НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ

РОМАНЮК Наталія Миколаївна

УДК 519.624:517.984

ФУНКЦІОНАЛЬНО-ДИСКРЕТНИЙ МЕТОД РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ЗАДАЧ З КРАТНИМИ ВЛАСНИМИ ЗНАЧЕННЯМИ

01.01.07 – обчислювальна математика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2015

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана в Інституті математики НАН України.

Науковий керівник:
доктор фізико-математичних наук, професор,
академік НАН України
Макаров Володимир Леонідович,
Інститут математики НАН України,
завідувач відділу обчислювальної математики.

Офіційні опоненти:
доктор фізико-математичних наук, професор,
член-кореспондент НАН України
Хіміч Олександр Миколайович,
Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України,
завідувач відділу чисельних методів та комп'ютерного моделювання;

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Подлевський Богдан Михайлович,
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України,
провідний науковий співробітник
відділу числових методів математичної фізики.

Захист відбудеться "19" січня 2016 року о 15 год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.206.02 Інституту математики НАН України за адресою: 01601, м. Київ, вул. Терещенківська, 3.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту математики НАН України.

Автореферат розісланий "11" грудня 2015 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради ПЕЛЮХ Г. П.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Задачі на власні значення широко застосовуються в теоретичних і прикладних проблемах механіки, фізики, фізичної хімії, біофізики, математичній економіці, теорії систем та їх оптимізації, теорії випадкових процесів, і багатьох інших галузях природничих наук. Зокрема, провідну роль у класичних галузях математичної фізики та прикладних науках відіграють крайові задачі для звичайних диференціальних рівнянь типу Штурма-Ліувілля. За допомогою самоспряжених крайових задач типу Штурма-Ліувілля описуються і моделюються квантово-механічні системи, а саме: атомні та молекулярні системи, включаючи атомні решітки, квантові гетероструктури, напівпровідники, квантові хвилеводи, потенціальні ями та ін. Несамоспряжені задачі на власні значення виникають у гідродинамічній та в магніто-гідродинамічній теорії стійкості, наприклад, при розгляді задач про стійкість потоків в'язкої рідини.

Над розробкою, обґрунтуванням та реалізацією наближених методів розв'язування задач на власні значення працювали багато дослідників, зокрема: Акуленко Л., Anderssen R. S., Алгазін С. Д., Andrew A. L., Бандирський Б. Й., Bailey P. B., Pruess S., Everitt W. N., Гаврилюк І. П., Ghelardoni P., Gladwell I., Greenberg L., Ixaru L. Gr., Коллатц Л., Ledoux V., Макаров В. Л., Marletta M., Paine J. W., Pryce J. D., Подлевський Б. М., Пузинін І. В., Самарський О. А., Тіхонов А. М., Vanden Berghe G., Weideman J. A. C. та інші.

Серед недоліків дискретних методів слід вказати на такі: погіршення точності із зростанням номера власного значення; використання згенерованої на початку чисельного процесу сітки, яке, наприклад, у випадку наявності щільно згрупованих власних значень призводить до співпадіння їх відповідних наближень; обмежена кількість обчислюваних (надійних) власних значень, яка залежить від кроку сітки; насичення точності. Водночас існують задачі, які вимагають обчислення великої кількості (тисяч) власних значень та відповідних нормованих власних функцій.

Протягом останніх років для наближеного розв’язання задач на власні значення широко застосовуються аналітичні (функціональні) методи, які базуються на ідеї методу гомотопії, і дозволяють знаходити розв’язки у вигляді швидкозбіжних функціональних рядів. Це, наприклад, метод декомпозиції Адомяна (ADM) (Adomian G., 1984), метод гомотопного аналізу (HAM) (Sh. Liao, 1992), метод гомотопного збурення (HPM) (J.-H. He, 1999). До задач типу Штурма-Ліувілля ці методи були застосовані в роботах Abbasbandy S. (2011), Atay M. T. (2010), Attili B. S. та Lesnic D. (2005–2007), Irandoust-pakchin S. (2015), Jafari M. A. (2009), Neamaty A. (2010), Singh N. (2013), Taher A. H. S. (2014) та інших.

Спорідненим за ідеологією із методами HPM, HAM та ADM є функціонально-дискретний метод (FD-метод), який, на відміну від них, містить в собі дискретну складову, за допомогою якої можна досягати збіжності у випадках, коли HPM, HAM, ADM є розбіжними. Запропонований у 1991 р. Макаровим В. Л., FD-метод дає змогу подолати перераховані вище недоліки дискретних методів та може бути застосований до розв'язування операторних рівнянь загального вигляду. Для ряду конкретних випадків було строго доведено, що швидкість його збіжності є суперекспоненціальною. FD-метод був розвинутий у роботах Макарова В. Л., Гаврилюка І. П., Лазурчака І. І., Россохатої Н. О., Василика В. Б., Ситника Д. О.,

Драгунова Д. В., Клименка А. В., Бандирського Б. Й., Уханьова О. Л., Попова А. М. та інших.

Для широкого класу одновимірних задач на власні значення було доведено, що FD-метод збігається із швидкістю не повільнішою, ніж геометрична прогресія, знаменник якої прямо пропорційний параметру дискретизації та обернено пропорційний порядковому номеру відповідного власного значення, тобто із збільшенням порядкового номера власного значення зростає швидкість збіжності FD-методу.

Серед особливостей, які спричиняють труднощі при чисельному розв'язуванні задач на власні значення, слід відмітити наявність кратних та щільно згрупованих у кластери близьких власних значень. Такі особливості притаманні, наприклад, скалярним задачам Штурма-Ліувілля другого порядку з рівняннями Матьє і Кофі-Еванса та з рівняннями Хілла і Ламе з періодичними та антиперіодичними крайовими умовами, скалярним задачам типу Штурма-Ліувілля четвертого порядку з відповідними крайовими умовами, задачам типу Штурма-Ліувілля з матричними коефіцієнтами. При недостатньо дрібному розбитті відрізку отримані згідно з дискретними методами наближення до близьких і, водночас, простих власних значень на деякому кроці методу починають співпадати (Dwyer H. I., Zettl A., 1995).

В роботах Макарова В. Л. та його учнів (2000, 2005, 2010) FD-метод обґрунтовано та застосовано для розв'язування задач типу Штурма-Ліувілля з близькими щільно згрупованими в двійки власними значеннями. При цьому вже на етапі базової задачі, з якої починається чисельний процес, виникають двократні власні значення, що зумовлює модифікацію традиційного алгоритму FD-методу для кожної із задач, а в 2009 р. здійснено узагальнення на випадок абстрактної постановки задачі на власні значення для самоспряжених операторів з дискретним спектром, що діють у гільбертовому просторі.

Згадані вище застосування спектральних задач, в яких власні значення згруповані в кластери близьких значень (трійки, четвірки і т.д.), та недоліки дискретних методів вказують на актуальність побудови більш ефективних чисельних методів. Водночас обґрунтування FD-методу для розв’язування спектральних задач для звичайних диференціальних рівнянь із кратними власними значеннями базової задачі довільної (скінченної) кратності та його узагальнення на випадок абстрактної постановки задачі на власні значення на момент початку проведення дисертаційного дослідження було відкритим та актуальним питанням.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Тематика дисертації пов'язана з науковими дослідженнями, що проводяться у відділі обчислювальної математики Інституту математики НАН України. Її результати було використано при виконанні науково-дослідної роботи І–16–11: «Високоточні методи розв'язування задач для операторних рівнянь у некласичній постановці», термін виконання з 01.01.2010 по 31.12.2015, номер державної реєстрації – 0111U000020.

Мета і завдання дослідження. *Метою дослідження* є розробка, обґрунтування і алгоритмічна реалізація FD-методу для спектральних задач типу Штурма-Ліувілля, які можуть мати кратні власні значення як у вихідній постановці, так і в процесі їх розв'язування.

Основними завданнями дослідження є:

1) розробка та обґрунтування FD-методу для розв'язування спектральних задач Штурма-Ліувілля для звичайних диференціальних рівнянь другого порядку на скінченному інтервалі з потенціалами із різних класів гладкості та у випадках, коли FD-метод є таким, що точно реалізується;

2) розробка та обґрунтування загальної схеми FD-методу для задач на власні значення в абстрактній постановці із кратними власними значеннями базової задачі довільної (скінченної) кратності та застосування цієї схеми до розв'язування одновимірних задач на власні значення типу Штурма-Ліувілля.

Об'єкт дослідження – спектральні задачі типу Штурма-Ліувілля.

Предмет дослідження – функціонально-дискретний метод для спектральних задач типу Штурма-Ліувілля, які можуть мати кратні власні значення як у вихідній постановці, так і в процесі їх розв'язування.

Методи дослідження. В ході дослідження були використані методи функціонального аналізу, метод твірних функцій, FD-метод розв'язування задач на власні значення.

Наукова новизна одержаних результатів. Основні результати дослідження, що визначають його наукову новизну:

1. Для задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з крайовими умовами Діріхле та у випадках, коли потенціал є кусково-сталою функцією або коли він належить негативному простору Соболєва $H_2^{-1}(0,1)$, отримано аналітичні оцінки для поправок до власних значень $\lambda_n^{(j)}$ згідно з FD-методом (з $\overline{q}(x) \equiv 0$), які відносно номера власного значення n є непокращуваними за порядком (теорема 2.2, (12), (14)). У випадку простору $H_2^{-1}(0,1)$ знайдено достатню умову експоненціальної швидкості збіжності FD-методу (теорема 2.3).

2. Для задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з поліноміальним потенціалом і крайовими умовами Діріхле та Діріхле-Неймана отримано структурні зображення розв'язків $u_n^{(j)}(x)$ відповідних рекурентних задач згідно з FD-методом (з $\overline{q}(x) \equiv 0$) (теорема 3.1). Завдяки цьому побудовано принципово новий алгоритм FD-методу, який містить тільки звичайні алгебраїчні операції та не потребує в ході рекурентного процесу розв'язання крайових задач і обчислення інтегралів.

3. Поширено FD-метод на задачі Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з потенціалом, який є похідною від функції обмеженої варіації і містить скінченну лінійну комбінацію дельта-функцій Дірака, та здійснена його алгоритмічна реалізація. Встановлено достатні умови експоненціальної швидкості збіжності розробленого методу (теореми 3.4, 3.5).

4. Запропоновано та обґрунтовано нову схему алгоритму FD-методу для задачі на власні значення в абстрактному формулюванні для самоспряжених операторів з дискретним спектром, що діють у гільбертовому просторі, у випадку базової задачі з власними значеннями довільної (скінченної) кратності (теореми 4.1, 4.2, 4.3) та здійснено узагальнення на випадок банахового простору (теорема 5.1, зауваження 5.1). В обох випадках отримано достатні умови суперекспоненціальної швидкості збіжності запропонованих підходів.

Практичне значення одержаних результатів. Результати дисертації мають як теоретичний, так і практичний характер та можуть бути використані для подальших досліджень, пов'язаних із розповсюдженням FD-методу на нові класи спектральних задач та для його високоефективної програмної реалізації. Крім того, висновки і результати дисертаційного дослідження можуть бути використані у процесі підготовки відповідної навчальної та навчально-методичної літератури, призначеної для читання лекцій, спецкурсів та проведення практичних занять, які відповідають напрямку наукових досліджень «Чисельні методи розв'язання задач математичної фізики».

