ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

11-92-278

ЖАНЛАВ
Тугалын

УДК 519.652+519.624+
519.615+530.145

ОБОБЩЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА И МЕТОД СПЛАЙНОВ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Специальность: 05.13.16 - применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях

Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Дубна 1992

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук С.И.ВИНИЦКИЙ

доктор физико-математических наук А.И.ГРЕБЕННИКОВ

доктор физико-математических наук И.Д.РОДИОНОВ

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Московский инженерно-физический институт

Автореферат разослан "__"_____________ 1992 г.

Защита диссертации состоится "__"_____________ 1992 года в "__" часов на заседании Специализированного совета Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна, Московская область.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук З.М.ИВАНЧЕНКО

Основной целью данной диссертации является разработка единого метода численного решения нелинейных краевых

$$\begin{aligned} &z''-f(x,\alpha,z,z')=0\ , && a\le x\le b\ ,\\ &l_1(\alpha,z,z')=0\ , && x=a\ ,\\ &l_2(\alpha,z,z')=0\ , && x=b\ , \end{aligned} \tag{1}$$

и спектральных краевых задач

$$\begin{aligned} &\left\{I\frac{d^2}{dx^2}+P(x,\alpha)\frac{d}{dx}+Q(x,\alpha)-\lambda(\alpha)B(x,\alpha)\right\}y=0\ , && a\le x\le b\ ,\\ &l_1(\alpha,\lambda,y,y')=0\ , && x=a\ ,\\ &l_2(\alpha,\lambda,y,y')=0\ , && x=b\ . \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь I-единичная, а P,Q и B-заданные матрицы размерности nxn, λ-собственные значения, z(x) и y(x)-искомые вектор-функции размерности n, f-заданный вектор той же размерности, l_1, l_2 -векторы размерности n, компоненты которых являются нелинейными функциями своих аргументов.

К общим характеристикам указанных задач можно отнести их нелинейность, сингулярность ($a=-\infty$, $b=\infty$), многопараметричность ($\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_m)$). Иногда возникает необходимость изучения эволюционной зависимости λ от параметра α. При этом возможна бифуркация точек спектра.

Актуальность работы

Задачи типов (1) и (2) часто возникают в различных разделах теоретической физики, таких как квантовая механика, мезоатомная физика, теория конденсированных сред.

В диссертации рассмотрены задача рассеяния, задача двух кулоновских центров, включая дискретный, непрерывный и дискретно-непрерывный спектры, исследование устойчивости солитонов в моделях нелинейной теории поля и физики конденсированного состояния. Математическая постановка этих задач приводит к уравнениям (1) и (2). Актуальность их решения объясняется непрерывным расширением области их приложения к проблемам современной физики и химии.

Как известно, задача на собственные значения (2) вместе с некоторым нормировочным функционалом собственного элемента рассматривается как нелинейное функциональное уравнение относительно неизвестной пары $z=(\lambda,y)$. Таким образом, задачи (1) и (2) можно записать в виде

$$\varphi(z)=0 . \tag{3}$$

Численное решение задачи (3) состоит из двух этапов: линеаризации и дискретизации. Среди методов линеаризации нелинейного функционального уравнения типа (3) одним из распространенных является метод Ньютона-Канторовича. Обобщение данного метода предложено М.К.Гавуриным и носит название непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН). Метод получил дальнейшее развитие в работах Е.П.Жидкова, И.В.Пузынина и их учеников и хорошо зарекомендовал себя при решении различных нелинейных задач теоретической физики в течение последних двадцати с лишним лет.

Отметим, что предложены также различные модификации НАМН с целью упрощения вычисления и расширения области сходимости. Что касается дискретизации задачи (3), то существует множество различных методов, таких как метод конечных разностей, метод конечных элементов и другие.

В последное время все больше внимание специалистов привлекает метод кубических сплайнов, который по точности и

сложности реализации сравним с конечно-разностным методом, но имеет и некоторые преимущества перед последним. Приближенное решение в нем ищется в конечномерном пространстве кубических сплайнов, в результате чего дифференциальный оператор от сплайна вычисляется точно. Оказывается, что в этом пространстве находится, в частности, квазиинтерполяционный сплайн, аппроксимирующий достаточно гладкое решение дифференциальной задачи. На основе метода коллокации удается найти сплайн, совпадающий по точности с квазиинтерполяционным. Таким образом, здесь имеется возможность строить приближенное решение, аппроксимирующее не только решение, но и его производные с высокой точностью, что требуют многие задачи физики, в том числе и перечисленные выше.

