НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ

На правах рукопису

РОМАНЮК Наталія Миколаївна

УДК 519.624:517.984

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

Спеціальність 01.01.07 — обчислювальна математика

Дисертація
на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник
доктор фізико-математичних наук,
професор, академік НАН України
Макаров Володимир Леонідович

Київ – 2015

ЗМІСТ

ВСТУП

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. Вони описують цілий ряд важливих фізичних явищ, які мають виражений коливний характер та пов'язані з вібрацією і хвильовими процесами (див. [14, 85]). 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 тощо. Вони описані в роботах таких сучасних дослідників, як S. Albeverio [40], M. Belloni [73], Hassan S. Ashour [63] та інших. Несамоспряжені задачі на власні значення виникають в гідродинамічній та в магніто-гідродинамічній теорії стійкості, наприклад, при розгляді задач про стійкість потоків в'язкої рідини (див., напр., [2, с.281, с.651]).

Рівняння типу Штурма-Ліувілля та пов'язані з ними диференціальні оператори, як зазначено в монографії Марченка В. О. [29, 150], завжди були постійним джерелом нових ідей і задач для спектральної теорії операторів і суміжних розділів аналізу. Тут також варто згадати такі монографії, присвячені теорії Штурма-Ліувілля: Коллатц Л. [14], Аткінсон Ф. В. [1], Левітан Б. М. та Саргсян І. С. [142], Pryce J. D. [163], Козлов В. та Мазья В. [129], під ред. Hinton D. та Schaefer P. W. [120], Zettl A. [183], M. A. Al-Gwaiz [49], під ред. Amrein W. O. та інших [55], Atkinson F. V. та Mingarelli A. B. [65].

Для розв'язування задач на власні значення існує велика кількість чисельних методів, які умовно можна поділити на *дискретні, аналітичні* та *чисельно-аналітичні* (*функціонально-дискретні*). Розробці, обґрунтуванню та реалізації наближених методів присвячено роботи багатьох математиків, а саме: Акуленко Л., Anderssen R. S., Алгазін С. Д., Бандирський Б. Й., Alici H., Andrew A. L., Attili B. S., Bailey P. B., Chen H., Pruess S., El-Daou M. K., Everitt W. N., Гаврилюк І.П., Ghelardoni P., Gladwell I., Greenberg L., He J.-H., Ixaru L. Gr., Коллатц Л., Кравченко В.В., Ledoux V., Макаров В. Л., Marletta M., Paine J. W., Pryce J. D., Подлевський Б. М., Пузинін І. В., Самарський О. А., Тихонов А. М., Торба С. М., Vanden Berghe G., Weideman J. A. C. та інші.

Найбільш економними з точки зору обчислювальних ресурсів, а значить, і більш ефективними при їх програмній реалізації є дискретні методи (див. Додаток B). Деякі з них реалізовано в пакетах прикладних програм, що входять до таких відомих бібліотек, як NAG Fortran Library, CALGO, CPC Program Library, JINRLIB та інших.

Серед *недоліків дискретних методів* є 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. Проблема погіршення точності із зростанням номера власного значення притаманна, зокрема, спектральним методам, популярним класичним методам таким, як метод скінченних різниць (FDM) та метод Нумерова (MN), а також методу скінченних елементів (FEM). Частково подолати цю проблему вдалось за допомогою запропонованої у 80-х роках XX століття колективом австралійських математиків Paine J. W., de Hoog F. R., Anderssen R. S. та Andrew A. L. *асимптотичної корекції* в поєднанні з FDM, MN та FEM в [56, 58, 60, 61, 158, 160, 178, 179]. Проте, асимптотична корекція є ефективною для дуже низьких за номером власних значень.

Недоліки класичних дискретних та спектральних методів підкреслює заключне зауваження із [184] про те, що «хоча число надійних власних значень і зростає зі збільшенням обчислювального масштабу N, відсоток надійних власних значень (в порівнянні з ненадійними власними значеннями) буде прямувати до нуля, коли N прямує до нескінченності». Тут N – кількість вузлових точок розбиття. Водночас існують задачі, які вимагають обчислення великої кількості (тисяч) власних значень та відповідних нормованих власних функцій (див., напр., [99, 161]).

Протягом останніх років для наближеного розв'язування задач на власні значення широко застосовуються аналітичні (функціональні) методи, які базуються на ідеї *методу гомотопії* або, що те ж саме, *методу продовження по параметру* (див., напр., [52, 62]) і дозволяють знаходити розв'язки у вигляді швидкозбіжних функціональних рядів. Це, наприклад, запропонований у 80-х роках XX століття в [43–46, 166] американським фізиком Джорджем Адомяном *метод декомпозиції Адомяна* (ADM) та розвинутий для задач типу Штурма-Ліувілля в [66, 67, 121, 141, 149, 169, 170, 175]; запропонований у 1992 році в [132] китайським математиком Shijun Liao *метод гомотопного аналізу* (HAM) та розвинутий в [39, 123]; запропонований китайським математиком JI-Huan He у 1999 році в [118] *метод гомотопного збурення* (HPM) та розвинутий в [64, 96, 118, 128, 156].

Бурхливий розвиток аналітичних методів останнім часом пов'язаний із вдосконаленням засобів комп'ютерної алгебри, за допомогою яких можна виконувати складні та громіздкі аналітичні перетворення. На відміну від дискретних методів, аналітичні методи в цьому сенсі є досить затратними. Тому для них *актуальною є розробка алгоритмів* більш ефективних та менш затратних з точки зору обчислювальних ресурсів. Головною *перевагою* аналітичних методів є можливість дослідження поведінки шуканого розв'язку за допомогою наближеного розв'язку, отриманого в аналітичній формі, адже точний розв'язок наближається елементами того ж простору.

Спорідненим за ідеологією із згаданими 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. Вперше запропонований у 1991 році Макаровим В. Л. в [17] FD-метод дає змогу подолати пераховані вище недоліки дискретних методів та може бути застосований до розв'язування операторних рівнянь загального вигляду, а для ряду конкретних випадків було строго доведено, що швидкість його збіжності є *суперекспоненціальною*. FD-метод був розвинутий в роботах Макарова В. Л., Гаврилюка І. П., Лазурчака І. І., Василика В. Б., Ситника Д. О., Драгунова Д. В., Клименка А. В., Бандирського Б. Й., Россохатої Н. О., Уханьова О. Л., Попова А. М. та інших.

В роботах Макарова В. Л. та його учнів було показано, що для широкого класу одновимірних задач на власні значення 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 за допомогою дискретних методів, слід відмітити наявність *кратних* та *щільно згрупованих в кластери близьких* власних значень. Такі особливості притаманні, наприклад, скалярним задачам Штурма-Ліувілля другого порядку з рівняннями Матьє і Кофі-Еванса (див. [163, с.283], [59, 94, 105, 131, 161]) та з рівняннями Хілла і Ламе з періодичними та антиперіодичними крайовими умовами (див. [2, гл.9, §6], [48, 76]), скалярним задачам типу Штурма-Ліувілля четвертого порядку з відповідними крайовими умовами (див. [12, гл.III, §11.2]), задачам типу Штурма-Ліувілля з матричними коефіцієнтами (див. [92, 137]). Як зазначено у [92], при недостатньо дрібному розбитті відрізку отримані згідно з дискретними методами наближення до близьких і, водночас, простих власних значень на деякому кроці методу починають співпадати.

В роботах Макарова В. Л. та його учнів [3, 71, 101, 102] FD-метод успішно 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 [101] 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, зокрема, в яких власні значення згруповані в кластери близьких значень (трійки, четвірки і т.д.), та недоліки дискретних методів, які використовуються для їх наближеного розв'язування, 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 даного дисертаційного дослідження було відкритим та актуальним питанням.

Зв'язок дослідження 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 проміжку 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 та коли 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 $\bar{q}(x) \equiv 0$), 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 $\bar{q}(x) \equiv 0$). 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.

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:

– задачі про параметричний резонанс та квантовий рух електронів у періодичному полі кристала (коли потенціал є нескінченно-диференційовною періодичною функцією);

– «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);

– 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);

– класичний, квантовий та модифіковані гармонічні 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 в турбіні 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 в семи статтях, належать Макарову В. Л. У всіх роботах підбір та реалізація чисельних прикладів належать Романюк Н.М. Отримані результати, опубліковані в роботах спільно з Гаврилюком І. П. та Лазурчаком І. І., належать всім 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 2013р.

- VI міжнародна конференція «Обчислювальна та прикладна математика» ім. академіка НАН України І. І. Ляшка, м. Київ, 5-6 вересня 2013р.

- 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 2014р.

- 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 2015р.

- Міжнародна конференція молодих математиків, м. Київ, 03-06 червня 2015р.

Публікації. Основні результати роботи викладено в 7 статтях [22, 23, 25, 27, 28, 103, 147], опублікованих у виданнях, що внесені до переліку наукових фахових видань України, а також відображено в 4 тезах доповідей на міжнародних конференціях [20, 21, 24, 26].

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

Автор висловлює щиру подяку своєму науковому керівникові, доктору фізико-математичних наук, професору, академіку НАН України Макарову Володимиру Леонідовичу за мудре наставництво, підтримку й допомогу на всіх етапах виконання дисертації.

Глибока вдячність за слушні поради та підтримку також колегам – науковим співробітникам очолюваного Володимиром Леонідовичем відділу обчислювальної математики Інституту математики НАН України.

РОЗДІЛ 1
ОГЛЯД СТАНУ ДОСЛІДЖЕНЬ

1.1 Задачі на власні значення типу Штурма-Ліувілля

Засновниками *теорії Штурма-Ліувілля* стали французькі математики Жак Шарль Франсуа Штурм та Жозеф Ліувілль, які вперше вивчили задачу (1.1) у 1833 році. Опубліковані ними мемуари 1830-х років стали основою нової на той час галузі математики — спектральної теорії для класу звичайних диференціальних операторів другого порядку. Її розвитком стало вивчення крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь високого порядку та систем звичайних диференціальних рівнянь. Обширний опис історії розвитку класичної спектральної теорії Штурма-Ліувілля наведено в [55, 144].

Теорія Штурма-Ліувілля включає в себе наступні питання: умови розв'язності; класи однозначності; властивості розв'язків та функцій Гріна; асимптотична поведінка власних значень та відповідних власних функцій. Їй присвячено багато робіт, зокрема монографії таких математиків: Коллатц Л. (1968р.) [14], Аткінсон Ф. В. (1968р.) [1], Марченко В. О. (1977р., 1985р.) [29,150], Левітан Б. М. та Саргсян І. С. (1991р.) [142], Pryce J. D. (1993р.) [163], Козлов В. та Мазья В. (1997р.) [129], під ред. Hinton D. та Schaefer P. W. (1997р.) [120], Zettl A. (2005р.) [183], M. A. Al-Gwaiz (2008р.) [49], Atkinson F. V. та Mingarelli A. B. (2011р.) [65].

Класична задача Штурма-Ліувілля (ЗШЛ) полягає у відшуканні нетривіальних розв'язків (власних пар – власних значень λ та власних функцій $u(x)$) крайової задачі для звичайного лінійного диференціального рівняння другого порядку

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du(x)}{dx}\right) + q(x)u(x) = \lambda w(x)u(x) \tag{1.1}$$

на скінченному інтервалі $x \in (a, b)$. В найпростішому випадку відомі функції-коефіцієнти $p(x) > 0$, $w(x) > 0$ та $q(x)$ є неперервними на (a, b), а $p(x)$ має неперервну похідну. Розглянемо ЗШЛ для рівняння (1.1) з *розділеними* *крайовими умовами*

$$a_1u(a) = a_2p(a)u'(a), \quad b_1u(b) = b_2p(b)u'(b) \quad (a_1 + a_2 \neq 0, \quad b_1 + b_2 \neq 0). \quad (1.2)$$

ЗШЛ (1.1), (1.2) називають *регулярною*, якщо інтервал (a, b) є скінченним, коефіцієнти рівняння $q(x)$, $w(x)$ та $\frac{1}{p(x)}$ належать $L^1(a, b)$, тобто є інтегровними за Лебегом на (a, b), причому коефіцієнти $w(x)$ та $p(x)$ є додатно визначені на (a, b). В іншому випадку ЗШЛ називають *сингулярною*.

Найпомітнішими результатами класичної теорії є такі *властивості регулярної* ЗШЛ (1.1), (1.2) з введеними вище припущеннями щодо коефіцієнтів $p(x)$, $w(x)$, $q(x)$ (див. [1, 29, 142, 150, 163, 183]):

1) власні значення λ_n, $n = 1, 2, ...$ ЗШЛ (1.1), (1.2) є дійсними та можуть бути впорядковані в зростаючому порядку: $\lambda_1 < \lambda_2 < ...$, а кожна відповідна власна функція $u_n(x)$, $n = 1, 2, ...$ має точно $n - 1$ нулів на (a, b);

2) власні функції $u_n(x)$, $n = 1, 2, ...$ ЗШЛ (1.1), (1.2) утворюють ортогональну систему відносно скалярного добутку в гільбертовому просторі $L_2[a, b]$ з ваговою функцією $w(x)$, тобто

$$(u_n(x), u_m(x)) = \int_a^b u_n(x)u_m(x)w(x)dx = \delta_{nm}, \quad (1.3)$$

де δ_{nm} – символ Кронекера;

3) має місце Теорема Стєклова (про розклад деякої функції в ряд Фур'є по системі власних функцій задачі Штурма-Ліувілля);

4) виконуються теореми порівняння, осциляційні теореми, знайдено оцінки для власних значень та інші.

Задача на власні значення (1.1) в абстрактному формулюванні для лінійного диференціального оператора L, що діє у деякому гільбертовому просторі, записується у такій формі:

$$Lu = \lambda u \quad (1.4)$$

де

$$Lu = \frac{1}{w(x)} \left\{ -\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du(x)}{dx} \right) + q(x)u(x) \right\}, \qquad a \leq x \leq b, \quad (1.5)$$

$$\forall u(x) \in C^{(1)}[a, b] \cap C^{(2)}(a, b)$$

та функції $u(x)$ задовольняють крайовим умовам (1.2), а у більш загальному випадку ЗШЛ із диференціальним рівнянням $2m$-го порядку оператор L має вигляд (див., напр., [110–112]):

$$Lu = \frac{1}{w(x)}\left\{(-1)^m \frac{d^m}{dx^m}\left(p_m(x)\frac{d^m u(x)}{dx^m}\right) + \right.$$
$$+ (-1)^{m-1}\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}}\left(p_{m-1}(x)\frac{d^{m-1}u(x)}{dx^{m-1}}\right) + ...$$
$$\left. ... + \frac{d^2}{dx^2}\left(p_2(x)\frac{d^2u(x)}{dx^2}\right) - \frac{d}{dx}\left(p_1(x)\frac{du(x)}{dx}\right) + p_0(x)u(x)\right\}. \quad (1.6)$$

Тут область визначення оператора L складається із власних функцій відповідної гладкості і таких, що задовольняють заданим крайовим умовам. Згідно з [112] задачу (1.4), (1.6) будемо називати *регулярною*, якщо виконуються такі умови: інтервал (a, b) є скінченним; коефіцієнти рівняння $p_k(x)$ $(k = \overline{0, m-1})$, $w(x)$ та $\frac{1}{p_m(x)}$ належать $L^1(a, b)$; коефіцієнти $w(x)$ та $p_m(x)$ є додатно визначені на (a, b). В іншому випадку ЗШЛ називають *сингулярною.*

Фундаментальними властивостями оператора L виду (1.6) та, зокрема, (1.5) є його *лінійність* та *самоспряженість* або, як її ще називають, *симетричність.* При цьому кажуть, що рівняння (1.4) із самоспряженим оператором (1.6) записане в *самоспряженій формі.* Зазначимо, що за допомогою самоспряжених крайових задач типу Штурма-Ліувілля описуються і моделюються квантово-механічні системи, деякі з яких, наприлад, описані в роботах [40, 63, 73], а також задачі технічної механіки (див., напр., [14]).

Відповідність між спектральними теоріями диференціальних та інтегральних рівнянь встановлює функція Гріна, яка є ядром інтегрального оператора (докладніше див., напр., [1, 29, 65, 129, 142, 150, 183]).

За допомогою *перетворення Ліувілля* (див., напр., [163, п.2.5.1])

$$t = \int \sqrt{w/p}dx, \qquad u = (pw)^{-1/4} \cdot v \qquad (1.7)$$

рівняння в самоспряженій формі (1.1) зводиться до форми фундаментального у квантовій механіці *рівняння Шрьодінгера* або, як її ще називають, *нормальної форми Ліувілля*

$$-\frac{d^2v(t)}{dt^2} + Q(t)v(t) = \lambda v(t). \qquad (1.8)$$

При побудові алгоритмів деяких наближених методів розв'язування ЗШЛ використовують також перетворення змінних, що зводять ЗШЛ другого порядку (1.1) до крайової задачі для системи нелінійних диференціальних рівнянь першого порядку. Це, наприклад, *перетворення Рікатті*, *просте* та *модифіковане перетворення Прюфера* (див., напр., [163, п.2.5.3]) та інші.

Узагальненням результатів класичної теорії Штурма-Ліувілля стало дослідження крайових задач на власні значення для звичайних диференціальних рівнянь вищих порядків та систем рівнянь, до яких ці рівняння зводяться. Наприклад, у [142] досліджено спектральну теорію одновимірних операторів Дірака, що описують задачі на власні значення для систем звичайних лінійних диференціальних рівнянь першого порядку; у [129] досліджено узагальнені ЗШЛ для звичайних диференціальних рівнянь вищих порядків, частинним випадком яких є класична ЗШЛ другого порядку; в [65] досліджено узагальнені одновимірні багатопараметричні ЗШЛ на k відрізках для системи з k диференціальних рівнянь другого порядку. Історію розвитку та огляд основних результатів щодо таких задач станом на 2005 рік наведено в [55, с.15-19].

Важливим питанням спектральної теорії задач типу Штурма-Ліувілля є *асимптотичний розклад* власних значень та власних функцій, або, що те ж саме, *теорія регуляризованих слідів* лінійних диференціальних операторів. Обширний огляд, присвячений історії та сучасному стану теорії регуляризованих слідів станом на 2006 рік, наведено в роботі [37], в якій основна увага приділена операторам з дискретним спектром.

1.2 Чисельні методи розв'язування задач типу Штурма-Ліувілля та їх програмна реалізація

Для розв'язування задач на власні значення існує велика кількість чисельних методів, які умовно можна поділити на *дискретні, аналітичні* та *чисельно-аналітичні* (*функціонально-дискретні*). В даному підрозділі наведемо огляд основних характеристик та особливостей наявних наближених методів.

Найбільш економними з точки зору обчислювальних ресурсів, а значить, і більш ефективними при їх програмній реалізації, є дискретні методи. Деякі з них реалізовано в пакетах прикладних програм, що входять до таких відомих бібліотек, як: NAG Fortran Library (абревіатура від Numerical Analysis Group) [155], CALGO (абревіатура від Collected Algorithms) [86], CPC (абревіатура від Computer Physics Communications) Program Library [87–89], JINRLIB (абревіатура від Joint Institute for Nuclear Research Library) [16]. В Додатку В до дисертації у вигляді таблиці наведена коротка інформація щодо пакетів прикладних програм, які призначені для наближеного розв'язування задач на власні значення типу Штурма-Ліувілля другого та четвертого порядків. При цьому вказано мову запрограмованого коду, посилання на електронний ресурс з наявним кодом, пов'язані наукові публікації, типи розв'язуваних задач даними пакетами та основні чисельні методи, що реалізовані в них.

Дискретні методи. Найпопулярнішими підходами серед дискретних методів є такі: прості матричні методи (*метод скінченних різниць* (FDM) [56, 58, 160] та *метод Нумерова* (NM) [57, 60, 178, 179]); *методи розв'язання крайових задач* (BVM) [41, 42, 54, 104]; *варіаційні методи* (*метод скінченних елементів* (FEM) [61]); *методи стрільби*, зокрема ті, що базуються на *перетворенні Прюфера* [68–70, 74, 77, 116, 159, 163]; *методи Прюса* [75, 97, 151, 161–163]; *спектральні* [83, 84, 109, 143, 180] та *псевдоспектральні методи* [50, 51, 122, 181]. Коротко опишемо особливості цих методів.

Дискретні методи ще називають *матричними*, оскільки вони зводять задачу на власні значення до розв'язання матричної задачі на власні значення $Ay = \lambda Ey$, де E – одинична матриця, або до узагальненої матричної задачі на власні значення $Ay = \lambda By$ з матрицями A, B стрічкової структури, в яких ширина стрічки залежить від кількості вузлових точок. Серед **переваг матричних методів** є відносна простота при їх застосуванні та можливість використання для створення достовірного та ефективного прикладного програмного забезпечення.

Для регулярної скалярної задачі Штурма-Ліувілля (ЗШЛ) другого порядку із крайовими умовами Діріхле на скінченному відрізку із заданою рівномірною сіткою з кроком h похибка *методу класичної центральної апроксимації другого порядку* з $q(x) \equiv const$ [160] та похибка методу NM з $q(x) \in C^4[a,b]$ [57] мають порядки $\mathcal{O}\left(k^4h^2\right)$ та $\mathcal{O}\left(k^6h^4\right)$ відповідно. Тут через k позначатимемо номер власного значення. За допомогою відомих похибок даних методів, які наведені у вступах до [3, 4], в ряді робіт здійснено так звану *асимптотичну корекцію власних значень*, яка вперше була вивчена в [158, 160]. Зокрема, за допомогою цієї простої техніки корекції *модифікований* NM [60, 178, 179] для ЗШЛ другого порядку з потенціалом $q(x) \in C^4[0,\pi]$ забезпечує кращу точність обчислень власних значень, ніж класичний NM, а саме з похибкою обчислень порядку $\mathcal{O}\left(k^3h^4\right)$. У [60] строго доведено, що похибка скоригованого NM при $q(x) \in C^4[0,\pi]$ поводить себе як $\mathcal{O}\left(k^4h^5/\sin(kh)\right)$, а згідно з чисельними результатами для широкого класу задач веде себе як $\mathcal{O}\left(k^3h^5/\sin(kh)\right)$.

Слід зауважити, що класичні дискретні методи *центральної апроксимації* та NM ефективно наближають тільки власні значення з найнижчими номерами.

В роботі [56] асимптотична корекція поширена на випадок загальних крайових умов, за виключенням періодичних та антиперіодичних крайових умов, та при умові, коли $q''(x) \in C[0,\pi]$, похибка скоригованої центральної різницевої апроксимації поводить себе як $\mathcal{O}\left(h^2\right)$ при достатньо малому kh. При умові, коли $q(x) \in C^2[0,\pi]$, в [58] для випадку періодичних та антиперіодичних крайових умов показано, що поведінка похибки скоригованого методу є такою: $\mathcal{O}\left(kh^2\right)$.

У [61] за допомогою простої техніки асимптотичної корекції методу FEM для регулярної ЗШЛ другого порядку на відрізку $[0,\pi]$ вдалось досягти точності $\mathcal{O}\left(kh^2\right)$ при обчисленні елементів (інтегралів) однієї з коефіцієнтних матриць F для побудови рекурентного процесу за допомогою правила Сімпсона та точності $\mathcal{O}\left(k^2h^2\right)$ – при використанні правила трапецій. При цьому дані оцінки точності скоригованого методу вірні при умові $q(x) \in C^2[0,\pi]$ та

$q(x) \in C^4 [0, \pi]$ відповідно.

Застосовані у $[41, 54, 104]$ для апроксимації власних значень ЗШЛ другого порядку *симетричні методи розв'язання крайових задач* («*symmetric boundary value methods*» (BVM)) є узагальненням методу NM, який можна розглядати як двокроковий BVM четвертого порядку ($p = 4$ відносно кроку рівномірної сітки h) (див. [42]). Як зазначено в згаданих роботах, за допомогою збільшенню кроків в лінійних багатокрокових методах можна досягти як завгодно великої точності. У випадку крайових умов Діріхле, коли потенціал є «достатньо» регулярною дійснозначною функцією, запропонований в [42] метод порядку $p > 4$ апроксимує k-ве власне значення регулярної ЗШЛ на скінченному відрізку $[0, \pi]$ з похибкою, що поводить себе як $\mathcal{O}\left(k^{p+1}h^{p-1/2}\right) + \mathcal{O}\left(k^{p+2}h^{p}\right)$, де $k = 1, 2, ..., N$, $N + 2$ – кількість точок розбиття відрізку.

Використовуючи ідеї класичних матричних методів для розв'язування регулярних скалярних ЗШЛ другого порядку таких як FDM, NM та їх узагальнення BVM (порядку $p = 2\nu + 2$, $\nu = 2, 3, 4, ...$), в роботі [167] здійснено їх модифікацію для розв'язування самоспряженої ЗШЛ четвертого порядку

$$u^{(4)}(x) + (q(x) - \lambda)\, u(x) = 0,$$

$$a_1 u(0) = a_2 u'(0), \quad b_1 u(0) = b_2 u''(0), \quad c_1 u(1) = c_2 u'(1), \quad d_1 u(1) = d_2 u''(1)$$

з $a_2, b_2, c_2, d_2 \neq 0$. Для кожного з методів FDM, NM та BVM знайдено коригуючі члени, за допомогою яких здійснено асимтотичну корекцію власних значень згідно з цими методами.