Отримані результати та розроблені алгоритми можуть бути використані для високоточного наближеного розв'язання, дослідження та моделювання реальних прикладних проблем. Наприклад, для спектральних задач типу Штурма-Ліувілля з рівнянням Шрьодінгера це: ***а)*** задачі про параметричний резонанс та квантовий рух електронів у періодичному полі кристала (коли потенціал є нескінченно-диференційовною періодичною функцією); ***б)*** «бар'єрні» задачі квантової механіки, прикладами застосувань яких є транзистори, напівпровідники, альфа-розпад, структури з резонансним тунелюванням електронів, яке лежить в основі наноелектронних пристроїв обробки сигналів (коли потенціал є кусково-сталою або кусково-гладкою функцією); ***в)*** моделювання атомних і молекулярних систем, в т.ч. атомних решіток, квантових гетероструктур, квантових хвилеводів, напівпровідників, органічних люмінесцентних матеріалів, сонячних батарей, ідеальних кристалів та дефектів у кристалах (коли потенціал містить скінченну лінійну комбінацію дельта функцій Дірака), а також задачі розсіювання молекул та електронів, коливання молекул (у випадку векторно-матричної задачі із симетричним матричним потенціалом); ***г)*** класичний, квантовий та модифіковані гармонічні та ангармонічні осцилятори (коли потенціал є поліномом відповідного степеня). Узагальнений алгоритм FD-методу у п'ятому розділі застосовано до задач типу Штурма-Ліувілля четвертого порядку, за допомогою яких, наприклад, моделюють задачі поздовжньої вібрації пружного стержня, а саме: балок перекриттів будинків, колон, елементів наземних трубопроводів, лопастей турбін тощо.

Особистий внесок здобувача. Всі основні результати дисертаційної роботи отримані автором самостійно. Визначення напрямків дослідження, постановки задач, деякі ідеї доведення тверджень та аналіз отриманих результатів, опублікованих у семи статтях, належать Макарову В. Л. У всіх роботах підбір та реалізація чисельних прикладів належать Романюк Н. М. Отримані результати, опубліковані у роботах спільно з Гаврилюком І. П. та Лазурчаком І. І., належать усім авторам з рівноцінним внеском кожного.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертації доповідались та обговорювались на таких наукових конференціях та семінарах:

- міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми механіки та математики», присвячена 95-річчю заснування НАН України, 85-річчю від дня народження академіка НАН України Я. С. Підстригача та 40-річчю створеної ним наукової установи в галузі механіки і математики, м. Львів, 21-25 травня 2013 р.;
- VI міжнародна конференція «Обчислювальна та прикладна математика» ім.

академіка НАН України І. І. Ляшка, м. Київ, 5-6 вересня 2013 р.;

• міжнародна математична конференція «Диференціальні рівняння, обчислювальна математика, теорія функцій та математичні методи механіки» до 100-річчя від дня народження члена-кореспондента НАН України Г. М. Положого, м. Київ, 23-24 квітня 2014 р.;

• семінар «Математичні проблеми механіки та обчислювальної математики» відділів динаміки та стійкості багатовимірних систем і обчислювальної математики Інституту математики НАН України (керівники семінару – академік І. О. Луковський, академік В. Л. Макаров), 14 травня 2015 р.;

• міжнародна конференція молодих математиків, м. Київ, 3-6 червня 2015 р.

Публікації. Основні результати роботи викладено в 7 статтях [1–7], а також відображено в 4 тезах доповідей на міжнародних конференціях [8–11].

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, списку використаних джерел із 184 найменувань та додатків. Загальний обсяг роботи – 180 сторінок, основний текст роботи викладено на 152 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету і завдання дослідження та виділено основні результати.

У **першому розділі** проведено огляд наукових робіт, тематика яких тісно пов'язана з тематикою дисертаційної роботи.

У **другому розділі** досліджено поведінку складових FD-методу $u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n^{(j)}$, $j = 0, 1, \ldots$ відносно порядкового номера n власної пари при його застосуванні до розв'язування самоспряжених задач Штурма-Ліувілля з рівняннями Шрьодінгера на скінченному інтервалі, потенціали яких $q(x)$ належать до різних класів гладкості і є такими, що FD-метод *точно реалізується*. Розглянуто варіант FD-методу з вибором функції $\overline{q}(x)$, що наближає потенціал $q(x)$, тотожно рівної нулю.

Постановка задачі та зображення розв'язку

Розглянуто задачу Штурма-Ліувілля

$$u''(x) + \big(\lambda - q(x)\big)u(x) = 0, \quad x \in (0,1), \qquad u(0) = u(1) = 0, \tag{1}$$

до якої застосовано FD-метод з вибором $\overline{q}(x) \equiv 0$. *Наближення m-го рангу* (згідно з термінологією FD-методу) до розв'язку задачі (1) має вигляд

$$u_n^{m}(x) = \sum\nolimits_{j=0}^{m} u_n^{(j)}(x), \quad \lambda_n^{m} = \sum\nolimits_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)}. \tag{2}$$

Члени рядів (2) визначаються як розв'язки *рекурентної послідовності задач*:

$$\frac{d^2 u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)} u_n^{(j+1)}(x) = -\sum_{p=0}^{j} \lambda_n^{(j+1-p)} u_n^{(p)}(x) + q(x) u_n^{(j)}(x) \equiv -F_n^{(j+1)}(x), \quad x \in (0,1), \tag{3}$$

$$u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) = 0, \qquad j = -1, 0, 1, \ldots, m-1, \tag{4}$$

$$\lambda_n^{(j+1)} = \int_0^1 q(x)\, u_n^{(j)}(x)\, u_n^{(0)}(x) dx, \tag{5}$$

$$\int_0^1 u_n^{(j+1)}(x)\, u_n^{(0)}(x)\, dx = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, m-1, \tag{6}$$

де $u_n^{(0)}(x)=\sqrt{2}\sin(n\pi x)$, $\lambda_n^{(0)}=(n\pi)^2$ – розв'язок *базової задачі* (3), (4) з $j=-1$, $F_n^{(0)}(x)=0$. Для того, щоб записати розв'язки задач (3), (4), введемо узагальнену функцію Гріна

$$g_n(x,\xi)=2\sum_{p=1,\,p\neq n}^{\infty}\frac{\sin(p\pi x)\sin(p\pi\xi)}{\pi^2(n^2-p^2)}=\big(\cos(n\pi(x+\xi))-\cos(n\pi(x-\xi))-$$
$$-2\pi n\left[\sin(n\pi(x+\xi))(1-x-\xi)-\sin(n\pi\,|\,x-\xi\,|)(1-|\,x-\xi\,|)\right]\big)/(4\pi^2n^2). \qquad (7)$$

Тоді при фіксованому j розв'язок задачі (3), (4), що задовольняє умову ортогональності (6), можна записати у вигляді

$$u_n^{(j+1)}(x)=-\int_0^1 g_n(x,\xi)F_n^{(j+1)}(\xi)d\xi. \qquad (8)$$

Теорема 2.1. *Нехай* $q(x)=-q(1-x)$, $x\in[0,1]$. *Тоді при* $j=1,2,...$ *виконуються співвідношення:*

$$u_n^{(2j-1)}(x)=-u_n^{(2j-1)}(1-x),\ u_n^{(2j)}(x)=u_n^{(2j)}(1-x),\ \text{якщо } n-\text{непарне}; \qquad (9)$$

$$u_n^{(2j-1)}(x)=u_n^{(2j-1)}(1-x),\ u_n^{(2j)}(x)=-u_n^{(2j)}(1-x),\ \text{якщо } n-\text{парне}; \qquad (10)$$

$$\lambda_n^{(2j-1)}=0,\qquad \lambda^{(2j)}=\int_0^1 q(x)\,u_n^{(2j-1)}(x)\,u_n^{(0)}(x)dx. \qquad (11)$$

Потенціал є нескінченно-диференційовною періодичною функцією

Розглянуто задачу (1) з $q(x)=\cos(\pi x)$, $q(x)\in C^{\infty}[0,1]$. Експериментально визначеною асимптотичною поведінкою поправок до власних значень згідно з FD-методом до певного кроку $j_0=2n_0$ відносно n є така: $\lambda_n^{(j)}=\mathcal{O}(n^{-2j+2})$. В цьому випадку для кожного фіксованого номера n_0 існує такий крок FD-методу $j_0=2n_0$, що для всіх наступних $j\geq j_0$ користуватись отриманими з (3)–(5) та наведеними в цьому підрозділі дисертаційної роботи аналітичними формулами, залежними від n, не можна, виникає ділення на нуль. Тому для кожного фіксованого $n=n_0$, $n_0+1,...,$ починаючи з $\lambda_{n_0}^{(2n_0)}$, $u_{n_0}^{(2n_0)}(x)$, треба використовувати інші формули, які отримуємо, розв'язуючи відповідні крайові задачі (3), (4) для $n=n_0$ з накладеними умовами (6).

Потенціал є кусково-сталою функцією

Теорема 2.2. *Нехай в* (1) $q(x)=a[-1/2+\mathrm{H}(x-1/2)]$, $a>0$. *Тоді при справедливими є співвідношення:*

$$|\lambda_n^{(2j)}|\leq c_{2j}\left(a/(\pi n)\right)^{2j},\quad j=1,2,..., \qquad (12)$$

$$\lambda_n^{(2j-1)}=0,\quad j=1,2,..., \qquad (13)$$

де $\mathrm{H}(x)$ *– функція Хевісайда і сталі* c_{2j} *не залежать від* a,n *та* $c_{2j}\xrightarrow[j\to\infty]{}0$.

Отримана аналітична оцінка (12) відносно n є непокращуваною за порядком.

Потенціал є кусково-гладкою функцією

Для задачі (1) з $q(x)=1/2+(1/2-x)\mathrm{H}(x-1/2)$ експериментально визначеною асимптотичною поведінкою поправок до власних значень згідно з FD-методом відносно порядкового номера n є така: $\lambda_n^{(1)}=\mathcal{O}(1)$, $\lambda_n^{(2)}=\mathcal{O}(n^{-2})$; $\lambda_{2\mu-1}^{(3)}=\mathcal{O}((2\mu-1)^{-4})$, $\lambda_{2\mu}^{(3)}=\mathcal{O}((2\mu)^{-6})$, $\mu=1,2,...;$ $\lambda_n^{(2j)}=\mathcal{O}(n^{-2j-2})$, $\lambda_n^{(2j+1)}=\mathcal{O}(n^{-2j-2})$, $j=2,3,....$

Потенціал є функцією з негативного простору Соболєва

У випадку, коли в (1) $q(x)=a\delta(x-1/2)\in H_2^{-1}(0,1),\quad a>0,$ де $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака, для всіх парних n FD-метод 0-го рангу дає точний розв'язок задачі: $\lambda_n=\lambda_n^{(0)}=(\pi n)^2$, $u_n(x)=u_n^{(0)}(x)=\sqrt{2}\sin(\pi nx)$, а для непарних n поправки до власних значень поводять себе як $\lambda_n^{(2j-1)}=\mathcal{O}(n^{-2j+2}),\ \lambda_n^{(2j)}=\mathcal{O}(n^{-2j}),\ j=1,2,...$ При непарному n одержано оцінки (14) для $\lambda_n^{(j+1)}$, які відносно n є непокращуваними за порядком:

$$|\lambda_n^{(j+1)}|=a\sqrt{2}\,|u_n^{(j)}(1/2)|\le a4\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}\left(a4\sqrt{2}M_n\right)^j\le 2a\left(a4\sqrt{2}\,M_n\right)^j\Big/\left((j+1)\sqrt{\pi j}\right),\quad(14)$$

де $M_n=\max\limits_{x,\xi\in[0,1]}|g_n(x,\xi)|\le 1/n\pi+1/(2(n\pi)^2).$

Теорема 2.3. *Нехай виконується умова* $r_n=a4\sqrt{2}M_n<1$. *Тоді FD-метод для задачі* (1) *з* $q(x)=a\delta(x-1/2)$ *збігається експоненціально і мають місце такі оцінки його точності:*

$$\|u_n-\overset{m}{u}_n\|_{L_2}\le\frac{r_n^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}(1-r_n)},\qquad|\lambda_n-\overset{m}{\lambda}_n|\le\frac{r_n^m}{(m+1)\sqrt{\pi m}(1-r_n)}.\qquad(15)$$

Третій розділ присвячений побудові та обґрунтуванню нових алгоритмів FD-методу для задач Штурма-Ліувілля другого порядку з рівняннями Шрьодінгера на скінченному інтервалі із поліноміальним потенціалом та потенціалом, який є похідною від функції обмеженої варіації і містить скінченну лінійну комбінацію дельта-функцій Дірака.