Следует отметить, что близким к методу сплайн-коллокации решения спектральных задач является метод стержневых сплайнов, в котором стержневая функция используется как средство внесения дополнительной информации о решении. Такая информация используется также в методе возмущения для решения задачи Коши.

Цели и задачи исследований

Исходя из вышесказанных соображений, объектами исследований в диссертации выбраны дальнейшее развитие НАМН и метод сплайн-аппроксимации для численного решения задачи (3). При этом нам пришлось:

- развить В-представление кубических сплайнов класса C^2;
- установить свойства локально кубических сплайнов, аппроксимирующих гладкие функции, в частности, решения дифференциальных задач;

- построить сплайн-схемы повышенной точности для решения дифференциальных уравнений второго порядка;

- разработать и обосновать модификацию НАМН для численного решения нелинейных функциональных уравнений, позволяющую существенно упростить решение задачи для итерационной поправки на каждом шаге итераций;

- теоретически обосновать метод выбора итерационного параметра в НАМН.

Разработанные алгоритмы были применены к численному решению следующих задач:

задача рассеяния в одноканальной и многоканальной постановках; задача рассеяния с комплексным потенциалом; вычисление квазистационарных состояний сферически симметричных ядер; задача двух центров, вычисление термов и матричных элементов; исследование устойчивости солитонов нелинейного уравнения Шредингера с различными типами нелинейности.

Для численного решения указанных задач было необходимо:

- Решить задачу переноса граничных условий из бесконечности, учитывая асимптотическое поведение искомых решений.

- Создать комплекс программ, реализующих алгоритмы на ЭВМ.

- Проверить работоспособность и эффективность алгоритмов проведением тестовых расчетов и сравнением с результатами, полученными другими методами в тех случаях, когда такие расчеты имелись.

Научная новизна и значимость работы

Следующие результаты являются новыми:

- На основе B-представления сплайна введены локально

кубические сплайны, допускающие существенно более простую численную реализацию по сравнению с интерполяционными. Получены оценки погрешности аппроксимации такими сплайнами, часть из которых неулучшаемы.

- Предложены пятиточечные и трехточечные сплайн-схемы повышенной точности (порядок точности выше двух относительно шага разностной сетки) для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка и доказана сходимость приближенных решений.

- Даны обоснования модификации НАМН для нелинейных функциональных уравнений в банаховом пространстве с аддитивным представлением оператора в виде простого оператора и его возмущения и выбора оптимального итерационного параметра

- Разработан алгоритм, основанный на методе сплайн-аппроксимации и модификации НАМН, для численного решения нелинейных краевых и спектральных краевых задач (1) и (2).

- Дано обобщение нелинейной постановки граничных условий для задач рассеяния. Предложена новая постановка граничных условий для задачи двух центров.

- С помощью разработанного алгоритма численно решены перечисленные выше задачи теоретической физики с высокой точностью. Получен ряд результатов, имеющих самостоятельный физический интерес.

Результаты, составляющие теоретическую часть (главы 1-3) диссертации, относятся к развитию метода сплайнов и непрерывного аналога метода Ньютона. В силу широты класса рассматриваемых задач предлагаемые методы могут найти применение в различных областях физики и техники.

Практическая полезность работы

Разработанные в диссертации численные алгоритмы были реализованы в виде комплексов программ, которые могут быть использованы для численного решения задачи рассеяния, задачи двух центров, для вычисления матричных элементов этой задачи независимо от значения параметров в ней. Большая часть программных модулей с небольшими изменениями может быть использована при решении других подобных задач.

В настоящее время комплекс программ успешно используется в ОИЯИ, на математическом и физическом факультетах Монгольского Государственного Университета.

Апробация работы и публикации

Результаты, вошедшие в диссертацию, докладывались и обсуждались на Международном симпозиуме по численному анализу (Прага, 1987), на Международных совещаниях по нелинейным и турбулентным процессам в физике (Киев, 1989), по теории солитонов и их приложениям (Дубна, 1988), Всесоюзной конференции "Математическое моделирование: нелинейные проблемы и вычислительная математика" (Звенигород, 1988), на семинарах ЛВТА ОИЯИ, ИМ СО АН СССР.

Работа выполнена в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ ОИЯИ.