Як зазначено в [159], з метою досягнення обчислювальної ефективності при застосуванні до задач геофізики слід використовувати методи стрільби, які базуються на *перетворенні Прюфера* $u = \rho \sin\theta$, $pu' = \rho\cos\theta$ (див. [163, §5]), за допомогою якого рівняння Штурма-Ліувілля $-\left(pu'\right)' + qu = \lambda w u$ зводиться до системи диференціальних рівнянь першого порядку відносно ρ, θ. На базі отриманої системи будується процес стрільби (див., напр., $[74, 77, 116, 163]$). В роботі [159] здійснено порівняння абсолютних похибок методів, що використовують перетворення Прюфера, методів стрільби, методів Релея-Рітца та методу із [158] з метою вибору найефективнішого залежно від поставленої задачі.

Методи, які базуються на *перетворенні Прюфера*, реалізовано в кластерах підпрограм D02KAF і D02KDF [106], D02KEF [107], що входять до NAG Fortran Library, а також в пакетах SLEIGN (абревіатура від Sturm-Liouville eigenvalue) [68, 69] та SLEIGN2 [70], що належать до бібліотеки CALGO (див. Додаток B). При цьому у D02KEF допускається існування точок розриву у функціях-коефіцієнтах та їх похідних. Як зазначено в [70], код SLEIGN2 став значно досконалішою модифікацією коду SLEIGN із перевагами над вже існуючими на той час пакетами. Так, зокрема, розширився перелік сингулярних самоспряжених задач розв'язуваних даним пакетом, класифікацію яких з наведеними прикладами, а також історію розробки і опис SLEIGN2 можна знайти в роботі [70].

Методи Прюса, основною ідеєю яких є апроксимація коефіцієнтів диференціального рівняння (див. [163, §6]), для ЗШЛ другого порядку реалізовано у Fortran-кодах SL02F [151] та SLEDGE (абревіатура від Sturm-Liouville Estimates Determined by Global Errors) [97, 161], які належать до бібліотеки CALGO (див. Додаток B). Дані методи названо на честь Steven Pruess, який у 1973 році в [162] довів умови строгої збіжності та здійснив аналіз похибок методу при використанні кусково-поліноміальної апроксимації. В [162] доведено, що у випадку, коли коефіцієнти рівняння (1.1) $p(x), q(x), w(x) \in C^{2m+2}[a, b]$, абсолютні похибки методу Прюса з використанням кусково-поліноміальних інтерполянтів степеня m для власних значень поводять себе як $\mathcal{O}\left(h^{2m+2}\right)$, де максимальний діаметр розбиття $h \to 0$. Огляд основних результатів, що стосуються збіжності методів Прюса наведено в [163, п.6.1].

Зазначимо, що варіанти цього методу були у використанні з початку минулого століття, а для кусково-сталого наближення коефіцієнтів метод був теоретично обґрунтований М. М. Боголюбовим і М. М. Криловим в 1928 році для лінійних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку та названий «metodo dei tronconi» [11, 75]. В роботі [108] 1969 року R. G. Gordon запропонував метод кусково-поліноміального наближення коефіцієнтів системи лінійних диференціальних рівнянь другого порядку. Варто також згадати роботи J. Dähnn, наприклад, у [90] для ЗШЛ другого порядку використано кусково-сталу апроксимацію коефіцієнтів рівняння.

Згадані вище Fortran-коди SL02F, SLEDGE, SLEIGN та SLEIGN2 об'єднано в пакеті SLTSTPAK (див. [164], Додаток В). Деталі реалізації на прикладі 60-ти тестових задач викладені в роботі [165].

Широкий клас регулярних і сингулярних векторних ЗШЛ другого порядку можна автоматично розв'язувати за допомогою Fortran-кодів SL09F і SL10F, описаних в роботі [152]. Для знаходження власних значень в них використовується нова спектральна функція, визначена у [152] для векторних ЗШЛ. Можливість задання користувачем необхідного шуканого номера власного значення авторами названо однією з переваг даного коду. Коди SL11F і SL12F базуються на матричній теорії коливань і методі стрільби, а SL12F додатково використовує метод апроксимації коефіцієнтів диференціального рівняння (див. [153]).

До колекції пакетів прикладних програм бібліотеки JINRLIB, які призначені для розв'язування ЗШЛ другого порядку, належать пакети SLIP [32,33], SLIPH4M [9] та SLIPM [35], що використовують неперервний аналог методу Ньютона [34] та дають можливість розв'язувати задачу з точністю порядку $\mathcal{O}(h^4)$ по відношенню до кроку h рівномірної сітки w_h (див. Додаток В).

Серед **недоліків матричних методів** є 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 відповідних наближень; обмежена кількість обчислюваних власних значень, яка залежить від кроку розбиття сітки; насичення точності.

Для різних задач, як правило, з гладкими розв'язками, було доведено, що *спектральні методи* (напр., *тау метод*, *метод Гальоркіна* і *метод колокації*) забезпечують *експоненціальну швидкість збіжності*, яку також називають *спектральною точністю*. Вона зумовлена використанням базису з многочленами високих степенів, наприклад, з такими класичними ортогональними поліномами як Якобі, Чебишева, Лежандра, Ерміта, Лагера (див. [109]). Водночас у скінченно-різницевих методах, згідно з вище наведеним, спостерігається алгебраїчне спадання похибки методу, яке пов'язане з використанням базису з многочленами низьких степенів. Основною ідеєю спектральних методів є заміна власної функції інтерполяційним поліномом. В деяких випадках використання некласичних ортогональних поліномів дає змогу значно покращити точність спектральних методів (див., напр., [84, 180]).

В роботі [180] побудовано спектральний метод колокації для ЗШЛ другого порядку на скінченному проміжку, що базується на ваговому інтерполянті з раціональною ваговою функцією. Чисельні розрахунки продемонстрували значну перевагу запропонованого методу, в смислі його точності, над класичним методом Чебишева.

У [84] обґрунтовано спектральний метод для рівняння Штурма-Ліувілля другого порядку та асоційованого з ним рівняння Шрьодінгера на скінченному проміжку, а саме побудовано метод колокацій з квадратурними (вузловими) точками, отриманими за допомогою некласичних поліномів з використанням процедури «Gautschi's Stieltjes». Розглянутий в [84] метод названо *методом квадратурної дискретизації* (*«Quadrature Discretization Method»* – QDM) та здійснено його порівняння з традиційними спектральними методами, що базуються на Чебишевських вузлах та вузлах Лежандра. Відносно новий метод QDM у [83, 143] було використано для розв'язування рівняння Шрьодінгера з різними потенціалами. Метод QDM можна розглядати як узагальнення спектральних методів, що базуються на класичних ортогональних поліномах.

В роботах H. Alici та ін. (див. [50, 51] та посилання в них) для розв'язування ЗШЛ другого порядку на скінченному проміжку обґрунтовано псевдоспектральний метод, в якому ЗШЛ у формі Шрьодінгера зводиться до *рівняння гіпергеометричного типу із збуренням* $Q(\xi)$: $\sigma(\xi)\, y'' + \tau(\xi)\, y' + Q(\xi)\, y = -\lambda y$, $\xi \in (a, b)$, де $\sigma(\xi)$ та $\tau(\xi)$ є поліномами степенів не більше ніж 2 та 1 відповідно. Дане рівняння є дуже близьким до рівняння гіпергеометричного типу, в якому $Q(\xi) \equiv 0$. Використано добре відомий факт про те, що рівняння гіпергеометричного типу для деяких конкретних власних значень має поліноміальні розв'язки степеня n, які утворюють базис в гільбертовому просторі.

Обширний огляд спектральних та псевдоспектральних методів станом на 2013 рік наведено в роботі [113]. Серед **переваг** псевдоспектральних методів над спектральними в деяких роботах зазначена їх відносна простота при реалізації (див. [50, 51, 122, 181]). Водночас для них притаманні майже всі перераховані вище **недоліки** матричних методів, зокрема погіршення точності із зростанням номера власного значення.

Аналітичні методи. Бурхливий розвиток аналітичних методів протягом останніх років пов'язаний із розвитком засобів комп'ютерної алгебри, за допомогою яких можна виконувати складні та громіздкі аналітичні перетворення. На відміну від дискретних методів, які здебільшого є найбільш ефективними та економними з точки зору обчислювальних ресурсів, аналітичні методи в цьому сенсі є досить затратними. Проте, незважаючи на це, їх головною **перевагою** є можливість дослідження поведінки шуканого розв'язку за допомогою наближеного розв'язку, отриманого в аналітичній формі, адже точний розв'язок наближається елементами того ж простору.

До *аналітичних методів* наближеного розв'язання задач на власні значення належать такі: *варіаційно-ітераційний метод* («*Variational Iteration Method*» – VIM) [53, 117, 119, 156, 171, 172, 174]; метод, що базується на ідеї *повторних інтегралів та рядів Фліса* (IIFSM) [78, 79]; *метод розкладу в степеневий ряд по спектральному параметру* (SPPSM) [130, 131]; *метод гомотопного збурення* («*Homotopy Perturbation Method*» – HPM) [64, 96, 118, 128, 156]; *метод декомпозиції Адомяна* («*Adomian Decomposition Method*» –ADM) [66, 67, 121, 141, 149, 169, 170, 175]; *метод гомотопного аналізу* («*Homotopy Analysis Method*» – HAM) [39, 123] та інші.

Аналітичний метод VIM запропонований в 1999 році JI-Huan He в [117]. Його порівняння з HPM при застосуванні до ЗШЛ та крайових задач наведено в роботі [156]. У VIM (див, напр., [119]) розв'язок операторного рівняння $Tu(x) = g(x)$ апроксимується множиною функцій, які є узгодженими з крайовими умовами. Тут T є диференціальним оператором, що діє на достатньо гладкі функції $u(x)$ на деякому інтервалі, $g(x)$ – деяка відома аналітична функція. Основною ідеєю цього методу є розклад оператора T на суму лінійного L та нелінійного N операторів, тобто розв'язується рівняння $Lu(x) + Nu(x) = g(x)$, для якого ітераційний процес VIM будується за допомогою коригуючого функціоналу

$$u_{k+1}(x) = u_k(x) + \int_0^x \mu \left[Lu_k(s) + N\tilde{u}_k(s) - g(s)\right] ds, \quad k = 0, 1, 2, \dots .$$

Узагальнені множники Лагранжа μ визначаються оптимально згідно з варіаційною теорією. Тут $\tilde{u}_k(s)$ – обмежені варіації, тобто $\delta\tilde{u}_k(s) = 0$ (деталі див. [119]). В роботі [53] метод VIM побудований для ЗШЛ другого порядку на скінченному проміжку з крайовими умовами Діріхле та Діріхле-Неймана. Новий алгоритм методу VIM запропоновано для несингулярних ЗШЛ четвертого [171] та шостого порядку [172] і узагальнений на випадок ЗШЛ $2m$-го порядку, $m \geq 1$ в [174].

В окрему підгрупу можна об'єднати аналітичні методи, які базуються на ідеї *методу гомотопії* або, що те ж саме, *методу продовження по параметру* (див., напр., [52, 62]) і дозволяють знаходити розв'язки у вигляді швидкозбіжних функціональних рядів. Це, наприклад, запропонований у 80-х роках XX століття американським фізиком Джорджем Адомяном *метод декомпозиції Адомяна* (ADM) (див. [43–46, 166]); запропонований у 1992 році в [132] китайським математиком Shijun Liao *метод гомотопного аналізу* (HAM); запропонований китайським математиком JI-Huan He у 1999 році в [118] *метод гомотопного збурення* (HPM).

В роботах [128, 156] HPM побудовано для ЗШЛ другого порядку, в [64] техніка методу HPM розвинута на випадок ЗШЛ другого та четвертого порядку. За допомогою HPM в [96] отримано асимптотичні формули для власних пар (для перших двох кроків методу) для ЗШЛ другого порядку з крайовими умовами Діріхле на скінченному відрізку. Автори наведених робіт по VIM та HPM для ЗШЛ не наводять строгих тверджень про умови, що забезпечують збіжність методів, а посилаються на роботи JI-Huan He для загального формулювання методу для звичайних диференціальних рівнянь (див. посилання у відповідних роботах).

Як зазначено в [39, 123], метод HAM є узагальненням традиційного методу гомотопії, оскільки у відповідне *рівняння деформації нульового порядку* входить додатковий параметр h, за допомогою якого регулюється збіжність методу. В роботі [39] метод HAM застосовано до ЗШЛ другого та четвертого порядків, а в [123] до ЗШЛ другого порядку.

Метод декомпозиції Адомяна (ADM) успішно та ефективно застосовується для розв'язання лінійних і нелінійних задач (диференціальних, інтегральних, інтегро-диференціальних та операторних рівнянь). Обширна бібліографія наукових робіт (більше 900 найменувань), що стосуються методу ADM станом на 2011 рік наведено в [166]. Оскільки, як зазначено в [5], при певному виборі дискретної складової FD-метод збігається з ADM, викладемо основну ідею загальної схеми методу ADM.

Розглядається операторне диференціальне рівняння $F\left(y(x)\right) = g(x)$, де $g(x)$ – відома функція, F – нелінійний диференціальний оператор, який може бути поданий у вигляді $F = L + R + N$, де L – лінійний диференціальний оператор, що містить оператор диференціювання найвищого порядку та є оборотнім, R – лінійний диференціальний оператор меншого порядку, ніж L, N – нелінійний оператор. Далі маємо

$$L^{-1}L\left(y(x)\right) = L^{-1}g(x) - L^{-1}R\left(y(x)\right) - L^{-1}N\left(y(x)\right).$$

У випадку, коли $L = \frac{d^n}{dx^n}$, оператор L^{-1} визначається як оператор n-кратного інтегрування (див. [175]). Наприклад, якщо $L = \frac{d^2}{dx^2}$, то останнє перепишеться

$$y(x) = y(x_0) + (x - x_0)\, y'(x_0) + \int_{x_0}^{x}\int_{x_0}^{\xi} \left[g(\eta) - R\left(y(\eta)\right) - N\left(y(\eta)\right)\right] d\eta d\xi.$$

Згідно з ідеологією ADM невідома функція $y(x)$ шукається у вигляді ряду $y(x) = \sum_{j=0}^{\infty} y^{(j)}(x)$. При цьому припускається, що оператор N аналітичний, тобто

$$N(y) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n,\, A_n = A_n\Big(N\left(\cdot\right); y^{(0)}, y^{(1)}, ..., y^{(j)}\Big) = \frac{1}{n!}\frac{d^n}{d\lambda^n}\left(N\left(\sum_{j=0}^{\infty}\lambda^j y^{(j)}\right)\right)\Bigg|_{\lambda=0},$$

де A_n – так звані *поліноми Адомяна* степеня n для оператора N відносно змінних $y^{(0)}, y^{(1)}, ..., y^{(j)}$. Підставивши ряди для $N(y)$ та $y(x)$ у рівняння для $L^{-1}L\left(y(x)\right)$, отримаємо систему рекурентних співвідношень для $y^{(j)}$

$$y^{(0)} = f(x), \qquad y^{(j+1)} = -L^{-1}R(y^{(j)}) - L^{-1}(A_j), \qquad j = 0, 1, ...$$

В якості наближеного розв'язку приймається зрізаний ряд $\overset{m}{y} = \sum_{j=0}^{m} y^{(j)}$. В монографії [5, п.1.1] наведено огляд основних результатів про збіжність ADM.

Зауважимо, що хоча поліноми A_n і названі в честь Дж. Адомяна, введені в розгляд вони були значно раніше, а саме в 1927 році E. T. Bell в [72] та відомі як поліноми Белла B_n використовувались, зокрема, в комбінаториці.

ADM побудовано для випадку лінійних несингулярних ЗШЛ другого та четвертого порядків у роботах [66, 67, 149] та поширено на випадок шостого порядку в [141]. В [170] метод застосовано до ЗШЛ другого порядку на скінченному відрізку з нелінійністю $[y\,(t)]^p\,, p = const > 1$, зокрема, як частинний випадок розглянуто ADM для лінійної задачі з $p = 1$. Випадок лінійних та нелінійних несингулярних ЗШЛ другого порядку при застосуванні до них ADM розглянуто в [169]. В [175] побудовано алгоритм модифікованого ADM для несингулярних самоспражених ЗШЛ високого порядку та, використовуючи теорему Банаха про нерухому точку, здійснено аналіз збіжності і знайдено оцінки похибок методу (доведено теорему про експоненціальну швидкість збіжності ADM).

Методи типу Адомяна, наприклад, ADM, HPM та HAM, при їх застосуванні до спектральних задач мають спільний з деякими із дискретних методів недолік – погіршення точності методу із зростанням номеру власного значення.

Функціонально-дискретні (чисельно-аналітичні) методи. Розглянемо окремий клас змішаних чисельно-аналітичних методів, що використовують апроксимацію коефіцієнтів диференціального рівняння та зарекомендували себе як високоточні та ефективні. В них коефіцієнти рівняння заміняються таким чином, щоб задачу можна було розв'язати аналітично. Це методи кускового збурення («*Piecewise Perturbation Methods*» – PPM), такі як «*Constant (reference potential) Perturbation Method*» (CPM) або «*Line Perturbation Method*» (LPM), *Тау метод Лежандра-Гауса* («*Legendre-Gauss Tau method*» – LGT) і його модифікація – *експоненціально зважений Тау метод Лежандра-Гауса* («*exponentially weighted Legendre–Gauss Tau method*» – ELGT), *функціонально-дискретний метод* (FD-метод) та інші.

Запропонований в роботах [93, 94] експоненціально зважений Тау метод Лежандра-Гауса є комбінацією трьох технік: спектрального Тау методу Лежандра-Гауса, експоненціальної апроксимації та методів збурення коефіцієнтів. Згідно з цим методом наближені розв'язки шукаються у вигляді скінченної суми експоненціально зважених поліномів Лежандра $e^{\omega_n x}L_n(x); n \geq 0$, де ω_n – належним чином вибране комплексне число. Перед виконанням обчислень згідно з методом ELGT(M, N) потрібно визначити кількість точок Лежандра-Гауса N, які використовуються на кожному з M інтервалів $[x_{i-1}, x_i]\,, i = 1, 2, ..., M$. В [93] показано, що відносно кроку h розбиття відрізку $[a, b]$ похибка методу ELGT поводить себе як $O\left(h^{2N}\right)$, а відносно степеня полінома Лежандра – $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N! c_N^N}\right)$, де c_N^N – старший коефіцієнт полінома Лежандра L_N.

Хоча діапазон задач, до яких можна застосовувати коди пакету SLTSTPAK, є досить широким, в окремих випадках ефективнішими виявились програми, в яких реалізовано методи PPM. До програмних пакетів, в яких реалізовано методи CPM, належать SLCPM12 [125], LILIX [127], що входять до CPC Program Library та пакети, які є у вільному доступі на офіційному сайті Кафедри прикладної математики, інформатики і статистики університету м. Гент [177], а саме: MATSLISE та MATSLISE_AD [133, 134, 136], MATSCS [137], MATCAS [140]. Серед пакетів прикладних програм доступних на [177] є також пакет LPMmatlab та fortran-коди lpm42ws.f, params.dat, в яких реалізовано метод LPM$\{4, 2\}$ [135] (див. також Додаток В).

В PPM коефіцієнтні функції диференціального рівняння замінюються кусково-поліноміальними і розв'язується отримане рівняння, назване *опорним* («*reference equation*»). До цих методів належать CPM, якщо коефіцієнти замінюються кусково-сталими функціями, та LPM, якщо використовуються лінійні функції. PPM побудовані для ЗШЛ другого порядку в нормальній формі (1.8). Використання рівномірної сітки є неефективним у багатьох випадках, тому розбиття відрізку при застосуванні CPM відбувається з врахуванням локальних похибок на нерівномірній сітці із величиною відрізків відповідно до заданого допустимого відхилення tol. Не існує теоретичної верхньої межі для розміру кроку в CPM, на відміну від методу Нумерова, в якому таке обмеження випливає із міркувань стійкості.

В роботі [124] побудовано алгоритм для методу CPM$\{N, Q\}$, де N є число поліноміальних виразів, за допомогою яких апроксимується потенціал в кожному підінтервалі, і Q – число здійснюваних корекцій. В [124] показано, що CPM$\{N, Q\}$ має порядок $2N + 2$ для найменших власних значень при $Q \geq \left[\frac{2}{3}N\right] + 1$ і порядок N для власних значень з високими номерами, коли $Q \geq 1$. Для останнього випадку також показано, що похибка методу відносно власних енергій (значень) E спадає як $\frac{1}{\sqrt{E}}$. Водночас в роботі [135] зазначено, що метод LPM$\{N, Q\}$ має порядок $\min(2N + 2, 4Q + 2 + 2\delta_{Q0})$, $Q = 1, 2, \ldots$.

1.3 Функціонально-дискретний метод для розв'язування задач на власні значення

Спорідненим за ідеологією із згаданими 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. Наявність дискретної складової робить FD-метод спорідненим також із методами Прюса та PPM. FD-метод дає змогу подолати перераховані вище недоліки дискретних методів та може бути застосований до розв'язування операторних рівнянь загального вигляду (див., напр., [5]), а для ряду конкретних випадків було строго доведено, що швидкість його збіжності є *суперекспоненціальною*.

Вперше FD-метод був запропонований у 1991 році Макаровим В. Л. в роботі [17] для розв'язування регулярної скалярної задачі Штурма-Ліувілля

(ЗШЛ) другого порядку

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + (\lambda - q(x))\,u(x) = 0, \quad x \in (0,1), \quad u(0) = u(1) = 0, \quad q(x) \geq 0 \quad (1.9)$$

з кусково-сталим наближенням $\bar{q}(x)$ коефіцієнта $q(x)$, який є кусково-гладкою функцією. Метод дозволяє при фіксованому параметрі дискретизації N (кількість сходинок у функції $\bar{q}(x)$) визначити наближення до власних функцій і власних значень $\{u_n(x), \lambda_n\}$ з точністю $\mathcal{O}((Nn)^{-m})$, де m – ранг методу, n – номер власної пари (див. теорему 1 в [17]). Для реалізації методу використовувались точні триточкові різницеві схеми. В [145] введено означення, згідно з яким FD-метод будемо називати *таким, що точно реалізується*, якщо поправки до власних функцій $u_n^{(j)}(x)$ можуть бути виражені аналітично в термінах елементарних функцій.

Пізніше в роботах [3, 4, 18] були доведені наступні явні апріорно-апостеріорні оцінки:

$$\left|\lambda_n(q(\cdot)) - \overset{m}{\lambda}_n(\bar{q}(\cdot))\right| \leq \|q - \bar{q}\|_\infty \frac{r_n^m}{1 - r_n} 2\frac{(2m-1)!!}{(2m+2)!!} \leq$$
$$\leq \|q - \bar{q}\|_\infty \frac{r_n^m}{1 - r_n} \frac{1}{(m+1)\sqrt{\pi m}}, \quad (1.10)$$

$$\left\|u_n(x, q(\cdot)) - \overset{m}{u}_n(x, \bar{q}(\cdot))\right\|_0 \leq \frac{r_n^{m+1}}{1 - r_n} 2\frac{(2m+1)!!}{(2m+4)!!} \leq$$
$$\leq \frac{r_n^{m+1}}{1 - r_n} \frac{1}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}}, \quad (1.11)$$

які є справедливими при виконанні достатньої умови збіжності FD-методу

$$r_n = 4\,\|q - \bar{q}\|_\infty M_n < 1, \quad (1.12)$$

де $M_n = \max\{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)})^{-1}, (\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)})^{-1}\}$, $n \geq 2$, $M_1 = \max\{(\lambda_2^{(0)} - \lambda_1^{(0)})^{-1}\}$, $\|q\|_\infty = \max_{x\in[0,1]} |q(x)|$, $\|u\|_0 = \left[\int_0^1 (u(x))^2 dx\right]^{\frac{1}{2}}$. Тут $\lambda_n^{(0)}$, $n = 1, 2, ...$ – власні значення *базової задачі*. У випадку, коли $\bar{q}(x) \equiv const$, $N = 0$, зокрема, при $\bar{q}(x) \equiv 0$ отримані оцінки (1.10), (1.11) стають явними апріорними з $M_n = (\pi^2(2n-1))^{-1}$ і замість (1.12) вимагається виконання умови

$$r_n = r_n^0 = \frac{4\,\|q\|_\infty}{\pi^2(2n-1)} < 1. \quad (1.13)$$

Згідно з доведеним в $[3,4,18]$ оцінки для поправок до власних значень $\lambda_n^{(j+1)}$ і норм поправок до власних функцій $u_n^{(j+1)}(x)$ мали порядки малості $\mathcal{O}\left(n^{-j}\right)$ і $\mathcal{O}\left(n^{-j-1}\right)$ відповідно.

В роботі [19] доведено, що умова (1.13) є достатньою умовою збіжності асимптотичного ряду Марченка В. О. для $\sqrt{\lambda_n}$ з $[29,150]$ для ЗШЛ (1.9) з поліноміальним потенціалом $q(x)=\sum_{l=0}^{r} c_l x^l$ та знайдено формули для коефіцієнтів цього асимптотичного розкладу, виражені через коефіцієнти асимптотичного розкладу для λ_n згідно з FD-методом (з $\bar{q}(x)\equiv 0$).

