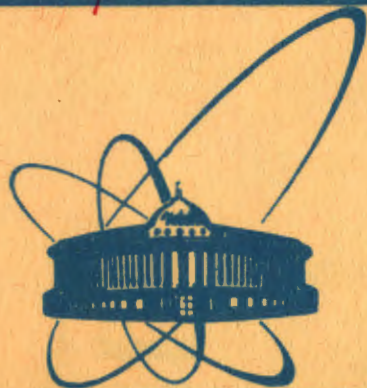


1383/82

29/IV-82



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P11-82-6

Л.Н.Сомов*

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ
ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ СИСТЕМЫ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
С ПОВЫШЕННЫМ ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТИ
КОНЕЧНОРАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ

1982

1. Введение

Для решения задачи о вычислении уровней энергии M^- - мезомолекул в ОИЯИ был создан комплекс программ /1-5/, который позволил с достаточной точностью вычислить энергию связи мезомолекул /6/.

Для более детального изучения M^- - мезомолекулярных процессов в смеси изотопов водорода и, в частности, для описания процесса резонансного образования мезомолекул dtm /7/ необходимо знать их уровни энергии с точностью $\sim 0,01$ эВ, что составляет 10^{-6} мезоатомных единиц энергии $\epsilon_M = 2m_p R_y = 5626,52$ эВ. Для достижения относительной точности $\sim 10^{-2}$ и выше вычисления собственных значений и собственных функций при решении задачи 3 тел в адиабатическом представлении /8-10/ необходимо расширить систему уравнений и при этом повысить порядок точности конечноразностной аппроксимации исходной системы дифференциальных уравнений.

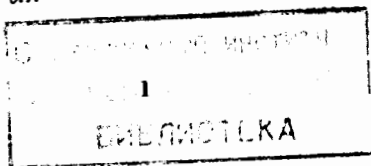
В настоящее время уровни энергий вычислены с точностью $\sim 0,1 - 0,05$ эВ /6/, в то время как точность эксперимента /11/, из которого можно извлечь значения уровней мезомолекулярных систем, — порядка нескольких тысячных долей электрон-вольта. Из этого сравнения видно, что задача повышения точности вычисления уровней энергии мезомолекулярных систем весьма актуальна.

В работе излагается алгоритм, использующий схемы повышенной точности конечноразностной аппроксимации до h^6 , где h — шаг конечноразностной сетки, без существенных изменений существующих программ /1-5/. Эффективность вычислительной схемы демонстрируется на примере задачи, имеющей аналитическое решение.

2. Постановка задачи

Для системы линейных дифференциальных уравнений второго порядка

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}(x) - 2\hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}(x) + (\lambda I - \hat{H}(x)) \bar{y}(x) = 0 \quad (1a)$$



требуется найти собственное значение λ и соответствующий собственный вектор $\bar{y}(x)$, удовлетворяющие граничным условиям:

$$\hat{A}(\lambda) \frac{d}{dx} \bar{y}(x) \Big|_{x=x_0} + \hat{B}(\lambda) \bar{y}(x) \Big|_{x=x_0} = 0, \quad (1б)$$

$$\hat{T}(\lambda) \frac{d}{dx} \bar{y}(x) \Big|_{x=x_m} + \hat{S}(\lambda) \bar{y}(x) \Big|_{x=x_m} = 0. \quad (1в)$$

Здесь $Q(x)$ и $H(x)$ - матрицы размерности $N_2 \times N_2$, заданные на отрезке $[x_0, x_m]$ в виде таблиц с постоянным шагом по x (\hat{Q} и \hat{H} - не предполагаются симметричными и $2 \operatorname{div} \hat{Q} \hat{y} = \hat{H}i; - \hat{H}y_i$); I - единичная матрица; $\hat{A}(\lambda)$, $\hat{B}(\lambda)$, $\hat{T}(\lambda)$ и $\hat{S}(\lambda)$ - матрицы размерности $N_2 \times N_2$; $\bar{y}(x)$ - вектор размерности N_2 .

