

сообщения  
Объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
Дубна

У11/2-80

У12-80

P5 - 12789

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

РЕШЕНИЕ ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ  
ДЛЯ СИСТЕМЫ ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ  
УРАВНЕНИЙ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

1979

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

P5 - 12789

Решение частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегродифференциальных уравнений специального вида

На основе модифицированного ньютоновского процесса предложена численная реализация решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегродифференциальных уравнений специального вида. При решении краевой задачи для итерационной поправки используется метод простой итерации. Показана высокая эффективность этой вычислительной схемы в мезомолекулярных расчетах. Предложенная вычислительная схема решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегродифференциальных уравнений, описывающей задачу трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении, позволяет находить уровни энергии и волновые функции  $\mu$ -мезомолекул изотопа водорода с заданной точностью. Абсолютная точность вычисления собственных значений и собственных функций  $\sim 10^{-4}$ .

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединяного института ядерных исследований. Дубна 1979

Melezhih V.S. et al.

P5 - 12789

Solution of the Sturm-Liouville Partial Problem for a System of Special Form Integrodifferential Equations

A numerical realization of the Sturm-Liouville partial problem solution for a system of special form integrodifferential equations of the second order is proposed. It is based on the modified Newton process. A simple iteration method is used in the iteration correction of the boundary value problem solution. A high effectiveness of this calculation scheme for mesomolecular calculations is demonstrated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

© 1979 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

## I. Введение

Задача о нахождении энергии связи трех частиц с зарядами и массами  $(Z_a, M_a)$ ,  $(Z_b, M_b)$ ,  $(-Z_c, M_c)$  в адиабатическом представлении сводится к частичной задаче Штурма-Лиувилля для бесконечной системы интегро-дифференциальных уравнений второго порядка /1/:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + (E - W_i(x)) \right] y_i(x) - \frac{1}{2M} \left[ \sum_j \bar{H}_{ij}(x) y_j(x) + 2 \sum_j \bar{Q}_{ij}(x) \frac{d}{dx} y_j(x) + \sum_j \int_0^\infty dx' \bar{H}_{ij}(x, x') y_j(x') + \sum_j \int_0^\infty dx' \bar{Q}_{ij}(x, x') \frac{d}{dx} y_j(x') \right] = 0, \quad (I.a)$$

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + (E - \frac{\epsilon^2}{2}) \right] y_i(x, x) - \frac{1}{2M} \left[ \sum_j \bar{H}_{ij}(x, x) y_j(x) + 2 \sum_j \bar{Q}_{ij}(x, x) y_j(x) + \sum_j \int_0^\infty dx' \bar{H}_{ij}(x', x; x) + \sum_j \int_0^\infty dx' \bar{Q}_{ij}(x', x) \frac{d}{dx} y_j(x') \right] = 0 \quad (I.b)$$

на  $0 \leq x < \infty$

с граничными условиями:

$$\frac{d}{dx} y_i(0) + \sum_j \bar{f}_{ij}^1 y_j(0) = 0, \quad (I.b)$$

$$\frac{d}{dx} y_i(\infty) + \sum_j \bar{f}_{ij}^2 y_j(\infty) = 0,$$

где  $\bar{f}_{ij}^1 = \bar{f}_{ij}^1 + \sum_j \int_0^\infty dx, a \bar{H}_{ij}(x), \bar{Q}_{ij}(x), \bar{H}_{ij}(x, x), \bar{Q}_{ij}(x, x)$  - эффективные потенциалы /1/ системы трех тел с кулоновским взаимодействием,  $i, j, i', j'$  - дискретные индексы,  $x, x'$  - непрерывные ( $x, x' \in [0, \infty)$ ).

В задаче (I) выделен малый параметр  $(2M)^{-1/2}$ , который для  $\mu^-$ -мезомолекул изотопов водорода удовлетворяет условию  $(2M)^{-1/2} \leq 10^{-1}$ . Это обстоятельство позволяет применить для нахождения решения (I) теорию возмущений Шредингера. Такая вычислительная схема была



реализована в работе /2/, где при нахождении собственных значений учитывались первые две не исчезающие поправки в ряду теории возмущений  $\sim (2M)^{-2}$ , а при нахождении собственных функций - первая не исчезающая поправка  $\sim (2M)^{-1}$  для случая нижнего открытого канала в системе уравнений. При этом абсолютная точность вычисления собственных значений была  $\sim 10^{-4}$  /4/.

В данной работе предложен метод численного решения частичной задачи Штурма-Лиувилля (I), который позволяет находить собственные значения и собственные функции  $\mu$ -мезомолекул с одинаковой заданной точностью. Эффективность этой вычислительной схемы демонстрируется на примере вычисления уровней энергии  $\mu$ -мезомолекулы  $dd\mu$  с квантовыми числами  $J=0, \nu=1$ .

## 2. Аппроксимация интегральной части

При численном решении задачи (I) нужно от бесконечной системы уравнений перейти к конечной  $i, j \leq N_{max}, i', j' \leq M_{max}, k \in [0, k_{max}]$  на конечном интервале  $R \in [0, R_{max}]$  и от непрерывных переменных  $k$  и  $x$  - к дискретным.  $N_{max}, R_{max}, k_{max}$  и шаг разностной аппроксимации по  $x$  и  $k$  определяются требуемой точностью вычисления  $y$  и  $E$ . Выбор  $N_{max}, R_{max}$  и шага по  $x$  описан в работе /3/, в которой изложен метод решения системы (I.a) для случая пренебрежения интегральной частью.

