Дима

410/2-80

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

М-435

4/2-80

Р5 - 12790

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

РЕШЕНИЕ ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ ДЛЯ СИСТЕМЫ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ μ-МЕЗОМОЛЕКУЛ В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

1979

Мележик В.С., и др. P5 - 12790

Решение частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегро-дифференциальных уравнений, возникающей при вычислении уровней энергии μ -мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел

Рассмотрено применение вычислительной схемы, основанной на модификации непрерывного аналога метода Ньютона, к решению частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы интегро-дифференциальных уравнений особого вида. Такой системой можно аппроксимировать бесконечную систему интегро-дифференциальных уравнений, возникающую при решении уравнения Шредингера для μ -мезомолекул изотопов водорода в адиабатическом представлении задачи трех тел. На примере расчета уровней энергии и волновой функции μ-мезомолекулы $dd\mu$ с квантовыми числами $J=0$, $V=1$ демонстрируется высокая эффективность алгоритма.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Melezhik V.S. et al. P5 - 12790

Solution of the Sturm-Liouville Partial Problem for a System of Integro-Differential Equations Arising at the Calculation of μ-Mesomolecule Energy Levels in the Adiabatic Representation of a Three-Body Problem

The application of the calculation scheme based on the modification of the Newton method continuous analogue in the solution of the Sturm-Liouville partial problem for special form integro-differential equation system is considered. With such a system it is possible to approximate an infinite system of integro-differential equations arising at the solution of Schroedinger equations for hydrogen isotope μ -mesomolecules in the adiabatic representation of the three-body problem. A high effectiveness of the algorithm is demonstrated for the calculation of energy states and wave function of a $dd\mu$- μ-mesomolecule with $J=0$, $V=1$ quantum numbers.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

I. Решение уравнения Шредингера для системы трех тел (а,в,с), взаимодействующих по закону Кулона, с массами $M_a \geqslant M_b \gg M_c$ и зарядами $Z_a = Z_b = -Z_c = 1$, в адиабатическом представлении сводится к решению задачи Штурма-Лиувилля для системы бесконечного числа интегродифференциальных уравнений /2/ (в единицах $e = \hbar = m_a = 1$, $m_a^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}$):

$$\left\{\delta_{ij}\left(\frac{d^2}{dx^2} + 2M\lambda\right) - U_{ii}(x)\right\} y_i(x) = \sum_{i\neq j}^{\infty} U_{ij}(x) y_j(x), \quad (I)$$

$$M = \frac{M_0}{m_a}, \quad M_0^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}, \quad U_{ij}(x) = 2MW_{ij}(x)\delta_{ij} + H_{ij}(x) + 2Q_{ij}(x)\frac{d}{dx}$$

на интервале $x \in [0, \infty)$
с граничными условиями:

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dx} y_i(0) + f_{ij}^1 y_j(0) = 0, \\ &\frac{d}{dx} y_i(\infty) + f_{ij}^2 y_j(\infty) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\sum_{i\neq j}$ включает в себя суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектрам задачи двух центров. Эффективные потенциалы $U_{ij}(x)$ определены в работе /2/. $(2M)^{-1}$ - параметр малости, который для μ -мезомолекул изотопов водорода удовлетворяет условию $(2M)^{-1} \ll 1$.

Особенность данной задачи такова, что замена бесконечной системы (I) системой, состоящей из двух уравнений (двухуровневое приближение"), дает неплохие результаты при вычислении собственных значений[3]. Сделаем еще один шаг и аппроксимируем задачу (I) следующей:

$$\left(\hat{L}(x) + \lambda \hat{I}\right) \bar{y}(x) = 0 \qquad (3)$$

с граничными условиями (2).