Основное содержание диссертации отражено в 25 публикациях в виде статей в журналах ЖВМ и МФ, ЯФ, Phys. Lett., в сборниках "Вычислительные системы", в трудах ИМ АН МНР, в ученых записках МонГУ, докладах, опубликованных в трудах международных совещаний по нелинейным и турбулентным

процессам в физике и по теории солитонов и их приложениям, в препринтах и сообщениях ОИЯИ.

Личный вклад автора

По теме диссертации автор имеет 7 самостоятельных публикаций. Кроме того, автор диссертации, работая в коллективе соавторов, был инициатором данных исследований. Им самостоятельно разработаны все принципиальные вопросы, относящиеся к теоретической части диссертации. Автор лично проводил реализацию на ЭВМ разработанных алгоритмов, поставил вычислительные эксперименты по решению упомянутых выше задач.

Структура диссертации

Реферируемая диссертация состоит из введения и шести глав. В первой части (главы 1-3) рассмотрены теоретические вопросы, касающиеся аппроксимации функций локальными сплайнами, построения сплайн-схем повышенной точности, обоснования модификации НАМН и выбора итерационного параметра для численного решения функциональных уравнений. Применению построенных в главах 2-3 алгоритмов для численного решения некоторых задач теоретической физики посвящена вторая часть диссертации (главы 4-6). Полный объем диссертации 251 страница. Диссертация содержит 37 таблиц, 2 рисунка и список литературы из 157 наименований.

Краткое содержание диссертации

Во введении к реферируемой диссертации выделяется класс задач, для которых необходимо разработать единый метод численного решения. Обосновывается выбор методов линеаризации и дискретизации. Дается краткое описание диссертации по главам и перечень основных результатов.

В главе 1 рассматриваются аппроксимационные свойства интерполяционных и близких к ним сплайнов. При этом всюду, за исключением §2, используется B-представление кубических сплайнов класса C^2.

$$S=\sum_{j=-1}^{N+1}\alpha_j B_j(x)\ , \qquad (4)$$

которое является удобным средством для приложений. Оно позволяет ввести в рассмотрение некоторые локальные сплайны.

В §1 сформулированы два типа краевых условий для интерполяционных кубических сплайнов в терминах коэффициентов разложения (4). Показана эквивалентность одного из них краевым условиям типа 4. Другой тип на равномерной сетке эквивалентен оптимальным краевым условиям. Установлены свойства коэффициентов разложения (4) для интерполяционного сплайна, представляющие интерес с точки зрения аппроксимации функций. В §2 рассмотрены два типа локальных кубических сплайнов класса C и показана неулучшаемость полученных для них оценок точности аппроксимации.

В §3 введены так называемые квазиинтерполяционные и локально- аппроксимационные сплайны, коэффициенты разложения которых определяются по явным формулам. Для них установлены оценки погрешностей на любой неравномерной сетке (теоремы 1.3, 1.4). Найдены точки суперсходимости этих сплайнов при некоторых ограничениях на соседние шаги сетки.

В §4 рассмотрен вопрос аппроксимации функций локально-интерполяционными кубическими сплайнами. Получены оценки приближения функции и ее производных. Для равномерной сетки

оценки являются точными (теорема 1.7). Для более гладкой функции получены асимптотические оценки приближения (теорема 1.9).

Глава 2 посвящена построению сплайн-схем повышенной точности для решения краевой задачи

$$\begin{aligned} &Lu=u''(x)+p(x)u'(x)+q(x)u(x)=r(x)\ , \quad x\in[a,b],\\ &l_1u=\bar\alpha_1 u(a)+\bar\beta_1 u'(a)=\gamma_1\ , \qquad (5)\\ &l_2u=\bar\alpha_2 u(b)+\bar\beta_2 u'(b)=\gamma_2\ . \end{aligned}$$

В §1 рассматривается метод сплайн-коллокации. Показано, что в случае равномерной сетки с помощью производных коллокационного сплайна можно аппроксимировать третью и четвертую производные решения задачи (5) (лемма 2.1). В §2 получено разложение коэффициентов коллокационного сплайна по степеням шага равномерной сетки и обоснована процедура Ричардсона уточнения решения на последовательности сеток.

В §3 на основе аппроксимационных свойств квазиитерполяционного сплайна построена пятиточечная сплайн-схема повышенной точности на равномерной сетке и предложен метод ее решения. Доказана теорема о сходимости приближенного решения и его производных. Схема легко распространяется на систему дифференциальных уравнений второго порядка.

В §4 построена трехточечная сплайн-схема повышенной точности на регулярной сетке. Доказана сходимость приближенного решения на неравномерной и равномерной сетках (теоремы 2.2 и 2.3). Все теоретические выводы относительно порядка сходимости приближенного решения подтверждаются численными расчетами.

