

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

4783 / 2-81

28/9-81

P5-81-444

Н. Ф. Трускова

ПОЛИСФЕРОИДАЛЬНЫЕ
ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

Направлено в "Журнал вычислительной математики
и математической физики"

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

Полисфероидальные периодические функции введены в работе /1/. Они возникают при решении уравнения Гельмгольца в системах координат N -мерных / $N \geq 4$ / эллипсоидов или гиперболоидов вращения и являются ограниченными при всех действительных z и периодическими с периодом π решениями уравнения

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2(\mu - \nu + (\nu + \mu + 1) \cos 2z)}{\sin 2z} \frac{\partial}{\partial z} - 2q \cos 2z + \lambda_{\nu, \mu}^{(\nu, \mu)}(q) \right] \text{ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q) = 0, \quad /1.1/$$

где величины ν, μ, q предполагаются действительными, а z может принимать как действительные, так и мнимые значения. При этом $\nu > -1, \mu \geq -1, n=0, 1, 2, \dots$

Функции $\text{ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$ являются целыми четными функциями переменной z , реальны, имеют по n нулей на интервале $0 < z < \frac{\pi}{2}$, не равны нулю в точках $z = \ell \frac{\pi}{2}$, где $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Эти функции образуют полную ортонормированную систему в классе квадратично-интегрируемых функций с весовым множителем $(\cos z)^{2\nu+1} (\sin z)^{2\mu+1}$ на интервале $[0, \frac{\pi}{2}]$ и удовлетворяют соотношению ортогональности

$$\int_0^{\pi/2} (\cos z)^{2\nu+1} (\sin z)^{2\mu+1} \text{ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q) \text{ps}_m^{(\nu, \mu)}(z, q) dz = \delta_{nm} \quad /1.2/$$

Аналитическое продолжение $\text{ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$ в область чисто мнимых значений z обозначается через $\text{Ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$ и называется модифицированной полисфероидальной периодической функцией.

$$\text{Ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q) = \text{ps}_n^{(\nu, \mu)}(iz, q) \quad /1.3/$$

Для таких функций справедливо соотношение ортогональности

$$\int_0^{\infty} (\text{ch} z)^{2\nu+1} (\text{sh} z)^{2\mu+1} \text{Ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q) \text{Ps}_m^{(\nu, \mu)}(z, q) dz = 0, \quad n \neq m \quad /1.4/$$

При частных значениях параметров $\text{ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q), \text{Ps}_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$ выражаются через известные специальные функции. В случае $\nu = \pm 1/2, \mu = \pm 1/2$ - через функции Маттье /2-4/, в случае $\nu = \pm 1/2$

или $\mu = \pm 1/2$ - через сфероидальные функции ^{/2,4-9/}, в случае $\mu = 0$ - через гиперсфероидальные /или обобщенные сфероидальные/ функции ^{/10-13/}, в случае $\mu = 1$, $\lambda_n^{(\nu,1)}(q) = -4(\nu+1) + 2q$ - через функции Бесселя ^{/4/}, в случае $q=0$ - через полиномы Якоби ^{/4/}, в случае $\nu = \mu = m = 0, 1, 2, \dots$ - через угловую и радиальную волновые функции водородоподобного атома с энергией $E=0$ в сфероидальной системе координат ^{/1/}. Более подробно основные свойства, частные случаи и физические приложения функций $ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$, $Ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$ рассмотрены в работе ^{/1/}. Асимптотическое поведение $ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$, $Ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$, $\lambda_n^{(\nu,\mu)}(q)$ при $q \rightarrow 0$ и $q \rightarrow \infty$ исследовано в ^{/14/}.

В данной работе изложен алгоритм вычисления на ЭВМ функций $ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$, $Ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$, их собственных значений $\lambda_n^{(\nu,\mu)}(q)$ и производных $\frac{\partial}{\partial q} \lambda_n^{(\nu,\mu)}(q)$ при различных значениях параметров $-1 < \nu, \mu < \infty$, $0 < q^2 < \infty$, $|z| < \infty$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Функции $ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$, $Ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q)$ вычисляются с помощью разложений по полиномам Якоби и функциям Бесселя. Собственные значения $\lambda_n^{(\nu,\mu)}(q)$ находятся посредством минимизации соответствующих этим разложениям n раз обернутых цепных дробей, а производные $\frac{\partial}{\partial q} \lambda_n^{(\nu,\mu)}(q)$ - аналитическим дифференцированием таких дробей. Во избежание больших промежуточных чисел и вычислительных погрешностей применяется основное тождественное преобразование цепных дробей, а их вычисление производится рекуррентным образом, что позволяет получать искомые цепные дроби с любой заданной точностью ϵ' . Результаты вычислений с помощью развитого алгоритма приведены в виде графиков.

2. АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЙ

В работе ^{/1/} получены следующие разложения:

$$ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q) = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\nu,\mu)} P_r^{(\nu,\mu)}(-\cos 2z) = \quad /2.1/$$

$$= \frac{\kappa_n^{(\nu,\mu)}(q)}{ps_n^{(\nu,\mu)}(0, q) (c \cdot \cos z)^{\nu+\mu+1}} \times$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} B_{r,n}^{(\nu,\mu)} J_{\nu+\mu+2r+1}(c \cdot \cos z),$$

$$Ps_n^{(\nu,\mu)}(z, q) =$$

$$= \frac{\kappa_n^{(\nu,\mu)}(q)}{ps_n^{(\nu,\mu)}(0, q) (c \cdot \operatorname{ch} z)^{\nu+\mu+1}} \cdot \sum_{r=0}^{\infty} B_{r,n}^{(\nu,\mu)} J_{\nu+\mu+2r+1}(c \cdot \operatorname{ch} z). \quad /2.2/$$

Здесь

$$c = 2\sqrt{q}, \quad A_{r,n}^{(\nu,\mu)} = A_{r,n}^{(\nu,\mu)}(q), \quad B_{r,n}^{(\nu,\mu)} = (-1)^r A_{r,n}^{(\nu,\mu)} \frac{\Gamma(r+\mu+1)}{r! \Gamma(\mu+1)},$$

$$\kappa_n^{(\nu,\mu)}(q) = \frac{ps_n^{(\nu,\mu)}(0, q) \cdot ps_n^{(\nu,\mu)}(\pi/2, q) \cdot 2^{\nu+\mu+1} \cdot \Gamma(\nu+\mu+2)}{A_{0,n}^{(\nu,\mu)}}$$

$P_r^{(\nu,\mu)}(-\cos 2z)$ - полиномы Якоби, $J_{\nu+\mu+2r+1}(c \cdot \cos z)$ - функции Бесселя первого рода, $\nu > -1$, $\mu > -1$, $q > 0$, $z^2 > 0$.

Коэффициенты $A_{r,n}^{(\nu,\mu)}$ удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$\alpha_r A_{r+1,n}^{(\nu,\mu)} + \beta_r A_{r,n}^{(\nu,\mu)} + \gamma_r A_{r-1,n}^{(\nu,\mu)} = 0, \quad A_{-1,n}^{(\nu,\mu)} = 0; \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad /2.3/$$

где

$$\alpha_r = -\frac{4q(r+\nu+1)(r+\mu+1)}{(2r+\nu+\mu+2)(2r+\nu+\mu+3)}, \quad r = 0, 1, 2, \dots$$

$$\beta_0 = \lambda_n^{(\nu,\mu)}(q) - \frac{2q(\nu-\mu)}{(\nu+\mu+2)},$$

$$\beta_r = \lambda_n^{(\nu,\mu)}(q) - 4r(r+\nu+\mu+1) - \frac{2q(\nu^2 - \mu^2)}{(\nu+\mu+2r)(\nu+\mu+2r+2)}, \quad r = 1, 2, \dots,$$

$$\gamma_0 = 0, \quad \gamma_1 = -\frac{4q}{(\nu+\mu+2)}, \quad \gamma_r = -\frac{4qr(r+\nu+\mu)}{(2r+\nu+\mu)(2r+\nu+\mu-1)}, \quad r = 2, 3, \dots,$$

а также соотношению

$$\sum_{r=0}^{\infty} (A_{r,n}^{(\nu,\mu)})^2 \frac{\Gamma(\nu+r+1) \Gamma(\mu+r+1)}{2(r!) \Gamma(\nu+\mu+r+1) \cdot (\nu+\mu+2r+1)} = 1, \quad /2.4/$$

которое следует из /1.2/ при $n=m$.

Знак $A_{r,n}^{(\nu,\mu)}$ выбран так, что $(-1)^n ps_n^{(\nu,\mu)}(\pi/2, q) > 0$, т.е.

$$(-1)^n A_{n,n}^{(\nu, \mu)} > 0. \quad /2.5/$$

Разложения /2.1/-/2.2/ сходятся при всех $q > 0$. В случае замены $q \rightarrow -q$ имеем /1/

$$\lambda_n^{(\nu, \mu)}(-q) = \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q), \quad /2.6/$$

$$ps_n^{(\nu, \mu)}(z, -q) = (-1)^n ps_n^{(\mu, \nu)}(-z + \frac{\pi}{2}, q) = (-1)^n \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\mu, \nu)} P_r^{(\mu, \nu)}(\cos 2z) =$$

$$= \frac{(-1)^n \kappa_n^{(\mu, \nu)}(q)}{ps_n^{(\mu, \nu)}(0, q) (c \cdot \sin z)^{\nu + \mu + 1}} \sum_{r=0}^{\infty} B_{r,n}^{(\mu, \nu)} J_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \cdot \sin z), \quad /2.7/$$

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, -q) = ps_n^{(\nu, \mu)}(iz, -q) =$$

$$= \frac{(-1)^n \kappa_n^{(\mu, \nu)}(q)}{ps_n^{(\mu, \nu)}(0, q) \cdot (c \cdot \operatorname{sh} z)^{\nu + \mu + 1}} \cdot \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r B_{r,n}^{(\mu, \nu)} I_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \cdot \operatorname{sh} z), \quad /2.8/$$

где $I_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \cdot \operatorname{sh} z)$ - функция Бесселя мнимого аргумента.

Если $z \rightarrow \infty$, то из разложений /2.2/, /2.8/ и асимптотических формул для функций Бесселя /4/ получаем /1/

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q) \underset{z \rightarrow \infty}{=} \frac{\kappa_n^{(\nu, \mu)}(q)}{y^{\nu + \mu + 3/2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \cos(y - (\nu + \mu + 1)\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}), \quad /2.9/$$

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, -q) \underset{z \rightarrow \infty}{=} \frac{(-1)^n \kappa_n^{(\mu, \nu)}(q)}{y^{\nu + \mu + 3/2} \sqrt{2\pi}} \cdot \exp(y). \quad /2.10/$$

Здесь $y = \sqrt{q} \exp(z)$, $q > 0$.