Здесь

$$\hat{L}(x) = \begin{pmatrix} L_{11}(x) & L_{12}(x) & L_{13}(x) & \dots & L_{1N}(x) \\ L_{21}(x) & L_{22}(x) & 0 & \dots & 0 \\ L_{31}(x) & 0 & L_{33}(x) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ L_{N1}(x) & 0 & 0 & \dots & L_{NN}(x) \end{pmatrix}, \qquad (4)$$

где

$$L_{ii}(x) = \frac{1}{2M}\left(I\frac{d^2}{dx^2} - H_{ii}(x) - W_{ii}(x) - 2Q_{ii}(x)\frac{d}{dx}\right),$$

$$L_{1i}(x) = \frac{1}{2M}\left(-2Q_{1i}(x)\frac{d}{dx} - H_{1i}(x)\right),$$

$$L_{i1}(x) = \frac{1}{2M}\left(-2Q_{i1}(x)\frac{d}{dx} - H_{i1}(x)\right)$$

и

$$Q_{ij}(x) = \begin{pmatrix} Q_{ia,ja}(x) & Q_{ia,jb}(x) \\ Q_{ib,ja}(x) & Q_{ib,jb}(x) \end{pmatrix}, \quad H_{ij}(x) = \begin{pmatrix} H_{ia,jb}(x) & H_{ia,jb}(x) \\ H_{ib,ja}(x) & H_{ib,jb}(x) \end{pmatrix}$$

$$W_{ij}(x) = \begin{pmatrix} W_{ia,jb}(x) & W_{ia,jb}(x) \\ W_{ib,ja}(x) & W_{ib,jb}(x) \end{pmatrix},$$

$\hat{I}$ – единичная матрица, $\bar{y}(x)$ – вектор размерности N. Переход от бесконечной системы интегродифференциальных уравнений к конечной системе дифференциальных уравнений ($N \sim 300$) осуществлен аналогично рассмотренному в работе[I].

Нам известно несколько подходов к решению задачи (3) с эффективными потенциалами вида (4). Первый заключается в следующем: используя специальную структуру матрицы $L(x)$ и наличие параметра малости $(2M)^{-I}$, находят операторное преобразование, диагонализирующее $L(x)$, с помощью которого система (3) N уравнений

сводится к двум связанным уравнениям ("эффективное двухуровневое приближение"). Такой подход реализован в работе[4], где указанное преобразование построено с точностью до членов $(2M)^{-2}$ включительно.

Другой подход состоит в том, что исходная задача (3) аппроксимируется конечноразностной и сводится к алгебраической задаче на собственные значения:

$$\left(\tilde{L} + \lambda \hat{I}\right) = 0, \qquad (5)$$

где $\tilde{L}$ имеет ту же структуру, что и $\hat{L}$, но теперь каждый элемент матрицы $\tilde{L}$ – матрица размерности $(2N_x \times 2N_x)$, где N_x – число узлов по оси x. Этот метод рассмотрен в работе[5].

Здесь для решения задачи (3) применена вычислительная схема, предложенная в работе[I], основанная на модификации непрерывного аналога метода Ньютона.

2. В таком подходе собственные значения и собственные функции задачи (3) находятся в результате итерационного процесса по параметру t[6]:

$$E^{k+1} = E^{k} + \mu^{k},$$

$$\bar{y}^{k+1}(x) = \bar{y}^{k}(x) + \Delta t_k\left(\bar{\bar{v}}_k^{2}(x) + \mu^k \bar{\bar{v}}_k^{1}(x)\right), \qquad (6)$$

основой которого является вычисление итерационных поправок $\bar{\bar{v}}^{1(2)}$ к собственным функциям на каждом шаге по t. Поправка к собственному значению μ^k определяется из условия нормировки:

$$\| y(x) \| - 1 = 0. \qquad (7)$$

Итерационные поправки $\bar{v}^{1(2)}$ являются решениями краевых задач:

$$\left(L(x) + \lambda_0 \hat{I}\right) \bar{\bar{v}}_k^{1}(x) = -\bar{y}_k(x), \qquad (8)$$

$$\left(L(x) + \lambda_0 \hat{I}\right) \bar{\bar{v}}_k^{2}(x) = -\left(L(x) + \lambda_k \hat{I}\right) \bar{y}_k(x) \qquad (9)$$

