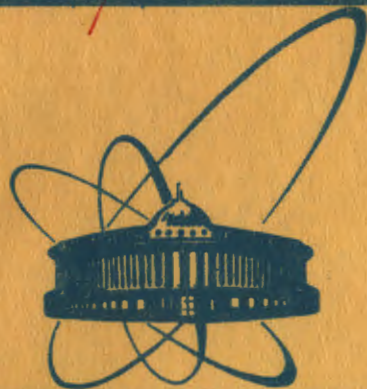


1381/82

29/III-82



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P11-82-97

Д.Баатар, Т.П.Пузынина, И.В.Пузынин

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ
МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ
НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
И ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ
РАЗНОСТНОГО РЕШЕНИЯ**

1982

I. Введение

К численному решению многопараметрических задач на собственные значения приводят исследования физических систем в рамках некоторых математических моделей, описываемых функциональными и, в общем случае, нелинейными уравнениями.

В классе обыкновенных дифференциальных операторов отметим задачу на собственные значения для систем уравнений

$$\varphi_i^{(2)}(\lambda, \bar{u}) \equiv \left[\frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\lambda, z) \right] u_i(z) = 0, \quad a_i < z < b_i, \quad (I.1)$$

$$\bar{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_N), \quad i = 1, \dots, N,$$

связанных вектором $\bar{\lambda}$ вещественных параметров с граничными условиями

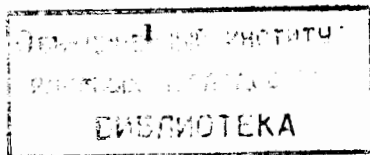
$$\varphi_j^{(2)}(\lambda, \bar{u}) \equiv \left[f_j^1(\lambda, z) \frac{d}{dz} + g_j^2(\lambda, z) \right] u_j(z) \Big|_{z=z_{ij}} = 0, \quad (I.2)$$

$j = 1, 2; \quad z_{i1} = a_i, \quad z_{i2} = b_i.$

Действительные функции $Q_i(\lambda, z)$ являются достаточно гладкими в областях $\{a_i < z < b_i, \|\bar{\lambda}\| < \infty\}$, а функции $f_j^1(\lambda, z)$, $g_j^2(\lambda, z)$ определены для $\|\bar{\lambda}\| < \infty$ в граничных точках $z = z_{ij}$, причем $f_j^1(\lambda, z_{ij}) + f_j^2(\lambda, z_{ij}) > 0$, и являются достаточно гладкими по $\bar{\lambda}$. Требуется найти такие векторы $\bar{\lambda}$, которым соответствуют нетривиальные решения $\bar{u} = (u_1, \dots, u_N)$ задачи (I.1)-(I.2).

Как отмечено в работе ^{1/}, задача (I.1)-(I.2) часто появляется при решении дифференциальных уравнений с частными производными методом разделения переменных. В квантовой механике системы (I.1) с сингулярными граничными условиями возникают при решении уравнения Шредингера. В качестве примеров можно указать задачу о двух кулоновских центрах ^{2/}, задачу об эффекте Штарке для атома водорода ^{3/} и другие.

Спектральная теория задачи (I.1)-(I.2) развита для случая линейной зависимости функций $Q_i(\lambda, z)$ от компонент $\bar{\lambda}$ и независимос-



ти от них граничных условий^{/1/}. Для этого случая сформулированы аналоги теорем Штурма для задачи (I.1)-(I.2) и соответствующей разностной задачи^{/4,5/}. В работе^{/5/} исследованы полнота собственных функций задачи и разложимость в ряд по ним достаточно гладких функций. Исследование двухпараметрической задачи содержится в работе^{/6/}.

С задачей (I.1)-(I.2) тесно связана многопараметрическая спектральная задача для одного дифференциального оператора с многоточечными граничными условиями для собственных функций. Наиболее полно исследована двухпараметрическая задача^{/7/}, встречающаяся, например, в некоторых разделах теоретической механики^{/8/}. Доказана теорема существования решений этой задачи для специальной нелинейной зависимости оператора от параметров и граничных условий, не зависящих от параметров^{/7/}.

Для приближенного решения рассматриваемых спектральных задач развиты различные подходы. Широко используется сведение краевой задачи к задаче Коши и нахождению спектральных параметров методом "стрельбы" путем численного решения последней в некотором итерационном процессе^{/8,9/}. Применяется также разложение собственных функций по определенному базису в сочетании с методами Бубнова-Галеркина или коллокации^{/10/}. В работе^{/11/} собственные функции двухпараметрической сингулярной задачи представляются рядами в окрестностях узловых точек сетки по независимым переменным и строится итерационная процедура нахождения собственных параметров. В работе^{/12/} для нелинейной двухпараметрической задачи применяется ньютоновская квазилинеаризация, причем последовательности линейных задач решаются методом сплайн-аппроксимации в комбинации с методом конечных разностей. Метод конечных разностей широко применяется в спектральных задачах благодаря развитой теории разностных задач на собственные значения^{/13/} и эффективным методам уточнения разностных решений^{/14/}. Например, в работе^{/6/} дан алгоритм решения двухпараметрической задачи (I.1)-(I.2) с линейной зависимостью коэффициентов уравнений от параметров, основанный на методе установления^{/15/} и разностной аппроксимации задачи.

