MTA Számitástechnikai és Automatizálási Kutató Intézete, **Közlemények** 17/1976.

К расчёту ядерных моделей методом гиперсферических функций

К.Балла

В ядерной физике при изучении ядерных и квазиядерных систем, состоящих из нуклонов и антинуклонов, применяется известный метод гиперсферических функций [I, 2], сводящий многомерное уравнение Шредингера к бесконечной системе линейных обыкновенных уравнений на полуоси с особенностями в граничных точках. Для задачи трёх тел (ядер трития и He^3) такие уравнения получены в [3].

Настоящая работа посвящена численному решению задачи о связанных состояниях системы из трёх частиц (ядро модельного трития) методом гиперсферических функций в приближении одного и трёх уравнений. Модель ядра выбирается такой же, как в [4], §3, с потенциалом взаимодействия в виде прямоугольной ямы и параметрами ямы, несколько отличными от выбранных в [4]. В [4] энергия связи основного состояния ядра (E_0=20.5$\pm$0.I Mev) найдена путём численного решения системы одномерных интегральных уравнений, полученных из многомерных интегральных уравнений Фаддеева.

Настоящая работа позволяет сравнить результаты решения небольшого числа уравнений, полученных в методе гиперсферических функций, с решением интегральных уравнений в [4], более трудоёмких с вычислительной точки зрения.

Быстрая сходимость метода гиперсферических функций, установленная в [3] для некоторых ядерных моделей, и результаты вычислений в данной работе в приближениях одного и трёх уравнений позволяют надеяться, что полученное уже для одного уравнения собственное значение $E_{I,0} = 2I.074 \pm I.5 \cdot IO^{-3}$ близко к истинному значению энергии связи основного состояния модели.

Некоторое расхождение со значением E_0 в [4] объясняется, с одной стороны, небольшим варьированием потенциала взаимодействия, а, с другой стороны, приближённостью вычислений в [4] (последующие поправки могут только увеличить E_0).

I. В первом приближении метода гиперсферических функций задача об определении энергии основного состояния ядра модельного трития сводится к нахождению максимального собственного значения E_I задачи:

$$x'' + \frac{1}{\rho} x' + \left[-bE_1 + 3b\mathcal{F}_0(\rho) - \frac{4}{\rho^2}\right] x = 0, \qquad 0 < \rho < \infty \tag{I.I}$$

$$\lim_{\rho \to 0} x(\rho) = 0, \tag{I.2}$$

$$\lim_{\rho \to \infty} x(\rho) = 0, \tag{I.3}$$

где $\mathcal{F}_0(\rho) = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\, V(\rho\sqrt{1+x})\, dx,$

$$V(t) = \begin{cases} C_1 = \dfrac{1,441 \cdot 102,276}{2,043} & \text{при } t \leq a = 2,043, \\ 0 & \text{при } t > a, \end{cases}$$

$b = 4,8229 \cdot 10^{-2}.$

Заменой $x(\rho) = z(\rho)\rho^{-1/2}$, $\lambda = bE_1$ получим задачу в виде:

$$z'' + [-\lambda + q(\rho)] z = 0, \qquad 0 < \rho < \infty \tag{I.4}$$

$$\lim_{\rho \to 0} z(\rho) = 0, \tag{I.5}$$

$$\lim_{\rho \to \infty} z(\rho) = 0, \tag{I.6}$$

где $q(\rho) = -\frac{15}{4\rho^2} + 3b\mathcal{F}_0(\rho)$ и, в силу поведения $\mathcal{F}_0(\rho)$,

$$q(\rho) = -\frac{15}{4\rho^2} + 3bC_1 \qquad \text{при } \rho \leq \frac{a}{\sqrt{2}},$$

$$q(\varrho) = -\frac{15}{4\varrho^2} + O\left(\frac{1}{\varrho^3}\right) \qquad \text{для достаточно больших } \varrho .$$

Для переноса граничных условий (I.5) и (I.6) из особых точек используем результаты работ, указанных в [5].