с граничными условиями, вытекающими из (2). Как и в работе[I], для нахождения решения задач (8) и (9) используем метод простой итерации в комбинации с методом прогонки. Векторы $\bar{\bar{v}}_k^{1(2)}$, $\bar{y}_k$ представим в виде :

$$
\bar{\bar{\vartheta}}_k^{\,1(2)} = \bar{\vartheta}_k^{\,1(2)} + \bar{w}_k^{\,1(2)} = \begin{pmatrix} \vartheta_{k,1}^{1(2)} \\ \vartheta_{k,2}^{1(2)} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ w_{k,1}^{1(2)} \\ w_{k,2}^{1(2)} \\ \vdots \\ w_{k,N}^{1(2)} \end{pmatrix}, \quad \bar{y}_k = \bar{y}_k^{d} + \bar{y}_k^{c} = \begin{pmatrix} y_{k,1}^{d} \\ y_{k,2}^{d} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ y_{k,1}^{c} \\ y_{k,2}^{c} \\ \vdots \\ y_{k,N}^{c} \end{pmatrix}, \qquad (\text{I0})
$$

а для решения задач (8) и (9) построим итерационные процессы:

$$
\left(L + \lambda_0 \hat{I}\right) \bar{\vartheta}_0^{1}(\ell+1) = -\bar{y}_0^{d} - L\,\bar{w}_0^{1}(\ell), \qquad (\text{IIа})
$$

$$
\left(L + \lambda_0 \hat{I}\right) \bar{w}_0^{1}(\ell+1) = -\bar{y}_0^{c} - L\,\bar{\vartheta}_0^{1}(\ell+1) \qquad (\text{IIб})
$$

и

$$
\left(L + \lambda_0 \hat{I}\right) \bar{\vartheta}_k^{2}(\ell+1) = -\left(L + \lambda_k \hat{I}\right)\bar{y}_k^{d} - L\,\bar{w}_k^{2}(\ell), \qquad (\text{I2а})
$$

$$
\left(L + \lambda_0 \hat{I}\right) \bar{w}_k^{2}(\ell+1) = -\left(L + \lambda_k \hat{I}\right)\bar{y}_k^{c} - L\,\bar{\vartheta}_k^{2}(\ell+1). \qquad (\text{I2б})
$$

На первом шаге по ℓ полагаем $\bar{w}_k^{1(2)}(0) = 0$, находим с помощью метода прогонки $\bar{\vartheta}_k^{1(2)}(1)$, подставляем в (IIб) (I2б), находим $\bar{w}_k^{1(2)}(1)$, после чего переходим к следующему шагу по ℓ.

На рассмотренных ниже примерах демонстрируется сходимость "внутренних" итерационных процессов (II), (I2). Отличие данной вычислительной схемы от алгоритма [I] – в разбиении (I0): в схеме [I] вектор-столбец итерационных поправок $\bar{\bar{\vartheta}}$ разбивается на вектор $\bar{\vartheta}$ поправок к функциям дискретного спектра и вектор поправок $\bar{w}$ к функциям непрерывного спектра; в данной схеме $\bar{\vartheta}$ – вектор поправок к первым двум функциям дискретного спектра, а $\bar{w}$ – вектор поправок ко всем остальным функциям дискретного и непрерывного спектров.

3. Предложенная вычислительная схема применялась для нахождения уровней энергии и волновых функций μ-мезомолекул $pp\mu$, $dd\mu$, $tt\mu$, $pd\mu$, $pt\mu$, $dt\mu$. Здесь, в качестве примера,

рассмотрена μ-мезомолекула $dd\mu$ с квантовыми числами $J = 0$, $v = 1$, параметр малости $(2M)^{-1} = 0.05333$.

Расчет проведен для двух случаев: учета только дискретного спектра в задаче (3), при этом $N = 26$, и учета дискретного и непрерывного спектров в задаче- $N = \text{I80}$. В обоих случаях делалось разбиение (I0).