Для решения разностных уравнений, аппроксимирующих спектральные задачи, эффективно применяется метод Ньютона. В работе^{/16/} этот метод успешно применен к численному решению задачи двух кулоновских центров. Ньютоновская итерационная процедура для линейной двухпараметрической задачи, в которой для нахождения итерационных поправок к параметрам используется отношение Рэлея, предложена в работе^{/17/}.

Отметим, что спектральные задачи математических моделей квантовой механики имеют определенные особенности. Как правило, граничные

задачи ставятся на полубесконечных или бесконечных интервалах изменения независимых переменных, а искомые спектральные параметры могут одновременно принадлежать дискретным и непрерывным спектрам соответствующих операторов в системе (I.1). Нередко в таких задачах методы разложения решений по базисам и "стрельбы" оказываются неэффективными: первые - из-за трудности выбора подходящего базиса, вторые - из-за неустойчивости решений. В работе^{/18/} представлена численная схема решения двухпараметрической частичной спектральной задачи (I.1)-(I.2) на основе непрерывного аналога метода Ньютона, который применялся ранее к разработке единых алгоритмов решения задач дискретного^{/19/} и непрерывного^{/20/} спектров. В работе^{/21/} приведено решение с помощью этой схемы задачи об эффекте Штарка.

Данная работа, обобщающая^{/18/}, содержит описание вычислительной схемы решения частичной задачи на собственные значения (I.1)-(I.2). Изучается зависимость точности результатов от порядка разностной аппроксимации задачи. Выполнены численные исследования сходимости предложенной итерационной схемы и результатов в зависимости от параметров аппроксимации сингулярной краевой задачи. Численные эксперименты проведены для трехпараметрической задачи, содержащей короткодействующий потенциал Морза, дальнедействующий потенциал Кулона и растущий при $\tau \rightarrow \infty$ потенциал задачи о гармоническом осцилляторе.

2. Ньютоновские итерации

Предположим, что задача (I.1)-(I.2) имеет решение $\mathbf{z}^* = \{\bar{\lambda}, \bar{u}\}$ и известно некоторое приближение $\mathbf{z}_0 = \{\bar{\lambda}_0, \bar{u}_0\}$ к этому решению. Однородную задачу (I.1)-(I.2) доопределим условиями нормировки собственных функций, например, в виде

$$\varphi_i^{(3)}(\bar{\lambda}, \bar{u}) \equiv \int_{a_i}^{b_i} [u_i(\tau)]^2 d\tau - 1 = 0, \quad (2.1)$$

что позволяет сформулировать рассматриваемую задачу как нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(\mathbf{z}) = 0. \quad (2.2)$$

Здесь $\mathbf{z} = \{\bar{\lambda}, \bar{u}\}$ - пара: вектор собственных параметров $\bar{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ и собственный элемент, являющийся вектор-функцией $\bar{u} = (u_1(\tau), \dots, u_N(\tau))$. Нелинейная функция φ задана операторами $\{\varphi_i^{(1)}, \varphi_i^{(2)}, \varphi_i^{(3)}\}$ уравнений (I.1), (I.2), (2.1).

Непрерывный аналог метода Ньютона^{/22/} сводит решение уравнения (2.2) к решению эволюционного уравнения на полуоси $0 \leq t < \infty$

$$\psi'(z(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\psi(z(t)) \quad (2.3)$$

с начальным условием

$$z(0) = z_0, \quad (2.4)$$

где $\psi'(z)$ - производная Фреше функции ψ , а $z_0 = \{\bar{\lambda}_0, \bar{u}_0\}$ - известное приближение к искомому решению. Предположим, что для рассматриваемого уравнения (2.2) выполнены условия сходимости решения $z(t)$ задачи (2.3)-(2.4) к его решению z^* [23].

Итерационная схема решения уравнения (2.2) является методом Эйлера приближенного решения задачи (2.3)-(2.4). Если при $t = t_k$, то есть на шаге с номером K итерационного процесса, известны приближения $\bar{\lambda}_k = (\lambda_{1k}, \dots, \lambda_{Nk})$ к вектору собственных значений и $\bar{u}_k = (u_{1k}(z), u_{2k}(z), \dots, u_{Nk}(z))$ к вектору собственных функций, то для нахождения поправок к этим приближениям

$$\Delta \lambda_{ik} = \mu_{ik}, \quad \Delta u_{ik}(z) = v_{ik}(z), \quad i = 1, \dots, N \quad (2.5)$$

необходимо решить систему уравнений. Она состоит из системы N дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\bar{\lambda}_k, z) \right] v_{ik}(z) = - \left[\frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{ik}(z) - \quad (2.6)$$

$$- \sum_{\ell=1}^N \mu_{\ell k} \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} Q_i(\bar{\lambda}_k, z) u_{\ell k}(z)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \left[f_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \right] v_{ik}(z) \Big|_{z=z_{ij}} = & - \left[f_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \frac{d}{dz} + \right. \\ & \left. + g_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{ik}(z) \Big|_{z=z_{ij}} - \sum_{\ell=1}^N \mu_{\ell k} \left[\frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} f_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \frac{d}{dz} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} g_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{\ell k}(z) \Big|_{z=z_{ij}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

и интегральных уравнений

$$2 \int_{a_i}^{b_i} u_{ik}(z) v_{ik}(z) dz = 1 - \int_{a_i}^{b_i} u_{ik}^2(z) dz. \quad (2.8)$$

