сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-91-87



И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, Т.П.Пузынина

# SNIDE - ПАКЕТ ПРОГРАММ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ НА ОСНОВЕ НАМН

1991

## I. Введение

Некоторые методы квантово-механических расчетов атомных и молекулярных состояний /1/, состояний в конденсированных средах /2/, описание кварковых связанных состояний /3/ и т.д. приводят к необходимости решения интегро-дифференциальных уравнений.

В данной работе представлена программа численного решения задачи на собственные значения следующего вида:

$$\varphi^{(1)}(\lambda,y) \equiv \left[\frac{d^2}{dx^2} + (Q(x) - \lambda R(x))\right]y(x) + y^n(x)\int_a^b K(x,x')y^m(x')dx' = 0 \quad (1)$$

$$n=0,1, \qquad m=1,2, \qquad x\in[a,b],$$

с граничными условиями

$$\varphi^{(2)}(\lambda,y) \equiv \left[d_1(\lambda,x)\frac{d}{dx} + f_1(\lambda,x)\right]y(x)\Big|_{x=a} = 0, \quad (2)$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda,y) \equiv \left[d_2(\lambda,x)\frac{d}{dx} + f_2(\lambda,x)\right]y(x)\Big|_{x=b} = 0 \quad (3)$$

и условием нормировки

$$\varphi^{(4)}(\lambda,y) \equiv \int_a^b y^2(x)dx - N = 0, \quad (4)$$

где $Q(x)$, $R(x)$, $K(x,x')$ – заданные на $[a,b]$ функции, обеспечивающие существование нетривиального решения, $N$ – нормировка, $d_1^2 + f_1^2 > 0$, $d_2^2 + f_2^2 > 0$. Численные схемы построены на основе непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) /4/. Согласно этому методу функциональное уравнение

$$\Phi(z) = 0, \quad (5)$$

представляющее исследуемую задачу, заменяется эволюционным уравнением

$$\frac{d}{dt}\Phi(z(t)) = -\Phi(z(t)), \quad (6)$$

$$0 \le t < \infty, \qquad z(0) = z_0.$$

Его интеграл есть $\Phi(t, z(t)) = \Phi(0, z_0)\, e^{-t}$. При $t \to \infty$ $\Phi(z)$ стремится к 0, и $z(t)$ стремится к искомому решению $z^*$. При практическом применении этого метода производится дискретизация по непрерывному параметру $t$. При этом важное значение приобретает проблема выбора шага $\tau$ по $t$, который оказывает существенное влияние на сходимость итерационного процесса. Реализация этого подхода в применении к интегро-дифференциальному уравнению вида $D(z) + S(z) = 0$, где $D$ и $S$ соответственно дифференциальный и интегральный операторы, а $z = (\lambda, y(x))$, приводит к необходимости решать на каждом шаге $t_i$ однопараметрические краевые задачи для интегро-дифференциальных уравнений, при дискретной аппроксимации которых приходится оперировать с полными матрицами высокого порядка. Для устранения этой трудности использован подход, предложенный в /6/, позволяющий решать на каждом шаге $t_i$ дифференциальные краевые задачи вместо интегро-дифференциальных. Ослабить требующиеся при таком подходе дополнительные ограничения на норму интегрального оператора /7/ должно применение так называемой функции включения $g(t)$, $g(0) = 0$, $g(\infty) = 1$ /5,8/. В этом случае зависимость оператора $\Phi(z) = D(z) + S(z)$ от $t$ вводится следующим образом:

$$\Phi(t) = D + g(t)\, S, \tag{7}$$

и эволюционное уравнение имеет вид

$$\Phi'_t(t) + \Phi'_z \frac{dz}{dt} = -\Phi(z, t), \tag{8}$$

$z(0) = z_0$ – решение уравнения

$$D(z) = 0. \tag{9}$$

Численная схема в представляемом пакете программ реализована на дискретной сетке $x_i \in \{x_0, \dots, x_n\}$ с неравномерным шагом $h_i = x_{i+1} - x_i$. Для аппроксимации на эту сетку коэффициентов $Q(x)$, $R(x)$ и ядра $K(x, x')$, которые могут быть даны или предварительно вычислены на более редкой сетке, для вычисления производных $y''$, $y$ и интегралов в задаче (I)-(4) в программе использованы кубические сплайны /9/. Для решения краевых задач применяется метод сплайн-коллокаций /10/, определивший получение решений с точностью порядка $O(h^2)$.

Работы по совершенствованию пакета SNIDE с целью доведения точности получаемых решений до порядка $O(h^4)$ ведутся и будут представлены в пакете SNIDE4. Набор алгоритмов для выбора шага по $t$, а также возможность подключения модифицированного алгоритма с фиксированным сдвигом собственного значения $\lambda$ позволяют при решении конкретной задачи подобрать режим, обеспечивающий хорошую сходимость и устойчивость вычислений. Работа программы была проверена на ряде тестовых задач и использовалась для численного решения интегро-дифференциального уравнения в рамках теории полярона.