В таблице I демонстрируется сходимость "внутренних" итераций к решению задачи (II) для функции $\vartheta_{0,1}^{1}$. В таблицах 2 – сходимость "внутренних" итераций к решению задачи (I2) на различных шагах по методу Ньютона (6) (по t) для функций $\vartheta_{2,1}^{1}$, $\vartheta_{3,1}^{1}$, $\vartheta_{4,1}^{1}$. Эти результаты получены при $N = 26$. Для случая $N = \text{I80}$ приводятся аналогичные таблицы 3 и 4.

Проведенные численные исследования демонстрируют быструю сходимость "внутренних" итерационных процессов (II), (I2) (при ℓ = I0 относительная точность в решении I0^{-5}). Однако сходимость данных итерационных схем медленнее аналогичных схем в работе [I], что обусловлено различием в разбиении (I0). Отмеченная особенность не является недостатком, так как для решения (II), (I2) требуемая точность $\sim \text{I0}^{-2}$ ($\ell = 3, 4$) (см. [I]), а сама вычислительная схема существенно проще в реализации и позволяет сократить время вычислений на порядок.

При решении (3) вычисленное значение $\lambda = -35.8\text{I}3$ не отличается от полученного в работе [I]. Это указывает на то, что задача (3) с большой точностью ($\sim \text{I0}^{-5}$–I0^{-6} для собственного значения) аппроксимирует исходную задачу (I).

4. В работе показана высокая эффективность предложенной вычислительной схемы в мезомолекулярных расчетах, существенным достоинством которой является простота реализации. Данный подход может быть применен к широкому классу задач типа Штурма-Лиувилля для системы интегродифференциальных уравнений специального вида (3)-(4). Оказалось, что система дифференциальных уравнений с простой структурой потенциалов вида (4) очень хорошо аппроксимирует бесконечную систему интегродифференциальных уравнений, возникающую при вычислении уровней энергии μ-мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел.

В заключение авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву за интерес к работе и С.И.Виницкому за полезные обсуждения.

Таблица I. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (II) для функции $\vartheta^{2}_{0,1}$.

x \ ℓ	I	2	3	5	7	9	IO
I.	.646416·IO^{I}	.827961З·IO^{I}	.8805749·IO^{I}	.9002165·IO^{I}	.9018625·IO^{I}	.9020005·IO^{I}	.9020094·IO^{I}
2.	.1395070·IO^{2}	.1788283·IO^{2}	.1902244·IO^{2}	.1944788·IO^{2}	.1948353·IO^{2}	.1948652·IO^{2}	.1948671·IO^{2}
3.	.2297038·IO^{0}	.1494086·IO^{0}	.1264102·IO^{0}	.1178036·IO^{0}	.1170822·IO^{0}	.1170217·IO^{0}	.1170178·IO^{0}
4.	-.1550717·IO^{2}	-.2011741·IO^{2}	-.2145188·IO^{2}	-.2195005·IO^{2}	-.2199180·IO^{2}	-.2199530·IO^{2}	-.2199552·IO^{2}
5.	-.2078497·IO^{2}	-.2674818·IO^{2}	-.2847089·IO^{2}	-.2911387·IO^{2}	-.2916775·IO^{2}	-.2917227·IO^{2}	-.2917256·IO^{2}
IO.	-.5793682·IO^{I}	-.7110738·IO^{I}	-.7488518·IO^{I}	-.7629501·IO^{I}	-.7641316·IO^{I}	-.7642306·IO^{I}	-.7642370·IO^{I}
I5.	-.1029737·IO^{I}	-.1216924·IO^{I}	-.1271082·IO^{I}	-.1291307·IO^{I}	-.1293002·IO^{I}	-.1293144·IO^{I}	-.1293153·IO^{I}

Таблица 2а. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I2) для функции $\vartheta^{1}_{2,1}$, на втором шаге по параметру t ($\delta_2 = 0.2 \cdot 10^{-4}$).