В силу сделанных предположений решение системы (2.6)-(2.8) существует. Для его отыскания удобно решение граничной задачи (2.6)-(2.7) представить в виде

$$v_{ik}(z) = v_{i0,k}(z) + \sum_{\ell=1}^N \mu_{\ell k} v_{i\ell,k}(z), \quad (2.9)$$

где функции $v_{i\ell,k}(z)$, ($i = 1, \dots, N; \ell = 0, 1, \dots, N$) являются решениями граничных задач

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\bar{\lambda}_k, z) \right] v_{i\ell,k}(z) = P_{i\ell,k}(z), \quad (2.10)$$

$$\left[f_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \right] v_{i\ell,k}(z) \Big|_{z=z_{ij}} = S_{ij\ell,k}(z) \Big|_{z=z_{ij}}, \quad (2.11)$$

причем

$$\begin{aligned} P_{i0,k}(z) &= - \left[\frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{ik}(z), \\ P_{i\ell,k}(z) &= - \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} \left[Q_i(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{ik}(z), \quad \ell = 1, \dots, N; \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$S_{ij0,k}(z) = - \left[f_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{ik}(z),$$

$$S_{ij\ell,k}(z) = - \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} \left[f_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \frac{d}{dz} + g_{ij}(\bar{\lambda}_k, z) \right] u_{ik}(z), \quad \ell = 1, \dots, N.$$

Решив граничные задачи (2.10)-(2.11) и подставив найденные решения в выражение (2.9), получим из системы (2.8) систему линейных алгебраических уравнений относительно $\mu_{\ell k}$

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=1}^N \mu_{\ell k} \int_{a_i}^{b_i} u_{ik}(z) v_{i\ell,k}(z) dz &= \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \int_{a_i}^{b_i} u_{ik}^2(z) dz - \int_{a_i}^{b_i} u_{ik}(z) v_{i0,k}(z) dz. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Определив из нее значения $\mu_{\ell k}$, с помощью (2.9) находим поправки $\Delta \lambda_{ik}$ и $\Delta u_{ik}(z)$ (2.5).

Переход к следующему $(k+1)$ -му шагу осуществляется с помощью соотношений, аппроксимирующих по методу Эйлера выражения (2.5) при $t = t_k$ ($t_{k+1} - t_k = \tau_k$)

$$\tau_k^{-1} (\lambda_{i,k+1} - \lambda_{i,k}) = \mu_{ik}, \quad (2.14)$$

$$\tau_k^{-1} (u_{i,k+1}(z) - u_{i,k}(z)) = v_{ik}(z).$$

При заданном значении шага интегрирования τ_k получаем следующие приближения $\lambda_{i,k+1}$, $u_{i,k+1}(\tau)$. Таким образом, для их нахождения необходимо решить $N+1$ граничных задач (2.10)-(2.11) и систему N линейных алгебраических уравнений (2.13). Заметим, что при $\ell=0$ решение задачи (2.10)-(2.11) известно:

$$v_{i0,k}(\tau) = -u_{i,k}(\tau), \quad (2.15)$$

поскольку $\bar{\lambda}_k \neq \bar{\lambda}^*$, то есть требуется решить N задач (2.10) - (2.11).

О сходимости приближений $z_k = \{\bar{\lambda}_k, \bar{u}_k\}$ к решению $z^* = \{\bar{\lambda}^*, \bar{u}^*\}$ задачи можно судить по убыванию невязки $\|\varphi(z_k)\|$. Если $\tau_k \equiv 1$, то в локальной окрестности искомого решения обратные итерации (2.10)-(2.14) с ньютоновским сдвигом (2.13)^{/17/} дают минимальное значение невязки^{/24/}. Специальный выбор τ_k ^{/19,20,25/} позволяет минимизировать невязку на каждом шаге. Возможные модификации этой итерационной схемы на примере двухпараметрической задачи рассмотрены в работе^{/18/}.

3. О методе сеток

Для численного решения граничных задач (2.10) - (2.11) применяется разностный метод. Интегралы в системе (2.13) заменяются квадратурными формулами с узлами разностных сеток того же порядка точности, что и порядок аппроксимации разностных схем. При постоянных в процессе итераций сетках с параметром h полученную вычислительную схему можно рассматривать как реализацию метода Эйлера решения эволюционной задачи

$$\varphi'_h(z_h(t)) \frac{dz_h(t)}{dt} = -\varphi(z_h(t)), \quad 0 \leq t < \infty \quad (3.1)$$

$$z_h(0) = z_{0,h}, \quad (3.2)$$

соответствующей нелинейной дискретной задаче

$$\varphi_h(z_h) = 0, \quad (3.3)$$

где функция φ_h аппроксимирует оператор φ в уравнении (2.2).

