, \quad \operatorname{Re} \nu > 0, \quad |z| \rightarrow 0; \end{aligned} \quad (185)$$

$$J_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \tilde{z}, \quad Y_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin \tilde{z}, \quad \tilde{z} \equiv z - \nu \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}, \quad |z| \rightarrow \infty. \quad (186)$$

Чтобы приближенная ФСР $\{\Phi^\pm = \sqrt{z} Z_\nu^\pm\}$ имела при $\varphi \rightarrow \pi/2$ точные асимптотики (153), определим ФСР $\{Z_\nu^\pm\}$ уравнения Бесселя (182) следующим образом: $Z_\nu^+ \equiv J_\nu$ и $Z_\nu^- \equiv Y_\nu$, если $c \geq -1/4$, и $Z_\nu^\pm \equiv J_{\pm\nu}$ или $Z_\nu^+ \equiv \operatorname{Re} J_\nu$ и $Z_\nu^- \equiv \operatorname{Im} J_\nu$, если $c < -1/4$. В силу (183)–(185) приближенное решение $\Phi = \sqrt{z} Z_\nu$ подчиняется требуемым условиям (151). При выводе формул (155)–(161), описывающих все точные спектры $\{p^2, \Phi\}$, использовались только асимптотические соотношения (153). Выбранные функции $\sqrt{z} Z_{\pm\nu}$ подчиняются этим соотношениям. Поэтому если в формулах (155)–(161) заменить точные функции Φ^+ и Φ^- их приближениями $\sqrt{z} Z_\nu$ и $\sqrt{z} Z_{-\nu}$,

то получатся формулы, определяющие все возможные приближенные при $|p^2| \gg |c|/3$ спектры $\{p^2, \Phi = \sqrt{z}Z_\nu\}$. Исследуем эти спектры.

• *Случай* $c \geq 0, \nu \geq 1/2$. Согласно (155) и (184) p^2 — корень уравнения

$$\Phi^+ \left(\frac{\pi}{2}; p^2 \right) = J_\nu(z) = 0, \quad z = k \frac{\pi}{2}, \quad p^2 = \frac{c}{3} + k^2. \quad (187)$$

Значит, весь спектр $\{p^2, \Phi\}$ определяется нулями $j_{\nu n}, n \geq 1$, функции J_ν и поэтому является вещественным, счетным ($n = 1, 2, \dots$) и невырожденным:

$$p_n^2(c) = \frac{c}{3} + \left(\frac{2}{\pi} j_{\nu n} \right)^2, \quad \Phi(\varphi; p_n^2) = \sqrt{z_n} J_\nu(z_n), \quad (188)$$

$$z_n \equiv j_{\nu n} \left(1 - \frac{2}{\pi} \varphi \right).$$

Полученный спектр $\{p_n^2(c)\}_{n=1}^\infty$ имеет свойства (175), а после замены нулей $j_{\nu n}$ нулями старшего члена асимптотики (186) функции J_ν становится спектром, отличающимся от точного спектра (174) слагаемым $c/3$:

$$p_n^2(c) = \frac{c}{3} + \left(2n - \frac{1}{2} + \nu \right)^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (189)$$

• *Случай* $c \in [-1/4, 0), \nu \in [0, 1/2)$. В силу (157) и (184) существует сплошной (любое p^2) комплексный спектр

$$\forall p^2, \quad \Phi(\varphi; p^2) = \sqrt{z} \left[Y_\nu \left(k \frac{\pi}{2} \right) J_\nu(z) - J_\nu \left(k \frac{\pi}{2} \right) Y_\nu(z) \right]. \quad (190)$$

Как следует из (160) и (184), при заранее заданных A и B спектр задается корнями уравнения $P = A/B$ для k и соответствующей формулой для Φ :

$$P(c, p^2) \equiv J_\nu \left(k \frac{\pi}{2} \right) / Y_\nu \left(k \frac{\pi}{2} \right) = \frac{A}{B}, \quad (191)$$

$$\Phi(\varphi; p^2) = \sqrt{z} [AJ_\nu(z) - BY_\nu(z)]$$

и поэтому существует тогда и только тогда, когда имеются такие корни.