x \ ℓ	I	2	3	5	7	9	IO
I.	-.3726199·IO^{-6}	.1577182·IO^{-3}	.2042832·IO^{-3}	.2216947·IO^{-3}	.2231539·IO^{-3}	.2232762·IO^{-3}	.2232842·IO^{-3}
2.	.2492464·IO^{-3}	.5940981·IO^{-3}	.6949966·IO^{-3}	.7327107·IO^{-3}	.7358715·IO^{-3}	.7361364·IO^{-3}	.7361536·IO^{-3}
3.	-.9304302·IO^{-4}	-.9315353·IO^{-4}	-.9508077·IO^{-4}	-.9584089·IO^{-4}	-.9590485·IO^{-4}	-.9591021·IO^{-4}	-.9591055·IO^{-4}
4.	-.9492845·IO^{-3}	-.1353011·IO^{-2}	-.1471235·IO^{-2}	-.1515398·IO^{-2}	-.1519099·IO^{-2}	-.1519409·IO^{-2}	-.1519429·IO^{-2}
5.	-.1431992·IO^{-2}	-.1965694·IO^{-2}	-.2118617·IO^{-2}	-.2175626·IO^{-2}	-.2180403·IO^{-2}	-.2180804·IO^{-2}	-.2180830·IO^{-2}
IO.	-.1656952·IO^{-3}	-.2801390·IO^{-3}	-.3136420·IO^{-3}	-.3261413·IO^{-3}	-.3271887·IO^{-3}	-.3272765·IO^{-3}	-.3272822·IO^{-3}
I5.	.2037784·IO^{-3}	.1887805·IO^{-3}	.1839792·IO^{-3}	.1821861·IO^{-3}	.1820358·IO^{-3}	.1820232·IO^{-3}	.1820224·IO^{-3}

ж) Параметр $\delta_k = \| (\mathcal{L}(x) + \lambda_k) y_k \|$, где $\mathcal{L}(x)$ – конечно-разностный аналог дифференциального оператора $\hat{L}(x)$.

Таблица 2б. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I2) для функции $\upsilon^{1}_{3,1}$ на третьем шаге по параметру t ($\delta_3 = 0{,}1\cdot 10^{-5}$).

x \ ℓ	I	2	3	5	7	9	I0
I.	-.175246I·IO^{-3}	-.2249940·IO^{-3}	-.2393985·IO^{-3}	-.2447756·IO^{-3}	-.2452262·IO^{-3}	-.2452640·IO^{-3}	-.2452665·IO^{-3}
2.	-.374990I·IO^{-3}	-.4827I06·IO^{-3}	-.5I39I06·IO^{-3}	-.5255576·IO^{-3}	-.5265336·IO^{-3}	-.5266I54·IO^{-3}	-.5266207·IO^{-3}
3.	.4I03979·IO^{-5}	.6838056·IO^{-5}	.6968986·IO^{-5}	.7204636·IO^{-5}	.7224386·IO^{-5}	.722604I·IO^{-5}	.7226I48·IO^{-5}
4.	.43I9I8I·IO^{-3}	.558I574·IO^{-3}	.59469I4·IO^{-3}	.6083296·IO^{-3}	.6094723·IO^{-3}	.6095882·IO^{-3}	.6095745·IO^{-3}
5.	.5707276·IO^{-3}	.7338572·IO^{-3}	.78I0I56·IO^{-3}	.7986I80·IO^{-3}	.800093I·IO^{-3}	.8002I68·IO^{-3}	.8002248·IO^{-3}
I0.	.I724277·IO^{-3}	.208469I·IO^{-3}	.2I88I08·IO^{-3}	.2226703·IO^{-3}	.2229938·IO^{-3}	.2230209·IO^{-3}	.2230226·IO^{-3}
I5.	.5022759·IO^{-4}	.5543693·IO^{-4}	.5692009·IO^{-4}	.5747378·IO^{-4}	.57520I8·IO^{-4}	.5752406·IO^{-4}	.5752432·IO^{-4}

Таблица 2в. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I2) для функции $\upsilon^{1}_{4,1}$ четвертом шаге по t ($\delta_4 = 4\cdot I0^{-7}$).