Условие (I.5) для решений уравнения (I.4) для достаточно маленьких ϱ эквивалентно условию

$$\varrho z'(\varrho) = w(\varrho) z(\varrho), \tag{I.7}$$

где $w(\varrho)$ есть решение задачи

$$\varrho w' + w^2 - w + \varrho^2 \left[-\lambda + q(\varrho)\right] = 0, \quad 0 < \varrho \le \varrho_0, \tag{I.8}$$

$$\lim_{\varrho \to 0} w(\varrho) = w_0 = \frac{5}{2},$$

причём

$$w(\varrho) = \sum_{i=0}^{\infty} w_i \varrho^{2i}, \tag{I.9}$$

где ряд сходится для достаточно малых ϱ и все коэффициенты получаются формальной подстановкой ряда (I.9) в уравнение (I.8).

Условие (I.6) для решений уравнения (I.4) для достаточно больших ϱ эквивалентно условию

$$z'(\varrho) = v(\varrho) z(\varrho), \tag{I.I0}$$

где $v(\varrho)$ есть решение задачи

$$v' + v^2 - \lambda + q(\varrho) = 0, \qquad \varrho_\infty \le \varrho < \infty, \tag{I.II}$$

$$\lim_{\varrho \to \infty} v(\varrho) = -\sqrt{\lambda},$$

причём при $\varrho \to \infty$

$$v(\varrho) \sim \sum_{i=0}^{\infty} \frac{v_i}{\varrho^i}, \tag{I.I2}$$

и все коэффициенты этого асимптотического ряда получаются формальной его подстановкой в уравнение (I.II).

Взяв первые два члена в разложениях (I.9) и (I.I2), получим в точках ρ_0 и ρ_∞ приближённые граничные условия в виде

$$\rho_0 z'(\rho_0) = \hat{w}(\rho_0)\, z(\rho_0), \tag{I.7'}$$

$$z'(\rho_\infty) = \hat{v}(\rho_\infty)\, z(\rho_\infty), \tag{I.I0'}$$

где $\hat{w}(\rho) = \frac{5}{2} + \frac{\lambda - 3bc_1}{6}\rho^2$,

$\hat{v}(\rho) = -\sqrt{\lambda}\left(1 + \frac{15}{8\lambda\rho^2}\right)$.

О выборе точек ρ_0 и ρ_∞ для достижения нужной точности скажем ниже.

На конечном интервале $[\rho_0, \rho_\infty]$ задачу (I.4), (I.7'), (I.I0') решаем методом устойчивой прогонки А.А.Абрамова. А именно, полагая $ctg\,\theta = \frac{z'}{z}$, приходим к задаче для $\theta(\rho)$:

$$\theta' = 1 - \left[1 + \lambda - q(\rho)\right]\sin^2\theta, \quad \rho_0 \le \rho \le \rho_\infty, \tag{I.I3}$$

$$\theta(\rho_0) = arctg\,\frac{\rho_0}{\hat{w}(\rho_0)}, \tag{I.I4}$$

$$\theta(\rho_\infty) = arctg\left[-\hat{v}(\rho_\infty)\right] + \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0, 1, \dots \tag{I.I5}$$

где n – номер собственного числа. Для нахождения максимального собственного числа надо положить в (I.I5) $n = 0$.

В результате задача сводится к решению уравнения (I.I3) слева направо до точки ρ_c с граничным условием (I.I4) и справа налево до точки ρ_c с граничным условием (I.I5) и стрельбе по λ. Так как задача (I.I3) – (I.I5) обладает свойством монотонности, то сходится следующий итерационный процесс ($\theta^{\wedge}(\rho,\lambda)$ обозначает решение (I.I3), удовлетворяющее (I.I4), а $\theta^{n}(\rho,\lambda)$ – решение (I.I3), удовлетворяющее (I.I5)): задаём λ_0 ; если на каком-то шаге $\theta^{\wedge}(\rho_c,\lambda_k) > \theta^{n}(\rho_c,\lambda_k)$, то берётся $\lambda_{k+1} > \lambda_k$, если же $\theta^{\wedge}(\rho_c,\lambda_k) < \theta^{n}(\rho_c,\lambda_k)$, то $\lambda_{k+1} < \lambda_k$. В качестве точки ρ_c удобнее всего брать $\frac{a}{\sqrt{2}}$.

Чтобы выбрать начальное приближение λ_0 для максимального собственного числа, умножим уравнение (I.4) на z и проинтегрируем его от 0 до ∞. Получим

$$\int_0^\infty [\lambda - q(\rho)]\, z^2\, d\rho < 0,$$

откуда

$$\lambda < \sup_{0<\rho<\infty} q(\rho) \ll 3bC_1$$

Исходя из $\lambda_0 = 3bC_1$, находим описанным методом максимальное собственное число λ и соответствующее значение $E_{I,0}$ для задачи (I.I) - (I.3): $E_{I,0} = 21.074 \pm 1.5 \cdot 10^{-3}$.

