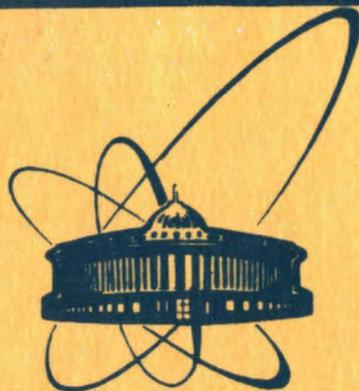


80-109



СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

2296 / 2-80

2/6-80

P5 -80-109

Д. Баатар, И. В. Пузынин

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ  
ОДНОЙ ДВУХПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ  
НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

1980

## I. Введение

Рассматривается алгоритм численного решения частичной двух-параметрической задачи на собственные значения для системы дифференциальных уравнений

$$\varphi_i(\lambda_1, \lambda_2, u_i(z)) \equiv \left[ \frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\lambda_1, \lambda_2, z) \right] u_i(z) = 0, \quad (1)$$
$$a_i < z < b_i; \quad i = 1, 2$$

с граничными условиями

$$\varphi_{ij}(\lambda_1, \lambda_2, u_i(z)) \equiv \left[ d_{ij}(\lambda_1, \lambda_2, z) \frac{d}{dz} + f_{ij}(\lambda_1, \lambda_2, z) \right] u_i(z) \Big|_{z=z_{ij}} = 0, \quad (2)$$
$$j = 1, 2; \quad z_{i1} = a_i, \quad z_{i2} = b_i.$$

В задаче (1)-(2)  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  - вещественные параметры, а  $Q_i(\lambda_1, \lambda_2, z)$ ,  $d_{ij}(\lambda_1, \lambda_2, z)$  и  $f_{ij}(\lambda_1, \lambda_2, z)$  - действительные функции, заданные на интервалах  $a_i < z < b_i$ ,  $-\infty < \lambda_i < \infty$ , причем в граничных точках  $z = z_{ij}$  функции  $d_{ij}$  и  $f_{ij}$  также определены и  $d_{ij}^2(\lambda_1, \lambda_2, z_{ij}) + f_{ij}^2(\lambda_1, \lambda_2, z_{ij}) > 0$ . Предполагается, что существуют такие значения  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ , которым соответствуют нетривиальные решения  $u_1(z)$  и  $u_2(z)$  задачи (1)-(2).

Задача (1)-(2) встречается в различных разделах теоретической /1/ и квантовой механики /2/-/4/. В работе /1/ приведены алгоритмы численного решения (1)-(2), являющиеся модификациями известного метода стрельбы (например, /5/ стр. 281). Следует отметить, что эти алгоритмы, как правило, неустойчивы в задачах квантовой механики, рассматриваемых на полуоси  $0 \leq z < \infty$ , в тех случаях, когда искомые решения системы (1) асимптотически неустойчивы при  $z \rightarrow \infty$ . В работе /6/, наряду с качественными исследованиями (1)-(2), дан алгоритм решения этой задачи, основанный на методе установления (например, /7/ стр. 429) и конечно-разностной аппроксимации (1)-(2). Однако при исследованиях и построении данного алгоритма существенно используется

предположение о линейной зависимости функций  $Q_i(\lambda_1, \lambda_2, z)$  от спектральных параметров  $\lambda_1, \lambda_2$ . В работе<sup>/4/</sup> для решения конечноразностной задачи, аппроксимирующей граничную задачу (I)-(2) в задаче двух кулоновских центров, применен метод Ньютона. На связь этого метода с методом обратных итераций (например, <sup>/5/</sup> стр.191), а также с ньютоновскими итерациями, использующими отношение Рэлея, указано в работах<sup>/8,9/</sup>. В работе<sup>/10/</sup> для решения разностной задачи, аппроксимирующей уравнение вида (I) с линейной зависимостью коэффициента  $Q_i$  от спектральных параметров  $\lambda_1, \lambda_2$  и трехточечными граничными условиями, предложена ньютоновская итерационная процедура, в которой последовательные приближения для  $\lambda_1, \lambda_2$  определяются с помощью обобщенных отношений Рэлея, минимизирующих на каждом итерационном шаге невязку по норме  $L_2$  для уравнения (I).