x \ ℓ	I	2	3	5	7	9	I0
I.	-.6567472·IO^{-6}	-.5620343·IO^{-6}	-.5334837·IO^{-6}	-.5227766·IO^{-6}	-.52I8790·IO^{-6}	-.52I8038·IO^{-6}	-.52I7989·IO^{-6}
2.	-.I063398·IO^{-5}	-.8543257·IO^{-6}	-.7924207·IO^{-6}	-.7692278·IO^{-6}	-.7672837·IO^{-6}	-.767I208·IO^{-6}	-.767II02·IO^{-6}
3.	-.3I99784·IO^{-6}	-.3I06408·IO^{-6}	-.3II7020·IO^{-6}	-.3I2I662·IO^{-6}	-.3I22056·IO^{-6}	-.3I22089·IO^{-6}	-.3I2209I·IO^{-6}
4.	-.I63I567·IO^{-6}	-.4033692·IO^{-6}	-.4759842·IO^{-6}	-.503I445·IO^{-6}	-.50542I0·IO^{-6}	-.5056II8·IO^{-6}	-.505624I·IO^{-6}
5.	-.3728060·IO^{-6}	-.704939I·IO^{-6}	-.7992343·IO^{-6}	-.8343053·IO^{-6}	-.8372435·IO^{-6}	-.8374897·IO^{-6}	-.8375057·IO^{-6}
I0.	.I6I9729·IO^{-5}	.I556645·IO^{-5}	.I536024·IO^{-5}	.I528335·IO^{-5}	.I52769I·IO^{-5}	.I527637·IO^{-5}	.I527634·IO^{-5}
I5.	.234995I·IO^{-5}	.2350585·IO^{-5}	.234767I·IO^{-5}	.2346568·IO^{-5}	.2346476·IO^{-5}	.2346468·IO^{-5}	.2346467·IO^{-5}

Таблица 3. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (II) для функции $\omega^{2}_{0,25}$.

$k \backslash \ell$	I	2	3	5	7	9	IO
I.	$.646416\cdot IO^{I}$	$.894458\cdot IO^{I}$	$.991924\cdot IO^{I}$	$.104519\cdot IO^{2}$	$.105339\cdot IO^{2}$	$.105465\cdot IO^{2}$	$.105479\cdot IO^{2}$
2.	$.139507\cdot IO^{2}$	$.193059\cdot IO^{2}$	$.214100\cdot IO^{2}$	$.225598\cdot IO^{2}$	$.227368\cdot IO^{2}$	$.227641\cdot IO^{2}$	$.227671\cdot IO^{2}$
3.	$.229704\cdot IO^{0}$	$.805915\cdot IO^{-I}$	$.216217\cdot IO^{-I}$	$.106919\cdot IO^{-I}$	$.156687\cdot IO^{-I}$	$-.164350\cdot IO^{-I}$	$-.165198\cdot IO^{-I}$
4.	$-.155072\cdot IO^{2}$	$-.217741\cdot IO^{2}$	$.242330\cdot IO^{2}$	$.255766\cdot IO^{2}$	$.257835\cdot IO^{2}$	$-.258154\cdot IO^{2}$	$-.258189\cdot IO^{2}$
5.	$-.207850\cdot IO^{2}$	$-.288578\cdot IO^{2}$	$-.320188\cdot IO^{2}$	$.337457\cdot IO^{2}$	$.340116\cdot IO^{2}$	$-.340526\cdot IO^{2}$	$-.340571\cdot IO^{2}$
IO.	$-.579368\cdot IO^{I}$	$-.758447\cdot IO^{I}$	$.828106\cdot IO^{I}$	$.866158\cdot IO^{I}$	$.872018\cdot IO^{I}$	$-.872920\cdot IO^{I}$	$-.873020\cdot IO^{I}$
I5.	$-.102974\cdot IO^{I}$	$.128316\cdot IO^{I}$	$.138263\cdot IO^{I}$	$.143701\cdot IO^{I}$	$.144538\cdot IO^{I}$	$-.144667\cdot IO^{I}$	$-.144681\cdot IO^{I}$

Таблица 4а. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I2) для функции $\omega^{1}_{2,25}$ на третьем шаге по t ($\delta_2 = 0.2\cdot IO^{-4}$).