Знайдена в $[3,4,18]$ нова методика доведення експоненціальної збіжності FD-методу з використанням методу твірних функцій дозволила подолати *проблему малих знаменників*, що породжується кратністю власних значень базової задачі, з якої починається чисельний процес, для ЗШЛ з періодичними і антиперіодичними крайовими умовами. В подальших роботах Макарова В. Л. і його учнів для широкого класу одновимірних задач на власні значення за допомогою даної методики показано, 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.

Наведемо короткий огляд робіт по FD-методу, в яких вдалось подолати труднощі, пов'язані із кратними власними значеннями базової задачі, що виникають при його застосуванні до розв'язання деяких ЗШЛ. В роботі [3] кожне власне значення базової задачі є двократним, окрім $\lambda_0^{(0)}=0$, яке є простим, для скалярної задачі Штурма-Ліувілля з потенціалом $q\left(x\right)=q\left(1-x\right)$, $x\in[0,1]$, як для випадку періодичних, так і для випадку антиперіодичних крайових умов. В п. 2 з [102] розглянуто одну із самоспряжених крайових задач на власні значення для звичайного диференціального рівняння 4-го порядку, в якій всі власні значення базової задачі є простими, окрім $\lambda_0^{(0)}=0$, яке є двократним. В роботі [71] при застосуванні FD-методу до матричної задачі Штурма-Ліувілля з крайовими умовами Діріхле всі власні значення базової задачі є двократними. В [101] обґрунтовано FD-метод та здійснена його алгоритмічна реалізація для абстрактної постановки задачі на власні значення для самоспряжених операторів з дискретним спектром, що діють у гільбертовому просторі у випадку, коли базова задача може мати двократні власні значення.

FD-метод був обґрунтований також для некласичних задач на власні значення типу Штурма-Ліувілля, а саме: для ліво-визначених крайових задач, задач з умовами Іонкіна-Самарського та Біцадзе-Самарського [3, гл.4]; для нелінійних задач в [10, 100, 148]; для векторно-матричних задач з коефіцієнтами розмірності 2 в [71]; для ЗШЛ із звичайними диференціальними рінняннями 4-го порядку [102] та інших.

РОЗДІЛ 2
ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ FD-МЕТОДУ ДЛЯ СКАЛЯРНИХ ЗАДАЧ ШТУРМА-ЛІУВІЛЛЯ ДРУГОГО ПОРЯДКУ В ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД СТУПЕНЯ ГЛАДКОСТІ ПОТЕНЦІАЛУ

2.1 Постановка задачі та зображення розв'язку

Розглянемо самоспряжену задачу Штурма-Ліувілля для звичайного диференціального рівняння другого порядку у формі Шрьодінгера на відрізку з крайовими умовами Діріхле:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + (\lambda - q(x))\, u(x) = 0, x \in\ (0,1),\ u(0) = u(1) = 0 \tag{2.1}$$

і застосуємо до неї FD-метод з вибором функції $\bar{q}(x)$, що наближає потенціал $q(x)$, тотожно рівної нулю (або метод гомотопій [52, 62], або, що те ж саме, метод Адомяна [43–46, 166] в нашій інтерпретації). *Наближення m-го рангу* до розв'язку задачі (2.1) має вигляд

$$\overset{m}{u}_n(x) = \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j)}(x),\ \overset{m}{\lambda}_n = \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)}. \tag{2.2}$$

Тут $u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$, $\lambda_n^{(0)} = (n\pi)^2$ – розв'язок *базової задачі*

$$\frac{d^2u_n^{(0)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)}u_n^{(0)}(x) = 0, \quad x \in\ (0,1), \quad u_n^{(0)}(0) = u_n^{(0)}(1) = 0. \tag{2.3}$$

Члени рядів (2.2) визначаються як розв'язки рекурентної послідовності задач

$$\begin{gathered}\frac{d^2u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}(x) = -\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}u_n^{(p)}(x) + q(x)u_n^{(j)}(x) \equiv \\ \equiv -F_n^{(j+1)}(x), \quad x \in\ (0,1),\end{gathered} \tag{2.4}$$

$$u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) = 0, \quad j = 0,\ 1,\ ..., m-1,$$

з умов розв'язності яких $\int_0^1 F_n^{(j+1)}(x)u_n^{(0)}(x)dx = 0$, $j = \overline{0, m-1}$ знаходимо

$$\lambda_n^{(j+1)} = \int\limits_0^1 q(x)u_n^{(j)}(x)u_n^{(0)}(x)\,dx, \quad j = 0,\ 1,\ ..., m-1. \tag{2.5}$$

Для однозначної розв'язності задач (2.4) на поправки до власних функцій $u_n^{(j)}(x)$ додатково накладається умова ортогональності

$$\int\limits_0^1 u_n^{(j+1)}(x)u_n^{(0)}(x)\,dx = 0, \quad j = 0,\ 1,\ ..., m-1. \tag{2.6}$$

Метою даного розділу є вивчення поведінки складових FD-методу, тобто поправок до власних пар $u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n^{(j)}$, відносно порядкового номера n в залежності від ступеня гладкості коефіцієнта $q(x)$. Розглянемо випадки, коли потенціал $q(x)$ є: а) нескінченно-диференційовна періодична функція, $q(x) \in C^\infty[0,1]$; б) кусково-стала функція, $q(x) \in Q^0[0,1]$; в) кусково-гладка функція, $q(x) \in Q^1[0,1] \cap C[0,1]$; г) функція, що належить негативному простору Соболєва $H_2^{-1}(0,1)$.

Зауваження 2.1. Найпростіший варіант FD-методу з $\bar{q}(x) \equiv 0$ згідно з (2.2)-(2.6) у певному розумінні є подібним до методу Адомяна, але в запропонованому вигляді (і це є суттєвим) для задачі Штурма-Ліувілля (2.1) він у науковій літературі не зустрічався (див. також вступ, п.1.2 та посилання в них).

Для того, щоб записати розв'язки задач (2.4), введемо *узагальнену функцію Гріна*

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

$$-\cos(n\pi(x-\xi)) - 2\pi n[\sin(n\pi(x+\xi))(1-x-\xi) - \sin(n\pi\,|x-\xi|)\times \tag{2.7}$$

$$\times(1-|x-\xi|)]) = \hat{g}_n(x,\xi) + \frac{1}{4\pi^2 n^2}\left[\cos\left(n\pi(x+\xi)\right) - \cos(n\pi(x-\xi))\right],$$

або, що те ж саме,

$$g_n(x,\xi) = \begin{cases} \left[\frac{(x-1)\cos(n\pi x)}{\pi n} - \frac{1}{2}\frac{\sin(n\pi x)}{\pi^2 n^2}\right]\sin(n\pi\xi) + \frac{\sin(n\pi x)\xi\cos(n\pi\xi)}{\pi n}, 0 \le \xi < x \le 1, \\ \left[\frac{x\cos(n\pi x)}{\pi n} - \frac{1}{2}\frac{\sin(n\pi x)}{\pi^2 n^2}\right]\sin(n\pi\xi) + \frac{\sin(n\pi x)(\xi-1)\cos(n\pi\xi)}{\pi n}, 0 \le x \le \xi \le 1. \end{cases}$$

Зауваження 2.2. Функція Гріна (2.7) має такі властивості:

$$g_n(x,\xi) = g_n(\xi,x),\ g_n(x,\xi) = g_n(1-x,1-\xi),\ \int\limits_0^1 g_n(x,\xi)\sin(n\pi x). \tag{2.8}$$

При фіксованому j розв'язок задачі (2.4), що задовольняє умові ортогональності (2.6), можна записати у вигляді

$$u_n^{(j+1)}(x) = -\int\limits_0^1 g_n(x,\xi) F_n^{(j+1)}(\xi)\, d\xi. \tag{2.9}$$

Лема 2.1. *Нехай $q(x) \in H_2^1(0,1)$, тоді має місце зображення*

$$\lambda_n^{(2)} = \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 w_n(x,\xi)\, q'(\xi) q'(x) d\xi dx, \tag{2.10}$$

де

$$w_n(x,\xi) = \int\limits_0^x \int\limits_0^\xi g_n(t,s)\, u_n^{(0)}(t) u_n^{(0)}(s) ds dt, \tag{2.11}$$

і наступна оцінка

$$\left|\lambda_n^{(2)}\right| \le \frac{3}{4} \left(\frac{\|q\|_{H_2^1(0,1)}}{2\pi n} \right)^2. \tag{2.12}$$

Доведення. Із (2.5) при $j = 1$ маємо

$$\begin{aligned} \lambda_n^{(2)} &= \int\limits_0^1 q(x) u_n^{(1)}(x) u_n^{(0)}(x) dx = \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 g_n(x,\xi)\, q(x) u_n^{(0)}(x) q(\xi) \times \\ &\times u_n^{(0)}(\xi) d\xi dx = \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 q(x) q(\xi) \frac{\partial^2}{\partial x \partial \xi} w_n(x,\xi)\, d\xi dx = \\ &= -\int\limits_0^1 \frac{\partial}{\partial x} w_n(x,\xi)\, q'(\xi) d\xi q(x) dx = \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 w_n(x,\xi)\, q'(\xi) q'(x) d\xi dx. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Тут використано співвідношення:

$$w_n(1,\xi) = 0, \forall \xi \in [0,1],\ w_n(x,1) = 0, \forall x \in [0,1],\ w_n(1,1) = 0,$$

які випливають із властивостей (2.8) функції $g_n(x,\xi)$.

Із (2.13) слідує оцінка

$$\left|\lambda_n^{(2)}\right| \le \max_{x,\xi \in [0,1]} |w_n(x,\xi)| \left(\|q\|_{H_2^1(0,1)} \right)^2. \tag{2.14}$$

Аналітична форма запису функції (2.11) буде наступною:

$$w_n(x,\xi) = -\frac{1}{16\pi^2 n^2}\left(x+\xi-|x-\xi|\right)\left(x+\xi+|x-\xi|-2\right)\left(\cos\left(2\pi n x\right)+\right.$$
$$\left.+\cos\left(2\pi n\xi\right)+1\right)+\frac{1}{16\pi^3 n^3}\left[2\left(x+\xi+|x-\xi|-2\right)\sin\left(\pi n\left(x+\xi-\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.-\;|x-\xi|\right)\right)+2\left(x+\xi-|x-\xi|\right)\sin\left(\pi n\left(x+\xi+|x-\xi|\right)\right)-$$
$$-\left(x-\xi-\mathrm{sgn}(x-\xi)\right)\sin\left(2\pi n\left(x-\xi\right)\right)+\left(x+\xi-1\right)\sin\left(2\pi n\left(x+\xi\right)\right)\Big]-$$
$$-\frac{3}{16\pi^4 n^4}\sin\left(2\pi n x\right)\sin\left(2\pi n\xi\right).$$

За допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple експериментально встановлено, що максимум $|w_n(x,\xi)|$ на області визначення знаходиться на прямій $x=\xi$. З необхідних і достатніх умов екстремума функції легко визначити, що він досягається в точці $x=\frac{1}{2},\xi=\frac{1}{2}$ при парних n і $n=1$ та в точках $x=\frac{n\pm1}{2n},\xi=\frac{n\pm1}{2n}$ – при непарних $n=3,5,\ldots$. Тому має місце оцінка

$$\max_{x,\xi\in[0,1]}|w_n(x,\xi)| \le \left|w_n\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\right| = \frac{3}{16\pi^2 n^2}. \tag{2.15}$$

Лему (2.1) доведено. □

Теорема 2.1. *Нехай $q(x)$ – непарна функція на відрізку $[0,1]$ відносно точки $\frac{1}{2}$, тоді для $j=1,2,\ldots$ будуть виконуватись наступні співвідношення:*

$$u_n^{(2j-1)}(x) = -u_n^{(2j-1)}(1-x), u_n^{(2j)}(x) = u_n^{(2j)}(1-x),\ \textit{якщо } n- \textit{непарне}; \tag{2.16}$$

$$u_n^{(2j-1)}(x) = u_n^{(2j-1)}(1-x), u_n^{(2j)}(x) = -u_n^{(2j)}(1-x),\ \textit{якщо } n- \textit{парне}; \tag{2.17}$$

$$\lambda_n^{(2j-1)} = 0; \tag{2.18}$$

$$\lambda^{(2j)} = \int\limits_0^1 q(x)u_n^{(2j-1)}(x)u_n^{(0)}(x)dx. \tag{2.19}$$

Доведення. Нехай виконуються умови теореми, тобто

$$q(x) = -q(1-x), x\in[0,1]. \tag{2.20}$$

Доведення проведемо методом повної математичної індукції. Із (2.5), враховуючи (2.20), при $j=0$ одержуємо

$$\lambda_n^{(1)} = \int\limits_0^1 q(x)\left[u_n^{(0)}(x)\right]^2 dx = 0.$$

Розв'язок задачі (2.4) при $j = 0$ має вигляд

$$u_n^{(1)}(x) = \int\limits_0^1 g_n(x,\xi) q(\xi) u_n^{(0)}(\xi) d\xi. \tag{2.21}$$

Враховуючи (2.8), з (2.21) робимо висновок, що $u_n^{(1)}(x)$ є непарною функцією відносно точки $x = \frac{1}{2}$, якщо n є непарним, і парною функцією, якщо n є парним числом.

Повернемось до задачі (2.4) при $j = 1$. Із (2.5) і (2.21) маємо

$$\lambda_n^{(2)} = \int\limits_0^1 q(x) u_n^{(1)}(x) u_n^{(0)}(x) dx.$$

Згідно з (2.9) розв'язок задачі (2.4) при $j = 1$ має вигляд

$$u_n^{(2)}(x) = \int\limits_0^1 g_n(x,\xi) q(\xi) u_n^{(1)}(\xi) d\xi, \tag{2.22}$$

і тоді з (2.8), (2.20) і (2.22) робимо висновок, що $u_n^{(2)}(x)$ є парною функцією відносно точки $x = \frac{1}{2}$, якщо n є непарним, і непарною функцією, якщо n є парним числом.

Припустимо, що співвідношення (2.16)–(2.19) справедливі при $i = s$, покажемо, що вони будуть справедливі і при $i = s + 1$. Запишемо умову розв'язності задачі (2.4) при $j = 2s$

$$\int\limits_0^1 \left(-\sum_{p=0}^{2s} \lambda_n^{(2s+1-p)} u_n^{(p)}(x) + q(x) u_n^{(2s)}(x) \right) u_n^{(0)}(x) dx = 0,$$

звідки з урахуванням припущення індукції та умов ортогональності (2.6) маємо

$$\lambda_n^{(2s+1)} = 0.$$

Тоді розв'язок задачі (2.4) при $j = 2s$ має вигляд

$$u_n^{(2s+1)}(x) = \int\limits_0^1 g_n(x,\xi) \left[-\sum_{p=1}^{s} \lambda_n^{(2s-2p+2)} u_n^{(2p-1)}(\xi) + q(\xi) u_n^{(2s)}(\xi) \right] d\xi,$$

що з урахуванням припущення індукції приводить до співвідношень:

$$\begin{aligned} u_n^{(2s+1)}(x) &= -u_n^{(2s+1)}(1-x), \text{ якщо } n - \text{непарне}, \\ u_n^{(2s+1)}(x) &= u_n^{(2s+1)}(1-x), \text{ якщо } n - \text{парне}, \end{aligned} \tag{2.23}$$

а при $j = 2s + 1$ вигляд розв'язку задачі (2.4)

$$u_n^{(2s+2)}(x) = \int_0^1 g_n(x,\xi) \left[-\sum_{p=1}^{s} \lambda_n^{(2s-2p+2)} u_n^{(2p)}(\xi) + q(\xi) u_n^{(2s+1)}(\xi) \right] d\xi,$$

разом з припущенням індукції приводять до співвідношень (функція у квадратних дужках є парною):

$$\begin{aligned} u_n^{(2s+2)}(x) &= u_n^{(2s+2)}(1-x), \text{ якщо } n - \text{непарне}, \\ u_n^{(2s+2)}(x) &= -u_n^{(2s+2)}(1-x), \text{ якщо } n - \text{парне}. \end{aligned} \tag{2.24}$$

Запишемо розв'язок задачі (2.4) при $j = 2s + 2$

$$u_n^{(2s+3)}(x) = \int_0^1 g_n(x,\xi) \left[-\sum_{p=1}^{s+1} \lambda_{n,k}^{(2s-2p+4)} u_n^{(2p-1)}(\xi) + q(\xi) u_n^{(2s+2)}(\xi) \right] d\xi,$$

звідки, враховуючи припущення індукції, а також (2.23) і (2.24), отримуємо співвідношення

$$\begin{aligned} u_n^{(2s+3)}(x) &= -u_n^{(2s+3)}(1-x), \text{ якщо } n - \text{непарне}, \\ u_n^{(2s+3)}(x) &= u_n^{(2s+3)}(1-x), \text{ якщо } n - \text{парне}. \end{aligned} \tag{2.25}$$

Теорема доведена. □

Далі будемо розглядати ряд випадків, коли функція $q(x)$ належить різним класам гладкості і FD-метод є таким, що *точно реалізується* (термінологія вперше була введена в роботі [145]). Зауважимо, що аналітичні перетворення згідно з FD-методом, за допомогою яких отримано наведені в наступних пунктах поправки до власних пар, здійснено за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17.

2.2 Потенціал є нескінченно-диференційовною періодичною функцією

Розглянемо задачу Штурма-Ліувілля (2.1) з потенціалом

$$q(x) = \cos(\pi x), \quad q(x) \in C^{\infty}[0, 1].$$

Дане рівняння є частинним випадком *рівняння Хілла* з $q(x) = a\cos(2x) + b\cos(4x)$, де a, b – дійсні числа (див., напр., [157, Ch.28], [12, 29, 95, 150], [2, §6, гл.9]) та названо *рівнянням Матьє* на честь французького математика E. L. Mathieu, який дослідив його у 1868 році, описавши коливання еліптичної мембрани. Серед фізичних застосувань також слід згадати задачі про параметричний резонанс та квантовий рух електронів у періодичному полі кристала.

Застосуємо FD-метод згідно з (2.3)-(2.6), (2.9). В цьому випадку FD-метод є таким, що *точно реалізується*, і для $\lambda_n^{(j)}$, $u_n^{(j)}(x)$ виконується теорема 2.1. Згідно з алгоритмом FD-методу (2.3)-(2.6), (2.9) отримуємо аналітичні вирази для поправок до власних значень:

$$\lambda_n^{(2)} = \frac{1}{2\pi^2(2n-1)(2n+1)},$$

$$\lambda_n^{(4)} = \frac{20n^2+7}{32\pi^6(n-1)(n+1)(2n-1)^3(2n+1)^3},$$

$$\lambda_n^{(6)} = \frac{144n^4+232n^2+29}{16\pi^{10}(2n-3)(2n+3)(n-1)(n+1)(2n-1)^5(2n+1)^5},$$

$$\lambda_n^{(8)} = \left[376064n^{10}+585216n^8-2245664n^6+256912n^4+827565n^2+\right.$$

$$+68687\big] \big/ \big[8192\pi^{14}(n-2)(n+2)(2n-3)(2n+3)(n-1)^3(n+1)^3\times$$

$$\left.\times(2n-1)^7(2n+1)^7\right]$$

та для поправок до власних функцій:

$$u_n^{(1)}(x) = -\frac{\sqrt{2}\sin(\pi x(n+1))}{2\pi^2(2n+1)} + \frac{\sqrt{2}\sin(\pi x(n-1))}{2\pi^2(2n-1)},$$

$$u_n^{(2)}(x) = \frac{\sqrt{2}\sin\left(\pi x\left(n+2\right)\right)}{16\pi^4\left(n+1\right)\left(2n+1\right)} + \frac{\sqrt{2}\sin\left(\pi x\left(n-2\right)\right)}{16\pi^4\left(n-1\right)\left(2n-1\right)},$$

$$u_n^{(3)}(x) = -\frac{\sqrt{2}\sin\left(\pi x\left(n+3\right)\right)}{96\pi^6\left(n+1\right)\left(2n+1\right)\left(2n+3\right)}+$$

$$+\frac{\sqrt{2}\sin\left(\pi x\left(n-3\right)\right)}{96\pi^6\left(n-1\right)\left(2n-1\right)\left(2n-3\right)} - \frac{\sqrt{2}\left(4n^2+8n+7\right)\sin\left(\pi x\left(n+1\right)\right)}{32\pi^6\left(n+1\right)\left(2n-1\right)\left(2n+1\right)^3}+$$

$$+\frac{\sqrt{2}\left(4n^2-8n+7\right)\sin\left(\pi x\left(n-1\right)\right)}{32\pi^6\left(n-1\right)\left(2n+1\right)\left(2n-1\right)^3},$$

$$u_n^{(4)}(x) = \frac{\sqrt{2}\sin\left(\pi x\left(n+4\right)\right)}{1536\pi^8\left(n+2\right)\left(n+1\right)\left(2n+1\right)\left(2n+3\right)}+$$

$$+\frac{\sqrt{2}\sin\left(\pi x\left(n-4\right)\right)}{1536\pi^8\left(n-2\right)\left(n-1\right)\left(2n-1\right)\left(2n-3\right)}+$$

$$+\frac{\sqrt{2}\left(2n^2+5n+5\right)\sin\left(\pi x\left(n+2\right)\right)}{48\pi^8\left(n+1\right)\left(2n-1\right)\left(2n+1\right)^3\left(2n+3\right)}+$$

$$+\frac{\sqrt{2}\left(2n^2-5n+5\right)\sin\left(\pi x\left(n-2\right)\right)}{48\pi^8\left(n-1\right)\left(2n+1\right)\left(2n-1\right)^3\left(2n-3\right)}.$$

Інші вирази для поправок не наводимо через їх громіздкість.

Зауважимо, що в цьому випадку для кожного фіксованого номера n_0 власного значення і власної функції існує такий крок FD-методу $j_0 = 2n_0$, що для всіх наступних $j \geq j_0$ користуватись вище наведеними формулами не можна, виникає ділення на нуль. Тому для кожного фіксованого номера $n = n_0, n_0+1, \ldots.$ власного значення, починаючи з $\lambda_{n_0}^{(2n_0)}$ та $u_{n_0}^{(2n_0)}(x)$, замість вище наведених формул треба використовувати інші формули, які отримуємо, розв'язуючи відповідні крайові задачі (2.4) з накладеними умовами ортогональності (2.6).

Так, при $n = 1$ вже починаючи з $\lambda_1^{(2)}$ потрібно використовувати формули, наведені нижче, у яких ділення на нуль вже нема, а саме:

$$\lambda_1^{(2)} = -\frac{1}{12\pi^2},$$

$$u_1^{(2)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{96\pi^4}\sin(3\pi x), u_1^{(3)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{8640\pi^6}\left(25\sin(2\pi x) - 3\sin(4\pi x)\right),$$

$$\lambda_1^{(4)} = \frac{5}{3456\pi^6},$$

$$u_1^{(4)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{138240\pi^8}(-37\sin(3\pi x) + \sin(5\pi x)),$$
$$u_1^{(5)}(x) = -\frac{\sqrt{2}}{87091200\pi^{10}}(-924\sin(4\pi x) + 10115\sin(2\pi x) + 9\sin(6\pi x)),$$
$$\lambda_1^{(6)} = -\frac{289}{4976640\pi^{10}},$$

при $n = 2$ маємо

$$\lambda_2^{(4)} = -\frac{317}{216000\pi^6},$$
$$u_2^{(4)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{48384000\pi^8}\left(2944\sin(4\pi x) + 75\sin(6\pi x)\right),$$
$$u_2^{(5)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{21772800000\pi^{10}}\left(2223200\sin(\pi x) + 349344\sin(3\pi x) - \right.$$
$$\left. -35775\sin(5\pi x) - 375\sin(7\pi x)\right),$$
$$\lambda_2^{(6)} = \frac{10049}{170100000\pi^{10}},$$
$$u_2^{(6)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{174182400000\pi^{12}}\left(25\sin(8\pi x) + 4800\sin(6\pi x) - 163843\sin(4\pi x)\right),$$
$$u_2^{(7)}(x) = -\frac{\sqrt{2}}{1207084032000000\pi^{14}}(1125\sin(9\pi x) + 386925\sin(7\pi x) -$$
$$- 31462695\sin(5\pi x) + 6424732160\sin(\pi x) + 799731009\sin(3\pi x)),$$
$$\lambda_2^{(8)} = -\frac{93824197}{31352832000000\pi^{14}}.$$

Експериментально визначеною поведінкою поправок до власних значень відносно порядкового номера n є така:

$$\lambda_n^{(j)} = \mathcal{O}\left(n^{-2j+2}\right). \tag{2.26}$$

Зазначена поведінка є справедливою до певного кроку $j_0 = 2n_0$ FD-методу до тих пір, поки не виникає ділення на нуль для деякого номера n_0.

Поведінка поправок до власних значень $\lambda_n^{(j)} = \mathcal{O}\left(n^{-2j+2}\right)$ по відношенню до порядкового номера n має місце у випадку, коли функція $q(x)$ є поліном. Цей випадок розглянуто у пункті 3.1 (див. [22, 23]).