Сходимость двух эволюционных процессов решения нелинейного уравнения (3) изучается в главе 3. Как известно, НАМН для уравнения (3) приводит к итерационному процессу

$$\varphi'(z_n)v_n=-\varphi(z_n) , \quad z_{n+1}=z_n+\tau_n v_n , \quad 0<\tau_n\le 1 , \quad n=0,1.... \tag{6}$$

В итерации (6) существенную роль играет параметр τ_n. В настоящее время часто используются "оптимальный" шаг, предложенный В.В.Ермаковым и Н.Н.Калиткиным, и шаг, вычисляемый по формуле

$$\tau_n= \alpha \frac{\|\varphi(z_{n-1})\|}{\|\varphi(z_n)\|} \tau_{n-1} , \quad n=1,2... , \tag{7}$$

которая была предложена И.В.Пузыниным, но не обоснована. В §1 этой главы показано, что выбор шага по формуле (7) с $\alpha=1$ позволяет уменьшать невязку уравнения (3) от итерации к итерации. При некоторых ограничениях относительно τ_0 получена оценка (теорема 3.1) скорости сходимости итерационного процесса (6), которая в пределе совпадает со скоростью сходимости метода Ньютона.

Возможность применения метода установления для решения нелинейных дифференциальных задач (1) рассматривается в §2. При ограничениях на функцию f имеет место монотонная сходимость итераций, основанных на комбинации метода установления и НАМН (теоремы 3.5 и 3.6). Установление монотонной сходимости приближенного решения позволяет сделать качественный вывод (теорема 3.7) о неотрицательности (неположительности) решения дифференциальной задачи (1).

§3 посвящен обоснованию обобщения (модификации) НАМН для уравнения (3), в котором оператор φ представляется в виде суммы двух операторов: $\varphi=\varphi_0+\varphi_1$. Вводя непрерывный параметр t ($0\le t<\infty$) и функцию включения $g(t)=1-\exp(-t)$ в нелинейный

оператор

$$\varphi(t,z(t))= \varphi_0(z(t))+g(t)\varphi_1(z(t)),$$

рассматривается абстрактная задача Коши

$$\frac{d}{dt} \varphi(t,z(t))=-\varphi(t,z(t)) , \quad z(0)=z_0 . \tag{8}$$

Доказываются существование решения задачи (8) при некоторых ограничениях относительно производных операторов φ_0, φ_1 и справедливость соотношения

$$\lim_{t\to\infty} z(t)= z^*,$$

где z^*-корень уравнения (3).

Дискретизация уравнения (8) по переменной t осуществляется, как обычно, по методу Эйлера и доказывается сходимость соответствующего итерационного процесса (теорема 3.10). Предлагается модификация этого итерационного процесса, приводящая к упрощению вычислений:

$$\varphi_0'(z_n)v_n= -\varphi(z_n)-g_n\varphi_1'(z_n)v_{n-1}, \tag{9a}$$

$$z_{n+1}= z_n+ \tau_n v_n, \quad n=0,1,.... \tag{9b}$$

Важным является то, что эволюционный ньютоновский процесс (8) обладает свойством регуляризации.

В §4 предлагается численный алгоритм решения спектральных краевых задач. Он построен с помощью обобщения НАМН и сплайн-схемы повышенной точности. Аналогичный вопрос для краевых задач изучается в §5.

В главе 4 изучена устойчивость солитонов нелинейного уравнения Шредингера с различными типами нелинейности, встречающихся в ряде теоретических моделей физики, включая ядерную гидродинамику, нелинейную оптику, плазму, теорию конденсированного состояния вещества и джозефсоновские контакты. Как известно, вопрос об устойчивости солитонов относительно возмущения специального вида в линейном приближении обычно сводится к изучению спектра собственных значений линеаризованного уравнения в зависимости от значения внешнего параметра задачи. В §1-2 исследуется устойчивость солитонов уравнений Шредингера

$$i\Phi_t+\Phi_{xx}-(1+2A)\Phi+2(A+2)\Phi|\Phi|^2-3\Phi|\Phi|^4=0, \quad 0<A<1 \tag{10}$$

и

$$i\Phi_t+\Phi_{xx}+2\Phi|\Phi|^2=-Fe^{i\Omega t}. \tag{11}$$

Вопрос об устойчивости солитонов уравнений (10) и (11) сводится к изучению зависимости от параметра собственных значений задач

$$\begin{aligned} &H(v)y-\lambda(v)Jy=0,\\ &y=0 \quad \text{при } |x|\to\infty \end{aligned} \tag{12}$$

