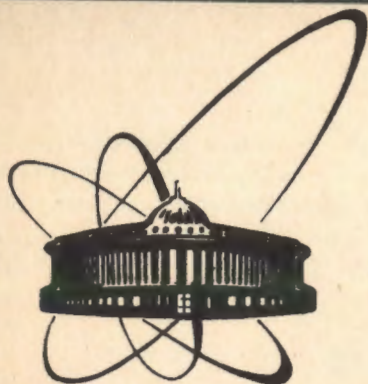


91-454



**сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна**

**P11-91-454**

**И.В.Амирханов, И.В.Пузынин, Т.А.Стриж**

**НЕЛИНЕЙНАЯ ГРАНИЧНАЯ ЗАДАЧА  
С ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ  
УРАВНЕНИЙ ОТ АСИМПТОТИКИ РЕШЕНИЙ  
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЕ К МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА**

**1991**

Моделирование многих физических процессов для электронов в полярных средах проводится в терминах автолокализованных электронных состояний [1-3] (поляроны, сольватированный электрон, состояния в белковой глобуле и т.д.). Для описания автолокализованных электронных состояний в жидкости - т.н. сольватированного электрона в работе [2] используется система 3 нелинейных уравнений

$$\begin{cases} \xi''(x) - \xi(x) + \xi(x) \frac{\eta_1(x) - \eta_2(x)}{x} = 0 \\ \eta_1''(x) + \frac{1}{x} \xi^2(x) = 0 \\ \eta_2''(x) - \frac{\alpha^2}{d} x \sinh\left(\frac{d\eta_2(x)}{x}\right) + \frac{b}{x} \xi^2(x) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\xi(0) = \xi(\infty) = \eta_1(0) = \eta_1'(\infty) = \eta_2(0) = \eta_2(\infty) = 0, \quad (2)$$

где  $\alpha, b, d$  - параметры физической модели.

Эта же система с линеаризованным  $\left[ \sinh \frac{d\eta_2(x)}{x} \sim \frac{d\eta_2(x)}{x} \right]$  последним уравнением

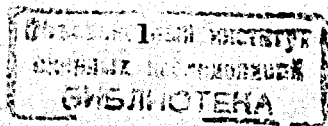
$$\begin{cases} \xi''(x) - \xi(x) + \xi(x) \frac{\eta_1(x) - \eta_2(x)}{x} = 0 \\ \eta_1''(x) + \frac{1}{x} \xi^2(x) = 0 \\ \eta_2''(x) - \alpha^2 \eta_2(x) + \frac{b}{x} \xi^2(x) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

и с теми же граничными условиями (2) уже рассматривалась и численно решалась при  $b = 1$  в работах [1,4].

В работе [5] описан метод решения краевой задачи (1) - (2) и (3), (2) с помощью итерационной схемы на основе непрерывного аналога метода Ньютона и приведены найденные этим способом характеристики первых нескольких состояний. Результаты, представляющие интерес для экспериментаторов, сведены в таблицы для различных значений физических параметров  $\alpha, d, b$ . Так как свободных параметров три, то перебор всех физически интересных случаев требует большого машинного времени.

Для некоторых физических моделей предполагаются дополнительные связи между этими параметрами. Для краевой задачи (1)-(2) выполняются условия

$$\begin{aligned} m &= \frac{dT_1^2}{5,2629 \cdot 10^2}, \\ n &= m \frac{d\alpha^2}{b \cdot 6,2125 \cdot 10^2}, \end{aligned} \quad (4)$$



а для задачи (3),(2) - условие

$$b \left( \frac{T_1^2}{\alpha} \right)^2 = 0,84713 \frac{m^2}{n}, \quad (5)$$

где

$$T_1 = \int_0^\infty \xi^2(x) dx = \eta_1(\infty), \quad (6)$$

$m$  - эффективная масса электрона,  $n$  - концентрация ионов. Эти параметры  $m$  и  $n$  удобны тем, что определяются из экспериментальных данных.

Таким образом, с учётом условий (4) и (5) исходные краевые задачи, зависящие от трех независимых параметров, можно свести к краевым задачам с одним параметром и дополнительным условием (6), связывающим интегральное условие на одну искомую функцию с асимптотическим поведением другой функции.

Введём удобные обозначения и условия (4) перепишем следующим образом:

$$\begin{aligned} dT_1^2 &= A_1, \\ d\alpha^2 &= A_2, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} A_1 &= m \cdot 5,2629 \cdot 10^2, \\ A_2 &= \frac{bn}{m} \cdot 6,2125 \cdot 10^2 \end{aligned} \quad (8)$$

известные величины.

С учётом (7) систему (1) перепишем в виде

$$\begin{cases} \xi''(x) - \xi(x) + \xi(x) \frac{\eta_1(x) - \eta_2(x)}{x} = 0 \\ \eta_1''(x) + \frac{1}{x} \xi^2(x) = 0 \\ \eta_2''(x) - \frac{A_2}{A_1^2} x \eta_1^4(\infty) \sinh\left(\frac{A_1 \eta_2(x)}{x \eta_1^2(\infty)}\right) + \frac{b}{x} \xi^2(x) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Аналогично, с учетом условия (5), можно переписать систему (3). Главная особенность системы (9) заключается в том, что её уравнения, в частности, третьи, определяются с помощью значения функции  $\eta_1(x)$  в асимптотической точке  $x = \infty$ .