Рассмотрим существование решения уравнения (3.3) и его сходимость при $h \rightarrow 0$ к известному решению z^* уравнения (2.2) при предположениях о сходимости процесса (2.3)-(2.4)^{/23/}. Пусть $\varphi(z)$ - нелинейная функция, переводящая B -пространство Z в B -пространство W , решение уравнения (2.2) z^* существует и единственно в ограниченной открытой области $S \subset Z$. Пусть, далее, в S существуют непрерывные производные Фреше $\varphi'(z) \in (Z \rightarrow W)$ и $\varphi''(z) \in (Z \times Z \rightarrow W)$ и существует $\varphi'(z)^{-1} \in (W \rightarrow Z)$, для которого выполнено

$$\|\varphi'(z)^{-1}\| \leq C_1. \quad (3.4)$$

В этих предположениях доказано^{/23/} существование сферы $S \subset S$

$$\|z - z^*\| \leq \sigma_1 \quad (3.5)$$

такой, что для любого $z_0 \in S$ решение $z(t)$ задачи (2.3)-(2.4) существует, единственно и

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t) - z^*\| = 0. \quad (3.6)$$

Согласно подходу, развитому в^{/26/}, предположим, что существует связь пространств Z и W с евклидовым пространством R_M ($h=O(1/m)$) с помощью линейного непрерывного оператора сноса P_h . Пусть существует линейный непрерывный оператор восполнения \bar{P}_h с областью определения $P_h(Z) \subset R_M$, причем $\bar{Z}_h = \bar{P}_h P_h(Z)$ - полное подпространство Z , то есть оператор $\bar{P}_h = \bar{P}_h P_h$ - линейный непрерывный оператор проектирования Z на \bar{Z}_h : $\bar{P}_h(\bar{Z}) = \bar{Z}_h, \bar{P}_h^2 = \bar{P}_h$.

Сделаем следующие предположения о соотношениях норм:

$$\|z - \bar{P}_h z\| \leq \rho_1(h) \|z\|, \quad P_h \bar{P}_h = I; \quad (3.7)$$

в R_M можно ввести такие нормы $\|\cdot\|_1$ и $\|\cdot\|_2$, что

$$\| \|z\| - \|P_h z\| \| \leq \rho_2(h) \|z\|, \quad (3.8)$$

$$\| \|z\| - \|P_h z\| \| \leq \rho_3(h) \|z\|, \quad (3.9)$$

где $\rho_i(h) > 0, \lim_{h \rightarrow 0} \rho_i(h) = 0, i=1,2,3$.

Относительно функции $\varphi_h(z_h)$ в евклидовом пространстве R_M предположим, что область ее определения является $P_h(Z) \subset R_M$, а область значений - $P_h(W) \subset R_M$, и в некоторой сфере S_h :

$$\|P_h z - P_h z^*\|_1 \leq \sigma_2 \quad (3.10)$$

существуют непрерывные производные Фреше $\varphi'_h(P_h z)$ и $\varphi''_h(P_h z)$. Пусть также выполнены условия аппроксимации операторов $\varphi(z), \varphi'(z)$ операторами $\varphi_h(z_h)$ и $\varphi'_h(z_h)$ соответственно:

$$P_h \varphi(z) - \varphi_h(P_h z) = \rho_4(h) P_h \mathcal{D}_0(z) z, \quad (3.11)$$

$$P_h \varphi'(z) v - \varphi'_h(P_h z) P_h v = \rho_5(h) P_h \mathcal{D}_1(z) v,$$

где $\mathcal{D}_0(z), \mathcal{D}_1(z) \in (Z \rightarrow W)$ - линейные непрерывные операторы; $\|\mathcal{D}_0(z)\| \leq C_2, \|\mathcal{D}_1(z)\| \leq C_3$, если $\|z\| \leq C_4$; $\rho_i(h) > 0,$

$\lim_{h \rightarrow 0} \rho_i(h) = 0, i=4,5$.
Из соотношений (3.11) следует, что для $\tilde{z}_h^*, \tilde{v}_h \in \bar{Z}_h$

$$\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*) P_h \tilde{v}_h = P_h [\varphi'(\tilde{z}_h^*) - \rho_5(h) \mathcal{D}_1(\tilde{z}_h^*)] \tilde{v}_h. \quad (3.12)$$

При достаточно малых h , согласно (3.7), $\tilde{z}_h^* \in S$. Из теоремы об обратном операторе [21] (с.157) следует, что линейный непрерывный оператор из $(Z \rightarrow W)$

$$T_h = \varphi'(\tilde{z}_h^*) - \rho_5(h) \mathcal{D}_1(\tilde{z}_h^*) \quad (3.13)$$

при достаточно малых h имеет обратный оператор T_h^{-1} и существует константа $c_5 > 0$, для которой

$$\|T_h^{-1}\| \leq c_5. \quad (3.14)$$

Очевидно, что $\tilde{W}_h = T_h^{-1}(\tilde{Z}_h) \subset W$ является полным. Пусть линейное многообразие $P_h(\tilde{W}_h) \subset R_M$ - полное подпространство, уравнение

$$P_h w = 0 \quad (3.15)$$

имеет в пространстве \tilde{W}_h только тривиальное решение и $\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*) \in (P_h(\tilde{Z}) \rightarrow P_h(\tilde{W}))$.