Например, при $A = 1$ и $B = 0$ имеется лишь действительный спектр (188), а если $A = 0$ и $B = -1$, то весь спектр определяется нулями $y_{\nu n}$ функции Y_ν и поэтому является счетным ($n = 1, 2, \dots$), невырожденным, но, вообще говоря, комплексным спектром:

$$p_n^2(c) = \frac{c}{3} + \left(\frac{2}{\pi} y_{\nu n} \right)^2, \quad \Phi(\varphi; p_n^2) = \sqrt{z_n} Y_\nu(z_n), \quad (192)$$

$$z_n \equiv y_{\nu n} \left(1 - \frac{2}{\pi} \varphi \right).$$

Если в (192) оставить только вещественные нули $y_{\nu n} = \operatorname{Re} y_{\nu n}$, то получатся формулы, определяющие действительный спектр. Аппроксимация таких нулей нулями старшего члена асимптотики (186) функции Y_ν дает действительный спектр

$$p_n^2(c) = \frac{c}{3} + \left(2n - \frac{3}{2} + \nu\right)^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (193)$$

• *Случай* $c < -1/4$, $\nu = i|\nu|$. Теперь вместо $Z_\nu^+ = J_\nu$ и $Z_\nu^- = Y_\nu$ используем $Z_\nu^\pm = J_{\pm\nu}$. Поэтому для вывода формул, определяющих спектр при тех же ограничениях на A и B , что и в предыдущем случае, достаточно в (187)–(189) положить $\nu = i|\nu|$, а в (190) и (191) заменить Y_ν на $J_{-\nu}$, $\nu = i|\nu|$. Тогда для нахождения спектра получатся следующие правила.

Данному p^2 отвечает, вообще говоря, комплексная собственная функция

$$\forall p^2, \quad \Phi(\varphi; p^2) = \sqrt{z} \left[J_{-\nu} \left(k \frac{\pi}{2} \right) J_\nu(z) - J_\nu \left(k \frac{\pi}{2} \right) J_{-\nu}(z) \right], \quad (194)$$

а если A и B заданы заранее, то спектр определяется формулами

$$P(c, p^2) \equiv \frac{J_{-\nu}(k\pi/2)}{J_\nu(k\pi/2)} = \frac{A}{B}, \quad \Phi(\varphi; p^2) = \sqrt{z} [AJ_\nu(z) - BJ_{-\nu}(z)]$$

и не существует, если уравнение $P = A/B$ для k не имеет решений.

Так как теперь $\nu = i|\nu|$, то при $A = 1$ и $B = 0$ ранее действительные спектры (188) и (189) становятся комплексными спектрами. Если же $A = 0$ и $B = -1$, то комплексный спектр определяется нулями $j_{-\nu, n}$ функции $J_{-\nu}$:

$$p_n^2(c) = \frac{c}{3} + \left(\frac{2}{\pi} j_{-\nu, n} \right)^2, \quad \Phi(\varphi; p_n^2) = \sqrt{z_n} J_{-\nu}(z_n), \quad (195)$$

$$z_n \equiv j_{-\nu, n} \left(1 - \frac{2}{\pi} \varphi \right).$$

При аппроксимации этих нулей нулями старшего члена асимптотики (186) функции $J_{-\nu}$ получается комплексно-сопряженный спектру (189) спектр

$$p_n^2(c) = \frac{c}{3} + \left(2n - \frac{1}{2} - \nu \right)^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (196)$$

Основные выводы выполненного анализа задачи (150), (151) сформулируем в виде теоремы о спектре ее больших собственных значений.

Теорема 2. Если $|p|^2 \gg |c|/3$, то задача (150), (151) в приближении $\varepsilon(s) = 0$ при $c \geq 0$ имеет только дискретный действительный спектр (188), при $c < 0$ существуют комплексные сплошные спектры (190), (194) и дискретные спектры (192), (195). Приближенные собственные значения (189),

(193) и (196) отличаются от соответствующих точных значений (171), (174) и (179) пренебрежимо малым при $n \rightarrow \infty$ слагаемым $c/3$.