В данной работе предлагается алгоритм численного решения задачи (I)-(2) в более общей постановке. В качестве основы для разработки этого алгоритма выбран непрерывный аналог метода Ньютона<sup>/11/</sup>, успешно используемый при решении задач квантовой механики на связанные состояния<sup>/12/</sup> и рассеяния<sup>/13/</sup>. Развиваемый подход позволяет в ряде случаев строить итерационные схемы с расширенными областями сходимости и некоторыми дополнительными свойствами, например с минимально возможной на каждом шаге для данной схемы невязкой по норме  $C$ . Это достигается соответствующим выбором шага по непрерывному параметру  $t$ , использованием различных дополнительных условий нормировки собственных решений и модифицированных схем<sup>/8,9/</sup>. Численное исследование сходимости предложенной здесь вычислительной схемы выполнено для двухпараметрической задачи (I)-(2), содержащей короткодействующий потенциал Морзе и дальнедействующий потенциал Кулона.

## 2. Итерационная схема

Задача (I)-(2) доопределяется условиями нормировки собственных решений

$$S_i(\lambda_1, \lambda_2, u_i(z)) \equiv \int_{a_i}^{b_i} G_i(\lambda_1, \lambda_2, u_i(z)) dz = 0, \quad (3)$$

$$i = 1, 2,$$

где  $G_i$  - некоторая известная функция, и система (I)-(3) рассматривается как нелинейное уравнение

$$\varphi(z) = 0, \quad (4)$$

где  $z = (\lambda_1, \lambda_2, u_1(z), u_2(z))$ , а нелинейная функция  $\varphi$  задана совокупностью операторов, определенных левыми частями уравнений (I)-(3).

Для решения уравнения (4) при заданном начальном приближении

$$z^{(0)} = (\lambda_1^{(0)}, \lambda_2^{(0)}, u_1^{(0)}(z), u_2^{(0)}(z)) \quad (5)$$

к искомому решению  $z^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, u_1^*(z), u_2^*(z))$  применяется непрерывный аналог метода Ньютона. Итерационная схема получена с помощью метода Эйлера для решения эволюционного уравнения

$$\varphi'(z(t)) \frac{dz}{dt} = -\varphi(z(t)), \quad 0 \leq t < \infty, \quad (6)$$

с начальным условием (5) и состоит в следующем.

Пусть на шаге с номером  $k$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ) итерационного процесса известны приближения  $\lambda_{1k}, \lambda_{2k}$  к собственным значениям  $\lambda_1^*, \lambda_2^*$  и приближения  $u_{1k}(z), u_{2k}(z)$  к собственным функциям  $u_1^*(z), u_2^*(z)$ . Тогда для определения итерационных поправок

$$\Delta \lambda_{ik} = \mu_{ik}, \quad \Delta u_{ik}(z) = v_{ik}(z); \quad i = 1, 2, \quad (7)$$

необходимо решить систему, состоящую из двух дифференциальных уравнений

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, z) \right] v_{ik}(z) = \quad (8a)$$

$$= P_{0,k}(z) + \mu_{1k} P_{1,k}(z) + \mu_{2k} P_{2,k}(z)$$

с краевыми условиями

$$\left[ d_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, z) \frac{d}{dz} + f_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, z) \right] v_{ik}(z) \Big|_{z=z_{ij}} = c_{ij0,k} + \quad (8b)$$

$$+ \mu_{1k} c_{ij1,k} + \mu_{2k} c_{ij2,k}$$

и двух интегральных уравнений

$$\mu_{1k} \int_{a_1}^{b_1} \frac{\partial}{\partial \lambda_1} G_{1k}(z) dz + \mu_{2k} \int_{a_2}^{b_2} \frac{\partial}{\partial \lambda_2} G_{1k}(z) dz + \int_{a_i}^{b_i} \frac{\partial}{\partial u_i} G_{ik}(z) v_{ik}(z) dz = \quad (9)$$

$$= - \int_{a_i}^{b_i} G_{ik}(z) dz.$$

В этой системе функции

$$P_{i_0,k}(\tau) = - \left[ \frac{d^2}{d\tau^2} + Q_i(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \right] u_{ik}(\tau),$$

$$P_{i\ell,k}(\tau) = - \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} \left[ Q_i(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \right] u_{ik}(\tau), \quad \ell = 1, 2; \quad (10a)$$

$$G_{ik}(\tau) = G_i(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, u_{ik}(\tau))$$

и константы

$$C_{ij_0,k} = - \left[ d_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \frac{d}{d\tau} + f_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \right] u_{ik}(\tau) \Big|_{\tau=\tau_{ij}},$$

$$C_{ij\ell,k} = - \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} \left[ d_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \frac{d}{d\tau} + f_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \right] \right\} u_{ik}(\tau) \Big|_{\tau=\tau_{ij}}, \quad \ell = 1, 2, \quad (10b)$$

определены на каждом шаге.