Для нахождения собственных значений $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ /или $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(-q)$ /, при которых ряды /2.1/-/2.2/ /или /2.7/-/2.8// сходятся, введем

$$M_r = -(A_{r,n}^{(\nu, \mu)} / A_{r-1,n}^{(\nu, \mu)}) a_{r-1}, \quad r = 1, 2, \dots$$

С учетом /2.3/ имеем

$$M_{n+1} = a_n \gamma_{n+1} / (\beta_{n+1} - M_{n+2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad /2.11a/$$

$$M_{n+1} = \beta_n - \begin{cases} 0, & \text{если } n = 0, \\ \frac{\gamma_n a_{n-1}}{M_n}, & \text{если } n = 1, 2, \dots \end{cases} \quad /2.11b/$$

Вычитая /2.11b/ из /2.11a/, получаем

$$U = -\beta_n + \frac{a_n \gamma_{n-1}}{\beta_{n+1} - \frac{a_{n+1} \gamma_{n+2}}{\beta_{n+2} - \frac{a_{n+2} \gamma_{n+3}}{\dots}}} + \dots = 0. \quad /2.12/$$

Величина U представляет собой n раз обернутую цепную дробь. Сходимость этой дроби доказана в работе /1/.

Необходимые значения $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$, удовлетворяющие уравнению /2.12/, найдем, минимизируя функционал

$$F(\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q), q) = |U| \quad /2.13/$$

методом линеаризации /15/. Требуемые при этом начальные приближения для $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ при малых $q < 1$ полагаем равными асимптотическим значениям $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ при $q \rightarrow 0$ /14/:

$$\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q) \underset{q \rightarrow 0}{=} d_0^n + d_1^n q + d_2^n q^2, \quad /2.14/$$

где

$$d_0^n = 4n(n + \nu + \mu + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$d_1^0 = \frac{2(\nu - \mu)}{(\nu + \mu + 2)}, \quad d_1^n = \frac{2(\nu^2 - \mu^2)}{(\nu + \mu + 2n)(\nu + \mu + 2n + 2)}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

$$d_2^0 = -D_1, \quad d_2^n = D_n - D_{n+1},$$

$$D_n = \frac{4n(n + \nu + \mu)(n + \nu)(n + \mu)}{(2n + \nu + \mu)^3 ((2n + \nu + \mu)^2 - 1)}, \quad n = 1, 2, \dots$$

При всех последующих $q = q_i > q_{i-1} > q_{i-2}$ в качестве начального приближения для $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ используем величины

$$\lambda_0(q_i) = \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q_{i-1}) + \frac{\partial \lambda}{\partial q|_{q_{i-1}}} \cdot (q_i - q_{i-1}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \lambda}{\partial q|_{q_{i-1}}} - \frac{\partial \lambda}{\partial q|_{q_{i-2}}} \right) \cdot (q_i - q_{i-1})^2 \cdot \frac{1}{(q_i - q_{i-2})}$$

Здесь $\frac{\partial \lambda}{\partial q} = \frac{\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)}{\partial q}$.

Приращение $\Delta \lambda_j$ для каждой j -й итерации вычисляем по формуле

$$\Delta \lambda_j = - \left(U / \frac{\partial U}{\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}} \right) \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q) = \lambda_{j-1} \quad /2.15/$$

Для первой итерации функционал /2.13/ и приращение /2.15/ вычисляем в точке $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q) = \lambda_0(q)$, а для $(j+1)$ -й - в точке $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q) = \lambda_j(q)$, где

$$\lambda_j(q) = \lambda_{j-1}(q) + \Delta \lambda_j, \quad j = 1, 2, \dots \quad /2.16/$$

Далее процесс итерирования продолжается до тех пор, пока не будут удовлетворяться условия

$$F(\lambda_j, q) \leq F(\lambda_{j-1}, q), \quad |\Delta \lambda_j| \leq \epsilon |\lambda_j| \quad /2.17/$$

Здесь ϵ - требуемая относительная точность вычисления $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$.

Сходимость такого итерационного процесса зависит от величины шага $\Delta q = q_i - q_{i-1}$. Если этот шаг выбран слишком большим, то при некотором j может быть

$$F(\lambda_j, q) > F(\lambda_{j-1}, q) \quad /2.18/$$

и процесс не сойдется. В этом случае автоматическое уменьшение Δq до $\Delta q' = \Delta q \cdot k$, где $k = 2, 3, \dots$, приводит к достижению необходимой сходимости.

Во избежание больших промежуточных чисел и ошибок округления при вычислении цепной дроби /2.12/ преобразуем ее к виду

$$U = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \dots}}} = 0, \quad /2.19/$$

где

$$b_0 = -\beta_n + \frac{\gamma_n \alpha_{n-1}}{\beta_{n-1} - \frac{\gamma_{n-1} \alpha_{n-2}}{\beta_{n-2} - \frac{\gamma_{n-2} \alpha_{n-3}}{\dots - \frac{\gamma_1 \alpha_0}{\beta_0}}}}$$

$$a_1 = \frac{\alpha_n \gamma_{n+1}}{\delta_{n+1}}, \quad b_1 = \frac{\beta_{n+1}}{\delta_{n+1}},$$

$$a_r = -\frac{\alpha_{n+r-1} \gamma_{n+r}}{\delta_{n+r} \delta_{n+r-1}}, \quad b_r = \frac{\beta_{n+r}}{\delta_{n+r}}, \quad r = 2, 3, \dots$$

$$\delta_{n+r} = 4(n+r+2)(n+r+\nu+\mu+3).$$

Введение множителя δ_{n+r} в /2.19/ не меняет величины U и соответствует основному тождественному преобразованию этой цепной дроби /16-17/.

