ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ДУБНА

12/41-24

P4 - 10942

B-486 4825/2-77

× ....

11

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина

ПРОЦЕСС НЬЮТОНА В ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С НЕПРЕРЫВНЫМ ВКЛЮЧЕНИЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ



P4 - 10942

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина

# ПРОЦЕСС НЬЮТОНА В ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С НЕПРЕРЫВНЫМ ВКЛЮЧЕНИЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Направлено в Journal Computational of Physics



### Виницкий С.И. и др.

Процесс Ньютона в теории возмущений с непрерывным включением взаимодействия

Предложены новые итерационные схемы решения задачи Штурма-Лиувилля по теории возмущений с непрерывным включением оператора возмущения в ходе итерационного процесса.

Эти схемы получены на основе непрерывного аналога метода Ньютона с использованием дополнительного нормировочного условия, фиксирующего заданную форму оператора возмушения, что позволяет определить функцию включения взаимодействия (оператора возмущения) в итерационном процессе и найти решение задачи.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

## Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Vinitsky S.I. et al.

P4 - 10942

Newton Process in the Perturbation Theory with Continuous Inclusion of Interaction

New iteration schems are suggested for solution of the Sturm-Liouville problem according to the perturbation theory with continouous inclusion of the perturbation operator in the course of iteration process.

These schemes are obtaines on the basis of a continuous analogue of the Newton method using additional normalization condition that fixes the given form of the perturbation operator. This fact allows one to determine the function of interaction inclusion (perturbation operator) in the iteration process and to find the solution of the problem.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

## 1. Введение

Как известно, в теории возмущений при решении общей задачи на собственные значения

 $Sy - \lambda Ry = 0, \qquad (1/2)$ 

где S и R - линейные операторы, определенные на некотором функциональном пространстве Y, a λ - вещественное число, применяется представление операторов S и R в виде сумм

 $S = S(G) = S_0 + GS_1,$  /2/  $R = R(G) = R_0 + GR_1,$ 

где G>0 - вещественный параметр /константа взаимодействия/, от которого зависят  $\lambda = \lambda(G)$  и y = y(G). Представление /2/ позволяет свести решение исходной однородной задачи /1/ к решению последовательности неоднородных задач /1/.

При решении задачи на собственные значения /1/, /2/ с помощью метода Ньютона <sup>/2/</sup> и его непрерывного аналога<sup>/3/</sup> к уравнениям /1/, /2/ присоединяют дополнительное нормировочное условие

$$F(G, \lambda(G), y(G)) = 0$$
, /3/

где F - некоторый функционал.

С 1977 Объединенный инспитут ядерных исследований Дубма

3

Система уравнений /1/-/3/ представляет собой нелинейное функциональное уравнение

$$\phi(\mathbf{G}, \mathbf{z}(\mathbf{G})) = \begin{pmatrix} \mathbf{S}(\mathbf{G})\mathbf{y}(\mathbf{G}) - \lambda(\mathbf{G})\mathbf{R}(\mathbf{G})\mathbf{y}(\mathbf{G}) \\ \mathbf{F}(\mathbf{G}, \lambda(\mathbf{G}), \mathbf{y}(\mathbf{G})) \end{pmatrix} = 0 \qquad /4/$$

относительно пары  $z = z(G) = (\lambda(G), y(G))$ , которое в рамках непрерывного аналога метода Ньютона заменяется эволюционным уравнением

$$\phi'_{z}$$
 (G, z(G, t))  $\frac{dz(G, t)}{dt} = -\phi(G, z(G, t))$  /5/

на полуоси  $0 \le t \le \infty$  с заданным начальным условнем

$$z(G, 0) = \{\lambda_{O}(G), y_{O}(G)\},$$
 /6/

Замена задачи /4/ эволюционным уравнением /5/ приводит к естественному обобщению представления /2/ для операторов S = S(G), R = R(G)

$$S = S(g) = S_{0} + gGS_{1},$$
  
 $R = R(g) = R_{0} + gGR_{1},$ 
(2 )/

и условия /3/ для функционала

$$F = F(g, \lambda(g), y(g)) = 0,$$
 /3 /

где g = g(t) - непрерывная функция включения взаимодействия /операторов возмущения S <sub>1</sub> и R <sub>1</sub>/, удовлетворяющая граничным условиям

$$g(0) = 0$$
 **H**  $g(\infty) = 1$ .  $/7/$ 

Функцию g(t) можно определить различными способами /см., например,  $^{/4/}$  /. Однако оптимальный способ введения функции g(t) в эволюционное уравнение /5/ должен быть согласован с динамической и асимптотической /при t→∞ / формами оператора ф. Это достигается путем присоединения новых дополнительных условий для определения функции g(t):

$$F_{\lambda}(G,\lambda,y)\frac{d\lambda}{dt} + F_{y}(G,\lambda,y)\frac{dy}{dt} = -F_{y}(G,\lambda,y), \qquad /8/$$

g(0) = 0,

к эволюционному уравнению /5/ и начальному условию /6/, которые принимают вид

$$\phi_{g} \frac{dg}{dt} + \phi_{\lambda} \frac{d\lambda}{dt} + \phi_{y} \frac{dy}{dt} = -\phi, \qquad /5 /$$

$$g(0) = 0, \ \lambda(0,0) = \lambda_0(0), \ y(0,0) = y_0(0), \ /6 \ /$$

где

$$\phi = \phi(\mathbf{g}, \lambda, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{S}(\mathbf{g})\mathbf{y} - \lambda \mathbf{R}(\mathbf{g})\mathbf{y} \\ \mathbf{F}(\mathbf{g}, \lambda, \mathbf{y}) \\ \mathbf{F}(\mathbf{G}, \lambda, \mathbf{y}) \end{pmatrix} , \qquad /9/$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{t}), \, \lambda = \lambda \left( \mathbf{t}, \mathbf{g}(\mathbf{t}) \right), \, \mathbf{y} = \mathbf{y} \left( \mathbf{t}, \lambda \left( \mathbf{t}, \mathbf{g}(\mathbf{t}) \right), \, \mathbf{g}(\mathbf{t}) \right),$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{\partial\lambda}{\partial t} + \frac{\partial\lambda}{\partial g} \quad \frac{dg}{dt},$$
 /10/  
$$\frac{dy}{dt} = \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial \lambda} \quad \frac{d\lambda}{dt} + \frac{\partial y}{\partial g} \quad \frac{dg}{dt}.$$