2. Во втором приближении метода Симонова при исследовании описанной ядерной модели вместо уравнения (I.I) возникает система двух связанных уравнений и одно независимое уравнение. В результате задача сводится к исследованию уравнения (3.I) (см. п.3.) и нахождению максимального собственного значения E_2 задачи:

$$x_0'' + \frac{1}{\rho}x_0' + \left[-bE_2 + 3b\mathcal{F}_0(\rho) - \frac{4}{\rho^2}\right]x_0 = \frac{b}{\sqrt{3}}\mathcal{F}_4(\rho)x_4, \tag{2.I}$$

$$x_4'' + \frac{1}{\rho}x_4' + \left[-bE_2 + 3b\mathcal{F}_0(\rho) + \frac{6}{5}b\mathcal{F}_4(\rho) - \frac{36}{\rho^2}\right]x_4 = \frac{b}{\sqrt{3}}\mathcal{F}_4(\rho)x_0, \quad 0<\rho<\infty,$$

$$\lim_{\rho\to 0} x_0(\rho) = \text{const}, \quad \lim_{\rho\to 0} x_4(\rho) = 0, \tag{2.2}$$

$$\lim_{\rho\to\infty} x_0(\rho) = \lim_{\rho\to\infty} x_4(\rho) = 0, \tag{2.3}$$

где $\mathcal{F}_4(\rho) = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-x^2}\,(16x^4 - 12x^2 + 1)\,V(\rho\sqrt{1+x})\,dx,$

а $V(t), \mathcal{F}_0(\rho), b$ те же, что в п.I.

Заменой $x_0(\rho) = z_1(\rho)\rho^{-1/2}, x_4(\rho) = z_2(\rho)\rho^{-1/2}, \lambda = bE_2$ получим для $Z = (z_1, z_2)^T$ задачу в виде:

$$Z'' + [-\lambda I_2 + Q(\rho)]Z = 0, \quad 0<\rho<\infty, \tag{2.4}$$

$$\lim_{\rho \to 0} Z(\rho) = 0, \tag{2.5}$$

$$\lim_{\rho \to \infty} Z(\rho) = 0, \tag{2.6}$$

где I_2 – единичная матрица второго порядка,

$$Q(\rho) = \begin{pmatrix} -\frac{15}{4\rho^2} + 3b\mathcal{F}_0(\rho) & -\frac{b}{\sqrt{3}}\mathcal{F}_4(\rho) \\ -\frac{b}{\sqrt{3}}\mathcal{F}_4(\rho) & -\frac{143}{4\rho^2} + 3b\mathcal{F}_0(\rho) + \frac{6}{5}b\mathcal{F}_4(\rho) \end{pmatrix},$$

и в силу поведения $\mathcal{F}_0(\rho)$ и $\mathcal{F}_4(\rho)$

$Q(\rho) = \frac{1}{\rho^2} Q_0^0 + 3bC_1 I_2$ при $\rho \leq \frac{a}{\sqrt{2}}$, где

Q_0^0 – диагональная матрица, $\operatorname{diag} Q_0^0 = (-\frac{15}{4}, -\frac{143}{4})$,

и для достаточно больших ρ

$$Q(\rho) = \frac{1}{\rho^2} Q_2^\infty + O\left(\frac{1}{\rho^3}\right), \quad Q_2^\infty = Q_0^0$$

Используя результаты работ, указанных в [5], получаем, что условие (2.5) для решений системы (2.4) для достаточно маленьких ρ эквивалентно условию

$$\rho Z'(\rho) = W(\rho) Z(\rho), \tag{2.7}$$

где $W(\rho)$ есть матрица-решение задачи

$$\begin{gathered} \rho W' + W^2 - W + \rho^2\left[-\lambda I_2 + Q(\rho)\right] = 0, \quad 0 < \rho \leq \rho_0, \\ \lim_{\rho \to 0} W(\rho) = W_0 = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & \frac{13}{2} \end{pmatrix}, \end{gathered} \tag{2.8}$$

причём

$$W(\rho) = \sum_{i=0}^{\infty} W_i \rho^{2i}, \tag{2.9}$$

где матричный ряд сходится для достаточно малых ρ и все коэффициенты получаются формальной подстановкой ряда в уравнение (2.8).