Согласно общей теории /16,17/

$$U = \lim_{k \rightarrow \infty} U_k, \quad /2.20/$$

где U_k - подходящая дробь цепной дроби /2.19/.

$$U_k = A_k / B_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad /2.21/$$

$$A_{-1} = 1, \quad A_0 = b_0, \quad A_k = b_k A_{k-1} + a_k A_{k-2}, \quad /2.22a/$$

$$B_{-1} = 0, \quad B_0 = 1, \quad B_k = b_k B_{k-1} + a_k B_{k-2}, \quad k = 1, 2, \dots \quad /2.22b/$$

Введем

$$v_k^{(i)} = -w_k^{(i)} / w_{k-1}^{(i)}, \quad i = 1, 2; \quad w_k^{(1)} = A_k, \quad w_k^{(2)} = B_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

Используя /2.22/, имеем

$$v_k^{(i)} - a_k / v_{k-1}^{(i)} = -b_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad /2.23/$$

Если $k \rightarrow \infty$, то

$$v_k^{(i)} + q^2 / (16k^4 v_{k-1}^{(i)}) \rightarrow 1. \quad /2.24/$$

Следовательно, одно из решений уравнения /2.23/ при $k \rightarrow \infty$ стремится к нулю, другое - к единице. Так как U - сходящаяся цепная дробь, то минимальное решение соответствует $v_k^{(1)}$, а максимальное - $v_k^{(2)}$. Таким образом, из /2.24/ имеем

$$|A_{k+1}/A_k| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} q^2/16k^4, \quad |B_{k+1}/B_k| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 1. \quad /2.25/$$

С учетом этих асимптотик в соответствии с /18/ получаем, что вычисление A_k с помощью уравнения /2.22а/, примененного в прямом направлении, связано с огромными вычислительными погрешностями. Напротив, вычисление B_k методом прямой рекурсии из уравнения /2.22б/ эффективно и при $k \rightarrow \infty$ к увеличению вычислительных погрешностей не приводит.

При практическом вычислении U_k на ЭВМ используем рекуррентную формулу /16,17/

$$U_k = U_{k-1} + (-1)^{k-1} \frac{a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_k}{B_{k-1} B_k}, \quad k = 1, 2, \dots; \quad U_0 = b_0. \quad /2.26/$$

Вычисляем последовательно в прямом направлении все B_k с помощью /2.22б/ и все U_k с помощью /2.26/, начиная с $k=0$ и до такого $k=k'$, при котором

$$|U_k - U_{k-1}| \leq \epsilon' |U_k|. \quad /2.27/$$

Здесь ϵ' - требуемая относительная точность вычисления цепной дроби U .

Производные $\partial U / \partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$, $\partial U / \partial q$ при всех ν, μ, n, q находим с помощью аналитического дифференцирования соотношений /2.20/, /2.22б/, /2.26/, а производную $\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q) / \partial q$ - по формуле

$$\frac{\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)}{\partial q} = - \left(\frac{\partial U}{\partial q} \right) / \left(\frac{\partial U}{\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}} \right).$$

Такой способ вычисления цепной дроби U аналогичен алгоритму 2, изложенному в /19/ и примененному в /20/ при вычислении соответствующих цепных дробей в теории сфероидальных функций. Он легко реализуем на ЭВМ и позволяет получать искомую величину U с любой наперед заданной относительной точностью ϵ' . Используемая здесь в отличие от /19,20/ рекуррентная формула /2.26/ удобна при вычислении U_k и особенно при вычислении $\partial U_k / \partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}$, $\partial U_k / \partial q$, так как

$$a_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0, \quad \frac{\partial a_k}{\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}} = 0, \quad \frac{\partial a_k}{\partial q} = \frac{2}{q} a_k, \quad k = 1, 2, \dots,$$

$$B_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \text{const} \neq \infty.$$

Найдя собственные значения $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$, вычисляем коэффициенты $A_{r,n}^{(\nu, \mu)}(q)$, которые соответствуют минимальному сходящемуся при $r \rightarrow \infty$ решению конечно-разностного уравнения /2.3/.

При $r=n$ это уравнение имеет особенность. Если $q \rightarrow 0$, то /1/

$$|A_{r,n}^{(\nu, \mu)}(q)| \rightarrow 0, \quad r \neq n; \quad |A_{n,n}^{(\nu, \mu)}(q)| \rightarrow \left(\frac{2(n!) (\nu + \mu + 2n + 1) \Gamma(\nu + \mu + n + 1)}{\Gamma(\nu + n + 1) \Gamma(\mu + n + 1)} \right)^{1/2}. \quad /2.28/$$

Так как при $r \rightarrow \infty$ /1/

$$v_r = |A_{r+1,n}^{(\nu, \mu)}(q) / A_{r,n}^{(\nu, \mu)}(q)| \rightarrow q/4r^2, \quad /2.29/$$

то согласно /18/ вычисление $A_{r,n}^{(\nu, \mu)}$ методом прямой рекурсии из /2.3/ при $r > n$ приводит к большим вычислительным погрешностям. Поэтому, применяя уравнение /2.3/ в прямом направлении, вычисляем сначала лишь отношения v_0, v_1, \dots, v_n . Затем, полагая $v_{r+1} = 0$ и используя /2.3/ в обратном направлении, вычисляем все $v_r, v_{r-1}, \dots, v_{n+1}$, начиная с некоторого достаточно большого $r = r'$. Подставляем найденные величины $v_0, v_1, \dots, v_{r'}$ в /2.4/ и с учетом /2.5/ получаем $A_{0,n}^{(\nu, \mu)}, A_{1,n}^{(\nu, \mu)}, \dots, A_{r,n}^{(\nu, \mu)}$.