Таким образом, решение задачи на собственные значения /1/, /2/ сведено к решению эволюционного уравнения /5 // с начальным условием /6 //, что позволяет определить при  $t \to \infty \lambda^*$  и  $y^*$  - собственное решение задачи /1/, /2/. Кроме того, в процессе решения /5 /, /6 / излагаемый метод позволяет определить функцию включения взаимодействия g(t), которая удовлетворяет граничным условиям /7/, на всей полуоси  $0 \le t < \infty$ .

В данной работе для решения задачи /1/ построены новые итерационные схемы, представляющие собой дискретную аппроксимацию эволюционного уравнения /5 / с начальным условием /6 /. Возможности этих итерационных схем иллюстрируются на примере решения радиального уравнения Шредингера, возмущение потенциала в котором моделирует вычислительные процессы, возникающие при решении систем интегродифференциальных уравнений <sup>/5/</sup> и систем, состоящих из большого числа дифференциальных уравнений <sup>/6/</sup>.

## 2. Итерационная схема теории возмущений

Дискретная аппроксимация эволюционного уравнения /5 '/ по параметру t реализуется с помощью метода Эйлера  $^{/5/}$ Полуось  $0 \le t < \infty$  разбивается узловыми точ-ками t<sub>k</sub> /k =0,1,2,.../ с переменным шагом  $\tau_k$ 

$$t_{k+1} = t_k + \tau_k$$
,  $t_0 = 0$ . /11/

В дальнейшем для краткости будем использовать в обозначении величин, зависящих от t, индекс k при  $t = t_k$ , опуская запись самого аргумента. Выражения /10/ заменим конечноразностными аналогами

$$\xi_{k} = \frac{g_{k+1} - g_{k}}{\tau_{k}}, \mu_{k} = \frac{\lambda_{k+1} - \lambda_{k}}{\tau_{k}}, v_{k} = \frac{y_{k+1} - y_{k}}{\tau_{k}}.$$
 (12/

Каждый шаг итерационного процесса по методу Эйлера для задачи /5 '/-/6 '/ состоит в том, что при заданных значениях  $g_k$ ,  $\lambda_k$ ,  $y_k$  находятся значения итерационных поправок  $\xi_k$ ,  $\mu_k$ ,  $v_k$  из соотношения

$$\phi_{g}\xi_{k} + \phi_{\lambda}\mu_{k} + \phi_{y}v_{k} = -\phi,$$
 /5 "/

являющегося конечноразностной аппроксимацией уравнения /5 %, справедливого при каждом t=t<sub>k</sub>, где

$$\phi = \begin{pmatrix} \mathbf{S}(\mathbf{g}_{k})\mathbf{y}_{k} - \lambda_{k}\mathbf{R}(\mathbf{g}_{k})\mathbf{y}_{k} \\ \mathbf{F}(\mathbf{g}_{k}, \lambda_{k}, \mathbf{y}_{k}) \\ \mathbf{F}(\mathbf{C}, \lambda_{k}, \mathbf{y}_{k}) \end{pmatrix}, \phi = \begin{pmatrix} \mathbf{G}(\mathbf{S}_{1}\mathbf{y}_{k} - \lambda_{k}\mathbf{R}_{1}\mathbf{y}_{k}) \\ \mathbf{F}_{g}(\mathbf{g}_{k}, \lambda_{k}, \mathbf{y}_{k}) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

$$(13)$$

$$\phi_{\lambda} \equiv \begin{pmatrix} -R(g_{k})y_{k} \\ F_{\lambda}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) \\ F_{\lambda}(G,\lambda_{k},y_{k}) \end{pmatrix}, \qquad \phi_{y} \equiv \begin{pmatrix} S(g_{k}) - \lambda_{k}R(g_{k}) \\ F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) \\ F_{y}(G,\lambda_{k},y_{k}) \end{pmatrix}$$

Уравнение /5 '' эквивалентно следующей системе уравнений:

$$(S(g_{k}) - \lambda_{k}R(g_{k}))v_{k} = -C(S_{1} - \lambda_{k}R_{1})y_{k}\xi_{k} - (S(g_{k}) - \lambda_{k}R(g_{k}))y_{k} + \mu_{k}R(g_{k})y_{k}, / 14/$$

$$F_{g}(g_{k}, \lambda_{k}, y_{k})\xi_{k} + F_{\lambda}(g_{k}, \lambda_{k}, y_{k})\mu_{k} + F_{y}(g_{k}, \lambda_{k}, y_{k})[v_{k}] = -F(g_{k}, \lambda_{k}, y_{k}), / 15/$$

$$F_{\lambda}(C, \lambda_{k}, y_{k})\mu_{k} + F_{y}(G, \lambda_{k}, y_{k})[v_{k}] = -F(C, \lambda_{k}, y_{k}) \cdot / 16/$$