Здесь мы остановимся на аппроксимации интегральных членов в (I). Из асимптотических оценок поведения эффективных потенциалов  $H, Q$  следует, что для требуемой точности  $\sim 10^{-4}$  достаточно положить  $k_{max} = 10$ . Шаг по  $k$  определяется гладкостью эффективных потенциалов, численные оценки дают  $\Delta k \sim 0,03$  при  $k \rightarrow 0$  и  $\Delta k \sim 0,2$  при  $k \rightarrow k_{max}$  и  $M_{max} = 6$ .

Отсюда следует, что для достижения заданной точности число уравнений в системе (I.б) должно быть  $\sim 300$  (равно числу шагов по  $k$ , умноженному на  $M_{max}$ ). Число уравнений в (I.a)  $\sim 20-40$ .

Интегральные члены в (I) аппроксимируем с помощью квадратурных формул Симпсона. Введем обозначения

$$Q_{i, k_j}(x) = Q_{i, j'}(k_{j'}, x) \phi(k_{j'}),$$

$$H_{i, k_j}(x) = H_{i, j'}(k_{j'}, x) \phi(k_{j'}), \quad (2)$$

где  $\phi(k_i)$  - вес квадратурных формул. Тогда система уравнений (I.a, I.б) принимает вид

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + (E - W_i(x)) \right] y_i(x) - \frac{1}{2M} \left( \sum_j H_{ij}(x) y_j(x) + 2 \sum_j Q_{ij}(x) \frac{d}{dx} y_j(x) \right) - \frac{1}{2M} \left( \sum_{k_j} H_{i, k_j}(x) y_{k_j}(x) + 2 \sum_{k_j} Q_{i, k_j}(x) \frac{d}{dx} y_{k_j}(x) \right) = 0, \quad (3)$$

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + (E - \frac{k_i^2}{2}) \right] y_{k_i}(x) - \frac{1}{2M} \left( \sum_j H_{k_i, j}(x) y_j(x) + 2 \sum_j Q_{k_i, j}(x) \frac{d}{dx} y_j(x) \right) - \frac{1}{2M} \left( \sum_{k_j} H_{k_i, k_j}(x) y_{k_j}(x) + 2 \sum_{k_j} Q_{k_i, k_j}(x) \frac{d}{dx} y_{k_j}(x) \right) = 0. \quad (4)$$

Итак, задачу (I) свели к частичной задаче Штурма-Лиувилля для системы порядка 300 линейных дифференциальных уравнений:

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}^d(x) - 2Q^{dd}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}^d(x) + (E \hat{I} - H^{dd}(x)) \bar{y}^d(x) - 2Q^{dc}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}^c(x) - H^{dc}(x) \bar{y}^c(x) = 0, \quad (5.a)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{y}^c(x) + (E \hat{I} - \frac{k^2}{2}) \bar{y}^c(x) - 2Q^{cd}(x) \frac{d}{dx} \bar{y}^d(x) - H^{cd}(x) \bar{y}^d(x) = 0 \quad (5.б)$$

с граничными условиями (I.в),





$$\|y(x)\|^{-1} = \sum_{i=1}^{K_{\max}} \int_0^{R_{\max}} y_i^2(x) dx + \iint_0^{K_{\max}} \int_0^{R_{\max}} y_c^2(x) dx dx_c - 1 = 0$$

- условие нормировки волновой функции, из которого находится  $\mu_k$ .

Ниже мы рассмотрим способ численного решения задачи (9).

Далее, чтобы не загромождать выкладки, граничные условия (7.6) опускаем.

Применив конечно-разностную аппроксимацию к дифференциальному оператору  $\hat{L}(x)$ , получим систему алгебраических уравнений

$$\sum_n (\hat{L}_n + E_k \hat{I}) V_{jn} = -y_{jn}, \quad (10)$$

или более подробно

$$\sum_{jn} (L_{ijn} + E_k \delta_{ij}) V_{jn} = -y_{jin}, \quad (10.a)$$

где

$$V_{ijn} = \begin{pmatrix} V_{in}^d & \dots & V_{in}^d \\ \vdots & & \vdots \\ V_{kN_{\max}1}^d & \dots & V_{kN_{\max}N}^d \\ V_{k1}^c & \dots & V_{kN}^c \\ \vdots & & \vdots \\ V_{kN_{\max}1}^c & \dots & V_{kN_{\max}N}^c \end{pmatrix}, \quad y_{jin} = \begin{pmatrix} y_{jn}^d & \dots & y_{jn}^d \\ \vdots & & \vdots \\ y_{kN_{\max}1}^d & \dots & y_{kN_{\max}N}^d \\ y_{k1}^c & \dots & y_{kN}^c \\ \vdots & & \vdots \\ y_{kN_{\max}1}^c & \dots & y_{kN_{\max}N}^c \end{pmatrix}.$$

Алгебраическую систему уравнений (10.a) можно решать с помощью матричной прогонки /6/

$$\hat{N}_{n+1} \bar{y}_{n+1} + \hat{M}_n (E_k) \bar{y}_n + R_n \bar{y}_n = -y_{jn}. \quad (II)$$

Метод матричной прогонки очень удобен и является самым быстрым методом решения системы уравнений при условии, что матрицы  $\hat{N}$ ,  $\hat{M}$ ,  $\hat{R}$  полностью заполнены, т.е. не имеют нулевых элементов. В случае рассматриваемой системы (5), этот метод уже не является оптимальным, т.к. матрицы  $\hat{N}, \hat{M}, R$ , в основном, заполнены нулями (см. рис. 1), и тогда применяют различные итерационные методы (см. обзор /7/).