Покажем, что существует оператор $\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*)^{-1}$. Для этого достаточно доказать, что в пространстве $P_h(\tilde{Z})$ для любого элемента $P_h \tilde{w}_h \in P_h(\tilde{W}_h)$ существует единственное решение уравнения

$$\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*) u_h = P_h \tilde{w}_h. \quad (3.16)$$

Поскольку операторы P_h и \bar{P}_h устанавливают взаимно однозначное соответствие между пространствами $P_h(\tilde{Z}) \subset R_M$ и $\tilde{Z}_h \subset Z$, то уравнение (3.16) равносильно уравнению

$$\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*) P_h u = P_h \tilde{w}_h \quad (3.17)$$

относительно неизвестного элемента $u \in \tilde{Z}_h$. Существование единственного решения

$$u = T_h^{-1} \tilde{w}_h \in \tilde{Z}_h \quad (3.18)$$

этого уравнения следует из соотношения (3.12), существования оператора T_h^{-1} и свойства уравнения (3.15). Поэтому уравнение (3.16) имеет единственное решение

$$u_h = P_h T_h^{-1} \tilde{w}_h \in P_h(\tilde{Z}). \quad (3.19)$$

В силу соотношений (3.8), (3.9) и (3.14) при достаточно малых h существует константа $c_6 > 0$, для которой

$$\|u_h\| \leq c_6 \|P_h \tilde{w}_h\|,$$

то есть $\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*)^{-1}$ существует и

$$\|\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*)^{-1}\| \leq c_6, \quad (3.20)$$

где $\tilde{z}_h = \tilde{z}_h^*$. Поскольку $\varphi_h(P_h \tilde{z}_h^*) = \varphi_h(P_h z^*)$, то, согласно (3.11),

$$\varphi_h(P_h \tilde{z}_h^*) = P_h [-\rho_4(h) \mathcal{D}_0(z^*) z^*],$$

откуда и из соотношения (3.9) при достаточно малых h получим оценку

$$\|\varphi_h(P_h \tilde{z}_h^*)\| \leq \rho_4(h) [1 + \rho_3(h)] \|\mathcal{D}_0(z^*)\| \|z^*\| \leq \rho_4(h) c_7. \quad (3.21)$$

По непрерывности оператор $\varphi'_h(P_h \tilde{z}_h^*)^{-1}$ для достаточно малых h существует в некоторой сфере \tilde{S}_h :

$$\|P_h \tilde{z}_h - P_h \tilde{z}_h^*\| \leq \sigma_3, \quad \sigma_3 > 0$$

с сохранением для всех элементов $P_h \tilde{z}_h \in \tilde{S}_h$ оценки (3.20).

Рассмотрим сферу \tilde{S}_h :

$$\|P_h \tilde{z}_h - P_h \tilde{z}_h^*\| < c_6 \|\varphi_h(P_h \tilde{z}_h^*)\|. \quad (3.22)$$

Из оценки (3.21) следует, что для достаточно малых h выполнено: $\tilde{S}_h \subset \tilde{S}_h$. Следовательно, в сфере \tilde{S}_h для оператора $\varphi_h(z_h)$ уравнения (3.3) выполнены условия теоремы [22] о существовании корня \tilde{z}_h этого уравнения и сходимости к нему решения $z_h(t)$ задачи (3.1)-(3.2) при $z_{0,h} = P_h z^*$ и $t \rightarrow \infty$. Так как $\tilde{z}_h \in \tilde{S}_h$, то из (3.21) и (3.22) получается оценка

$$\|\tilde{z}_h - P_h z^*\| \leq \rho_4(h) \cdot c_3, \quad c_3 > 0. \quad (3.23)$$

Таким образом, решение \tilde{z}_h дискретного уравнения (3.3) существует и сходится к сеточному образу $P_h z^*$ решения z^* уравнения (2.2) со скоростью стремления функции $\rho_4(h)$ к нулю при $h \rightarrow 0$.

Заметим, что условия аппроксимации (3.11) могут быть заменены соотношениями

$$\begin{aligned} P_h \varphi(z) - \varphi_h(P_h z) &= \rho_4(h) P_h(z) \mathcal{D}_0 z, \\ P_h \varphi'(z) v - \varphi'_h(P_h z) P_h v &= \rho_5(h) P_h(v) \mathcal{D}_1 v, \end{aligned} \quad (3.24)$$

где $\mathcal{D}_0, \mathcal{D}_1$ - линейные ограниченные операторы из $(Z \rightarrow W)$, $P_h(z)$ - линейный непрерывный оператор сноса W в $P_h(W)$, причем

$$\|[P_h - P_h(z)]w\| \leq \rho_6(h) \|w\|, \quad \rho_6(h) > 0, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \rho_6(h) = 0.$$

Проведенные рассуждения можно применить к разностной аппроксимации задачи (I.1)-(I.2), (2.1). Для пространства $Z = R^{3N} \times \prod_{i=1}^N C^{\epsilon} [a_i, b_i]$ параметр гладкости ϵ выбирается так, чтобы дифференциальные операторы в уравнениях (I.1) и остаточных членах аппроксимирующих формул были ограниченными как операторы из $(C^{\epsilon} [a_i, b_i]) \rightarrow C [a_i, b_i]$ (стр.57). Тогда P_h - оператор простого сноса^{/26/} на сетку, \bar{P}_h - оператор построения интерполяционного полинома по сеточной функции, $P_h(z)$ - оператор построения сеточной функции со сдвигами в аргументах для остаточных членов. Предполагается, что интерполяционный процесс сходится.

Отметим, что одни и те же схемы, применяемые для дискретного представления операторов $\psi(z)$ и $\psi'(z)$ задачи (I.1)-(I.2), (2.1), дают один и тот же порядок их аппроксимации. Доказательство существования оператора $\psi'_h(z_h)^{-1}$ разностного аналога этой задачи можно выполнить, используя хорошо изученные свойства разностных схем в граничных задачах для линейных неоднородных дифференциальных уравнений второго порядка^{/13/}.