FD-метод з $\overline{q}(x)\equiv 0$ для задач з поліноміальним потенціалом

Розглянуто регулярну задачу Штурма-Ліувілля

$$u''(x)+\big(\lambda-q(x)\big)u(x)=0,\qquad q(x)=\sum\nolimits_{l=0}^{r}c_l x^l,\quad x\in(0,1),\qquad(16)$$

$$a)\,u(0)=u(1)=0,\qquad b)\,u(0)=u'(1)=0,\qquad(17)$$

до якої застосовано FD-метод з вибором $\overline{q}(x)\equiv 0$, який у цьому випадку є таким, що *точно реалізується*. *Наближення m-го рангу* до розв'язків задач (16), (17)-a) та (16), (17)-b) мають вигляд (2). Члени рядів (2) визначаються як розв'язки рекурентної послідовності задач (3), (5), (6) з відповідними крайовими умовами, а саме: для випадку крайових умов Діріхле (17)-*a*) – з (18)-*a*), а для випадку крайових умов Діріхле-Неймана (17)-*b*) – з (18)-*b*):

$$a)\,u_n^{(j+1)}(0)=u_n^{(j+1)}(1)=0,\qquad b)\,u_n^{(j+1)}(0)=\frac{du_n^{(j+1)}(1)}{dx}=0,\quad j=-1,0,1,...,m-1.\quad(18)$$

Розв'язками базових задач (3), (18)-*a*) та (3), (18)-*b*) з $j=-1$, $F_n^{(0)}(x)=0$ є власні функції $u_n^{(0)}(x)=\sqrt{2}\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)$ та власні значення для кожного з випадків *a*) та *b*):

$$a)\,\lambda_n^{(0)}=(\pi n)^2,\qquad b)\,\lambda_n^{(0)}=\pi^2(n-1/2)^2.\qquad(19)$$

Для того, щоб записати розв'язки задач (3), (18)-*a*) та (3), (18)-*b*), введемо узагальнену функцію Гріна

$$g_n(x,\xi)=2\sum_{\substack{p=1,\\ p\neq n}}^{\infty}\frac{\sin\left(\sqrt{\lambda_p^{(0)}}x\right)\sin\left(\sqrt{\lambda_p^{(0)}}\xi\right)}{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}-\sqrt{\lambda_p^{(0)}}}=\frac{1}{4\lambda_n^{(0)}}\left(\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x+\xi)\right)-\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x-\xi)\right)-\right.$$

$$\left.-2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\left[\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x+\xi)\right)(1-x-\xi)-\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x-\xi)\right)(1-|x-\xi|)\right]\right). \qquad (20)$$

Тоді при фіксованому j розв'язки відповідних крайових задач (3), (18)-*a*) та (3), (18)-*b*), що задовольняють умову ортогональності (6), можна записати у вигляді (8).

Теорема 3.1. *Справедливими є такі структурні зображення розв'язків задач* (3), (18)-*a*) *та* (3), (18)-*b*) *при* $j=1,2,\ldots$

$$u_n^{(0)}(x)=\sqrt{2}\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right),\quad a_0^{(0)}=\sqrt{2}, \qquad (21)$$

$$u_n^{(2j-1)}(x)=\sum\nolimits_{p=1}^{(2j-1)(r+1)}b_p^{(2j-1)}x^p\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)+\sum\nolimits_{p=0}^{(2j-1)(r+1)-1}a_p^{(2j-1)}x^p\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right), \qquad (22)$$

$$u_n^{(2j)}(x)=\sum\nolimits_{p=1}^{2j(r+1)-1}b_p^{(2j)}x^p\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)+\sum\nolimits_{p=0}^{2j(r+1)}a_p^{(2j)}x^p\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right). \qquad (23)$$

Із (21)–(23) та (8) отримано рекурентні формули для коефіцієнтів $b_p^{(2j-1)}$, $p=\overline{1,(2j-1)(r+1)}$, $a_s^{(2j-1)}$, $s=\overline{1,(2j-1)(r+1)-1}$, $b_p^{(2j)}$, $p=\overline{1,2j(r+1)-1}$, $a_s^{(2j)}$, $s=\overline{1,2j(r+1)}$, виражені через коефіцієнти на попередньому кроці FD-методу. Наприклад, при $j=1,2,\ldots$ та $b_{-1}^{(0)}=0$, $a_0^{(0)}=\sqrt{2}$ маємо

$$b_{(2j-1)(r+1)}^{(2j-1)}=-\frac{c_r a_{2(j-1)(r+1)}^{(2j-2)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(2j-1)(r+1)},\quad a_{(2j-1)(r+1)-1}^{(2j-1)}=\frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\left(\frac{b_{2(j-1)(r+1)-1}^{(2j-2)}}{(2j-1)(r+1)-1}+\frac{a_{2(j-1)(r+1)}^{(2j-2)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\right),$$

$$b_{2j(r+1)-1}^{(2j)}=\frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\left(\frac{b_{(2j-1)(r+1)}^{(2j-1)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}-\frac{a_{(2j-1)(r+1)-1}^{(2j-1)}}{2j(r+1)-1}\right),\quad a_{2j(r+1)}^{(2j)}=\frac{b_{(2j-1)(r+1)}^{(2j-1)}c_r}{4\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\,j(r+1)}. \qquad (24)$$

Початкові значення для коефіцієнтів $a_0^{(2j-1)}$ та $a_0^{(2j)}$ з $j=1,2,\ldots$ знаходяться із умов ортогональності (6) для поправок до власних функцій (22) і (23). Із (21)–(23) та (5) для поправок до власних значень отримано формули:

$$\lambda_n^{(1)}=c_0+\sqrt{2}\sum_{l=1}^{r}c_l\left[\sqrt{2}\Big/\big(2(l+1)\big)+\alpha_l\right],$$

$$\lambda_n^{(2j)}=-\sum_{p=1}^{(2j-1)(r+1)}b_p^{(2j-1)}\sum_{l=1}^{r}c_l\beta_{p+l}+\sum_{p=0}^{(2j-1)(r+1)-1}a_p^{(2j-1)}\sum_{l=1}^{r}c_l\left[\sqrt{2}\Big/\big(2(p+l+1)\big)+\alpha_{p+l}\right], \qquad (25)$$

$$\lambda_n^{(2j+1)}=-\sum_{p=1}^{2j(r+1)-1}b_p^{(2j)}\sum_{l=1}^{r}c_l\beta_{p+l}+\sum_{p=0}^{2j(r+1)}a_p^{(2j)}\sum_{l=1}^{r}c_l\left[\sqrt{2}\Big/\big(2(p+l+1)\big)+\alpha_{p+l}\right],\ j=1,2,\ldots,$$

де $\alpha_p=-\sqrt{2}/2\cdot\int_0^1 x^p\cos\left(2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)dx$, $\beta_p=-\sqrt{2}/2\cdot\int_0^1 x^p\sin\left(2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)dx$. Інтеграли α_p і β_p обчислюються точно, а вирази для них мають явний аналітичний вигляд та містять тільки звичайні алгебраїчні операції.

Формули (21)–(25) утворюють основу принципово нової алгоритмічної реалізації FD-методу, який є таким, що *точно реалізується*, містить тільки звичайні

алгебраїчні операції та не потребує в ході рекурентного процесу розв'язання крайових задач (3), (18)-a) або (3), (18)-b) і обчислення інтегралів згідно з (5), (8).

FD-метод для задачі з потенціалом, що є похідною від функції обмеженої варіації, та крайовими умовами Діріхле

Розглянуто задачу Штурма-Ліувілля (1) з потенціалом, який є похідною від функції $\sigma(x)=\sum_{p=0}^{k}\gamma_p\,\mathrm{H}(x-x_p)+\psi(x)$, що належить до класу функцій обмеженої варіації $BV_c[0,1]$ неперервних справа у будь-якій точці $x\in(0,1)$ та неперервних у точках $x=0$ і $x=1$, тобто

$$q(x)=\frac{d\sigma(x)}{dx},\ q(x)=\sum_{p=1}^{k}\gamma_p\delta(x-x_p)+\psi'(x),\ x_p\in(0,1),\ p=\overline{1,k},\ x_1<x_2<\ldots<x_k, \quad (26)$$

де γ_p – дійсні числа, $\mathrm{H}(x)$ – функція Хевісайда, $\delta(x)$ – дельта-функція Дірака, $\psi(x)$ – абсолютно неперервна функція.

FD-метод з $\overline{q}(x)\equiv 0$ у цьому випадку є таким, що *точно реалізується*. *Наближення m-го рангу* до розв'язку задачі (1), (26) має вигляд (2). Члени рядів (2) визначаються як розв'язки рекурентної послідовності задач (3)–(6). При фіксованому j розв'язок задачі (3), (4), (26), що задовольняє умову ортогональності (6), можна записати у вигляді (8) за допомогою узагальненої функції Гріна (7).

Наступна теорема є посиленням та узагальненням теореми 2.3 та результатів щодо асимптотичного розкладу власних значень задачі (1), (26) із роботи Винокурова В.А., Садовничого В.А. (Дифф. уравн. – 2002. – Т. 38, №6. – С. 735-751).

Теорема 3.4. *Нехай* $\sigma(x)\in BV_c[0,1]$ *і виконується умова* $r_n=4\sqrt{2}\,\|g_n\|_\infty\,\|\sigma\|_v<1$, *де* $\|g_n\|_\infty=\max\limits_{x,\xi\in[0,1]}|g_n(x,\xi)|$, $\|\sigma\|_v=\{\sigma(x);0,1\}$ *– повна варіація функції* $\sigma(x)$ *на відрізку* $[0,1]$. *Тоді FD-метод для задачі* (1), (26) *експоненціально збігається, а його точність характеризується такими оцінками:*

$$\|u_n-\overset{m}{u}_n\|_\infty\le\frac{r_n^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}(1-r_n)},\qquad |\lambda_n-\overset{m}{\lambda}_n|\le\frac{\sqrt{2}\,\|\sigma\|_v\,r_n^m}{(m+1)\sqrt{\pi m}(1-r_n)}. \quad (27)$$

Тут $\|u_n^{(j)}\|_\infty=\max\limits_{x\in[0,1]}|u_n^{(j)}(x)|$.