В данной работе рассмотрены результаты численного исследования краевой задачи для системы уравнений типа (9) с дополнительным условием (6). Для решения полученной сингулярной граничной задачи применяется итерационная ньютоновская схема с предварительным переносом асимптотических условий в конечные точки  $x = x_L = 0$ ,  $x = x_R$ .

## Краевая задача для сольватированного электрона и схема решения

Вводя обозначения  $\xi = y_1$ ,  $\eta_1 = y_2$  и  $\eta_2 = y_3$ , перепишем систему (9) следующим образом:

$$\begin{aligned} R_1 &\equiv y_1'' - y_1 + y_1 \frac{y_2 - y_3}{x} = 0, \\ R_2 &\equiv y_2'' + \frac{1}{x} y_1^2 = 0, \\ R_3 &\equiv y_3'' - \frac{A_2}{A_1^2} y_2^4(x_R) x \sinh\left(\frac{A_1 y_3}{x y_2^2(x_R)}\right) + \frac{b}{x} y_1^2 = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Для системы (10) имеют место граничные условия

$$\begin{aligned} G_{L1} &\equiv y_1(0) = 0 \\ G_{L2} &\equiv y_2(0) = 0 \\ G_{L3} &\equiv y_3(0) = 0 \\ G_{R1} &\equiv y_1'(x_R) + y_1(x_R) = 0 \\ G_{R2} &\equiv y_2'(x_R) - C = 0 \\ G_{R3} &\equiv y_3'(x_R) + \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} C y_3(x_R) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

и дополнительное условие

$$Q_1 \equiv \int_0^{x_R} y_1^2(x) dx - C = 0. \quad (12)$$

На каждом шаге с номером  $k$  ньютоновского итерационного процесса [6] возникают следующие линейные задачи:

$$\begin{cases} v_{1k}'' - v_{1k} + \frac{y_{2k} - y_{3k}}{x} v_{1k} + \frac{v_{2k} - v_{3k}}{x} y_{1k} = -R_1 \\ v_{2k}'' + \frac{2}{x} y_{1k} v_{1k} = -R_2 \\ v_{3k}'' - \frac{A_2}{A_1^2} C^2 \cosh\left(\frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x}\right) v_{3k} + \frac{2b}{x} y_{1k} v_{1k} = \\ -R_3 + \mu \left( \frac{A_2}{A_1^2} 4C^3 x \sinh\left(\frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x}\right) - \frac{A_2}{A_1} 2C y_3 \cosh\left(\frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x}\right) \right), \end{cases} \quad (13)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} v_{1k}(0) = -G_{L1} \\ v_{2k}(0) = -G_{L2} \\ v_{3k}(0) = -G_{L3} \\ v_{1k}'(x_R) + v_{1k}(x_R) = -G_{R1} \\ v_{2k}(x_R) - \mu = -G_{R2} \\ v_{3k}'(x_R) + \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} C v_{3k}(x_R) = -G_{R3} - \mu \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} y_{3k}(x_R) \end{cases} \quad (14)$$

и дополнительным условием

$$2 \int_0^{x_R} y_{1k}(x)v_{1k}(x)dx - \mu_k = -Q_1. \quad (15)$$

Решение задачи (13)-(15) будем искать в виде

$$v_{ik} = v_{ik}^{(1)} + \mu_k v_{ik}^{(2)}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (16)$$

Это приводит к следующим двум задачам:

$$\begin{cases} (v_{1k}^{(1)})'' - v_{1k}^{(1)} + \frac{y_{2k} - y_{3k}}{x} v_{1k}^{(1)} + \frac{v_{2k}^{(1)} - v_{3k}^{(1)}}{x} y_{1k} = -R_1 \\ (v_{2k}^{(1)})'' + \frac{2}{x} y_{1k} v_{1k}^{(1)} = -R_2 \\ (v_{3k}^{(1)})'' - \frac{A_2}{A_1} C^2 \cosh \frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x} v_{3k}^{(1)} + \frac{2b}{x} y_{1k} v_{1k}^{(1)} = -R_3 \end{cases} \quad (17)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} v_{1k}^{(1)}(0) = -G_{L1} \\ v_{2k}^{(1)}(0) = -G_{L2} \\ v_{3k}^{(1)}(0) = -G_{L3} \\ (v_{1k}^{(1)}(x_R))' + v_{1k}^{(1)}(x_R) = -G_{R1} \\ v_{2k}^{(1)}(x_R) = -G_{R2} \\ (v_{3k}^{(1)}(x_R))' + \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} C v_{3k}^{(1)}(x_R) = -G_{R3}, \end{cases} \quad (18)$$