$k \backslash \ell$	I	2	3	5	7	9	IO
I.	$.667158\cdot IO^{-4}$	$.251138\cdot IO^{-3}$	$.334954\cdot IO^{-3}$	$.380767\cdot IO^{-3}$	$.387822\cdot IO^{-3}$	$.388908\cdot IO^{-3}$	$.389028\cdot IO^{-3}$
2.	$.349500\cdot IO^{-3}$	$.750063\cdot IO^{-3}$	$.930976\cdot IO^{-3}$	$.102988\cdot IO^{-2}$	$.104511\cdot IO^{-2}$	$.104745\cdot IO^{-2}$	$.104771\cdot IO^{-2}$
3.	$-.942131\cdot IO^{-4}$	$-.946966\cdot IO^{-4}$	$-.997516\cdot IO^{-4}$	$-.102529\cdot IO^{-3}$	$-.102957\cdot IO^{-3}$	$-.103023\cdot IO^{-3}$	$-.103030\cdot IO^{-3}$
4.	$-.953104\cdot IO^{-3}$	$-.142330\cdot IO^{-2}$	$-.163477\cdot IO^{-2}$	$-.175034\cdot IO^{-2}$	$-.176814\cdot IO^{-2}$	$-.177088\cdot IO^{-2}$	$-.177118\cdot IO^{-2}$
5.	$-.135210\cdot IO^{-2}$	$-.196995\cdot IO^{-2}$	$-.224210\cdot IO^{-2}$	$-.239066\cdot IO^{-2}$	$-.241353\cdot IO^{-2}$	$.241706\cdot IO^{-2}$	$-.241745\cdot IO^{-2}$
IO.	$.174426\cdot IO^{-4}$	$-.114714\cdot IO^{-3}$	$-.174712\cdot IO^{-3}$	$-.207445\cdot IO^{-3}$	$-.212485\cdot IO^{-3}$	$-.213261\cdot IO^{-3}$	$-.213347\cdot IO^{-3}$
I5.	$.268621\cdot IO^{-3}$	$.251288\cdot IO^{-3}$	$.242774\cdot IO^{-3}$	$.238097\cdot IO^{-3}$	$.237377\cdot IO^{-3}$	$.237266\cdot IO^{-3}$	$.237254\cdot IO^{-3}$

Таблица 4б. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I2) для функции $\omega^{1}_{3,25}$ на третьем шаге по t (δ_3 =.I·IO^{-5}).

$x \backslash \ell$	I	2	3	5	7	9	IO
I.	$-.2I2029\cdot IO^{-3}$	$-.294658\cdot IO^{-3}$	$-.327202\cdot IO^{-3}$	$-.344984\cdot IO^{-3}$	$-.347722\cdot IO^{-3}$	$-.348I44\cdot IO^{-3}$	$-.348I90\cdot IO^{-3}$
2.	$-.456393\cdot IO^{-3}$	$.634763\cdot IO^{-3}$	$-.7050I7\cdot IO^{-3}$	$-.743405\cdot IO^{-3}$	$-.7493I6\cdot IO^{-3}$	$-.750227\cdot IO^{-3}$	$-.750327\cdot IO^{-3}$
3.	$-.I07922\cdot IO^{-5}$	$.389458\cdot IO^{-5}$	$.5867I6\cdot IO^{-5}$	$.6946I3\cdot IO^{-5}$	$.7II229\cdot IO^{-5}$	$.7I3788\cdot IO^{-5}$	$.7I4070\cdot IO^{-5}$
4.	$.5I87I3\cdot IO^{-3}$	$.727477\cdot IO^{-3}$	$.809577\cdot IO^{-3}$	$.854437\cdot IO^{-3}$	$.86I345\cdot IO^{-3}$	$.862409\cdot IO^{-3}$	$.862526\cdot IO^{-3}$
5.	$.692I66\cdot IO^{-3}$	$.960979\cdot IO^{-3}$	$.I0665I\cdot IO^{-2}$	$.II24I7\cdot IO^{-2}$	$.II3305\cdot IO^{-2}$	$.II3442\cdot IO^{-2}$	$.II3457\cdot IO^{-2}$
IO.	$.2I3859\cdot IO^{-3}$	$.2736I0\cdot IO^{-3}$	$.296870\cdot IO^{-3}$	$.309574\cdot IO^{-3}$	$.3II53I\cdot IO^{-3}$	$.3II832\cdot IO^{-3}$	$.3II865\cdot IO^{-3}$
I5.	$.58I342\cdot IO^{-4}$	$.666980\cdot IO^{-4}$	$.700200\cdot IO^{-4}$	$.7I8355\cdot IO^{-4}$	$.72II5I\cdot IO^{-4}$	$.72I58I\cdot IO^{-4}$	$.72I629\cdot IO^{-4}$