4. Вычислительные схемы

Разностная аппроксимация граничных задач (2.10)-(2.11) осуществляется на равномерных сетках

$$\omega_{h_i} = \{z_1 = a_i, \dots, z_n = a_i + (n-1)h_i, \dots, z_m = b_i\}. \quad (4.1)$$

Разработаны две вычислительные схемы решения задачи (I.1)-(I.2), (2.1) с помощью ньютоновских итераций (2.10)-(2.14), которые реализованы на языке FORTRAN в виде двух пакетов программ MANYPAR и MANPH4 для ЭВМ CDC-6500.

В первой схеме используется симметричная трехточечная разностная схема точности порядка $O(h^2)$ для аппроксимации уравнений (2.10). Применены несимметричные трехточечные формулы численного дифференцирования точности порядка $O(h_i^2)$ ^{/29/} (с.232) для аппроксимации граничных условий (2.11) и квадратурная формула трапеций с узлами сеток (4.1) того же порядка точности для аппроксимации интегралов в системе уравнений (2.13). Порядок аппроксимации операторов $\psi(z)$ и $\psi'(z)$ при этом равен $O(h^2)$, $h = \max h_i$.

Во второй схеме уравнения системы (2.10) аппроксимируются в узлах с номерами $n=3, M_i-2$ трехточечной разностной схемой Нумерова с порядком аппроксимации $O(h_i^4)$ ^{/30/} (с.189). В узлах с номерами $n=2$ и $n=M_i-1$ применяются несимметричные пятиточечные разностные уравнения с порядком аппроксимации $O(h_i^4)$, которые не используют значения коэффициентов уравнений (2.10) в граничных узлах. Это важно при решении сингулярных граничных задач. Аппроксимация

граничных условий (2.11) выполнена с помощью несимметричных пятиточечных формул численного дифференцирования^{/29/} (с.232) с точностью порядка $O(h_i^4)$. Интегралы в системе (2.13) заменяются квадратурными формулами Симпсона с узлами сеток (4.1) (M_i - нечетное) точности порядка $O(h_i^4)$. Операторы $\psi(z)$ и $\psi'(z)$ аппроксимируются в этой схеме с точностью порядка $O(h^4)$, $h = \max h_i$.

Дискретные граничные задачи, аппроксимирующие задачу (2.10)-(2.11), решаются с помощью алгоритма прогонки^{/13/}. Для определения параметра τ_k в выражениях (2.14) применяется алгоритм нахождения минимума невязки

$$\delta_k(\tau) = \|\psi_h(z_{h,k} + \tau \Delta z_{h,k})\| \quad (4.2)$$

на сетке

$$\omega_{\Delta\tau} = \{\tau_j = (j-1)\Delta\tau + \tau_0; j=1, \dots, L; \tau_L = 1\}. \quad (4.3)$$

Признаком окончания итераций является выполнение условия

$$\delta_{h,k} \leq \epsilon, \quad (4.5)$$

где $\epsilon > 0$ - достаточно малое число. Точность рассмотренных вычислительных схем можно оценить следующим образом. Пусть K - число итераций, необходимых для выполнения условия (4.5). Тогда в сеточной норме справедлива оценка

$$\|z^* - z_{h,k}\| \leq \|z^* - \bar{z}_h\| + \|\bar{z}_h - z_{h,k}\|. \quad (4.6)$$

Для первого слагаемого в правой части (4.6) получена оценка (3.23). Поскольку рассматривается сходящийся ньютоновский процесс, второе слагаемое в правой части (4.6) пропорционально невязке $\delta_{h,k}$ ^{/22/}. В случае $\epsilon \ll 1$ основной вклад в ошибки вносит величина $\|z^* - \bar{z}_h\|$. Для первой схемы в оценке (3.23) $\rho_4(h) \sim h^2$, а для второй - $\rho_4(h) \sim h^4$. Уточнение разностных решений возможно с помощью экстраполяции по Ричардсону^{/14/} и по Паде на последовательностях сгущающихся сеток (4.1).

5. Численные исследования

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - \lambda_1 - \lambda_2 \left(e^{-2\lambda_3(z-z_0)} - 2e^{-\lambda_3(z-z_0)} \right) \right] u_1(z) = 0, \quad (5.1)$$

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - \lambda_1 + \frac{2\lambda_2}{z} - \frac{3\lambda_3}{2z^2} \right] u_2(z) = 0,$$

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - \lambda_1 - \frac{2\lambda_2}{z^2} - \frac{3\lambda_3 z^2}{4} + \frac{82}{9} \right] u_3(z) = 0, \quad 0 < z < \infty.$$

Первое уравнение системы содержит потенциал Морза, второе - потенциал Кулона и третье - потенциал гармонического осциллятора. /3/ Трех-параметрическая сингулярная частичная задача на собственные значения для системы (5.1) имеет при значении параметра $\tau_0 = 2,15$ для собственных значений

$$\lambda_1 = 1/9, \quad \lambda_2 = 1, \quad \lambda_3 = 4/3 \quad (5.2)$$

аналитические собственные функции, ограниченные на полуоси $0 \leq \tau < \infty$,

$$u_1(\tau) = d_1 e^{-\xi/2} \xi^\rho, \quad \xi = \frac{2\sqrt{\lambda_2}}{\lambda_3} e^{-\lambda_3(\tau-\tau_0)}, \quad \rho = \frac{\sqrt{\lambda_2}}{\lambda_3};$$

$$u_2(\tau) = d_2 e^{-\sqrt{\lambda_2}\tau} \tau^2 (1 - \frac{\tau}{6}); \quad (5.3)$$

$$u_3(\tau) = d_3 e^{-\frac{\tau^2}{2}} \tau^2 (1 - \frac{2}{5}\tau^2).$$

При численном решении этой задачи условия ограниченности собственных функций на полуоси $0 \leq \tau < \infty$ приближались граничными условиями вида (1.2), где $a_i = 0$, $b_i = R_{max}$ - параметр. Функции f_{ij} и g_{ij} задавались с учетом главных членов асимптотики для логарифмических производных от выражений (5.3). Это позволило исключить в граничных условиях неизвестные константы нормировки d_i