Решение  $v_k$  и  $\mu_k$  представим в виде сумм

где и <sub>к</sub> и <sub>ж</sub>удовлетворяют системе уравнений

$$\{S(g_{k}) - \lambda_{k}R(g_{k})\}u_{k} = -\{S(g_{k}) - \lambda_{k}R(g_{k})\}y_{k} + \mu_{k}^{(1)}R(g_{k})y_{k},$$
  
$$\{S(g_{k}) - \lambda_{k}R(g_{k})\}w_{k} = -G\{S_{1} - \lambda_{k}R_{1}\}y_{k}\xi_{k} + \mu_{k}^{(2)}\xi_{k}R(g_{k})y_{k}.$$
  
$$/18/$$

Компоненты  $u_k = w_k$ , в свою очередь, представим в виде сумм

$$u_{k} = u_{k}^{(1)} + \mu_{k}^{(1)} u_{k}^{(2)} ,$$

$$w_{k} = (w_{k}^{(1)} + \mu_{k}^{(2)} w_{k}^{(2)}) \xi_{k},$$
/19/

где  $u_k^{(1)}$ ,  $u_k^{(2)}$ ,  $w_k^{(1)}$ ,  $w_k^{(2)}$  удовлетворяют системе уравнений

$$(S(g_{k}) - \lambda_{k} R(g_{k}))u_{k}^{(1)} = -(S(g_{k}) - \lambda_{k} R(g_{k}))y_{k},$$

$$(S(g_{k}) - \lambda_{k} R(g_{k}))u_{k}^{(2)} = R(g_{k})y_{k},$$

$$(S(g_{k}) - \lambda_{k} R(g_{k}))w_{k}^{(1)} = -C(S_{1} - \lambda_{k} R_{1})y_{k},$$

$$(S(g_{k}) - \lambda_{k} R(g_{k}))w_{k}^{(2)} = R(g_{k})y_{k}.$$
/20/

Подставляя выражение для  $\mu_k$  /17/ в соотношение /15/ и используя равенство  $u^{(2)} = w^{(2)}$ , которое следует из уравнений /20/, получим k k

$$\{F_{\lambda}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(2)}]\} (\mu^{(1)} + \mu^{(2)} \xi_{k}) =$$

$$= -F(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) - F_{g}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})\xi_{k} -$$

$$-F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(1)}] - F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[w_{k}^{(1)}]\xi_{k}. /21/$$

Уравнение /21/ линейно зависит от параметра  $\xi_k$ , отсюда следуют выражения для  $\mu_k^{(1)}$  и  $\mu_k^{(2)}$ :

$$\mu_{k}^{(1)} = -\frac{F(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(1)}]}{F_{\lambda}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(2)}]}, /22/$$

145

$$\mu_{k}^{(2)} = - \frac{F_{g}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[w_{k}^{(1)}]}{F_{\lambda}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(2)}]}, /23/$$

Подставляя вычисленные поформулам /22/, /23/ значения  $\mu_k^{(1)}$  и  $\mu_k^{(2)}$ в асимптотическое условие /16/, найдем выражение для параметра  $\xi_k$ :

$$\xi_{k} = \frac{F(G,\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(G,\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(1)}] + \{F_{\lambda}(G,\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(G,\lambda_{y},y_{k})[u_{k}^{(2)}]\}\mu_{k}^{(1)}}{F_{y}(G,\lambda_{k},y_{k})[w_{k}^{(1)}] + \{F_{\lambda}(G,\lambda_{k},y_{k}) + F_{y}(G,\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(2)}]\}\mu_{k}^{(2)}}.$$
(24/

Таким образом, величины  $\xi_k$ ,  $\mu_k$ ,  $v_k$  в соотношениях /10/-/12/ определены, что позволяет найти значения  $g_{k+1}$ ,  $\lambda_{k+1}$ ,  $y_{k+1}$ , если  $\tau_k$  задано. Итерационный параметр  $\tau_k$  выбирается из условия минимума невязки  $\delta_k = ||\phi(g_k^{+\tau} \xi_k^{\xi}, \lambda_k^{+\tau} \mu_k, y_k^{+\tau}, v_k^{0})||_c$ . /25/ Поскольку начальное условие /6 // задано в локальной окрестности искомого решения  $\lambda^*, y^*$ , процесс вычисления  $g_k$ ,  $\lambda_k$ ,  $y_k$  с помощью формул /12/-/25/ полностью определен для всех k, при этом функция включения взаимодействия  $g_k$  стремится к 1 при  $k \rightarrow \infty$  в соответствии с условием /7/.

## 3. Решение радиального уравнения Шредингера

Рассмотрим применение предложенной итерационной схемы к решению радиального уравнения Шредингера

$$\phi^{(1)} = \{ \frac{d^2}{dx^2} + q(x) - \lambda \} y(x) = 0$$
 /26/

с граничными условиями

$$\phi^{(2)} = y(a) = 0, \quad a = 0,$$
 /27/  
 $\phi^{(3)} = y(b) = 0$ 

и условием нормировки

$$\phi^{(4)} = \int_{a}^{b} dx y(x) \{ \frac{d^{2}}{dx^{2}} + q(x) - \lambda \} y(x) = 0.$$
 /28/

Задача /26/-/28/ на конечном интервале [a,b] представляет собой аппроксимацию задачи дискретного спектра для уравнения /26/ на полуоси  $[0,\infty)$ .

В теории возмущений потенциал q(x) представляется в виде суммы

$$q(x) = q_0(x) + Gq_1(x).$$
 /29/

В частности, q<sub>1</sub>(x) может иметь вид

$$q_{1}(x)y(x) = \int_{a}^{b} dx' K(x, x') y(x').$$
 /30/

Предложенная в работе  $^{/5/}$  вычислительная схема решения интегродифференциальных уравнений позволяет на каждом шаге итерационного процесса решать граничные задачи для дифференциальных уравнений переносом возмущения  $Gq_1(x)v_k$  в правую часть уравнения /14/ с запаздыванием  $(k \rightarrow k - 1)$ . Сходимость этой итерационной схемы имеет место при жестких ограничениях на норму оператора  $Gq_1(x)$ . Предложенная в данной работе итерационная схема /12/-/25/ с непрерывным включением оператора возмущения  $Gq_1(x)$  позволяет ослабить условия ограниченности нормы оператора  $q_1(x)$  и обобщить итерационную схему работы  $^{/5/}$ . Для этого вместо решения линейных задач /20/ следует решать возмущенные линейные задачи, которые имеют вид:

$$\{S(0) - \lambda_{k} R(0)\} u_{k}^{(1)} = -(S(g_{k}) - \lambda_{k} R(g_{k}))y_{k} - g_{k} G(S_{1} - \lambda_{k} R_{1})u_{k-1},$$

$$\{S(0) - \lambda_{k} R(0) \} u_{k}^{(2)} = R(g_{k}) y_{k},$$

$$\{S(0) - \lambda_{k} R(0) \} w_{k}^{(1)} = -G(S_{1} - \lambda_{k} R_{1}) y_{k} - g_{k} G(S_{1} - \lambda_{k} R_{1}) w_{k-1},$$

$$= g_{k} G(S_{1} - \lambda_{k} R_{1}) w_{k-1},$$

$$\{S(0) - \lambda_{k} R(0) \} w_{k}^{(2)} = R(g_{k}) y_{k},$$

$$/20 '/$$

где  $u_{k-1}$  и  $w_{k-1}$  считаются известными из предыдущего итерационного шага. Промоделируем итерационный процесс /5 '' на примере представления оператора q(x) в виде /29/, где

$$q_{0}(x) = (1 + C)q(x),$$
 /31/  
 $q_{1}(x) = -q(x),$  11

С > 0 - вещественный параметр /константа взанмодействия/. На каждом шаге итерационного процесса необходимо при заданных значениях  $g_k$ ,  $\lambda_k$ , у решить краевые задачи /20/, где операторы  $S(g_k)$ ,  $R(g_k)$ ,  $S_1$ ,  $R_1$  имеют вид

$$S(g_{k}) = \frac{d^{2}}{dx^{2}} + q_{0}(x) + g_{k}Gq_{1}(x) ,$$

$$R(g_{k}) = 1 ,$$

$$S_{1} = Gq_{1}(x) ,$$

$$R_{1} = 0 .$$
/32/

Краевые задачи /20/ решаются численно методом прогонки /7/ для конечноразностных уравнений, аппроксимирующих /20/ с точностью порядка  $h^2$  на равномерной сетке узлов  $w_h = \{x_1 = a, x_2 = x_1 + h, ..., x_n = x_{n-1} + h, ..., x_N = b\}$ . Далее по формулам /22/, /23/ вычисляем значения  $\mu_k^{(1)}$ н  $\mu_k^{(2)}$ , где

$$F(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) = \int_{a}^{b} dx y_{k} (\frac{d^{2}}{dx^{2}} + q_{0}(x) + g_{k}^{C} q_{1}(x) - \lambda_{k}) y_{k},$$

$$F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(1)}] = 2\int_{a}^{b} dx y_{k} (\frac{d^{2}}{dx^{2}} + q_{0}(x) + g_{k}^{C} q_{1}(x))u_{k}^{(1)},$$

$$F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(2)}] = 2\int_{a}^{b} dx y_{k} (\frac{d^{2}}{dx^{2}} + q_{0}(x) + g_{k}^{C} q_{1}(x))u_{k}^{(2)},$$

$$F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[u_{k}^{(1)}] = 2\int_{a}^{b} dx y_{k} (\frac{d^{2}}{dx^{2}} + q_{0}(x) + g_{k}^{C} q_{1}(x))u_{k}^{(2)},$$

$$F_{y}(g_{k},\lambda_{k},y_{k})[w_{k}^{(1)}] = 2\int_{a}^{b} dx y_{k} (\frac{d^{2}}{dx} + q_{0}(x) + g_{k}^{C} q_{1}(x))w_{k}^{(1)},$$

$$F_{\lambda}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) = -\int_{a}^{b} dx y_{k}^{2}, /33/$$

$$F_{\alpha}(g_{k},\lambda_{k},y_{k}) = -\int_{a}^{b} dx y_{k}^{Q} q_{1}(x) y_{k},$$

12

а значение  $\xi_k$  находим из формулы /24/, где F(G,  $\lambda_k$ , y, ),

$$F_{y}(G, \lambda_{k}, y_{k})[u_{k}^{(1)}], F_{y}(G, \lambda_{k}, y_{k})[u_{k}^{(2)}], F_{y}(G, \lambda_{k}, y_{k})[w_{k}^{(1)}]$$

определяются формулами/33/ с заменой  $g_k = 1$ . Интегралы в формулах /22/, /23/, /24/, /33/ вычисляются с помощью квадратурной формулы трапеций с точностью O(h<sup>2</sup>). Далее по формулам /12/ переходим к значенням  $g_{k+1}$ ,  $\lambda_{k+1}$ ,  $v_{k+1}$ , при этом  $\tau_k$  вычисляется из условия минимума главной компоненты невязки /25/, которая имеет вид

$$\delta_{k} = \max_{n} || \frac{y \binom{(n+1)}{k+1} - 2y \binom{(n)}{k+1} + y \binom{(n-1)}{k+1}}{h^{2}} + (q^{(n)} \lambda_{k+1}) y \binom{(n)}{k+1} ||,$$

$$/25'/$$

где

$$q^{(n)} = q(x_n), \quad y_k^{(n)} = y_k^{(x_n)}.$$

При выполнении условия

$$\delta_k < \epsilon$$
, /34/

где  $\epsilon > 0$  - достаточно малое число /  $\sim 10^{-7}$  /, итерационный процесс заканчивается. При этом в силу теорем о сходимости непрерывного аналога метода Ньютона /8/ и сходимости разностной задачи Штурма-Лиувилля /9/ выполняются следующие соотношения:

$$\lim_{k \to \infty} g_{k} = 1 + O(h^{2}),$$

$$\lim_{k \to \infty} \lambda^{*} + O(h^{2}),$$

$$\lim_{k \to \infty} y_{k} = y^{*}(x) + O(h^{2}).$$

$$/35/$$

$$k \to \infty$$

### 4. Численные расчеты

Численные исследования итерационного процесса /5 "/, реализованного схемой /12/-/25/, проводились для задачи /26/-/28/ с потенциалом q(x):

$$q(x) = q_{o}(x) + Cq_{1}(x), q_{o}(x) = (1 + C)q_{M}(x), q_{1}(x) = -q_{M}(x),$$