Загальна схема FD-методу з $\overline{q}(x)\not\equiv 0$**.** Якщо умова теореми 3.4 не виконується, то треба застосувати FD-метод у загальній постановці. З цією метою «занурюємо» задачу (1), (26) у більш загальну:

$$\frac{\partial^2u(x,t)}{\partial x^2}+\left\{\lambda(t)-\sum_{p=1}^{k}\gamma_p\delta(x-x_p)-\hat{\psi}'(x)-t\left[\psi'(x)-\hat{\psi}'(x)\right]\right\}u(x,t)=0,\ x\in(0,1), \quad (28)$$

$$u(0,t)=u(1,t)=0,$$

де $\psi(x)$ – абсолютно неперервна функція, $\hat{\psi}(x)$ – її кусково-лінійне наближення

$$\hat{\psi}(x)=\psi(x_p)\frac{x_{p+1}-x}{x_{p+1}-x_p}+\psi(x_{p+1})\frac{x-x_p}{x_{p+1}-x_p},\quad \hat{\psi}'(x)=\psi_{x,p}=\frac{\psi(x_{p+1})-\psi(x_p)}{x_{p+1}-x_p}, \quad (29)$$

$$x\in[x_p,x_{p+1}],\quad p=\overline{0,k},\quad 0=x_0<x_1<\ldots<x_{k+1}=1. \quad (30)$$

Розв'язок задачі (28) шукаємо у вигляді степеневих рядів $u_n(x,t)=\sum_{j=0}^{\infty}u_n^{(j)}(x)t^j$, $\lambda_n(t)=\sum_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)}t^j$, які при виконанні умов теореми 3.5 (див. нижче) є абсолютно збіжними при $|t|\le 1$, тоді при $t=1$ одержуємо розв'язок задачі (1), (26) у вигляді $u_n(x)=u_n(x,1)=\sum_{j=0}^{\infty}u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n=\lambda_n(1)=\sum_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)}$. Підставивши формально ряди для $u_n(x,t)$, $\lambda_n(t)$ в (28) і прирівнявши коефіцієнти при однакових степенях t, отримуємо рекурентну послідовність крайових задач, яку з врахуванням умов спряження у точках сингулярностей x_p, $p=\overline{1,k}$ перепишемо в еквівалентній формі, звідки знаходимо члени рядів $u_n(x)$, λ_n:

$$\frac{d^2u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2}+\mu_n^{(0)}u_n^{(j+1)}(x)=-F_n^{(j+1)}(x),\ x\in\bigcup_{p=0}^{k}(x_p,x_{p+1}),\quad u_n^{(j+1)}(0)=u_n^{(j+1)}(1)=0, \tag{31}$$

$$F_n^{(j+1)}(x)\equiv\sum_{l=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-l)}u_n^{(l)}(x)-\left[\psi'(x)-\hat{\psi}'(x)\right]u_n^{(j)}(x),$$

$$\mu_n^{(0)}(x)=\mu_{n,p}^{(0)},\ \ x\in(x_p,x_{p+1}),\ \ p=\overline{0,k}, \tag{32}$$

$$\left[u_n^{(j+1)}(x)\right]_{x=x_p}=0,\ \left[\frac{du_n^{(j+1)}(x)}{dx}\right]_{x=x_p}=\gamma_p u_n^{(j+1)}(x_p),\ p=\overline{1,k}\ \text{(умови спряження)}, \tag{33}$$

$$\lambda_n^{(j+1)}=\int_0^1 u_n^{(0)}(x)\left[\psi'(x)-\hat{\psi}'(x)\right]u_n^{(j)}(x)dx,\quad \int_0^1 u_n^{(0)}(x)u_n^{(j+1)}(x)dx=0,\ \ j=0,1,\ldots. \tag{34}$$

Розв'язок (31)–(33) на проміжках $[x_p,x_{p+1})$, $p=\overline{0,k-1}$ та $[x_k,1]$ має вигляд:

$$u_n^{(j+1)}(x)=A_{p,n}^{(j+1)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}(x-x_p)\right)+B_{p,n}^{(j+1)}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}(x-x_p)\right)-$$

$$-\int_{x_p}^{x}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}(x-\xi)\right)\Big/\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}\cdot F_n^{(j+1)}(\xi)d\xi,\quad x\in[x_p,x_{p+1}),\ p=\overline{0,k-1},\ B_{0,n}^{(j+1)}=0, \tag{35}$$

$$u_n^{(j+1)}(x)=A_{k,n}^{(j+1)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}(1-x)\right)+\int_x^1\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}(x-\xi)\right)\Big/\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,F_n^{(j+1)}(\xi)d\xi,\ x\in[x_k,1].$$

При $t=0$ із (28) одержуємо *базову задачу*:

$$\frac{\partial^2u_n^{(0)}(x)}{\partial x^2}+\left\{\lambda_n^{(0)}-\hat{\psi}'(x)\right\}u_n^{(0)}(x)=0,\quad x\in\bigcup_{p=0}^{k}(x_p,x_{p+1}),\qquad u_n^{(0)}(0)=u_n^{(0)}(1)=0, \tag{36}$$

$$\left.\begin{aligned}&\left[u_n^{(0)}(x)\right]_{x=x_p}=u_n^{(0)}(x_p+0)-u_n^{(0)}(x_p-0)=0,\\&\left[\frac{du_n^{(0)}(x)}{dx}\right]_{x=x_p}=\frac{du_n^{(0)}(x_p+0)}{dx}-\frac{du_n^{(0)}(x_p-0)}{dx}=\gamma_p u_n^{(0)}(x_p),\quad p=\overline{1,k},\end{aligned}\right\}\ \text{(умови спряження)} \tag{37}$$

розв'язками якої на проміжках $[x_p,x_{p+1})$, $p=\overline{0,k-1}$ та $[x_k,1]$ є вирази

$$u_n^{(0)}(x)=A_{p,n}^{(0)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}(x-x_p)\right)+B_{p,n}^{(0)}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}(x-x_p)\right),\ x\in[x_p,x_{p+1}),\ p=\overline{0,k-1}, \tag{38}$$

$$u_n^{(0)}(x)=A_{k,n}^{(0)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}(1-x)\right),\quad x\in[x_k,1],$$

де $B_{0,n}^{(0)}=0$, $\mu_{n,p}^{(0)}=\lambda_n^{(0)}-\psi_{x,p}$, $p=\overline{0,k}$. Сталі $A_{p,n}^{(0)}$, $p=\overline{0,k}$, $B_{p,n}^{(0)}$, $p=\overline{1,k-1}$ визначаються

із однорідної системи $D_n\vec{Y}_n^{(0)}=\vec{0}$, яку отримано в результаті підстановки виразів (38) в умови спряження (37). Тут $\vec{Y}_n^{(0)}$ – вектор-стовпець невідомих $A_{p,n}^{(0)}$ і $B_{p,n}^{(0)}$, D_n – матриця системи. Кожне власне значення задачі (36), (37) є нулем визначника $\Delta(\lambda_n^{(0)})=\det(D_n)$ кратності 1, відмінним від $\psi_{x,p}$, $p=\overline{0,k}$, причому $\lambda_1^{(0)}<\lambda_2^{(0)}<\ldots<\lambda_n^{(0)}<\ldots$ Розв'язок системи $\vec{Y}_n^{(0)}$ для конкретного значення $\lambda_n^{(0)}$ знаходиться з точністю до сталої, яка визначається з умови нормування $\|u_n^{(0)}\|_0=\sqrt{\int_0^1[u_n^{(0)}(x)]^2dx}=1$. Послідовність власних функцій $\{u_n^{(0)}(x)\}_{n=1}^{\infty}$ утворює повну ортонормовану систему в $L_2[0,1]$.

В результаті підстановки виразів (35) в умови спряження (33) отримаємо систему $D_n\vec{Y}_n^{(j+1)}=\vec{H}_n^{(j+1)}$, $j=0,1$, де $\vec{H}_n^{(j+1)}$ – вектор-стовпець відомих правих частин, $\vec{Y}_n^{(j+1)}$ – вектор-стовпець невідомих $A_{p,n}^{(j+1)}$ і $B_{p,n}^{(j+1)}$, а матриця цієї системи лінійних алгебраїчних рівнянь D_n є виродженою. Тому необхідною і достатньою умовою її розв'язності буде $\vec{Z}_n^T\vec{H}_n^{(j+1)}=0$, яка є еквівалентною інтегральній умові розв'язності задач (31): $\int_0^1 F_n^{(j+1)}(x)\,u_n^{(0)}(x)\,dx=0$. Тут $\vec{Z}_n^T$ – власний вектор-рядок, що відповідає нульовому власному значенню матриці D_n, тобто $\vec{Z}_n^TD_n=\vec{0}$.

Введемо позначення

$$M_n=\max\left\{(\lambda_n^{(0)}-\lambda_{n-1}^{(0)})^{-1},(\lambda_{n+1}^{(0)}-\lambda_n^{(0)})^{-1}\right\},\quad \omega(\psi')=\max_{0\le p\le k}\max_{x\in[x_p,x_{p+1}]}\left|\int_{x_p}^{x_{p+1}}\frac{\psi'(x)-\psi'(t)}{x_{p+1}-x_p}dt\right|.$$

Теорема 3.5. *Нехай* $\sigma(x)\in BV_c[0,1]$ *і виконується умова* $\hat{r}_n=4M_n\omega(\psi')<1$. *Тоді FD-метод для задачі* (1), (26) *експоненціально збігається і справедливими є такі оцінки його точності:*

$$\|u_n-\overset{m}{u}_n\|\le\frac{\hat{r}_n^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}(1-\hat{r}_n)},\qquad |\lambda_n-\overset{m}{\lambda}_n|\le\frac{\omega(\psi')\hat{r}_n^m}{(m+1)\sqrt{\pi m}(1-\hat{r}_n)}. \tag{39}$$

Викладене вище є основою нової алгоритмічної реалізації FD-методу для задачі (1), (26) та є посиленням результатів роботи Макарова В. Л., Россохатої Н. О., Драгунова Д. В. (J. Comput. Appl. Math. – 2013. – № 250. – P. 39-57) у лінійному випадку для задачі (1), (26) з потенціалом, що має єдину сингулярність ($k=1$).

У **четвертому розділі** обґрунтовано нову схему алгоритму FD-методу для задач на власні значення в абстрактному формулюванні для самоспряжених операторів з дискретним спектром, що діють у гільбертовому просторі, у випадку базової задачі з власними значеннями довільної (скінченної) кратності. Результати даного розділу є узагальненням ряду робіт щодо FD-методу Макарова В. Л. та його учнів (2000, 2005, 2009, 2010), в яких на етапі базової задачі виникають двократні власні значення, що зумовило модифікацію традиційного алгоритму FD-методу.