В работе приводится описание алгоритма и список параметров программ пакета, а также обсуждаются численные результаты.

## 2. Алгоритм программы

### 2.1. Описание итерационного процесса

Последовательность операторов $\varphi^{(J)}$, $J=1,2,3,4$ задачи (1)-(4) можно рассматривать как нелинейный функционал $\Phi(z)$, где $z=(\lambda, y(x))$. Согласно подходу, определяемому непрерывным аналогом метода Ньютона, величины $(\lambda, y(x))$ ставятся в зависимость от непрерывного параметра $t$ $(0 \le t \le \infty)$ : $z(t)=(\lambda(t), y(x,t))$. Зависимость $\Phi(z)$ от $t$ вводится также через функцию включения $g(t)$ : $g(0)=0$, $g(\infty)=1$. Полученное эволюционное уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[D_J(z(t))+g(t)S_J(z(t))\right]=-\left[D_J(z(t))+g(t)S_J(z(t))\right], \quad J=1,2,3, \tag{10}$$

$$2\int_a^b y(x,t)y'_t(x,t)dx=-\int_a^b y^2(x,t)dx+N, \tag{11}$$

где $$D_1(z(t))\equiv\left[\frac{d^2}{dx^2}+Q(x)-\lambda(t)R(x)\right]y(x,t), \tag{12}$$

$$D_2(z(t))\equiv\left[d_{01}(x,\lambda(t))\frac{d}{dx}+f_{01}(x,\lambda(t))\right]y(x,t)\Big|_{x=a}, \tag{13}$$

$$D_3(z(t))\equiv\left[d_{02}(x,\lambda(t))\frac{d}{dx}+f_{02}(x,\lambda(t))\right]y(x,t)\Big|_{x=b}, \tag{14}$$

$$S_1(z(t))\equiv y^n(x,t)\int_a^b K(x,x')y^m(x',t)dx', \tag{15}$$

$$S_2(z(t))\equiv\left[d_{11}(x,\lambda(t))\frac{d}{dx}+f_{11}(x,\lambda(t))\right]y(x,t)\Big|_{x=a}, \tag{16}$$

$$S_3(z(t))\equiv\left[d_{12}(x,\lambda(t))\frac{d}{dx}+f_{12}(x,\lambda(t))\right]y(x,t)\Big|_{x=b}. \tag{17}$$

$$d_{01}(x,\lambda(t))+d_{11}(x,\lambda(t))=d_1(x,\lambda(t)), \tag{18}$$

$$d_{02}(x,\lambda(t))+d_{12}(x,\lambda(t))=d_2(x,\lambda(t)). \tag{19}$$

$$f_{01}(x,\lambda(t)) + f_{11}(x,\lambda(t)) = f_1(x,\lambda(t)), \tag{20}$$

$$f_{02}(x,\lambda(t)) + f_{12}(x,\lambda(t)) = f_2(x,\lambda(t)). \tag{21}$$

Вводя по $t$ дискретную сетку $t_i \in \{t_0, \dots, t_n, \dots\}$, при каждом фиксированном $t_i$ получаем краевую задачу для интегро-дифференциального уравнения:

$$D_1(\lambda_i, v_i) + g_i \tilde{S}_1(\lambda_i, v_i, y_i) = \mu_i R(x) y_i - (g_i' + g_i) S_1(\lambda_i, y_i) - \\ - D_1(\lambda_i, y_i) \tag{22}$$

$$D_2(\lambda_i, v_i) + g_i S_2(\lambda_i, v_i) = -\mu_i [D_{2\lambda}'(\lambda_i, y_i) + g_i S_{2\lambda}'(\lambda_i, y_i)] - \\ - D_2(\lambda_i, y_i) - (g_i' + g_i) S_2(\lambda_i, y_i) \tag{23}$$

$$D_3(\lambda_i, v_i) + g_i S_3(\lambda_i, v_i) = -\mu_i [D_{3\lambda}'(\lambda_i, y_i) + g_i S_{3\lambda}'(\lambda_i, y_i)] - \\ - D_3(\lambda_i, y_i) - (g_i' + g_i) S_3(\lambda_i, y_i), \tag{24}$$

где $y_i = y(x, t_i)$, $\lambda_i = \lambda(t_i)$, $v_i = y_t'(x, t_i)$, $\mu_i = \lambda_t'(t_i)$,

$g_i = g(t_i)$, $g_i' = g_t'(t_i)$.

$$\tilde{S}_1(\lambda_i, v_i, y_i) = n v_i y_i^{n-1} \int_a^b K(x,x') y_i^m(x') dx' + \\ + y_i^n \int_a^b K(x,x') m y_i^{m-1}(x') v_i(x') dx'. \tag{25}$$