и

$$\begin{cases} (v_{1k}^{(2)})'' - v_{1k}^{(2)} + \frac{y_{2k} - y_{3k}}{x} v_{1k}^{(2)} + \frac{v_{2k}^{(2)} - v_{3k}^{(2)}}{x} y_{1k} = 0 \\ (v_{2k}^{(2)})'' + \frac{2}{x} y_{1k} v_{1k}^{(2)} = 0 \\ (v_{3k}^{(2)})'' - \frac{A_2}{A_1} C^2 \cosh \left( \frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x} \right) v_{3k}^{(2)} + \frac{2b}{x} y_{1k} v_{1k}^{(2)} = \\ \frac{A_2}{A_1^2} 4C^3 x \sinh \left( \frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x} \right) - \frac{A_2}{A_1} 2C y_{3k} \cosh \left( \frac{A_1 y_{3k}}{C^2 x} \right) \end{cases} \quad (19)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} v_{1k}^{(2)}(0) = v_{2k}^{(2)}(0) = v_{3k}^{(2)}(0) = 0 \\ (v_{1k}^{(2)}(x_R))' + v_{1k}^{(2)}(x_R) = 0 \\ v_{2k}^{(2)}(x_R) = 1 \\ (v_{3k}^{(2)}(x_R))' + \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} C v_{3k}^{(2)}(x_R) = -\sqrt{\frac{A_2}{A_1}} y_{3k}(x_R). \end{cases} \quad (20)$$

Подставляя (16) в (15), находим выражение для  $\mu_k$ :

$$\mu_k = \frac{-Q_1 - 2 \int_0^{x_R} y_{1k}(x)v_{1k}^{(1)}(x)dx}{2 \int_0^{x_R} y_{1k}(x)v_{1k}^{(2)}(x)dx - 1}. \quad (21)$$

Переход к следующей итерации осуществляется по формулам

$$\begin{aligned} y_{i(k+1)} &= y_{ik} + \tau_k v_{ik}, & i &= 1, 2, 3 \\ c_{k+1} &= c_k + \tau_k \mu_k, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $\tau_k$  - итерационный параметр, выбор которого может обеспечить оптимальные условия сходимости итераций [6,7]. Итерации прекращаются при выполнении условия

$$\delta_k < \varepsilon,$$

где невязка  $\delta_k$  может определяться как

$$\delta_k = \max_i \max_{x \in [x_L, x_R]} |R_i(y_{ik}(x), c_k)|, \quad i = 1, 2, 3,$$

$\varepsilon > 0$  заданное малое число.

## Численные эксперименты

На основе описанной выше итерационной схемы был создан пакет программ, позволяющий провести численное исследование модели сольватированного электрона. Работа пакета программ проверялась на тестовом примере с известным аналитическим решением, моделирующем задачу (10)-(12). Система

$$\begin{cases} y_1''(x) - y_1(x) + \frac{y_2(x) - y_3(x)}{x} y_1(x) - R_1(x) = 0 \\ y_2''(x) + \frac{1}{x} y_1^2(x) - R_2(x) = 0 \\ y_3''(x) - \frac{A_2}{A_1^2} x C^4 \sinh \frac{A_1 y_3(x)}{x C^2} + \frac{b y_1^2(x)}{x} - R_3(x) = 0, \end{cases} \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} R_1(x) &= B e^{-x} (-2 + C - C e^{-x} - D x^2 e^{-2x}) \\ R_2(x) &= -C e^{-x} + B^2 x e^{-2x} \\ R_3(x) &= 2D e^{-2x} (1 - 4x + 2x^2) - \frac{A_2}{A_1^2} x C^4 \sinh \frac{A_1 D x e^{-2x}}{C^2} + b B^2 x e^{-2x} \end{aligned} \quad (24)$$

$0 < x < x_R$ , с граничными условиями

$$\begin{cases} y_1(0) = y_2(0) = y_3(0) = 0 \\ y_1'(x_R) + (1 - \frac{1}{x_R}) y_1(x_R) = 0 \\ y_2'(x_R) + y_2(x_R) = C \\ y_3'(x_R) + (2 - \frac{2}{x_R}) y_3(x_R) = 0, \end{cases} \quad (25)$$

с дополнительным условием

$$\int_0^{x_R} y_1^2(x) dx - C = 0 \quad (26)$$

имеет решение

$$\begin{aligned} y_1(x) &= Bxe^{-x} \\ y_2(x) &= C(1 - e^{-x}) \\ y_3(x) &= Dx^2e^{-2x} \end{aligned} \quad (27)$$

На рис.1 показан характер сходимости итераций в тестовой задаче к точному решению от начальных приближений, в которых моделируется разрыв функций в асимптотических областях. Наблюдается выглаживание этих разрывов в процессе итераций. Невязка начального приближения составляла  $\sim 0.1$ , выход из итераций происходит при достижении невязки  $10^{-9}$ . Для этого требовалось 5 итераций при выборе итерационного параметра методом [8].