Абстрактна постановка задачі

Розглядається задача на власні значення для суми лінійних самоспряжених операторів A і B ($A=A^*$, $B=B^*$) з областями визначення $D(A)$ і $D(B)$ відповідно

та дискретним спектром у гільбертовому просторі H із скалярним добутком $(\cdot,\cdot)$

$$(A+B)u-\lambda u=\theta, \tag{40}$$

де $\theta-$ нульовий елемент. При цьому $\overline{D(A)}=H$, $D(A)\subset D(B)$ і оператор B *підпорядкований* оператору A, тобто для деякої сталої $c>0$ і $\forall v\in D(A)$: $\|Bv\|\le c\|Av\|$. Нехай $\overline{B}=\overline{B}^*$, $D(\overline{B})=D(B)$ і апроксимуємо оператор B оператором $\overline{B}$ так, щоб *базова задача*

$$(A+\overline{B})u^{(0)}-\lambda^{(0)}u^{(0)}=\theta \tag{41}$$

була «простішою», ніж задача (40). Власні значення (41) впорядковані в неспадному порядку: $0\le\lambda_1^{(0)}\le\ldots\le\lambda_n^{(0)}\le\ldots$, де кожне власне значення повторюється відповідну до його кратності кількість разів. Відповідні власні вектори утворюють повну ортонормальну систему $\{u_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$. Згідно з ідеєю методу гомотопії, на якому базується FD-метод, «занурюємо» (40), (41) у сімейство параметричних задач

$$(A+W(t))u_n(t)-\lambda_n(t)u_n(t)=\theta,\quad t\in[0,1],\quad W(t)=\overline{B}+t\varphi(B),\quad \varphi(B)=B-\overline{B}. \tag{42}$$

Очевидно, що $u_n(0)=u_n^{(0)}$, $u_n(1)=u_n$. Розв'язок (42) шукаємо у вигляді рядів $\lambda_n(t)=\sum\limits_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)}t^j$, $u_n(t)=\sum\limits_{j=0}^{\infty}u_n^{(j)}t^j$, де формально $\lambda_n^{(j)}=\dfrac{1}{j!}\dfrac{d^j\lambda_n(t)}{dt^j}\Big|_{t=0}$, $u_n^{(j)}=\dfrac{1}{j!}\dfrac{d^ju_n(t)}{dt^j}\Big|_{t=0}$.

Для $t=1$ отримуємо $\lambda_n=\sum_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)}$, $u_n=\sum_{j=0}^{\infty}u_n^{(j)}$ при умові, що ряди $\lambda_n(t)$, $u_n(t)$ збігаються для всіх $t\in[0,1]$. *Наближеннями рангу* m до власних значень і власних векторів задачі (42) є зрізані ряди (2). Підставивши $\lambda_n(t)$, $u_n(t)$ в (42) та прирівнявши коефіцієнти при однакових степенях t, отримаємо рекурентні рівняння для визначення $\lambda_n^{(j+1)}$, $u_n^{(j+1)}$:

$$(A+\overline{B})u_n^{(j+1)}-\lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}=\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}u_n^{(p)}-\varphi(B)u_n^{(j)}\equiv F_n^{(j+1)},\quad j=0,1,\ldots, \tag{43}$$

для яких початковими даними $\lambda_n^{(0)}$, $u_n^{(0)}$ є розв'язок базової задачі (41).

Алгоритм FD-методу

Нехай $\lambda_n^{(0)}$ є k-кратним власним значенням, $k\ge2$ і йому відповідає ортонормальна система власних векторів $e_{n,p}$, $p=\overline{1,k}$, тобто $(e_{n,p},e_{n,s})=\delta_{p,s}$, $p,s=\overline{1,k}$, де $\delta_{p,s}$ – символ Кронекера. Тут і надалі індекс n часто опускатиметься, якщо це не буде призводити до непорозумінь. Загальний розв'язок задачі (41) має вигляд $u^{(0)}=\sum_{p=1}^{k}C_p^{(0)}e_p$, де сталі $C_p^{(0)}$, $p=\overline{1,k}$ будуть визначені нижче.

Позначимо через Γ^+ псевдообернений оператор Мура-Пенроуза до оператора $A+\overline{B}+\lambda^{(0)}E$ з тотожним оператором E. Тоді при виконанні умов розв'язності $(F^{(j+1)},e_m)=0$, $m=\overline{1,k}$ розв'язок рівняння (43) можна записати у вигляді

$$u^{(j+1)}=\sum_{p=1}^{k}C_p^{(j+1)}e_p+\hat{u}^{(j+1)},\qquad \hat{u}^{(j+1)}=\Gamma^+\Big(\sum_{s=1}^{j}\lambda^{(j+1-s)}u^{(s)}-\varphi(B)u^{(j)}\Big). \tag{44}$$

З вимоги ортогональності $\left(u^{(j+1)},u^{(0)}\right)=0$, $j=0,1,\ldots$ випливає умова

$$\left(\vec{C}^{(j+1)},\vec{C}^{(0)}\right)_R=\sum\nolimits_{p=1}^{k}C_p^{(j+1)}C_p^{(0)}=0,\quad j=0,1,..., \tag{45}$$

яка накладається на вектори $\vec{C}^{(j+1)}=|[C_p^{(j+1)}]|_{p=\overline{1,k}}$, $j=0,1,...$ Тут $(\cdot,\cdot)_R$ – скалярний добуток в R^k, $\vec{C}^{(0)}=|[C_p^{(0)}]|_{p=\overline{1,k}}$. Отримуємо систему рівнянь

$$\sum\nolimits_{s=1}^{k}C_s^{(j)}\left((\varphi(B)-\lambda^{(1)}E)e_s,e_m\right)=-\left(\varphi(B)\hat{u}^{(j)},e_m\right)+\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda^{(j+1-p)}C_m^{(p)},\ \ m=\overline{1,k}, \tag{46}$$

де $E=|[\delta_{s,t}]|_{s,t=\overline{1,k}}$ – одинична матриця. Помножимо систему (46) на $C_m^{(0)}$ і підсумуємо за m від 1 до k, в результаті одержимо одну з основних формул FD-методу

$$\lambda^{(j+1)}=\left(\varphi(B)\,u^{(j)},u^{(0)}\right)=\left(\varphi(B)\hat{u}^{(j)},u^{(0)}\right)=\left(\hat{u}^{(j)},\varphi(B)\,u^{(0)}\right). \tag{47}$$

Нехай $\lambda_\nu^{(1)}$, $\nu=\overline{1,r}$ є μ_ν-кратним власним значенням матриці $D^{(1)}=|[d_{p,m}^{(1)}]|_{p,m=\overline{1,k}}$, $d_{p,m}^{(1)}=\left(\varphi(B)\,e_p,e_m\right)$, причому $\sum_{\nu=1}^{r}\mu_\nu=k$, $\lambda_1^{(1)}<...<\lambda_\nu^{(1)}<...<\lambda_r^{(1)}$. Введемо матрицю $D^{[\nu]}=|[d_{p,m}^{[\nu]}]|_{p,m=\overline{1,k}}$, $d_{p,m}^{[\nu]}=\left((\varphi(B)-\lambda_\nu^{(1)}E)e_p,e_m\right)$, $\nu=\overline{1,r}$ та запишемо систему (46) у векторно-матричному вигляді (з $j=0,1,...$):

$$D^{[\nu]}\vec{C}^{(j)}=\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda^{(j+1-p)}\vec{C}^{(p)}-\left\langle\varphi(B)\hat{u}^{(j)},\vec{e}\right\rangle=\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda^{(j+1-p)}\vec{C}^{(p)}-\left\langle\hat{u}^{(j)},\varphi(B)\vec{e}\right\rangle, \tag{48}$$

де $\vec{e}=[e_1,e_2,...,e_k]^T$, $\langle v,\vec{e}\rangle=\left[\left(v,e_1\right),\left(v,e_2\right),...,\left(v,e_k\right)\right]^T$. Із (50) при $j=0$ та умови $\hat{u}^{(0)}=0$ одержуємо $D^{[\nu]}\vec{C}^{(0)}=\vec{0}$. Нехай розв'язками цієї системи при $\lambda^{(1)}=\lambda_\nu^{(1)}$, $\nu=\overline{1,r}$ буде ортонормальна система векторів $\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}=|[C_{\nu,i,m}^{(0)}]|_{m=\overline{1,k}}$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, тобто $\left(\vec{C}_{\nu,i}^{(0)},\vec{C}_{\nu,s}^{(0)}\right)_R=\delta_{i,s}$, $\|\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}\|_R=1$, $i,s=\overline{1,\mu_\nu}$. Система (48) з $j=0,1,...$ перепишеться як

$$D^{[\nu]}\vec{C}_{\nu,i}^{(j)}=\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)}-\left\langle\varphi(B)\hat{u}_{\nu,i}^{(j)},\vec{e}\right\rangle=\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)}-\left\langle\hat{u}_{\nu,i}^{(j)},\varphi(B)\vec{e}\right\rangle,\ i=\overline{1,\mu_\nu}. \tag{49}$$

Із (49) слідує, що права частина системи (49) є ортогональною до всіх векторів $\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, тобто виконуються необхідні й достатні умови її розв'язності. В якості розв'язку системи (49), а він є неоднозначним, візьмемо такий:

$$\begin{aligned}\vec{C}_{\nu,i}^{(j)}&=(D^{[\nu]})^{+}\left(\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)}-\left\langle\varphi(B)\hat{u}_{\nu,i}^{(j)},\vec{e}\right\rangle\right)=\\&=(D^{[\nu]})^{+}\left(\sum\nolimits_{p=0}^{j-1}\lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)}-\left\langle\hat{u}_{\nu,i}^{(j)},\varphi(B)\vec{e}\right\rangle\right),\ i=\overline{1,\mu_\nu},\ j=0,1,...,\end{aligned} \tag{50}$$

де $(D^{[\nu]})^{+}$ – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $D^{[\nu]}$. Неважко переконатись, що $(D^{[\nu]})^{+}\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}=\vec{0}$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, а отже, для розв'язку системи (48) у формі (50) будуть виконуватись умови ортогональності (45).

Збіжність FD-методу

Ввівши позначення

$$\left|\left\langle\vec{b}\right\rangle\right|=\left\{\sum\nolimits_{p=1}^{k}\|b_p\|^2\right\}^{1/2},\quad \|\vec{a}\|_R=\left(\vec{a},\vec{a}\right)_R,\quad \|\tilde{u}_{\nu,i}^{(s)}\|=\begin{cases}\|\hat{u}_{\nu,i}^{(s)}\|, s>0,\\ 1, s=0,\end{cases} \tag{51}$$

$$M_{\nu,i}=M_{n,\nu,i}=\max\left\{\|\Gamma_n^{+}\|\cdot\|\varphi(B)u_{n,\nu,i}^{(0)}\|,\|\Gamma_n^{+}\varphi(B)\|\right\},$$

за допомогою методу твірних функцій знаходимо радіус збіжності $z_{\max}$

мажорантних рядів: $f(z)=\sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar{U}_j$, $g(z)=\sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar{S}_j$, де $U_j=(M_{\nu,i})^{-j}\,\|\tilde{u}_{\nu,i}^{(j)}\|\le \bar{U}_j$, $S_j=(M_{\nu,i})^{-j}\,\|\vec{C}_{\nu,i}^{(j)}\|_R \le \bar{S}_j$, $j=1,2,...$, $\bar{U}_0=U_0=1$, $\bar{S}_0=S_0=1$. Тоді існують такі сталі L, $\underline{L}$, ε, $\underline{\varepsilon}>0$, що $(z_{\max})^j \bar{U}_j \le L/j^{1+\varepsilon}$, $(z_{\max})^j \bar{S}_j \le \underline{L}/j^{1+\underline{\varepsilon}}$, $j=1,2,...$ Звідси слідує

Теорема 4.1. *Нехай виконується умова* $q_{n,\nu,i}=M_{n,\nu,i}/z_{\max}<1$. *Тоді FD-метод для задачі* (40) *є суперекспоненціально збіжним і справедливими є оцінки його точності*

$$\|u_{n,\nu,i}-\overset{m}{u}_{n,\nu,i}\|\le \frac{2\bar{L}}{(m+1)^{1+\bar{\varepsilon}}}\frac{[q_{n,\nu,i}]^{m+1}}{1-q_{n,\nu,i}},\quad |\lambda_{n,\nu,i}-\overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i}|\le \frac{L\,\|\varphi(B)u_{n,\nu,i}^{(0)}\|}{(m+1)^{1+\varepsilon}}\frac{[q_{n,\nu,i}]^{m}}{1-q_{n,\nu,i}}. \quad (52)$$

Якщо $q_{n,\nu,i}=1$, *то замість оцінок* (52) *будуть наступні:*

$$\|u_{n,\nu,i}-\overset{m}{u}_{n,\nu,i}\|\le \frac{2\bar{L}}{\bar{\varepsilon}m^{\bar{\varepsilon}}},\qquad |\lambda_{n,\nu,i}-\overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i}|\le \frac{\bar{L}\,\|\varphi(B)u_{n,\nu,i}^{(0)}\|}{\varepsilon m^{\varepsilon}}. \quad (53)$$

Тут $\bar{L}=\max(L,\underline{L})$, $\bar{\varepsilon}=\min(\varepsilon,\underline{\varepsilon})$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, $\nu=\overline{1,r}$, $\sum_{\nu=1}^{r}\mu_\nu=k$.

