

12788



сообщения
Объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

409 / 2-80

4 / 2-80
P5 - 12788

С.И.Виницкий, В.С.Мележик, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

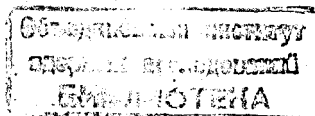
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
НЕКОТОРЫХ МОДИФИКАЦИЙ
НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА
ПРИ РЕШЕНИИ ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ
ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ

1979

P5 - 12788

С.И.Виницкий, В.С.Мележик, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
НЕКОТОРЫХ МОДИФИКАЦИЙ
НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА
ПРИ РЕШЕНИИ ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ
ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ



1. Введение

Нереривный аналог метода Ньютона^{/1/} успешно использовался для решения нелинейных функциональных уравнений, возникающих в различных областях физики /2-5/.

Рассмотрим его применительно к решению задачи на собственные значения

$$\hat{\mathcal{D}}y - \hat{G}(\lambda)y = 0, \quad (1)$$

где $\hat{\mathcal{D}}$ и $\hat{G}(\lambda)$ - линейные операторы, определенные на некотором функциональном пространстве Y , λ - искомое собственное значение. Обычно к уравнению (1) присоединяют условие нормировки собственной функции^{/6/}:

$$S(\lambda, y) = 0, \quad (2)$$

где S - функционал.

Тогда задачу (1-2) рассматриваем как нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(\lambda, y) = \left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathcal{D}}y - \hat{G}(\lambda)y \\ S(\lambda, y) \end{array} \right\} = 0 \quad (3)$$

относительно пары $Z = (\lambda, y)$.

Функциональное уравнение (3) в виде

$$\varphi(Z) = 0 \quad (4)$$

решаем с помощью непрерывного аналога метода Ньютона /1/, т.е. после введения дополнительного параметра погружения $0 \leq t < \infty$, от которого зависят компоненты элемента $Z(t) = (\lambda(t), y(t))$, задачу (4) заменяем соответствующим эволюционным уравнением

$$\varphi'(Z(t)) \frac{dZ(t)}{dt} = -\varphi(Z(t)) \quad (5)$$

с начальным условием

$$Z(0) = Z_0$$

(Z_0 - начальное приближение к искомому решению Z^* уравнения (4)).

В работах /1-2/ показано, что при выполнении условия гладкости оператора φ в окрестности искомого изолированного решения $Z^* = (\lambda^*, y^*)$ выполняется предельное соотношение:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|Z^* - Z(t)\| = 0. \quad (6)$$

Дискретная аппроксимация эволюционного уравнения (5) по параметру t реализуется с помощью метода Эйлера /2/. Полуось $0 \leq t < \infty$ разбивается узловыми точками t_k ($k = 0, 1, \dots$) с переменным шагом τ_k

$$t_{k+1} = t_k + \tau_k.$$

На каждом шаге по t решается линейная задача относительно поправки ΔZ_k

$$\Delta Z_k = - [\varphi'(Z_k)]^{-1} \varphi(Z_k) \quad (7)$$

и находится новое значение Z_{k+1}

$$Z_{k+1} = Z_k + \tau_k \Delta Z_k. \quad (8)$$

Итерационный процесс (7-8) схематически изображен на рис.1 ($\tau_k = 1$).

Основная сложность при численной реализации итерационного процесса (7)-(8) состоит в вычислении оператора $[\varphi'(Z_k)]^{-1}$. Многократное вычисление этого оператора затруднительно. Кроме

того, при частной реализации итерационного процесса (7)-(8), являющейся обобщением метода обратных итераций /7/, может возникнуть проблема решения плохо обусловленной системы уравнений /8/.

Для устранения этих трудностей можно использовать модификацию ньютоновского процесса (7)-(8) /6/

$$\Delta Z_k = - [\varphi'(Z_0)]^{-1} \varphi(Z_k), \quad (9)$$

$$Z_{k+1} = Z_k + \tau_k \Delta Z_k.$$

Этот процесс схематически представлен на рис.2. В этом случае $[\varphi'(Z_0)]^{-1}$ вычисляется всего один раз. Если Z - вектор, то часто бывает целесообразно зафиксировать одну или несколько из его компонент. Можно надеяться, что при достаточно хорошем начальном приближении Z_0 сходимость итерационного процесса (9) будет незначительно замедляться по сравнению с (7)-(8).

