С л е д с т в и е. Если при каждом $\nu = 1, 2, \ldots, n$ заданные главные части $\xi_{\pm}^{\nu}(z)$ аналитичны в проколотых окрестностях u_ν, то для разрешимости задачи (1) необходимо и достаточно, чтобы выполнялись условия разрешимости

$$\operatorname{Im}\left\{\frac{1}{2\pi i}\int_L g(t)\,\psi_j^+(t)\,dt\right\} = \sum_{\nu=1}^{n_+} \operatorname{Im}\{\operatorname*{res}_{\zeta=F_\nu^+}[\xi_+^\nu(\zeta)\,\psi_j^+(\zeta)\,d\zeta]\} +$$

$$+\sum_{\nu=1}^{n_-} \operatorname{Im}\{\operatorname*{res}_{\zeta=F_\nu^-}[\xi_-^\nu(\zeta)\,\psi_j^-(\zeta)\,d\zeta]\}$$

для любого решения $\psi_j(z)$ сопряженной задачи (7), где $F_\nu^+(F_\nu^-)$ — особая точка, принадлежащая $D^+(D^-)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г а х о в Ф. Д. Краевые задачи. М., 1977.
2. М и х а й л о в Л. Г. Новый класс особых интегральных уравнений и его применение к дифференциальным уравнениям с сингулярными коэффициентами. Душанбе, 1963.
3. Л и т в и н ч у к Г. С. Краевые задачи со сдвигом и сингулярные интегральные уравнения. М., 1977.
4. З в е р о в и ч Э. И. и Л и т в и н ч у к Г. С.— «УМН», 1968, 23, вып. 3(141), 67.
5. А к б а р о в Р., З в е р о в и ч Э. И.— «Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех.», 1979, № 1.
6. А к б а р о в Р.— «Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех.», 1979, № 1.
7. А к б а р о в Р.— «ДАН БССР», 1977, 22, № 7, 588.

Поступила в редакцию 20/V 1977 г.

Кафедра теории функций

УДК 518.321

В. В. БОБКОВ, В. Н. ШАЛИМА

НЕЛИНЕЙНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

В развитие [1] предлагаются новые численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, характеризующиеся улучшенными свойствами устойчивости в сравнении с известными методами.

Рассмотрим задачу Коши для уравнения

$$\ddot{u} = f(t, u, \dot{u}), \tag{1}$$

где f — достаточно гладкая функция указанных аргументов. По аналогии с [2] метод численного решения этой задачи станем называть A-устойчивым, если в случае $f(t, u, \dot{u}) \equiv -2\lambda\dot{u} - \gamma\lambda^2 u$ при любых постоянных $\lambda > 0$, $\gamma > 0$ его погрешность стремится к нулю, когда $t \to \infty$.

Явные методы типа Рунге — Кутта, например, удовлетворяют условию A-устойчивости лишь при жестких ограничениях на величину шага τ численного интегрирования. Построим примеры таких явных методов, которые A-устойчивы при любых $\tau > 0$.

Рассмотрим семейство зависящих от параметров a_i, b_i, c_i, α_i, β_i ($i = 0, 1$) нелинейных методов

$$\hat{y} = y + \tau\dot{y} + \frac{\tau^2}{2} f_0 \,\mathrm{Reg}_0, \tag{2}$$

$$\hat{\dot{y}} = \dot{y} + \tau f_1 \,\mathrm{Reg}_1, \tag{3}$$

где $\mathrm{Reg}_i = \dfrac{f_i}{2f_i - f(t+\beta_i\tau,\ y + a_i\tau\dot{y} + b_i\tau^2 f_i,\ \dot{y} + c_i\tau f_i)}$;

$$f_i = f(t + \alpha_i\tau,\ y + a_i\tau\dot{y},\ \dot{y});$$

$$\hat{y} \approx u(t+\tau),\ y \approx u(t),\ \overset{\wedge}{\dot{y}} \approx \dot{u}(t+\tau),\ \dot{y} \approx \dot{u}(t),\ i = 0,\ 1.$$

Для погрешностей формул (2), (3) в предположении $f(t,\ u,\ \dot{u}) \neq 0$ можно дать представления

$$r_i \doteq \frac{\tau^{3-i}}{(3-i)!}\left((1-(3-i)\beta_i) f_t + (1-(3-i)a_i)\dot{u}f_u + \right.$$
$$\left. + (1-(3-i)c_i) f f_{\dot{u}}\right) + O(\tau^{4-i}),\ i = 0,\ 1,$$

из которых следует, что при выполнении равенств

$$1-(3-i)\beta_i = 0,\ 1-(3-i)a_i = 0,\ 1-(3-i)c_i = 0,\ i = 0, 1,$$

порядок точности таких методов возрастает.