Решив на $i$-том шаге задачу (22)–(25) и задав каким-либо образом шаг $\tau_i = t_{i+1} - t_i$, можно определить значения $\lambda_{i+1}$, $y_{i+1}(x)$ из соотношений

$$y_{i+1} = y_i + \tau_i v_i, \\ \lambda_{i+1} = \lambda_i + \tau_i \mu_i \tag{26}$$

Применяя подход, предложенный в /6/, /7/, интегро-дифференциальное уравнение (22) в задаче (22)–(25) можно заменить следующим дифференциальным уравнением:

$$\tilde{D}_1(\lambda_i, v_i) = \mu_i R(x) y_i - (g_i' + g_i) S_1(\lambda_i, y_i) - D_1(\lambda_i, y_i) - \\ - y_i^n \int_a^b K(x,x') m y_i^{m-1}(x') v_{i-1}(x') dx', \tag{27}$$

где

$$\widetilde{D}_1(\lambda_i, V_i)=\left[\frac{d^2}{dx}+Q(x)-\lambda_i R(x)+n y_i^{n-1}\int_a^b K(x,x')\,y_i^m(x')\,dx'\right]V_i \quad . \tag{28}$$

Решение $V_i(x)$ краевой задачи (27)-(28),(23)-(24) вычисляется следующим образом:

$$V_i(x) = V_i^{(1)}\cdot\mu_i + V_i^{(2)}(x) \ , \tag{29}$$

где $V_i^{(1)}$ и $V_i^{(2)}$ – решения краевых задач

$$\begin{cases} \widetilde{D}_1(\lambda_i, V_i^{(1)}) = R(x)\,y_i \\ D_2(\lambda_i, V_i^{(1)}) + g_i S_2(\lambda_i, V_i^{(1)})\Big|_{x=a} = D'_{2\lambda}(\lambda_i, y_i) + g_i S'_{2\lambda}(\lambda_i, y_i)\Big|_{x=a} \\ D_3(\lambda_i, V_i^{(1)}) + g_i S_3(\lambda_i, V_i^{(1)})\Big|_{x=b} = D'_{3\lambda}(\lambda_i, y_i) + g_i S'_{3\lambda}(\lambda_i, y_i)\Big|_{x=b} \end{cases} \tag{30}$$

$$\begin{cases} \widetilde{D}_1(\lambda_i, V_i^{(2)}) = -(g'_i + g_i)S_1(\lambda_i, y_i) - D_1(\lambda_i, y_i) - \\ \qquad - y_i^n \int_a^b K(x,x')\, m\, y_i^{m-1} V_{i-1}(x')\,dx' \\ D_2(\lambda_i, V_i^{(2)}) + g_i S_2(\lambda_i, V_i^{(2)})\Big|_{x=a} = -D_2(\lambda_i, y_i) - (g'_i + g_i) S_2(\lambda_i, y_i)\Big|_{x=a} \\ D_3(\lambda_i, V_i^{(2)}) + g_i S_3(\lambda_i, V_i^{(2)})\Big|_{x=b} = -D_3(\lambda_i, y_i) - (g'_i + g_i) S_3(\lambda_i, y_i)\Big|_{x=b} \end{cases} \tag{31}$$

,

а значение $\mu_i$ вычисляется по формуле, вытекающей из условия нормировки:

$$\mu_i = \frac{\frac{1}{2}\left(N - \int_a^b y_i^2(x)\,dx\right) - \int_a^b V_i^{(2)}(x)\, y_i(x)\,dx}{\int_a^b y_i(x)\, V_i^{(1)}(x)\,dx} \ . \tag{32}$$

Итак, зная $(\lambda_i, y_i(x))$, вычислив с помощью (27)-(32) $V_i$, $\mu_i$, можно найти $(\lambda_{i+1}, y_{i+1}(x))$. Таким образом, процесс вычислений полностью определен, если задано начальное приближение $(\lambda_0, y_0(x))$ и алгоритм для вычисления $\tau_i$. Начальное приближение подбирается, исходя из особенностей конкретной задачи. Один из вариантов – использование в качестве начального приближения решения дифференциального уравнения

$$D_J(z) = 0 \quad , \quad J = 1,2,3 \; , \tag{33}$$

где $D_J$ определяется из формул (I2)-(I4). Вычисления продолжаются до тех пор, пока не будет выполнено неравенство

$$\delta_i < \varepsilon \; , \tag{34}$$

где $\varepsilon > 0$ заранее заданное малое число, $\delta_i$ – невязка, вычисляемая по формулам:

$$\delta_i = \max_J \; \max_{x \in [ab]} \left| \varphi^{(J)}(\lambda_i, y_i(x)) \right| \; , \quad J = 1,2,3 \tag{35}$$