Физическая интерпретация действительного спектра. В квантовой механике [6] задача (150), (151) является однородной краевой задачей Шредингера для волновой функции Φ квантовой частицы, обладающей полной энергией p^2 , угловым моментом $b = 0$ и взаимодействующей с сингулярным в точке $\varphi = \pi/2$ силовым полем посредством потенциала

$$V(\varphi; c) = \frac{c}{(\cos \varphi)^2}, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2, \quad c = \operatorname{Re} c. \quad (197)$$

Связанное состояние такой частицы описывается действительной энергией p^2 и соответствующей ее волновой функцией Φ , нормированной условием

$$\|\Phi\|^2 \equiv \int_0^{\pi/2} d\varphi |\Phi(\varphi; p^2)|^2 = 1.$$

При таком условии величина $|\Phi(\varphi; p^2)|^2$ имеет смысл плотности вероятности, а произведение $|\Phi(\varphi; p^2)|^2 d\varphi$ есть вероятность обнаружить частицу на отрезке $[\varphi, \varphi + d\varphi]$ бесконечно малой длины $d\varphi$. По теореме 1 в отталкивающем ($c > 0$) поле (197) спектр (174) связанных состояний частицы дискретный и ограничен снизу величиной $p_1^2(c) = (3/2 + \nu)^2$, а в притягивающем ($c < 0$) поле спектр может быть как дискретным, так и сплошным, причем не ограниченным ни снизу, ни сверху.

Покажем, что при $c < 0$ и $p^2 \rightarrow \pm\infty$ волновые функции (176) и (180) сплошного спектра имеют физически интересные особенности.

• *Случай $c \in [-1/4, 0)$.* В силу (177) нормированная волновая функция (176) имеет асимптотику

$$\Phi(\varphi; p^2) \sim \begin{cases} \sqrt{2/\pi} \sin p\varphi, & p^2 \rightarrow +\infty, \\ 2|p| \exp[-|p|(\pi/2 - \varphi)], & p^2 \rightarrow -\infty, \end{cases} \quad \varphi \in [0, \pi/2). \quad (198)$$

Следовательно, если энергия p^2 положительная и возрастает, то число нулей функции Φ увеличивается как целая часть дроби $|p|/2$, если же энергия отрицательная и уменьшается, то уменьшается и длина δ отрезка $[\pi/2 - \delta, \pi/2]$, на котором функция Φ заметно отличается от нуля. Значит, волновая функция Φ и плотность $|\Phi|^2$ локализуются в бесконечно малой окрестности точки $\varphi = \pi/2$. Локализация плотности выглядит как смещение положения φ_0 ее главного максимума к точке $\varphi = \pi/2$ при уменьшении p^2 . Так как функция Φ знакопостоянна вблизи точки $\varphi = \pi/2$, то плотность вероятности $|\Phi|^2$ не имеет ни других максимумов, ни нулей, расположенных правее точки φ_0 . Локализация плотности вероятности означает коллапс, т. е. падение или

стягивание частицы в точку $\varphi = \pi/2$ при $p^2 = -\infty$. Коллапс является особым состоянием, так как в нем энергия связи $B = -p^2$ частицы бесконечно велика, а среднее расстояние между частицей и сингулярной точкой $\varphi = \pi/2$ поля (197) бесконечно мало. Коллапс происходит при сколь угодно малой по модулю константе связи c этого поля.

- *Случай $c < -1/4$.* Формулы (198) справедливы для нормированной волновой функции (180). Поэтому при $p^2 \rightarrow \pm\infty$ эта функция, осциллируя, локализуется вблизи точки $\varphi = \pi/2$. Из-за осцилляций вблизи точки $\varphi = \pi/2$ плотность вероятности $|\Phi|^2$, кроме главного максимума, имеет справа от него бесконечно много убывающих при $\varphi \rightarrow \pi/2$ максимумов. Так как положение главного максимума φ_0 смещается при $p^2 \rightarrow -\infty$ к точке $\varphi = \pi/2$, то происходит коллапс.

Рис. 8 иллюстрирует коллапс в двух описанных случаях. Кривыми на рис. 8, *a, б* изображены волновые функции при $c = -1/8 \in [-1/4, 0)$ и $c = -25/4 < -1/4$, а на рис. 8, *в, г* представлены соответствующие плотности вероятности. Цифра над кривой — отвечающее ей значение энергии p^2 .

Прикладная значимость исследованных спектров. Вследствие теоремы 1 при $c < 0$ имеется уникальная возможность моделировать дискретный спектр $\{p_n^2, \Phi(\varphi; p_n^2)\}$ двумя способами. Для примера опишем способы моделирования (дизайна) действительного спектра в случае $c \in [-1/4, 0)$.