Аналогично, условие (2.6) для решений системы (2.4) для достаточно больших ρ эквивалентно условию

$$Z'(\rho)=V(\rho)Z(\rho), \tag{2.I0}$$

где $V(\rho)$ есть матрица-решение задачи

$$\begin{aligned} &V'+V^2+\left[-\lambda I_2+Q(\rho)\right]=0, \qquad \rho_\infty'\le\rho<\infty, \\ &\lim_{\rho\to\infty} V(\rho)=-\sqrt{\lambda}\, I_2, \end{aligned} \tag{2.II}$$

причём

$$V(\rho)\sim\sum_{i=0}^{\infty} V_i\,\rho^{-i}, \tag{2.I2}$$

и все матрицы-коэффициенты этого асимптотического ряда получаются формальной его подстановкой в (2.II).

Взяв первые два члена в разложениях (2.9) и (2.I2), получим в точках ρ_0 и ρ_∞ граничные условия

$$\rho_0 Z'(\rho_0)=\hat{W}(\rho_0)Z(\rho_0), \tag{2.7'}$$

$$Z'(\rho_\infty)=\hat{V}(\rho_\infty)Z(\rho_\infty), \tag{2.I0'}$$

где $\hat{W}(\rho)$ и $\hat{V}(\rho)$ диагональные матрицы,

$$\mathrm{diag}\,\hat{W}(\rho)=\left(\frac{5}{2}+\frac{\lambda-3bC_1}{6}\rho^2,\ \frac{13}{2}+\frac{\lambda-3bC_1}{14}\rho^2\right)$$, а

$$\mathrm{diag}\,\hat{V}(\rho)=\left(-\sqrt{\lambda}\left(1+\frac{15}{8\lambda\rho^2}\right),\ -\sqrt{\lambda}\left(1+\frac{143}{8\lambda\rho^2}\right)\right).$$

О выборе точек ρ_0 и ρ_∞ для достижения заданной точности см. п.4.

К решению задачи (2.4), (2.7′), (2.I0′) на конечном интервале $[\rho_0, \rho_\infty]$ применяем матричный вариант устойчивой прогонки А.А.Абрамова в следующем виде.

Вводя четырёхмерную вектор-функцию $S=\binom{Z}{Z'}$ из (2.4), (2.7′), (2.I0′) получим для S уравнение

$$S' + P(\lambda,\rho)S = 0, \qquad \rho_0 \le \rho \le \rho_\infty, \tag{2.I3}$$

где

$$P(\lambda,\rho) = \begin{pmatrix} 0 & -I_2 \\ -\lambda I_2 + Q(\rho) & 0 \end{pmatrix},$$

и граничные условия

$$U_0^{\wedge *} S(\rho_0) = 0, \tag{2.I4}$$

$$U_\infty^{n*} S(\rho_\infty) = 0, \tag{2.I5}$$

где $U_0^\wedge$ и U_∞^n для удобства нормированы так, чтобы

$$U_0^{\wedge *} U_0^\wedge = I_2 \qquad \text{и} \qquad U_\infty^{n*} U_\infty^n = I_2 .$$

Многообразие решений системы (2.I3), удовлетворяющих (2.I4) /соответственно (2.I5)/, определяется соотношением

$$U^{\wedge *}(\rho)\, S(\rho) = 0, \quad \rho_0 \le \rho \le \rho_\infty,$$
(соответственно $U^{n*}(\rho) S(\rho) = 0$),

где $U^\wedge(\rho)$ является матрицей-решением задачи Коши

$$U^{\wedge\prime} - P^* U^\wedge + U^\wedge (U^{\wedge *} U^\wedge)^{-1} U^{\wedge *} P^* U^\wedge = 0, \quad \rho_0 \le \rho \le \rho_\infty, \qquad U^\wedge(\rho_0) = U_0^\wedge \tag{2.I6}$$

/соответственно в (2.I6) верхний индекс заменяется на n , а начальное условие – на условие на правом конце $U^n(\rho_\infty) = U_\infty^n$ /.

Собственное значение λ находится из условия

$$\det \begin{vmatrix} U^{\wedge *}(\rho_c) \\ U^{n*}(\rho_c) \end{vmatrix} = 0, \tag{2.I7}$$

где ρ_c – произвольная точка отрезка $[\rho_0, \rho_\infty]$ (удобнее всего выбрать $\rho_c = \frac{a}{\sqrt{2}}$). Условие (2.I7) есть нелинейное уравнение относительно λ, его решение отыскивается итерационным методом.