Методы (2), (3) в случае $f(t,\ u,\ \dot{u}) \equiv -2\lambda\dot{u} - \gamma\lambda^2 u$ приводят к соотношению $\overset{\wedge}{\bar{y}} = S\bar{y}$, где $\bar{y} = [y,\ \dot{y}]^T$,

$$S = \begin{bmatrix} 1 - \dfrac{\gamma\lambda^2\tau^2}{2s_0} & \tau - \tau^2\dfrac{2\lambda + a_0\gamma\lambda^2\tau}{2s_0} \\ -\dfrac{\gamma\lambda^2\tau}{2s_1} & 1 - \tau\dfrac{2\lambda + a_1\gamma\lambda^2\tau}{2s_1} \end{bmatrix},$$

$s_i = 1 + 2c_i\lambda\tau + \gamma b_i\lambda^2\tau^2,\ i = 0, 1.$

Для выполнения условия A-устойчивости потребуем, чтобы собственные значения матрицы S были меньше единицы по модулю. Это требование приводит к следующим неравенствам:

$$a_1 \geqslant \frac{1}{2},\ c_0 > 0,\ c_1 \geqslant \frac{1}{2},\ 2b_0 + a_1 - a_0 \geqslant 0,\ 2(b_0 + b_1) \geqslant a_1;$$
$$2c_0(a_1 - 1) + 2b_0 + c_1 \geqslant 0,\ 2b_0(a_1 - 1) + b_1 + a_0 - a_1 \geqslant 0;$$
$$4(c_1b_0 + c_0b_1) - 2(b_0 + c_0a_1) + c_0 - c_1 \geqslant 0;$$
$$8b_0b_1 - 2b_1 + 2b_0 - 4a_1b_0 + a_1 - a_0 \geqslant 0.$$

Рассмотрим примеры явных нелинейных методов, A-устойчивых при любых $\tau > 0$.

Метод 1. Полагая $\alpha_i = \beta_i = a_i = c_i = 1,\ b_i = \frac{1}{2},\ i = 0, 1,$ получаем метод первого порядка точности, требующий двукратного вычисления значений f на узел сетки. При этом приближенное значение решения может быть получено с локальной ошибкой порядка τ^3, производной — τ^2.

Метод 2. *Положив* $\alpha_i = \beta_i = a_i = b_i = c_i = \frac{1}{2},\ i = 0,\ 1,$ получим метод второго порядка точности, также требующий двукратного вычисления значений f на одном шаге численного интегрирования.

Приведем некоторые результаты численных экспериментов (см. таблицу).

$$L(u) = f(t),\ u(1) = 0,\ \dot{u}(1) = 4,\ t \geqslant 1,$$
$$L(u) = \ddot{u} + 24\dot{u} + 144\cdot 10^6 u, \qquad (4)$$
$$f(t) = 6t(1 + 12t + 24\cdot 10^6 t^2) + \frac{2}{t^3}(12t - 72\cdot 10^6 t^2 - 1).$$

Точное решение задачи (4) есть $u(t) = t^3 - \frac{1}{t}$. Для рассматриваемого примера характерной особенностью является то, что $|\mathrm{Jm}\,\mu_i| \gg |\mathrm{Re}\,\mu_i|$, $i = 0, 1$ (примерно в 1000 раз), где μ_i — собственные значения $L(u)$. Явные методы типа Рунге — Кутта оказываются практически непригодными для решения уравнений указанного типа, в то время как предлагаемые алгоритмы позволяют получить удовлетворительные результаты.

τ	n	$u(t_n)$	Р—К—Н	Метод 1
$\frac{1}{2048} \approx 0.0005$	1	0.1953602 — 02	0.1953602 — 02	0,1953597 — 02
	11	0.2154238 — 01	0.1386756 + 11	0,2154239 — 01
	12	0.2350657 — 01	*	0,2350656 — 01
	40960	0.7999950 + 04	*	0,7999950 + 04
0.5	1	0,2708333 + 01	—0.6749992 + 06	0,2708333 + 01
	2	0,7500000 + 01	*	0,7500000 + 01
	1000	0,1250000 + 09	*	0,1250000 + 09

Примечания: Р—К—Н — метод Рунге — Кутта — Нистрёма [3]; * — приближенное решение не получено в результате переполнения разрядной сетки ЭВМ «Минск—32».

В заключение отметим, что рассматриваемые методы покоординатно могут быть перенесены на системы соответствующих уравнений, а также на их основе могут быть построены разностные схемы решения граничных задач для дифференциальных уравнений с частными производными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бобков В. В.— «ДАН БССР», 1977, 21, № 5, 395.
2. Dahlquist G.— «BIT», 1963, 3, 27.
3. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений, 2. М., 1959.

Поступила в редакцию
8/IX 1977 г.

Кафедра вычислительной математики

УДК 539.143

В. Г. БАРЫШЕВСКИЙ, С. А. КУТЕНЬ,
С. И. ЛИВШИЦ, И. Д. ФЕРАНЧУК

КВАДРУПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ АТОМА ВОДОРОДА

В работе [1] нами получено выражение для квадрупольного момента Q основного состояния атома водорода, записанное в виде бесконечного ряда теории возмущений, и дана оценка вклада дискретного спектра в величину Q. Возможно, однако, избежать непосредственного суммирования рядов теории возмущений, используя эффективный путь прямого решения возмущенного уравнения Шредингера. Это и составляет основу так называемых аналитических методов в теории возмущений. Указанные методы применительно к задачам атомной спектроскопии были развиты в работах [2] (для основного состояния) и [3—5] (для возбужденных состояний), в которых были найдены волновые функции S-состояний атомов с учетом примеси к ним D-состояний.

В системе центра инерции квадрупольный момент атома водорода в основном (триплетном) состоянии определяется выражением

$$Q = 2\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} < \Psi_{1S}^{(1)} \mid (3z^2 - r^2) \mid \Psi_{1S} >, \qquad (1)$$

где m_1 и m_2 — масса электрона и протона соответственно. Согласно [2], поправка к волновой функции основного состояния имеет вид