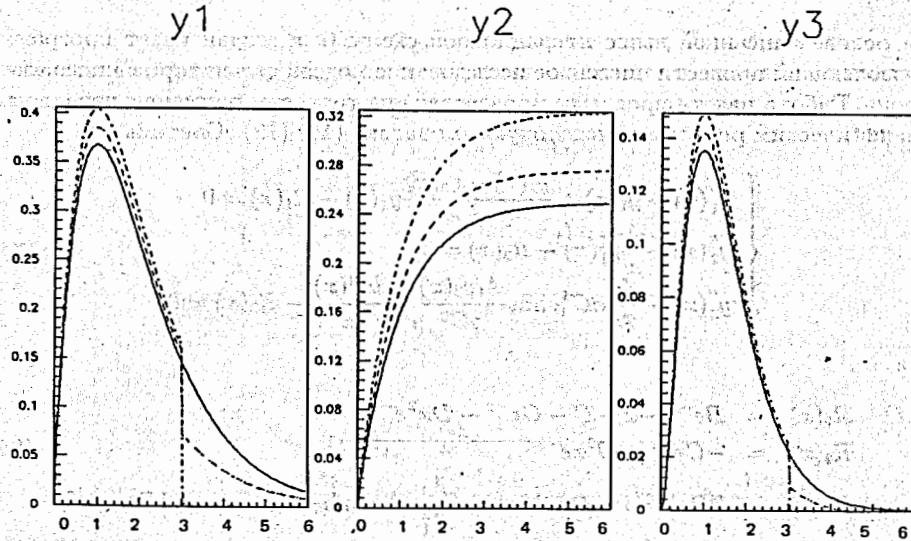


Рисунок 1. Поведение решений тестовой задачи. Штрих-пунктирная кривая - начальное приближение, штриховая - результаты 1-й итерации, сплошная - решение, совпадающее с аналитическим.

В таблице 1 приведены результаты, полученные с помощью разработанной программы, использующей для вычислений схему Нумерова (порядок  $O(h^4)$ ) на последовательности вдвое сгущающихся сеток для тестового примера (24)-(27) при  $h = 0.132$ . При этом отношение

$$\sigma_i = \frac{y_i(h) - y_i(\frac{h}{2})}{y_i(\frac{h}{2}) - y_i(\frac{h}{4})} \cong 16,$$

приведенное в таблице, подтверждает четвертый порядок сходимости схемы. Для расчетов были выбраны значения констант:  $B = 1.0$ ,  $C = 0.25$ ,  $D = 1.0$ ,  $n = 1.0$ ,  $b = 0.5$ ,  $m = 1.0$ .

Таблица 1

x	$y_i(\text{анал.})$	$y_i(\text{нач. пр.})$	$y_i(h)$	$y_i(\frac{h}{2})$	$y_i(\frac{h}{4})$	$\frac{y_i(h) - y_i(\frac{h}{2})}{y_i(\frac{h}{2}) - y_i(\frac{h}{4})}$
0.53	0.311406	0.342546	0.311414	0.311406	0.311406	15.89
	0.102554	0.123065	0.102561	0.102555	0.102554	15.88
	0.096973	0.106671	0.096933	0.096971	0.096974	15.90
1.06	0.367324	0.404056	0.367334	0.367324	0.367324	15.89
	0.163039	0.195647	0.163050	0.163039	0.163039	15.88
	0.134927	0.148419	0.134885	0.134924	0.134927	15.88
2.11	0.255543	0.281097	0.255550	0.255543	0.255543	15.87
	0.219751	0.263701	0.219765	0.219752	0.219751	15.88
	0.065302	0.071832	0.065269	0.065301	0.065303	15.83
3.04	0.145809	0.160390	0.145813	0.145809	0.145809	15.86
	0.237993	0.285592	0.238008	0.237994	0.237993	15.87
	0.021260	0.023386	0.021232	0.021259	0.021261	15.80
4.09	0.068360	0.000000	0.068362	0.068360	0.068360	15.86
	0.245824	0.294988	0.245838	0.245824	0.245823	15.87
	0.004673	0.000000	0.004650	0.004672	0.004674	15.76
4.49	0.050459	0.000000	0.050460	0.050459	0.050459	15.85
	0.247189	0.296627	0.247204	0.247190	0.247189	15.87
	0.002546	0.000000	0.002524	0.002545	0.002547	15.75
5.02	0.033261	0.000000	0.033262	0.033261	0.033261	15.85
	0.248342	0.298011	0.248357	0.248343	0.248342	15.87
	0.001106	0.000000	0.001087	0.001106	0.001107	15.73
5.54	0.021682	0.000000	0.021682	0.021682	0.021682	15.85
	0.249022	0.298827	0.249037	0.249023	0.249022	15.87
	0.000470	0.000000	0.000452	0.000469	0.000471	15.71
6.07	0.014005	0.000000	0.014006	0.014005	0.014005	15.84
	0.249423	0.299308	0.249439	0.249424	0.249423	15.87
	0.000196	0.000000	0.000180	0.000196	0.000197	15.69

В таблице 2, приведенной ниже, демонстрируется зависимость решений от выбора правой границы  $x_R$  при шаге  $h = 0.03$  (в таблицах приведено значение

Сходимость разностного решения задачи (10)-(12) на последовательности сгущающихся сеток ( $h = 0.12$ )