и

$$\begin{aligned} &\left(L(\alpha)-(\lambda_1(\alpha)D_1+\lambda_2(\alpha)D_2)\right)\bar{y}=0,\\ &\bar{y}=0 \quad \text{при } |x|\to\infty \end{aligned} \tag{13}$$

соответственно. Здесь

$$H(v)=-\frac{d^2}{dx^2}I+v\frac{d}{dx}J+U(x), \quad |v|<2\sqrt{1-A},$$

$$I=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}, \quad J=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}, \quad U(x)=\begin{pmatrix}q_1&q_3\\q_3&q_2\end{pmatrix},$$

$$L(\alpha)=\begin{pmatrix}L_0(\alpha)&0&0&0\\0&L_1(\alpha)&0&0\\0&0&L_0(\alpha)&0\\0&0&0&L_1(\alpha)\end{pmatrix}, \quad D_1=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&-1&0\end{pmatrix},$$

$$D_2=\begin{pmatrix}0&0&0&-1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix}, \quad \begin{aligned}&L_0(\alpha)=-\frac{d^2}{dx^2}-(2V-\mathrm{cth}^2\alpha),\\ &L_1(\alpha)=-\frac{d^2}{dx^2}-(6V-1), \quad \alpha\in(0,\infty),\end{aligned}$$

q_i и V - выражения, содержащие действительную и мнимую части солитонов уравнений (10) и (11).

С помощью разработанного в главах 2,3 алгоритма численно решена серия задач на собственные значения (12), (13). Найдены критические значения параметров (α,v), являющиеся порогами устойчивости солитонов. В нелинейном приближении с помощью прямых численных расчетов исследована временная эволюция решения эволюционного уравнения (11) в §3.

В главе 5 развивается один подход, сводящий задачу рассеяния к решению нелинейной краевой задачи, явно не содержащей фазы рассеяния δ. В §1 рассматривается одноканальная задача рассеяния

$$u''+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)\right)u=0, \tag{14}$$

$$u(0)=0, \tag{15}$$

$$u(r)\approx\sin(kr-l\pi/2+\delta), \quad r\to\infty, \tag{16}$$

где потенциал $U(r)$ имеет асимптотику при $r\to\infty$

$$U(r)=\frac{c_2}{r^2}+\frac{c_3}{r^3}+\ldots \tag{16'}$$

Не исключено, что он имеет сингулярность в точке $r=0$. Задача состоит в нахождении фазы рассеяния δ при заданных значениях энергии k^2 и орбитального момента l.

С целью более точной постановки граничного условия при больших r учтены следующие члены в асимптотике решения (16):

$$u(r) = f_{0m}(r)\sin\alpha(r)+g_{0m}(r)\cos\alpha(r), \qquad (17)$$

$$\alpha(r)=kr-l\pi/2+\delta,$$

где

$$f_{0m}(r) = \sum_{l=0}^{m} a_l/r^l, \quad g_{0m}(r) = \sum_{l=1}^{m} b_l/r^l.$$

Асимптотика (17) позволяет поставить приближенное граничное условие в точке r=R, более близкой к точке r=0, чем граница интервала с тривиальным краевым условием (16)

$$(ug_{1m}-g_{0m}u')^2+(f_{1m}u-f_{0m}u')^2-(f_{0m}g_{1m}-f_{1m}g_{0m})^2 = 0, \ r=R, \qquad (18)$$

где

$$f_{1m}=f'_{0m}-kg_{0m}, \quad g_{1m}=g'_{0m}+kf_{0m}.$$

Таким образом, задача рассеяния сформулирована как нелинейная краевая задача (14), (15), (18). Прием построения нелинейного граничного условия, не содержащего фазы рассеяния, распространен в следующих параграфах (§2-§3) на задачу рассеяния с комплексным потенциалом и многоканальную задачу рассеяния. Идея исключения неизвестных параметров рассеяния из краевого условия, развитая в предыдущих параграфах, использована в §4 для вычисления коэффициентов прохождения и отражения в одномерной задаче рассеяния:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x,k)+(k^2-V(x))\psi(x,k) = 0, \quad k\in\mathbb{R},$$

$$\psi(x,k) \to D(k)e^{ikx}, \quad x \to +\infty,$$

$$\psi(x,k) \to e^{ikx}+T(k)e^{-ikx}, \quad x \to -\infty,$$

где V -вещественнозначная, кусочно-непрерывная на $\mathbb{R}$ функция, достаточно быстро стремящаяся к нулю при $|x| \to \infty$, так что выполняется условие

$$\int_{-\infty}^{\infty}|V(x)|dx < \infty.$$

В отличие от предыдущих случаев, здесь получена линейная

краевая задача для волновой функции $\psi(x,k)$.