В настоящей работе проведено численное исследование и сравнение итерационных процессов (7)-(8) и (9) на примере решения частичной задачи Штурма-Лиувилля (I)-(4) для системы шести и сорока линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, которая возникает при расчете уровней энергии M - мезомолекул изотопов водорода в адиабатическом представлении задачи трех тел в приближении конечного числа уравнений N^{10} :

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)}(z) = \frac{d^2}{dx^2} \bar{y}(x) - 2\hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}(x) + \\ + (\lambda \hat{I} - \hat{H}(x)) \bar{y}(x) = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\varphi^{(2)}(z) = \hat{A}(\lambda, a) \frac{d}{dx} \bar{y}(a) + \hat{B}(\lambda, a) \bar{y}(a) = 0,$$

$$\varphi^{(3)}(z) = \hat{T}(\lambda, b) \frac{d}{dx} \bar{y}(b) + \hat{F}(\lambda, b) \bar{y}(b) = 0,$$

$$\varphi^{(4)}(z) = (\bar{y}, \bar{y}) - 1 = 0.$$

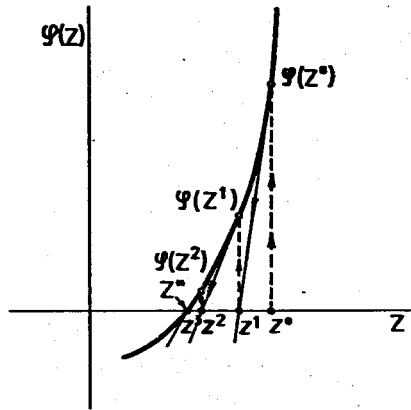


Рис. 1. Схематическое изображение процесса Ньютона (7), (8) при решении задачи Штурма-Лиувилля (4).

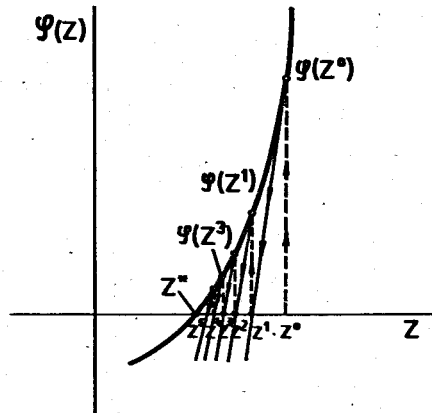


Рис. 2. Схематическое изображение модифицированного процесса Ньютона (9) при решении задачи Штурма-Лиувилля (4). Производная $\varphi'(z_0)$ не меняется в процессе решения.

где $\hat{Q}(x), \hat{H}(x), \hat{A}(\lambda, a), \hat{B}(\lambda, a), \hat{T}(\lambda, b), \hat{F}(\lambda, b)$ матрицы размерностью $N \times N$ ($N = 6$ и 40), $\bar{Y}(x)$ — N -мерный вектор решения, \hat{I} — единичная матрица,

$$(\bar{Y}, \bar{Y}) = \sum_{j=1}^N \int_a^b y_j^2(x) dx.$$

λ — искомое собственное значение.

Здесь $Z = (\lambda, \bar{Y})$, и известно начальное приближение $Z^0 = (\lambda^0, \bar{Y}^0(x))$ к искомому изолированному решению $Z^* = (\lambda^*, \bar{Y}^*(x))$.

В этом случае хорошее начальное приближение к Z^* есть решение задачи (10) в приближении двух уравнений $Z^*(N=2)$, которая обычно решалась в рамках итерационной схемы (7)–(8) /9, 10/, эффективной для плохих начальных приближений. В настоящей работе показано, что решение Z^* задачи (10) при $N = 6, 40$ и т.д. удобно искать от начального приближения $Z^0 = Z^*(N=2)$ с помощью модифицированного ньютоновского процесса /9/, который позволяет обойти определенные трудности в реализации обычного ньютоновского процесса (7)–(8).

2. Численная реализация метода

Для решения задачи (10) используем итерационную схему /9, 10/, при этом (7)–(8) можно привести к виду:

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{v}_k^{(i)}(x) - 2\hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(i)}(x) + (\lambda_k \hat{I} - H(x)) \bar{v}_k^{(i)}(x) =$$

$$- \left[\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}_k(x) - 2Q(x) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + (\lambda_k \hat{I} - H(x)) \bar{y}_k(x) \right],$$

$$\hat{A} \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(i)}(a) + \hat{B} \bar{v}_k^{(i)}(a) = - \left[\hat{A} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(a) + \hat{B} \bar{y}_k(a) \right], \quad (\text{II})$$

$$\hat{T} \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(i)}(b) + \hat{F} \bar{v}_k^{(i)}(b) = - \left[\hat{T} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(b) + \hat{F} \bar{y}_k(b) \right],$$

$$\hat{A} \equiv \hat{A}(\lambda, a), \quad \hat{B} \equiv \hat{B}(\lambda, a), \quad \hat{T} \equiv \hat{T}(\lambda, b), \quad \hat{F} \equiv \hat{F}(\lambda, b),$$