Решение системы (8)-(9) можно осуществить следующим образом. Представим решение граничной задачи (8a)-(8b) в виде

$$\tilde{v}_{ik}(\tau) = \tilde{v}_{i_0,k}(\tau) + \mu_{1k} \tilde{v}_{i1,k}(\tau) + \mu_{2k} \tilde{v}_{i2,k}(\tau), \quad (11)$$

где функции  $\tilde{v}_{i\ell,k}(\tau)$  ( $\ell = 0, 1, 2; i = 1, 2$ ) являются решениями граничных задач

$$\left[ \frac{d^2}{d\tau^2} + Q_i(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \right] \tilde{v}_{i\ell,k}(\tau) = P_{i\ell,k}(\tau), \quad (12a)$$

$$\left[ d_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \frac{d}{d\tau} + f_{ij}(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \tau) \right] \tilde{v}_{i\ell,k}(\tau) \Big|_{\tau=\tau_{ij}} = C_{ij\ell,k}, \quad (12b)$$

а параметры  $\mu_{1k}, \mu_{2k}$  неизвестны.

Решив граничные задачи (12a)-(12b), можно определить двухпараметрическое семейство функций  $\tilde{v}_{ik}(\mu_{1k}, \mu_{2k}, \tau)$ , вид которого дан формулой (11). Заметим, что при  $\ell = 0$  можно выписать в явном виде решения граничной задачи (12)

$$\tilde{v}_{i_0,k}(\tau) = -u_{ik}(\tau), \quad (13)$$

поскольку  $\lambda_{ik} \neq \lambda_i^*$ . Неизвестные параметры  $\mu_{1k}, \mu_{2k}$  являются решением системы алгебраических уравнений

$$\mu_{ik} \int_{a_i}^{\tau_{ij}} \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda_i} G_{ik}(\tau) + \tilde{v}_{i\ell,k}(\tau) \frac{\partial}{\partial u_i} G_{ik}(\tau) \right] d\tau +$$

$$+ \mu_{2k} \int_{a_i}^{\tau_{ij}} \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda_2} G_{ik}(\tau) + \tilde{v}_{i2,k}(\tau) \frac{\partial}{\partial u_i} G_{ik}(\tau) \right] d\tau =$$

$$= - \int_{a_i}^{\tau_{ij}} \left[ G_{ik}(\tau) + \tilde{v}_{i_0,k}(\tau) \frac{\partial}{\partial u_i} G_{ik}(\tau) \right] d\tau, \quad i = 1, 2, \quad (14)$$

получающейся после подстановки правой части выражения (11) с найденными компонентами  $\tilde{v}_{i\ell,k}(\tau)$  в систему интегральных уравнений (9).

Таким образом, если на каждом шаге известны приближения  $\lambda_{ik}, u_{ik}(\tau)$  к искомому решению задачи (1)-(2)  $\lambda_i^*, u_i^*(\tau)$ , то итерационные поправки (7) можно определить, решив граничные задачи (12) и систему алгебраических уравнений (14).

Для перехода к следующему шагу итерационные поправки (7) согласно методу Эйлера [12, 13] аппроксимируются с помощью соотношений

$$\tau_k^{-1} (\lambda_{i,k+1} - \lambda_{i,k}) = \mu_{ik},$$

$$\tau_k^{-1} (u_{i,k+1}(\tau) - u_{i,k}(\tau)) = \tilde{v}_{ik}(\tau), \quad (15)$$

которые позволяют при заданном значении шага интегрирования  $\tau_k$  получить следующие приближения:  $\lambda_{i,k+1}$  и  $u_{i,k+1}(\tau)$ .