Ниже предложен алгоритм, основанный на комбинации прогонки и методе простой итерации. Он позволил значительно расширить область изменения  $N_{\max}$  и  $K_{\max}$  и решить задачу (5) для  $N_{\max} \sim 40$  и  $\sum_i A_i K_i \sim 300$ . Суть его в следующем.

Перепишем (8) для задачи (5) в таком виде:

$$(L_{ijn}^{dd} + E_k \delta_{ij}) v_{jn}^{(l+1)} = -y_{jn}^d - L_{ijn}^{dc} w_{jn}^{(l)}, \quad (12.a)$$

$$(L_{ijn}^{cc} + E_k \delta_{ij}) w_{jn}^{(l+1)} = -y_{jn}^c - L_{ijn}^{cd} v_{jn}^{(l+1)}, \quad (12.б)$$

где

$$V_{in} = \begin{pmatrix} v_{kin}^d \\ v_{kin}^c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{in} \\ w_{in} \end{pmatrix}.$$

Полагаем  $w_{jn}^{(0)} = 0$ , с помощью прогонки решаем (12.a). Найденное  $v_{jn}^{(1)}$  подставляем в (12.б), и аналогичным способом решая (12.б), находим  $w_{jn}^{(1)}$ , после чего процесс повторяется. Далее  $l$  будем называть номером "внутренней" итерации (итерационный процесс (10) является "внутренним" по отношению к "внешнему" ньютоновскому процессу (8)). Практические расчеты продемонстрировали быструю сходимость процесса (12), если  $y_k(x)$

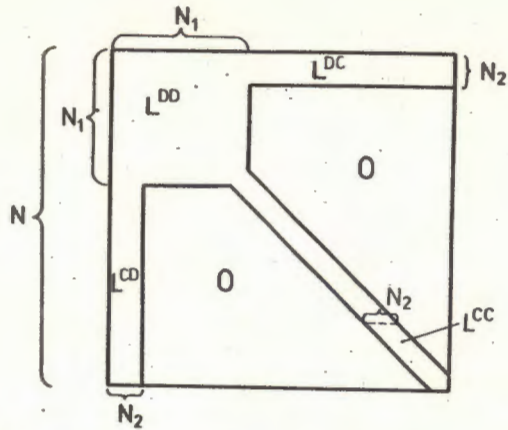


Рис. I

и  $E_k$  находятся вдали от решения задачи (7)  $\bar{y}^*(x)$  и  $E^*$ . Однако это не так при  $k \rightarrow \infty$ , потому что при этом  $E_k \rightarrow E^*$ ,  $\bar{y}_k \rightarrow y^*$ , и задача (9) становится плохо обусловленной. В работе /8/ показано, что при правильной организации вычисления в (9) указанная особенность не должна влиять на вычислительный процесс, это выполняется при решении (9) с большой точностью (например, методом прогонки). При решении задачи итерационным способом плохая обусловленность становится существенным препятствием для организации вычислений: при  $E_k \rightarrow E^*$  "внутренний" процесс (12) начинает "раскачиваться".

Для устранения отмеченной трудности применяется модифицированный метод Ньютона /5/, при этом плохо обусловленная задача (9) заменяется двумя хорошо обусловленными:

$$\sum_n (L_n + E_0 \hat{I}) \bar{V}_n = -y_n, \quad (13.a)$$

$$\sum_n (L_n + E_0 \hat{I}) \bar{V}_{kn} = -\sum_n (L_n + E_k \hat{I}) y_{kn}, \quad (13.б)$$

$$V_{kn} = \bar{V}_k + M_k \bar{V}_0.$$

Каждая из них решается предложенным способом (12) (здесь и далее по повторяющимся индексам подразумевается суммирование):

$$\begin{aligned} (L_{ijn}^{dd} + E_0) v_{jn}^d(l+1) &= -y_{jn}^d - L_{ijn}^{dc} w_{jn}^c(l), \\ (L_{ijn}^{cc} + E_0) w_{jn}^c(l+1) &= -y_{jn}^c - L_{ijn}^{cd} v_{jn}^d(l+1), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} (L_{ijn}^{dd} + E_0) \tilde{v}_{jn}^d(l+1) &= -(L_{ijn}^{dd} + E_k) y_{ijn}^d - L_{ipn}^{dc} y_{ijn}^c - \\ &\quad - L_{ipn}^{dc} \tilde{v}_{jn}^d, \\ (L_{ipn}^{cc} + E_0) \tilde{w}_{pn}^c(l+1) &= -(L_{ipn}^{cc} + E_k) y_{ijn}^c - h_{ijn}^{cd} y_{ijn}^d - \\ &\quad - L_{ijn}^{cd} \tilde{v}_{jn}^d(l+1), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{pmatrix} v_{jn}^d(l+1) \\ w_{jn}^c(l+1) \end{pmatrix} \xrightarrow{l \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} v_{ojn}^d \\ w_{ojn}^c \end{pmatrix}$$