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

$$\hat{A} \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(2)}(a) + \hat{B} \bar{v}_k^{(2)}(a) = - \left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda_k} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(a) + \frac{\partial \hat{B}}{\partial \lambda_k} y_k(a) \right], \quad (I2)$$

$$\hat{T} \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(2)}(b) + \hat{F} \bar{v}_k^{(2)}(b) = - \left[\frac{\partial \hat{T}}{\partial \lambda_k} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(b) + \frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda_k} \bar{y}_k(b) \right],$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_{k+1} &= \lambda_k + \mu_k \tau_k, \\ \bar{y}_{k+1} &= \bar{y}_k(x) + \tau_k \bar{v}_k(x), \\ \bar{v}_k(x) &= \bar{v}_k^{(1)}(x) + \mu_k \bar{v}_k^{(2)}(x), \end{aligned} \quad (I3)$$

а μ_k находится из условия нормировки:

$$\mu_k = \frac{1 - (y_k, y_k) - (\bar{v}_k^{(1)}, \bar{y}_k)}{2 (\bar{v}_k^{(2)}, \bar{y}_k)}. \quad (I4)$$

Следует отметить, что так как $\lambda_k \neq \lambda^*$, то $\bar{v}_k^{(1)}(x) = -\bar{y}_k(x)$. Задача (I2) решается методом конечных разностей. Итерационный процесс (II)-(I4), являющийся обобщением метода обратных итераций [7], повторяется до выполнения условия: $\delta_k = \max(\delta_k(i)) < \varepsilon$,

где

$$\delta_k(i) = \left\| \frac{y_k(x_{i+1}) - 2y_k(x_i) + y_k(x_{i-1}))}{h^2} - 2\hat{Q}(x_i) \frac{\bar{y}_k(x_{i+1}) - y_k(x_{i-1}))}{2h} + (\lambda_k \hat{I} - H(x_i)) \bar{y}_k(x_i) \right\|, \quad (I5)$$

а $\varepsilon > 0$ достаточно мало. (Здесь h - шаг разностной сетки по x). Шаг τ_k выбирается из условия минимума δ_k [10]; другой способ выбора невязки δ_k предложен в работе [9].

Краевая задача (I2) заменяется конечно-разностной:

$$\hat{R}_i \bar{v}_{k,i-1} + \hat{M}_i \bar{v}_{k,i} + \hat{N}_i \bar{v}_{k,i+1} = -h^2 \bar{y}_{k,i},$$

где

$$\hat{M}_i = h^2 \lambda_k \hat{I} - h^2 \hat{H}_i - 2\hat{I}, \quad (I6)$$

$$\hat{R}_i = \hat{I} + h \cdot \hat{Q}_i, \quad \hat{N}_i = \hat{I} - h \hat{Q}_i$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \hat{A} (3 \bar{v}_{k,1}^{(2)} - 4 \bar{v}_{k,2}^{(2)} + \bar{v}_{k,3}^{(2)}) + 2h \hat{B} \bar{v}_{k,1}^{(2)} = \\ - \left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda_k} (3 \bar{y}_{k,1} - 4 \bar{y}_{k,2} + \bar{y}_{k,3}) + 2h \frac{\partial \hat{B}}{\partial \lambda_k} y_{k,1} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{T} (\bar{v}_{k,N_2-2}^{(2)} - 4 \bar{v}_{k,N_2-1}^{(2)} + 3 \bar{v}_{k,N_2}^{(2)}) + 2h \hat{F} \bar{v}_{k,N_2}^{(2)} = \quad (I7) \\ - \left[\frac{\partial \hat{T}}{\partial \lambda_k} (\bar{y}_{k,N_2-2} - 4 \bar{y}_{k,N_2-1} + 3 \bar{y}_{k,N_2}) + 2h \frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda_k} \bar{y}_{k,N_2} \right], \end{aligned}$$

$$\bar{y}_{k,1} = y_k(a), \quad \bar{y}_{k,N_2} = y_k(b).$$

Система алгебраических уравнений (I6)-(I7) решается методом прогонки [11]