2.3 Потенціал є кусково-сталою функцією

Розглянемо задачу Штурма-Ліувілля (2.1) з кусково-сталим потенціалом $q(x) \in Q^0[0,1]$, коли

$$q(x) = a\left[-\frac{1}{2} + \mathrm{H}\left(x - \frac{1}{2}\right)\right] = \begin{cases} -\frac{a}{2}, 0 \le x < \frac{1}{2}, \\ \frac{a}{2}, \frac{1}{2} \le x \le 1, \end{cases} \tag{2.27}$$

де $a = const > 0$, $\mathrm{H}(x)$ – функція Хевісайда (див., напр., [157, §1.16(iv)]).

За допомогою кусково-сталих потенціалів моделюють так звані «бар'єрні» задачі квантової механіки – задачі про квантово-механічний рух у середовищі із стрибками потенціалу (див., напр., [31,40]). Прикладами таких застосувань є транзистори, напівпровідники, альфа-розпад (альфа- та бета-промені Резерфорда), структури з резонансним тунелюванням електронів, яке лежить в основі наноелектронних пристроїв обробки сигналів та ін.

Застосуємо до задачі (2.1), (2.27) FD-метод згідно з (2.3)-(2.6), (2.9). В цьому випадку FD-метод є таким, що *точно реалізується*, і, оскільки $q(x)$ є непарною функцією на відрізку $[0,1]$, для $\lambda_n^{(j)}$, $u_n^{(j)}(x)$ виконується теорема 2.1. Згідно з алгоритмом FD-методу (2.3)-(2.6), (2.9) отримуємо аналітичні вирази для поправок до власних значень:

$$\lambda_n^{(2)} = a^2 \frac{2\cos(\pi n) + 1}{16\pi^2 n^2}, \ \lambda_n^{(4)} = a^4\left[-\frac{\cos(\pi n)}{768\pi^4 n^4} - \frac{5 + 2\cos(\pi n)}{256\pi^6 n^6}\right],$$

$$\lambda_n^{(6)} = a^6\left[\frac{\cos(\pi n)}{245760\pi^6 n^6} + \frac{7 + 2\cos(\pi n)}{12288\pi^8 n^8} + \frac{3\,(3 + 8\cos(\pi n))}{4096\pi^{10} n^{10}}\right],$$

$$\lambda_n^{(8)} = a^8\left[-\frac{\cos(\pi n)}{165150720\pi^8 n^8} - \frac{24 + 11\cos(\pi n)}{3932160\pi^{10} n^{10}} - \frac{11 + 28\cos(\pi n)}{98304\pi^{12} n^{12}} - \right.$$
$$\left. -\frac{13\,(11 + 4\cos(\pi n))}{65536\pi^{14} n^{14}}\right],$$

$$\lambda_n^{(10)} = a^{10}\left[\frac{\cos(\pi n)}{190253629440\pi^{10} n^{10}} + \frac{22 + 23\cos(\pi n)}{660602880\pi^{12} n^{12}} + \right.$$
$$\left. + \frac{208 + 357\cos(\pi n)}{62914560\pi^{14} n^{14}} + \frac{5\,(47 + 21\cos(\pi n))}{1572864\pi^{16} n^{16}} + \frac{17\,(5 + 14\cos(\pi n))}{262144\pi^{18} n^{18}}\right]$$

і для поправок до власних функцій:

$$u_n^{(1)}(x) = \begin{cases} \frac{a\sqrt{2}}{4\pi n} x\cos(\pi n x) - \frac{a\sqrt{2}(\cos(\pi n)+1)}{8\pi^2 n^2}\sin(\pi n x), 0 \le x \le \frac{1}{2}, \\ -\frac{a\sqrt{2}}{4\pi n}(x-1)\cos(\pi n x) + \frac{a\sqrt{2}(\cos(\pi n)+1)}{8\pi^2 n^2}\sin(\pi n x), \frac{1}{2} < x \le 1, \end{cases}$$

$$u_n^{(2)}(x) = \begin{cases} -\frac{a^2\sqrt{2}}{384}\left(\frac{12x^2-1}{\pi^2 n^2} + \frac{6(2\cos(\pi n)-1)}{\pi^4 n^4}\right)\sin(\pi n x) + \frac{a^2\sqrt{2}(\cos(\pi n)-1)}{32\pi^3 n^3}\times \\ \times x\cos(\pi n x), 0 \le x \le \frac{1}{2}, \\ -\frac{a^2\sqrt{2}}{384}\left(\frac{12x^2-24x+11}{\pi^2 n^2} + \frac{6(2\cos(\pi n)-1)}{\pi^4 n^4}\right)\sin(\pi n x) + \\ +\frac{a^2\sqrt{2}(\cos(\pi n)-1)}{32\pi^3 n^3}(x-1)\cos(\pi n x), \frac{1}{2} < x \le 1. \end{cases}$$

Інші вирази для поправок не наводимо через їх громіздкість. Даний приклад ілюструє наступну теорему і свідчить про те, що оцінка (2.28) відносно n є непокращуваною за порядком.

Теорема 2.2. *Нехай* $q(x) = a\left[-\frac{1}{2} + \mathrm{H}\left(x - \frac{1}{2}\right)\right], a > 0$, *тоді будуть мати місце співвідношення*

$$\left|\lambda_n^{(2j)}\right| \le c_{2j}\left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2j}, j = 1, 2, ..., \tag{2.28}$$

$$\lambda_n^{(2j+1)} = 0, j = 0, 1, ..., \tag{2.29}$$

де $\mathrm{H}(x)$ – *функція Хевісайда і сталі* c_{2j} *не залежать від* a, n *та*

$$c_{2j} \xrightarrow[j\to\infty]{} 0. \tag{2.30}$$

Доведення. Справедливість рівностей (2.29) випливає з теореми 2.1. Доведення нерівностей (2.28) будемо здійснювати методом повної математичної індукції. При $j = 1$ з (2.5) маємо

$$\lambda_n^{(2)} = \frac{2\cos(\pi n) + 1}{16\pi^2 n^2} a^2 \tag{2.31}$$

і c_2 тут дорівнює $\frac{3}{16}$.

Припустимо, що нерівність (2.28) виконується для всіх j від $j = 1$ до $j = k$. Покажемо, що ця нерівність буде мати місце і при $j = k+1$. Із формул (2.4), (2.5) будемо мати

$$\lambda_n^{(2k+2)} = \int_0^1 q(x)u_n^{(0)}(x)u_n^{(2k+1)}(x)dx = \int_0^1 q(x)u_n^{(0)}(x)\int_0^1 g_n(x,\xi_1)\times$$

$$\times \left[-\sum_{p=1}^{2k} \lambda_n^{(2k+1-p)} u_n^{(p)}(\xi_1) + q(\xi_1) u_n^{(2k)}(\xi_1) \right] d\xi_1 dx = \tag{2.32}$$

$$= -\sum_{p=1}^{2k} \lambda_n^{(2k+1-p)} \int\limits_0^1 q(x) u_n^{(0)}(x) \int\limits_0^1 g_n(x, \xi_1) u_n^{(p)}(\xi_1) d\xi_1 dx +$$

$$+ \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 q(x) u_n^{(0)}(x) g_n(x, \xi_1) q(\xi_1) u_n^{(2k)}(\xi_1) d\xi_1 dx = R_{2k} + G_1 \left(u_n^{(2k)} \right).$$

Використовуючи оцінки

$$\max_{x, \xi_1 \in [0,1]} |g_n(x, \xi_1)| \le \frac{1}{n\pi} + \frac{1}{2(n\pi)^2} < \frac{7}{6\pi n}, \tag{2.33}$$

$$\left\| u_n^{(j)} \right\|_\infty = \max_{x \in [0,1]} \left| u_n^{(j)}(x) \right| \le d_j \left(\frac{a}{\pi n} \right)^j, j = 0, 1, ...,$$

із (2.32) одержуємо

$$\left| \lambda_n^{(2k+2)} \right| \le \frac{a}{2} \frac{7}{6\pi n} \sum_{p=1}^{2k} c_{2k+1-p} d_p \left(\frac{a}{\pi n} \right)^{2k+1} + \left| G_1 \left(u_n^{(2k)} \right) \right| = \tag{2.34}$$

$$= \left(\frac{a}{\pi n} \right)^{2k+2} \frac{7}{12} \sum_{p=1}^{2k} c_{2k+1-p} d_p + \left| G_1 \left(u_n^{(2k)} \right) \right| = \hat{R}_{2k} + \left| G_1 \left(u_n^{(2k)} \right) \right|.$$

де $d_j = \left(\frac{4}{\pi^2} \right)^j \frac{1}{(j+1)\sqrt{\pi j}}$ (див., напр., [3, 18]). Далі маємо

$$G_1 \left(u_n^{(2k)} \right) = \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 q(x) u_n^{(0)}(x) g_n(x, \xi_1) q(\xi_1) \int\limits_0^1 g_n(\xi_1, \xi_2) \times$$

$$\times \left[-\sum_{p=1}^{2k-1} \lambda_n^{(2k-p)} u_n^{(p)}(\xi_2) + q(\xi_2) u_n^{(2k-1)}(\xi_2) \right] d\xi_2 d\xi_1 dx =$$

$$= R_{2k-1} + G_2 \left(u_n^{(2k-1)} \right),$$

де

$$R_{2k-1} = -\sum_{s=1}^{2k-1} \lambda_n^{(2k-s)} \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 u_n^{(0)}(x) q(x) g_n(x, \xi_1) q(\xi_1) g_n(\xi_1, \xi_2) \times$$

$$\times u_n^{(s)}(\xi_2) d\xi_2 d\xi_1 dx,$$

$$G_2\left(u_n^{(2k-1)}\right)=\int_0^1\int_0^1\int_0^1 q(x)u_n^{(0)}(x)g_n(x,\xi_1)q(\xi_1)g_n(\xi_1,\xi_2)q(\xi_2)\times$$

$$\times\, u_n^{(2k-1)}(\xi_2)d\xi_2 d\xi_1 dx,$$

і, отже, справедлива нерівність

$$\left|G_1\left(u_n^{(2k)}\right)\right|\le|R_{2k-1}|+\left|G_2\left(u_n^{(2k-1)}\right)\right|\le\left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2k+2}\left(\frac{7}{12}\right)^2\times$$
$$\times\sum_{s=1}^{2k-1}c_{2k-s}d_s+\left|G_2\left(u_n^{(2k-1)}\right)\right|=\hat{R}_{2k-1}+\left|G_2\left(u_n^{(2k-1)}\right)\right|. \quad (2.35)$$

Продовжуючи за аналогією, одержуємо

$$G_{2k}\left(u_n^{(1)}\right)=G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right), \quad (2.36)$$

де

$$G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right)=\underbrace{\int_0^1\cdots\int_0^1}_{2k+2}u_n^{(0)}(\xi_0)\prod_{i=0}^{2k}q(\xi_i)g_n(\xi_i,\xi_{i+1})q(\xi_{2k+1})\times$$

$$\times\, u_n^{(0)}(\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1}\ldots d\xi_0,\quad \xi_0=x.$$

Із формул (2.32)–(2.36) випливає, що

$$\lambda_n^{(2k+2)}=\sum_{p=0}^{2k-2}R_{2k-p}+G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right), \quad (2.37)$$

де

$$R_{2k-p}=-\sum_{s=1}^{2k-p}\lambda_n^{(2k-p+1-s)}\underbrace{\int_0^1\ldots\int_0^1}_{p+2}u_n^{(0)}(\xi_0)\prod_{i=0}^{p}q(\xi_i)g_n(\xi_i,\xi_{i+1})\times$$

$$\times\, u_n^{(s)}(\xi_{p+1})d\xi_{p+1}\ldots d\xi_0, p=0,1,\ldots,2k,$$

причому $R_0=R_1=0$. З (2.37) отримуємо нерівність

$$\left|\lambda_n^{(2k+2)}\right|\le\sum_{p=0}^{2k-2}|R_{2k-p}|+\left|G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right)\right|\le\left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2k+2}\times$$
$$\times\left\{\sum_{p=1}^{2k}\left(\frac{7}{12}\right)^p\sum_{s=1}^{2k+1-p}c_{2k+2-s-p}d_s\right\}+\left|G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right)\right|. \quad (2.38)$$

Змінивши порядок підсумовування в (2.38), отримаємо оцінку

$$\left|\lambda_n^{(2k+2)}\right| \leq \left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2k+2} \chi_1 \sum_{p=1}^{k} c_{2p} \left(\frac{7}{12}\right)^{2k-2p} + \left|G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right)\right|, \tag{2.39}$$

де $\chi_1 = \left(\frac{7}{12}\right)^2 \chi, \quad \chi = \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{48}{7\pi^2}\right)^l \frac{1}{(l+1)\sqrt{\pi l}} \approx 0.316252908.$

Залишилось оцінити $\left|G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right)\right|$. Враховуючи вигляд $q(x)$ з умов теореми, можна переконатись, що має місце формула

$$G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right) = a^2 \int_0^{\frac{1}{2}} \underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{2k} \int_0^{\frac{1}{2}} u_n^{(0)}(\xi_0) \prod_{i=0}^{2k-1} g_n(\xi_i, \xi_{i+1}) q\left(\xi_{i+1}\right) \times$$

$$\times g_n(\xi_{2k}, \xi_{2k+1}) u_n^{(0)}(\xi_{2k+1}) d\xi_{2k+1} \dots d\xi_0. \tag{2.40}$$

Обчислення інтегралів $t_j(\xi_j)$ в (2.40) за змінними ξ_j, $j = 0, 1, ..., 2k+1$ виконаємо послідовно, починаючи з ξ_0 і до ξ_{2k+1}. Отримаємо

$$t_0(\xi_0) = t_{0,1}(\xi_0) = u_n^{(0)}(\xi_0) = \sqrt{2}\sin(\pi n \xi_0),$$

$$t_1(\xi_1) = -a \int_0^{\frac{1}{2}} g_n(\xi_0, \xi_1) t_0(\xi_0) d\xi_0 = t_{1,1}(\xi_1) + t_{1,2}(\xi_1),$$

$$t_{1,1}(\xi_1) = \frac{a\sqrt{2}}{4\pi n} \left(\frac{1}{2} - \left|\frac{1}{2} - \xi_1\right|\right) \cos\left(\pi n \xi_1\right),$$

$$t_{1,2}(\xi_1) = -\operatorname{sgn}\left(\frac{1}{2} - \xi_1\right) \frac{a\sqrt{2}\left(1 + \cos\left(\pi n\right)\right)}{8\pi^2 n^2} \sin\left(\pi n \xi_1\right),$$

$$t_2(\xi_2) = \int_0^1 q(\xi_1) g_n(\xi_1, \xi_2) t_1(\xi_1) d\xi_1 = t_{2,1}(\xi_2) + t_{2,2}(\xi_2),$$

$$t_{2,1}(\xi_2) = \frac{a^2\sqrt{2}}{4\pi^2 n^2} \left[\frac{1}{96} - \frac{1}{8}\left(\frac{1}{2} - \left|\frac{1}{2} - \xi_2\right|\right)^2\right] \sin\left(\pi n \xi_2\right),$$

$$t_{2,2}(\xi_2) = \operatorname{sgn}\left(\frac{1}{2} - \xi_2\right) \frac{a^2\sqrt{2}\left(\cos\left(\pi n\right) - 1\right)}{32\pi^3 n^3} \left(\frac{1}{2} - \left|\frac{1}{2} - \xi_2\right|\right) \cos\left(\pi n \xi_2\right) -$$

$$- \frac{a^2\sqrt{2}\left(2\cos\left(\pi n\right) - 1\right)}{64\pi^4 n^4} \sin\left(\pi n \xi_2\right),$$

$$t_3(\xi_3)=\int\limits_0^1 q(\xi_2)g_n(\xi_2,\xi_3)t_2(\xi_2)d\xi_1=t_{3,1}(\xi_3)+t_{3,2}(\xi_3),$$

$$t_{3,1}(\xi_3)=\frac{a^3\sqrt{2}}{4\pi^3n^3}\left[\frac{1}{384}\left(\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-\xi_3\right|\right)-\frac{1}{96}\left(\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-\xi_3\right|\right)^3\right]\cos\left(\pi n\xi_3\right),$$

$$t_{3,2}(\xi_3)=-\operatorname{sgn}\left(\frac{1}{2}-\xi_3\right)\frac{a^3\sqrt{2}}{3072\pi^4n^4}\left[12\left(\cos\left(\pi n\right)-2\right)\times\right.$$

$$\left.\times\left(\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-\xi_3\right|\right)^2-5\cos\left(\pi n\right)+4\right]\sin\left(\pi n\xi_3\right)-\frac{3a^3\sqrt{2}\left(\cos\left(\pi n\right)-1\right)}{256\pi^5n^5}\times$$

$$\times\left(\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-\xi_3\right|\right)\cos\left(\pi n\xi_3\right)$$

і так далі. Методом повної математичної індукції доводимо, що мають місце зображення

$$t_{2j}(\xi_{2j})=\int\limits_0^1 q(\xi_{2j-1})g_n(\xi_{2j-1},\xi_{2j})t_{2j-1}(\xi_{2j-1})d\xi_{2j-1}=$$

$$=t_{2j,1}(\xi_{2j})+t_{2j,2}(\xi_{2j}),\quad j=1,2,...,\quad t_0(\xi_0)=t_{0,1}(\xi_0)=u_n^{(0)}(\xi_0), \tag{2.41}$$

$$t_{2j,1}(\xi_{2j})=\frac{a^{2j}\sqrt{2}}{4(n\pi)^{2j}}\sum_{p=0}^{j}\mu_{2p}^{(2j)}\left(\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-\xi_{2j}\right|\right)^{2p}\sin(n\pi\xi_{2j}),$$

а також

$$t_{2j+1}(\xi_{2j+1})=\int\limits_0^1 q(\xi_{2j})g_n(\xi_{2j},\xi_{2j+1})t_{2j}(\xi_{2j})d\xi_{2j}=$$

$$=t_{2j+1,1}(\xi_{2j+1})+t_{2j+1,2}(\xi_{2j+1}),\quad j=0,1,..., \tag{2.42}$$

$$t_{2j+1,1}(\xi_{2j+1})=\frac{a^{2j+1}\sqrt{2}}{4(n\pi)^{2j+1}}\sum_{p=0}^{j}\mu_{2p+1}^{(2j+1)}\left(\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-\xi_{2j+1}\right|\right)^{2p+1}\times$$

$$\times\cos(n\pi\xi_{2j+1}).$$

Із (2.41) і (2.42) одержуємо

$$\mu_{2p+1}^{(2j+1)}=\frac{\mu_{2p}^{(2j)}}{4\left(2p+1\right)},\ p=0,1,...,j,\ j=0,1,...,\ \mu_0^{(0)}=4,$$

$$\mu_0^{(2j)}=\sum_{p=0}^{j-1}\frac{\mu_{2p+1}^{(2j-1)}}{4\left(2p+2\right)\left(2p+3\right)}\left(\frac{1}{2}\right)^{2p+2},j=1,2,..., \tag{2.43}$$

$$\mu_{2p+2}^{(2j)} = -\frac{\mu_{2p+1}^{(2j-1)}}{4\,(2p+2)}, p = 0, 1, ..., j-1, j = 1, 2, ...,$$

Наслідком співвідношень (2.43) є

$$\begin{aligned} \mu_{2p+1}^{(2j+1)} &= (-1)^p \frac{\mu_1^{(2j-2p+1)}}{16^p\,(2p+1)!},\ p = 0, 1, ..., j,\ j = 0, 1, ..., \\ \mu_1^{(2j+1)} &= \frac{1}{64} \sum_{s=0}^{j-1} \frac{(-1)^s}{16^s (2s+3)!} \mu_1^{(2j-2s-1)} \left(\frac{1}{2}\right)^{2s}, j = 1, 2, ... \end{aligned} \tag{2.44}$$

Введемо твірну функцію $f(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \mu_1^{(2j+1)}$, тоді з другого рівняння в (2.44) маємо

$$f(z) = \frac{\frac{\sqrt{z}}{8}}{\sin\left(\frac{\sqrt{z}}{8}\right)},$$

звідки

$$\mu_1^{(2j+1)} = \frac{1}{j!} \left.\frac{d^j f(z)}{dz^j}\right|_{z=0}. \tag{2.45}$$

Із (2.43), (2.44) і (2.45) одержуємо розв'язок системи рекурентних співвідношень (2.43)

$$\begin{aligned} \mu_{2p+1}^{(2j+1)} &= \frac{(-1)^p}{16^p\,(2p+1)!\,(j-p)!} \left.\frac{d^{j-p} f(z)}{dz^{j-p}}\right|_{z=0}, \\ &\qquad p = 0, 1, ..., j, j = 0, 1, ..., \\ \mu_0^{(2j)} &= \sum_{p=0}^{j-1} \frac{(-1)^p}{2^{6p+4}\,(2p+3)!\,(j-p-1)!} \left.\frac{d^{j-p-1} f(z)}{dz^{j-p-1}}\right|_{z=0}, \\ &\qquad j = 1, 2, ..., \\ \mu_{2p+2}^{(2j)} &= \frac{(-1)^{p+1}}{2^{4p+2}\,(2p+2)!\,(j-p-1)!} \left.\frac{d^{j-p-1} f(z)}{dz^{j-p-1}}\right|_{z=0}, \\ &\qquad p = 0, 1, ..., j-1, j = 1, 2, ... \end{aligned} \tag{2.46}$$

Із формул (2.41) і (2.42) відповідно отримуємо оцінки

$$\|t_{2j+1,2}\|_\infty \le M_n^{2j+2} \frac{\sqrt{2}}{a} \sum_{p=0}^{j} \left|\mu_{2p}^{(2j)}\right| \left(\frac{1}{2}\right)^{2p+3} + \frac{7}{12} M_n \|t_{2j,2}\|_\infty, \tag{2.47}$$

$$\begin{aligned} \|t_{2j,2}\|_\infty \le & M_n^{2j+1} \frac{\sqrt{2}}{a} \sum_{p=0}^{j-1} \left(\frac{1}{2}\right)^{2p+3} \left[\frac{7}{4}\left|\mu_{2p+1}^{(2j-1)}\right| + \left|\mu_{2p+2}^{(2j)}\right|\right] + \\ & + \frac{7}{12} M_n \|t_{2j-1,2}\|_\infty, \end{aligned} \tag{2.48}$$

де $M_n = \frac{a}{\pi n}$, $\|t_{2j,2}\|_\infty = \max\limits_{\xi_{2j}\in[0,1]} |t_{2j,2}(\xi_{2j})|$.