где

$$q_{y}(x) = -2MD[e^{-2a(x-x_{0})}-2e^{-a(x-x_{0})}]$$
 /31 /

/ 10, 11, 12/

потенциал Морзе / 3/ с наборами значений параметров

Μ	= 4,69;	D = 0,1055;	a = 0,67;	$x_0 = 2,15;$	/36/

M =9,126; D =0,1040;  $\alpha$  = 0,67; x = 2,09; /37/

M = 9,126; D = 0,0824;  $\alpha$  = 0,697;  $x_0$  = 2,25. /38/

В настоящих расчетах была использована конечноразностная сетка по переменной х с постоянным шагом h =0,0125,  $x_1=0$ ,  $x_n=b=:20$ , что дает априорную оценку абсолютной точности результата ~10<sup>-4</sup>. В итерационном процессе /5 "/ параметр  $\tau_k$  выбирался автоматически в соответствии с условием /25 '/. Итерации прекращались при уменьшении невязки до величины порядка ~10<sup>-8</sup>.

В табл. І показана сходимость предложенного итерационного процесса /5 '' для задачи /26/-/28/ с потенциалом /31 '/ с набором значений параметров /36/ от начального приближения  $\lambda_0 = 0,6$  при константах взаимодействия G= 0;0.5;1.

При реализации рассматриваемого итерационного процесса для повышения устойчивости в данном случае применена модификация метода Ньютона, в которой

 $\frac{d\lambda}{dt}\Big|_{t\to\infty}\to \text{const.}$ 

Особый интерес представляет сходимость итерационного процесса /5  $\ddot{\prime}$  от начальных приближений, соответствующих решениям  $z_0 = (\lambda_0, y_0(x))$  задачи /26/-/28/ с потенциалом  $q_0(x)$ . В этом случае итерационная схема /11/-/25/ и /20 // представляет собой обобщение известных схем теорин возмущений  $^{/1-6/}$ . В табл. 2,3,4 показана сходимость итерационного процесса /5 // для задачи /26/-/28/ от начальных приближений  $z_0$ , соответствующих потенциалу  $q_0 = (1+G)q_M(x)$  при различных константах G с наборами значений параметров /36/,/37/и /38/ соответственно.

На рис. 1 и 2 изображена функция g(t) для наборов значений параметров потенциала Морзе /36/ и /37/ соответственно при некоторых значениях константы взаимодействия G. Видно, что поведение функции g(t) различно для разных наборов значений параметров потенциала /31 / и разных G.

## 5. Заключение

Представленные в данной работе новые итерационные схемы, а также проведенные численные исследования сходимости построенных итерационных процессов демонстрируют новые возможности применения непрерывного аналога метода Ньютона в теории возмущений для решения задачи типа Штурма-Лиувилля /смотри, например, 15,6/ /. Пренмуществом данных итерационных схем по сравнению с /1.2,5,6/ является непрерывное включение оператора возмущения с помощью функции включения взанмодействия g(t). Оптимальный вид функции g(t) устанавливается непосредственно в ходе итерационного процесса /5 "/, что оказалось возможным благодаря присоединению к эволюционному уравнению /5 / с начальным условнем /6/ дополнительных условий /8/, фиксируюших форму оператора при  $t \rightarrow 0$  и  $t \rightarrow \infty$ . Функция g(t) имеет довольно сложную конфигурацию /см. рис. 2/, особенно при больших значениях константы взаимодействия С. поэтому она не может быть определена заранее, как это предлагалось, например, в работах/4/ Кроме того, предложенные итерационные схемы могут быть применены к решению многоканальной задачи рассеяния, которая формулируется как задача на собственные значения в рамках непрерывного аналога метода Ньютона /3/

В заключение авторы благодарят К.Н.Данилову за помощь в работе.



Рис. 1. Функция g(t), полученная из итерационного про-чесса /5"/ решения задачи /26/-/28/ для потенциала Морзе /31'/ с параметрами M = 4,69; D = 0,1055; a = 0,67;  $x_0 = 2,15$ .



Рис. 2. Функция g(t), полученная из итерационного про-цесса /5 "/ решения задачи /26/-/28/ для потенциала Морзе /31 '/ с параметрами M =9,126; D =0,104; a = = 0,67; x<sub>0</sub>=2,09.

tentre $\lambda_{\bullet} = 0.6$ .	G = I	ع <sub>(1)</sub> الم م ع ک م م م م م م م م م م	-0,405I -0,I329+I0 <sup>I</sup> 0,91II 0,4068 0,344I -0,810I -0,4067-I0 <sup>-I</sup>	-0,2505 -0,4581 0,4754 0,9124 0,4490 -0,6580 0,8717	-0.3549 0,2052.10 <sup>I</sup> 0,429I I,0006 -0,II03 -0,6869 0,8820.10 <sup>-I</sup>	-0.3157 0,4515 0,4331 1,0000 -0,1673 -0.6638 -0,6308.10 <sup>-3</sup>	-0,3348 0,3476 0.4331 I,0000 -0,1669 -0,6607 -0,2573.10 <sup>-5</sup>	-0,3309 0,1027.10 <sup>-I</sup> 0,43310,1669 -0,6600 -0,2411.10 <sup>-8</sup>	-0,330I 0,2236.10 <sup>-4</sup> 0,6598 -0,4959.10 <sup>-D</sup>	-0,3300 0,1122.10 <sup>-7</sup> 0,6598 0,3669.10 <sup>12</sup>	-0,3299 0,1270·10 <sup>-10</sup> 2833·10 <sup>11</sup>	$-0.3299$ 0.2075 $\cdot 10^{-10}$ 5512 $\cdot 10^{13}$
		90	0,4068	0,9124	1,000	1,000	1,0000	ſ	I	I	ı	ı
			1116,0	0,4754	0,4291	0,4331	0.4331	0,4331	1	ı	، ٥	'
кения А. = 0,6.		÷	-0,1329.10 <sup>I</sup>	-0,4581	0,2052.I0 <sup>I</sup>	0,4515	0,3476	0,1027.10 <sup>-1</sup>	0,2236.10-4	0,1122.10 <sup>-7</sup>	0,1270-I0 <sup>-I(</sup>	0.2075.10 <sup>-1(</sup>
		(E) M	-0 <b>,</b> 405I	-0,2505	-0,3549	-0,3157	-0,3348	-0,3309	<b>-0,</b> 330I	-0,3300	-0,3299	-0,3299
го приол	G = 0,5	(s) 24	-0°0601	0,3081	0,6900	0,0641	-0,0474	-0,1635	-0 <b>,</b> I668	-0 <b>,</b> I668	ı	,
		e B	-1,3291	-I,5834	0,2407	0,6421	0,9897	1,0000	1 <b>,0</b> 000	ı	ł	ı
		~	I,0774	0,8351	0,5657	0,5303	0,4363	0,4331	0,4331	ı	ı	1
	0 =	~	0,4020	0,4430	0,4339	0,4332	0,4331	0,4331	ı	ı	ı	ı
	ľ	×	н	2	ო	4	2	9	~	8	ი	ទ