$$\bar{v}_{k,i} = \hat{C}_i \bar{v}_{k,i+1} + \bar{D}_i,$$

$$\hat{C}_1 = (3\hat{A} - \hat{A} \hat{N}_2^{-1} \hat{R}_1 + 2h \hat{B})^{-1} \hat{A} (4 + \hat{N}_2^{-1} \hat{M}_2)$$

$$\bar{D}_1 = -(3\hat{A} - \hat{A} \hat{N}_2^{-1} \hat{R}_1 + 2h \hat{B})^{-1} \quad (I8)$$

$$\left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda_k} (3 \bar{y}_{k,1} - 4 \bar{y}_{k,2} + \bar{y}_{k,3}) + 2h \frac{\partial \hat{B}}{\partial \lambda_k} \bar{y}_{k,1} - \hat{A} \hat{N}_2^{-1} h \bar{y}_{k,2} \right],$$

$$\hat{C}_i = [\hat{M}_i + \hat{R}_i \hat{C}_i]^{-1} \hat{N}_i, \quad \bar{D}_i = -[\hat{M}_i + \hat{R}_i \hat{C}_i]^{-1} (h \bar{y}_{k,i} + \hat{R}_i \bar{D}_{i-1}),$$

$$\begin{aligned} \bar{v}_i^{(2)} = - \left[\hat{T} (\hat{C}_{N-2} - 4) \hat{C}_{N-1} + 3\hat{T} + 3h \hat{F} \right]^{-1} \cdot \left\{ \frac{\partial \hat{T}}{\partial \lambda_k} (\bar{y}_{k,N_2-2} - 4 \bar{y}_{k,N_2-1} + 3 \bar{y}_{k,N_2}) + 2h \frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda_k} y_{k,N_2} - \hat{T} \bar{D}_{N_2-2} - \hat{T} (\hat{C}_{N_2-2} - 4) \bar{D}_{N_2-1} \right\} \end{aligned}$$

В рассматриваемой задаче вычисление $[\Psi'(z_k)]^{-1}$ свелось к нахождению $\hat{C}_i(\lambda_k)$, $\bar{D}_i(\lambda_k, y_k)$. Для вычисления матрицы \hat{C}_i нужно выполнить $\sim N^3 N_2$ операций, вычисление \bar{D}_i требует $\sim N^2 N_2$

операций. А весь итерационный процесс потребует $\sim it \cdot (N^3 N_3 + N^2 N_2) \sim it \cdot N^3 N_2$ (где it - число шагов по t). Таким образом, основное время затрачивается на нахождение матриц $C_i(\lambda_k)$, и с ростом размерности системы уравнений это время возрастает как N^3 . Однако задача (I2), а следовательно, и задача (I6)-(I7) становятся плохо обусловленными в близкой окрестности решения. Это может привести к потере точности при расчетах на ЭВМ, в которых числа представляются с небольшим числом знаков.

Применим теперь модифицированный ньютоновский процесс к задаче (I0). Получим:

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{v}_k^{(1)}(x) - 2\hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(1)}(x) + (\lambda_0 \hat{I} - \hat{H}(x)) \bar{v}_k^{(1)}(x) =$$

$$= \left[\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}_k(x) - 2\hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(x) + (\lambda_k \hat{I} - \hat{H}(x)) \bar{y}_k(x) \right], \quad (I9)$$

$$\hat{A}(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(1)}(a) + \hat{B}(\lambda_0) \bar{v}_k^{(1)}(a) = -\hat{A}(\lambda_k) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(a) - \hat{B}(\lambda_k) \bar{y}_k(a),$$

$$\hat{T}(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(1)}(b) + \hat{F}(\lambda_0) \bar{v}_k^{(1)}(b) = -\hat{T}(\lambda_k) \frac{d}{dx} \bar{y}_k(b) - \hat{F}(\lambda_k) \bar{y}_k(b),$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{v}_0^{(2)}(x) - 2\hat{Q}(x) \frac{d}{dx} \bar{v}_0^{(2)}(x) + (\lambda_0 \hat{I} - \hat{H}(x)) \bar{v}_0^{(2)}(x) = -\bar{y}_0(x),$$

$$\hat{A}(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_0^{(2)}(a) + \hat{B}(\lambda_0) \bar{v}_0^{(2)}(a) = -\frac{\partial \hat{A}(\lambda_0)}{\partial \lambda_0} \frac{d}{dx} \bar{y}_0(a) - \frac{\partial \hat{B}(\lambda_0)}{\partial \lambda_0} \bar{y}_0(a), \quad (20)$$