либо

$$\delta_i = \int_a^b \varphi^{(1)2}(\lambda_i, y_i(x)) \, dx \, . \tag{36}$$

## 2.2. Вычисление параметра $\tau_k$

Вычисление параметра $\tau_k$ на $k$-том шаге может осуществляться по одному из следующих пяти алгоритмов, применявшихся в /II-I3/

I. $$\tau_k = \tau_0 = const \; , \quad 0 < \tau_0 \leq 1 \, . \tag{37}$$

2. $$\tau_k = \begin{cases} \min(1, 2\tau_{k-1}), & \text{если} \quad \delta_k < \delta_{k-1} \\ \max(\tau_0, \tau_{k-1}/2), & \text{если} \quad \delta_k \geq \delta_{k-1} \end{cases} \tag{38}$$

3. $$\tau_k = \begin{cases} \min\left(1, \tau_{k-1} \dfrac{\delta_{k-1}}{\delta_k}\right), & \text{если} \quad \delta_k < \delta_{k-1} \\ \max\left(\tau_0, \tau_{k-1} \dfrac{\delta_{k-1}}{\delta_k}\right), & \text{если} \quad \delta_k \geq \delta_{k-1} \end{cases} \tag{39}$$

В формулах (38),(39) используется невязка, вычисленная по формуле (35).

4. $$\tau_k = \max\left(\tau_0 \, , \frac{\delta_{k-1}}{\delta_{k-1} + \delta_k(1)}\right) \tag{40}$$

где $\delta_k(1)$ – невязка на $k$-той итерации для $\tau = 1$ . В этом алгоритме используется значение невязки, вычисленное по формуле (36).

5. Параметр $\tau_K$ определяется следующим образом: на равномерной сетке $\omega_\tau$ отрезка $[0,1]$ с шагом $\Delta\tau$ вычисляется последовательность невязок $\delta_K$ по формуле (35) и выбирается такое значение $\tau_K$, которому соответствует минимальная невязка.

### 2.3. Модифицированный процесс

Модификация с фиксированным сдвигом $\bar\lambda$ по собственному значению призвана обеспечить сходимость к решению $\{\lambda_n^*, y_n^*(x)\}$, где $\lambda^*$ - ближайшее к $\bar\lambda$ собственное значение /12/. Суть ее состоит в том, что в эволюционном уравнении (6) вместо $z = \{\lambda, y(x)\}$ используется $\bar z = \{\bar\lambda, y(x)\}$, где $\bar\lambda$ некоторое фиксированное собственное значение. При этом эволюционное уравнение принимает вид:

$$\Phi'(\bar z)\frac{dz}{dt} = -\Phi(z),$$

что приводит к следующим изменениям в формулах итерационного процесса:

а) в левых частях уравнения и граничных условий краевых задач (30) и (31) вместо $\lambda$ будет $\bar\lambda$,

б) $D'_{2\lambda}, S'_{2\lambda}$ и $D'_{3\lambda}, S'_{3\lambda}$ в задаче (30) также будут зависеть от $\bar\lambda$. При использовании модифицированного процесса в нелинейном случае следует внимательно относиться к выбору начального приближения для функции $y(x)$.

## 3. Описание параметров программы

Программа написана на языке FORTRAN, реализована на ЭВМ CDC-6500 и адаптирована на ЭВМ ЕС-1037, VAX-8350 и IBM PC/AT. Обращение к ней осуществляется следующим оператором:

```
CALL SNIDE(M,U0,SL0,X,NQ,YK,Q,R,INT,N1,N2,T,NDEL,TAU0,NTAU,NT,XQ,
     EPS,NMAX,NH,NPR,NFIX,SLTFIX,NORM,SNP,U,SLT).
```

M – размерность массивов $U0$, $U$, $X$.
$M = N+2$, где $N$ число узлов в сетке $x_i \in \{x_1 \dots x_N\}$.

X – массив узлов сетки.

U0 – массив начальных приближений:
- в $U0(1)$ содержится $y'_{0x}(x_1)$, $x_1 = a$
- в $U0(M)$ содержится $y'_{0x}(x_N)$, $x_N = b$
- в $U0(2), \dots, U0(M-1)$ содержится $y_0(x_1) \dots y_0(x_N)$

SL0 – начальное приближение для собственного значения

NQ – размерность массивов Q,R,YK,XQ.

XQ – массив узлов сетки $\bar x_j \in \{\bar x_1 \dots \bar x_{NQ}\}$, в которых заданы значения функций $Q(x)$, $R(x)$, $K(x,x')$.

Q,R – массивы значений функций $Q(\bar{x}_J)$, $R(\bar{x}_J)$, $J=1,NQ$.

YK(NQ,NQ) – матрица, в которой содержатся значения $K(\bar{x}_i,\bar{x}_J)$, $i=1,NQ$, $J=1,NQ$.

INT – параметр, характеризующий наличие или отсутствие интегрального члена в уравнении (I).

При INT=0 решается задача (33).