Особливий випадок $\left(\varphi(B)e_p,e_m\right)=0\ \ \forall p,m=\overline{1,k}$

Припускаючи, що для оператора $\Pi^-(B)$, який є добутком самоспряжених операторів $\varphi(B)$ і Γ^+ з непарною кількістю входжень оператора $\varphi(B)$, і $\forall p,m=\overline{1,k}$, $s=0,1,...$ виконуються співвідношення:

$$\left(\Pi^-(B)e_p,e_m\right)=0,\ \left((\varphi(B)\Gamma^+)^{2s}\varphi(B)e_p,e_m\right)=0,\ \left((\varphi(B)\Gamma^+)^{2s}\Gamma^+\varphi(B)e_p,e_m\right)=0, \quad (54)$$

доведено теорему, яка визначає властивості FD-методу в цьому випадку.

Теорема 4.2. *Нехай виконується перша умова з* (54), *тоді вірними є співвідношення:*

$$\vec{C}^{(2j-1)}=\vec{0},\quad \lambda^{(2j-1)}=0; \quad (55)$$

$$\left(\Pi^+\hat{u}^{(2j-1)},e_m\right)=0\ \ \forall\,\Pi^+\in\Omega^+;\ \left(\Pi^-\hat{u}^{(2j)},e_m\right)=0\ \ \forall\,\Pi^-\in\Omega^-;\ \ m=\overline{1,k}, \quad (56)$$

де Ω^+, Ω^- – *множини добутків операторів* $\varphi(B)$ і Γ^+ *з парним і непарним входженням* $\varphi(B)$ *відповідно,* $j=1,2,...$

На основі теореми 4.2 побудовано новий алгоритм FD-методу для задачі (40) в особливому випадку, коли $\left(\varphi(B)e_p,e_m\right)=0\ \ \forall p,m=\overline{1,k}$. Наведемо основні формули цього алгоритму:

$$\hat{u}^{(2j-1)}=\Gamma^+\left(\sum_{s=1}^{j-1}\lambda^{(2j-2s)}\hat{u}^{(2s-1)}-\varphi(B)u^{(2j-2)}\right),\ \hat{u}^{(2j)}=\Gamma^+\left(\sum_{s=1}^{j-1}\lambda^{(2j-2s)}\hat{u}^{(2s)}-\varphi(B)\hat{u}^{(2j-1)}\right),$$

$$\vec{C}^{(2j)}=(D^{[2,\nu]})^+\left(\sum_{s=1}^{j-1}\lambda^{(2j+2-2s)}\left[\left\langle\varphi(B)\Gamma^+\hat{u}^{(2s-1)},\vec{e}-u^{(0)}\vec{C}^{(0)}\right\rangle-\vec{C}^{(2s)}\right]+\right.$$

$$\left.+\lambda^{(2)}\left\langle\varphi(B)\Gamma^+\hat{u}^{(2j-1)},\vec{e}-u^{(0)}\vec{C}^{(0)}\right\rangle+\left\langle\varphi(B)\Gamma^+\varphi(B)\hat{u}^{(2j)},u^{(0)}\vec{C}^{(0)}-\vec{e}\right\rangle\right), \quad (57)$$

$$\lambda^{(2j)}=\left(\varphi(B)\hat{u}^{(2j-1)},u^{(0)}\right),$$

$$\lambda^{(2)}=\lambda_{n,\nu}^{(2)},\ \lambda^{(2j)}=\lambda_{n,\nu,i}^{(2j)},\ \hat{u}^{(j)}=\hat{u}_{n,\nu,i}^{(j)},\ \vec{C}^{(2j-2)}=\vec{C}_{n,\nu,i}^{(2j-2)},\ \ u^{(0)}=u_{n,\nu,i}^{(0)},\ j=1,2,...,$$

$$\hat{u}^{(0)}=0,\quad \|u_{n,\nu,i}^{(0)}\|=1,\quad \|\vec{C}_{n,\nu,i}^{(0)}\|_R=1,\ \ i=\overline{1,\mu_\nu},\ \ \nu=\overline{1,r},\ \ \sum_{\nu=1}^{r}\mu_\nu=k,$$

де $(D^{[2,\nu]})^+$ – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $D^{[2,\nu]}=\lambda_\nu^{(2)}E+D^{(2)}$,

$\lambda_\nu^{(2)}$, $\nu=\overline{1,r}$ є μ_ν-кратним власним значенням матриці $D^{(2)}=\|[d_{p,m}^{(2)}]\|_{p,m=\overline{1,k}}$, $d_{p,m}^{(2)}=-\left(\varphi(B)\Gamma^{+}\varphi(B)e_p,e_m\right)$, причому, $\lambda_1^{(2)}<...<\lambda_\nu^{(2)}<...<\lambda_r^{(2)}$.

Збіжність FD-методу в особливому випадку

За допомогою методу твірних функцій для мажорантних рядів $f(z)=\sum_{j=0}^{\infty}z^j\overline{u}_{2j+1}$, $g(z)=\sum_{j=0}^{\infty}z^j\overline{u}_{2j+2}$, $w(z)=\sum_{j=0}^{\infty}z^j\overline{c}_{2j}$ знаходимо радіус збіжності $z_{\max}$. Тут використані позначення (51) та $c_{2j}=(M_{\nu,i})^{-2j-1}\|\vec{C}^{(2j)}\|_R\le\overline{c}_{2j}$, $u_j=(M_{\nu,i})^{-j}\|\hat{u}^{(j)}\|\le\overline{u}_j$, $j=1,2,...$, $c_0=\overline{c}_0=1$, $u_0=\overline{u}_0=0$. Тоді існують такі сталі $L_i>0$, $\varepsilon_i>0$, $i=1,2,3$, що при $j=1,2,...$ виконуються нерівності $(z_{\max})^j\overline{u}_{2j-1}\le L_1/j^{1+\varepsilon_1}$, $(z_{\max})^j\overline{u}_{2j}\le L_2/j^{1+\varepsilon_2}$, $(z_{\max})^j\overline{c}_{2j}\le L_3/j^{1+\varepsilon_3}$. Звідси слідує

Теорема 4.3. *Нехай* $\left(\varphi(B)\,e_{n,p},e_{n,m}\right)=0\ \forall p,m=\overline{1,k}$ *та виконується умова* $q_{n,\nu,i}=M_{n,\nu,i}/z_{\max}<1$. *Тоді FD-метод для задачі* (40) *є суперекспоненціально збіжним і справедливими є такі оцінки його точності:*

$$\|u_{n,\nu,i}-\overset{m}{u}_{n,\nu,i}\|\le\frac{2\overline{L}}{(m+1)^{1+\varepsilon}}\frac{[q_{n,\nu,i}]^{m+1}}{1-q_{n,\nu,i}},\quad |\lambda_{n,\nu,i}-\overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i}|\le\frac{\overline{L}\,\|\varphi(B)u_{n,\nu,i}^{(0)}\|}{(m+1)^{1+\varepsilon}}\frac{[q_{n,\nu,i}]^m}{1-q_{n,\nu,i}}. \qquad (58)$$

Якщо $q_{n,\nu,i}=1$, *то замість оцінок* (58) *будуть наступні:*

$$\|u_{n,\nu,i}-\overset{m}{u}_{n,\nu,i}\|\le\frac{2\overline{L}}{\varepsilon m^{\varepsilon}},\quad |\lambda_{n,\nu,i}-\overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i}|\le\frac{\overline{L}\,\|\varphi(B)u_{n,\nu,i}^{(0)}\|}{\varepsilon m^{\varepsilon}}. \qquad (59)$$

Тут $\overline{L}=\max(L_1,L_2,L_3)$, $\varepsilon=\min(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3)$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, $\nu=\overline{1,r}$, $\sum_{\nu=1}^{r}\mu_\nu=k$.

Ефективність розробленого алгоритму FD-методу в особливому випадку на основі отриманих теоретичних результатів успішно проілюстровано на прикладі диференціально-матричної задачі Штурма-Ліувілля другого порядку з рівнянням Шрьодінгера на скінченному інтервалі із симетричним матричним потенціалом розмірності 3, для якої кожне власне значення базової задачі є трикратним.

У **п'ятому розділі** обґрунтовано нову схему алгоритму FD-методу для задач на власні значення в абстрактному формулюванні для лінійних операторів з дискретним спектром, що діють у банаховому просторі, у випадку базової задачі з власними значеннями довільної (скінченної) кратності.

Абстрактна постановка задачі

Розглядається задача на власні значення в операторному формулюванні з рівнянням (40) для суми лінійних операторів A і B з дискретним спектром у банаховому просторі X, білінійним відношенням $(\cdot,\cdot)$ та дуальним банаховим простором X^* лінійних функціоналів на X.

Алгоритм FD-методу

Ідеологія побудови загальної схеми алгоритму FD-методу, який базується на методі гомотопії, є такою ж, як у випадку гільбертового простору у четвертому розділі (див. (41)–(43)).

Нехай $\lambda_n^{(0)}$ представлено k_n разів відповідно до його кратності k_n у впорядкуванні $0\le\lambda_1^{(0)}\le...\le\lambda_n^{(0)}\le...$ Власні вектори $e_{n,p}$, $p=\overline{1,k_n}$, $n=1,2,...,$ які

відповідають $\lambda_n^{(0)}$, утворюють базис в X. Позначимо через $f_{n,p}$, $p=\overline{1,k_n}$, $n=1,2,...$ відповідну біортогональну систему функціоналів в X^* до $e_{n,p}$, $p=\overline{1,k_n}$, тобто $\left(e_{m,i},f_{n,j}\right)=\delta_{n,j}\delta_{m,i}$, $n,m=1,2,...$, $i=1,2,...,k_m$, $j=1,2,...,k_n$, яка утворює базис в X^*. Тут $\delta_{n,j}$ – символ Кронекера. Загальний розв'язок базової задачі (41) має вигляд $u_n^{(0)}=\sum_{p=1}^{k_n}C_{n,p}^{(0)}e_{n,p}$, де сталі $C_{n,p}^{(0)}$ $p=\overline{1,k_n}$ будуть визначені нижче. Надалі індекс n часто опускатиметься там, де це не буде призводити до непорозумінь.