= 2,15 or Havarbuo задачи (26)-(28) × = 0,67; 55 ۲  $\overline{}$  $M = 4_{\bullet}69; \ M = 0.1055;$ \* Таблица I. Сходимость итерационного процесса (5 потенциала Морзе

с параметрами

17

Таблица 2. Сходимость итерационного процесса (5<sup>"</sup>) для задачи (26)-(28) с параметрами потенциала Морзе M=4,69;D=0,1055;  $\omega = 0,67$ ;  $\omega =$ 

		BJAIM	одействия_	G=0,2 0.7;	1.1.			
κ	λ	5	æ	8	·μ	<u>ب</u> ر	M(2)	*
Ι	0,3883	0 <b>,29</b> 99•10 <sup>-1</sup>	0,7780	0,7236	0,2420	0,3696	-0,1371	0,9301
2	0,4269	0,3676·10 <sup>-2</sup>	0,8890	0,9670	$0,4340 \cdot 10^{-1}$	0,7884.10	-0,1294	0,2737
3	0,4332	0,1017,10-3	I,0000	0 <b>,9999</b>	$0,6386 \cdot 10^{-2}$	$0,1071 \cdot 10^{-1}$	-0,1319	0,3281.10-1
4	0,433I	0.5937.10-5	0,8890	I,0000	-0,1507.10-2	-0,1225.10-3	-0,1319	0,2140-10-3
5	0,433I	0,4985.10	I,0000	1,0000	-0,8I00·10 <sup>-5</sup>	-0,1017.10-2	-0,1319	-0,1569.10-2
6	0,4331	0,1861.10-9	I,0000	1,0000	0,6493.10	0,4137.10-0	-0,1319	-0,1785-10-5
I	0,4232	0,7736·10 <sup>-1</sup>	0,6670	0,5074	0,3346	0,7255	-0,5138	0,7607
2	0,4606	0,3683·10 <sup>-1</sup>	0,7780	0,7661	0,48II·I0 <sup>-1</sup>	0,1815	-0,40II	0,3325
3	0,4333	$0,2584 \cdot 10^{-2}$	I,0000	0,9986	$-0,2727 \cdot 10^{-1}$	0,8174	-0,4687	0,2326
4	0,4331	0,3077·10 <sup>-5</sup>	I,0000	0,9999	-0,1892.10-3	0,4295·I0 <sup>-3</sup>	-0,4617	0,1340-10 <sup>-2</sup>
5	0 <b>,433I</b>	0,4580.10-8	I,0000	I,0000	-0,3816·10 <sup>-5</sup>	$0,2960 \cdot 10^{-5}$	-0,4618	0,1467.10-4
6	0 <b>,43</b> 3I	$0,2964 \cdot 10^{-9}$	I,0000	I,0000	0,6522.10-8	-0,2485.10	-0,4618	-0,1950.10-7
7	0,433I	0,1444·10 <sup>-9</sup>	0 <b>,8890</b>	I,0000	-0,7129.10-10	0,8611.10-12	-0,4618	0,1562·10 <sup>-9</sup>
I	0.3950	0.2098	0.2230	0.4002.IO <sup>-I</sup>	0.8745	1.0245	-0.8356	0.1794
2	0.4736	0.1905	0.2230	0.1165	0.3523	0,5581	-0.5995	0.3431
3	0.4408	0.5982·10 <sup>-1</sup>	T.0000	0.9768	-0.3275.10-I	0 6107	-0 7479	0,8604
4	0 4347	0 1169.10-2	T 0000	0,9968	-0 6097.10-2	0.8417.10-2	-0,7274	0 1995. TO <sup>-I</sup>
5	0,4331	$0.2329 \cdot 10^{-4}$	T 0000	T 0000	$-0,0037 \cdot 10^{-2}$	0.7278.10-3	_0,726T	0,199510
6	0,433I	0,1701.10 <sup>-0</sup>	I,0000	0.9999	$0.3520 \cdot 10^{-4}$	-0.7419.10-5	-0,7258	_0 5872•10 <sup>-4</sup>
7	0, <b>433</b> I	0,1067·10 <sup>-8</sup>	I.0000	I.0000	-0.2327.10-6	$0.2477 \cdot 10^{-7}$	-0.7257	0 3547.10-6
8	0,433I	0,3320 · 10 <sup>-9</sup>	I,0000	1,0000	-0.2329.10-9	0.1108·10 <sup>-11</sup>	-0.7257	0.3226•10 <sup>-9</sup>
				-		_,	0,.201	0,0000 10

Таблица 3. Сходимость итерационного процесса (5<sup>\*</sup>) для задачи (26)-(28) с параметрами потенциала Морзе M = 2.1.26; D = 0.1040; $d = 0.64; x_{s} = 2.09$  при различных константах взаимодействия S = 0.1; 0.8; 1.6.