Верхнюю оценку для собственного числа λ можно получить умножением первого уравнения (2.4) на z_1 и второго уравнения на z_2, сложением их и последующим интегрированием от 0 до ∞. Получаем, что

$$\int_0^\infty \left[\lambda - 3b\mathfrak{F}_0(\rho) - \frac{b}{\sqrt{3}}\mathfrak{F}_4(\rho) + \frac{15}{4\rho^2}\right] z_1^2\, d\rho + \int_0^\infty \left[\lambda - 3b\mathfrak{F}_0(\rho) - \left(\frac{b}{\sqrt{3}} + \frac{6b}{5}\right)\mathfrak{F}_4(\rho) + \frac{143}{\rho^2}\right] z_2^2\, d\rho \equiv$$
$$\equiv \int_0^\infty [\lambda - q_1(\rho)] z_1^2\, d\rho + \int_0^\infty [\lambda - q_2(\rho)] z_2^2\, d\rho < 0,$$

и поэтому по меньшей мере на каком-то отрезке

$$\lambda < \max(q_1(\rho), q_2(\rho)),$$

откуда $\lambda < NbC_1$, $N \ll 40$.

Исходя из $\lambda_0 = 40\, bC_1$, находится максимальное собственное число λ и соответствующее $E_{2,0} = 21.083$ с относительной погрешностью $0.1‰$.

3. Во втором приближении возникает ещё независимое уравнение, отделившееся от системы (2.I). Покажем, что при любом положительном E задача

$$x_2'' + \frac{1}{\rho} x_2' + \left[-bE + \frac{3}{2} b\mathfrak{F}_0(\rho) + \frac{3}{2} b\mathfrak{F}_2(\rho) - \frac{16}{\rho^2}\right] x_2 = 0,\quad 0<\rho<\infty, \qquad (3.I)$$

$$\lim_{\rho\to 0} x_2(\rho) = \lim_{\rho\to\infty} x_2(\rho) = 0$$

имеет только тривиальное решение.

Здесь $\mathfrak{F}_2(\rho) = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\,(4x^2-1)\, V(\rho\sqrt{1+x})\, dx,$

а $V(t), \mathfrak{F}_0(\rho), b$ те же, что в п.I.

Заменой $\varkappa_2(\rho) = z(\rho)\rho^{-1/2}$ получим задачу в виде

$$z'' + [-bE + q(\rho)]z = 0, \qquad 0 < \rho < \infty, \tag{3.2}$$

$$\lim_{\rho \to 0} z(\rho) = \lim_{\rho \to \infty} z(\rho) = 0,$$

где $q(\rho) = -\frac{63}{4\rho^2} + \frac{3}{2} b\mathcal{F}_0(\rho) + \frac{3}{2} b\mathcal{F}_2(\rho)$.

В силу поведения $\mathcal{F}_0(\rho)$ и $\mathcal{F}_2(\rho)$ функция $q(\rho)$ остаётся всюду отрицательной, поскольку при $\rho \leq \frac{a}{\sqrt{2}}$ $q(\rho) = -\frac{63}{4\rho^3} + 3bC_1 < 0$ а для достаточно больших ρ $q(\rho) = -\frac{63}{4\rho^2} + O(\frac{1}{\rho^3})$.

Если бы на каком-то отрезке было $q(\rho) > 0$, то нашлась бы точка, в которой $q'(\rho) = 0$. Это условие эквивалентно выполнению равенства

$$u(t) \equiv (2t^2 - 1)^2 t(1 - t^2)^{1/2} = \frac{21\pi}{32a^2bC_1}$$

при некотором $t \in (0,1)$. Однако $\max\limits_{t \in [0,1]} u(t) < \frac{21\pi}{32a^2bC_1}$.

Предположим, что при некотором $E > 0$ существует нетривиальное решение задачи (3.I) и потому и задачи (3.2). Умножим уравнение (3.2) на него и проинтегрируем от 0 до ∞. Получим, что

$$\int_0^\infty [-bE + q(\rho)] z^2 d\rho > 0,$$

что противоречит предположению.