### 3. Модифицированная итерационная схема

Численное решение задач (12) в близкой окрестности искомым собственным значениям  $\lambda_1^*, \lambda_2^*$  может представить определенную сложность, особенно на ЭВМ с малой разрядностью машинного слова, поскольку эти задачи становятся плохо обусловленными [14]. Избегать решения таких задач можно за счет перехода к модифицированным итерационным схемам, которые можно получить при дискретном представлении по параметру  $t$  эволюционной задачи

$$\varphi'(\bar{z}(t)) \frac{d\bar{z}}{dt} = -\varphi(\bar{z}(t)), \quad 0 \leq t < \infty, \quad (16)$$

$$\bar{z}(0) = z^0, \quad (17)$$

где  $\bar{z}(t)$  - специально выбранная траектория. В этой траектории все или некоторые из компонент  $\lambda_1, \lambda_2, u_1, u_2$  задаются фиксированными, то есть не зависящими от параметра  $t$ . Заметим, что разработка итерационных схем этого класса может быть основана не

только на специальном выборе компонент траектории  $\bar{z}(t)$ , но и на модификации компонент (8)-(9) оператора  $\varphi'(z)$ .

В частности, если

$$\bar{z} = (\lambda_1^0, \lambda_2^0, u_1^0(z), u_2^0(z)), \quad (18)$$

то метод Эйлера решения задачи (16)-(17) при  $\tau_k \equiv 1$  приводит к модифицированному методу Ньютона-Канторовича<sup>/15/</sup> (стр.670), область сходимости которого можно расширить специальным выбором параметра  $\tau_k$ . В этой схеме для определения компонент  $\bar{v}_{i\ell,k}(z)$  итерационных поправок (II) необходимо решить граничные задачи

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + Q_i(\lambda_1^0, \lambda_2^0, z) \right] \bar{v}_{i\ell,k}(z) = \bar{P}_{i\ell,k}(z), \quad (19a)$$

$$\left[ d_{ij}(\lambda_1^0, \lambda_2^0, z) \frac{d}{dz} + f_{ij}(\lambda_1^0, \lambda_2^0, z) \right] \bar{v}_{i\ell,k}(z) \Big|_{z=z_{ij}} = \bar{C}_{ij\ell,k}, \quad (19b)$$

где  $\bar{P}_{i0,k}(z) = P_{i0,k}(z)$ ,

$$\bar{P}_{i\ell,k}(z) = -\frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} [Q_i(\lambda_1^0, \lambda_2^0, z)] u_i^0(z); \quad \ell = 1, 2, \quad (20a)$$

и  $\bar{C}_{ij0,k} = C_{ij0,k}$ ,

$$C_{ij\ell,k} = -\left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} [d_{ij}(\lambda_1^0, \lambda_2^0, z) \frac{d}{dz} + f_{ij}(\lambda_1^0, \lambda_2^0, z)] \right\} u_i^0(z). \quad (20b)$$

Таким образом, на каждом шаге итерационного процесса необходимо решать лишь одну граничную задачу (19) при  $\ell=0$ , которая не является плохо обусловленной, если  $\lambda_1^0$  и  $\lambda_2^0$  достаточно отличаются от искомым собственным числам  $\lambda_1^*$  и  $\lambda_2^*$ . Граничные задачи (19) при  $\ell=1, 2$  достаточно решить один раз, поскольку в процессе итераций они не меняются.

Для нахождения итерационных поправок  $\mu_{ik}$  и  $\mu_{zk}$  необходимо решить систему алгебраических уравнений (14) с постоянной в процессе итераций матрицей при неизвестных, поскольку в данном случае

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} G_{ik}(z) = \frac{\partial}{\partial \lambda_\ell} G_i(\lambda_1^0, \lambda_2^0, u_i^0(z)), \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial u_i} G_{ik}(z) = \frac{\partial}{\partial u_i} G_i(\lambda_1^0, \lambda_2^0, u_i^0(z)).$$

Переход к следующим приближениям осуществляется с помощью соотношений (15).

#### 4. Вычислительная схема

Численное решение граничных задач (12) и (19) в итерационных схемах находится с помощью метода конечных разностей. Применяется трехточечная разностная схема на равномерных сетках

$$\omega_{h_i} = \{z_n = a_i, \dots, z_n = a_i + h_i(n-1), \dots, z_{m_i} = b_i\}, \quad (22)$$

аппроксимирующая рассматриваемые задачи с точностью порядка  $O(h_i^2)$ . Для вычисления коэффициентов системы (14) применяются квадратурные формулы трапеций с узлами (22), имеющие этот же порядок точности. Как указано в<sup>/15/</sup> (стр.287), для рассматриваемых итерационных схем эффективной является комплексная организация расчета.