$$\hat{T}(\lambda_0) \frac{d}{dx} \bar{v}_0^{(2)}(b) + \hat{F}(\lambda_0) \bar{v}_0^{(2)}(b) = -\frac{\partial \hat{T}(\lambda_0)}{\partial \lambda_0} \frac{d}{dx} \bar{y}_0(b) - \frac{\partial \hat{F}(\lambda_0)}{\partial \lambda_0} \bar{y}_0(b),$$

$$\mu_k = \frac{1 - (\bar{y}_k, \bar{y}_k) - (\bar{v}_k^{(1)}, \bar{y}_0)}{2(\bar{v}_0^{(2)}, \bar{y}_0)}, \quad (21)$$

$$y_{k+1} = y_k(x) + \tau_k (-\bar{v}_k^{(1)}(x) + \mu_k \bar{v}_k^{(2)}(x)). \quad (22)$$

В этом случае задачу (I9) уже необходимо решать на каждом шаге по t , но $\hat{C}_i(\lambda_0)$ и решение задачи (20) находятся всего один раз. Оценим число операций, необходимых для численной реали-

зации итерационного процесса (I9)-(2I). Для вычисления $\hat{C}_i(\lambda_0)$ необходимо $N^3 N_2$ -операций, $\hat{D}_i \sim N^2 N_2$ операций, общее число операций: $\sim N^3 N_2 + it N^2 N_2 + N^2 N_2$.

С ростом числа уравнений в системе (I0) и незначительном увеличении it по сравнению с рассмотренной выше итерационной схемой можно ожидать существенного сокращения счетного времени (число операций $\sim N^3 N_2$).

Рассмотрим еще одну модификацию непрерывного аналога метода Ньютона для задачи на собственные значения

$$\Delta Z_k = [\Psi'(\lambda_0, \bar{y}_k)]^{-1} \Psi(Z_k), \quad (23)$$

$$Z_{k+1} = Z_k + \tau_k \Delta Z_k.$$

При этом в формулах (I9)-(2I) изменятся (20) и (2I):

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

$$\hat{A} \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(2)}(a) + \hat{B} \bar{v}_k^{(2)}(a) = -\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda_0} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(a) - \frac{\partial \hat{B}}{\partial \lambda_0} \bar{y}_k(a), \quad (24)$$

$$\hat{T} \frac{d}{dx} \bar{v}_k^{(2)}(b) + \hat{F} \bar{v}_k^{(2)}(b) = -\frac{\partial \hat{T}}{\partial \lambda_0} \frac{d}{dx} \bar{y}_k(b) - \frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda_0} \bar{y}_k(b),$$

$$\mu_k = \frac{1 - (\bar{y}_k, \bar{y}_k) - (\bar{v}_k^{(2)}, \bar{y}_k)}{2(\bar{v}_k^{(2)}, \bar{y}_k)}. \quad (25)$$

Общее число операций в этом случае $\sim N^3 N_2 + 2 \cdot it \cdot N^2 N_2$. Расчеты, приведенные ниже, показывают, что схема (23) оказывается менее чувствительной к начальному приближению по сравнению с (I9)-(22) в задаче о вычислении уровней энергии λ и волновых функций $\bar{Y}(x)$ системы трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении.

3. Численный пример

Задача (I0) была решена для случая m -мезомолекул ddm и pdM в состоянии с квантовыми числами $J=0, \nu=0$ и $J=0, \nu=1$ соответственно.

В таблицах I и 2 приведены сходимости всех трех рассмотренных выше методов α, β, γ : (II)-(I8), (I9)-(22), (23)-(25).

Итерационные процессы начинались от одного и того же начального приближения и сходились к одному и тому же Z^* ($\delta \sim 10^{-7}$). Число решаемых уравнений в системе (10) $N = 6$, тогда $\lambda_{ddm} = 34,772$; $\lambda_{pdm} = 218,611$. Начальное приближение $\bar{Y} = \begin{pmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \end{pmatrix}$ в первых трех строках таблиц 1 и 2 было получено при решении (10) с $N = 2$, следующие три колонки - "плохое" начальное приближение $\bar{y}_1 = \frac{y_1 + y_2}{\sqrt{2}}$, $\bar{y}_2 = \frac{y_1 - y_2}{\sqrt{2}}$.