Предполагается, что изолированное решение задачи (1) (λ^* , $\bar{y}^*(x)$) существует и известно начальное приближение (λ_0 , $\bar{y}_0(x)$) к этому решению.

Для решения задачи (1) применяется модифицированный метод Ньютона [3], который является частным случаем непрерывного аналога метода Ньютона [1, 12], на основании которого были сделаны последние алгоритмы [4, 5]. Используя итерационную схему [12], приводим уравнение для итерационной поправки к виду:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dx^2} \bar{v}_k^{(k)}(x) - 2 \hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(k)}(x) + (\lambda_0 I - \hat{H}(x)) \bar{v}_k^{(k)}(x) = \\ & - \left[\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}_k(x) - 2 \hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + (\lambda_0 I - \hat{H}(x)) \bar{y}_k(x) \right], \quad (2) \\ & \hat{A}(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(k)} + \hat{B}(\lambda_0) \bar{v}_k^{(k)} = - \left[\hat{A}(\lambda) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + \hat{B}(\lambda) \bar{y}_k(x) \right], \\ & \hat{T}(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(k)} + \hat{S}(\lambda_0) \bar{v}_k^{(k)} = - \left[\hat{T}(\lambda) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + \hat{S}(\lambda) \bar{y}_k(x) \right], \end{aligned}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{v}_k^{(k)}(x) - 2 \hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(k)}(x) + (\lambda_0 I - \hat{H}(x)) \bar{v}_k^{(k)}(x) = - \bar{y}_k(x),$$

$$A(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(k)} + B(\lambda_0) \bar{v}_k^{(k)} = - \left[\frac{dA(\lambda)}{d\lambda} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + \frac{dB(\lambda)}{d\lambda} \bar{y}_k(x) \right],$$

$$T(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(k)} + S(\lambda_0) \bar{v}_k^{(k)} = - \left[\frac{dT(\lambda)}{d\lambda} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + \frac{dS(\lambda)}{d\lambda} \bar{y}_k(x) \right], \quad (3)$$

где

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \mu_k,$$

$$\bar{y}_{k+1}(x) = \bar{y}_k(x) + \bar{v}_k(x),$$

(4)

$$\bar{v}_k(x) = \bar{v}_k^{(k)}(x) + \mu_k \bar{v}_k^{(k)}(x),$$

а поправка к собственному значению находится из условия нормировки решения уравнения (1) ($\bar{y} \cdot \bar{y}$) = I:

$$\mu_k = [1 - (\bar{y}_k \cdot \bar{y}_k) - 2(\bar{v}_k^{(k)} \cdot \bar{y}_k)] / 2(\bar{v}_k^{(k)} \cdot \bar{y}_k). \quad (5)$$

Здесь k - номер итерации.

Задачи (2) и (3) решаются методом конечных разностей порядка h^2 , где h - шаг разностной сетки. Уравнения (2) и (3) замещаются конечноразностными

$$\hat{N}_i \bar{v}_{k,i+1}^{(k)} + \hat{M}_i(\lambda_0) \bar{v}_{k,i}^{(k)} + \hat{R}_i \bar{v}_{k,i-1}^{(k)} = \bar{F}_i^{(k)}, \quad \ell = 1, 2, \quad (6)$$

$$\hat{M}_i(\lambda_0) = h^2 \lambda_0 I - h^2 \hat{H}(x_i),$$

$$\hat{N}_i = I + h \hat{Q}(x_i),$$

$$\hat{R}_i = I - h \hat{Q}(x_i),$$

$$\bar{F}_i^{(k)} = - \left[\hat{N}_i \bar{y}_{k,i+1} + \hat{M}_i(\lambda_k) \bar{y}_{k,i} + \hat{R}_i \bar{y}_{k,i-1} \right],$$

$$\bar{F}_i^{(2)} = - h^2 \bar{y}_{k,i},$$

с граничными условиями (выпишем их только для уравнения (2)):