- *Способ 1.* Положим $p_n^2 = f_n(c)$, где $n = 1, 2, \dots$, а $f_n(c)$ — *любые*, но заранее заданные функции параметра c . Соответствующие собственные функции $\Phi(\varphi; p^2 = f_n(c))$ всегда существуют и вычисляются по формуле (176) с коэффициентами $A = g^-(0; f_n(c))$ и $B = g^+(0; f_n(c))$. Примеры заранее заданных спектров $p_n^2 = f_n(c)$ — эквидистантный спектр $f_n = -n$ и спектр $f_n = c/n^2$, подобный кулоновскому и имеющий точку сгущения $f_\infty = 0$.

- *Способ 2.* Сначала задается не спектр собственных значений, а дискретное множество собственных функций, отвечающих заранее неизвестным собственным значениям. В формуле (176) положим $A = A_n(c)$ и $B = B_n(c)$, где $A_n(c)$ и $B_n(c)$ — *любые* заранее заданные функции параметра c , подчиняющиеся при каждом $n = 1, 2, \dots$ вместо A и B достаточным условиям теоремы 1. Затем вычислим собственные значения $p_n^2(c)$ как корни соответствующих уравнений $P(c; p_n^2(c)) = A_n(c)/B_n(c)$ и найдем отвечающую каждому корню собственную функцию (176) с $A = A_n(c)$, $B = B_n(c)$ и $p^2 = p_n^2(c)$.

Замечания. Если $c < -1/4$, то моделирование однопараметрического спектра $\{p^2, \Phi\}$ возможно обоими способами, но вместо (176) следует использовать (180). Для моделирования двухпараметрического спектра задаются функции $f_n(c, t)$ или $A_n(c, t)$ и $B_n(c, t)$ двух параметров c и t .

Смоделированные спектры предлагается использовать как эталонные для тестов алгоритмов численного решения одномерных и однородных краевых задач Шредингера по методике, описанной в п. 3.7. С той же целью можно

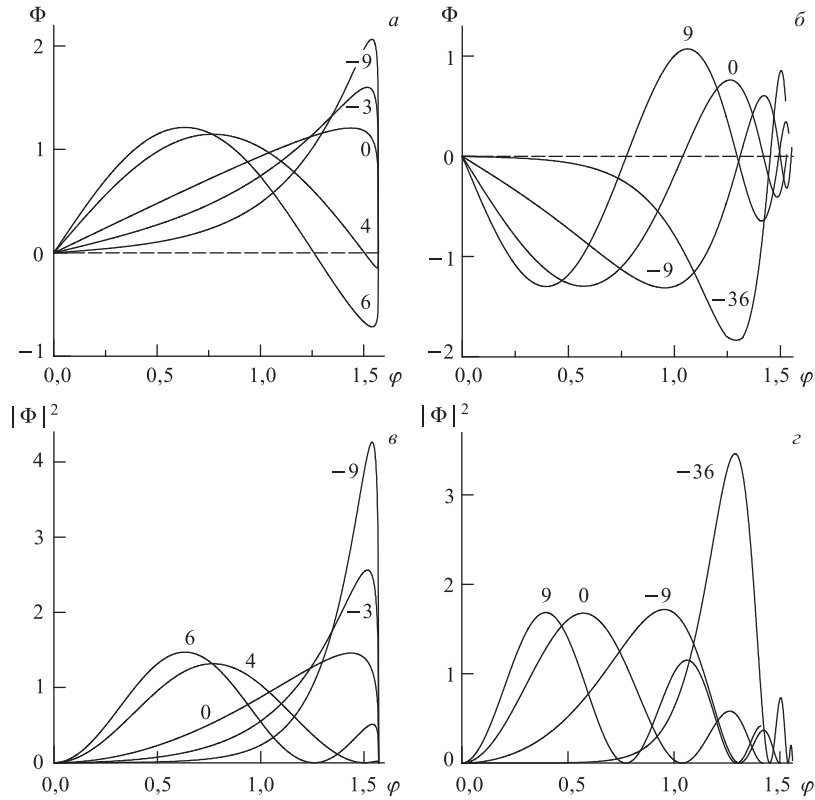


Рис. 8. Волновые функции $\Phi(\varphi; p^2)$ и плотности $|\Phi(\varphi; p^2)|^2$ при значениях p^2 , указанных цифрами над кривыми, в случае $c = -1/8$ (а, в) и в случае $c = -25/4$ (б, г)

использовать как эталонные точные и смоделированные спектры задачи Бесселя (182), (183). Моделирование спектров этой задачи осуществляется теми же способами 1 и 2, но вместо рядов Гаусса используются функции Бесселя и их нули. Суммирование рядов Гаусса с высокой точностью заметно усложняется с ростом $|p|$, функции Бесселя, и их нули даже в этом случае можно вычислить с высокой точностью численными методами [98] или найти приближенно, используя подробные таблицы [98], двухсторонние оценки и различные асимптотические представления [98, 106].