В таблице 3 сравниваются средние времена CP и PP на одну итерацию в модифицированных (b, c) и обычном (a) ньютоновских процессах при решении задачи (10) для системы $N = 40$ уравнений в случае мезомолекулы ddm , находящейся в состоянии с квантовыми числами $J=0$ и $V=1$. Все расчеты проводились на ЭЕМ СДС-6500 ЛВТА ОИЯИ.

4. Заключение

Численное исследование сходимости итерационных процессов, построенных на основе рассмотренных модификаций, демонстрирует некоторые новые возможности метода Ньютона применительно к решению задачи Штурма-Ливуилля.

Отметим основные свойства предложенных модификаций. Во-первых, расчеты сложных практических задач показали, что эти схемы оказываются более удобными в задачах Штурма-Ливуилля для систем большого числа дифференциальных уравнений. Они существенно упрощают вычислительные алгоритмы и расширяют область применимости. Во-вторых, эти схемы более устойчивы к ошибкам округления и позволяют избежать трудностей, связанных с решением плохо обусловленных задач для компоненты итерационной поправки.

В заключение авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву за интерес к работе.

Таблица 1.

Зависимость числа итераций от начального приближения по энергии связи системы ddm ($J=0, V=1$) мезомолекулы в случае "хорошего" и "плохого" начальных приближений. (Число уравнений $N = 6$, число узлов сетки 200, $\lambda_{ddm}^* = 34,772$).

		λ_0 (эВ)		-34	-40	-45	-50	-55	-65
число итераций по t :	"хорошее" начальное приближение по	(a)	$\lambda_k \bar{y}_k$	3	3	3	3	4	4
		(b)	$\lambda_0 \bar{y}_0$	3	4	6	7	8	10
		(c)	$\lambda_0 \bar{y}_k$	3	7	8	9	10	10
число итераций по it :	"плохое" начальное приближение по	(a)	$\lambda_k \bar{y}_k$	3	3	4	4	5	6
		(b)	$\lambda_0 \bar{y}_0$	30	Сходимости нет				
		(c)	$\lambda_0 \bar{y}_k$	5	6	8	9	10	13

Таблица 2.

Зависимость числа итераций от начального приближения по энергии связи системы pdm ($J=0, V=1$) мезомолекулы в случае "хорошего" и "плохого" начальных приближений. (Число уравнений $N = 6$, число узлов сетки 200, $\lambda_{pdm}^* = 218,611$).

		λ_0 (эВ)		-220	-250	-300	-350
число итераций по t :	"хорошее" начальное приближение по	(a)	$\lambda_k \bar{y}_k$	3	3	3	3
		(b)	$\lambda_0 \bar{y}_0$	5	7	9	11
		(c)	$\lambda_0 \bar{y}_k$	10	13	14	17
число итераций по it :	"плохое" начальное приближение по	(a)	$\lambda_k \bar{y}_k$	12	12	13	13
		(b)	$\lambda_0 \bar{y}_0$	Сходимости нет			
		(c)	$\lambda_0 \bar{y}_k$	12	15	17	20

Таблица 3.

Сравнение счетного (CP) и периферического времени (PP) работы программы по обычному и модифицированному методу Ньютона. (Число уравнений $N = 40$, число узлов разностной сетки - 200).

Метод мин/итерация	обычный	модифицированный
CP	12,3	8,09
PP	6,65	10,65

Литература

1. Гавурин М.К. Изв. вузов, Математика ; 1958 , 5 , с.18.
2. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, с.127.
3. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J.Comp.Phys. 1973, 13; 1976, 21.
4. Гареев Ф.А., Шульц Г., Ямалеев Р.М., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Кухтина И.Н. ЯФ, 1975, 22, с.1136.
J.Bang, F.A.Gareev, I.V.Puzynin, R.M.Jamalejev. Nucl.Phys. 1976, A261, p.59.
5. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina, L.N.Somov. Annals of Phys. 1978, 110, p.274.
6. Канторович Л.В. Успехи мат.наук. 1956, II, с.99.
7. Калиткин Н.Н. Численные методы. "Наука", М., 1978.
8. Гавурин М.К. Решение "почти-особенных" операторных уравнений. Успехи матем. наук. 1960, 95, с.151.
Жидков Е.П., Пузынин И.В., Хоромский Б.Н. Сообщение ОИЯИ, Р5-9512, Дубна, 1975.
Дяткин В.В. ЖМ и МФ. 1976. 16, с.838.
9. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. КФКИ -74-34, 1974.

10. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р5-12787, Дубна, 1979.
11. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. "Наука", М., 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 сентября 1979 года.