При INT=1 решается задача (I)-(4),(7), функция $g(t)$ вычисляется по формуле $g(t)=1-e^{-t}$, $g'(t)=e^{-t}$.

При INT=2 решается задача (I)-(4),(7), $g(t)=1$, $g'(t)=0$.

N1 – степень функции перед интегралом

N2 – степень функции под знаком интеграла

T – начальное значение непрерывного параметра $t$.

NDEL – параметр, определяющий выбор формул для вычисления невязки.

При NDEL=1 используется формула (35).

При NDEL=2 используется формула (36).

TAUO,NTAU,NT – параметры, определяющие способ вычисления $\tau_K$.

В TAUO задается значение $\tau_0$,

NTAU определяет номер алгоритма из п.2.2 для вычисления $\tau_K$.

NT – число узлов сетки $\omega_\tau$ для алгоритма № 5.

EPS – заданное малое число $\varepsilon$ из соотношения (34), по которому прекращаются вычисления.

NMAX – максимально возможное число итераций.

NH – шаг таблицы, с которым печатаются входные данные, промежуточные и окончательный результаты.

NPR – количество итераций, через которое выдаются на печать промежуточные результаты.

NORM и SNP – параметры, связанные с нормировкой.

При NORM=1 осуществляется нормирование функции $y_K(x)$ на каждом шаге согласно условию нормировки (4). Если NORM=0, нормирование не производится. В SNP задается значение N из условия (4).

NFIX – при NFIX=1 подключается модифицированный процесс, описанный в п.2.3.

SLTFIX – фиксированный сдвиг $\bar{\lambda}$ собственного значения.

Результаты работы программы $\lambda$ и $y(x_i)$ присваиваются соответственно параметрам SLT и U. В процессе работы программы SNIDE происходит обращение к подпрограмме DFT, которая должна быть составлена пользователем. В ней задаются граничные условия. Параметры подпрограммы DFT следующие:

```
DFT(SLT,SLTFIX,d10,d20,d11,d22,f10,f20,f11,f22,dt10,dt11,dt20,dt22,
    Ft10,Ft11,Ft20,Ft22,A,B).
```

SLT – собственное значение, SLTFIX – фиксированный сдвиг собственного значения, A и B – границы отрезка.

$d10 - d_{01}(\lambda,x)$, $f_{10} - f_{01}(\lambda,x)$, $dt10 - d'_{01\lambda}(\lambda,x)$, $ft10 - f'_{01\lambda}(\lambda,x)$,

$d20 - d_{02}(\lambda,x)$, $f20 - f_{02}(\lambda,x)$, $dt20 - d'_{02\lambda}(\lambda,x)$, $ft20 - f_{02\lambda}(\lambda,x)$,

$d11 - d_{11}(\lambda,x)$, $f11 - f_{11}(\lambda,x)$, $dt11 - d'_{11\lambda}(\lambda,x)$; $ft11 - f'_{11\lambda}(\lambda,x)$,

$d22 - d_{12}(\lambda,x)$, $f22 - f_{12}(\lambda,x)$, $dt22 - d'_{12\lambda}(\lambda,x)$, $ft22 - f'_{12\lambda}(\lambda,x)$.

## 4. Численные примеры

Ниже приводятся некоторые результаты по тестам, на которых проверялась работа пакета программ SNIDE . В большинстве случаев использовалась равномерная сетка по $x$ с шагом $h = 0.05$ и числом узлов $N = 201$. Значения функций $Q(x)$, $R(x)$, $K(x,x')$ задавались на неравномерной сетке с числом узлов $NQ = 60$, с шагом $h = 0.05$ в окрестности нуля и более крупным шагом в остальной части интервала. Все представленные результаты получены на ЭВМ СДС-6500.

I. $$y''(x) + (Q(x) - \lambda)\, y(x) + \int_0^\infty K(x,x')\, y(x')\, dx' = 0.$$

$$y(0) = y(\infty) = 0,$$

$$Q(x) = 4 + \frac{2}{x} - \frac{\alpha e^{x}}{x^3},$$

$$K(x,x') = \frac{\alpha}{x^2 x'}$$

$$\alpha = 0 \div 1.$$

Аналитическое решение задачи: $\lambda^* = 5$, $y^*(x) = x e^{-x}$. Вычисления проводились на отрезке $[0,10]$. В качестве начального приближения использовалось решение соответствующего дифференциального уравнения, полученное с помощью программы SNIDE с параметром INT=0 .

В таблице I представлены результаты решения этой задачи при различных значениях параметра $\alpha$. Для каждого $\alpha$ указано полученное значение $\lambda$ и величина $\Delta = \max\limits_{i=1,N} |y(x_i) - y^*(x_i)|$. Задача решалась с нормировкой на каждом шаге, при $\varepsilon = 5\cdot 10^{-5}$, $\delta_0$ – величина начальной невязки.