При $c \in [-1/4, 0)$ любая собственная функция $\Phi(\varphi; p_n(c))$ имеет бесконечную производную в точке $\varphi = \pi/2$ (см. рис. 8, а), а в случае $c < -1/4$ быстро осциллирует при $\varphi \rightarrow 0$ (см. рис. 8, б). Из-за этих особенностей численное решение задачи (150), (151) является довольно сложной вычисли-

тельной проблемой, требующей высокой поточечной сходимости и устойчивости алгоритма по отношению к ошибкам округления. Ясно, что алгоритм, позволяющий воспроизвести упомянутые выше особенности поведения собственной функции $\Phi(\varphi; p_n(c))$ и заранее заданные особенности поведения собственного значения $p_n(c) = f_n(c)$ при изменяющемся параметре c , можно использовать для достоверного анализа одномерных краевых задач Шредингера с менее сингулярными, чем функция (197), потенциалами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Завершим обзор формулировкой некоторых наиболее важных проблем и возможных способов их решения.

Возможным и вполне логичным этапом развития теории рассеяния трех заряженных частиц представляется возврат к интегральным уравнениям Фаддеева и их регуляризация с помощью построения подходящих интегральных образов явных координатных асимптотик волновых функций и их компонент, найденных С. П. Меркурьевым.

Для систем трех ядерных частиц типичные парные взаимодействия — суперпозиции нелокальных ядерных взаимодействий и кулоновских центральных потенциалов. Для таких взаимодействий достаточно общего типа дифференциальные шестимерные уравнения Фаддеева нельзя точно редуцировать к трехмерным уравнениям, но вполне возможна редукция к двумерным интегродифференциальным уравнениям. Поэтому теория таких уравнений, несомненно, заслуживает дальнейшего развития. На этом пути особо значимым представляется сравнительный анализ координатных асимптотик решений бесконечной и отвечающей ей редуцированной по парциальным моментам двумерных систем уравнений. Для процессов $(2 \rightarrow 3)$ и $(3 \rightarrow 3)$ в случае кулоновских взаимодействий и $r \rightarrow \infty$ такой анализ дан в работе [107]. Ее авторы доказали, что асимптотики решений бесконечной и «обрезанной» систем функционально одинаковы в случае $(2 \rightarrow 3)$ и функционально различаются в случае $(3 \rightarrow 3)$.

Интересной проблемой является сравнение асимптотик решений бесконечной и отвечающей ей редуцированной по гипермоменту систем одномерных уравнений Фаддеева в гиперсферическом базисе. Как показано в [61], в случае S -волновых взаимодействий и $r \rightarrow 0$ решения бесконечной и «обрезанной» систем функционально одинаковы, если каждый потенциал — ряд по четным степеням его аргумента, и функционально различны, если один из рядов содержит хотя бы одну нечетную степень аргумента.

Представленные в обзоре сеточные алгоритмы численного решения уравнений Фаддеева в бисферическом базисе различаются строением сеток, типом, гладкостью и точностью аппроксимативных разложений искомых реше-

ний и их производных, а в итоге — строением и размерностью матриц \mathbf{A} дискретных аналогов и порядками поточечной сходимости. Как было показано, предложенные новые алгоритмы $3'$, $3''$, $4'$ и $4''$ перспективны и настолько экономичны, что их реализация даже на персональных компьютерах не вызывает принципиальных затруднений, особенно при использовании циклического матричного аналога схемы исключения Гаусса. Все алгоритмы анализировались лишь в частном случае, когда двумерные системы интегродифференциальных уравнений состоят из одного уравнения. Обобщение на случай нескольких сцепляющихся уравнений не вызывает принципиальных затруднений. Основная возникающая при этом обобщении проблема заключается в экономном и удобном с вычислительной точки зрения порядке заполнения матрицы \mathbf{A} . Различные варианты заполнения предложены в работе [23], выполненной с участием С. П. Меркурьева. Удачным оказался и другой подход [38, 44], основанный на тензорном представлении блоков матрицы \mathbf{A} . Возможное решение [38] еще одной существенной проблемы, а именно дискретизации интегральных слагаемых интегродифференциальных уравнений Фаддеева, заключается в использовании многоточечной квадратурной формулы Гаусса.