x	$y_i(h), i = 1, 2, 3$	$y_i(\frac{h}{2}), i = 1, 2, 3$	$y_i(\frac{h}{4}), i = 1, 2, 3$	$\frac{y_i(h) - y_i(\frac{h}{2})}{y_i(\frac{h}{2}) - y_i(\frac{h}{4})}$
1.2000	0.979442072E+00	0.979266475E+00	0.979256069E+00	16.8753
	0.207855332E+01	0.207859992E+01	0.207859050E+01	14.9470
	0.381611506E-01	0.383802155E-01	0.383795019E-01	306.9956
2.0000	0.115589769E+01	0.115594728E+01	0.115594904E+01	28.0858
	0.290779205E+01	0.290819738E+01	0.290820261E+01	77.4421
	0.381367176E-01	0.385435890E-01	0.385433063E-01	1439.0029
2.8000	0.101750525E+01	0.101776313E+01	0.101777346E+01	24.9747
	0.331776959E+01	0.331848114E+01	0.331849863E+01	40.6687
	0.239604516E-01	0.242738739E-01	0.242740445E-01	1837.2125
3.6000	0.757340599E+00	0.757656269E+00	0.757667826E+00	27.3147
	0.348577539E+01	0.348664274E+01	0.348666566E+01	37.8437
	0.110747722E-01	0.112288284E-01	0.112289738E-01	1059.2342
4.0000	0.626186616E+00	0.626488781E+00	0.626499404E+00	28.4439
	0.352379852E+01	0.352470400E+01	0.352472805E+01	37.6489
	0.697497739E-02	0.707280245E-02	0.707290917E-02	916.6328
6.0000	0.187030998E+00	0.187165056E+00	0.187169207E+00	32.2950
	0.357120252E+01	0.357215764E+01	0.357218286E+01	37.8683
	0.445551273E-03	0.451826169E-03	0.451838605E-03	504.5906
8.0000	0.437405111E-01	0.437789430E-01	0.437800863E-01	33.6158
	0.357342731E+01	0.357438498E+01	0.357441023E+01	37.9223
	0.189835441E-04	0.192517724E-04	0.192525410E-04	348.9728
14.0000	0.306940493E-03	0.307323121E-03	0.307335006E-03	32.1924
	0.357351113E+01	0.357446906E+01	0.357449431E+01	37.9315
	0.561499104E-09	0.569607812E-09	0.569650158E-09	191.4869

Таблица 4

X	$y_1(x_R = 10)$	$y_1(x_R = 20)$	$y_1(x_R = 30)$	$y_1(x_R = 40)$
0.0	.000000000E+00	.000000000E+00	.000000000E+00	.000000000E+00
1.0	.869055134E+00	.869029078E+00	.869029078E+00	.869029078E+00
2.0	.115596768E+01	.115595019E+01	.115595019E+01	.115595019E+01
3.0	.957460704E+00	.957467223E+00	.957467223E+00	.957467223E+00
4.0	.626478345E+00	.626504071E+00	.626504071E+00	.626504071E+00
5.0	.357486104E+00	.357527233E+00	.357527233E+00	.357527233E+00
6.0	.187107543E+00	.187171216E+00	.187171216E+00	.187171216E+00
7.0	.923256640E-01	.924359863E-01	.924359863E-01	.924359863E-01
8.0	.435682242E-01	.437806505E-01	.437806505E-01	.437806505E-01
9.0	.196567643E-01	.200948546E-01	.200948546E-01	.200948546E-01
10.0	.805732079E-02	.900059294E-02	.900059295E-02	.900059295E-02

Таблица 2

x	$\delta_1(x_R = 3)$	$\delta_1(x_R = 9)$	$\delta_1(x_R = 15)$	$\delta_1(x_R = 30)$	$\delta_1(x_R = 45)$	$\delta_1(x_R = 60)$
0.0	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00
0.3	.2540E-02	.7764E-07	-.9610E-08	-.9391E-08	-.9315E-08	-.9276E-08
0.6	.4455E-02	.1366E-06	-.1613E-07	-.1574E-07	-.1560E-07	-.1553E-07
0.9	.5435E-02	.1661E-06	-.1914E-07	-.1864E-07	-.1846E-07	-.1838E-07
1.2	.5611E-02	.1703E-06	-.1937E-07	-.1882E-07	-.1862E-07	-.1853E-07
1.5	.5274E-02	.1584E-06	-.1790E-07	-.1734E-07	-.1714E-07	-.1705E-07
1.8	.4682E-02	.1388E-06	-.1563E-07	-.1509E-07	-.1491E-07	-.1481E-07
2.4	.3358E-02	.9637E-07	-.1080E-07	-.1035E-07	-.1020E-07	-.1012E-07
2.7	.2773E-02	.7798E-07	-.8720E-08	-.8323E-08	-.8185E-08	-.8115E-08
3.0	.2274E-02	.6239E-07	-.6957E-08	-.6612E-08	-.6492E-08	-.6431E-08
x	$\delta_2(x_R = 3)$	$\delta_2(x_R = 9)$	$\delta_2(x_R = 15)$	$\delta_2(x_R = 30)$	$\delta_2(x_R = 45)$	$\delta_2(x_R = 60)$
0.0	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00
0.3	.3140E-02	.8031E-07	-.8341E-08	-.7656E-08	-.7417E-08	-.7297E-08
0.6	.5963E-02	.1509E-06	-.1542E-07	-.1408E-07	-.1361E-07	-.1338E-07
0.9	.8361E-02	.2085E-06	-.2091E-07	-.1895E-07	-.1827E-07	-.1792E-07
1.2	.1037E-01	.2540E-06	-.2498E-07	-.2244E-07	-.2155E-07	-.2110E-07
1.5	.1207E-01	.2903E-06	-.2798E-07	-.2488E-07	-.2380E-07	-.2326E-07
1.8	.1357E-01	.3203E-06	-.3023E-07	-.2660E-07	-.2534E-07	-.2470E-07
2.4	.1618E-01	.3691E-06	-.3347E-07	-.2882E-07	-.2720E-07	-.2638E-07
2.7	.1739E-01	.3907E-06	-.3474E-07	-.2960E-07	-.2781E-07	-.2690E-07
3.0	.1857E-01	.4112E-06	-.3591E-07	-.3027E-07	-.2831E-07	-.2732E-07
x	$\delta_3(x_R = 3)$	$\delta_3(x_R = 9)$	$\delta_3(x_R = 15)$	$\delta_3(x_R = 30)$	$\delta_3(x_R = 45)$	$\delta_3(x_R = 60)$
0.0	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00
0.3	-.1021E-01	-.3373E-06	.3245E-07	.3214E-07	.3202E-07	.3197E-07
0.6	-.2225E-01	-.7380E-06	.6886E-07	.6816E-07	.6791E-07	.6779E-07
0.9	-.2756E-01	-.9138E-06	.8484E-07	.8398E-07	.8367E-07	.8352E-07
1.2	-.2695E-01	-.8935E-06	.8284E-07	.8199E-07	.8170E-07	.8154E-07
1.5	-.2316E-01	-.7674E-06	.7110E-07	.7038E-07	.7013E-07	.7000E-07
1.8	-.1832E-01	-.6071E-06	.5624E-07	.5567E-07	.5547E-07	.5537E-07
2.4	-.9828E-02	-.3255E-06	.3016E-07	.2985E-07	.2974E-07	.2969E-07
2.7	-.6831E-02	-.2262E-06	.2096E-07	.2074E-07	.2067E-07	.2063E-07
3.0	-.4630E-02	-.1533E-06	.1423E-07	.1408E-07	.1403E-07	.1401E-07