Таблица I.

| $\alpha$ | $\delta_0$ | $\lambda$ | $\Delta$ |
|---|---|---|---|
| 0,000I | I,97 | 5,0003I | $2{,}64 \cdot 10^{-4}$ |
| 0,00I | I9,25 | 5,00053 | $2{,}56 \cdot 10^{-4}$ |
| 0,0I | I74,34 | 5,00049 | $2{,}23 \cdot 10^{-4}$ |
| 0,I | I37I,9 | 5,00036 | $1{,}41 \cdot 10^{-4}$ |
| 0,4 | 4326,9 | 5,0002I | $6{,}62 \cdot 10^{-5}$ |
| 0,7 | 6802,2 | 5,000II | $3{,}95 \cdot 10^{-5}$ |
| I | 9098,9 | 5,0000I | $2{,}71 \cdot 10^{-5}$ |

2. $$y''(x) + (1-\lambda)y(x) + \int_a^b K(x,x')\, y(x')\, dx' = 0$$

$$K(x,x') = e^{-x} e^{x'} \cdot \frac{4}{b^2}, \quad a = 0, \ b = 10.$$

а) Если граничные условия имеют вид $y(a) = 0$, $by'(b) + (1-b)y(b) = 0$, то решение задачи следующее: $\lambda^* = 2$, $y^*(x) = xe^{-x}$.

б) При граничных условиях

$$y'(a) + y(a) = 0$$
$$y'(b) + y(b) = 0$$

уравнение имеет решение $\lambda^* = 2{,}4$, $y^*(x) = e^{-x}$.
Задача решалась с граничными условиями а) и б) при $\varepsilon = 10^{-4}$, $\lambda_0 = 2$, $y_0(x) = e^{-x}$, с нормированием функции на каждом шаге. Расхождение с аналитическим решением в обоих случаях не превышало $3 \cdot 10^{-4}$.

3. $$y''(x) + (Q(x) - \lambda)\, y(x) + \int_a^b K(x,x')\, y(x')\, dx' = 0$$

$$Q(x) = -\frac{x^2 + 2x + 7}{(x+1)^2}, \quad K(x,x') = \frac{4}{(x+1)^3}(x'+1)\, e^{-x'}$$

$$y'(x) + \frac{1}{x+1}\, y(x) = 0, \quad x = a, b, \quad a = 0, \ b = 10.$$

Аналитическое решение этой задачи: $y^*(x) = \frac{1}{x+1}$, $\lambda^* = -1$. В качестве начального приближения использовалось решение задачи

$$y''(x) + (Q(x) - \lambda)\, y(x) = 0$$
$$y'(x) + \frac{2}{x+1}\, y(x) = 0, \quad x = a, b,$$

имеющее вид: $y_0(x) = \frac{1}{(x+1)^2}$, $\lambda_0 = -1$.
Начальное значение невязки $S = 4.13$. В таблице 2 указаны число итераций $K$ и время счета на СДС-6500 при различных способах выбора $\tau_K$. Расхождение с аналитическим решением во всех случаях не превышает $10^{-3}$.

Таблица 2.

| NTAU | TAUO | K | $t_{CDC\ 6500}$ (сек) |
|---|---|---|---|
| I | 0,3 | 25 | 60I,I |
| I | 0,5 | I6 | 384,I |
| 2 | 0,I | 26 | 625,I |
| 2 | 0,2 | 30 | 74I,5 |
| 3 | 0,I | 3I | 765,7 |
| 3 | 0,3 | 30 | 74I,5 |
| 3 | 0,5 | 20 | 482,5 |
| 4 | 0,I | 23 | 792,6 |
| 4 | 0,5 | 25 | 884,3 |
| 5 | 0,2 | I0 | 877,5 |

4. $$y''(x) - \frac{\lambda}{(x+1)^2}\, y(x) + \int_a^b \frac{x'+c}{(x+1)^5}\, y(x')\, dx' = 0 .$$

$$(x+1)\, y'(x) + 3y(x) = 0, \qquad x = a, b, \quad b = 9, \quad c = -11,21$$

Аналитическое решение задачи: $\lambda^* = 6.9$, $y^*(x) = \frac{1}{(x+1)^3}$. Начальное приближение $\lambda_0 = 6$, $y_0(x) = \frac{1}{(x+1)^2}$ является решением задачи

$$y''(x) - \frac{\lambda}{(x+1)^2}\, y(x) = 0, \qquad a = 0, \; b = 9$$

$$(x+1)\, y'(x) + 2y(x) = 0, \qquad x = a, b .$$

При этом начальное значение невязки $\delta_0 = 14.9$.

В таблице 3 представлены собственные значения $\lambda_K$, полученные на сетках с разным числом узлов, $\Delta_K = \max\limits_{k=1,N} |y_K(x) - y^*(x)|$, число итераций $K$, а также результат экстраполяции по Ричардсону /I7/. Вычисления проводились при NTAU=2, TAUO=0,2, EPS=$10^{-4}$.