Немаловажным элементом стратегии построения оптимального сплайн-алгоритма является подчинение сплайна максимально возможному числу известных линейных комбинаций, связывающих точное решение и его производные разного порядка на всех границах области изменения аргументов. Использование таких связей не только приводит к более простым соотношениям для коэффициентов сплайна, чем решаемое уравнение, записанное в близких к границам узлах коллокации, но и улучшает поточечное сплайн-приближение в физически интересных областях конфигурационного пространства \mathcal{R}^6 . К ним, несомненно, относятся окрестности точек тройного ($r = 0$) и парных ($x_i = 0, y_i > 0$) ударов и окрестность прямой $x_i = 0, y_i > 0$, проходящей через все три частицы. Вывод асимптотик точных решений уравнений Фаддеева в таких областях представляется не только актуальным с чисто теоретической точки зрения, но и необходимым для оптимизации сплайн-алгоритмов. Два разных подхода к выводу асимптотик в точке тройного удара, предложенные соответственно в работе [16] и работах [60, 61], обсуждались и сопоставлялись в предыдущем обзоре [56]. Альтернативный описанному в [16] способ построения асимптотик регулярных решений дифференциальных уравнений Фаддеева в точках парных соударений недавно предложен в [69].

В заключение автор считает своим долгом отметить, что без обсуждений в 80-х гг. алгоритмов 1–4 с С. П. Меркурьевым и В. М. Суловым ему бы не удалось представить в разд. 3 сравнительный анализ дискретных аналогов интегродифференциальной краевой задачи трех частиц. Особая благодарность выражается Г. Д. Босфельду и Н. В. Шеллингергоуту за экземпляр их доклада [38], предоставленный автору настоящего обзора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фаддеев Л. Д. // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1459.
2. Фаддеев Л. Д. // Тр. МИАН им. В. А. Стеклова. Т. 69. М.; Л., 1963.
3. Якубовский О. Я. // ЯФ. 1967. Т. 5. С. 1312.
4. Шмид Э., Цигельман Х. Проблема трех тел в квантовой механике. М.: Наука, 1979.
5. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
7. Merkuriev S. P., Gignoux C., Laverne A. // Ann. Phys. 1976. V. 99. P. 30.
8. Меркурьев С. П. // ЯФ. 1976. Т. 24. С. 289.
9. Меркурьев С. П. // ТМФ. 1977. Т. 32. С. 187.
10. Меркурьев С. П. // Записки науч. семинара ЛОМИ. 1978. Т. 77. С. 148.
11. Меркурьев С. П. // Докл. АН СССР. 1978. Т. 241. С. 68.
12. Меркурьев С. П. // ТМФ. 1979. Т. 38. С. 201.
13. Merkuriev S. P. // Lett. Math. Phys. 1979. V. 3. P. 141.
14. Merkuriev S. P. // Ann. Phys. 1980. V. 130. P. 395.
15. Merkuriev S. P. // Acta Phys. Austriaca. Suppl. 1981. V. XXIII. P. 65.
16. Kostykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P. // Few-Body Systems. 1989. V. 6. P. 97.
17. Квицинский А. А., Кострыкин В. В., Меркурьев С. П. // ЭЧАЯ. 1990. Т. 21. С. 553.
18. Меркурьев С. П., Немнюгин С. А. // ЯФ. 1992. Т. 55. С. 929.
19. Меркурьев С. П., Позднеев С. А. // ЯФ. 1979. Т. 29. С. 620.
20. Куперин Ю. А., Меркурьев С. П., Квицинский А. А. // Вестн. ЛГУ, сер. физ. 1981. Вып. 4, № 22. С. 66.
21. Куперин Ю. А., Меркурьев С. П., Квицинский А. А. // Микроскопические расчеты легких ядер: Сб. Калинин, 1982. С. 4.
22. Куперин Ю. А., Меркурьев С. П., Квицинский А. А. // ЯФ. 1983. Т. 37. С. 1440.
23. Виницкий С. И. и др. // ЯФ. 1990. Т. 51. С. 641.
24. Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P. // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 2723.
25. Motovilov A. K., Sofianos S. A., Kolganova E. A. // Chem. Phys. Lett. 1997. V. 275. P. 168.
26. Motovilov A. K. et al. // Nucl. Phys. A. 2001. V. 684. P. 646c.
27. Motovilov A. K. et al. // Eur. Phys. J. D. 2001. V. 13. P. 33.
28. Kolganova E. A. et al. // Избранные вопросы теоретической физики и астрофизики: Сб. Дубна, 2003. С. 129.
29. Kolganova E. A. et al. // Book of Abstr. of the 17th Intern. IUPAP Conf. on Few-Body Problems in Physics, Durham, North Carolina, USA, June 5–10, 2003. P. 408.
30. Kolganova E. A., Motovilov A. K., Ho Y. K. // Nucl. Phys. A. 2001. V. 684. P. 623c.
31. Вазов В., Форсайт Дж. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
32. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977.