Використаємо запропоновану в роботі [3] техніку переходу від системи рекурентних нерівностей (2.47)-(2.48) до мажоруючої її зверху системи рівнянь. Розв'язавши цю систему, отримуємо оцінки

$$\|t_{2j+1,2}\|_\infty \le \left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2j+2} \sum_{s=0}^{j} \left[\frac{7}{12}\right]^{2s} F_{j-s}, \tag{2.49}$$

$$\|t_{2j,2}\|_\infty \le \left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2j+1} \sum_{r=0}^{j-1} \left[\frac{7}{12}\right]^{2r} D_{j-r}, \tag{2.50}$$

де

$$F_j = \frac{\sqrt{2}}{a}\left(\sum_{p=0}^{j}\left|\mu_{2p}^{(2j)}\right|\left(\frac{1}{2}\right)^{2p+3} + \frac{7}{12}\sum_{p=0}^{j-1}\left(\frac{1}{2}\right)^{2p+3}\left[\frac{7}{4}\left|\mu_{2p+1}^{(2j-1)}\right| + \left|\mu_{2p+2}^{(2j)}\right|\right]\right),$$

$$D_j = \frac{\sqrt{2}}{a}\left(\frac{7}{12}\sum_{p=0}^{j-1}\left|\mu_{2p}^{(2j-2)}\right|\left(\frac{1}{2}\right)^{2p+3} + \sum_{p=0}^{j-1}\left(\frac{1}{2}\right)^{2p+3}\left[\frac{7}{4}\left|\mu_{2p+1}^{(2j-1)}\right| + \left|\mu_{2p+2}^{(2j)}\right|\right]\right).$$

За допомогою функції

$$\tilde{f}(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \left|\mu_1^{(2j+1)}\right| = \frac{\frac{\sqrt{z}}{8}}{\sinh\left(\frac{\sqrt{z}}{8}\right)} \tag{2.51}$$

знаходимо оцінки для виразів F_j і D_j

$$|F_j| \le \frac{59\sqrt{2}}{3a\sinh 1}\left(\frac{1}{2}\right)^{6j+1}, \quad |D_j| \le \frac{13\sqrt{2}}{3a\sinh 1}\left(\frac{1}{2}\right)^{6j-3}. \tag{2.52}$$

Із (2.49), (2.50), (2.52) отримуємо

$$\|t_{2j+1,2}\|_\infty \le \frac{a^{2j+1}}{(\pi n)^{2j+2}}\frac{177\sqrt{2}}{187\sinh 1}\left(\frac{1}{2}\right)^{6j+1}\left[\left(\frac{14}{3}\right)^{2j+2} - 1\right], \tag{2.53}$$

$$\|t_{2j,2}\|_\infty \le \frac{a^{2j}}{(\pi n)^{2j+1}}\frac{39\sqrt{2}}{187\sinh 1}\left(\frac{1}{2}\right)^{6j-3}\left[\left(\frac{14}{3}\right)^{2j} - 1\right]. \tag{2.54}$$

Останній інтеграл, який обчислюємо в (2.40), є

$$G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right) = \int\limits_0^1 u_n^{(0)}(\xi_{2k+1})q(\xi_{2k+1})t_{2k+1}(\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1} =$$

$$= -a\int\limits_0^{\frac{1}{2}} u_n^{(0)}(\xi_{2k+1})t_{2k+1}(\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1} = -a\int\limits_0^{\frac{1}{2}} u_n^{(0)}(\xi_{2k+1})\times$$

$$\times\, t_{2k+1,1}(\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1} + \int\limits_0^1 u_n^{(0)}(\xi_{2k+1})q(\xi_{2k+1})t_{2k+1,2}(\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1} =$$

$$= -\frac{a^{2k+2}}{4(n\pi)^{2k+2}}\sum_{p=0}^{k}\mu_{2p+1}^{(2k+1)}\left[(-1)^{n+1}\left(\frac{1}{2}\right)^{2p+2} + \frac{2p+1}{2}\int\limits_0^{\frac{1}{2}}\xi_{2k+1}^{2p}\times\right.$$

$$\left.\times\cos(2n\pi\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1}\right] + \int\limits_0^1 u_n^{(0)}(\xi_{2k+1})q(\xi_{2k+1})t_{2k+1,2}(\xi_{2k+1})d\xi_{2k+1}.$$

Звідси, враховуючи (2.53) і використовуючи функцію (2.51), одержуємо оцінку

$$\left|G_{2k+1}\left(u_n^{(0)}\right)\right| \le \left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2k+2}\cdot\beta_{2k}, k = 0, 1, ..., \tag{2.55}$$

де

$$\beta_{2k} = \frac{1}{\sinh 1}\left(\frac{1}{2}\right)^{6k+2}\left[\frac{1}{2} + \frac{177\sqrt{2}}{187}\left[\left(\frac{14}{3}\right)^{2k+2} - 1\right]\right].$$

Із (2.39) і (2.55) маємо

$$\left|\lambda_n^{(2k+2)}\right| \le \left(\frac{a}{\pi n}\right)^{2k+2}\left[\chi_1\sum_{p=1}^{k}c_{2p}\left(\frac{7}{12}\right)^{2k-2p} + \beta_{2k}\right], \tag{2.56}$$

звідки отримуємо

$$c_{2k+2} \le \chi_1\sum_{p=1}^{k}c_{2p}\left(\frac{7}{12}\right)^{2k-2p} + \beta_{2k}. \tag{2.57}$$

Замість знаку нерівності в (2.57) поставимо знак рівності. Отримаємо мажоруюче рекурентне рівняння

$$C_{2k+2} = \chi_1\sum_{p=1}^{k}C_{2p}\left(\frac{7}{12}\right)^{2k-2p} + \beta_{2k}, \quad k = 0, 1, ... \tag{2.58}$$

в тому розумінні, що

$$C_{2k+2} \geq c_{2k+2}, \quad k = 0, 1, \dots . \tag{2.59}$$

Тут

$$C_2 = c_2 = \beta_0 = \frac{1}{\sinh 1}\left[\frac{1}{8} + \frac{59\sqrt{2}}{12}\right]. \tag{2.60}$$

Розв'язуючи рекурентне рівняння (2.58), отримаємо

$$C_{2k+2} = \chi_1 \sum_{p=0}^{k-1} \beta_{2p}\left(\chi_1 + \left(\frac{7}{12}\right)^2\right)^{k-1-p} + \beta_{2k},\ k = 0, 1, ..., \tag{2.61}$$

звідки згідно з (2.59) одержимо оцінку

$$c_{2k+2} \leq 6.1570 \cdot [0.4479]^k - 0.2 \cdot 10^{-8} \cdot [0.3403]^k - 0.1340 \cdot [0.0156]^k . \tag{2.62}$$

Із (2.56), (2.59)–(2.62) слідує справедливість співвідношень (2.28) і (2.30).

Теорема доведена. $\square$

2.4 Потенціал є кусково-гладкою функцією

Розглянемо задачу Штурма-Ліувілля (2.1) з кусково-гладким потенціалом $q(x) \in Q^1[0, 1] \cap C[0, 1]$, коли

$$q(x) = \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} - x\right)\mathrm{H}\left(x - \frac{1}{2}\right) = \begin{cases} \frac{1}{2}, 0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \\ 1 - x, \frac{1}{2} < x \leq 1, \end{cases} \tag{2.63}$$

де $\mathrm{H}(x)$ – функція Хевісайда. Застосуємо FD-метод згідно з (2.3)-(2.6), (2.9). В цьому випадку FD-метод є таким, що *точно реалізується.*

Експериментально визначеною поведінкою поправок до власних значень відносно номера n є така (розрахунки здійснено до 14-ї поправки):

$$\lambda_n^{(1)} = \mathcal{O}(1), \lambda_n^{(2)} = \mathcal{O}\left(n^{-2}\right), \lambda_{2\mu}^{(3)} = \mathcal{O}\left((2\mu)^{-6}\right), n = 2\mu, \mu = 1, 2, ...,$$

$$\lambda_{2\mu-1}^{(3)} = \mathcal{O}\left((2\mu - 1)^{-4}\right), n = 2\mu - 1, \mu = 1, 2, ..., \tag{2.64}$$

$$\lambda_n^{(2j)} = \mathcal{O}\left(n^{-2j-2}\right),\ \lambda_n^{(2j+1)} = \mathcal{O}\left(n^{-2j-2}\right), j = 2, 3, \dots .$$

Для прикладу наведемо декілька перших поправок:

$$\lambda_n^{(1)} = \frac{3}{8} + \frac{1-\cos(\pi n)}{4\pi^2 n^2},$$

$$\lambda_n^{(2)} = \frac{5}{768\pi^2 n^2} - \frac{3\cos(\pi n)+7}{64\pi^4 n^4} + \frac{5\left(\cos(\pi n)-1\right)}{32\pi^6 n^6},$$

$$\lambda_n^{(3)} = \frac{\cos(\pi n)-1}{2048\pi^4 n^4} + \frac{5\left(8+\cos(\pi n)\right)}{768\pi^6 n^6} + \frac{77\left(\cos(\pi n)-1\right)}{384\pi^8 n^8} - \frac{3\left(\cos(\pi n)-1\right)}{16\pi^{10} n^{10}},$$

$$\lambda_{2\mu-1}^{(3)} = -\frac{1}{1024\pi^4\left(2\mu-1\right)^4} + \frac{35}{768\pi^6\left(2\mu-1\right)^6} - \frac{77}{192\pi^8\left(2\mu-1\right)^8} +$$

$$+\frac{3}{8\pi^{10}\left(2\mu-1\right)^{10}}, n = 2\mu-1,\ \lambda_{2\mu}^{(3)} = \frac{15}{256\pi^6\left(2\mu\right)^6}, n = 2\mu, \mu = 1,2,...,$$

$$\lambda_n^{(4)} = \frac{42\cos(\pi n)+43}{589824\pi^6 n^6} + \frac{47\cos(\pi n)-252}{12288\pi^8 n^8} + \frac{1274+761\cos(\pi n)}{4096\pi^{10} n^{10}} -$$

$$-\frac{913\left(\cos(\pi n)-1\right)}{1536\pi^{12} n^{12}} + \frac{143\left(\cos(\pi n)-1\right)}{512\pi^{14} n^{14}}.$$

Дві перші поправки до власних функцій мають вигляд:

$$u_n^{(1)}(x) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{2}}{16}\left(\frac{1}{\pi n} + \frac{2(\cos(\pi n)-1)}{\pi^3 n^3}\right) x\cos(\pi n x) + \\ +\frac{\sqrt{2}}{32}\left(\frac{1}{\pi^2 n^2} + \frac{6(\cos(\pi n)-1)}{\pi^4 n^4}\right)\sin(\pi n x), 0 \le x \le \frac{1}{2}, \\ \frac{\sqrt{2}}{16}\left(\frac{4x-1}{\pi n} - \frac{2(\cos(\pi n)-1)}{\pi^3 n^3}\right)(x-1)\cos(\pi n x) - \\ -\frac{\sqrt{2}}{32}\left(\frac{8x-5}{\pi^2 n^2} - \frac{6(\cos(\pi n)-1)}{\pi^4 n^4}\right)\sin(\pi n x), \frac{1}{2} < x \le 1, \end{cases}$$

$$u_n^{(2)}(x) = \begin{cases} -\frac{\sqrt{2}}{1536}\left(\frac{1}{\pi^3 n^3} + \frac{24(3\cos(\pi n)+2)}{\pi^5 n^5} - \frac{216(\cos(\pi n)-1)}{\pi^7 n^7}\right) x\cos(\pi n x) - \\ -\frac{\sqrt{2}}{61440}\left(\frac{120x^2-17}{\pi^2 n^2} + \frac{10\left(48(\cos(\pi n)-1)x^2-23\cos(\pi n)+9\right)}{\pi^4 n^4} - \right. \\ \left. -\frac{80\left(12(\cos(\pi n)-1)x^2+71\cos(\pi n)+67\right)}{\pi^6 n^6} + \frac{12960(\cos(\pi n)-1)}{\pi^8 n^8}\right) \times \\ \times \sin(\pi n x), 0 \le x \le \frac{1}{2}, \\ -\frac{\sqrt{2}}{1536}\left(\frac{160x^2-140x+29}{\pi^3 n^3} + \frac{24(7(\cos(\pi n)-1)x-4\cos(\pi n)+9)}{\pi^5 n^5} - \right. \\ \left. -\frac{216(\cos(\pi n)-1)}{\pi^7 n^7}\right)(x-1)\cos(\pi n x) - \frac{\sqrt{2}}{61440}\left(\frac{1}{\pi^2 n^2}\left[1920x^4 - \right.\right. \\ -4800x^3 + 3960x^2 - 1200x + 103\right] - \frac{10}{\pi^4 n^4}\left[192(\cos(\pi n)-1)\times \right. \\ \times x^3 - 48(9\cos(\pi n)-29)x^2 + 48(6\cos(\pi n)-31)x - \\ \left. -73\cos(\pi n)+399\right] - \frac{80\left((\cos(\pi n)-1)\left(12x^2-108x\right)+65\cos(\pi n)-47\right)}{\pi^6 n^6} + \\ \left. + \frac{12960(\cos(\pi n)-1)}{\pi^8 n^8}\right)\sin(\pi n x), \frac{1}{2} < x \le 1. \end{cases}$$

2.5 Потенціал є функцією з негативного простору Соболєва

Основною ідеєю дослідження багатьох квантово-механічних моделей є вивчення властивостей гамільтоніанів наступного вигляду:

$$\mathcal{H} = -\Delta + \sum_{\alpha \in \aleph} \gamma_\alpha \delta_\alpha (\cdot) , \qquad (2.65)$$

де Δ – самоспряжений оператор Лапласа в $L^2 \left(R^d\right)$, d – розмірність конфігураційного простору, $\aleph$ – дискретна не більш ніж зліченна підмножина в R^d, $\delta_\alpha (\cdot)$ – дельта-функція Дірака в α (деталі див. [40]). $\mathcal{H}$ описує енергію квантово-механічної частинки, яка рухається під впливом «контактного потенціалу» створеного «точковими джерелами» сил γ_α, розташованих в α. Надалі дельта-функцію Дірака будемо позначати через $\delta (x)$.

Потенціали типу *дельта-функції Дірака* (*the Dirac delta function potentials*) були використані для 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 тощо (див., напр., [40, 63, 73] і посилання в них). Історія досліджень, математичні властивості і візуалізація деяких моделей, пов'язаних з такими розривними потенціалами, та їх застосування до фізичних систем викладено в роботі [73].

В даному підрозділі розглянемо задачу на власні значення для гамільтоніану $\mathcal{H}$ із $d = 1$, $\aleph = \{\alpha\}$, $\alpha = \frac{1}{2}$, тобто розглянемо задачу Штурма-Ліувілля другого порядку (2.1) з потенціалом $q(x)$, що є функцією, яка належить негативному простору Соболєва $H_2^{-1}(0, 1)$, а саме, випадок, коли

$$q(x) = a\delta \left(x - \frac{1}{2} \right), \; a = const > 0. \qquad (2.66)$$

Лінійні задачі Штурма-Ліувілля з потенціалами-розподілами (*distribution potentials*) широко досліджені теоретично (див., напр., [7, 8, 36, 168]). Обширний огляд присвячений історії та сучасному стану теорії регуляризованих слідів лінійних операторів станом на 2006 рік наведено в роботі [37], в якій основна увага приділена операторам з дискретним спектром.

Застосуємо до задачі (2.1), (2.66) FD-метод згідно з (2.3)-(2.6), (2.9). В цьому випадку FD-метод є таким, що *точно реалізується.* Використаємо *фільтруючу властивість* (*«sifting»* або *«sampling property»*) дельта-функції Дірака (див., напр., [157, §1.17]):

$$\int_0^1 f(x)\delta\left(x-\frac{1}{2}\right)dx = f\left(\frac{1}{2}\right) \quad \forall f(x)\in C[0,1]. \tag{2.67}$$

Тоді для всіх парних $n=2\mu, \mu=1,2,...$ отримуємо $u_n^{(j)}(x)=0$, $\lambda_n^{(j)}=0$, $j=1,2,...$, тобто FD-метод 0-го рангу дає точний розв'язок задачі (2.1), (2.66):

$$\lambda_n=\lambda_n^{(0)}=(\pi n)^2, \quad u_n(x)=u_n^{(0)}(x)=\sqrt{2}\sin(\pi n x).$$

При непарних $n=2\mu-1, \mu=1,2,...$ поведінка поправок до власних значень є наступною:

$$\lambda_n^{(2j)}=\mathcal{O}\left(n^{-2j}\right), \quad \lambda_n^{(2j-1)}=\mathcal{O}\left(n^{-2j+2}\right), \quad j=1,2,\ldots. \tag{2.68}$$

Наведемо для прикладу декілька перших поправок при $n=2\mu-1, \mu=1,2,...$

$$\lambda_n^{(1)}=2a,\ \lambda_n^{(2)}=-\frac{a^2}{\pi^2n^2},\ \lambda_n^{(3)}=-\frac{a^3}{3\pi^2n^2}+\frac{7a^3}{2\pi^4n^4},$$

$$\lambda_n^{(4)}=\frac{19a^4}{24\pi^4n^4}-\frac{31a^4}{4\pi^6n^6},$$

$$\lambda_n^{(5)}=\frac{a^5}{15\pi^4n^4}-\frac{31a^5}{12\pi^6n^6}+\frac{38785a^5}{2048\pi^8n^8}-\frac{93a^5}{16384\pi^{10}n^{10}}.$$

При непарних n поправки до власних функцій $u_n^{(j)}(x), j=1,2,...$ є парними функціями на відрізку $[0,1]$ відносно точки $\frac{1}{2}$ для будь-якого $j=1,2,\ldots$, тобто $u_n^{(j)}(x)=u_n^{(j)}(1-x)$. Для прикладу наведемо перші дві поправки до власних функцій:

$$u_n^{(1)}(x)=a\sqrt{2}\,(-1)^{\mu+1}g_n\left(x,\frac{1}{2}\right),$$

$$u_n^{(2)}(x)=a^2\sqrt{2}\,(-1)^{\mu+1}\left[-2\int_0^1 g_n\left(\xi,\frac{1}{2}\right)g_n\left(x,\xi\right)d\xi+g_n\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)g_n\left(x,\frac{1}{2}\right)\right].$$

Дослідимо збіжність FD-методу для даного випадку. Враховуючи властивості функції $q(x)$, з (2.5) і (2.9) отримуємо

$$\lambda_n^{(j+1)} = a\int\limits_0^1 \delta\left(x-\frac{1}{2}\right)u_n^{(j)}(x)u_n^{(0)}(x) = a\sqrt{2}\,(-1)^{\mu+1}\,u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right),$$

$$u_n^{(j+1)}(x) = \int\limits_0^1 g_n\left(x,\xi\right)\left[-\sum_{p=1}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}u_n^{(p)}(\xi) + a\delta\left(\xi-\frac{1}{2}\right)u_n^{(j)}(\xi)\right]d\xi =$$
$$= -\sum_{p=1}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}\int\limits_0^1 g_n\left(x,\xi\right)u_n^{(p)}(\xi)d\xi + ag_n\left(x,\frac{1}{2}\right)u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right),$$

звідки

$$\left|\lambda_n^{(j+1)}\right| = a\sqrt{2}\left|u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|, \tag{2.69}$$

$$\left|u_n^{(j+1)}\left(\frac{1}{2}\right)\right| \le \sum_{p=1}^{j}\left|\lambda_n^{(j+1-p)}\right|\left|\int\limits_0^1 g_n\left(\frac{1}{2},\xi\right)u_n^{(p)}\left(\xi\right)d\xi\right| +$$
$$+ a\left|g_n\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\right|\left|u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|, \tag{2.70}$$

$$\left\|u_n^{(j+1)}\right\|_{L_2} \le \sum_{p=1}^{j}\left|\lambda_n^{(j+1-p)}\right|\left\|\int\limits_0^1 g_n\left(\cdot,\xi\right)u_n^{(p)}(\xi)d\xi\right\|_{L_2} +$$
$$+ a\left\|g_n\left(\cdot,\frac{1}{2}\right)\right\|_{L_2}\left|u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|. \tag{2.71}$$

Звідси одержуємо оцінки:

$$\left|u_n^{(j+1)}\left(\frac{1}{2}\right)\right| \le a\sqrt{2}\sum_{p=1}^{j}\left|u_n^{(j-p)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|M_n\left\|u_n^{(p)}\right\|_{L_2} + a\left|g_n\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\right|\times$$
$$\times\left|u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right)\right| \le a\sqrt{2}M_n\sum_{p=0}^{j}\left|u_n^{(j-p)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|\left\|u_n^{(p)}\right\|_{L_2}, \tag{2.72}$$

$$\left\|u_n^{(j+1)}\right\|_{L_2} \le a\sqrt{2}M_n\sum_{p=0}^{j}\left|u_n^{(j-p)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|\left\|u_n^{(p)}\right\|_{L_2}, \tag{2.73}$$

де

$$M_n = \max_{x,\xi\in[0,1]} |g_n(x,\xi)| \le \frac{1}{n\pi} + \frac{1}{2(n\pi)^2}. \tag{2.74}$$

Ввівши позначення

$$v_{j+1} = \left(a\sqrt{2}\,M_n\,\right)^{-j-1} \left|u_n^{(j+1)}\left(\frac{1}{2}\right)\right|,\; V_{j+1} = \left(a\sqrt{2}M_n\right)^{-j-1} \left\|u_n^{(j+1)}\right\|_{L_2}, \tag{2.75}$$

виконаємо заміни (2.75) в системі рекурентних нерівностей (2.72), (2.73) та одержимо

$$v_{j+1} \le \sum_{p=0}^{j} v_{j-p}V_p, \quad V_{j+1} \le \sum_{p=0}^{j} v_{j-p}V_p. \tag{2.76}$$

Замість знаку нерівності поставимо знак рівності. Отримаємо мажоруючу систему рекурентних рівнянь

$$\omega_{j+1} = \sum_{p=0}^{j} \omega_{j-p}\Omega_p, \quad \Omega_{j+1} = \sum_{p=0}^{j} \omega_{j-p}\Omega_p, \quad j = 1, 2, ... \tag{2.77}$$

в тому розумінні, що її розв'язок мажорує відповідний розв'язок системи нерівностей (2.76), тобто

$$\Omega_j \ge V_j\,,\; \omega_j \ge v_j\;,\; j = 0, 1, ... \,. \tag{2.78}$$

Тут

$$v_0 = \omega_0 = \left|u_n^{(0)}\left(\frac{1}{2}\right)\right| = \sqrt{2}, \quad V_0 = \Omega_0 = \left\|u_n^{(0)}\right\|_{L_2} = 1. \tag{2.79}$$

Як бачимо,

$$\omega_{j+1} = \sqrt{2}\Omega_{j+1}, \tag{2.80}$$

тоді з (2.77), як наслідок, одержуємо систему рекурентних рівнянь

$$\Omega_{j+1} = \sum_{p=0}^{j} \Omega_{j-p}\Omega_p, j = 0, 1, ... \,, \Omega_0 = 1, \tag{2.81}$$

розв'язком якої згідно з [6, с.210-212] буде вираз

$$\Omega_j = 4^j 2\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!},\;\; j = 0, 1, ... \,. \tag{2.82}$$

Враховуючи (2.69), (2.78), (2.80), (2.82), будемо мати

$$\left\|u_n^{(j)}\right\|_{L_2} \le 2\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}\left(a4\sqrt{2}\,M_n\,\right)^j \le \frac{\left(a4\sqrt{2}\,M_n\right)^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}}. \tag{2.83}$$

Остання частина нерівностей (2.83) була одержана за допомогою міркувань, пов'язаних із доведенням формули Валліса [38, с. 344]. Враховуючи (2.79), (2.80), (2.83), одержуємо

$$\left|u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right)\right| \le 2^{\frac{3}{2}}\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}\left(a4\sqrt{2}\,M_n\right)^j \le \sqrt{2}\frac{\left(a4\sqrt{2}\,M_n\right)^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}}, \tag{2.84}$$

$$\left|\lambda_n^{(j+1)}\right| = a\sqrt{2}\left|u_n^{(j)}\left(\frac{1}{2}\right)\right| \le a4\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}\left(a4\sqrt{2}M_n\right)^j \le a2\frac{\left(a4\sqrt{2}M_n\right)^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}}. \tag{2.85}$$

Із (2.83), (2.85) випливає така

Теорема 2.3. *Нехай виконується умова*

$$r_n = a4\sqrt{2}M_n < 1, \tag{2.86}$$

тоді FD-метод для задачі Штурма-Ліувілля (2.1) з $q(x) = a\delta\left(x - \frac{1}{2}\right)$ *експоненціально збігається і справедливими є такі оцінки його точності:*

$$\left\|u_n - \overset{m}{u}_n\right\|_{L_2} = \left\|u_n - \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j)}\right\|_{L_2} \le \frac{r_n^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}(1-r_n)}, \tag{2.87}$$

$$\left|\lambda_n - \overset{m}{\lambda}_n\right| = \left|\lambda_n - \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)}\right| \le \frac{r_n^{m}}{(m+1)\sqrt{\pi m}(1-r_n)}. \tag{2.88}$$

Оцінки (2.85) для $\lambda_n^{(j+1)}$ у випадку непарного n за порядком є непокращуваними, про що свідчать наведені вище аналітичні розрахунки.

2.6 Висновки до розділу 2

В даному розділі вивчено поведінку складових FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) $u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n^{(j)}$ відносно порядкового номера n власного значення в залежності від ступеня гладкості потенціалу $q(x)$. FD-метод застосовано для розв'язування самоспряжених задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з рівнянням у формі Шрьодінгера, крайовими умовами Діріхле та потенціалами, які належать різним класам гладкості та є такими, що FD-метод точно реалізується, а саме, коли $q(x)$: **а)** нескінченно-диференційовна періодична функція ($q(x) \in C^{\infty}[0,1]$): $q(x) = \cos(\pi x)$; **б)** кусково-стала функція $\big(q(x) \in Q^0[0,1]\big)$: $q(x) = a\left[-1/2 + \mathrm{H}\left(x - 1/2\right)\right]$, $a = const > 0$; **в)** кусково-гладка функція $\big(q(x) \in Q^1[0,1] \cap C[0,1]\big)$: $q(x) = 1/2 + (1/2 - x)\,\mathrm{H}\left(x - 1/2\right)$; **г)** функція, що належить негативному простору Соболєва $H_2^{-1}(0,1)$: $q(x) = a\delta\left(x - 1/2\right)$, $\quad a = const > 0$.

Основні результати даного розділу:

1) У випадку, коли потенціал $q(x) \in H_2^1\left(0,1\right)$ отримано нове аналітичне зображення другої поправки до власних значень $\lambda_n^{(2)}$ згідно з FD-методом (з $\bar{q}(x) \equiv 0$), а також аналітичну оцінку її абсолютної величини $|\lambda_n^{(2)}|$ (лема 2.1).

2) У випадку, коли потенціал $q(x)$ є непарною функцією на відрізку $[0,1]$ відносно точки $\frac{1}{2}$, доведені співвідношення для складових $u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n^{(j)}$ на парних та непарних кроках FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) в залежності від парності номера n власного значення (теорема 2.1).

3) У випадках, коли потенціал $q(x)$ є кусково-сталою функцією (б) та коли $q(x)$ належить негативному простору Соболєва $H_2^{-1}\left(0,1\right)$ (г), отримано аналітичні оцінки для поправок до власних значень, які відносно n є непокращуваними за порядком (теорема 2.2, див. оцінки (2.28), (2.85)). При цьому у випадку (г) знайдено достатню умову експоненціальної збіжності FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$).

4) У випадках, коли потенціал $q(x)$ є нескінченно-диференційовною періодичною функцією (а) та кусково-гладкою функцією (в), поведінка складових FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) $u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n^{(j)}$ відносно порядкового номеру n досліджена експериментально (див. (2.26), (2.64)).

Основні результати даного розділу опубліковано в статті [27].