Таблица 3.

| Число узлов | $\lambda_K$ | k число итераций | $\Delta_K$ |
|---|---|---|---|
| I0I | 6,542 | 8 | $4{,}I \cdot 10^{-3}$ |
| 20I | 6,68I | 8 | $I{,}I \cdot 10^{-3}$ |
| 40I | 6,886 | 9 | $2{,}9 \cdot 10^{-4}$ |
| Экстраполяция по Ричардсону | 6,89975 | | $I{,}46 \cdot 10^{-5}$ |

5. $$y''(x) - (4+\lambda)y(x) + y(x)\int_a^b k(x,x')y^2(x')dx'$$

$$K(x,x') = 0{,}3\cdot e^{2x'}, \quad a=0, \quad b=10$$

$$y'(x) + y(x) = 0, \quad x = a, b$$

Аналитическое решение задачи $y^*(x) = e^{-x}$, $\lambda^* = 0$. Для проверки порядка сходимости схемы были проведены вычисления на последовательности вдвое сгущающихся сеток с шагом $h_0 = 0.1$, $h_0/2$, $h_0/4$. Получены значения $\sigma_\lambda$ и $\sigma_{y_i}$, вычисленные по формулам

$$\sigma_\lambda = \frac{\lambda_h - \lambda_{h/2}}{\lambda_{h/2} - \lambda_{h/4}}, \qquad \sigma_{y_i} = \frac{y_{i\,h} - y_{i\,h/2}}{y_{i\,h/2} - y_{i\,h/4}}.$$

При этом $\sigma_\lambda = 3.9$, $\sigma_{y_i} > 3.9$, что подтверждает второй порядок сходимости схемы.

## 5. Применение пакета к решению уравнения полярона

Согласно модели Латтинжера-Лу [14], задача на собственные значения для интегро-дифференциального уравнения, решения которой определяют уровни энергии и волновые функции полярона, имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \psi'' - \lambda\psi(x) + 8\sqrt{2}\,\pi\alpha\,\psi(x)\dfrac{1}{x}\displaystyle\int_0^\infty D(x,x')\dfrac{\psi^2(x')}{x'}dx' = 0 \\ \psi(0) = \psi(\infty) = 0 \\ \displaystyle\int_0^\infty \psi^2(x)\,dx = \dfrac{1}{4\pi} \end{cases} \qquad (41)$$

где

$$D(x,x') = \begin{cases} x' - \frac{1}{c}e^{-cx}\,\mathrm{sh}\,cx', & x' < x, \\ x - \frac{1}{c}\,\mathrm{sh}\,cx\cdot e^{-cx'}, & x < x', \end{cases}$$

$\alpha > 0$ константа связи, $0 < \mu < 1$ приведенная масса, $c = \mu\sqrt{2}/\sqrt{1-\mu}$, $\lambda = 2\mu\varepsilon$, $\varepsilon > 0$ – уровни энергии. В предельном случае при $\mu = 1$ $D(x,x')$ имеет вид:

$$D(x,x') = \begin{cases} x', & x' < x \\ x, & x < x' \end{cases}$$

Решая эту задачу с помощью программы SNIDE, удалось получить результаты, хорошо согласующиеся с полученными в работах [15,16], где задача в рамках той же модели решалась в другой постановке, а именно в виде системы дифференциальных уравнений с параметром $a > 0$.

$$\begin{cases} \varphi'' - \varphi + \frac{1}{r}\varphi(W_1 - W_2) = 0 \\ W_1'' + \frac{1}{r}\varphi^2 = 0 \\ W_2'' - a^2 W_2 + \frac{1}{r}\varphi^2 = 0 \end{cases} \tag{42}$$

Решения и параметры задач (4I),(42) связаны между собой рядом соотношений. Если параметры $\alpha$ и $\mu$ для задачи (4I) выбраны, исходя из формулы

$$\mu(a,\alpha) = 2\left[\sqrt{1+\left(\frac{N}{a\alpha}\right)^2} + 1\right]^{-1}, \tag{43}$$

где $N = \int_0^\infty \varphi^2(x)\,dx$, то соответствующие решения задач (42) и (4I) должны удовлетворять соотношениям:

$$\begin{cases} \Psi = \gamma\varphi, & \gamma = \frac{1}{2\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\mu\varepsilon\sqrt{2}}{\pi\alpha}} \\ \lambda = \beta\gamma, & \beta = 1/\sqrt{2\mu\varepsilon} \end{cases} \tag{44}$$