33. *Payne G. L. et al.* // Phys. Rev. C. 1980. V. 22. P. 823.
34. *Payne G. L.* // Proc. «Lecture Notes in Physics: Models and Methods in Few-Body Physics», Lisboa, Portugal, Oct. 13–18, 1986. Springer-Verlag, 1986. V. 273. P. 64.
35. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 1986. Т. 43. С. 1318.
36. *Пупышев В. В.* Сообщение ОИЯИ Р4-86-386. Дубна, 1986.
37. *Piryshev V. V.* // Book of Abstr. of the V Intern. Congress on Mathematical Modelling, Dubna, Sept. 30–Oct. 6, 2002. V. 1. P. 169.
38. *Bosveld G. D., Schellingerhout N. W.* Report 231. Groningen, 1989.
39. *Schellingerhout N. W., Kok L. P., Bosveld G. D.* // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 5568.
40. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 7301.
41. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 994.
42. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // Phys. Rev. A. 1994. V. 50. P. 1924.
43. *Kvitsinsky A. A., Hu C.-Y., Cohen J. S.* // Phys. Rev. A. 1996. V. 53. P. 255.
44. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L.* // Comp. Phys. Commun. 2000. V. 126. P. 162.
45. *Yakovlev S. L., Roudnev V. A.* // Conf. Handbook of the XV Intern. Conf. on Few-Body Problems in Physics, Groningen, July 22–26, 1997. P. 157.
46. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L.* // Chem. Phys. Lett. 2000. V. 328. P. 97.
47. *Roudnev V. A.* // Chem. Phys. Lett. 2003. V. 367. P. 95.
48. *Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л.* Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
49. *Вершинин В. В., Завьялов Ю. С., Павлов Н. Н.* Экстремальные свойства сплайнов и задача сглаживания. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1988.
50. *Корнейчук Н. П.* Сплайны в теории приближения. М.: Наука, 1984.
51. *Корнейчук Н. П.* Точные константы в теории приближения. М.: Наука, 1987.
52. *Prenter P. M.* Splines and Variational Methods. N. Y.: Wiley, 1975.
53. *Пупышев В. В., Соловцова О. П.* // ЭЧАЯ. 1996. Т. 27. С. 859.
54. *Пупышев В. В.* // ЭЧАЯ. 1997. Т. 28. С. 1457.
55. *Пупышев В. В.* // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30. С. 1562.
56. *Пупышев В. В.* // ЭЧАЯ. 2003. Т. 33. С. 844.
57. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 1986. Т. 43. С. 260.
58. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 1989. Т. 81. С. 86.
59. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 1999. Т. 62. С. 1955.
60. *Piryshev V. V.* JINR Preprint E5-87-902. Dubna, 1987.
61. *Piryshev V. V.* // Few-Body Systems. 1990. V. 8. P. 105.
62. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 1996. Т. 107. С. 501.
63. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2000. Т. 125. С. 253.
64. *Piryshev V. V.* // Phys. Lett. A. 1989. V. 140. P. 151.
65. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2001. Т. 128. С. 268.
66. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 2003. Т. 66. С. 64.