РОЗДІЛ 3
НОВА АЛГОРИТМІЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ FD-МЕТОДУ ДЛЯ СКАЛЯРНИХ ЗАДАЧ ШТУРМА-ЛІУВІЛЛЯ ДРУГОГО ПОРЯДКУ

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

Розглянемо самоспряжені задачі Штурма-Ліувілля на відрізку для звичайного диференціального рівняння другого порядку у формі Шрьодінгера у випадку, коли функція $q(x) = \sum_{l=0}^{r} c_l x^l$ є поліном деякого степеня r, та з крайовими умовами a) Діріхле (3.2) і b) Діріхле-Неймана (3.3) відповідно, а саме:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + (\lambda - q(x))\, u(x) = 0, \;\; q(x) = \sum_{l=0}^{r} c_l x^l, \quad x \in (0,1), \tag{3.1}$$

$$\text{a)}\;\; u(0) = u(1) = 0, \tag{3.2}$$

$$\text{b)}\;\; u(0) = u'(1) = 0. \tag{3.3}$$

Застосуємо до (3.1), (3.2) та (3.1), (3.3) FD-метод з вибором функції $\bar{q}(x)$, що наближає $q(x)$, тотожно рівної нулю (або метод гомотопій [52, 62], або, що те ж саме, метод Адомяна [43–46, 166] в нашій інтерпретації). В цьому випадку FD-метод є *таким, що точно реалізується* (див. [145]). Тоді *наближення m-го рангу* до розв'язків задач (3.1), (3.2) та (3.1), (3.3) матимуть вигляд

$$\overset{m}{u}_n(x) = \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j)}(x), \;\; \overset{m}{\lambda}_n = \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)}. \tag{3.4}$$

Відповідні *базові задачі* для випадків a) та b) мають вигляд:

$$\frac{d^2u_n^{(0)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)} u_n^{(0)}(x) = 0, \quad x \in (0,1),$$

$$\text{a)}\;\; u_n^{(0)}(0) = u_n^{(0)}(1) = 0, \tag{3.5}$$

$$\text{b)}\;\; u_n^{(0)}(0) = \frac{du_n^{(0)}(1)}{dx} = 0, \tag{3.6}$$

розв'язками яких є власні функції

$$u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2}\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right) \tag{3.7}$$

та відповідні власні значення:

$$\text{a)}\ \ \lambda_n^{(0)} = (\pi n)^2, \tag{3.8}$$

$$\text{b)}\ \ \lambda_n^{(0)} = \pi^2\left(n - \frac{1}{2}\right)^2. \tag{3.9}$$

Члени рядів (3.4) визначаються як розв'язки відповідної рекурентної послідовності задач, а саме: для випадку крайових умов a) – (3.10), (3.11), а для b) – (3.10), (3.12), тобто

$$\begin{gathered}\frac{d^2u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}(x) = -\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}u_n^{(p)}(x) + q(x)u_n^{(j)}(x) \equiv \\ \equiv -F_n^{(j+1)}(x), \quad x \in (0,1),\end{gathered} \tag{3.10}$$

$$\text{a)}\ \ u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) = 0, \tag{3.11}$$

$$\text{b)}\ \ u_n^{(j+1)}(0) = \frac{du_n^{(j+1)}(1)}{dx} = 0, \tag{3.12}$$

$$j = 0,\ 1,\ ..., m-1,$$

де

$$\begin{aligned}\lambda_n^{(j+1)} &= \int_0^1 q(x)u_n^{(j)}(x)u_n^{(0)}(x)dx = \\ &= \sqrt{2}\sum_{l=0}^{r}c_l\int_0^1 x^l u_n^{(j)}(x)\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)dx.\end{aligned} \tag{3.13}$$

Співвідношення (3.13) одержується з умов розв'язності задач (3.10), (3.11) та (3.10), (3.12), а для їх однозначної розв'язності вимагається додаткова умова ортогональності

$$\int_0^1 u_n^{(j+1)}(x)u_n^{(0)}(x)\,dx = 0, \quad j = 0,\ 1,\ ..., m-1. \tag{3.14}$$

Для того щоб записати розв'язки задач (3.10), (3.11) та (3.10), (3.12) введемо узагальнену функцію Гріна

$$g_n(x,\xi) = 2\sum_{\substack{p=1\\p\neq n}}^{\infty} \frac{\sin\left(\sqrt{\lambda_p^{(0)}}x\right)\sin\left(\sqrt{\lambda_p^{(0)}}\xi\right)}{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}-\sqrt{\lambda_p^{(0)}}} = \tag{3.15}$$

$$= \frac{1}{4\lambda_n^{(0)}}\left(\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x+\xi)\right) - \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x-\xi)\right) - \right.$$
$$-2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\left[\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x+\xi)\right)(1-x-\xi) - \right.$$
$$\left.\left. - \sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(x-\xi)\right)(1-|x-\xi|)\right]\right),$$

або, що те ж саме,

$$g_n(x,\xi) = \left(\frac{(x-\mathrm{H}(x-\xi))\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)}{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}} - \frac{\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)}{2\lambda_n^{(0)}}\right)\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\xi\right) +$$
$$+\frac{\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)(\xi-\mathrm{H}(\xi-x))\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\xi\right)}{\sqrt{\lambda_n^{(0)}}},$$

де $\mathrm{H}(z)$ – функція Хевісайда.

Зауваження 3.1. *Узагальнена функція Гріна* (3.15) *має такі властивості:*

$$g_n(x,\xi) = g_n(\xi,x),\ \ g_n(x,\xi) = g_n(1-x,1-\xi),$$
$$\int_0^1 g_n(x,\xi)\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)dx = 0. \tag{3.16}$$

При фіксованому j розв'язки задач (3.10), (3.11) та (3.10), (3.12), що задовольняють умову ортогональності (3.14), можна записати у вигляді

$$u_n^{(j+1)}(x) = -\int_0^1 g_n(x,\xi)F_n^{(j+1)}(\xi)d\xi, \tag{3.17}$$

де початкове наближення $\lambda_n^{(0)}$, $u_n^{(0)}$ визначено згідно з (3.7), (3.8) та (3.7), (3.9) для випадків крайових умов a) Діріхле і b) Діріхле-Неймана відповідно.

Має місце

Теорема 3.1. *Справедливими є наступні структурні зображення розв'язків задач* (3.10), (3.11) *та* (3.10), (3.12), *а саме при* $j = 1, 2, ...,$

$$u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2}\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right), a_0^{(0)} = \sqrt{2}, \tag{3.18}$$

$$u_n^{(2j-1)}(x) = \sum_{p=1}^{(2j-1)(r+1)} b_p^{(2j-1)} x^p \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right) + \\ + \sum_{p=0}^{(2j-1)(r+1)-1} a_p^{(2j-1)} x^p \sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right), \tag{3.19}$$

$$u_n^{(2j)}(x) = \sum_{p=1}^{2j(r+1)-1} b_p^{(2j)} x^p \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right) + \sum_{p=0}^{2j(r+1)} a_p^{(2j)} x^p \sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right). \tag{3.20}$$

Доведення. Доведення проведемо методом повної математичної індукції. Введемо позначення

$$\begin{aligned} z(t,x) &= \int_0^1 g_n(x,\xi)\xi^t \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\xi\right) d\xi, \\ z^T(t,x) &= \int_0^1 g_n(x,\xi)\xi^t \sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\xi\right) d\xi. \end{aligned} \tag{3.21}$$

Зауважимо, що в наступних підпунктах 3.1.1, 3.1.2 наведено формули для виразів $z(t,x)$, $z^T(t,x)$ для кожного із випадків крайових умов a) Діріхле (3.1), (3.2) та b) Діріхле-Неймана (3.1), (3.3) окремо.

Перепишемо зображення (3.19) та (3.20) в еквівалентній формі, яка є більш зручною для їх аналізу та доведення теореми. Використовуючи введені позначення (3.21), (3.21), з інтегрального зображення розв'язку (3.17) при $j = 1, 2, ...,$ отримаємо

$$\begin{aligned} u_n^{(2j-1)}(x) = -\sum_{p=0}^{j-2} \lambda_n^{(2j-2-2p)} \left[\sum_{t=1}^{(2p+1)(r+1)} b_t^{(2p+1)} z(t,x) + \right. \\ \left. + \sum_{t=1}^{(2p+1)(r+1)-1} a_t^{(2p+1)} z^T(t,x) \right] - \sum_{p=1}^{j-1} \lambda_n^{(2j-1-2p)} \left[\sum_{t=1}^{2p(r+1)-1} b_t^{(2p)} z(t,x) + \right. \end{aligned} \tag{3.22}$$

$$+\sum_{t=1}^{2p(r+1)} a_t^{(2p)} z^T(t,x)\Bigg] + \sum_{t=1}^{2(j-1)(r+1)-1} b_t^{(2j-2)} \sum_{l=0}^{r} c_l z(t+l,x) +$$
$$+\sum_{t=0}^{2(j-1)(r+1)} a_t^{(2j-2)} \sum_{l=0}^{r} c_l z^T(t+l,x),$$

$$u_n^{(2j)}(x) = -\sum_{p=1}^{j-1} \lambda_n^{(2j-2p)} \left[\sum_{t=1}^{2p(r+1)-1} b_t^{(2p)} z(t,x) + \sum_{t=1}^{2p(r+1)} a_t^{(2p)} z^T(t,x)\right] -$$
$$-\sum_{p=0}^{j-1} \lambda_n^{(2j-2p-1)} \left[\sum_{t=1}^{(2p+1)(r+1)} b_t^{(2p+1)} z(t,x) + \sum_{t=1}^{(2p+1)(r+1)-1} a_t^{(2p+1)} z^T(t,x)\right] + \quad (3.23)$$
$$+\sum_{t=1}^{(2j-1)(r+1)} b_t^{(2j-1)} \sum_{l=0}^{r} c_l z(t+l,x) + \sum_{t=0}^{(2j-1)(r+1)-1} a_t^{(2j-1)} \sum_{l=0}^{r} c_l z^T(t+l,x).$$

Легко перевірити справедливість зображення (3.22) та (3.23) при $j = 1$, а саме

$$u_n^{(1)}(x) = a_0^{(0)} \sum_{l=0}^{r} c_l z^T(l,x) = a_0^{(0)} c_r z^T(r,x) + a_0^{(0)} c_{r-1} z^T(r-1,x) + ... =$$
$$= \left[-\frac{\sqrt{2}c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\,(r+1)} x^{r+1} + ...\right] \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right) + \left[\frac{\sqrt{2}c_r}{4\lambda_n^{(0)}} x^r + ...\right] \sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right),$$

де три крапки означають доданки, які містять степені x менші, ніж перші доданки у квадратних дужках. Звідси легко визначити коефіцієнти зображення (3.19) при $j = 1$. Так, зокрема, маємо

$$b_{r+1}^{(1)} = -\frac{\sqrt{2}c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\,(r+1)}, \quad a_r^{(1)} = \frac{\sqrt{2}c_r}{4\lambda_n^{(0)}}. \tag{3.24}$$

При $j = 1$ із (3.23) отримуємо

$$u_n^{(2)}(x) = -\lambda_n^{(1)} \left[\sum_{t=1}^{r+1} b_t^{(1)} z(t,x) + \sum_{t=1}^{r} a_t^{(1)} z^T(t,x)\right] + \sum_{t=1}^{r+1} b_t^{(1)} \sum_{l=0}^{r} c_l z(t+l,x) +$$
$$+\sum_{t=0}^{r} a_t^{(1)} \sum_{l=0}^{r} c_l z^T(t+l,x) = b_{r+1}^{(1)} c_r z(2r+1,x) + a_r^{(1)} c_r z^T(2r+2,x) + ... =$$
$$= \left[\frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}} \left(\frac{b_{r+1}^{(1)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}} - \frac{a_r^{(1)}}{2r+1}\right) x^{2r+1} + ...\right] \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right) +$$

$$+\left[\frac{c_r b_{r+1}^{(1)}}{4\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(r+1)}x^{2r+2}+...\right]\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right),$$

де три крапки означають доданки, які містять степені x менші, ніж перші доданки у квадратних дужках. Використовуючи знайдені коефіцієнти (3.24), звідси легко визначити коефіцієнти зображення (3.20) при $j=1$, зокрема, маємо

$$\begin{aligned} b_{2r+1}^{(2)}&=\frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\left(\frac{b_{r+1}^{(1)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}-\frac{a_r^{(1)}}{2r+1}\right)=-\frac{\sqrt{2}c_r^2}{8\left[\lambda_n^{(0)}\right]^{3/2}}\left(\frac{1}{r+1}+\frac{1}{2r+1}\right),\\ a_{2r+2}^{(2)}&=\frac{c_r b_{r+1}^{(1)}}{4\sqrt{\lambda_n^{(0)}}(r+1)}=-\frac{\sqrt{2}c_r^2}{8\lambda_n^{(0)}(r+1)^2}. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Зауважимо, що справедливість наведених формул для коефіцієнтів (3.24) та (3.25) підтверджується також наведеними в Додатку А виразами для поправок $u_n^{(1)}(x)$ та $u_n^{(2)}(x)$ у випадку крайових умов Діріхле, які також демонструють асимптотичну поведінку поправок відносно індексу n.

Нехай справедливі зображення (3.19), (3.20), або, що те ж саме, (3.22), (3.23) при $j=1,...,J-1$. Покажемо, що вони будуть справедливі і при $j=J$.

Змінивши порядок підсумовування в кожній із сум, перетворимо (3.22) до вигляду:

$$u_n^{(2J-1)}(x)=-\sum_{t=1}^{(2J-3)(r+1)}\sum_{p=1+\left[\frac{t-r-2}{2r+2}\right]}^{J-2}\lambda_n^{(2J-2-2p)}b_t^{(2p+1)}z(t,x)- \tag{3.26}$$

$$-\sum_{t=1}^{(2J-3)(r+1)-1}\sum_{p=1+\left[\frac{t-r-1}{2r+2}\right]}^{J-2}\lambda_n^{(2J-2-2p)}a_t^{(2p+1)}z^T(t,x)-$$

$$-\sum_{t=1}^{2(J-1)(r+1)-1}\sum_{p=1+\left[\frac{t}{2r+2}\right]}^{J-1}\lambda_n^{(2J-1-2p)}b_t^{(2p)}z(t,x)-$$

$$-\sum_{t=1}^{2(J-1)(r+1)}\sum_{p=1+\left[\frac{t-1}{2r+2}\right]}^{J-1}\lambda_n^{(2J-1-2p)}a_t^{(2p)}z^T(t,x)+$$

$$+\sum_{k=1}^{2(J-1)(r+1)+r-1}\ \sum_{l=\max(0,k-2(J-1)(r+1)+1)}^{\min(k,r)} c_l b_{k-l}^{(2J-2)} z(k,x)+$$

$$+\sum_{k=1}^{2(J-1)(r+1)+r}\ \sum_{l=\max(0,k-2(J-1)(r+1))}^{\min(k,r)} c_l a_{k-l}^{(2J-2)} z^T(k,x).$$

Тут і надалі в межах підсумовування по параметру p використано позначення $[s]$– ціла частина від числа s. Аналіз формули (3.26) з використанням виразів для $z(k,x)$ і $z^T(k,x)$ дозволяє записати її наступним чином

$$\begin{aligned} u_n^{(2J-1)}(x) &= c_r b_{2(J-1)(r+1)-1}^{(2J-2)} z\left(2\left(J-1\right)\left(r+1\right)+r-1,x\right)+ \\ &\qquad + c_r a_{2(J-1)(r+1)}^{(2J-2)} z^T\left(2\left(J-1\right)\left(r+1\right)+r,x\right)+\ldots= \\ &= \left[-\frac{c_r a_{2(J-1)(r+1)}^{(2J-2)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\left(2J-1\right)\left(r+1\right)} x^{(2J-1)(r+1)}+\ldots\right]\cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)+ \end{aligned} \tag{3.27}$$

$$+\left[\frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\left(\frac{b_{2(J-1)(r+1)-1}^{(2J-2)}}{(2J-1)(r+1)-1}+\frac{a_{2(J-1)(r+1)}^{(2J-2)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\right)x^{(2J-1)(r+1)-1}+\ldots\right]\sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right),$$

де три крапки означають доданки, які містять степені x менші, ніж перші доданки у квадратних дужках. Це доводить справедливість зображення (3.19) при $j=J$.

Використовуючи зображення (3.19) при $j=J$ та (3.26), одержуємо рекурентні формули для коефіцієнтів $b_p^{(2j-1)}$ $(p=1,\ldots,(2j-1)(r+1))$, $a_p^{(2j-1)}$ $(p=0,\ldots,(2j-1)(r+1)-1)$, $j=1,2,\ldots$, виражені через коефіцієнти на попередніх кроках FD-методу. Наприклад:

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

$$a_{(2j-1)(r+1)-1}^{(2j-1)} = \frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\left(\frac{b_{2(j-1)(r+1)-1}^{(2j-2)}}{(2j-1)(r+1)-1}+\frac{a_{2(j-1)(r+1)}^{(2j-2)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}}\right), \tag{3.28}$$

$$j=1,2,\ldots,\ b_{-1}^{(0)}=0,\ a_0^{(0)}=\sqrt{2}.$$

Відштовхуючись тепер від вже доведеного зображення (3.19) при $j = J$, аналогічно доводиться справедливість (3.20) при $j = J$. Так, після перетворення кожної із сум в еквівалентному йому зображенні (3.23) будемо мати

$$\begin{aligned} u_n^{(2J)}(x) = &- \sum_{t=1}^{2(J-1)(r+1)-1} \sum_{p=1+\left[\frac{t}{2r+2}\right]}^{J-1} \lambda_n^{(2J-2p)} b_t^{(2p)} z(t,x) - \\ &- \sum_{t=1}^{2(J-1)(r+1)} \sum_{p=1+\left[\frac{t-1}{2r+2}\right]}^{J-1} \lambda_n^{(2J-2p)} a_t^{(2p)} z^T(t,x) - \\ &- \sum_{t=1}^{(2J-1)(r+1)} \sum_{p=1+\left[\frac{t-r-2}{2r+2}\right]}^{J-1} \lambda_n^{(2J-2p-1)} b_t^{(2p+1)} z(t,x) - \\ &- \sum_{t=1}^{(2J-1)(r+1)-1} \sum_{p=1+\left[\frac{t-r-1}{2r+2}\right]}^{J-1} \lambda_n^{(2J-2p-1)} a_t^{(2p+1)} z^T(t,x) + \\ &+ \sum_{k=1}^{2J(r+1)-1} \sum_{l=\max(0,k-(2J-1)(r+1))}^{\min(k,r)} c_l b_{k-l}^{(2J-1)} z(k,x) + \\ &+ \sum_{k=1}^{2J(r+1)-2} \sum_{l=\max(0,k-(2J-1)(r+1)+1)}^{\min(k,r)} c_l a_{k-l}^{(2J-1)} z^T(k,x), \;\; b_0^{(1)} = 0. \end{aligned} \tag{3.29}$$

Аналіз формули (3.29) з використанням виразів для $z(k,x)$ и $z^T(k,x)$ дозволяє записати її наступним чином

$$\begin{aligned} u_n^{(2J)}(x) = c_r b_{(2J-1)(r+1)}^{(2J-1)} z\left(2J(r+1)-1, x\right) + \\ + c_r a_{(2J-1)(r+1)-1}^{(2J-1)} z^T\left(2J(r+1)-2, x\right) + \ldots = \end{aligned} \tag{3.30}$$

$$= \left[\frac{c_r}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}} \left(\frac{b_{(2J-1)(r+1)}^{(2J-1)}}{2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}} - \frac{a_{(2J-1)(r+1)-1}^{(2J-1)}}{2J(r+1)-1} \right) x^{2J(r+1)-1} + \ldots \right] \cos\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}} x\right) +$$

$$+ \left[\frac{c_r b_{(2J-1)(r+1)}^{(2J-1)}}{4\sqrt{\lambda_n^{(0)}} J(r+1)} x^{2J(r+1)} + \ldots \right] \sin\left(\sqrt{\lambda_n^{(0)}} x\right),$$

де три крапки означають доданки, які містять степені x менші, ніж перші доданки у квадратних дужках. Цим доведена справедливість зображення (3.20) при $j = J$.

Використовуючи зображення (3.20) при $j = J$ та (3.29), одержуємо рекурентні формули для коефіцієнтів $b_p^{(2j)}$ $(p = 1, ..., 2j(r+1)-1)$, $a_p^{(2j)}$ $(p = 0, ..., 2j(r+1))$, $j = 1, 2, ...$, виражені через коефіцієнти на попередніх кроках FD-методу. Наприклад:

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

$$a_{2j(r+1)}^{(2j)} = \frac{b_{(2j-1)(r+1)}^{(2j-1)} c_r}{4\sqrt{\lambda_n^{(0)}}\, j\,(r+1)}, \tag{3.31}$$

$$j = 1, 2, \dots .$$

Таким чином, зображення (3.19), (3.20) є справедливими при всіх $j=0, 1, ...$.

Теорема повністю доведена. $\square$

Введемо наступні позначення:

$$\alpha_p = -\frac{\sqrt{2}}{2}\int_0^1 x^p \cos\left(2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)dx, \quad \beta_p = -\frac{\sqrt{2}}{2}\int_0^1 x^p \sin\left(2\sqrt{\lambda_n^{(0)}}x\right)dx. \tag{3.32}$$

Із умови ортогональності (3.14) для поправок до власних функцій (3.19) та (3.20) знаходимо

$$a_0^{(2j-1)} = \sqrt{2}\left(\sum_{p=1}^{(2j-1)(r+1)} b_p^{(2j-1)}\beta_p - \sum_{p=1}^{(2j-1)(r+1)-1} a_p^{(2j-1)}\left[\frac{\sqrt{2}}{2(p+1)} + \alpha_p\right]\right), \tag{3.33}$$

$$a_0^{(2j)} = \sqrt{2}\left(\sum_{p=1}^{2j(r+1)-1} b_p^{(2j)}\beta_p - \sum_{p=1}^{2j(r+1)} a_p^{(2j)}\left[\frac{\sqrt{2}}{2(p+1)} + \alpha_p\right]\right), \tag{3.34}$$

$$j = 1, 2, \dots .$$

Рекурентні формули для решти коефіцієнтів не наводимо через їх громіздкість.

Із (3.13), (3.19) та (3.20) для поправок до власних значень на непарних та парних кроках FD-методу одержуємо формули:

$$\lambda_n^{(1)} = c_0 + \sqrt{2}\sum_{l=1}^{r} c_l\left[\frac{\sqrt{2}}{2(l+1)} + \alpha_l\right], \tag{3.35}$$

$$\lambda_n^{(2j)} = -\sum_{p=1}^{(2j-1)(r+1)} b_p^{(2j-1)} \sum_{l=1}^{r} c_l \beta_{p+l} +$$
$$+ \sum_{p=0}^{(2j-1)(r+1)-1} a_p^{(2j-1)} \sum_{l=1}^{r} c_l \left[\frac{\sqrt{2}}{2\,(p+l+1)} + \alpha_{p+l} \right], \quad (3.36)$$

$$\lambda_n^{(2j+1)} = -\sum_{p=1}^{2j(r+1)-1} b_p^{(2j)} \sum_{l=1}^{r} c_l \beta_{p+l} +$$
$$+ \sum_{p=0}^{2j(r+1)} a_p^{(2j)} \sum_{l=1}^{r} c_l \left[\frac{\sqrt{2}}{2\,(p+l+1)} + \alpha_{p+l} \right]. \quad (3.37)$$
$$j = 1, 2, \ldots .$$

Отже, отримано формули для поправок до власних пар $\lambda_n^{(j)}$, $u_n^{(j)}$, $j = 1, 2, ...$, які не потребують ані обчислення інтегралів, ані розв'язання відповідних крайових задач згідно з формулами (3.10)-(3.13) та містять тільки звичайні алгебраїчні операції. Це дало змогу за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17 здійснити ефективну програмну реалізацію FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) для задач (3.1), (3.2) та (3.1), (3.3), що успішно проілюстровано на чисельних прикладах.

В наступних підпунктах 3.1.1, 3.1.2 наведено вирази для використаних тут позначень $z(t,x)$ та $z^T(t,x)$ згідно з (3.21), α_p та β_p згідно з (3.32) для кожного із випадків крайових умов a) Діріхле (3.1), (3.2) та b) Діріхле-Неймана (3.1), (3.3), а також наведено чисельні приклади.