В результате для энергии основного состояния описанной ядерной модели мы получим в первом приближении метода гиперсферических функций значение $E_{1,0}$=2I.074 MeV, а во втором приближении значение $E_{2,0}$=2I.083 MeV. Эти значения удовлетворяют вариационному принципу метода гиперсферических функций (см. [I-4]):

$$E_{1,0} < E_{2,0}.$$

Отметим также, что полученная малая поправка к $E_{1,0}$ во втором приближении (порядка 0.5 %) и факт быстрой сходимости метода Симонова для данной ядерной модели позволяют надеяться, что энергия связи основного состояния этой модели близка к 2I.I MeV.

4. Осталось указать оценки для выбора точек ρ_0 и ρ_∞ в граничных условиях (I.7′), (I.I0′), (2.7′) и (2.I0′).

Оценим погрешность замены точного граничного условия (I.7) приближенным. Обозначим погрешность замены через

$$\delta(\rho) \equiv \rho^3 \beta(\rho = w(\rho) - \hat{w}(\rho)$$

и невязку при подстановке $\hat{w}(\rho)$ вместо $w(\rho)$ в уравнение (I.8) через $T(\rho)$. При этом $\lim\limits_{\rho \to 0} \beta(\rho) = 0$ и $T(\rho) = w_2^2 \rho^4$, где $w_2 = \frac{\lambda - 3bC_1}{6}$. Для $\beta(\rho)$ получаем уравнение

$$\rho\beta' + (2 + 2w_0)\beta + 2w_2\rho^2\beta + \rho^3\beta^2 + \rho w_2^2 = 0.$$

Такое уравнение имеет единственное решение, стремящееся к нулю при ρ, стремящемся к нулю. Оно разлагается в степенной ряд по ρ. Определим функцию $z(\rho)$ соотношениями

$$z = \frac{1}{12}(2|w_2|\rho^2 z + \rho^3 z^2) + \frac{w_2^2}{8}\rho + \frac{|w_2|^3}{40}\rho^3, \qquad (4.I)$$
$$z(0) = 0.$$

По теореме о неявной функции $z(\rho)$ определена для малых ρ и представима в виде степенного ряда. Нетрудно проверить, что коэффициенты разложения $z(\rho)$ положительны и мажорируют коэффициенты разложения $\beta(\rho)$ по модулю и потому $|\beta(\rho)| \leq z(\rho)$. Разрешая уравнение (4.I) относительно z, легко получить оценку $z(\rho) < \frac{3\rho}{10} w_2^2$. Поэтому при допустимой прогрешности $|\delta(\rho)| \leq \delta_0$ достаточно брать

$$\rho_0 \leq \frac{1}{\sqrt{|w_2|}} \sqrt[4]{\frac{10}{3}\delta_0}.$$

В случае граничного условия (2.7′) поступаем аналогично. Пусть погрешность замены точного граничного условия приближённым есть

$$Д(\rho) \equiv \rho^3 \mathcal{B}(\rho) = W(\rho) - \hat{W}(\rho),$$

а невязка при подстановке $\hat{W}(\rho)$ вместо $W(\rho)$ в уравнение (2.8) есть $T(\rho) = W_2^2 \rho^4$, где W_2 – диагональная матрица,

$$\operatorname{diag} W_2 = \left(\frac{\lambda-3bC_1}{6}, \frac{\lambda-3bC_1}{14}\right).$$

Для матричной функции $\mathcal{B}(\varrho)$ получаем уравнение

$$\varrho\mathcal{B}'+(I_2+W_0)\mathcal{B}+\mathcal{B}(I_2+W_0)+\varrho^2(\mathcal{B}W_2+W_2\mathcal{B})+\varrho^3\mathcal{B}^2+W_2^2\varrho=0.$$

Такое уравнение также имеет единственное решение, стремящееся к нулю при ϱ, стремящемся к нулю. Оно разлагается в матричный степенной ряд по ϱ. Определим функцию $z(\varrho)$ соотношениями

$$z=c\left[v\varrho^2 z+8\varrho^3 z^2\right]+b_1\varrho+b_3\varrho^3, \qquad (4.2)$$
$$z(0)=0,$$

где

$$c=\|(5I_4+U)^{-1}\|, \quad v=\|V\|,$$
$$b_1=\|(I_4+U)^{-1}H\|, \quad b_3=\|(3I_4+U)^{-1}V(I_4+U)^{-1}H\|, \text{ а}$$
$$U=I_2\times W_0+W_0^T\times I_2, \quad V=I_2\times W_2+W_2^T\times I_2,$$
$$H=\left(\frac{(\lambda-3bC_1)^2}{36}, 0, 0, \frac{(\lambda-3bC_1)^2}{196}\right)^T.$$