($i = 1, 2, 3$). В расчетах варьировались способы задания начальных условий для итераций путем возмущений собственного решения (5.2), (5.3). Особенности сходимости итераций аналогичны отмеченным в работе /21/. Зависимость ошибки аппроксимации сингулярной задачи на

Таблица 1.

$h=0,04$	$R_{max}=12$	$R_{max}=24$	$R_{max}=36$	$R_{max}=48$
λ_1	0,111111334	0,111111178	0,111111172	0,111111172
λ_2	1,00000082	1,00000044	1,00000043	1,00000043
λ_3	1,33333340	1,33333362	1,33333363	1,33333363

Таблица 2.

R_{max}	λ	h	0,08	0,04	0,02	Δ_1	Δ_2	Δ_1/Δ_2
λ_{1h}	$0(h^2)$		0,111730752	0,111265676	0,111149730	465076	115946	4,01
	$0(h^3)$		0,111112834	0,111111178	0,111111079	1656	99	16,73
λ_{2h}	$0(h^2)$		1,00299774	1,00074650	1,00018706	224924	56144	4,01
	$0(h^3)$		1,00000855	1,00000044	0,99999996	811	48	16,89
λ_{3h}	$0(h^2)$		1,33502827	1,33375659	1,33343912	127168	31747	4,01
	$0(h^3)$		1,33333750	1,33333362	1,33333339	388	23	16,87

Таблица 3.

R	Условит.	$h_1=0,08$	$h_2=0,04$	$h_3=0,02$	Δ_1	Δ_2	Δ_1/Δ_2
U_{1h}		0,08	0,016111686	0,015927036	0,016065393	0,016100106	138357
							34712
							3,99
		5,6	0,301642207	0,301099651	0,301506825	0,301608378	407174
							101553
							4,01
U_{2h}		10,4	0,061360599	0,060977481	0,061264741	0,061336630	287260
							71889
							4,00
		15,2	0,012388646	0,012257147	0,012355685	0,012380401	98538
							24716
							3,98
U_{3h}		20,0	0,002501225	0,002463770	0,002491820	0,002498871	28050
							7051
							3,98
		0,08	0,051696912	0,051957483	0,051761873	0,051713123	195610
							48750
							4,01
R		5,6	0,039341070	0,038025098	0,039012928	0,039259075	987830
							246147
							4,01
		10,4	-0,301341052	-0,302386736	-0,301603123	-0,301406502	783613
							196621
							3,99
R		15,2	-0,271733247	-0,271034140	-0,271559246	-0,271689699	525106
							130453
							4,03
		20,0	-0,144538862	-0,143468609	-0,144271217	-0,144471896	802608
							200679
							4,00
R		0,08	0,670572251	0,671568007	0,670820740	0,670634346	747267
							186394
							4,01
		5,6	-0,000108308	-0,000109115	-0,000108887	-0,000108828	228
							59
							3,86
R		10,4	0	0	0	0	
		15,2	0	0	0	0	
	20,0	0	0	0	0		

Таблица 4.

$U_{\text{аналит.}}$	$h_1=0,08$	$h_2=0,04$	$h_3=0,02$	Δ_1	Δ_2	Δ_3/Δ_2
R						
	$U_{2,h}$					
0,8	0,016111686	0,016111683	0,016111681	460	28	16,43
5,6	0,301642207	0,301642149	0,301642226	1277	77	16,58
10,4	0,061360599	0,061360564	0,061360620	996	60	16,60
15,2	0,012388646	0,012388687	0,012388636	348	21	16,57
20,0	0,002501225	0,002501122	0,002501229	101	6	16,83
R						
	$U_{3,h}$					
0,8	0,051696686	0,051697135	0,051696698	601	36	16,69
5,6	0,039341049	0,039337521	0,039341092	3369	202	16,68
10,4	-0,301340897	-0,301343914	-0,301340994	2754	166	16,59
15,2	-0,27173106	-0,271731414	-0,271733206	1792	108	16,59
20,0	-0,14453787	-0,144536046	-0,144539017	2802	169	16,58
R						
	U_{31}					
0,8	0,670572251	0,670577591	0,670572287	4999	305	16,39
5,6	-0,000108808	-0,108800357·10 ⁻³	-0,108307743·10 ⁻³	108808198·10 ⁻³	7386 455	16,23
10,4	0	0	0			
15,2	0	0	0			
20,0	0	0	0			

собственные значения от параметра R_{max} приведена в таблице I. Вычисления выполнены с помощью схемы $O(h^4)$. Слабая зависимость значений λ_{ih} от величины R_{max} при фиксированном значении h демонстрирует достаточно хорошее приближение асимптотических условий ограниченности собственных функций $U_i(z)$ при $z \rightarrow 0$ и $z \rightarrow \infty$ граничными условиями (1.2). Исследуемая ошибка не превышает в данном случае погрешности разностной аппроксимации.