и

$$\begin{pmatrix} \tilde{v}_{jn}^d(l+1) \\ \tilde{w}_{pn}^c(l+1) \end{pmatrix} \xrightarrow{l \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} \tilde{v}_{ijn}^d \\ \tilde{w}_{ijn}^c \end{pmatrix}.$$

Или более подробно

$$\begin{aligned} (\delta_{ij}^d - h Q_{ijn}^{dd}) v_{jn}^d(l+1) &+ [h^2 (\delta_{ij}^d E_0 - H_{ijn}^{dd}) - 2\delta_{ij}^d] v_{jn}^d(l+1) + \\ &+ (\delta_{ij}^d + h Q_{ijn}^{dd}) v_{jn}^d(l-1) = -y_{oin}^d + h Q_{ipn}^{dc} w_{pn}^c(l) + \\ &+ h^2 H_{ipn}^{dc} w_{pn}^c(l) - h Q_{ipn}^{dc} w_{pn}^c(l), \\ w_{in}^c(l+1) &+ h^2 \delta_{ip}^c (E_0 - \frac{k^2}{2}) w_{pn}^c(l+1) + w_{in}^c(l+1) = \\ &= -y_{oin}^c + h Q_{ijn}^{cd} v_{jn}^d(l+1) + h^2 H_{ijn}^{cd} v_{jn}^d(l+1) - \\ &- h Q_{ijn}^{cd} v_{jn}^d(l+1), \end{aligned} \quad (14.a)$$



$$\begin{aligned}
& (\delta_{ij} - h Q_{ijn}^{dd}) \tilde{v}_{jn}^{(l+1)} + [h^2 (\delta_{ij}^v E_0 - H_{ijn}^{dd}) - 2 \delta_{ij}^v] \tilde{v}_{jn}^{(l+1)} + \\
& + (\delta_{ij}^v + h Q_{ijn}^{dd}) \tilde{v}_{jn-1}^{(l+1)} = \\
& = (\delta_{ij}^v - h Q_{ijn}^{dd}) y_{kjn+1}^d - [h^2 (\delta_{ij}^v E_k - H_{ijn}^{dd}) - 2 \delta_{ij}^v] y_{kjn}^d - \\
& - (\delta_{ij}^v + h Q_{ijn}^{dd}) y_{kjn-1}^d + h Q_{ipn}^{dc} (y_{kjn+1}^c + \tilde{w}_{jn+1}^{(l)}) + \\
& + h^2 H_{ipn}^{dc} (y_{kjn}^c + \tilde{w}_{jn}^{(l)}) - h Q_{ipn}^{dc} (y_{kjn-1}^c + \tilde{w}_{jn-1}^{(l)}), \\
& \qquad \qquad \qquad (I5.a) \\
& \tilde{w}_{in+1}^{(l+1)} + h^2 \delta_{ip}^v (E_0 - \frac{k^2}{2}) \tilde{w}_{pn}^{(l+1)} + \tilde{w}_{in-1}^{(l+1)} = \\
& = -y_{kin+1}^c - h^2 \delta_{ip}^v (E_k - \frac{k^2}{2}) y_{kpn}^c - y_{kin-1}^c + h Q_{ijn}^{cd} (y_{kjn+1}^d + \\
& + \tilde{v}_{jn+1}^{(l+1)}) + h^2 H_{ijn}^{cd} (y_{kjn}^d + \tilde{v}_{jn}^{(l+1)}) - h Q_{ijn}^{cd} (y_{kjn-1}^d + \\
& + \tilde{v}_{jn-1}^{(l+1)}).
\end{aligned}$$

Эффективность рассмотренного алгоритма демонстрируется на численном примере.

#### 4. Численный пример

Предложенная вычислительная схема применялась для расчетов уровней энергии и волновых функций  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода. Здесь в качестве примера рассмотрим случай  $\mu$ -мезомолекулы  $dd\mu$  с квантовыми числами  $J=0$ ,  $v=1$ . Для достижения абсолютной точности в численном решении  $\sim 10^{-4}$  полагалось  $N_{max} = 26$ ,  $K_{max} = 10$ ,  $\sum_i \Delta k_i = 250$ . Для начального приближения  $E_0$ ,  $\bar{y}_0(x)$  использовались значения энергии и собствен-

ные функции  $\bar{y}_0(x)$ , полученные в приближении двух уравнений /9/.

В таблицах Ia - Ib показана сходимость итерационного процесса нахождения решения краевой задачи (I4) для функций  $\bar{v}_{01}(x)$ ,  $\bar{v}_{03}(x)$  и  $\bar{w}_0(k=0.2, x)$ .

В таблицах 2a - 2б-сходимость итерационного процесса нахождения решения краевой задачи (I5) для функций  $\bar{v}_{21}(x)$ ,  $\bar{v}_{31}(x)$  при второй и третьей итерации по методу Ньютона, в таблицах 3a - 3в - для функций  $\bar{w}_1(k=0.2, x)$ ,  $\bar{w}_2(k=0.2, x)$ ,  $\bar{w}_3(k=0.2, x)$ .