По теореме о неявной функции $z(\varrho)$ определена для малых ϱ и разлагается в степенной ряд по ϱ. При этом легко проверяется, что коэффициенты разложения $z(\varrho)$ положительны и мажорируют матрицы-коэффициенты разложения $\mathcal{B}(\varrho)$ по норме и потому $\|\mathcal{B}(\varrho)\|\le z(\varrho)$. Разрешая (4.2) относительно z, получим оценку

$$z(\varrho)<8b_1\varrho \qquad \text{при } \varrho\le\varrho^1=\min\left(\frac{1}{\sqrt{2cv}}, \sqrt[3]{\frac{b_1}{b_3}}, \frac{1}{2\sqrt[4]{8b_1c}}\right),$$

итак при допустимой погрешности $\|Д(\varrho)\|<\delta_0$ достаточно брать

$$\varrho_0\le\min\left(\varrho^1, \sqrt[4]{\frac{\delta_0}{8b_1}}\right).$$

Для оценки погрешности условий (I.I0′) и (2.I0′) непосредственно воспользуемся оценками из [5]. Обозначив через

$$d(\rho)=v(\rho)-\hat{v}(\rho) \qquad \text{и}$$

$$\mathcal{D}(\rho)=V(\rho)-\hat{V}(\rho)$$

получаем оценки $|d(\rho)| \leq \frac{1}{\lambda^{3/2}\rho^3} k_1$ и

$$\|\mathcal{D}(\rho)\| \leq \frac{1}{\lambda^{3/2}\rho^3} k_2 ,$$

где $k_1 \sim 160$, а $k_2 \sim 800$, поэтому для достижения заданной точности δ_∞ в случае (I.IO´) следует брать

$$\rho_\infty \geqslant \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sqrt[3]{\frac{k_1}{\delta_\infty}} ,$$

а в случае (2.IO´)

$$\rho_\infty \geqslant \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sqrt[3]{\frac{k_2}{\delta_\infty}} .$$

Автор выбражает благодарность Н.Б.Конюховой (ВЦ АН СССР) за оказанную помощь в решении задачи и А.М.Бадалян (ИЯФ АН СССР) за обсуждение результатов.

Литература

[I] Ю.А. Симонов. ЯФ 3,630(I966)
[2] Ю.А. Симонов. ЯФ 7,I2IO(I968)
[3] А.М. Бадалян, Ю.А.Симонов. ЯФ 3,I032(I966)
[4] А.Г. Ситенко, В.Ф.Харченко УФН I03,469(I97I)
[5] Е.С. Биргер. ЖВМ и МФ т8 №3, 674(I968)
[6] Е.С. Биргер. Алгоритмы и алгоритмические языки, вып.6, 3(I973) и цитированная в [5] и [6] литература.

Summary

On the Evaluation of Nuclear Models by the Method of Hyperspherical Functions

K. Balla

The paper is devoted to the numerical solution of the bound states problem for the three particle system (nucleus of tritium model) by the method of hyperspherical functions. One and three equations are used for the approximation, (1.1) and (2.1), (3.1) respectively. For the solution of the problem the methods of effective reduction of the boundary value problems on semi-axis with singularities in boundary points to the problems on the finite intervals without singularities and variants of the stable factorization are used. For the substitution of exact boundary conditions by approximative ones near the regular singularity error estimates are obtained in the case of approximation by means of convergent series.

Összefoglaló

Atommag modellek számitásai giperszferikus függvények módszereivel

Balla Katalin

A dolgozat egy három részecskéből álló rendszer (a tritium magjának modellje) kötött állapotai problémájának van szentelve. A feladatot numerikusan a hiperszférikus függvények módszerével oldja meg, egy (1.1) és három (2.1) és (3.1) egyenlettel való közelités segitségével.

A feladat megoldására felhasználja azokat a módszereket, amelyek féltengelyen lévő határpontokban szinguláris peremérték problémákat véges intervallumon szingularitással nem rendelkező feladatokra effektiven visszavezetnek; valamint a véges intervallumon értelmezett stabil faktorizációs módszereket. A pontos peremfeltételeket a reguláris kritikus pont környezetében konvergens sorral helyettesitő közelités hibabecsléseit is megadja.