Для фиксированного значения R_{max} проведены расчеты на последовательности сгущающихся разностных сеток.

В таблице 2 даны значения разностных собственных параметров, вычисленных с помощью схем точности $O(h^2)$ и $O(h^4)$ на трех вдвое сгущающихся сетках, и последовательные разности Δ_1, Δ_2 этих значений. Отношение разностей указывает порядок сходимости разностного решения к точному. Если $|\lambda_h - \lambda^*| \sim O(h^m)$, то на таких сетках $m \sim \log_2(\Delta_1/\Delta_2)$. Из таблицы видно, что сходимость для схемы порядка $O(h^2)$ имеет порядок $m \sim 2$, а для схемы порядка $O(h^4) - m \sim 4$.

Аналогичные результаты для сеточных собственных функций представлены в таблицах 3 и 4 для схем порядков $O(h^2)$ и $O(h^4)$ соответственно. Для сравнения там же приведены значения нормированных в соответствии с (2.1) собственных функций (5.3).

Выполненные численные исследования показывают, что порядок сходимости сеточного решения к точному соответствует порядку аппроксимации исходной задачи дискретной. Это соответствует проведенному в п.3 качественному рассмотрению.

Литература

1. Atkinson F.V. Bull. Math. Soc., 1968, 74, 1, p.1.
2. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука," М., 1976.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Наука," М., 1974.
4. Аткинсон Ф. Дискретные и непрерывные граничные задачи. "Мир," М., 1968.
5. Fairman M. J. Different. Equat., 1969, 5, 1, p.197.
6. Hargrave B.A., Sleeman B.D. J.Inst. Maths. Applics., 1974, 14, 1, p.9.
7. Sleeman B.D. Proc.Roy.Soc., A, 1971, 119, 10, p.139.
8. Fox L. et al. In "Topics in Numerical Analysis", Acad. Press, London-New York, 1973, p.93.
9. Guschina N.A., Nikulin V.K. J.Chem.Phys., 1975, 10, p.23.
10. Тополянский Д.Б. и др. В сб: "Вычисл. и прикл.матем." Изд. Киевского госуд.университета, Киев, 1974, 22, с. 138.

11. Damburg R.J., Kolosov V.V. J.Phys. B:Atom.,Molec.Phys., 1976, 9, p.3149.
12. Тополянский Д.Б., Крылова Т.В. В сб: "Исслед. по совр. пробл. суммир. и прил. функций и их прил." Изд. Днепропетровского госуд. университета, Днепропетровск, 1973,4, с. 165.
13. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. "Наука," М., 1971.
14. Марчук Г.И., Шайдулов В.В. Повышение точности решений разностных схем. "Наука," М., 1979.
15. Бахвалов Н.С. Численные методы. "Наука," М., 1975, с.429.
16. Sauford J.K. et al. J.Comput. Phys., 1974,16, p.259.
17. Blum E.K., Chang A.F. J.Inst. Maths.Applics., 1978,22,p.29.
18. Баатар Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, Р5-80-109, Дубна, 1980.
19. Popomarev L.L. et al. J.Comput.Phys., 1973,13,p.1.
20. Popomarev L.L. et al. Annals of Phys., 1978,110,p.274.
21. Баатар Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, II-81-385, Дубна, 1981.
22. Гавурин М.К. Изв. вузов, Матем., 1968, 5(6),с.18.
23. Жидков Е.П., Пузынин И.В. ЖВМ и МФ, 1967, 7, с.1086.
24. Кивистик Л.А. ДАН СССР, 1961, 136, с.22.
25. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. ЖВМ и МФ, 1981, 21, с.491.
26. Гавурин М.К. Лекции по методам вычислений."Наука," М., 1971.
27. Люстерник Л.А., Соболев В.И. Элементы функционального анализа. "Наука," М., 1965.
28. Функциональный анализ. СМБ. Под редакцией С.Г.Крейна "Наука," М., 1972.
29. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. I, Физматгиз, М., 1959.
30. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Ред. Дж. Холл, Дж.Уатт. "Мир", М., 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 февраля 1982 года.

Баатар Д., Пузынина Т.П., Пузынин И.В. Численное решение многопараметрической задачи на собственные значения и повышение точности разностного решения P11-82-97

На основе ньютоновской итерационной схемы и метода сеток разработан и реализован алгоритм численного решения задачи на собственные значения для системы N обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, связанных вещественными параметрами.

Изучается зависимость точности результатов от порядка разностной аппроксимации задачи. Выполнены численные исследования сходимости предложенной вычислительной схемы в зависимости от параметров аппроксимации сингулярной краевой задачи.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Baatar D., Puzyrin I.V., Puzyrina T.P. Numerical Solution of Multiparametric Eigenvalue Problem and IMPROVEMENT of Difference Solution Accuracy. P11-82-97

On the basis of the Newton iteration scheme and net-point method an algorithm for numerical solution of eigenvalue problem for system of N ordinary differential equations of second order connected by real parameters has been developed and realized. The dependence of result accuracy upon order of difference approximation is studied. Numerical analysis of convergence of the scheme proposed against approximation parameters of singular boundary value problem are performed.

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.