В том случае, когда сетки (22) сохраняются постоянными в ходе итераций, обсуждаемая вычислительная схема может быть получена применением итерационных схем, приведенных выше, к решению системы нелинейных алгебраических уравнений

$$\varphi_h(z_h) = 0, \quad (23)$$

аппроксимирующей функциональное уравнение (4). Можно показать, опираясь на общие теоремы о сходимости непрерывного аналога метода Ньютона<sup>/11/</sup>, что решение эволюционного уравнения

$$\varphi_h^*(z_h(t)) \frac{dz_h}{dt} = -\varphi_h(z_h(t)), \quad 0 \leq t < \infty \quad (24)$$

с начальным условием

$$z_h(0) = z_h^0 \quad (25)$$

сходится при  $t \rightarrow \infty$  к решению  $z_h^*$  разностной задачи (23), если начальное условие (25) принадлежит некоторой локальной окрестности этого решения и

$$\|z^* - z_h^*\| \leq Ch^2, \quad (26)$$

Выбор параметра  $\tau_k$  целесообразно связать с величиной невязки  $\delta_k$ ,

$$\delta_k = \|\varphi_h(z_{h,k})\|_C, \quad (27)$$

которая является характеристикой сходимости итерационного процесса. Различные алгоритмы вычисления  $\tau_k$  рассмотрены в работах<sup>/12,13/</sup>.

Сначала итерации выполняются по формулам (12)-(15). При выполнении условия

$$\delta_k \leq \varepsilon_1, \quad (28)$$

где  $\varepsilon_1$  - достаточно малое положительное число, полученные значения  $\lambda_{1k,k}$ ,  $\lambda_{2k,k}$ ,  $u_{1k,k}$  и  $u_{2k,k}$  берутся в качестве начальных и для задания элемента  $\bar{x}_k$  (18) в модифицированной итерационной схеме. Итерации по этой схеме продолжают до выполнения условия

$$\delta_k \leq \varepsilon, \quad (29)$$

где  $\varepsilon_1 \gg \varepsilon > 0$ . Параметры  $\varepsilon, \varepsilon_1$  подбираются в результате численных экспериментов.

### 5. Численный пример

Рассмотрим систему (I) с коэффициентами

$$Q_1(\lambda_1, \lambda_2, \tau) = \lambda_1 - \lambda_2 \left( e^{-\lambda_1(\tau-\tau_0)} - 2e^{-\lambda_2(\tau-\tau_0)} \right), \quad (30)$$

$$Q_2(\lambda_1, \lambda_2, \tau) = \lambda_1 - \frac{\rho(\rho+1)}{\tau^2} + \frac{\lambda_2}{\tau}, \quad (31)$$

первый из которых содержит потенциал Морзе, а второй - потенциал Кулона.

В случае, когда

$$\tau_0 = 2.15, \quad \rho = 1, \quad \alpha = 4/3,$$

система (I) с коэффициентами (30), (31) при

$$\lambda_1 = -1/9, \quad \lambda_2 = 1 \quad (32)$$

имеет ограниченные на полуоси  $0 \leq \tau < \infty$  решения

$$u_1^*(\tau) = \text{const} \cdot e^{-\lambda_1 \tau} \int_0^\tau \xi^{\rho-1} d\xi, \quad (33)$$

где  $\xi = \frac{\alpha \sqrt{\lambda_2}}{\alpha} e^{-\alpha(\tau-\tau_0)}$ ,  $\rho = \frac{\sqrt{-\lambda_1}}{\alpha}$  и

$$u_2^*(\tau) = \text{const} \cdot e^{-\sqrt{-\lambda_1} \tau} \tau^{\rho+1} \left(1 - \frac{\tau}{\rho}\right). \quad (34)$$

Рассматриваемая система представляет собой удобную модель для исследования свойств предложенной вычислительной схемы при решении задач квантовой механики.