Приведенные результаты демонстрируют быструю сходимость "внутренних" итераций. Важно то, что (I4), (I5) являются краевыми задачами для нахождения итерационных поправок к собственным функциям, а следовательно, могут быть решены достаточно грубо. Действительно, численные исследования показывают, что даже при относительной точности вычисления итерационных поправок  $\sim 10^{-2}$  (это соответствует третьей, четвертой "внутренней" итерации, как видно из таблиц) сходимость метода Ньютона такая же, как и при относительной точности  $\sim 10^{-6}$ . В практических расчетах число внутренних итераций не превышало пяти. Время счета одной "внешней" итерации по  $t$  при четырех "внутренних" итерациях в приведенном примере на ЭВМ СДС-6500 для центрального процессора  $\sim 5$  мин., а для периферического  $\sim 13$  мин.

#### 5. Заключение

Предложенная вычислительная схема решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегродифференциальных уравнений, описывающей задачу трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении, позволяет находить уровни энергии и волновые функции  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода с задан-

Таблица Ia Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I4) для функции  $\mathcal{V}_{01}(x)$ .

	I	3	5	7	9	10
20	.I3767I7·10 <sup>2</sup>	.I604046·10 <sup>2</sup>	.I608879·10 <sup>2</sup>	.I608982·10 <sup>2</sup>	.I608984·10 <sup>2</sup>	.I608984·10 <sup>2</sup>
40	-.I556898·10 <sup>2</sup>	-.I82I873·10 <sup>2</sup>	-.I827502·10 <sup>2</sup>	-.I827622·10 <sup>2</sup>	-.I827624·10 <sup>2</sup>	-.I827625·10 <sup>2</sup>
60	-.I863967·10 <sup>2</sup>	-.2I60853·10 <sup>2</sup>	-.2I67I49·10 <sup>2</sup>	-.2I67282·10 <sup>2</sup>	-.2I67285·10 <sup>2</sup>	-.2I67285·10 <sup>2</sup>
80	-.I068348·10 <sup>2</sup>	-.I228I74·10 <sup>2</sup>	-.I23I558·10 <sup>2</sup>	-.I23I630·10 <sup>2</sup>	-.I23I632·10 <sup>2</sup>	-.I23I632·10 <sup>2</sup>
100	-.54333I6·10	-.6I87337·10	-.6203302·10	-.6203642·10	-.6203649·10	-.6203649·10
120	-.2702III·10	-.3049678·10	-.3057049·10	-.3057205·10	-.3057209·10	-.3057209·10
140	-.I328209·10	-.I487050·10	-.I490426·10	-.I490498·10	-.I490500·10	-.I490500·10
160	-.6309305	-.70I2740	-.7027743	-.7028062	-.7028068	-.7028069
180	-.2536040	-.280I258	-.2806938	-.2807059	-.280706I	-.2807062

Таблица Ib Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I4) для функции  $\mathcal{V}_{02}(x)$ .

	I	3	5	7	9	10
20	.2079I5I	.244I352	.2449065	.2449229	.2449232	.2449232
40	.20279I7	.2336809	.2343353	.2343492	.2343495	.2343495
60	-.I656232	-.I94I82I	-.I947890	-.I9480I9	-.I948022	-.I948022
80	-.I245760	-.I447I45	-.I45I4I4	-.I45I505	-.I45I507	-.I45I507
100	-.6345995·10 <sup>-I</sup>	-.7305658·10 <sup>-I</sup>	-.7325964·10 <sup>-I</sup>	-.7326390·10 <sup>-I</sup>	-.7326404·10 <sup>-I</sup>	-.7326405·10 <sup>-I</sup>
120	-.3099400·10 <sup>-I</sup>	-.3533806·10 <sup>-I</sup>	-.3542997·10 <sup>-I</sup>	-.3543I93·10 <sup>-I</sup>	-.3543I97·10 <sup>-I</sup>	-.3543I97·10 <sup>-I</sup>
140	-.I52I302·10 <sup>-I</sup>	-.I7I90I2·10 <sup>-I</sup>	-.I723202·10 <sup>-I</sup>	-.I72329I·10 <sup>-I</sup>	-.I723293·10 <sup>-I</sup>	-.I723293·10 <sup>-I</sup>
160	-.767I020·10 <sup>-2</sup>	-.859327I·10 <sup>-2</sup>	-.86I2865·10 <sup>-2</sup>	-.86I3282·10 <sup>-2</sup>	-.86I329I·10 <sup>-2</sup>	-.86I329I·10 <sup>-2</sup>
180	-.4265600·10 <sup>-2</sup>	-.4734736·10 <sup>-2</sup>	-.4744743·10 <sup>-2</sup>	-.4744956·10 <sup>-2</sup>	-.4744960·10 <sup>-2</sup>	-.4744960·10 <sup>-2</sup>



Таблица 1в Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (14) для функции  $w_0$  ( $\kappa=0.2, n_1=0, n_2=1, m=0, x$ ).