67. *Pupyshev V. V.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. V. 36. P. L13.
68. *Pupyshev V. V.* // Book of Abstr. of Intern. Conf. «Kolmogorov and Contemporary Mathematics», Moscow, June 16–21, 2003. M., 2003. P. 222.
69. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2003. Т. 136. С. 90.
70. *Alt E. O., Grassberger P., Sandhas W.* // Nucl. Phys. B. 1967. V. 2. P. 167.
71. *Grassberger P., Sandhas W.* // Ibid. P. 181.
72. *Sloan I. H.* // Phys. Rev. C. 1972. V. 6. P. 1945.
73. *Bencze Gy.* // Nucl. Phys. A. 1973. V. 211. P. 568.
74. *Redish E. F.* // Nucl. Phys. A. 1974. V. 225. P. 16.
75. *Karlson B., Zeiger E.* // Phys. Rev. D. 1975. V. 11. P. 939.
76. *Noble J. V.* // Phys. Rev. 1967. V. 167. P. 945.
77. *Веселова А. М.* // ТМФ. 1970. Т. 3. С. 326.
78. *Веселова А. М.* // ТМФ. 1978. Т. 35. С. 180.
79. *Hamza K. A., Edwards S.* // Phys. Rev. 1969. V. 181. P. 1494.
80. *Adya S.* // Ibid. V. 177. P. 1406.
81. *Alt E. O., Sandhas W., Ziegelmann H.* // Phys. Rev. C. 1978. V. 17. P. 1981.
82. *Mukhamedzhanov A. M., Alt E. O., Avakov G. V.* // Phys. Rev. C. 2000. V. 61. P. 064006.
83. *Mukhamedzhanov A. M., Alt E. O., Avakov G. V.* // Phys. Rev. C. 2001. V. 63. P. 044005.
84. *Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А.* Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
85. *Джибути Р. И., Крупеникова Н. Б.* Метод гиперсферических функций в квантовой механике нескольких тел. Тбилиси: Мецниереба, 1984.
86. *Mercuriev S. P., Motovilov A. K.* // Lett. Math. Phys. 1983. V. 7. P. 497.
87. *Mercuriev S. P., Motovilov A. K., Yakovlev S. L.* // Theor. Math. Phys. 1993. V. 94. P. 306.
88. *Вицицкий С. И., Пономарев Л. И.* // ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336.
89. *Chuluumbaatar O., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* // J. Phys. B. 2001. V. 34. P. L425.
90. *Chuluumbaatar O., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* // JCMSE. 2002. V. 2. P. 37.
91. *Chuluumbaatar O. et al.* // JCMSE. 2003. V. 2. P. 1.
92. *Chuluumbaatar O. et al.* // Избранные вопросы теоретической физики и астрофизики: Сб. Дубна, 2003. С. 105.
93. *Hylleraas E. A.* // Z. Physik. 1929. V. 54. P. 347.
94. *Breit G.* // Phys. Rev. 1930. V. 35. P. 569.
95. *Касчиев М. С., Вицицкий С. И.* // ЯФ. 1986. Т. 44. С. 386.
96. *Коробов В. И.* // ЯФ. 1989. Т. 50. С. 1595.
97. *Korobov V. I., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* // Muon Catalyzed Fusion. 1992. V. 7. P. 63.
98. *Abramowitz M., Stegun I. A.* Handbook of Mathematical Functions. Washington, 1972.
99. *Suslov V. M., Vlahovic B.* // Book of Abstr. of the 17th Intern. IUPAP Conf. on Few-Body Problems in Physics, Durham, North Carolina, USA, June 5–10, 2003. P. 276.
100. *Friar J. L. et al.* // Phys. Rev. C. 1990. V. 42. P. 1838.
101. *Kievsky A., Viviani M., Rosati S.* // Phys. Rev. C. 2001. V. 64. P. 024002.

102. *Friar J. L. et al.* // Phys. Rev. C. 1995. V. 51. P. 2356.
103. *Fabri E., Friorio G.* // Nuovo Cim. 1969. V. 60. P. 210.
104. *Руднев В. А., Яковлев С. Л.* // ЯФ. 1995. Т. 58. С. 1762.
105. *Avishai Y.* // J. Math. Phys. 1975. V. 16. P. 1491.
106. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1974. Т. 2.
107. *Квицинский А. А., Латыпов Д. М.* // ЯФ. 1991. Т. 53. С. 1552.