3.1.1 Випадок крайових умов Діріхле. Розглянемо скалярну задачу Штурма-Ліувілля (3.1) з крайовими умовами Діріхле (3.2). Початкові наближення для рекурентного процесу FD-методу згідно з (3.7), (3.8) є такими:

$$u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2}\sin(\pi n x), \quad \lambda_n^{(0)} = (n\pi)^2. \quad (3.38)$$

Згідно з викладеним в пункті 3.1 алгоритмом FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) поправки до власних пар обчислюються за формулами, які містять тільки звичайні алгебраїчні операції та використовують позначення величин $z(t,x)$ та $z^T(t,x)$

згідно з (3.21), α_p та β_p згідно з (3.32), для яких аналітичні вирази у випадку крайових умов Діріхле є наступними:

$$\begin{aligned} z(t,x) &\stackrel{def}{=} P_{t+1}(x)\sin(\pi n x) + \frac{t}{2\pi n}P_t(x)\cos(\pi n x), \\ z^T(t,x) &\stackrel{def}{=} -P_{t+1}(x)\cos(\pi n x) + \frac{t}{2\pi n}P_t(x)\sin(\pi n x), \end{aligned} \tag{3.39}$$

де

$$P_{t+1}(x) = \frac{1}{(t+1)\,2\pi n}\sum_{s=0}^{\left[\frac{t}{2}\right]} \frac{(-1)^s x^{t+1-2s}}{(2\pi n)^{2s}}\,(t-2s+2)_{2s}\,,\ \ (v)_k \stackrel{def}{=} \frac{(v+k-1)!}{(v-1)!},$$

та

$$\begin{aligned} \alpha_p &\stackrel{def}{=} -\frac{\sqrt{2}}{2}\int_0^1 x^p\cos(2\pi n x)dx = \frac{\sqrt{2}}{4\pi n}\sum_{i=0}^{p-1}\frac{p!\cos\left(\frac{i+1}{2}\pi\right)}{(p-i)!(2\pi n)^i}, \\ \beta_p &\stackrel{def}{=} -\frac{\sqrt{2}}{2}\int_0^1 x^p\sin(2\pi n x)dx = \frac{\sqrt{2}}{4\pi n}\sum_{i=0}^{p-1}\frac{p!\sin\left(\frac{i+1}{2}\pi\right)}{(p-i)!(2\pi n)^i}. \end{aligned} \tag{3.40}$$

Тут $[s]$ – ціла частина від числа s.

В роботах [3, 18] знайдено достатню умову збіжності FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) для задачі (3.1), (3.2):

$$r_n^0 = \frac{4\,\|q\|_\infty}{\pi^2(2n-1)} < 1 \tag{3.41}$$

та доведено такі явні апріорні оцінки:

$$\left|\lambda_n - \overset{m}{\lambda}_n\right| \le \|q\|_\infty\,\frac{\left(r_n^0\right)^m}{1-r_n^0}2\frac{(2m-1)!!}{(2m+2)!!} \le \|q\|_\infty\,\frac{\left(r_n^0\right)^m}{1-r_n^0}\frac{1}{(m+1)\sqrt{\pi m}}, \tag{3.42}$$

$$\left\|u_n - \overset{m}{u}_n\right\| \le \frac{\left(r_n^0\right)^{m+1}}{1-r_n^0}2\frac{(2m+1)!!}{(2m+4)!!} \le \frac{\left(r_n^0\right)^{m+1}}{1-r_n^0}\frac{1}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}}, \tag{3.43}$$

де $r_n^0 = \frac{4\|q\|_\infty}{\pi^2(2n-1)}$, $\|q\|_\infty = \max\limits_{x\in[0,1]}|q(x)|$.

В наступних чисельних прикладах дослідимо поведінку поправок до власних значень $\lambda_n^{(j)}$ відносно n. Вирази для поправок до власних функцій $u_n^{(j)}(x)$ не наводимо у зв'язку з тим, що, як показали розрахунки, швидкість збіжності їх норм відносно n задовольняє оцінку (3.43), доведену в попередніх роботах [3, 18].

Приклад 1. *Нехай $q(x) = \sum_{l=0}^{2} c_l x^l$. Тоді згідно з викладеним вище алгоритмом за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17 отримуємо*

$$
\begin{aligned}
\lambda_n^{(1)} =& c_0 + \frac{1}{2}c_1 + \frac{1}{3}c_2 - \frac{c_2}{2\pi^2 n^2},\\
\lambda_n^{(2)} =& \frac{15c_1^2 + 30c_1c_2 + 16c_2^2}{720\pi^2 n^2} - \frac{5}{48}\frac{3c_1^2 + 6c_1c_2 + 4c_2^2}{\pi^4 n^4} + \frac{7c_2^2}{8\pi^6 n^6},\\
\lambda_n^{(3)} =& \frac{1}{30240}\frac{c_2\left(63c_1^2 + 126c_1c_2 + 64c_2^2\right)}{\pi^4 n^4} - \frac{c_2\left(15c_1^2 + 30c_1c_2 + 16c_2^2\right)}{48\pi^6 n^6} +\\
&+ \frac{31}{32}\frac{c_2\left(3c_1^2 + 6c_1c_2 + 4c_2^2\right)}{\pi^8 n^8} - \frac{121c_2^3}{16\pi^{10} n^{10}},\\
\lambda_n^{(4)} =& \frac{315c_1^4 + 1260c_1^3c_2 + 2085c_1^2c_2^2 + 1650c_1c_2^3 + 512c_2^4}{725760\pi^6 n^6} -\\
&- \frac{1575c_1^4 + 6300c_1^3c_2 + 11907c_1^2c_2^2 + 11214c_1c_2^3 + 4096c_2^4}{17280\pi^8 n^8} +\\
&+ \frac{1100c_1^4 + 4400c_1^3c_2 + 15745c_1^2c_2^2 + 22690c_1c_2^3 + 10928c_2^4}{1280\pi^{10} n^{10}} -\\
&- \frac{14573}{768}\frac{c_2^2\left(3c_1^2 + 6c_1c_2 + 4c_2^2\right)}{\pi^{12} n^{12}} + \frac{17771c_2^4}{128\pi^{14} n^{14}}.
\end{aligned}
\tag{3.44}
$$

З наведених результатів обчислень випливає, що поправки до власних значень відносно порядкового номера n для многочлена $q(x)$ степеня $r = 2$ ведуть себе як $\lambda_n^{(j)} = \mathcal{O}\left(n^{-2j+2}\right)$, $j = 2, 3, \ldots$. Така ж поведінка поправок $\lambda_n^{(j)}$ є справедливою і при $r > 2$. При $r = 1$ $(c_2 = 0)$ поведінка поправок є наступною: $\lambda_n^{(2j)} = \mathcal{O}\left(n^{-4j+2}\right)$, $\lambda_n^{(2j+1)} = 0$, $j = 1, 2, \ldots$, яка є справедливою також при певному підборі коефіцієнтів многочлена $q(x) = \sum_{l=0}^{r} c_l x^l$ вищого степеня $r >= 2$ (наприклад, при $c_2 = -\frac{3}{2}c_3$, $r = 3$).

3.1.2 Випадок крайових умов Діріхле-Неймана. Розглянемо скалярну задачу Штурма-Ліувілля (3.1) з крайовими умовами Діріхле-Неймана (3.3). Початкові наближення для рекурентного процесу FD-методу згідно з (3.7), (3.9) є такими:

$$
u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2}\sin\left(\pi\left(n - \frac{1}{2}\right)x\right), \ \lambda_n^{(0)} = \pi^2\left(n - \frac{1}{2}\right)^2. \tag{3.45}
$$

Згідно з викладеним в пункті 3.1 алгоритмом FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) поправки до власних пар обчислюються за формулами, які містять тільки звичайні алгебраїчні операції та використовують позначення величин $z(t,x)$ і $z^T(t,x)$ згідно з (3.21) та α_p і β_p згідно з (3.32). Аналітичні вирази для цих позначень у випадку крайових умов Діріхле-Неймана є наступними:

$$\begin{gathered}z(t,x)=R_t\left(x\right)+\frac{1}{\pi\left(2n-1\right)}\left(\left[\frac{x^{t+1}}{t+1}+\sqrt{2}\left(\alpha_t-\alpha_{t+1}+\frac{\beta_t}{\pi\left(2n-1\right)}\right)+\right.\right.\\ \left.\left.+\frac{1}{t+2}-\frac{1}{t+1}\right]\sin\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x\right)-\sqrt{2}\beta_t x\cos\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x\right)\right),\end{gathered}\tag{3.46}$$

$$\begin{aligned}z^T(t,x)=R_t^T(x)+\frac{1}{\pi\left(2n-1\right)}&\left(\left[\sqrt{2}\left(\beta_t-\beta_{t+1}-\frac{\alpha_t}{\pi\left(2n-1\right)}\right)-\right.\right.\\ &\left.-\frac{1}{\pi\left(2n-1\right)\left(t+1\right)}\right]\sin\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x\right)+\\ &\left.+\left[-\frac{x^{t+1}}{t+1}+\left(\sqrt{2}\alpha_t+\frac{1}{t+1}\right)x\right]\cos\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x\right)\right),\end{aligned}\tag{3.47}$$

де

$$R_t\left(x\right)=\frac{1}{\pi\left(2n-1\right)}\int\limits_0^x\xi^t\sin\left(\pi\left(2n-1\right)\left(\frac{x}{2}-\xi\right)\right)d\xi=$$

$$=\frac{t!}{\pi^2\left(2n-1\right)^2}\sum_{k=0}^{t}\frac{x^{t-k}\cos\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x+\frac{k\pi}{2}\right)}{(t-k)!\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^k}-\frac{t!\cos\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x-\frac{t\pi}{2}\right)}{\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^{t+2}},$$

$$R_t^T\left(x\right)=\frac{1}{\pi\left(2n-1\right)}\int\limits_0^x\xi^t\cos\left(\pi\left(2n-1\right)\left(\frac{x}{2}-\xi\right)\right)d\xi=$$

$$=\frac{t!}{\pi^2\left(2n-1\right)^2}\sum_{k=0}^{t}\frac{x^{t-k}\sin\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x+\frac{k\pi}{2}\right)}{(t-k)!\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^k}+\frac{t!\sin\left(\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)x-\frac{t\pi}{2}\right)}{\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^{t+2}},$$

та

$$\alpha_p=\frac{\sqrt{2}}{2\pi\left(2n-1\right)}\left[\sum_{i=1}^{p-1}\frac{p!\sin\left(\frac{\pi i}{2}\right)}{(p-i)!\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^i}+\frac{2p!\sin\left(\frac{\pi p}{2}\right)}{\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^p}\right],\tag{3.48}$$

$$\beta_p=-\frac{\sqrt{2}}{2\pi\left(2n-1\right)}\left[\sum_{i=0}^{p-1}\frac{p!\cos\left(\frac{\pi i}{2}\right)}{(p-i)!\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^i}+\frac{2p!\cos\left(\frac{\pi p}{2}\right)}{\left(\pi\left(2n-1\right)\right)^p}\right].$$

Приклад 2. *Нехай $q(x)=c_0+c_1x$. Тоді згідно з викладеним вище алгоритмом FD-методу (з $\bar{q}(x)\equiv 0$) за допомогою системи комп'ютерної алгебри*

Maple 17 отримуємо

$$\lambda_n^{(1)} = c_0 + \frac{1}{2}c_1 + \frac{2c_1}{\pi^2\left(2n-1\right)^2},$$

$$\lambda_n^{(2)} = \frac{c_1^2}{12\pi^2\left(2n-1\right)^2} + \frac{c_1^2}{\pi^4\left(2n-1\right)^4} - \frac{20c_1^2}{\pi^6\left(2n-1\right)^6},$$

$$\lambda_n^{(3)} = \frac{40c_1^3}{3\pi^6\left(2n-1\right)^6} - \frac{512c_1^3}{3\pi^8\left(2n-1\right)^8} + \frac{384c_1^3}{\pi^{10}\left(2n-1\right)^{10}},$$

$$\lambda_n^{(4)} = \frac{c_1^4}{36\pi^6\left(2n-1\right)^6} + \frac{14c_1^4}{3\pi^8\left(2n-1\right)^8} - \frac{680c_1^4}{\pi^{10}\left(2n-1\right)^{10}} + \frac{21472c_1^4}{3\pi^{12}\left(2n-1\right)^{12}} - \\ - \frac{9152c_1^4}{\pi^{14}\left(2n-1\right)^{14}},$$

$$\lambda_n^{(5)} = \frac{56c_1^5}{\pi^{10}\left(2n-1\right)^{10}} - \frac{65824c_1^5}{9\pi^{12}\left(2n-1\right)^{12}} + \frac{457312c_1^5}{5\pi^{14}\left(2n-1\right)^{14}} - \frac{268800c_1^5}{\pi^{16}\left(2n-1\right)^{16}} + \\ + \frac{243712c_1^5}{\pi^{18}\left(2n-1\right)^{18}}.$$

З наведених результатів обчислень випливає, що поправки до власних значень відносно порядкового номера n *для многочлена* $q(x)$ *степеня* $r=1$ *ведуть себе як* $\lambda_n^{(j)} = \mathcal{O}\left(n^{-2j+2-4\left\{\frac{j}{2}\right\}}\right)$, $j = 2, 3, \ldots$, *де* $\{a\}$– *дробова частина від числа* a. *Така ж поведінка поправок* $\lambda_n^{(j)}$ *спостерігається при певному підборі коефіцієнтів многочлена* $q(x) = \sum_{l=0}^{r} c_l x^l$ *вищого степеня* $r >= 2$. *Так, наприклад, при* $r = 3$ *і* $c_1 \neq 0$, $c_2 = -\frac{3}{2}c_3$ *маємо:*

$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(1)}\right) = c_0 + \frac{1}{2}c_1 - \frac{1}{4}c_3,$$

$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(2)}n^2\right) = \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{1}{48}c_1^2 - \frac{1}{40}c_1c_3 + \frac{17}{2240}c_3^2\right),$$

$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(3)}n^6\right) = \frac{c_1}{\pi^6}\left(\frac{5}{24}c_1^2 - \frac{13}{64}c_1c_3 + \frac{11}{224}c_3^2\right),$$

$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(4)}n^6\right) = \frac{1}{\pi^6}\left(\frac{c_1^4}{2304} - \frac{5c_1^3c_3}{5376} + \frac{27c_1^2c_3^2}{35840} - \frac{27c_1c_3^3}{98560} + \frac{5427c_3^4}{143503360}\right),$$

$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(5)}n^{10}\right) = \frac{c_1}{\pi^{10}}\left(\frac{7c_1^4}{128} - \frac{471c_1^3c_3}{4480} + \frac{13509c_1^2c_3^2}{179200} - \frac{188289c_1c_3^3}{7884800} + \frac{1010817c_3^4}{358758400}\right),$$

а при $r = 3$ та $c_1 = 0$, $c_2 = -\frac{3}{2}c_3$ одержимо

$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(1)}\right) = c_0 - \frac{1}{4}c_3, \quad \lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(2)}n^2\right) = \frac{17c_3^2}{2240\pi^2},$$
$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(3)}n^8\right) = -\frac{237c_3^3}{1280\pi^8}, \quad \lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(4)}n^6\right) = \frac{5427c_3^4}{143503360\pi^6},$$
$$\lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(5)}n^{12}\right) = -\frac{235041c_3^5}{13045760\pi^{12}}, \quad \lim_{n\to\infty}\left(\lambda_n^{(6)}n^{10}\right) = \frac{281393271c_3^6}{519137755136000\pi^{10}}.$$

тобто поправки до власних значень ведуть себе як $\lambda_n^{(2j)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{4j-2}}\right)$, $\lambda_n^{(2j+1)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{4j+4}}\right)$, $j = 1, 2, ...$

Зауваження 3.2. *Як випливає із чисельних експериментів і у випадку крайових умов Діріхле і у випадку крайових умов Діріхле-Неймана, завжди існує такий поліном $q(x)$, з яким поправки до власних значень відносно порядкового номера n ведуть себе як $\lambda_n^{(j)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{2j-2}}\right)$. Водночас, яким би не був поліном $q(x)$, завжди будуть мати місце співвідношення $\lambda_n^{(2j)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{4j-2}}\right)$, $\lambda_n^{(2j+1)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{4j+2k}}\right)$, $k \in \{0, 1, 2, ...\}$.*

Теоретико-експериментально це можна пояснити наступним чином. В [29, 150] показано, що у випадку, коли потенціал $q(x)$ є нескінченно-диференційовною функцією, справедливим є асимптотичний розклад (після переходу від відрізку $[0, \pi]$ до відрізку $[0, 1]$)

$$\sqrt{\lambda_n} \simeq \sqrt{\tilde{\lambda}_n} = (n - 1/2)\pi + \sum_{j=0}^{\infty} b_{2j+1}[(2n-1)\pi]^{-2j-1}. \tag{3.49}$$

Нехай ряд (3.49) є абсолютно збіжним, тоді буде абсолютно збіжним ряд

$$\tilde{\lambda}_n = \pi^2\left(n - \frac{1}{2}\right)^2 + \sum_{j=0}^{\infty}\left[\sum_{p=0}^{j-1} b_{2p+1}b_{2j-2p-1} + b_{2j+1}\right][\pi(2n-1)]^{-2j}. \tag{3.50}$$

Порівнюючи ряд (3.50) з відповідним рядом, отриманим згідно з FD-методом для конкретного полінома $q(x)$, одразу однозначно визначаємо b_{2j+1}, $j = 0, 1, ...$ (див. [19] для випадку крайових умов Діріхле). В якості ілюстрації повернемось до прикладу 2 до випадку, коли $q(x) = c_0 + c_1x$. Послідовно отримуємо

$$b_1 = \frac{1}{2}c_1 + c_0, \ \ b_3 = 2c_1 + \frac{1}{12}c_1^2 - b_1^2, \ \ b_5 = c_1^2 - 2b_3b_1,$$
$$b_7 = -20c_1^2 + \frac{40}{3}c_1^3 + \frac{1}{36}c_1^4 - b_3^2 - 2b_5b_1, \ \dots .$$

Згідно з [3] справедливою є теорема, яка для задачі Штурма-Ліувілля (3.1) з крайовими умовами b) Діріхле-Неймана (3.3) визначає достатні умови збіжності FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) та оцінки його точності, які є явними апріорними.

Теорема 3.2. *[3]. Нехай виконується умова*

$$r_n^0 = \frac{2\,\|q\|_\infty}{\pi^2(n-1)} < 1, \text{якщо } n = 2, 3, ..., \ r_1^0 = \frac{2\,\|q\|_\infty}{\pi^2} < 1, \text{якщо } n = 1. \quad (3.51)$$

Тоді FD-метод буде експоненціально збіжним і його точність характеризується такими оцінками:

$$\left|\lambda_n - \overset{m}{\lambda}_n\right| = \left|\lambda_n - \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)}\right| \le \|q\|_\infty \frac{(r_n^0)^m}{1 - r_n^0}\alpha_m, \quad (3.52)$$

$$\left\|u_n - \overset{m}{u}_n\right\| = \left\|u_n - \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j)}\right\| \le \frac{(r_n^0)^{m+1}}{1 - r_n^0}\alpha_{m+1}, \quad (3.53)$$

де $\alpha_m = 2\frac{(2m-1)!!}{(2m+2)!!} \le \frac{1}{(m+1)\sqrt{\pi m}}$, $\|q\|_\infty = \max\limits_{x\in[0,1]} |q(x)|$.

Якщо L_2-оцінка точності FD-методу m-го рангу наближення власних функцій (3.53) з точки зору поведінки відносно n є непокращуваною, то цього не можна сказати про оцінку точності наближень до власних значень (3.53). Остання – занадто груба. Обгрунтуємо це теоретико-експериментально.

Нехай виконуються умови теореми 3.2 і ряд (3.49) абсолютно збігається до $\sqrt{\lambda_n}$, тоді FD-метод для задачі (3.1), (3.3) буде збіжним і буде справедливим співвідношення:

$$\lambda_n = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_n^{(j)} = \pi^2(n - 1/2)^2 +$$
$$+ \sum_{j=0}^{\infty} \left[\sum_{p=0}^{j-1} b_{2p+1}b_{2j-2p-1} + b_{2j+1}\right] [\pi(2n-1)]^{-2j}, \quad (3.54)$$

де доданки в першій сумі задовольняють оцінку

$$\left|\lambda_n^{(j)}\right| \leq \|q\|_\infty (r_n^0)^{j-1}\alpha_{j-1}. \tag{3.55}$$

Із (3.54) слідує, що кожне $\lambda_n^{(j)}$ містить тільки парні степені $[\pi(2n-1)]^{-1}$, і, що

$$\lambda_n^{(1)} = b_1, \;\; \lambda_n^{(2)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\pi^2(2n-1)^2}\right),$$

тоді як із (3.55) слідує

$$\left|\lambda_n^{(1)}\right| \leq \|q\|_\infty, \;\left|\lambda_n^{(2)}\right| \leq \|q\|_\infty r_n^0 = \frac{2\|q\|_\infty^2}{\pi^2(n-1)}\frac{1}{1-\frac{2\|q\|_\infty}{\pi^2(n-1)}}.$$

Очевидно, що члени ряду у правій частині (3.54) можна об'єднати в такі групи, що новий ряд із цих сум буде співпадати з рядом у лівій частині співвідношення (3.54). Таким чином теоретико-експериментально доводиться справедливість поведінки поправок до власних значень відносно n як у випадку крайових умов a) Діріхле-Діріхле (3.2), так і крайових умов b) Діріхле-Неймана (3.3).

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

Розглянемо задачу Штурма-Ліувілля на відрізку $[0,1]$ для звичайного диференціального рівняння другого порядку з крайовими умовами Діріхле

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + (\lambda - q(x))\,u(x) = 0, \; x \in (0,1), \; u(0)=0, \; u(1)=0, \tag{3.56}$$

де $q(x) = \frac{d\sigma(x)}{dx}$ і $\sigma(x)$ є функцією обмеженої варіації.

Наведемо деякі факти, які нам знадобляться у подальшому. Оскільки $\sigma(x)$ є функцією обмеженої варіації, то для неї має місце зображення

$$\sigma(x) = h(x) + \psi(x) + \chi(x),$$

де $h(x)$ – функція стрибків, $\psi(x)$ – абсолютно неперервна функція і $\chi(x)$ – сингулярна функція (див. [15, с.347]), причому вона має не більш ніж зліченну кількість точок розриву, які співпадають з точками розриву функції стрибків $h(x)$. Позначимо ці точки через $x_p \in (0,1)$, $p = 1, 2, \ldots$, $x_1 < x_2 < \ldots$, тоді $h(x) = \sum_p \gamma_p \mathrm{H}(x - x_p)$, де γ_p – дійсні числа, $\mathrm{H}(z)$ – функція Хевісайда. Надалі будемо вважати, що функція $\sigma(x)$ належить до класу функцій обмеженої варіації неперервних справа у будь-якій точці $x \in (0,1)$ та неперервних у точках $x = 0$ і $x = 1$. Цей клас будемо позначати через $BV_c[0,1]$.

Суттєву роль у доведенні збіжності FD-методу в даному підрозділі відіграла наступна теорема.

Теорема 3.3. ***[1, с.481]*** *Нехай* $\sigma(x) \in BV_c[0,1]$ *і функція* $f(x)$ *є неперервною на сегменті* $[0,1]$*, тоді має місце нерівність*

$$\left| \int\limits_0^1 f(x) d\sigma(x) \right| \le \max_{x\in[0,1]} |f(x)| \, \|\sigma\|_v ,$$

де $\|\sigma\|_v = \operatorname{var}\{\sigma(x); 0, 1\}$ *– повна варіація функції* $\sigma(x)$ *на відрізку* $[0,1]$.

В цьому підрозділі досліджено та обгрунтовано FD-метод і здійснена його алгоритмічна реалізація для задачі на власні значення (3.56) з потенціалом, який є похідною від функції обмеженої варіації, а саме, коли

$$q(x) = \sum_{p=1}^{k} \gamma_p \delta(x - x_p) + \psi'(x), \; x_p \in (0,1), \; p = \overline{1,k}.$$

В [63] потенціал такої структури $V(x) = \sum_{p=1}^{K} \gamma_p \delta(x - x_p)$ названо *«Dirac Comb»* та за допомогою нього побудовано нову структуру квантового хвилеводу і встановлено залежність електронної провідності у квантовому хвилеводі від числа K дельта-функцій Дірака і величини сил γ_j. Потенціали, що містять дельта-функції Дірака, застосовуються для моделювання квантовомеханічних систем (див., напр., [40, 63, 73] і посилання в них).

Лінійні задачі Штурма-Ліувілля з потенціалами-розподілами (*«distribution potentials»*) широко досліджені теоретично (див. [37]). Наведемо короткий огляд робіт, що стосуються розглянутої задачі. В роботі [168] доведена загальна формула регуляризованого сліду для сингулярних потенціалів із класу функцій, що складається із розподілів $q(x)$, які не є локально інтегровними функціями і узагальнені первісні яких $\int q(x)dx \in BV_c[0,\pi]$, а в [36] знайдено просте доведення для випадку потенціалу $q\left(x\right) = \delta\left(x - \frac{\pi}{2}\right)$. Слід зауважити, що у випадку, коли $q\left(x\right) \in L_1$ теорема 1 з [168] містить результати роботи [7]. Незалежно від [168] у роботі [8] отримана асимптотика спектру і формула сліду на відрізку $[0, l]$ для класу потенціалів, які можуть містити доданки у вигляді δ - функцій Дірака.

3.2.1 FD-метод з $\bar{q}(x) \equiv 0$.

Для відшукання наближеного розв'язку задачі (3.56) застосуємо до неї FD-метод m-го рангу з функцією $\bar{q}(x)$, що наближає $q(x)$, тотожно рівною нулю ($\bar{q}(x) \equiv 0$). Обгрунтування вибору схеми FD-методу буде наведено у п.3.2.2 для загального випадку $\bar{q}(x) \not\equiv 0$.