~

ĸ	λ	ð	æ	8	М	μm	Ju (A)	È
I	0,1372	0,1462·10 <sup>-1</sup>	0,7780	0,6944	0,2198.10 <sup>-1</sup>	0,7358·I0 <sup>-I</sup>	-0,578I·10 <sup>-1</sup>	0,8926
2	0,1382	0,I <b>448</b> 'IO <sup>-2</sup>	0,8890	.C <b>,968</b> 5	0,II90·IO <sup>-2</sup>	0,1673·10 <sup>-1</sup>	-0,5 <b>232</b> ·10 <sup>-1</sup>	0 <b>,297</b> I
3	0,1382	0 <b>,4I38·I</b> 0 <sup>-4</sup>	1,0000	I,0000	0,3301.10-4	0,2220·IO <sup>-2</sup>	-0,5I <b>49·I</b> 0 <sup>-I</sup>	0 <b>,4247 · 10<sup>-1</sup></b>
4	0,1382	0,9745.10-7	1,0000	I,000C	0,7169.10-4	-0,5211.10-4	-0,5142·10 <sup>-1</sup>	-0,1015·10 <sup>-2</sup>
5	0,1382	0,1763-10 <sup>-9</sup>	I,0000	I,0000	0,7325·IO <sup>-7</sup>	0 <b>,2038·</b> IO <sup>-5</sup>	-0,5I42·I0 <sup>-I</sup>	0,3820.10-4
6	0,1382	0,75I7·IO <sup>-IO</sup>	I.6000	I,0000	0,1398·10 <sup>-9</sup>	0,1990·10 <sup>-8</sup>	-0,5I42·IO <sup>-I</sup>	0,3 <b>598</b> ·10 <sup>-7</sup>
			:+ 		<u></u>			
I	0,3542	0,1779	0,7780	0,3259	0,3011	0,5914	-0,6929	0 <b>,4189</b>
2	0,1035	0,7757.10-1	0,6670	I,0883	-0,3759	0,2365'IO <sup>-I</sup>	-0,3496	1,1432
3	0,1485	0,2691·10 <sup>-1</sup>	0,5560	0,9626	0,8I05·IO <sup>-I</sup>	0,2521.10 <sup>-2</sup>	-0,3472	-0,226I
4	0,I377	0,5523·10 <sup>-3</sup>	I,0000	I,00I4	-0,1080·10 <sup>-1</sup>	0,4950·10 <sup>-2</sup>	-0,4060	0 <b>,3878·</b> IO <sup>-I</sup>
5	0,1381	0,4754·IO <sup>-6</sup>	I,0000	I,0000	0 <b>,4130·10<sup>-3</sup></b>	-0,1659·10 <sup>-3</sup>	-0,4III	-0,1 <b>408</b> •10 <sup>-2</sup>
6	0,1381	0,4823·I0 <sup>-9</sup>	I,00C0	I,0000	0,1504·10 <sup>-6</sup>	0,1562·10 <sup>-6</sup>	-0,4113	0,1407.10-7

Продолжение таблицы 3

0,1661	0,8241	0,00I0	-0,0269	46,1439	I,3599	-I,663I	-26,928I
0,8963	0,6430	0,2230	-0,2932	3,2743	1,3509	-1,6106	-1,1942
0,4990	0,3978	0,2230	0,3219	-I,78I5	0,1351	-0,6947	2,7587
0,1464	0,2182	0,4450	0,9213	-0,7923	0,8674·IO <sup>-I</sup>	-0,6526	I,3469
0,1546	0,3526·IO <sup>-I</sup>	I,0000	0,9676	0,8094·10 <sup>-2</sup>	0,3642.10 <sup>-1</sup>	-0,6117	0,4630·I0
0,1390	0,1145.10-2	I,0000	0,9981	-0,1553·10 <sup>-1</sup>	0,1120·10 <sup>-1</sup>	-0,8790	0,3041.10
0,1381	0,4943.10-5	Í,0000	0,9999	-0,8284·I0 <sup>-3</sup>	0,7779·IO <sup>-3</sup>	-0,8248	0,1948.10
0,1382	0,7994·I0 <sup>-I0</sup>	I,0000	I,0000	-0, <b>48</b> 33·10 <sup>-6</sup>	0, <b>I483</b> ·I0 <sup>-5</sup>	-0,8228	0,2390.10
0.1381	0.4497'IO <sup>-IO</sup>	0,7780	I,0000	-0,2607.10-10	0,1560.10 <sup>-10</sup>	-0,8228	0,5065.10
0.1381	0.3563.10-10	0.7780	I.0000	-0.1133.10-10	0,3124.10-11	-0,8228	0,1757.10

Таблица 4. Сходимость итерационного процесса (5<sup>"</sup>) для задачи (26) - (28) с параметреми потенциала Морее M=9,126;9:0,0224;J=0,607,2;=2,25 при различных