Выбор числа r' зависит от требуемой относительной точности вычисления коэффициентов $A_{0,n}^{(\nu, \mu)}, \dots, A_{r,n}^{(\nu, \mu)}$ и функций $ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$,

$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$. Если эта точность не хуже, чем точность вычисления $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$, то $r' > k' + n$. Численные эксперименты показывают, что вследствие /2.29/ для достижения относительной точности вычисления $A_{0,n}^{(\nu, \mu)}, \dots, A_{r,n}^{(\nu, \mu)}, \dots, A_{n+\ell}^{(\nu, \mu)}$ не хуже чем 10^{-12} достаточно выбрать $r' = n + \ell + 10$.

Функции $ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q)$, $Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q)$ вычисляем, суммируя с необходимой точностью ряды /2.1/-/2.2/, /2.7/-/2.8/. Функции Бесселя при этом вычисляем согласно алгоритму Дж.И.П.Миллера /21/, а полиномы Якоби - по формуле /4/

$$P_r^{(\nu, \mu)}(x) = 2^{-r} \sum_{\ell=0}^r \binom{r+\nu}{\ell} \binom{r+\mu}{r-\ell} (x-1)^{r-\ell} (x+1)^\ell, \quad r=0,1,2,\dots \quad /2.30/$$

$$\text{где } \binom{p}{\ell} = \frac{\Gamma(p+1)}{\ell! \Gamma(p-\ell+1)}.$$

Заметим, что для вычисления функций $Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q)$ полезно применять также разложение /1/

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q) = \frac{\kappa_n^{(\nu, \mu)}(q)}{ps_n^{(\nu, \mu)}(\pi/2, q) \cdot (c \operatorname{sh} z)^{\nu + \mu + 1}} \times$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} A_{r,n}^{(\nu, \mu)} \frac{\Gamma(r+\nu+1)}{r! \Gamma(\nu+1)} J_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \operatorname{sh} z) \quad /2.31/$$

и разложение

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q) = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\nu, \mu)} P_r^{(\nu, \mu)}(-ch2z), \quad /2.32/$$

которое можно получить из /2.1/ с помощью замены $z \rightarrow iz$.

Функция $P_r^{(\nu, \mu)}(-ch2z)$ представляет собой аналитическое продолжение полинома /2.30/ в область $x = -ch2z < 1$. Из /2.29/ и /2.30/ следует, что при $r \rightarrow \infty$

$$\left| \frac{A_{r+1,n}^{(\nu, \mu)}}{A_{r,n}^{(\nu, \mu)}} \cdot \frac{P_{r+1}^{(\nu, \mu)}(-ch2z)}{P_r^{(\nu, \mu)}(-ch2z)} \right| \rightarrow \frac{|q| \cdot e^{2|z|}}{4r^2}.$$

Таким образом, ряд /2.32/ абсолютно сходится при любых конечных $|q|, |z|$.

Аналогично, заменяя z на iz в /2.7/, получаем ряд

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, -q) = (-1)^n \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\mu, \nu)} P_r^{(\mu, \nu)}(ch2z), \quad /2.33/$$

который, как и /2.32/, абсолютно сходится в области $|z| < \infty, |q| < \infty$.

Полагая $z = iz$ в /2.31/, получаем

$$ps_n^{(\nu, \mu)}(z, q) = \frac{\kappa_n^{(\nu, \mu)}(q)}{ps_n^{(\nu, \mu)}(\pi/2, q) \cdot (c \cdot \sin z)^{\nu + \mu + 1}} \times$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\nu, \mu)} \frac{\Gamma(r + \nu + 1)}{r! \Gamma(\nu + 1)} I_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \cdot \sin z). \quad /2.34/$$

Замена $q \rightarrow -q$ в /2.31/, /2.34/ с учетом /2.7/-/2.8/ дает

$$Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, -q) = \frac{(-1)^n \kappa_n^{(\nu, \mu)}(q)}{ps_n^{(\mu, \nu)}(\pi/2, q) (c \cdot ch z)^{\nu + \mu + 1}} \times$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\mu, \nu)} \frac{\Gamma(r + \mu + 1)}{r! \Gamma(\mu + 1)} I_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \cdot ch z), \quad /2.35/$$

$$ps_n^{(\nu, \mu)}(z, -q) = \frac{(-1)^n \kappa_n^{(\mu, \nu)}(q)}{ps_n^{(\mu, \nu)}(\pi/2, q) (c \cdot \cos z)^{\nu + \mu + 1}} \times$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r A_{r,n}^{(\mu, \nu)} \frac{\Gamma(r + \mu + 1)}{r! \Gamma(\mu + 1)} I_{\nu + \mu + 2r + 1}(c \cdot \cos z). \quad /2.36/$$

Разложения /2.31/, /2.34/-/2.36/ абсолютно сходятся при всех конечных $|q|, |z|$, так как

$$\left| \frac{A_{r+1,n}^{(\nu, \mu)}}{A_{r,n}^{(\nu, \mu)}} \cdot \frac{(r + \nu + 1)}{(r + 1)} \cdot \frac{J_{\nu + \mu + 2r + 3}(y)}{J_{\nu + \mu + 2r + 1}(y)} \right| \rightarrow \frac{|q|}{4r^2} \cdot \frac{|y|^2}{16r^2}.$$

Вследствие быстрой сходимости эти разложения применимы при численных расчетах в широкой области $|q| < \infty, |z| < \infty$.