Задача вычисления комплексных энергий ($k=k_1+ik_2$, $k_2<0$) уравнения Шредингера (14) сформулирована в §5 как спектральная краевая задача, для чего была использована идея привлечения последующих членов в асимптотике решения. Особенность задачи вычисления резонансных состояний состоит в том, что волновая функция не интегрируема с квадратом. Поэтому вместо обычного условия нормировки применяется условие

$$(u,u)_\alpha = 1, \qquad (19)$$

где

$$(u,v)_\alpha = \lim_{\alpha\to 0+0} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} u(r)v(r)dr.$$

Получаемые в главе 5 нелинейные краевые и спектральные краевые задачи решены с помощью итерационного процесса (9), основанного на методе сплайн-апроксимации и модификации НАМН. В процессе итераций требуется значительное время для вычисления коэффициентов и правой части системы линейных алгебраических уравнений (9а), и это становится особенно ощутимым, когда число итераций велико. В случае задачи рассеяния, в силу линейности уравнения (14), все коэффициенты системы (9а), за исключением только последнего уравнения, соответствующего краевому условию (18) в точке r=R, не зависят от номера итерации n. Это обстоятельство приводит к значительному сокращению счетного времени на ЭВМ. С помощью разработанного алгоритма вычислены фазы рассеяния для широкого набора действительных и комплексных потенциалов. Вычислены резонансные энергии уравнения Шредингера со сферическим потенциалом Вудса-Саксона. Отметим, что предлагаемый алгоритм вычисления резонансных энергий применим также в случае дискретного спектра с незначительным изменением краевого условия при $r\to\infty$. В этом случае условие нормировки (19) с $\alpha=0$ превращается в обычное условие нормировки. Эффективность и точность предложенных алгоритмов во всех рассматриваемых задачах продемонстрированы численными расчетами.

В главе 6 рассматривается задача двух кулоновских центров и метод ее решения. С помощью подходящего преобразования в §1 сформулированы краевые условия для волновых функций. В результате в случае дискретного спектра ($E<0$) поставлена спектральная краевая задача:

$$L_1\Phi\equiv\Phi''(\eta)-\frac{2(m+1)\eta}{1-\eta^2}\Phi'(\eta)+\left(\frac{ER^2}{2}+\frac{b\eta+\lambda-m(m+1)}{1-\eta^2}\right)\Phi(\eta)=0, \qquad (19)$$

$$-1\le\eta\le 1,$$

$$l_1\Phi\equiv\Phi'+\frac{\lambda-b-m(m+1)}{2(m+1)}\Phi=0, \quad \eta=-1,$$

$$l_2\Phi\equiv\Phi'-\frac{\lambda+b-m(m+1)}{2(m+1)}\Phi=0, \quad \eta=1, \qquad (20)$$

$$L_2 f\equiv f''(\xi)+\frac{2(m+1)\xi}{\xi^2-1}f'(\xi)+\left(\frac{ER^2}{2}+\frac{a\xi-\lambda+m(m+1)}{\xi^2-1}\right)f(\xi)=0, \qquad (21)$$

$$1\le\xi<\infty,$$

$$\bar{l}_1 f\equiv f'+\frac{a-\lambda+m(m+1)}{2(m+1)}f=0, \quad \xi=1,$$

$$\bar{l}_2 f\equiv f'+\left(p+\frac{m+1-\bar{a}}{\xi}+\frac{\lambda-\bar{a}-\bar{a}^2}{2p\xi^2}\right)f=0, \quad \xi\to\infty, \qquad (22)$$

$$\bar{a}=a/2p,\quad p=-ER^2/2,\quad a=(Z_1+Z_2)R,\quad b=(Z_2-Z_1)R,\quad 0\le R<\infty.$$

Уравнения (19) и (21) связаны между собой через искомые величины E и λ (константа разделения).