$$\begin{aligned} & \hat{A}(\lambda_0) (3 \bar{v}_{k,1}^{(k)} - 4 \bar{v}_{k,2}^{(k)} + \bar{v}_{k,3}^{(k)}) + 2h \hat{B}(\lambda_0) \bar{v}_{k,1}^{(k)} = \\ & = - \left[\frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=\lambda_k} (3 \bar{y}_{k,1} - 4 \bar{y}_{k,2} + \bar{y}_{k,3}) + 2h \frac{d\hat{B}(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=\lambda_k} \bar{y}_{k,1} \right], \quad (7) \end{aligned}$$

$$\hat{T}(\lambda_0) (\bar{U}_{k,N-2}^{(2)} - 4\bar{U}_{k,N-1}^{(2)} + 3\bar{U}_{k,N}^{(2)}) + 2h \hat{S}(\lambda_0) \bar{U}_{k,N}^{(2)} =$$

$$= - \left[\frac{dT(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=\lambda_k} (y_{k,N-2} - 4y_{k,N-1} + 3y_{k,N}) + 2h \frac{dS(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=\lambda_k} y_{k,N} \right].$$

Система алгебраических уравнений (6) и (7) решается методом прогонки /13/:

$$\bar{U}_{k,i} = \hat{C}_i \bar{U}_{k,i+1} + \bar{D}_i, \quad (8)$$

где

$$\hat{C}_i = \left[(3 - N_2^{-1} R_2) A(\lambda_0) + 2h B(\lambda_0) \right]^{-1} \times$$

$$\times A(\lambda_0) \left[4 + N_2^{-1} M_2(\lambda_0) \right],$$

$$\bar{D}_i^{(2)} = - \left[(3 - N_2^{-1} R_2) A(\lambda_0) + 2h B(\lambda_0) \right]^{-1} \times$$

$$\times \left[\frac{dA(\lambda)}{d\lambda} (3y_{k,i-1} - 4y_{k,i} + y_{k,i+1}) + 2h \frac{dR_1(\lambda)}{d\lambda} y_{k,i-1} - A(\lambda_0) N_2^{-1} h y_{k,i} \right],$$

$$\hat{C}_i = - \left[M_i(\lambda_0) + R_i \hat{C}_{i-1} \right]^{-1} N_i,$$

$$\bar{D}_i^{(2)} = - \left[M_i(\lambda_0) + R_i \hat{C}_{i-1} \right]^{-1} \left[h^2 y_{k,i} + R_i \bar{D}_{i-1}^{(2)} \right],$$

$$\bar{U}_{k,N}^{(2)} = - \left[T(\lambda_0) (C_{N-2} - 4) C_{N-1} + 3T(\lambda_0) + 3h S(\lambda_0) \right]^{-1} \times$$

$$\times \left[\frac{dT(\lambda)}{d\lambda} (y_{k,N-2} - 4y_{k,N-1} + 3y_{k,N}) + \right.$$

$$\left. + 2h \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} y_{k,N} - T(\lambda_0) \bar{D}_{N-2}^{(2)} - T(\lambda_0) (C_{N-2} - 4) \bar{D}_{N-1}^{(2)} \right].$$

Итерационный процесс (2) - (8) повторяется до выполнения условия

$$\delta = \max_{i=1, N} \delta_k(i) < \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ достаточно мало, а

$$\delta_k(i) = (\hat{N}_i \bar{y}_{k,i+1} + \hat{M}_i(\lambda_k) \bar{y}_{k,i} + \hat{R}_i \bar{y}_{k,i-1}) / h^2 \quad (9)$$

есть невязка уравнения (6).