Ограничимся рассмотрением отрезка  $0 \leq \tau \leq R$  и зададим в точках  $\tau=0$  и  $\tau=R$  граничные условия вида (2) с учетом глав-

Таблица I

$R=10, h=0.02$

K	$\lambda_{1k}$	$\lambda_{2k}$	$\delta_k$	$\tau_k$
0	-0,100000	1,100000	0,52E+02	0,050
I	-0,64285I	2,20289I	0,49E+02	0,050
5	-0,569466	2,069883	0,39E+02	0,063
10	-0,435597	1,814583	0,26E+02	0,091
15	-0,264077	1,446084	0,13E+02	0,167
20	-0,127462	1,053359	0,59E-01	1,000
21	-0,115454	1,013691	0,22E-01	1,000
22	-0,111437	1,001026	0,72E-02	1,000
23	-0,111025	0,999709	0,74E-03	1,000
24	-0,111021	0,999695	0,83E-05	1,000
25	-0,111021	0,999695	0,10E-08	1,000

ных членов асимптотики для выражений (33), (34). Условия нормировки (3) зададим в виде

$$\int_0^R u_i^2(\tau) d\tau - 1 = 0. \quad (35)$$

Поставленная таким образом задача была решена на ЭВМ СТС-6500 с помощью специальной подпрограммы, написанной на языке FORTRAN. В расчетах варьировались граница интервала  $R$ , шаг  $h$  разностной сетки, начальные условия итерационного процесса, способ выбора параметра  $\tau_k$ .

Некоторые типичные результаты приведены в таблицах. Наиболее широкая область начальных условий, при которых получена сходимость итераций, достигается при использовании алгоритма изменения  $\tau_k$  пропорционально изменению невязки  $^{1/2}$ . Отмечено, что при сравнительно хорошем задании начальных значений  $\lambda_1^0$  и  $\lambda_2^0$ , например,

$$\lambda_1^0 = -0,1, \quad \lambda_2^0 = 1,1, \quad (36)$$

начальные значения  $u_i^0(\tau)$  можно задать довольно грубо:

$$u_i^0(z) = \begin{cases} z \sin \frac{\pi n z}{z_{ac}} & , 0 \leq z \leq z_{ac} , \\ u_{i,ac}(z) & , z_{ac} \leq z \leq R , \end{cases} \quad (37)$$

где  $u_{i,ac}(z)$  - асимптотическое выражение для искомого решения, а параметр  $z_{ac}$  минимизирует начальное значение невязки. При таких начальных условиях получено  $\delta_0 \sim 50$ . Параметры  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$

Таблица 2

	Аналитические решения	Численные решения $R=10, h=0.01$
$\lambda_1$	- 0,111111	- 0,111089
$\lambda_2$	1,000000	0,999924
$z$	$u_1(z)$	$u_{1k}(z)$
0	3,710466E-06	3,703692E-06
1	4,375545E-02	4,375496E-02
2	4,052193E-01	4,052069E-01
3	5,700240E-01	5,700080E-01
4	4,879259E-01	4,879234E-01
5	3,663916E-01	3,664010E-01
6	2,657949E-01	2,658105E-01
7	1,910717E-01	1,910893E-01
8	1,370265E-01	1,370436E-01
9	9,820599E-02	9,822156E-02
$z$	$u_2(z)$	$u_{2k}(z)$
1	1,440933E-01	1,440908E-01
2	3,303917E-01	3,303988E-01
3	3,994921E-01	3,995219E-01
4	3,392576E-01	3,393114E-01
5	1,899131E-01	1,899924E-01
6	0,000000	7,247585E-05
7	-1,911091E-01	-1,910452E-01
8	-3,577096E-01	-3,576623E-01
9	-4,865888E-01	-4,865620E-01
10	3,913896E-05	4,399739E-09

определяющие переход на модифицированные итерации и их окончание, задавались в виде

$$\varepsilon_1 = 10^{-3}, \quad \varepsilon_2 = 10^{-2}$$

В таблице 1 показана сходимость последовательных приближений  $\lambda_{1k}, \lambda_{2k}$  к собственным значениям  $\lambda_{1h}^*, \lambda_{2h}^*$  разностной задачи, аппроксимирующей исходную на сетке узлов отрезка  $0 \leq z \leq R = 10$  с шагом  $h = 0.02$ . Интересно отметить, что на первой итерации происходит резкое изменение значений  $\lambda_{11}$  и  $\lambda_{21}$  по сравнению с начальными, что объясняется плохими начальными приближениями  $u_{ik}^0$  (37). Далее процесс монотонно сходится. Таким образом, при улучшении начальных приближений  $u_{ik}^0$  можно расширить область начальных приближений  $\lambda_{ik}^0$ .