	1	3	5	7	9	10
1	$-.1136063 \cdot 10^{-2}$	$-.1321557 \cdot 10^{-2}$	$-.1325502 \cdot 10^{-2}$	$-.1325586 \cdot 10^{-2}$	$-.1325588 \cdot 10^{-2}$	$-.1325588 \cdot 10^{-2}$
20	$.9102357 \cdot 10^{-1}$	.1067257	.1070600	.1070671	.1070673	.1070675
50	$-.3920691 \cdot 10^{-1}$	$-.4662943 \cdot 10^{-1}$	$-.4678755 \cdot 10^{-1}$	$-.4679091 \cdot 10^{-1}$	$-.4679099 \cdot 10^{-1}$	$-.4679099 \cdot 10^{-1}$
80	$-.5001040 \cdot 10^{-1}$	$-.5806828 \cdot 10^{-1}$	$-.5823909 \cdot 10^{-1}$	$-.5824271 \cdot 10^{-1}$	$-.5824279 \cdot 10^{-1}$	$-.5824279 \cdot 10^{-1}$
110	$-.1595525 \cdot 10^{-1}$	$-.1827304 \cdot 10^{-1}$	$-.1832207 \cdot 10^{-1}$	$-.1832311 \cdot 10^{-1}$	$-.1832313 \cdot 10^{-1}$	$-.1832313 \cdot 10^{-1}$
150	$-.3208510 \cdot 10^{-2}$	$-.3609487 \cdot 10^{-2}$	$-.3617994 \cdot 10^{-2}$	$-.3618175 \cdot 10^{-2}$	$-.3618179 \cdot 10^{-2}$	$-.3618179 \cdot 10^{-2}$
190	$-.8208385 \cdot 10^{-3}$	$-.9069773 \cdot 10^{-3}$	$-.9088194 \cdot 10^{-3}$	$-.9088585 \cdot 10^{-3}$	$-.9088594 \cdot 10^{-3}$	$-.9088594 \cdot 10^{-3}$

Таблица 2а Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (15) для функции  $v_{21}(x)$  на втором шаге по  $t$ .

	1	3	5	7	9	10
20	$.5967455 \cdot 10^{-3}$	$.7209744 \cdot 10^{-3}$	$.7236162 \cdot 10^{-3}$	$.7236724 \cdot 10^{-3}$	$.7236736 \cdot 10^{-3}$	$.7236736 \cdot 10^{-3}$
40	$-.6506315 \cdot 10^{-3}$	$-.7950992 \cdot 10^{-3}$	$-.7981759 \cdot 10^{-3}$	$-.7982414 \cdot 10^{-3}$	$-.7982427 \cdot 10^{-3}$	$-.7982428 \cdot 10^{-3}$
60	$-.4367799 \cdot 10^{-3}$	$-.5977348 \cdot 10^{-3}$	$-.6011756 \cdot 10^{-3}$	$-.6012488 \cdot 10^{-3}$	$-.6012504 \cdot 10^{-3}$	$-.6012504 \cdot 10^{-3}$
80	$.1338560 \cdot 10^{-3}$	$.4829949 \cdot 10^{-4}$	$.4644969 \cdot 10^{-4}$	$.4641033 \cdot 10^{-4}$	$.4640949 \cdot 10^{-4}$	$.4640947 \cdot 10^{-4}$
100	$.3760819 \cdot 10^{-3}$	$.3362140 \cdot 10^{-3}$	$.3353414 \cdot 10^{-3}$	$.3353228 \cdot 10^{-3}$	$.3353224 \cdot 10^{-3}$	$.3353224 \cdot 10^{-3}$
120	$.3989456 \cdot 10^{-3}$	$.3806310 \cdot 10^{-3}$	$.3802281 \cdot 10^{-3}$	$.3802195 \cdot 10^{-3}$	$.3802193 \cdot 10^{-3}$	$.3802193 \cdot 10^{-3}$
140	$.3354278 \cdot 10^{-3}$	$.3270407 \cdot 10^{-3}$	$.3268561 \cdot 10^{-3}$	$.3268522 \cdot 10^{-3}$	$.3268521 \cdot 10^{-3}$	$.3268521 \cdot 10^{-3}$
160	$.2512924 \cdot 10^{-3}$	$.2475940 \cdot 10^{-3}$	$.2475120 \cdot 10^{-3}$	$.2475103 \cdot 10^{-3}$	$.2475102 \cdot 10^{-3}$	$.2475102 \cdot 10^{-3}$
180	$.1558509 \cdot 10^{-3}$	$.1545051 \cdot 10^{-3}$	$.1544741 \cdot 10^{-3}$	$.1544734 \cdot 10^{-3}$	$.1544734 \cdot 10^{-3}$	$.1544734 \cdot 10^{-3}$

Таблица 26 Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I5) для функции  $\tilde{v}_3(x)$  на третьем шаге по  $t$ .