3. Аппроксимация задачи с повышенным порядком точности конечноразностной схемы

В данной работе реализована конечноразностная аппроксимация дифференциальных уравнений второго порядка для итерационных поправок четвертого до h^4 и шестого до h^6 порядков (h - шаг конечноразностной сетки). Идея и обоснование используемого метода изложены в работах /14-15/. Его сущность заключается в следующем. В отличие от /1-5/, где использовалась аппроксимация оператора дифференцирования конечными разностями второго порядка точности, в данной работе операторы аппроксимируются конечными разностями четвертого и шестого порядков точности, а именно:

$$\frac{d}{dx} \bar{y}_i = \frac{1}{h} \left\{ \Delta - \frac{1}{6} \Delta^3 + \frac{1}{30} \Delta^5 \right\} \bar{y}_i, \quad (10)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}_i = \frac{1}{h^2} \left\{ \Delta^2 - \frac{1}{12} \Delta^4 + \frac{1}{90} \Delta^6 \right\} \bar{y}_i.$$

Уравнение (3) аппроксимируется

$$\hat{N}_i \bar{U}_{k,i+1}^{(2)} + \hat{M}_i(\lambda_0) \bar{U}_{k,i}^{(2)} + \hat{R}_i \bar{U}_{k,i-1}^{(2)} =$$

$$= \left[\frac{1}{12} \Delta^4 \bar{U}_{k,i-2}^{(2)} - \frac{1}{90} \Delta^6 \bar{U}_{k,i-3}^{(2)} - 2\hat{Q}_i \cdot h \cdot \left(\frac{1}{6} \Delta^3 \bar{U}_{k,i-\frac{1}{2}}^{(2)} - \frac{1}{30} \Delta^5 \bar{U}_{k,i-\frac{1}{2}}^{(2)} \right) + \bar{F}_i^{(2)} \right], \quad (11)$$

где Δ - оператор конечной разности и введены обозначения

$$\Delta \vartheta_i = \vartheta_{i+1} - \vartheta_i,$$

$$\Delta \vartheta_{i-\frac{1}{2}} = (\Delta \vartheta_{i-1} + \Delta \vartheta_i) / 2,$$

$$\Delta^3 \vartheta_{i-\frac{1}{2}} = (\Delta^3 \vartheta_{i-2} + \Delta^3 \vartheta_{i-1}) / 2,$$

$$\Delta^5 \vartheta_{i-\frac{1}{2}} = (\Delta^5 \vartheta_{i-3} + \Delta^5 \vartheta_{i-2}) / 2.$$

\hat{N}_i , \hat{M}_i и \hat{R}_i определены формулами (6). В крайних точках X_0

и X_m используются интерполяционные формулы Гаусса для интерполирования вперед и назад /16/.

Заметим, что точность интерполирования в этом случае хуже $\sim h^3$, если используется схема порядка точности h^4 , и $\sim h^5$, если используется схема порядка точности h^6 . Эта "порча" точности происходит лишь в нескольких первых и последних точках. Как показывают численные эксперименты, это не ухудшает точности вычисления собственных функций на основном интервале их определения и не сказывается на точности определения собственного значения. Явный вид операторов центральной разности приведен в приложении. Полученное уравнение аппроксимирует исходную задачу с той точностью, какого порядка малости члены по h оставлены. Естественно, что если мы отбрасываем члены, имеющие порядок малости выше h^2 , получаем исходную систему (6). Уравнение (II) решаем методом итерации. Для этого строим "внутренний" итерационный процесс:

$$\begin{aligned} \hat{N}_i \bar{v}_{x,i+1}^{(2)}(l+1) + \hat{M}_i(\lambda_0) \bar{v}_{x,i}^{(2)}(l+1) + \hat{R}_i \bar{v}_{x,i-1}^{(2)}(l+1) = \\ = \left[\frac{1}{12} \Delta^4 - \frac{1}{90} \Delta^6 + \hat{Q}_i \cdot h \cdot \left(\frac{1}{6} \Delta^3 - \frac{1}{30} \Delta^5 \right) \right] \bar{v}_i^{(2)}(l) + \bar{F}_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (12)$$