Позначимо через Γ_n^+ псевдообернений оператор Мура-Пенроуза до сингулярного оператора $A+\overline{B}+\lambda_n^{(0)}E$ з тотожним оператором E. При виконанні умов розв'язності $\left(F_n^{(j+1)},f_{n,p}\right)=0$, $p=\overline{1,k_n}$ розв'язок рівняння (43) можна записати у вигляді (44). Також маємо систему рівнянь

$$\sum_{s=1}^{k_n}C_s^{(j)}\left(\left(\varphi(B)-\lambda_n^{(1)}E\right)e_{n,s},f_{n,m}\right)=-\left(\varphi(B)\hat{u}_n^{(j)},f_{n,m}\right)+\sum_{p=0}^{j-1}\lambda_n^{(j+1-p)}C_m^{(p)},\quad m=\overline{1,k_n},\quad (60)$$

де $\lambda_n^{(1)}$ – одне з власних значень $\lambda_n^{(1)}=\lambda_{n,i}^{(1)}$, $i=\overline{1,k_n}$ матриці $[(\varphi(B)e_{n,s},f_{n,m})]_{s,\,m=\overline{1,k_n}}$. При цьому $\lambda_{n,i}^{(1)}$ відповідають впорядкуванню $\lambda_{n,1}^{(1)}\le\lambda_{n,2}^{(1)}\le...\le\lambda_{n,k_n}^{(1)}$, в яке кожне власне значення входить відповідну до його кратності кількість разів. Ввівши матрицю $D^{[\nu]}=[d_{s,m}^{[\nu]}]_{s,\,m=\overline{1,k_n}}$, $d_{s,m}^{[\nu]}=\left((\varphi(B)-\lambda_{n,\nu}^{(1)}E)e_{n,s},f_{n,m}\right)$, $\nu=\overline{1,k_n}$, перепишемо (60) у векторно-матричній формі

$$D^{[\nu]}\vec{C}^{(j)}=\sum_{p=0}^{j-1}\lambda_n^{(j+1-p)}\vec{C}^{(p)}-\left\langle\varphi(B)\hat{u}^{(j)},\vec{f}\right\rangle,\quad j=0,1,...,\quad (61)$$

де $\vec{f}=[f_1,f_2,...,f_{k_n}]^T$, $\langle v,\vec{f}\rangle=[(v,f_1),(v,f_2),...,(v,f_{k_n})]^T$. Із (61) при $j=0$, враховуючи умову $\hat{u}^{(0)}=0$, отримуємо систему $D^{[\nu]}\vec{C}^{(0)}=\vec{0}$, розв'язками якої є вектори $\vec{C}_i^{(0)}$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, $1\le\mu_\nu<k_n$, $\left(\vec{C}_i^{(0)},\vec{C}_t^{(0)}\right)_R=\delta_{i,t}$, тобто $\lambda_\nu^{(1)}$ є власним значенням матриці $[(\varphi(B)e_{n,s},f_{n,m})]_{s,\,m=\overline{1,k_n}}$ кратності μ_ν, де $(\cdot,\cdot)_R$ є скалярним добутком в R^{k_n}. Нехай коефіцієнти $C_{n,p}^{(j+1)}$, $p=\overline{1,k_n}$ задовольняють умову $\left(u_n^{(j+1)},f_n^{(0)}\right)=0$, де $f_n^{(0)}=\sum_{i=1}^{k_n}C_{n,i}^{(0)}f_{n,i}$ є спряженим елементом до $u_n^{(0)}$. Звідси слідує $\left(\vec{C}_i^{(j+1)},\vec{C}_i^{(0)}\right)_R=\sum_{i=1}^{k_n}C_{n,p}^{(j+1)}C_{n,p}^{(0)}=0$, $j=0,1,...,$ використовуючи яке, помножимо (60) на $C_m^{(0)}$ та підсумуємо за m від 1 до k_n. В результаті одержимо одну з основних формул FD-методу

$$\lambda_n^{(j+1)}=\left(\varphi(B)\hat{u}_n^{(j)},f_n^{(0)}\right).\quad (62)$$

Із (62) видно, що права частина (61) є ортогональною до векторів $\vec{C}_i^{(0)}$, $i=\overline{1,\mu_\nu}$, тобто необхідні і достатні умови її розв'язності виконуються. В якості розв'язку системи (61), а він є неоднозначним, візьмемо такий:

$$\vec{C}_i^{(j)}=(D^{[\nu]})^+\left(\sum_{p=0}^{j-1}\lambda_i^{(j+1-p)}\vec{C}_i^{(p)}-\left\langle\varphi(B)\hat{u}_i^{(j)},\vec{f}\right\rangle\right),\quad (63)$$

де $(D^{[\nu]})^+$ – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $D^{[\nu]}$. Неважко переконатись, що $(D^{[\nu]})^+\vec{C}_i^{(0)}=\vec{0}$, а отже, для розв'язку системи (61) у формі (63)

будуть виконуватись умови ортогональності $\left(\vec{C}_i^{(j+1)}, \vec{C}_i^{(0)}\right)_R = 0, \quad j = 0, 1, \ldots$

Збіжність FD-методу

Ввівши позначення

$$w = \| \varphi(B) \| \cdot \| (D^{[\nu]})^+ \|_R \left(\| f_n^{(0)} \|_* + \left| \left\langle \vec{f} \right\rangle \right| \right), \quad \left| \left\langle \vec{f} \right\rangle \right| = \left(\sum_{s=1}^{k_n} \| f_n^{(0)} \|_*^2 \right)^{1/2}, \quad \| \vec{a} \|_R = \left(\vec{a}, \vec{a} \right)_R, \quad (64)$$

$$M_n = \max \left\{ \| \varphi(B) \| \cdot \| \Gamma_n^+ \| \cdot \| f_n^{(0)} \|_*, \| \Gamma_n^+ \varphi(B) \| k_n \right\}, \quad \tilde{u}_i^{(s)} = [1 - \operatorname{sgn}(s)] u_i^{(0)} + \operatorname{sgn}(s) \hat{u}_i^{(s)},$$

де $\| \cdot \|_*$ – норма в X^*, за допомогою методу твірних функцій доведено наступну теорему 5.1 та зауваження 5.1. Для мажорантного ряду $f(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \tilde{U}_j$ знайдено радіус збіжності $z_{\max}$, де $u_j = \| \tilde{u}_n^{(j)} \| \le U_j = M_n^j \tilde{U}_j$, $j = 0, 1, 2, \ldots$, $u_0 = U_0 = \tilde{U}_0 = \| u_n^{(0)} \|$. Тоді існують такі сталі $L, \varepsilon > 0$, які не залежать від j, n, що $(z_{\max})^j \tilde{U}_j \le L / j^{1+\varepsilon}$, $j = 1, 2, \ldots$ Звідси слідує теорема:

Теорема 5.1. *Нехай виконуються умови*

$$q_n = M_n / z_{\max} < 1, \quad q_n (1 + wL) < 1. \quad (65)$$

Тоді FD-метод є експоненціально збіжним для власних елементів та суперекспоненціально збіжним для власних значень з оцінками його точності

$$\| u_{n,i} - \overset{m}{u}_{n,i} \| \le L [wk_n + 1] \frac{[q_n (1 + wL)]^{m+1}}{1 - q_n (1 + wL)}, \quad | \lambda_{n,i} - \overset{m}{\lambda}_{n,i} | \le \frac{L \| \varphi(B) \| \cdot \| f_n^{(0)} \|_* [q_n]^m}{(m+1)^{1+\varepsilon} (1 - q_n)}, \quad (66)$$

Тут $i = \overline{1, k_n}$.

Зауваження 5.1. *Оцінка в* (66) *для власних елементів може бути покращена. Провівши міркування, подібні до наведених вище, для мажорантного ряду* $g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \tilde{C}_j$ *знайдено радіус збіжності* $z_{1,\max}$, *де* $c_j = \| \vec{C}_n^{(j)} \|_R \le C_j = M_n^j \tilde{C}_j$, $j = 0, 1, 2, \ldots$, $c_0 = C_0 = \tilde{C}_0 = 1$. *Тоді існують такі сталі* $L_1, \varepsilon_1 > 0$, *які не залежать від* j, n, *що* $(z_{1,\max})^j \tilde{C}_j \le L_1 / j^{1+\varepsilon_1}$, $j = 1, 2, \ldots$ *Якщо виконується умова*

$$q_{1,n} = M_n / z_{1,\max} < 1, \quad (67)$$

то справедливою є оцінка

$$\| u_{n,i} - \overset{m}{u}_{n,i} \| \le \overline{L} \frac{[\overline{q}_n]^{m+1}}{(m+1)^{1+\overline{\varepsilon}} (1 - \overline{q}_n)}, \quad i = \overline{1, k_n}, \quad (68)$$

де $\overline{q}_n = \max(q_n, q_{1,n})$, $\overline{\varepsilon} = \min(\varepsilon, \varepsilon_1)$, $\overline{L} = \max(L, L_1)$, *тобто* FD-*метод є суперекспоненціально збіжним як для власних значень, так і для власних елементів.*

Зауваження 5.2. *Контроль за умовами збіжності* (65), (67) *за допомогою* n *та* $\overline{B}$ *відбувається таким чином, щоб* M_n *було достатньо малим. Для фіксованого* n *виконання умов збіжності* (65), (67), *якщо вони не виконуються, можна досягти за рахунок кращого наближення оператора* B, *тобто зменшення* $\| \Gamma_n^+ \varphi(B) \|$.

Застосування FD-методу до диференціальних операторів четвертого порядку. В даному підрозділі на прикладі скалярних задач Штурма-Ліувілля четвертого порядку з різними крайовими умовами, які впливають на кратність власних значень, досліджено властивості запропонованого алгоритму FD-методу.

ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота присвячена розробці, обґрунтуванню та алгоритмізації функціонально-дискретного методу (FD-методу) для спектральних задач типу Штурма-Ліувілля, які можуть мати кратні власні значення як у вихідній постановці, так і в процесі їх розв'язування. При цьому отримано такі *основні результати*:

1. Для задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з крайовими умовами Діріхле та у випадках, коли потенціал є кусково-сталою функцією або коли він належить негативному простору Соболєва $H_2^{-1}(0,1)$, отримано аналітичні оцінки для поправок до власних значень $\lambda_n^{(j)}$ згідно з FD-методом (з $\overline{q}(x) \equiv 0$), які відносно номера власного значення n є непокращуваними за порядком. При цьому у випадку простору $H_2^{-1}(0,1)$ знайдено достатню умову експоненціальної швидкості збіжності FD-методу.

2. Для задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з поліноміальним потенціалом і крайовими умовами Діріхле та Діріхле-Неймана отримано структурні зображення розв'язків $u_n^{(j)}(x)$ відповідних рекурентних задач згідно з FD-методом (з $\overline{q}(x) \equiv 0$). Завдяки цьому здійснено принципово нову алгоритмічну реалізацію FD-методу, яка містить тільки звичайні алгебраїчні операції та не потребує в ході рекурентного процесу розв'язання крайових задач і обчислення інтегралів.

3. Поширено FD-метод на задачі Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з потенціалом, який є похідною від функції обмеженої варіації і містить скінченну лінійну комбінацію дельта-функцій Дірака, та здійснена його алгоритмічна реалізація. Встановлено достатні умови експоненціальної швидкості збіжності розробленого методу.