Аналогичные численные исследования были проведены и для задачи (10)-(12). Результаты, полученные для  $m = 1.0$ ,  $n = 1.0$ ,  $b = 1.0$ , приведены в таблицах 3-4.

Таблица 4  
(Продолжение)

X	$y_2(x_R = 10)$	$y_2(x_R = 20)$	$y_2(x_R = 30)$	$y_2(x_R = 40)$
0.000	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00
1.000	0.179237227E+01	0.179234568E+01	0.179234568E+01	0.179234568E+01
2.000	0.290822182E+01	0.290820717E+01	0.290820717E+01	0.290820717E+01
3.000	0.337672154E+01	0.337673955E+01	0.337673955E+01	0.337673955E+01
4.000	0.352469160E+01	0.352473993E+01	0.352473993E+01	0.352473993E+01
5.000	0.356326769E+01	0.356333873E+01	0.356333873E+01	0.356333873E+01
6.000	0.357210777E+01	0.357219559E+01	0.357219559E+01	0.357219559E+01
7.000	0.357395564E+01	0.357405620E+01	0.357405620E+01	0.357405620E+01
8.000	0.357431266E+01	0.357442300E+01	0.357442300E+01	0.357442300E+01
9.000	0.357437415E+01	0.357449195E+01	0.357449195E+01	0.357449195E+01
10.000	0.357438113E+01	0.357450444E+01	0.357450444E+01	0.357450444E+01
X	$y_3(x_R = 10)$	$y_3(x_R = 20)$	$y_3(x_R = 30)$	$y_3(x_R = 40)$
0.000	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00
1.000	0.346939529E-01	0.346920173E-01	0.346920173E-01	0.346920173E-01
2.000	0.385471335E-01	0.385444675E-01	0.385444675E-01	0.385444675E-01
3.000	0.204949150E-01	0.204937589E-01	0.204937589E-01	0.204937589E-01
4.000	0.707302807E-02	0.707300445E-02	0.707300445E-02	0.707300445E-02
5.000	0.192148214E-02	0.192172142E-02	0.192172142E-02	0.192172142E-02
6.000	0.451616832E-03	0.451847007E-03	0.451847007E-03	0.451847007E-03
7.000	0.963150745E-04	0.965021201E-04	0.965021201E-04	0.965021201E-04
8.000	0.190998687E-04	0.192529861E-04	0.192529861E-04	0.192529861E-04
9.000	0.352062064E-05	0.365166948E-05	0.365166949E-05	0.365166949E-05
10.000	0.424017494E-06	0.666127412E-06	0.666127413E-06	0.666127413E-06

Начальные приближения строились по описанному в работе [4] способу. Они давали уровень невязки  $\sim 0.01$ . За 11-14 итераций происходило уменьшение невязки до  $10^{-9} - 10^{-11}$ . "Суперсходимость" разностного решения относительно шага  $h$  сетки объясняется достаточно большим значением  $h$ . Устанавливаются 4-5 значащих цифр.

## Результаты и обсуждение

На рис.2 и 3 приведены результаты некоторых расчетов для задачи о сольватированном электроде. Зависимость решения от параметра  $n$  при  $b = 1$ , и  $m = 2$  для нулевой моды (безузловое решение) приведена на рис.2. Рис.3 иллюстрирует аналогичную зависимость для первой моды. Для оценки точности расчетов полученные решения для реальной задачи тестировались на сходимость по  $h$  и по  $x_R$ , описанным в предыдущем разделе способом. Кроме того, для решаемой задачи можно получить специальное соотношение для проверки точности решения

$$4T_2 - 2T_{eq} - (1 - b)T_p + \frac{1}{b}T_q + 3\frac{a^2}{d^2b}T_N = 0, \quad (28)$$