Таблица 4в. Сходимость "внутреннего" итерационного процесса к решению задачи (I2) для функции $\omega^{1}_{4,25}$ на четвертом шаге по t (δ_4 =.4·IO^{-7}).

$x \backslash \ell$	I	2	3	5	7	9	IO
I.	$-.983922\cdot IO^{-6}$	$-.982I05\cdot IO^{-6}$	$-.955864\cdot IO^{-6}$	$-.94I509\cdot IO^{-6}$	$.939298\cdot IO^{-6}$	$-.938957\cdot IO^{-6}$	$-.938920\cdot IO^{-6}$
2.	$-.I72364\cdot IO^{-5}$	$-.I7II06\cdot IO^{-5}$	$-.I65446\cdot IO^{-5}$	$-.I62346\cdot IO^{-5}$	$-.I6I869\cdot IO^{-5}$	$-.I6I796\cdot IO^{-5}$	$-.I6I788\cdot IO^{-5}$
3.	$-.4I0I7I\cdot IO^{-6}$	$-.387794\cdot IO^{-6}$	$-.389432\cdot IO^{-6}$	$-.390300\cdot IO^{-6}$	$-.390434\cdot IO^{-6}$	$-.390455\cdot IO^{-6}$	$-.390457\cdot IO^{-6}$
4.	$.435320\cdot IO^{-6}$	$.4276I8\cdot IO^{-6}$	$.36I480\cdot IO^{-6}$	$.325267\cdot IO^{-6}$	$.3I9689\cdot IO^{-6}$	$.3I8830\cdot IO^{-6}$	$.3I8735\cdot IO^{-6}$
5.	$.624997\cdot IO^{-6}$	$.588640\cdot IO^{-6}$	$.502966\cdot IO^{-6}$	$.456398\cdot IO^{-6}$	$.448I26\cdot IO^{-6}$	$.448I26\cdot IO^{-6}$	$.448004\cdot IO^{-6}$
IO.	$.272425\cdot IO^{-5}$	$.273790\cdot IO^{-5}$	$.27I904\cdot IO^{-5}$	$.270878\cdot IO^{-5}$	$.270720\cdot IO^{-5}$	$.270696\cdot IO^{-5}$	$.270693\cdot IO^{-5}$
I5.	$.2687I3\cdot IO^{-5}$	$.270I06\cdot IO^{-5}$	$.269875\cdot IO^{-5}$	$.2697II\cdot IO^{-5}$	$.269688\cdot IO^{-5}$	$.269685\cdot IO^{-5}$	$.269684\cdot IO^{-5}$

Литература

1. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р5-12789, Дубна, 1979.
2. Ponomarev L.I. and Vinitsky S.I. Phys. B: Atom and Molec. Phys. 1979, 12, p.657.
3. Пономарев Л.И., Пузынин И.В. Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-6919, Дубна, 1973.
4. Виницкий С.И., Вукайлович Ф.Р., Пономарев Л.И. ОИЯИ, Р4-12018, Дубна, 1978.
5. Вулевич Б.Д., Кублановская В.Н. Зап.научн. семинаров Лен.отдел. мат. ин-та им. Стеклова АН СССР. 18, Наука, Л., 1970.
6. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р5-12788, Дубна, 1979.
7. Пузынин И.В., Пузынина Т.П.-В кн.: "Algorithms and Programs" KFKI-34, Budapest, 1974, p.93.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 сентября 1979 года.