На первом шаге $l = 0$ полагаем $\bar{v}_i^{(2)}(0) = 0$ и с помощью метода прогонки находим $\bar{v}_i^{(2)}(1)$. Далее, подставляем вычисленные значения в правую часть уравнения (12), находим методом прогонки $\bar{v}_i^{(2)}(2)$ и повторяем процесс до достижения сходимости. Экспериментальные исследования сходимости внутреннего итерационного процесса показывают, что достаточно сделать 2-3 итерации, чтобы точность вычисления итерационных поправок соответствовала точности используемой схемы. В свою очередь, как показывают исследования модифицированного метода Ньютона /3/, внешний итерационный процесс устойчив к такого рода искажениям итерационных поправок.

Увеличение счетного времени при использовании рассматриваемой схемы незначительно, так как основная часть времени тратится на нахождение прогоночного коэффициента C_i (N_2^3 операций, где N_2 - размерность системы), в то время как для вычисления коэффициента 2_i , который зависит от правой части уравнения (12), достаточно $\sim N_2^2$ операций (см., например, /13/).

На рассмотренном ниже примере демонстрируется сходимость внутреннего итерационного процесса.

Таблица I. Значение волновой функции и энергии в зависимости от порядка точности конечноразностной схемы. В пятой колонке дано для сравнения точное аналитическое решение уравнения (13) *

x	h^2	h^4	h^6	аналитическое решение
0,0	0,60825748	0,60848971	0,60848768	0,60848766
0,5	0,66752260	0,66763319	0,66763204	0,66763204
1,0	0,64946295	0,64948875	0,64948853	0,64948853
1,5	0,57976227	0,57973326	0,57973354	0,57973354
2,0	0,48663412	0,48657252	0,48657307	0,48657307
3,0	0,30428852	0,30412482	0,30412549	0,30412549
4,0	0,17333521	0,17326051	0,17326115	0,17326115
5,0	0,09419028	0,09413410	0,09413464	0,09413464
λ	-0,43511846	-0,43531302	-0,43533117	-0,43533116

* Шаг конечноразностной схемы брался равным $h = 0,05$; значение функции в точке $X_m = 30$ полагалось равным нулю.

Таблица 2а. Сходимость итерационного процесса (12) для функции $\varphi^{(k)}(x)$

в зависимости от числа итераций ℓ

x	ℓ	1	3	5	7	9
0,0	0,44819464 E+01	0,45684256 E+01	0,45682986 E+01	0,45682894 E+01	0,45682889 E+01	0,45682889 E+01
8,22	0,93088881 E-01	0,93707499 E-01	0,93706431 E-01	0,93706359 E-01	0,93706355 E-01	0,93706355 E-01
24,03	0,47851745 E-03	0,47695989 E-03	0,47695609 E-03	0,47695591 E-03	0,47695590 E-03	0,47695590 E-03
31,94	0,24254140 E-05	0,24069353 E-05	0,24069245 E-05	0,24069241 E-05	0,24069240 E-05	0,24069240 E-05

Таблица 2б. Сходимость итерационного процесса (12) для функции $\psi^{(k)}(x)$

в зависимости от числа итераций ℓ

x	ℓ	1	3	5	7	9
0,0	-0,30934315 E-02	-0,32271272 E-02	-0,32271441 E-02	-0,32271385 E-02	-0,32271382 E-02	-0,32271382 E-02
8,22	0,48289670 E-04	0,47311205 E-04	0,47311174 E-04	0,47311219 E-04	0,47311222 E-04	0,47311222 E-04
24,03	0,15979577 E-05	0,15949780 E-05	0,15949794 E-05	0,15949795 E-05	0,15949795 E-05	0,15949795 E-05
31,94	0,18976056 E-07	0,18925572 E-07	0,18925577 E-07	0,18925577 E-05	0,18925577 E-05	0,18925577 E-07