Применение /2.32/-/2.33/ при вычислении $Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q)$ полезно в случае $0 \leq |q| \leq 20, chz \leq 10$. Если $|q| > 20, chz > 10$, то для получения $Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q)$ с относительной точностью $\epsilon = 10^{-8} \pm 10^{-12}$ требуется довольно значительное число членов этих разложений ($r > 70$).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложенный алгоритм реализован в виде программы на языке фортран /CDC-6500/. Функции $ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q), Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q)$, их собственные значения $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(\pm q)$ и производные $\partial \lambda_n^{(\nu, \mu)}(q) / \partial q$ вычисляются с заданной относительной точностью $\epsilon = 10^{-8} \div 10^{-12}$ при различных значениях параметров $-1 < \nu, \mu < \infty, |q| < \infty, |z| < \infty, n = 0, 1, 2, \dots$ Часть полученных таким способом результатов представлена на рис. 1-8.

Как показывает опыт вычислений, используемый способ минимизации в случае $\Delta q = 0, 1 \div 0, 2$ требует 2 ÷ 3 итерации для получения собственных значений $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ с относительной точностью $\epsilon = 10^{-12}$ и 1 ÷ 2 итерации - с $\epsilon = 10^{-8}$.

Число k' , равное числу звеньев цепной дроби /2.19/, необходимых для ее вычисления с требуемой относительной точностью ϵ' , при данных ν, μ, n, ϵ' увеличивается с увеличением q . Например, при $\nu = 1, \mu = 3, n = 1, \epsilon' = 10^{-14}$ число k' изменяется от 5 до 12 при изменении q от 0,4 до 14 и далее увеличивается до 17 при увеличении q до 50. Практически в большинстве случаев k' , как правило, не превышает 20 при $\epsilon' = 10^{-8} \div 10^{-14}$.

Сравнение численных результатов с соответствующими величинами, полученными с помощью асимптотических формул работы /14/, показывает, что нет необходимости вычислять на ЭВМ $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(\pm q), ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q), Ps_n^{(\nu, \mu)}(z, \pm q)$ при слишком малых или слишком больших q . Например, значения $\lambda_0^{(\nu, \mu)}(q)$, вычисленные по асимптотическим формулам /14/ с точностью до $O(q^5)$, совпадают с соответствующими значениями, полученными при $\epsilon = 10^{-12}$ на ЭВМ, в случае $q = 0,01$ с точностью до 9 знаков, в случае $q = 0,25$ с точностью до 5 знаков, в случае $q = 0,5$ с точностью до 3 ÷ 4 знаков. С увеличением n при данном q точность этих асимптотик значительно улучшается.