4. Запропоновано та обґрунтовано нову схему алгоритму FD-методу для задачі на власні значення в абстрактному формулюванні для самоспряжених операторів з дискретним спектром, що діють у гільбертовому просторі, у випадку базової задачі з власними значеннями довільної (скінченної) кратності та здійснено узагальнення на випадок банахового простору. В обох випадках отримано достатні умови суперекспоненціальної швидкості збіжності запропонованих підходів.

Результати дисертації мають як теоретичний, так і практичний характер, та разом із розробленими алгоритмами FD-методу, які успішно проілюстровані на чисельних прикладах, можуть бути використані для високоточного наближеного розв'язання, дослідження та моделювання реальних прикладних проблем, які описуються, наприклад, за допомогою спектральних задач типу Штурма-Ліувілля з рівнянням Шрьодінгера (в т. ч. векторно-матричних) та зі звичайними диференціальними рівняннями вищих порядків.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Макаров В. Л. Нові властивості FD-методу при його застосуваннях до задач Штурма-Ліувілля / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк // Доп. НАН України. – 2014. – № 2. – С. 26–31.
2. Макаров В. Л. Експериментально-аналітичне дослідження властивостей складових FD-методу при його застосуванні до задач Штурма-Ліувілля / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк, І. І. Лазурчак // Зб. праць Ін-ту математики НАН України. – 2013. – Т. 10, № 3. – С. 145–170.
3. Макаров В. Л. Новая реализация FD-метода для случая задачи Штурма-Лиувилля с краевыми условиями Дирихле-Неймана / В. Л. Макаров, Н. Н. Романюк // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. – 2014. – Т. 22, № 1. – С. 98–106.
4. Makarov V. FD-method for solving the Sturm–Liouville problem with potential that is the derivative of a function of bounded variation / V. Makarov, N. Romaniuk, I. Lazurchak. // J. Comp. Appl. Math. – 2014. – Vol. 116, № 2 –P. 68–88.
5. Макаров В. Л. FD-метод для задачі на власні значення з кратними власними значеннями базової задачі / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк, І. І. Лазурчак // Зб. праць Ін-ту математики НАН України. – 2014. – Т. 11, № 4. – С. 239–265.
6. Макаров В. Л. FD-метод для задачі на власні значення в гільбертовому просторі з кратними власними значеннями базової задачі в особливому випадку / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк // Доп. НАН України. – 2015. – № 5. – С. 26–35.
7. Gavrilyuk I. P. Super-exponentially convergent algorithm for an abstract eigenvalue problem with applications to ODEs / I. P. Gavrilyuk, V. L. Makarov, N. M. Romaniuk // Nonl. Osc. – 2015. – Vol. 18, № 3. – С. 332–356.
8. Макаров В. Функціонально-дискретний метод (FD-метод) для диференціально-матричної задачі Штурма-Ліувілля з кратними власними значеннями базової задачі / В. Макаров, І. Гаврилюк, І. Лазурчак, Н. Романюк // Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми механіки та математики», присвячена 95-річчю заснування НАН України, 85-річчю від дня народження академіка НАН України Я. С. Підстригача та 40-річчю створеної ним наукової установи в галузі механіки і математики, 21–25 травня 2013 р., Львів: Матеріали конф. – Т. 3. – С. 35–37.
9. Макаров В. Л. Неочікувана швидкість збіжності наближень FD-методом до власних значень регулярної задачі Штурма-Ліувілля з крайовими умовами Діріхле / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк // VI міжнародна конференція «Обчислювальна та прикладна математика», присвячена пам'яті академіка НАН України І. І. Ляшка, 5-6 вересня 2013р., Київ: Матеріали конференції.– С. 158–161.
10. Макаров В. Л. Нова реалізація FD-методу для випадку задачі Штурма-Ліувілля з крайовими умовами Діріхле-Неймана / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк // Міжнародна математична конференція «Диференціальні рівняння, обчислювальна математика, теорія функцій та математичні методи механіки» до 100-річчя від дня народження члена-кореспондента НАН України Г. М. Положого, 23–24 квітня 2014 р., Київ: Матеріали конференції. – С. 86.
11. Макаров В. Л. Нова алгоритмічна реалізація FD-методу для задачі Штурма-Ліувілля четвертого порядку / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк // Міжнародна конференція молодих математиків, 3–6 червня 2015 р., Київ: Матеріали конференції. – С. 106.

АНОТАЦІЇ

Романюк Н. М. Функціонально-дискретний метод розв'язування спектральних задач з кратними власними значеннями. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.01.07 – обчислювальна математика. Інститут математики НАН України, Київ, 2015.

В дисертаційній роботі розроблено та обґрунтовано функціонально-дискретний метод (FD-метод) для спектральних задач типу Штурма-Ліувілля на скінченному інтервалі, які можуть мати кратні власні значення як у вихідній постановці, так і в процесі їх розв'язування.

Досліджено властивості FD-методу для задач Штурма-Ліувілля з рівняннями Шрьодінгера, потенціали яких належать до різних класів гладкості. У випадках, коли потенціал є кусково-сталою функцією або коли він належить негативному простору Соболєва, отримано аналітичні оцінки для поправок до власних значень, які відносно номера власного значення є непокращуваними за порядком. У випадку потенціалу з негативного простору Соболєва знайдено достатню умову експоненціальної швидкості збіжності FD-методу. У випадку поліноміального потенціалу здійснено нову алгоритмічну реалізацію FD-методу, яка містить тільки звичайні алгебраїчні операції та не потребує в ході рекурентного процесу розв'язання крайових задач і обчислення інтегралів. Поширено FD-метод на задачі з потенціалом, який є похідною від функції обмеженої варіації, та встановлено достатні умови його експоненціальної швидкості збіжності.

Обґрунтовано нову схему алгоритму FD-методу для задач на власні значення в абстрактному формулюванні для самоспряжених операторів з дискретним спектром, що діють у гільбертовому просторі, у випадку базової задачі з власними значеннями довільної (скінченної) кратності та здійснено узагальнення на випадок банахового простору. В обох випадках отримано достатні умови суперекспоненціальної швидкості збіжності запропонованих підходів.

Ключові слова: спектральна задача, задача на власні значення, гільбертів простір, банахів простір, спектр лінійного оператора, звичайні диференціальні рівняння, рівняння Шрьодінгера, задача Штурма-Ліувілля, кратні власні значення, гомотопія, функціонально-дискретний метод, суперекспоненціально збіжний алгоритм.

Романюк Н. М. Функционально-дискретный метод решения спектральных задач с кратными собственными значениями. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – вычислительная математика. Институт математики НАН Украины, Киев, 2015.

В диссертационной работе разработан и обоснован функционально-дискретный метод (FD-метод) для спектральных задач типа Штурма-Лиувилля на конечном интервале. Эти задачи могут иметь кратные собственные значения как в исходной постановке, так и в процессе их решения.

Исследованы свойства FD-метода для задач Штурма-Лиувилля с уравнениями

Шредингера, потенциалы которых принадлежат различным классам гладкости. В случаях, когда потенциал является кусочно-постоянной функцией или когда он принадлежит негативному пространству Соболева, получены аналитические оценки для поправок к собственным значениям, которые относительно номера собственного значения являются неулучшаемыми по порядку. В случае потенциала из негативного пространства Соболева найдено достаточное условие экспоненциальной скорости сходимости FD-метода. В случае полиномиального потенциала осуществлена новая алгоритмическая реализация FD-метода, которая содержит только обычные алгебраические операции, и, кроме этого, для выполнения рекуррентного процесса не нужно решать краевые задачи и вычислять интегралы. FD-метод распространен на задачи с потенциалом, который является производной от функции ограниченной вариации, и установлены достаточные условия экспоненциальной скорости сходимости FD-метода.

Обоснована новая схема алгоритма FD-метода для задач на собственные значения в абстрактной формулировке для самосопряженных операторов с дискретным спектром, действующих в гильбертовом пространстве, в случае базовой задачи с собственными значениями произвольной (конечной) кратности, и выполнено обобщение на случай банахового пространства. В обоих случаях получены достаточные условия суперэкспоненциальной скорости сходимости предложенных подходов.

Ключевые слова: спектральная задача, задача на собственные значения, гильбертово пространство, банахово пространство, спектр линейного оператора, обыкновенные дифференциальные уравнения, уравнение Шредингера, задача Штурма-Лиувилля, кратные собственные значения, гомотопия, функционально-дискретный метод, суперэкспоненциально сходящийся алгоритм.

Romaniuk N. M. Functional-discrete method for the solution of spectral problems with multiple eigenvalues. – Manuscript.

A thesis presented for the Degree of Candidate of Physics and Mathematics in speciality 01.01.07 – computational mathematics. Institute of Mathematics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2015.

We developed and justified a new scheme of the functional discrete method (FD-method) for the spectral problems of Sturm-Liouville type on a finite interval. The scheme is capable of solving problems with multiple eigenvalues as well as the problems where such multiplicity occur during the solution process.

We study the properties of FD-method when applied to the Sturm-Liouville problems for the Schrödinger equation with potentials that belong to the different classes of smoothness and are such that can be exactly implemented within the FD-method's algorithm. For the cases when the potential is piecewise constant or when it belongs to the negative Sobolev space, we derived the analytical estimates on FD-method's corrections to the eigenvalues which are unimprovable with respect to the eigenvalue's index. For such case of the negative Sobolev space we present a sufficient condition for the FD-method's convergence rate to be exponential.

New structural representations of the solutions to the Sturm-Liouville problem for the Schrödinger equations with polynomial potential and boundary conditions of Dirichlet or

Dirichlet-Neumann type are obtained. We present new algorithmic implementation of FD-method for the mentioned class of problems. The advantage of this implementation come from the fact that it relies on the simple algebraic operations only and does not involve the solution of any supplementary boundary problems or integral evaluations unlike the previously known implementations.

We also derive new algorithmic implementation of FD-method for the Sturm-Liouville problems for the Schrödinger equation with the potential being a derivative of the function with bounded variation and containing a finite linear combination of Dirac delta functions, supplied by the Dirichlet boundary conditions. For such case we established the sufficient conditions of the method's exponential convergence rate. These results generalize the results of Vinokurov V. A., Sadovnichy V. A. (2002) on the asymptotic expansion of eigenvalues as well as the results Makarov V. L, Rossokhata N. O., Dragunov D. V. (2013) in the linear case with the potential for a problem that has a single singularity.

A new scheme of the FD-method's algorithm for the eigenvalue problem in the abstract setting is proposed. We study the case when the involving operators act in the Hilbert space, self-adjoint and have the discrete spectrum. The basic problem is allowed to have eigenvalues of arbitrary (finite) multiplicity. We also offer some generalizations to the case when the operators acts in the Banach space. In both cases we received the sufficient conditions of super-exponential converge rate of the proposed approach. These results generalize several works on FD-method by Makarov V. L. and his students (2000, 2005, 2009, 2010), where basic problem is allowed to have double multiplicity only.

Key words: spectral problem, eigenvalue problem, Hilbert space, Banach space, spectrum of linear operator, ordinary differential equations, Schrödinger equation, Sturm-Liouville problem, multiple eigenvalues, homotopy, functional-discrete method, super-exponentially convergent algorithm.

Підписано до друку 19.11.2015 р. Зам. № 1818
Формат 60×90 1/16. Папір офсетний. Друк – різографія.
Наклад 110 прим. Ум. друк. арк. 0,9
Друк «ЦП «КОМПРИНТ», Свідоцтво ДК №4131, від 04.08.2011р.
м. Київ, вул. Предславинська, 28
528-05-42, 067-209-54-30