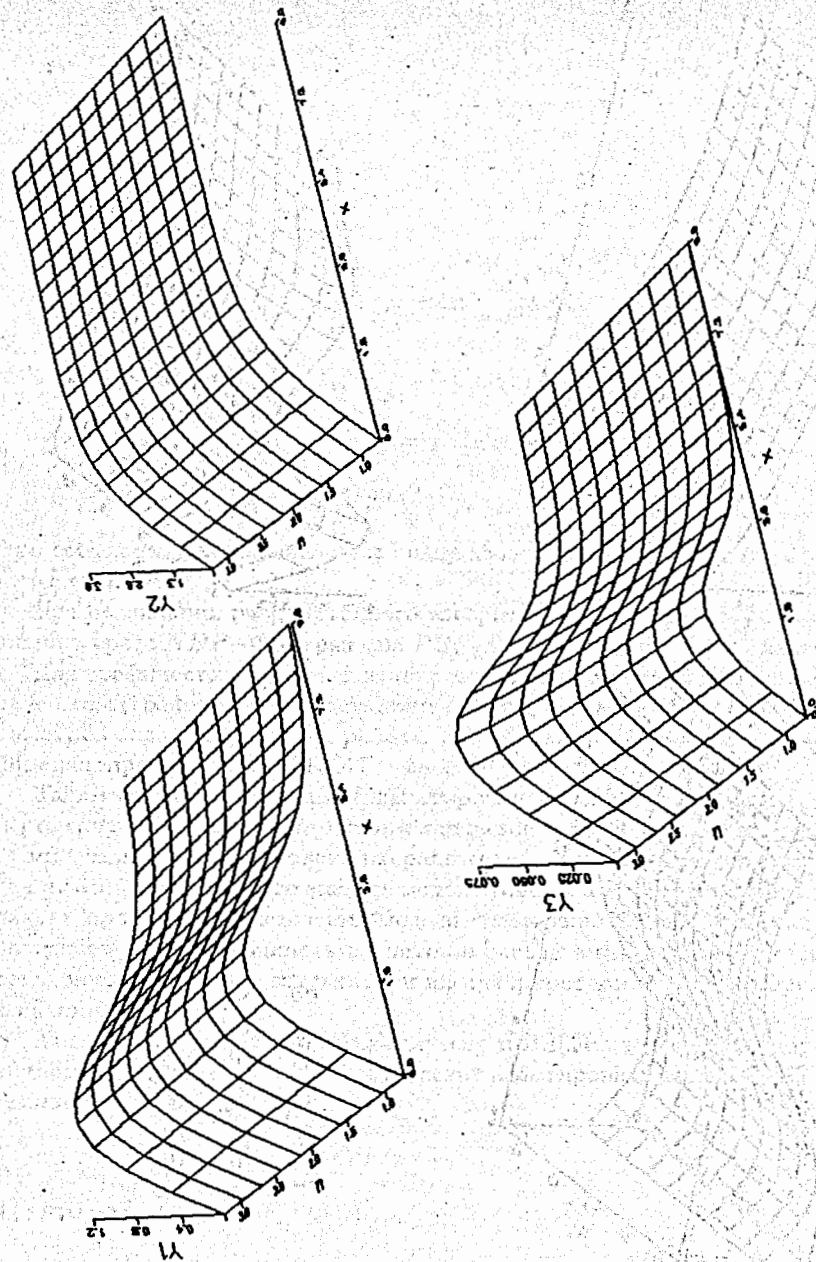


Рисунок 2.  $b=1.0, m=2.0, n=0.5(0.25)3.0$

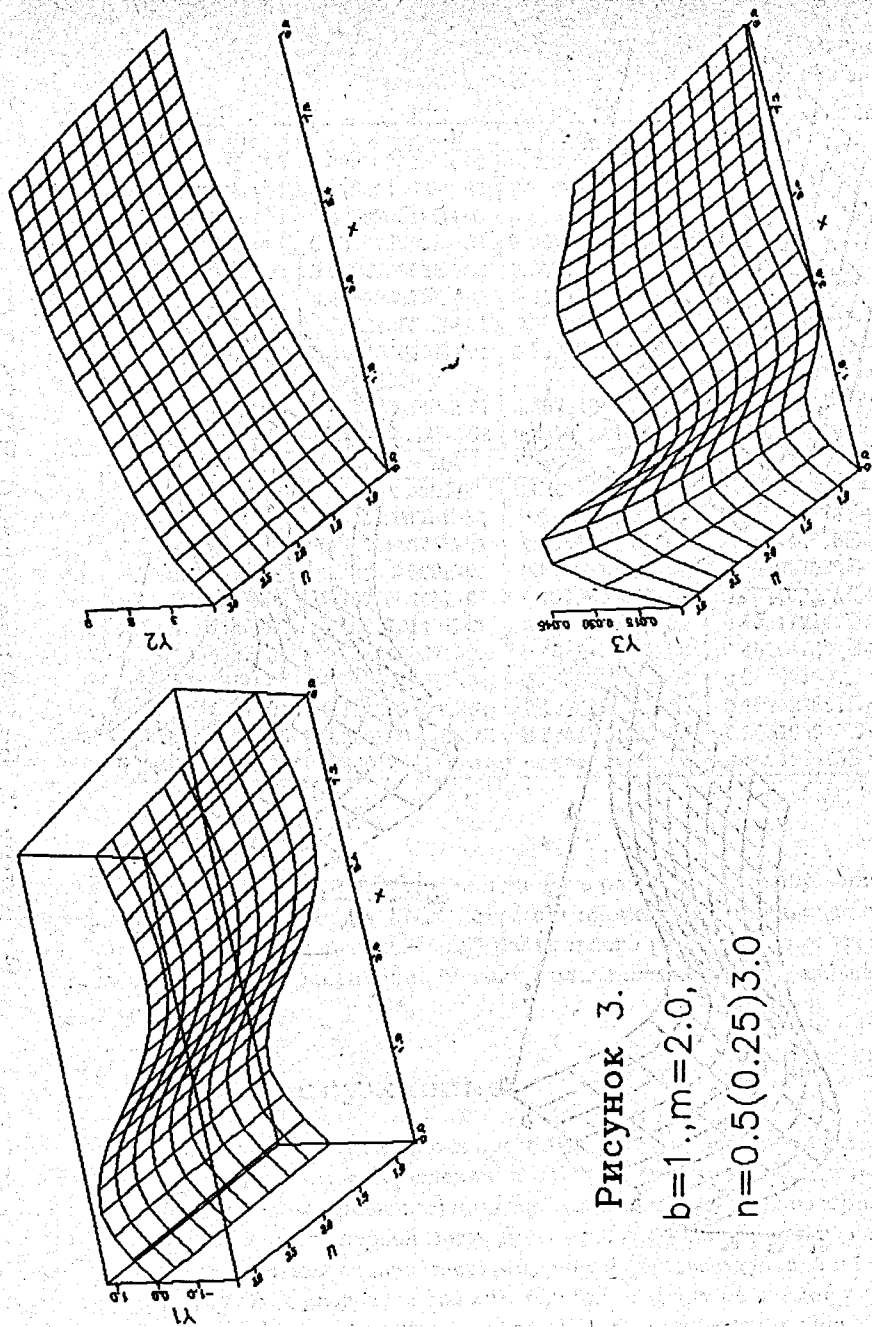


Рисунок 3.

$$b=1, m=2.0,$$

$$n=0.5(0.25)3.0$$

где

$$a^2 = \frac{A_2 T_1^2}{A_1}$$

$$d = \frac{A_1}{T_1^2}$$

$$T_1 = \int_0^\infty \xi^2(x) dx$$

$$T_2 = \int_0^\infty (\xi'(x))^2 dx$$

$$T_N = \int_0^\infty x^2 (e^{\frac{d\eta_2(x)}{x}} + e^{-\frac{d\eta_2(x)}{x}} - 2) dx \quad (29)$$

$$T_{eq} = \int_0^\infty \frac{\xi^2}{x} (b\eta_1(x) - \eta_2(x)) dx$$

$$T_p = \int_0^\infty x^2 (\partial_x (\frac{\eta_1(x)}{x}))^2 dx$$

$$T_q = \int_0^\infty x^2 (\partial_x [\frac{1}{x} (b\eta_1(x) - \eta_2(x))])^2 dx.$$

Это соотношение выполнялось с точностью  $\sim 10^{-5}$  для выбранных параметров  $n$ ,  $b$  и  $m$ .

Для реализации разработанного алгоритма создан пакет программ, работающий в среде NDP-Фортрана на PC/AT - 386. Общий объем пакета  $\sim 2.5 Mb$ .

Для графического представления результатов счета, оперативного контроля за счетом (графическое представление результатов по итерациям), задания параметров задачи и режимов работы используются возможности пакета HIGZ [9], адаптированного на PC/AT - 386.

Таким образом, задача о сольватированном электроде с помощью замены переменных сведена к многопараметрической граничной задаче с дополнительными условиями. Разработана итерационная схема для решения такого типа задач на базе непрерывного аналога метода Ньютона. С помощью разработанного пакета проведено исследование модели сольватированного электрода, которое позволяет оценить точность расчетов в зависимости от параметров вычислительной схемы. Сами результаты и их интерпретация являются предметом отдельной работы.