	RONCTANTAX BEAMONDERCTHER 6=0.5:19.20										
K	2	e de la constante de la consta	સ્	9	<u>N</u>	M <sup>(4)</sup>	N(a)	1			
I	0,5754·I0 <sup>-1</sup>	0,5069-I0 <sup>-1</sup>	I,0000	0,6599	-0,6246·10 <sup>-1</sup>	0,8835·10 <sup>-1</sup>	-0,2285	0.6599			
2	0,3443.10-1	$0,9000 \cdot 10^{-2}$	I,0000	0,9482	-0,2311·10 <sup>-1</sup>	0,2006·I0 <sup>-I</sup>	-0,1497	0.2883			
3	0 <b>,3207</b> •I0 <sup>-1</sup>	0,4638·10 <sup>-3</sup>	I,0000	0,9966	-0,2358·10 <sup>-2</sup>	$0,3544 \cdot 10^{-2}$	-0,1221	0.483I · IO <sup>-I</sup>			
4	0,3185·10 <sup>-1</sup>	0,2661.10-5	I,0000	0,9999	-0,21 <b>8</b> 5·10 <sup>-3</sup>	0,1709·10 <sup>-3</sup>	-0,1156	0.3367.10-2			
5	0 <b>,3185</b> •10 <sup>-1</sup>	0,9764·IO <sup>-8</sup>	I,0000	I,0000	-0,2185.10 <sup>-5</sup>	0,1205-10 <sup>-5</sup>	-0,1153	0,2939.10-4			
Ī	0,1733	0,1558	I,0000	0,5040	0,5338 ·10 <sup>-1</sup>	0,3544	-0,5972	0,5040			
2	0,6760·I0 <sup>-1</sup>	0,6536.10	I,0000	0,8653	-0,1057	0,1158·10 <sup>-2</sup>	-0,2960	0,3613			
3	0,6357·I0 <sup>-1</sup>	0,2339.10-1	I,0000	0,8791	$-0,4023 \cdot 10^{-2}$	0,4850 10-4	-0,2952	0,1379·10 <sup>-1</sup>			
- 4	0,6522.10-1	0,I495·I0 <sup>-1</sup>	I,0000	0,8736	0,1647·10 <sup>-2</sup>	0,5132.10-4	-0,2897	-0.5508·10 <sup>-2</sup>			
5	0,6187.10-1	0,1197.10-1	I,0000	0,8849	-0,3345.10 <sup>-2</sup>	0,5392.10-4	-0,3011	0.II29·I0 <sup>-I</sup>			
6	0,6497.10-1	0,I469·I0 <sup>-1</sup>	I,0000	0,8744	0,3068.10 <sup>-2</sup>	0,5909.10-4	-0,2874	-0.1053·10 <sup>-1</sup>			
7	0,649I·I0 <sup>-I</sup>	0,12I6·10 <sup>-1</sup>	I,0000	0,8747	-0,5135.10-4	0,5033.10-4	-0.3043	0.3341.10-3			
8	0,2274.10-1	$0,2341 \cdot 10^{-2}$	0,8890	I,0168	-0,4743.IO <sup>-I</sup>	0,4889·I0-4	-0,2971	0.1598			
9	$0,3127 \cdot 10^{-1}$	0,6622.10-3	I,0000	I,00I9	0,853I·10 <sup>-2</sup>	$0,4984 \cdot 10^{-2}$	-0,2390	-0.1484·10 <sup>-1</sup>			
IO	0,3184.10	0,2332.10-5	I,0000	I,0000	0,5752.10 <sup>-3</sup>	0,1266.10-3	-0.2293	-0.1956.10-2			
II	0 <b>,3185·10<sup>-1</sup></b>	0,3484·IO <sup>-9</sup>	I,0000	I,0000	0,4424·10 <sup>-5</sup>	0,2073·10 <sup>-5</sup>	-0,2307	$-0,1019 \cdot 10^{-4}$			
I	0.6753	0.5566	0.4450	-0.5954.	10 <sup>-1</sup> 1.2477	T.0434	_T 5273	-0 1338			
2	0.9123·10 <sup>-1</sup>	0.3041	I.0000	0,9231	-0.5840	0.3043.TO <sup>-I</sup>	-0.6252	0 9827			
3	0.7446.IO <sup>-I</sup>	$0.3266.10^{-1}$	T-0000	0.9330	-0.1677.10 <sup>-1</sup>	0.1047·10 <sup>-I</sup>	-0,6395	0,9844.10-2			
4	0.3447·I0 <sup>-I</sup>	0.3829.10-2	T.0000	0.9879	-0.3999 · TO <sup>-I</sup>	-0.6918.10-2	-0,0000	0.5493.10			
5	0.3235 · 10 <sup>-1</sup>	0.7459.10-3	T.0000	0.9982	-0.2105.10-2	0.3027.10-2	_0 4971	0,0430-10			
6	0.3185.10-1	0 1610.10-5	T 0000	0 0000	-0 5082 .10-3	0,0021-10-3	-0,45/1	0,1002-10			
7	0,0100-10-1	0,1010.10 -9	I,0000	U, 3339	-0,002-10-0	0,2039.10-0	-0,4637	0,1708.10-2			
	0,3192 10 +	0,12/4.10-5	1,0000	1,0000	0,1171.10~0	0,1283.10~5	-0,4614	0,2439.10-6			

#### Литература

- 1. Lowdin P.O. J.Math.Phys., 1965, 3, 1341; Perturbation Theory and Its Application. Ed. by M.Wilcox Wiley, New York, 1966.
- 2. Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ в нормированных пространствах. Физматгиз, <u>М.</u>, 1959.
- 3. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. J.Comp. Phys., 1973, 13,1.
- Пономарев Л.И. и др. ОИЯИ, Р4-9915, Дубна, 1976. 4. Давиденко Д.Ф. Укр.матем.Ж., 1955, 7, 1; Препринты ИАЭ-2048, М., 1970, ИАЭ-2081, М., 1971, ИАЭ-2082 М., 1971, ИАЭ-2083, М., 1971; Wasserstrom E. J. Comp. Phys., 1972, 9, 53.
- 5. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, 1, 127.
- Гареев Ф.А. и др. ЖВМ и МФ, 1977, 17, 407; 6. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1977, 72, 1670.
- 7. Годунов С.К., Рябенький В.С. Введение в теорию разностных схем. Физматгиз., М., 1962.
- 8. Жидков Е.П., Пузынин И.В., Хоромский Б.Н. ОИЯИ, P4-9512, Дубна, 1976.
- Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. Наука, М., 1971.
   Gerstein S.S., Ponomarev L.I. In "Muon Physics",
- Gerstein S.S., Ponomarev L.I. In "Muon Physics", Ed. Hughes V. and Wu C.S. Academic Press, New York, 1975.
- 11. Беляев В.Б. и др. ЖЭТФ, 1959, 37, 1952.
- 12. Виницкий С.И., Пузынин И.В. ОИЯИ, P11-10802, Дубна, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел 1 сентября 1977 года.

٠.