	I	3	5	7	9	10
20	$-.1332229 \cdot 10^{-3}$	$-.1548950 \cdot 10^{-3}$	$-.1553566 \cdot 10^{-3}$	$-.1553664 \cdot 10^{-3}$	$-.1553666 \cdot 10^{-3}$	$-.1553666 \cdot 10^{-3}$
40	$.1476941 \cdot 10^{-3}$	$.1729811 \cdot 10^{-3}$	$.1735186 \cdot 10^{-3}$	$.1735301 \cdot 10^{-3}$	$.1735303 \cdot 10^{-3}$	$.1735303 \cdot 10^{-3}$
60	$.1941975 \cdot 10^{-3}$	$.2225613 \cdot 10^{-3}$	$.2231625 \cdot 10^{-3}$	$.2231753 \cdot 10^{-3}$	$.2231755 \cdot 10^{-3}$	$.2231755 \cdot 10^{-3}$
80	$.1336936 \cdot 10^{-3}$	$.1490162 \cdot 10^{-3}$	$.1493394 \cdot 10^{-3}$	$.1493462 \cdot 10^{-3}$	$.1493464 \cdot 10^{-3}$	$.1493464 \cdot 10^{-3}$
100	$.9077573 \cdot 10^{-4}$	$.9804573 \cdot 10^{-4}$	$.9819818 \cdot 10^{-4}$	$.9820142 \cdot 10^{-4}$	$.9820149 \cdot 10^{-4}$	$.9820149 \cdot 10^{-4}$
120	$.6412683 \cdot 10^{-4}$	$.6749977 \cdot 10^{-4}$	$.6757014 \cdot 10^{-4}$	$.6757164 \cdot 10^{-4}$	$.6757167 \cdot 10^{-4}$	$.6757167 \cdot 10^{-4}$
140	$.4517649 \cdot 10^{-4}$	$.4673036 \cdot 10^{-4}$	$.4676260 \cdot 10^{-4}$	$.4676329 \cdot 10^{-4}$	$.4676330 \cdot 10^{-4}$	$.4676330 \cdot 10^{-4}$
160	$.2967402 \cdot 10^{-4}$	$.3036778 \cdot 10^{-4}$	$.3038210 \cdot 10^{-4}$	$.3038241 \cdot 10^{-4}$	$.3038242 \cdot 10^{-4}$	$.3038242 \cdot 10^{-4}$
180	$.1513418 \cdot 10^{-4}$	$.1539405 \cdot 10^{-4}$	$.1539948 \cdot 10^{-4}$	$.1539959 \cdot 10^{-4}$	$.1539959 \cdot 10^{-4}$	$.1539959 \cdot 10^{-4}$

Таблица 3а Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I5) для функции  $\tilde{w}_1$  ( $k=0.2, n_1=0, n_2=1, m=0, \alpha$ ) на первом шаге по  $t$ .

	I	3	5	7	9	10
I	$-.9247001 \cdot 10^{-6}$	$-.9246914 \cdot 10^{-6}$	$-.9246914 \cdot 10^{-6}$	$-.9246914 \cdot 10^{-6}$	$-.9246914 \cdot 10^{-6}$	$-.9246914 \cdot 10^{-6}$
20	$-.2293637 \cdot 10^{-10}$	$-.1467558 \cdot 10^{-9}$	$-.1491358 \cdot 10^{-9}$	$-.1491862 \cdot 10^{-9}$	$-.1491873 \cdot 10^{-9}$	$-.1491873 \cdot 10^{-9}$
50	$-.1309713 \cdot 10^{-12}$	$.5587742 \cdot 10^{-10}$	$.5700296 \cdot 10^{-10}$	$.5702692 \cdot 10^{-10}$	$.5702739 \cdot 10^{-10}$	$.5702740 \cdot 10^{-10}$
80	$-.1601760 \cdot 10^{-12}$	$.5736759 \cdot 10^{-10}$	$.5858335 \cdot 10^{-10}$	$.5860913 \cdot 10^{-10}$	$.5860966 \cdot 10^{-10}$	$.5860966 \cdot 10^{-10}$
110	$-.5064153 \cdot 10^{-13}$	$.1689630 \cdot 10^{-10}$	$.1724532 \cdot 10^{-10}$	$.1725273 \cdot 10^{-10}$	$.1725287 \cdot 10^{-10}$	$.1725287 \cdot 10^{-10}$
150	$-.1008777 \cdot 10^{-13}$	$.3046105 \cdot 10^{-11}$	$.3106662 \cdot 10^{-11}$	$.3107953 \cdot 10^{-11}$	$.3107977 \cdot 10^{-11}$	$.3107977 \cdot 10^{-11}$
190	$-.2533750 \cdot 10^{-14}$	$.6828192 \cdot 10^{-12}$	$.6959322 \cdot 10^{-12}$	$.6962127 \cdot 10^{-12}$	$.6962179 \cdot 10^{-12}$	$.6962179 \cdot 10^{-12}$



Таблица 3б Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I5) для функции  $\tilde{w}_2$  ( $k=0.2, n_1=0, n_2=1, m=0, x$ ) на втором шаге по  $t$ .