В таблице 2 приведено сравнение аналитического решения (32)-(34) рассматриваемой задачи с численным. Видно, что при  $h = 0.01$  относительная погрешность для собственных значений и собственных функций в среднем имеет порядок  $10^{-4}$ . Таблица 3 содержит зависимость вычисленных при различных  $R$  и  $h$  значений  $\lambda_{ik}$  от величины  $h$ . Эта зависимость является квадратичной по  $h$ . Аналогичная зависимость сохраняется и для значений  $u_{ik}$ , что подтверждает оценку (26). Поэтому для уточнения численного решения можно успешно использовать экстраполяцию по Ричардсону<sup>[16]</sup> (стр.79).

Слабая зависимость значений  $\lambda_{ik}$  от величины  $R$  при фиксированном значении  $h$ , приведенная в таблице 4, свидетельствует о достаточно хорошей аппроксимации асимптотических условий для  $u_i(z)$  при  $z \rightarrow 0$  и  $z \rightarrow \infty$  граничными условиями на конечном интервале  $0 \leq z \leq R$ . Погрешность этого приближения не превосходит погрешности разностной аппроксимации.

Таблица 3

$R$	$h$	0,08	0,04	0,02	$\Delta_1$	$\Delta_2$	$\Delta_1/\Delta_2$
16	$\lambda_{1h}$	-0,109687	-0,110767	-0,111024	1080	258	4,19
	$\lambda_{2h}$	0,995170	0,998830	0,999705	3660	876	4,18
20	$\lambda_{1h}$	-0,109742	-0,110780	-0,111028	1038	248	4,19
	$\lambda_{2h}$	0,995335	0,998669	0,999715	3534	846	4,17

Таблица 4

$h_2$	$\lambda$ $\begin{matrix} R \\ \backslash \end{matrix}$	I0	I6	20
	0,02	$\lambda_{1h}$	-0,111021	-0,111024
$\lambda_{2h}$		0,999695	0,999705	0,999715

### 6. Заключение

Предложенный алгоритм решения задачи (1)-(2) можно легко обобщить на  $n$ -параметрические ( $n > 2$ ) задачи на собственные значения для систем уравнений, связанных лишь спектральными параметрами. Без существенных изменений он может быть применен также к решению  $n$ -параметрической задачи для одного уравнения второго порядка с  $(n+1)$  условиями на собственную функцию<sup>/1,6/</sup>.

Обоснование сходимости рассмотренных итерационных схем является предметом отдельной работы.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Fox L., et al. In "Topics in numerical analysis". Acad. Press, London - New York, 1973, p.93.
2. Dambury R.J., Kolosov V.V. J.Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1976,9, p.3149.
3. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферoidalные и кулоновские сферoidalные функции. Наука, М., 1976.
4. Cayford J.K. et al. J. Comput. Phys., 1974, 16, p.259.
5. Калиткин Н.Н. Численные методы. Наука, М., 1978.
6. Hargrave V.A., Sleeman B.D. J.Inst. Maths Applics., 1974, 14, p.9.
7. Бахвалов Н.С. Численные методы. Наука, М., 1975.
8. Виноцкий С.И., Пузынин И.В. ОИЯИ, P11-10802, Дубна, 1977.
9. Виноцкий С.И. и др. ОИЯИ, P4-10942, Дубна, 1977.
10. Blum E.K., Chang A.F. J. Inst. Maths Applics., 1978, 22, p.29.
11. Гавурин М.К. Изв. ВУЗов, Математика, 1958, 5,18.
12. Ponomarev L.I. et al. J. Comput. Phys., 1973, 13, p.1.
13. Ponomarev L.I. et al. Annals of Phys., 1978, 110, p.274.
14. Жидков Е.П. и др. ОИЯИ, P5-9512, Дубна, 1976.
15. Канторович Л.В., Акимов Г.П. Функциональный анализ. Наука, М., 1977.
16. Сальвадори М. Дж. Численные методы в технике. ИЛ, М., 1955.

Рукопись поступила в издательский отдел  
13 февраля 1980 года.