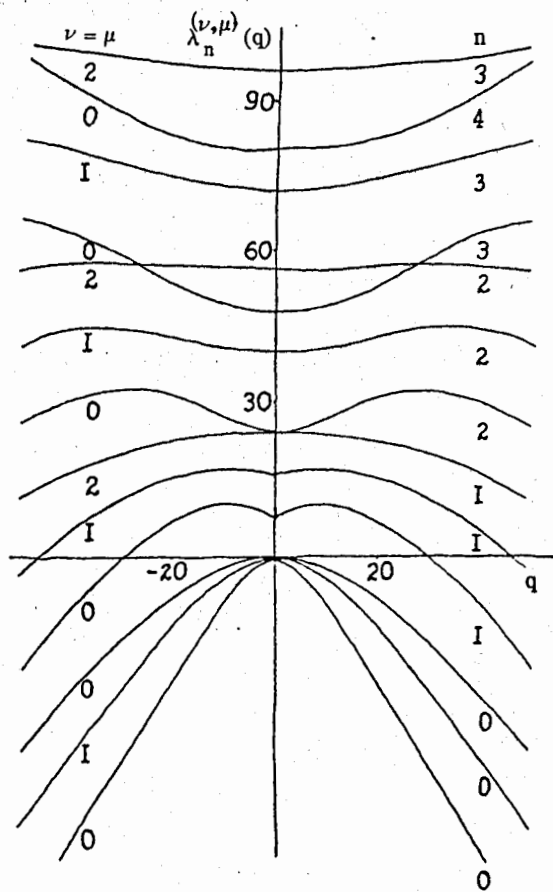


Рис. 1

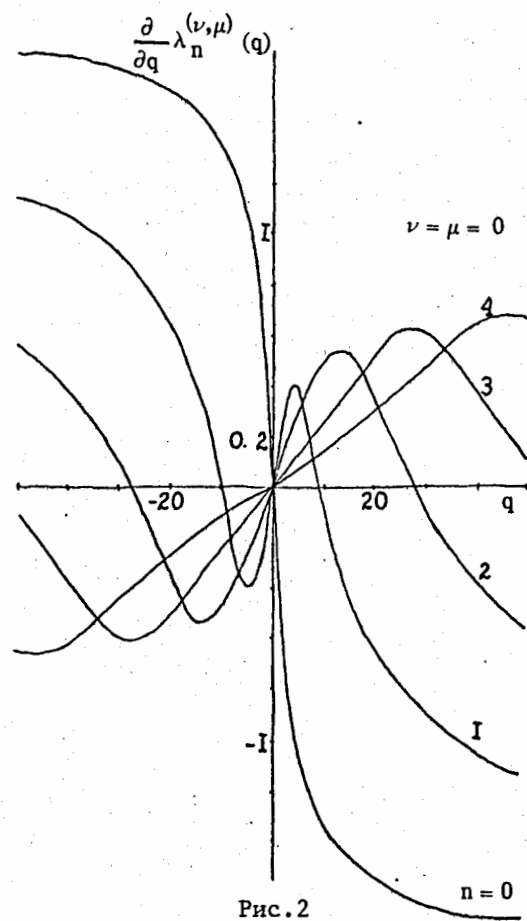


Рис. 2

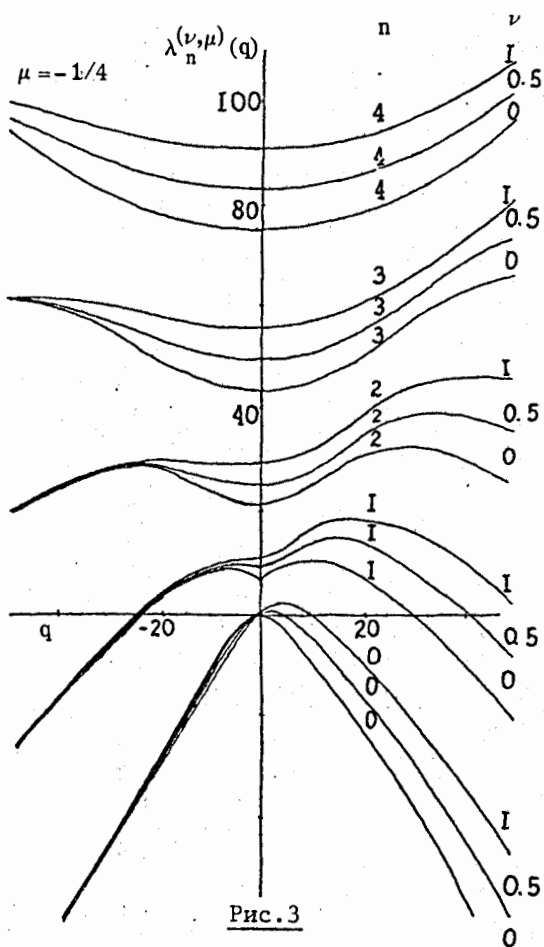


Рис. 3

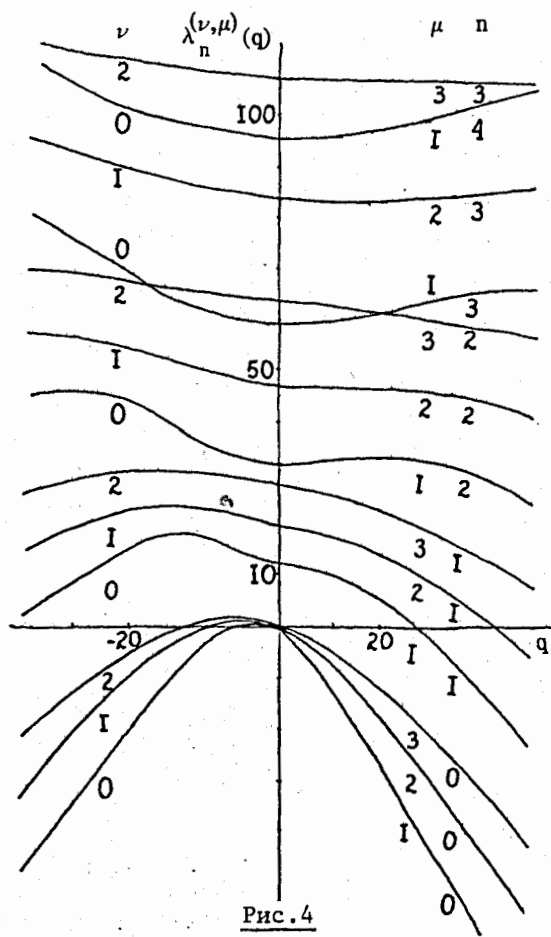


Рис. 4

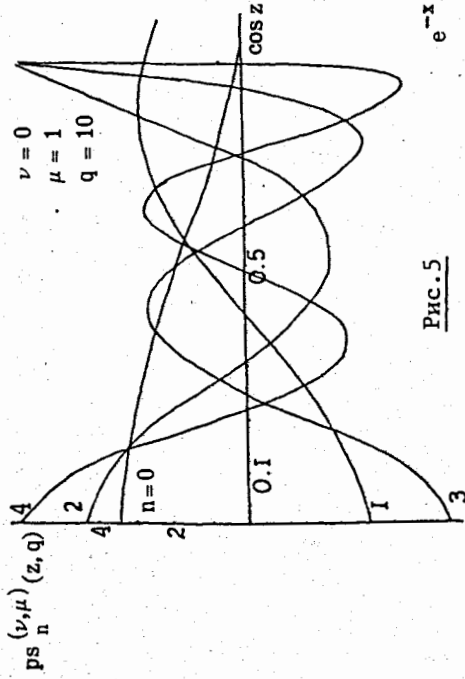


Рис. 5

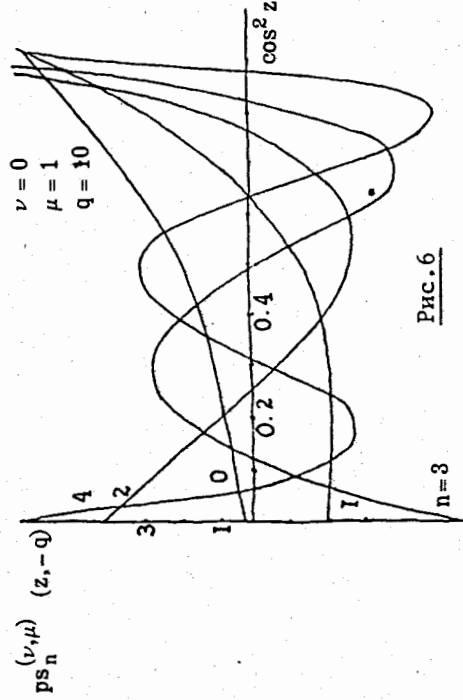


Рис. 6

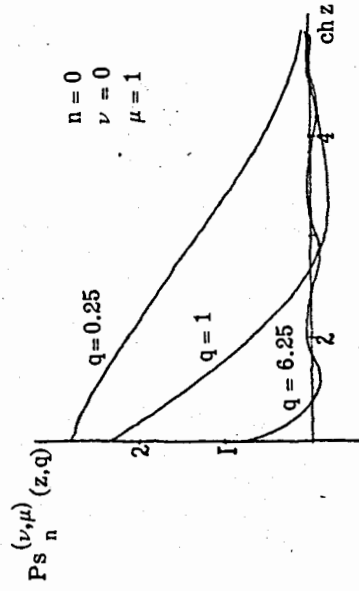


Рис. 7

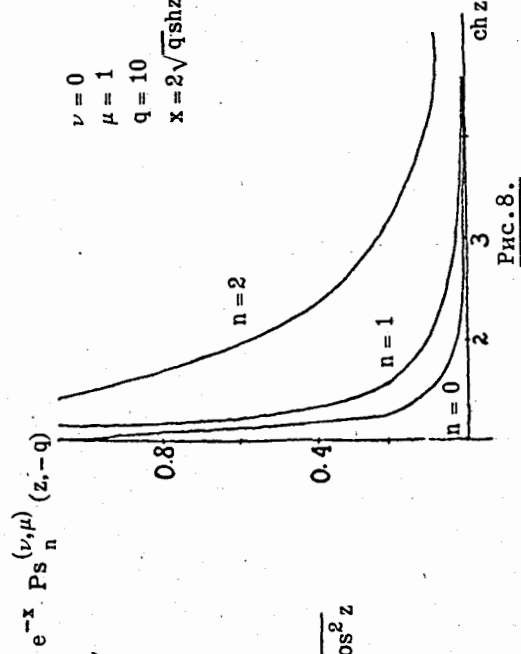


Рис. 8.

Асимптотические формулы для $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ при $q \rightarrow \infty$, представленные в $\sqrt[14]{}$ с точностью до $O(1/q^2)$, начинают выполняться в случае $n=0$ уже при $q=9 \div 10$ и дают здесь правильные значения $\lambda_n^{(\nu, \mu)}(q)$ с точностью до процента.

Автор благодарит Я.А.Сморodinского и А.Т.Филиппова за внимание к работе и ценные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, P5-81-372, Дубна, 1981.
2. Абрамовиц М., Стиган Л. Справочник по специальным функциям. "Наука", М., 1979.
3. Мак-Лаклан Н.В. Теория и приложения функций Матье. ИЛ, М., 1953.
4. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. "Наука", М., 1973, тт. 1-3.
5. Фламмер К. Таблицы сферидальных волновых функций. БМТ, вып. 17, М., ВЦ АН СССР, 1962.
6. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферидальные и кулоновские сферидальные функции. "Наука", М., 1976.