Авторы признательны О.В.Васильеву и В.Д.Лахно за плодотворное сотрудничество, В.Э.Файну за предоставление адаптированной на PC/AT - 386 версии пакета HIGZ.

## Литература

1. Возбужденные поляронные состояния в конденсированных средах. Сборник научных трудов, ИЦБИ АН СССР, Пущино, 1990.
2. Lakhno V.D., Vasil'ev O.V. Chem.Phys.153(n.1,2)p.147-159(1991), Phys.Lett.A.152(n.5,6)p.300-302(1991).



3. Чуев Г.Н., Лахно В.Д. Перенос электрона в глобулярных белках. Модель поляронного состояния электрона. Препринт НЦБИ АН СССР, Пушино, 1990.
4. Амирханов И.В. и др. Сообщение ОИЯИ, P11-85-445, Дубна, 1985.
5. Амирханов И.В. и др. Численное исследование нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения в обобщенной модели сольватированного электрона. Препринт НЦБИ АН СССР, Пушино, 1990.
6. Жидков Е.П., Пузынин И.В. ЖВМ и МФ, 7(1086)1967.
7. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. ЖВМ и МФ, 21(491)1981.
8. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сб.: Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики. KFKI-74-34, Будапешт(93-111)1974.
9. Bock R., Brun R. et al. *HIGZ* - High Level Interface to Graphics and Zebra, CERN program library Q120.

Рукопись поступила в издательский отдел  
18 октября 1991 года.