4. Численный пример

Для численной иллюстрации и выяснения скорости сходимости изложенного итерационного процесса задача (I) была решена для случая потенциала Морзе $V(x)$:

$$Q(x) \equiv 0, \\ H(x) = 2 \cdot M \cdot D (e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad x \geq 0, \quad (13)$$

а искомая собственная функция $Y(x)$ удовлетворяет граничным условиям $Y(0) = const$, $Y(x) = 0$ при $x \rightarrow \infty$. В этом случае задача (I) имеет аналитическое решение

$$\lambda = -2MD \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{2MD}} \right]^2, \\ Y(x) = C_0 \xi^\rho \cdot \exp(-\xi/2), \quad (14)$$

где

$$\xi = 2\sqrt{2MD}/\alpha \cdot \exp(-\alpha \cdot x), \\ \rho = \sqrt{-\lambda}/\alpha.$$

Константы M , α , D заданы, причем $\sqrt{2MD}/\alpha > \frac{1}{2}$.

Результаты сравнения приближенного и аналитического решения приведены в таблице I. Из нее видно, что при $h = 0.05$ относительная погрешность вычислений соответственно составляет: для итерационной схемы со вторым порядком аппроксимации $\epsilon \sim 10^{-3}$; с включением конечно-разностного оператора Δ^4 $\epsilon \sim 10^{-5}$, а при включении конечно-разностных операторов до шестого порядка точности относительная погрешность $\epsilon \sim 10^{-7}$. Число итераций ℓ , необходимых для получения такой точности, ~ 3 , причем число это определялось экспериментально. Сходимость итерационных поправок к функциям $\varphi^{(k)}$ и $\psi^{(k)}$ в зависимости от числа итераций ℓ иллюстрируется таблицами 2а - 2б.

5. Заключение

Описанный алгоритм позволяет без существенных изменений имеющихся программ ⁴⁻⁸ повысить порядок точности конечно-разностной схемы.

В заключение автор выражает благодарность Л.И.Пономареву за дискуссию, инициировавшие данную работу, И.В.Пузынину за полезные и плодотворные обсуждения и В.С.Мележику за большую помощь в работе.

Приложение

Выпишем явный вид операторов конечной разности, используемых в работе, через значения функций:

$$\Delta^3 y_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2h} (-y_{i-2} + 2y_{i-1} - 2y_{i+1} + y_{i+2}),$$

$$\Delta^4 y_{i-2} = \frac{1}{2h} (-y_{i-2} + 4y_{i-1} - 6y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}),$$

$$\Delta^5 y_{i-\frac{3}{2}} = \frac{1}{2h} (-y_{i-3} + 4y_{i-2} - 5y_{i-1} + 5y_{i+1} - 4y_{i+2} + y_{i+3}),$$

$$\Delta^6 y_{i-3} = \frac{1}{2h} (y_{i-3} - 6y_{i-2} + 15y_{i-1} - 20y_i + 15y_{i+1} - 6y_{i+2} + y_{i+3}).$$

Для постановки граничных условий выпишем значения производной в конечных точках $\frac{1}{16}$.

а) Аппроксимация четвертого порядка точности:

$$y_0' = \frac{1}{12h} (-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4),$$

$$y_1' = \frac{1}{12h} (-3y_0 - 10y_1 + 18y_2 - 6y_3 + y_4),$$

$$y_2' = \frac{1}{12h} (y_0 - 8y_1 + 8y_3 + y_4),$$

$$y_3' = \frac{1}{12h} (-y_0 + 6y_1 - 18y_2 + 10y_3 + 3y_4),$$

$$y_4' = \frac{1}{12h} (3y_0 - 16y_1 + 36y_2 - 48y_3 + 25y_4).$$

Для вычисления невязки (9) выпишем значения вторых производных через значения функций в узлах конечноразностной сетки.