В случае непрерывного спектра ($E>0$) вместо радиального уравнения (21) рассматривается уравнение

$$\hat{L}_2F\equiv F''+\frac{2(m+1)\xi}{\xi(\xi^2-1)}F'+\left(c^2+\frac{a\xi-\lambda}{\xi^2-1}-\frac{(m+2)(m+1)}{\xi^2(\xi^2-1)}\right)F=0, \qquad (23)$$

$$c=kR/2,\quad 1\le\xi<\infty.$$

Граничные условия для функции F имеют вид

$$\bar{l}_1F\equiv F'+\frac{a-\lambda-(m+1)(m+2)}{2(m+1)}F=0, \quad \xi=1, \qquad (24)$$

$$F(\xi)\approx\sin\left(c\xi+\frac{a}{2c}\ln 2c\xi-\frac{\pi l}{2}+\Delta\right), \quad \xi\to\infty.$$

В этом случае параметр λ в радиальном уравнении (23) перестает быть произвольным и должен выбираться как собственное значение задачи (19), (20).

Задача (23), (24), по сути, является задачей рассеяния, и поэтому при $c\xi\to\infty$ для нее справедливо нелинейное граничное условие типа (18). Как и в главах 4, 5, для численного решения полученных задач на собственные значения и нелинейных граничных задач применяется разработанный алгоритм, основанный на модификации НАМН и методе сплайн-аппроксимации. Вычислены дискретные и непрерывные спектры для различных состояний и зарядов. В §2 строится алгоритм для вычисления матричных элементов. Сравнение численных результатов с имеющимися данными, полученными другими методами, показывает высокую точность и универсальность данного алгоритма.

Основные результаты и выводы

1. Развито В-представление кубических сплайнов класса C^2 и на его основе проведены все исследования по аппроксимации функций и по построению сплайн-схем повышенной точности.

2. Получены оценки погрешностей аппроксимации функций с помощью локальных кубических сплайнов и показана

неулучшаемость некоторых из них. Эти результаты являются новыми в теории приближения сплайнами.

3. Разработаны и обоснованы трех- и пятиточечные сплайн-схемы повышенной точности для решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Это позволяет получить приближенное решение, не отличающееся по порядку точности от интерполяционного сплайна. B-представление сплайнов позволило развить с единой точки зрения два известных приема уточнения приближенного решения для предлагаемых сплайн-схем.

4. Обоснован выбор итерационного параметра и установлена скорость сходимости итераций на основе НАМН для нелинейных задач, заданных в банаховом пространстве. Доказана монотонная сходимость метода установления для нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка при ограничениях на функцию f.

5. Обосновано обобщение НАМН для нелинейных операторных уравнений.

6. На основе обобщения НАМН в сочетании с методом сплайн-аппроксимации разработан единый алгоритм решения краевых и спектральных краевых задач для системы нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка с высокой точностью.

7. Развита постановка нелинейных граничных условий для задачи рассеяния и задачи двух центров, которая обеспечивает сокращение эффективной длины отрезка интегрирования. Разработаны алгоритмы вычисления дискретного и непрерывного спектров задачи рассеяния и задачи двух центров, а также матричных элементов этой задачи.

8. В качестве приложения разработанных алгоритмов численно решены задачи рассеяния для широкого набора потенциалов (потенциалы Юкавы и Морзе, статический потенциал атома водорода, сферически симметричный потенциал, комплексный потенциал, встречающийся в рассеянии заряженных частиц на нейтральные атомы, и другие). Вычислены резонансные энергии сферически симметричного ядра свинца (^{208}Pb). В задаче двух центров проведены расчеты термов и матричных элементов для различных состояний и зарядов ($Z_1=Z_2$; $Z_2=-Z_1=1$; $Z_1=36$, $Z_2=41$). Найдены критические значения параметров, управляющих устойчивостью солитонов. Полученные результаты представляют физический интерес.

9. Создан комплекс программ, реализующих разработанные алгоритмы.

10. Все разработанные в диссертации численные методы имеют самостоятельный теоретический и прикладной интерес.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Жанлав Т. О представлении интерполяционных кубических сплайнов через B-сплайны. В кн. Методы сплайн-функций. (Вычислительные системы, вып. 85) Новосибирск, 1981, 3.
2. Жанлав Т. О краевых условиях для интерполяционных кубических сплайнов. В кн. Приближение сплайнами. (Вычислительные системы, вып. 106) Новосибирск, 1984, 25.
3. Жанлав Т. Об интерполяционном локально-кубическом сплайне класса C. Ученые записки МонГУ. 1984, 1, 89.
4. Жанлав Т. О точках суперсходимости локальных кубических сплайнов. В сб. научных трудов ИМ АН МНР, 1983, 2, 40.