20

	I	3	5	7	9	10
I	$-.2699610 \cdot 10^{-7}$	$-.3715692 \cdot 10^{-7}$	$-.3737261 \cdot 10^{-7}$	$-.3737720 \cdot 10^{-7}$	$-.3737730 \cdot 10^{-7}$	$-.3737730 \cdot 10^{-7}$
20	$.5421200 \cdot 10^{-5}$	$.6279907 \cdot 10^{-5}$	$.6298192 \cdot 10^{-5}$	$.6298581 \cdot 10^{-5}$	$.6298590 \cdot 10^{-5}$	$.6298590 \cdot 10^{-5}$
50	$-.3772717 \cdot 10^{-5}$	$-.4181777 \cdot 10^{-5}$	$-.4190428 \cdot 10^{-5}$	$-.4190612 \cdot 10^{-5}$	$-.4190616 \cdot 10^{-5}$	$-.4190616 \cdot 10^{-5}$
80	$-.2906480 \cdot 10^{-5}$	$-.3344761 \cdot 10^{-5}$	$-.3354108 \cdot 10^{-5}$	$-.3354307 \cdot 10^{-5}$	$-.3354311 \cdot 10^{-5}$	$-.3354311 \cdot 10^{-5}$
110	$-.7670822 \cdot 10^{-7}$	$-.1995735 \cdot 10^{-6}$	$-.2022568 \cdot 10^{-6}$	$-.2023139 \cdot 10^{-6}$	$-.2023151 \cdot 10^{-6}$	$-.2023151 \cdot 10^{-6}$
150	$.4178436 \cdot 10^{-6}$	$.3965831 \cdot 10^{-6}$	$.3961175 \cdot 10^{-6}$	$.3961076 \cdot 10^{-6}$	$.3961075 \cdot 10^{-6}$	$.3961073 \cdot 10^{-6}$
190	$.4780962 \cdot 10^{-6}$	$.4739797 \cdot 10^{-6}$	$.4738789 \cdot 10^{-6}$	$.4738767 \cdot 10^{-6}$	$.4738767 \cdot 10^{-6}$	$.4738767 \cdot 10^{-6}$

Таблица 3в Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I5) для функции  $\tilde{w}_3$  ( $k=0.2, n_1=0, n_2=1, m=0, x$ ) на третьем шаге по  $t$ .

21

$x \backslash N$ шаг	I	3	5	7	9	10
I	$.1206064 \cdot 10^{-7}$	$.1202874 \cdot 10^{-7}$	$.1206642 \cdot 10^{-7}$	$.1206722 \cdot 10^{-7}$	$.1206724 \cdot 10^{-7}$	$.1206724 \cdot 10^{-7}$
20	$-.8605746 \cdot 10^{-6}$	$-.1010339 \cdot 10^{-5}$	$-.1013534 \cdot 10^{-5}$	$-.1013602 \cdot 10^{-5}$	$-.1013603 \cdot 10^{-5}$	$-.1013603 \cdot 10^{-5}$
50	$.3036034 \cdot 10^{-6}$	$.3743676 \cdot 10^{-6}$	$.3758789 \cdot 10^{-6}$	$.3759111 \cdot 10^{-6}$	$.3759118 \cdot 10^{-6}$	$.3759118 \cdot 10^{-6}$
80	$.4705620 \cdot 10^{-6}$	$.5475314 \cdot 10^{-6}$	$.5491643 \cdot 10^{-6}$	$.5491990 \cdot 10^{-6}$	$.5491198 \cdot 10^{-6}$	$.5491998 \cdot 10^{-6}$
110	$.1929910 \cdot 10^{-6}$	$.2152841 \cdot 10^{-6}$	$.2157529 \cdot 10^{-6}$	$.2157628 \cdot 10^{-6}$	$.2157630 \cdot 10^{-6}$	$.2157630 \cdot 10^{-6}$
150	$.8107172 \cdot 10^{-7}$	$.8498069 \cdot 10^{-7}$	$.8506202 \cdot 10^{-7}$	$.8506376 \cdot 10^{-7}$	$.8506379 \cdot 10^{-7}$	$.8506379 \cdot 10^{-7}$
190	$.4963238 \cdot 10^{-7}$	$.5049697 \cdot 10^{-7}$	$.5051459 \cdot 10^{-7}$	$.5051496 \cdot 10^{-7}$	$.5051497 \cdot 10^{-7}$	$.5051497 \cdot 10^{-7}$

ной точностью. В данной схеме практически нет ограничений, накладываемых памятью ЭВМ CDC-6500 как на число решаемых уравнений, так и на число узловых точек на интервале  $[0, R_{max}]$ , что позволяет повысить точность вычисления собственных значений и собственных функций (уменьшая  $\Delta x_i$ ,  $\Delta R_i$  и увеличивая  $K_{max}$ ,  $N_{max}$ ). Ограничения существуют только по счетному времени и обусловлены, в основном, работой периферических устройств. В настоящее время абсолютная точность вычисления собственных значений и собственных функций  $\sim 10^{-4}$ .

В заключение авторы благодарят Л.И.Пономарева за инициирование данной работы и С.И.Виницкого - за многочисленные обсуждения.

#### Литература

1. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20, с.576.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1977, 72, с.1670.
3. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р5-12788, Дубна, 1979.
4. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.
5. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р5-12787, Дубна, 1979.
6. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. "Наука", М., 1971.
7. Федоренко Р.П. Успехи мат.наук. 1973, 26, с.121.
8. Хидков Е.П., Пузынин И.В., Хоромский Б.Н. ОИЯИ, Р5-9512, Дубна, 1976.
9. Ponomarev L.I., Puzynin I.V. and Puzynina T.P. J.Computational Phys. 1976, 22, p.125.

Рукопись поступила в издательский отдел  
12 сентября 1979 года.