а) Аппроксимация четвертого порядка точности *):

$$y_0'' = \frac{1}{24h^2} (70y_0 - 208y_1 + 228y_2 - 112y_3 + 22y_4),$$

$$y_1'' = \frac{1}{24h^2} (22y_0 - 40y_1 + 12y_2 + 8y_3 - 2y_4),$$

$$y_2'' = \frac{1}{24h^2} (-2y_0 + 32y_1 - 6(y_2 + 32y_3 - 2y_4)),$$

$$y_3'' = \frac{1}{24h^2} (-2y_0 + 8y_1 + 12y_2 - 40y_3 + 22y_4),$$

$$y_4'' = \frac{1}{24h^2} (22y_0 - 112y_1 + 228y_2 - 208y_3 + 70y_4).$$

*) Заметим, что точность аппроксимации второй производной ухудшается на порядок по h в крайних точках.

Литература

1. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сб. Algorithms and Programs. КРКИ-34, Budapest, 1974, p.93.
2. Витницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12787, Дубна, 1980.
3. Витницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12788, Дубна, 1980.
4. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12789, Дубна, 1980.
5. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P5-12790, Дубна, 1980.
6. Витницкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Трускова Н.Ф. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
7. Витницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1978, 74, с.847.
8. Ponomarev L.I. and Vinitzky S.I. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys. 1979, 12B, p.567.
9. Ponomarev L.I., Vinitzky S.I. and Vukajlovic F.R. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1980, 13B, p.847.
10. Вукайлович Ф.Р., Пономарев Л.И., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P4-80-442, Дубна, 1980.
11. Быстрицкий В.М., Джелепов В.П., Петрухин В.И., Руденко А.И., Сомов Л.Н., Суворов В.М., Фильченков В.В., Кемниц Г., Кованский Н.Н., Хоменко Б.А., Хорват Д. ЖЭТФ, 1979, 75, с.460.
12. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, с.127.
13. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., "Наука", 1977.
14. Волков Е.А. Высшая математика. 1957, I, с.62.
15. Watt J.M. Comp.J. 1968, 11, p.77.
16. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. М., Физматгиз, 1959.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, т.3, М., Физматгиз, 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 января 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д1,2-9224	IV Международный семинар по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1975.	3 р. 60 к.
Д-9920	Труды Международной конференции по избранным вопросам структуры ядра. Дубна, 1976.	3 р. 50 к.
Д9-10500	Труды II Симпозиума по коллективным методам ускорения. Дубна, 1976.	2 р. 50 к.
Д2-10533	Труды X Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Баку, 1976.	3 р. 50 к.
Д13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
Д17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
Д6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Сомов Л.Н. P11-82-6
Алгоритм решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений с повышенным порядком точности конечноразностной схемы

Описан алгоритм численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы линейных дифференциальных уравнений с точностью конечноразностной аппроксимации до h^6 , где h - шаг конечноразностной сетки. Оператор дифференцирования аппроксимировался разностями второго порядка точности и разностями следующих порядков по h . Разности порядка точности выше h^2 рассматриваются как возмущение оператора второго порядка точности. Дифференциальное уравнение с таким возмущением решается методом итераций. На примере решения задачи на нахождение дискретного спектра в потенциале Морзе показана эффективность описанного алгоритма. Предложенная схема применяется при решении задачи на связанные состояния μ -мезомолекулярных систем.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Somov L.N. P11-82-6
Algorithm for Solving the Sturm-Liouville Partial Problem for a System of Differential Equations with Increased Accuracy Order of Finite-Difference Scheme

An algorithm for numerical solution of the Sturm-Liouville problem for a system of linear differential equations is described with an up to h^6 accuracy of finite-difference approximation, where h is a finite-difference grid spacing. The differential operator was approximated by differences of the second order of accuracy and differences of consecutive orders over h . The differences with an order of accuracy higher than h^2 are considered as a perturbation to an operator of the second order of accuracy. A differential equation with such a perturbation is solved using the iteration method. The efficiency of the described algorithm is demonstrated by the solution of a problem of finding a discrete spectrum in the Morse potential. The suggested scheme is used for solving problems dealing with bound states of μ -mesomolecular systems.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.