5. Жанлав Т. Уточнение оценок для локально-кубических сплайнов. В сб. научных трудов ИМ АН МНР, 1990, 8, 25.

6. Жанлав Т., Мирошниченко В.Л. Аппроксимация функций локально-интерполяционными кубическими сплайнами. В кн. Приближение сплайнами (Вычислительные системы, вып.137) Новосибирск, 1990, 3.

7. Жанлав Т., Жидков Е.П. Применение экстраполяции по Ричардсону к кубическим сплайнам. Препринт ОИЯИ, Р11-86-415, Дубна, 1986.

8. Жанлав Т. О методе сплайн-аппроксимации решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Препринт ОИЯИ, Р5-92-111, Дубна, 1992.

9. Жанлав Т. О трехточечной сплайн-схеме повышенной точности. ЖВМ и МФ, 1991, 31, 1, 40.

10. Жанлав Т., Пузынин И.В. О модификации непрерывного аналога метода Ньютона. Препринт ОИЯИ, Р11-91-100, Дубна, 1991, ЖВМ и МФ, 1992, 32, 1, 3.

11. Жанлав Т., Пузынин И.В. Итерационная схема для нелинейных задач, основанная на методе установления. Препринт ОИЯИ, Р11-91-259, Дубна, 1991.

12. Жанлав Т., Пузынин И.В. Сходимость итерационной ньютоновской схемы. Препринт ОИЯИ, Р5-91-559, Дубна, 1991, ЖВМ и МФ, 1992, 32, 6, 846.

13. Жанлав Т., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Алгоритм и программа решения задачи Штурма-Лиувилля с использованием сплайн-схемы повышенной точности. Препринт ОИЯИ, Р11-90-501, Дубна, 1990.

14. Бояджиев Т.П., Жанлав Т., Пузынин И.В. Численное исследование одной задачи на собственные значения, возникающей в теории устойчивости солитонов. Препринт ОИЯИ, Р5-89-423, Дубна, 1989.

15. Barashenkov I.V., Puzynin I.V., Zhanlav T. and Boyadjiev T.L. Stability of the moving bubbles in the Bose condensate. In Proceed. 4 international workshop "Solitons and applications" 1989, Dubna, world Sci. Singapore, 281.

16. Barashenkov I.V., Boyadjiev T.L., Puzynin I.V. and Zhanlav T. Stability of the moving bubbles in the system of interacting bosons.Phys. Lett, 1989, A135, 6, 125.

17. Жанлав Т., Пузынин И.В. Численное решение задачи на собственные значения, возникающей при исследовании нелинейного уравнения Шредингера с накачкой. Препринт ОИЯИ, Р11-90-213, Дубна, 1990.

18. Barashenkov I.V., Bogdan M.M., Zhanlav T. Instabilities and soliton structures in the driven nonlinear Schrodinger equation. Preprint JINR E5-89-817, Dubna, 1989. In Proceed. 4 international workshop on nonlinear and turbulent processes in physics. Nonlinear world V.1 Kiev USSR, 1989, world Sci. Singapore, 3.

19. Жанлав Т., Пузынин И.В. Численное решение одномерных нелинейных эволюционных задач методом сплайн-коллокаций. Препринт ОИЯИ, Р11-89-34, Дубна, 1989.

20. Жанлав Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. Схема сплайн-коллокации для численного решения одноканальной задачи рассеяния. Препринт ОИЯИ, Р11-88-823, Дубна, 1988.

21. Жанлав Т., Пузынин И.В. Численное решение задачи

рассеяния с комплексным потенциалом. Препринт ОИЯИ, Р11-89-643, Дубна, 1989.

22. Жанлав Т., Пузынин И.В. Многоканальная задача рассеяния в постановке нелинейной граничной задачи. Препринт ОИЯИ, Р11-90-382, Дубна, 1990.

23. Жанлав Т., Пузынин И.В. О вычислении коэффициентов прозрачности и отражения в одномерной задаче рассеяния. Препринт ОИЯИ, Р11-90-381, Дубна, 1990.

24. Жанлав Т., Пузынин И.В. Вычисление комплексных энергий резонансных состояний. Препринт ОИЯИ, Р11-91-351, Дубна, 1991, ЯФ, 1992, 55, 3, 630.

25. Жанлав Т., Павлов Д.В., Пузынин И.В. Численное решение задачи двух центров. Препринт ОИЯИ, Р11-91-138, Дубна, 1991.

**Рукопись поступила в издательский отдел
30 июня 1992 года.**