$$\varepsilon = \mu/a^2(1-\mu) \tag{45}$$

В таблице 4 даны собственные значения $\lambda$ задачи (4I) для решений с числом узлов $N_z = 0,1,2$, вычисленные с помощью программы SNIDE . Во всех приведенных вариантах параметры $\alpha$ и $\mu$ выбраны согласно (43) в соответствии с имеющимися решениями задачи (42). Все вычисления по этой задаче проводились на VAX 8350 . При этом использовались значения входных параметров программы SNIDE для $N_z=0$ : T=0.1 , NTAU=1 , TAUO=0.5 , NORM=0 , NFIX=0 и для $N_z=1,2$ : T=15 , NTAU=3 , TAUO=0.05 , NORM=1 , NFIX=1 . Во всех случаях использовалась сетка с шагом $h = 0.1$ по $x$ ( $0 < x \le R$ , значение $R$ для каждого варианта указано в таблице 4). При этом для выполнения неравенства (34) с $\mathcal{E} = 10^{-4}$ требовалось в среднем 15-20 итераций.

В качестве начального приближения для $\Psi(x)$ при вычислении безузловых решений использовалась функция $\Psi_0(x) = xe^{-x}$ . Начальное приближение для узловых решений подбиралось в виде $\Psi_0(x) = cxe^{-\gamma_0 x}(1-\beta_0 x)$. Кроме того, возможно использование уже найденных решений в качестве начального приближения для решения задачи (4I) с измененными значениями $\alpha$ и $\mu$ . Вычисления показали, что задача в данной постановке весьма чувствительна к выбору начального приближения, и итерационный процесс имеет тенденцию "скатываться" к безузловому решению. Эта проблема встает тем более остро, что применить метод исключения уже найденных решений путем ортогонализации (как, например, в /12/) не удалось в силу нелинейности задачи. Поэтому проблема поиска эффективного способа построения начальных приближений остается актуальной и ее обсуждение будет предметом отдельной работы.

Таблица 4.

| $a$ | $Nz$ | $\alpha$ | $\mu$ | $R$ | $\lambda$ | $\lambda^{*/16/}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.6 | 0 | I | 0.2082 | 30 | 0.30321 | 0.30914 |
| 0.6 | 0 | 0.6 | 0.1309 | 30 | 0.10947 | 0.10953 |
| 0.6 | 0 | 5.125 | 0.6792 | 30 | 7.9882 | 7.9882 |
| 0.6 | I | 0.6 | 0.0737 | 80 | 0.03263 | 0.03259 |
| I. | 0 | 0.6 | 0.2414 | 30 | 0.15311 | 0.15363 |
| I. | 0 | I | 0.3674 | 30 | 0.42615 | 0.42675 |
| I. | 0 | 3.833 | 0.7973 | 30 | 6.2729 | 6.2721 |
| I. | I | I. | 0.2047 | 70 | 0.10536 | 0.10535 |
| 2. | I | 2. | 0.6059 | 40 | 0.4653 | 0.4659 |
| 2. | 2 | 2. | 0.458 | 60 | 0.1941 | 0.1942 |
| $\infty$ | 0 | $\frac{N}{2\sqrt{2}}$ $N=3.499$ | I | 25 | 3.996 | 4. |
| $\infty$ | 0 | $\frac{N}{8\sqrt{2}}$ | I | 25 | 0.998 | I. |

Авторы выражают искреннюю благодарность Пузынину И.В. за научное руководство при постановке задачи, решении ее и обсуждении результатов этой работы и Стриж Т.А. за предоставленные численные расчеты для тестирования и сравнения результатов нескольких вариантов поляронной задачи.

## Литература

1. Давыдов А.С. Квантовая механика. Изд-во Наука, М., 1973.
2. Возбужденные поляронные состояния в конденсированных средах. Сборник научных трудов. Пущино, 1990.
3. Pervushin V.N., Kalinovsky Yu.L., Kallies W., Sarikov N.A. Preprint JINR E2-89-58, 1989.
4. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, вып.I, с.127.

5. Виницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, P11-81-837, Дубна, 1981.
6. Гареев Ф.А. и др. ЖВМ и МФ, 1977, 17, с.407.
7. Жидков Е.П., Пузынин И.В., Хоромский Б.Н. ОИЯИ, P4-9512, Дубна, 1976.
8. Виницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, P11-82-315, Дубна, 1982.
9. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций "Наука", 1980.
10. Алберг Дж., Нильсон Э. Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения, Мир, 1972.
11. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. в сб.: Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики KFKI-74-34, Будапешт, 1974, 93-111.
12. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. ОИЯИ, P11-87-332, Дубна, 1987.
13. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. ЖВМ и МФ, 1981, 21, с.491.
14. [illegible] J.M., [illegible] Phys. Rev. B., 1980, 21,10,p.4251.
15. Амирханов И.В. и др. ОИЯИ, P11-85-445, Дубна, 1985.
16. Амирханов И.В. и др. Численное исследование нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения в обобщенной модели полярона. Пущино, 1988.
17. Марчук Г.И.,Шайдуров В.В. Повышение точности решений разностных схем "Наука", М.,1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 февраля 1991 года.