7. Meixner J., Schäpfke F.W. Mathieusche Functionen und Sphäroidfunktionen, Springer, 1954.
8. Stratton J.A. et al. Spheroidal Wave Functions. Mass. Inst. Techn. Press, 1956.
9. Rhodes R. J. Res. Nat. But. Stand. 1970, 74, p. 187.
10. Вайнштейн Л.А. В кн.: Электроника больших мощностей, 1965, "Наука", М., с. 130.
11. Heurtley J.C. In: Proc. Symp. on Quasioptics, Politechnic Press, N.Y., 1964, p. 367.
12. Кузнецов Н.В. Записки научных семинаров ЛОМИ, "Наука", Л., 1970, 17, с. 66.
13. Slepian D. Bell System Tech. J., 1964, 43, p. 3009.
14. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, P5-80-838, Дубна, 1980.
15. Соколов С.Н., Силин И.Н. ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961.
16. Wall H.C. Continued Fractions, N.Y., Pergamon Press, 1948.
17. Хованский А.Н. Приложение цепных дробей и их обобщений к вопросам приближенного анализа. ГИТТЛ, М., 1956.
18. Wimp J. Applicable Anal., 1972, 1, p. 325.
19. Gautschi W. SIAM Rev., 1967, 9, p. 24.
20. Ерашевская С.П. и др. Таблицы сферидальных волновых функций и их первых производных. "Наука и техника", Минск, 1973.
21. Люк Ю. Специальные математические функции и их аппроксимации. "Мир", М., 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 июля 1981 года.