Наближений розв'язок m-го рангу шукаємо у вигляді скінченних сум

$$\overset{m}{u}_n(x) = \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j)}(x),\ \ \overset{m}{\lambda}_n = \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)}, \tag{3.57}$$

доданки в яких визначаються як розв'язки рекурентної послідовності задач:

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2 u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)} u_n^{(j+1)}(x) = -\sum_{p=0}^{j} \lambda_n^{(j+1-p)} u_n^{(p)}(x) + q(x) u_n^{(j)}(x),\\
&u_n^{(j+1)}(0) = 0,\ u_n^{(j+1)}(1) = 0,\ x \in (0,1),\ j = 0, 1, ..., m-1,\\
&u_n^{(0)} = \sqrt{2}\sin(n\pi x),\ \ \lambda_n^{(0)} = (n\pi)^2.
\end{aligned} \tag{3.58}$$

З умов розв'язності задач (3.58) $\int_0^1 F_n^{(j+1)}(x) u_n^{(0)}(x)dx = 0$, $j = \overline{0, m-1}$ знаходимо

$$\lambda_n^{(j+1)} = -\sum_{p=1}^{j} \lambda_n^{(j+1-p)} \int\limits_0^1 u_n^{(p)}(x)\, u_n^{(0)}(x)dx + \int\limits_0^1 q(x) u_n^{(j)}(x)\, u_n^{(0)}(x)dx.$$

Для однозначної розв'язності додатково накладається умова ортогональності

$$\int\limits_0^1 u_n^{(j+1)}(x)\, u_n^{(0)}(x)dx = 0.$$

Базова задача є такою ж як у п. 3.1 для випадку а), тому узагальнена функція Гріна $g_n(x,\xi)$ згідно з (3.15) має вигляд:

$$\begin{gathered} g_n(x,\xi) = \left[\frac{(x - \mathrm{H}(x-\xi))\cos(n\pi x)}{\pi n} - \frac{\sin(n\pi x)}{2\pi^2 n^2}\right]\sin(n\pi\xi) + \\ + \frac{\sin(n\pi x)(\xi - \mathrm{H}(\xi - x))\cos(n\pi\xi)}{\pi n} = g_{n,1}(x,\xi) + g_{n,2}(x,\xi), \end{gathered} \tag{3.59}$$

$$g_{n,1}(x,\xi) = \frac{(x-\mathrm{H}(x-\xi))\cos(n\pi x)}{\pi n}\sin(n\pi\xi) + \frac{\sin(n\pi x)(\xi-\mathrm{H}(\xi-x))}{\pi n}\cos(n\pi\xi),$$

$$g_{n,2}(x,\xi) = -\frac{\sin(n\pi x)}{2\pi^2 n^2}\sin(n\pi\xi).$$

Згідно із зауваженням 3.1 для $g_n(x,\xi)$ виконуються властивості (2.1). Також справедливою є така оцінка:

$$|g_n(x,\xi)| \le \frac{1}{\pi n} + \frac{1}{2(\pi n)^2} \le \frac{7}{6\pi n}. \tag{3.60}$$

Запишемо розв'язок задачі (3.58) за допомогою узагальненої функції Гріна $g_n(x,\xi)$:

$$\begin{aligned} u_n^{(j+1)}(x) &= \int_0^1 g_n(x,\xi)\left[-\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}u_n^{(p)}(\xi) + q(\xi)u_n^{(j)}(\xi)\right]d\xi = \\ &= -\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}\int_0^1 g_n(x,\xi)u_n^{(p)}(\xi)d\xi + \int_0^1 g_n(x,\xi)u_n^{(j)}(\xi)d\sigma(\xi), \\ \lambda_n^{(j+1)} &= \int_0^1 q(\xi)u_n^{(j)}(\xi)u_n^{(0)}(\xi)d\xi = \int_0^1 u_n^{(j)}(\xi)u_n^{(0)}(\xi)d\sigma(\xi). \end{aligned} \tag{3.61}$$

Із зображення (3.61), властивостей $g_n(x,\xi)$, зокрема із (3.60), та теореми 3.3 отримуємо таку рекурентну систему нерівностей:

$$\begin{gathered} \left\|u_n^{(j+1)}\right\|_\infty \le \|g_n\|_\infty \left(\sum_{p=1}^{j}\left|\lambda_n^{(j+1-p)}\right|\left\|u_n^{(p)}\right\|_\infty + \left\|u_n^{(j)}\right\|_\infty \|\sigma\|_v\right), \\ \left|\lambda_n^{(j+1)}\right| \le \sqrt{2}\left\|u_n^{(j)}\right\|_\infty \|\sigma\|_v, \end{gathered} \tag{3.62}$$

$$j = 0, 1, ..., m-1,$$

де $\left\|u_n^{(j)}\right\|_\infty = \max\limits_{x\in[0,1]} \left|u_n^{(j)}(x)\right|$, $\|g_n\|_\infty = \max\limits_{x,\xi\in[0,1]} |g_n(x,\xi)|$. З (3.62) слідує оцінка

$$\left\|u_n^{(j+1)}\right\|_\infty \le M_n \sum_{p=0}^{j} \left\|u_n^{(j-p)}\right\|_\infty \left\|u_n^{(p)}\right\|_\infty, \tag{3.63}$$

де $M_n = \sqrt{2}\,\|g_n\|_\infty \|\sigma\|_v \le \sqrt{2}\frac{7}{6\pi n}\|\sigma\|_v$. Виконавши в (3.63) заміну

$$U_j = M_n^{-j}\left\|u_n^{(j)}\right\|_\infty, \quad U_0 = \left\|u_n^{(0)}\right\|_\infty = \sqrt{2}$$

та перейшовши до мажорантного рівняння, в якому $U_j \le \overline{U}_j$, $\overline{U}_0 = U_0 = \sqrt{2}$, отримаємо *нелінійне рекурентне співвідношення:* $\overline{U}_{j+1} = \sum_{s=0}^{j} \overline{U}_{j-s}\overline{U}_s$, розв'язком якого згідно з [6, с.159-161, с.210] є

$$\overline{U}_j = \frac{(2j)!}{j!\,(j+1)!} = 4^j 2\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}.$$

Повертаючись до заміни, одержимо розв'язок нерівностей (3.62):

$$\begin{gathered}\left\|u_n^{(j)}\right\|_\infty \le 2\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}(4M_n)^j \le \frac{(4M_n)^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}},\\ \left|\lambda_n^{(j+1)}\right| \le 2\sqrt{2}\,\|\sigma\|_v \frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}(4M_n)^j \le \sqrt{2}\,\|\sigma\|_v \frac{(4M_n)^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}},\\ j = 0,1,...,m-1,\end{gathered} \tag{3.64}$$

де $(2j)!! = 2\cdot 4\cdot ...\cdot 2j$, $(2j+1)!! = 1\cdot 3\cdot ...\cdot (2j+1)$. Остання частина нерівностей (3.64) була одержана за допомогою міркувань, пов'язаних із доведенням формули Валліса [38, с.344]. Звідси випливає наступна теорема.

Теорема 3.4. *Нехай $\sigma(x) \in BV_c[0,1]$ і виконується умова*

$$r_n = 4M_n = 4\sqrt{2}\,\|g_n\|_\infty \|\sigma\|_v < 1, \tag{3.65}$$

тоді FD-метод для задачі Штурма-Ліувілля (3.56) експоненціально збігається і мають місце такі оцінки його точності:

$$\left\|u_n - \overset{m}{u}_n\right\|_\infty = \left\|u_n - \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j+1)}\right\|_\infty \le \frac{r_n^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}(1-r_n)}, \tag{3.66}$$

$$\left|\lambda_n - \overset{m}{\lambda}_n\right| = \left|\lambda_n - \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j+1)}\right| \le \frac{\sqrt{2}\,\|\sigma\|_v r_n^m}{(m+1)\sqrt{\pi m}(1-r_n)}. \tag{3.67}$$

Одержані результати є значним посиленням і узагальненням відповідних результатів пункту 2.5 (див. [27, п. 5]), а також результатів теореми 1 із [8]. Для того щоб показати це наведемо відповідний результат із [8]. Якщо $\sigma(x) \in BV_c[0,1]$ і

$$n > \frac{1}{4\pi}\left(\frac{681}{16}\left\|\sigma\right\|_v + 1\right) \stackrel{def}{=} n_b, \tag{3.68}$$

то згідно з позначеннями даного пункту справедливим є таке асимптотичне зображення власних значень:

$$\lambda_n = (\pi n)^2 - \int_0^1 \left[u_n^{(0)}(x)\right]^2 d\sigma(x) - \int_0^1 \int_0^1 k_n(\xi_1, \xi_2) d\sigma(\xi_1) d\sigma(\xi_2) + \nu'_{n,2}(\sigma),$$

де

$$\begin{aligned} k_n(\xi_1, \xi_2) \equiv & \frac{1}{4\pi n} \sum_{i=1}^{2} (1 - \cos(2\pi n \xi_i)) \sin(2\pi n \xi_{3-i}) \times \\ & \times \left[\frac{2}{\pi}\Theta(2\pi\xi_{3-i}) + (-1)^{i-1} \operatorname{sgn}(\xi_2 - \xi_1)\right], \end{aligned}$$

$$\Theta(t) = (\pi - t)/2,$$

$$\left|\nu'_{n,2}(\sigma)\right| \leq \left\|\sigma\right\|_v^2 \frac{4.4 + 467\left\|\sigma\right\|_v + 2\left\|\sigma\right\|_v^2}{\left(\pi n - \frac{1}{4}\right)^2} \stackrel{def}{=} \gamma_b\left(n, \left\|\sigma\right\|_v\right). \tag{3.69}$$

Водночас з теореми 3.4 випливає, що

$$\lambda_n = (\pi n)^2 + \lambda_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)} + R_n^{(3)}, \tag{3.70}$$

де

$$\lambda_n^{(1)} = \int_0^1 \left[u_n^{(0)}(x)\right]^2 d\sigma(x), \quad \lambda_n^{(2)} = \int_0^1 u_n^{(0)}(x) u_n^{(1)}(x) d\sigma(x),$$

$$u_n^{(1)}(x) = \int_0^1 g_n(x, \xi) u_n^{(0)}(\xi) d\sigma(\xi),$$

і для залишкового члену $R_n^{(3)}$ при умові виконання (3.65) справедливою є оцінка

$$\left|R_n^{(3)}\right| \leq \frac{\left\|\sigma\right\|_v r_n^2}{3\sqrt{\pi}(1 - r_n)}. \tag{3.71}$$

Для того щоб зробити більш зручним порівняння оцінок залишкових членів (3.69) і (3.71), використаємо оцінку для r_n

$$r_n \stackrel{def}{=} 4\sqrt{2}\,\|g_n\|_\infty \|\sigma\|_v \le 4\sqrt{2}\left[\frac{1}{\pi n} + \frac{1}{2(\pi n)^2}\right]\|\sigma\|_v \stackrel{def}{=} r_{n,1} \le$$
$$\le \frac{14\sqrt{2}}{3\pi n}\|\sigma\|_v \stackrel{def}{=} r_{n,2}.$$

Тоді оцінка (3.71) може бути замінена наступною

$$\left|R_n^{(3)}\right| \le \frac{\|\sigma\|_v\, r_{n,1}^2}{3\sqrt{\pi}(1-r_{n,1})} \stackrel{def}{=} \gamma_m\left(n, \|\sigma\|_v\right), \qquad (3.72)$$

яка буде справедливою для всіх n таких, що

$$n > \frac{2\sqrt{2}}{\pi}\left(\|\sigma\|_v + \sqrt{\|\sigma\|_v^2 + \frac{\sqrt{2}}{4}\|\sigma\|_v}\right) \stackrel{def}{=} n_m. \qquad (3.73)$$

Порівнюючи умови (3.68) і (3.73), неважко переконатись, що

$$n_b > n_m,\ \forall\, \|\sigma\|_v \in [0, \infty),\ \lim_{\|\sigma\|_v \to \infty}(n_b - n_m) = \infty,$$

тобто умова (3.73) є менш строгою, ніж умова (3.68). Тепер порівняємо оцінки (3.72) і (3.69) для залишкових членів при $n > n_b$, тобто коли обидві оцінки обґрунтовані. Для того щоб зробити це порівняння коректним, треба у формулі (3.70) (див.(3.59)) вилучити другий доданок з виразу для

$$\lambda_n^{(2)} = \int_0^1 u_n^{(0)}(x)\int_0^1 g_{n,1}(x,\xi)u_n^{(0)}(\xi)d\sigma(\xi)d\sigma(x) +$$
$$+ \int_0^1 u_n^{(0)}(x)\int_0^1 g_{n,2}(x,\xi)u_n^{(0)}(\xi)d\sigma(\xi)d\sigma(x) = \lambda_{n,1}^{(2)} + \lambda_{n,2}^{(2)}$$

і об'єднати його з $R_n^{(3)}$. Тоді, як не важко переконатись, одержуємо рівність

$$\nu'_{n,2}(\sigma) = R_n^{(3)} + \lambda_{n,2}^{(2)},$$

з якої випливає оцінка

$$\left|\nu'_{n,2}(\sigma)\right| \le \left|R_n^{(3)}\right| + \left|\lambda_{n,2}^{(2)}\right| \le \frac{\|\sigma\|_v\, r_{n,1}^2}{3\sqrt{\pi}(1-r_{n,1})} + \frac{\|\sigma\|_v^2}{(n\pi)^2} \stackrel{def}{=} \tilde{\gamma}_m(n, \|\sigma\|_v).$$

Шляхом елементарних викладок переконуємось, що

$$\gamma_b(n, \|\sigma\|_v) > \tilde{\gamma}_m(n, \|\sigma\|_v), \ \ \forall \|\sigma\|_v \geq 0.$$

Зауваження 3.3. *Отже, показано, що дослідження точності FD-методу другого рангу може бути більш ефективним, ніж підхід, запропонований у пункті 2.5 при доведенні теореми 2.3 (див. [27, п.5]). Наведене порівняння оцінок залишкового члену згаданого асимптотичного розкладу Винокурова В.А., Садовничого В.А. з теореми 1 в [8] та залишкового члену FD-методу другого рангу згідно з теоремою 3.4 показало, що FD-метод другого рангу дає кращі теоретичні оцінки.*

Приклад 3. *Розглянемо задачу (3.56) з потенціалом* $q(x) = \delta(x - x_1)$ *для випадку* $\bar{q}(x) \equiv 0$*, де* x_1 *є дійсне число та* $x_1 \in (0,1)$*. Задача* (3.56) *із* $x_1 = \frac{1}{2}$ *була досліджена в пункті 2.5 ([27, п.5]). В даному випадку FD-метод є таким, що точно реалізується (див. [145]).*

Введемо позначення:

$$I_0(x) = g_n(t,a), \quad I_j(x) = \int_0^1 g_n(x,t)\, I_{j-1}(t)\, dt, \ j = 1, 2, \ \ldots .$$

Використаємо фільтруючу властивість («sifting» або «sampling property») дельта-функції Дірака (див., напр., [157, §1.17]) для довільної функції $f(x) \in C[0,1]$*:*

$$\int_0^1 f(x)\, \delta(x - x_1)\, dx = f(x_1), \ \ x_1 \in (0,1).$$

Тоді згідно з (3.61) отримаємо формули для поправок до власних значень:

$$\lambda_n^{(1)} = \left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2, \quad \lambda_n^{(2)} = \left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 I_0(x_1),$$

$$\lambda_n^{(3)} = \left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 \left(-\left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 I_1(x_1) + [I_0(x_1)]^2\right),$$

$$\lambda_n^{(4)} = \left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 \left(\left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^4 I_2(x_1) - 3\left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 I_0(x_1)\, I_1(x_1) + [I_0(x_1)]^3\right),$$

$$\lambda_n^{(5)} = \left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 \left(-\left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^6 I_3(x_1) + \left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^4 (4I_0(x_1)\, I_2(x_1) + \right.$$
$$\left. + 2[I_1(x_1)]^2) - 6\left[u_n^{(0)}(x_1)\right]^2 [I_0(x_1)]^2 I_1(x_1) + [I_0(x_1)]^4\right).$$

Візьмемо $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, *тоді одержимо*

$$I_0\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = \frac{\left(\sqrt{2}-1\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)}{2n\pi} + \frac{\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-1}{4n^2\pi^2},$$

$$I_1\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = \frac{\left(3\sqrt{2}-4\right)\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)+1}{12n^2\pi^2} + \frac{\left(\sqrt{2}-1\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)}{4n^3\pi^3} + \\ + \frac{3}{16}\frac{\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-1}{n^4\pi^4},$$

$$I_2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = -\frac{\left(2\sqrt{2}-3\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)+1}{24n^3\pi^3} + \frac{\left(3\sqrt{2}-4\right)\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)+1}{16n^4\pi^4} + \\ + \frac{3\left(\sqrt{2}-1\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)}{16n^5\pi^5} + \frac{5}{32}\frac{\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-1}{n^6\pi^6},$$

$$I_3\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = -\frac{\left(30\sqrt{2}-43\right)\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-2}{1440n^4\pi^4} - \frac{\left(2\sqrt{2}-3\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)}{24n^5\pi^5} + \\ + \frac{5}{96}\frac{\left(3\sqrt{2}-4\right)\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)+1}{n^6\pi^6} + \frac{5}{32}\frac{\left(\sqrt{2}-1\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)}{n^7\pi^7} + \\ + \frac{35}{256}\frac{\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-1}{n^8\pi^8}.$$

Звідси маємо аналітичні вирази для поправок до власних значень:

$$\lambda_n^{(1)} = 1-\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right),$$

$$\lambda_n^{(2)} = \frac{\sqrt{2}-1}{4n\pi}\left[2\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)-\sin\left(2\pi n\sqrt{2}\right)\right] + \frac{1}{8n^2\pi^2}\left[4\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)- \\ -\cos\left(2\pi n\sqrt{2}\right)-3\right],$$

$$\lambda_n^{(3)} = \frac{1}{48n^2\pi^2}\left[\left(27-15\sqrt{2}\right)\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-\left(36-24\sqrt{2}\right)\cos\left(2\pi n\sqrt{2}\right)- \\ -\left(-13+9\sqrt{2}\right)\cos\left(3\pi n\sqrt{2}\right)-4\right] + \frac{\sqrt{2}-1}{8n^3\pi^3}\left[-5\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)+ \\ +4\sin\left(2\pi n\sqrt{2}\right)-\sin\left(3\pi n\sqrt{2}\right)\right] - \frac{1}{16n^4\pi^4}\left[15\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)- \\ -6\cos\left(2\pi n\sqrt{2}\right)+\cos\left(3\pi n\sqrt{2}\right)-10\right],$$

$$\lambda_n^{(4)} = \frac{1}{96n^3\pi^3}\left[\left(33-26\sqrt{2}\right)\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)-\left(102-74\sqrt{2}\right)\sin\left(2\pi n\sqrt{2}\right)+\right.$$

$$+\left(93-66\sqrt{2}\right)\sin\left(3\pi n\sqrt{2}\right)-\left(27-19\sqrt{2}\right)\sin\left(4\pi n\sqrt{2}\right)\Big]+$$
$$+\frac{1}{128n^4\pi^4}\Big[\left(84\sqrt{2}-160\right)\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)+\left(260-168\sqrt{2}\right)\cos\left(2\pi n\sqrt{2}\right)+$$
$$+\left(-160+108\sqrt{2}\right)\cos\left(3\pi n\sqrt{2}\right)+\left(35-24\sqrt{2}\right)\cos\left(4\pi n\sqrt{2}\right)+25\Big]-$$
$$-\frac{3}{32n^5\pi^5}\Big[-14\sin\left(\pi n\sqrt{2}\right)+14\sin\left(2\pi n\sqrt{2}\right)-6\sin\left(3\pi n\sqrt{2}\right)+$$
$$+\sin\left(4\pi n\sqrt{2}\right)\Big]\left(\sqrt{2}-1\right)+\frac{5}{128n^6\pi^6}\Big[56\cos\left(\pi n\sqrt{2}\right)-28\cos\left(2\pi n\sqrt{2}\right)+$$
$$+8\cos\left(3\pi n\sqrt{2}\right)-\cos\left(4\pi n\sqrt{2}\right)-35\Big].$$

Як видно із наведених виразів, на відміну від (2.68)*, поведінка поправок до власних значень є наступною:* $\lambda_n^{(j)} = \mathcal{O}\left(n^{-j+1}\right), \quad j = 2, 3, \ldots$ *Символьні перетворення та чисельні розрахунки здійснено за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17 із значенням системної змінної* `Digits=50`*. Точні значення для перших чотирьох найменших власних значень є наступними:*

$$\lambda_1^{ex} = 11.022523825094569772, \quad \lambda_2^{ex} = 41.340740867782361817,$$
$$\lambda_3^{ex} = 89.107123018325500435, \quad \lambda_4^{ex} = 158.43248922006795733.$$

Чисельні результати наведено в таблиці 3.1, а саме, абсолютні похибки наближень до власних значень $|\lambda_n^{ex} - \overset{m}{\lambda}_n|$*,* $n = \overline{1,4}$*, обчислені за допомогою FD-методу рангу* $m = \overline{1,7}$*. Як видно з результатів розрахунків, на практи-*

Таблиця 3.1

Збіжність FD-методу для власних значень λ_n, $n = \overline{1,4}$

m	$\lvert\lambda_1^{ex} - \overset{m}{\lambda}_1\rvert$	$\lvert\lambda_2^{ex} - \overset{m}{\lambda}_2\rvert$	$\lvert\lambda_3^{ex} - \overset{m}{\lambda}_3\rvert$	$\lvert\lambda_4^{ex} - \overset{m}{\lambda}_4\rvert$
0	1.15291942	1.86232326	$2.80683409 \cdot 10^{-1}$	$5.18818803 \cdot 10^{-1}$
1	$1.133359180 \cdot 10^{-1}$	$4.107077756 \cdot 10^{-3}$	$3.94803868 \cdot 10^{-3}$	$8.11115467 \cdot 10^{-3}$
2	$7.742232717 \cdot 10^{-3}$	$5.465997838 \cdot 10^{-3}$	$3.59081538 \cdot 10^{-5}$	$2.04583089 \cdot 10^{-5}$
3	$2.413263027 \cdot 10^{-4}$	$2.236100909 \cdot 10^{-4}$	$2.76880792 \cdot 10^{-6}$	$4.78997590 \cdot 10^{-6}$
4	$1.803276622 \cdot 10^{-5}$	$1.756773022 \cdot 10^{-5}$	$2.24957824 \cdot 10^{-8}$	$9.73463064 \cdot 10^{-8}$
5	$2.808138047 \cdot 10^{-6}$	$2.790308195 \cdot 10^{-6}$	$1.78267571 \cdot 10^{-9}$	$1.19558652 \cdot 10^{-9}$
6	$8.408097623 \cdot 10^{-8}$	$8.398954936 \cdot 10^{-8}$	$5.11881467 \cdot 10^{-11}$	$1.07278596 \cdot 10^{-10}$
7	$1.701810221 \cdot 10^{-8}$	$1.700439254 \cdot 10^{-8}$	$7.05364768 \cdot 10^{-13}$	$1.69101311 \cdot 10^{-12}$

ції FD-метод збігається для всіх n, включаючи $n = 1$, тоді як умова (3.65) з теореми 3.4 виконується при $n \geq 2$.

3.2.2 Загальна схема FD-методу з $\bar{q}(x) \not\equiv 0$. Якщо умова (3.65) не виконується, то треба застосувати загальну схему FD-методу. Розглянемо цей випадок в даному підпункті. З цією метою занурюємо задачу (3.56) у більш загальну:

$$\begin{gathered}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + \left\{\lambda(t) - \sum_{p=1}^{k} \gamma_p \delta(x - x_p) - \hat{\psi}'(x) - \right. \\ \left. -t\left[\psi'(x) - \hat{\psi}'(x)\right]\right\} u(x,t) = 0, \\ x \in (0,1),\, u(0,t) = u(1,t) = 0,\end{gathered} \tag{3.74}$$

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

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

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

$$x \in [x_p, x_{p+1}],\ \ p = \overline{0,k},$$

$$0 = x_0 < x_1 < ... < x_{k+1} = 1.$$

Розв'язок (3.74) шукаємо у вигляді рядів

$$u_n(x,t) = \sum_{j=0}^{\infty} u_n^{(j)}(x)\, t^j, \quad \lambda_n(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_n^{(j)} t^j. \tag{3.75}$$

Підставимо формально ряди (3.75) в (3.74) і прирівняємо коефіцієнти при однакових степенях t. Отримуємо рекурентну послідовність крайових задач:

$$\left\{\begin{array}{l} L_n^{(0)} u_n^{(j+1)}(x) \equiv \frac{d^2 u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \\ + \left\{\lambda_n^{(0)} - \sum\limits_{p=1}^{k} \gamma_p \delta(x - x_p) - \hat{\psi}'(x)\right\} u_n^{(j+1)}(x) = \\ = -\sum\limits_{l=0}^{j} \lambda_n^{(j+1-l)} u_n^{(l)}(x) + \left[\psi'(x) - \hat{\psi}'(x)\right] u_n^{(j)}(x) \equiv \\ \equiv -F_n^{(j+1)}(x),\ x \in (0,1), \\ u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) = 0, \end{array}\right. \tag{3.76}$$

$$\lambda_n^{(j+1)} = \int\limits_0^1 u_n^{(0)}(x)\left[\psi'(x) - \hat{\psi}'(x)\right] u_n^{(j)}(x)\,dx, \tag{3.77}$$

$$\int\limits_0^1 u_n^{(0)}(x)\, u_n^{(j+1)}(x)\,dx = 0, \tag{3.78}$$

$$j = 0, 1, \ldots .$$

Тут пара $\left\{\lambda_n^{(0)}, u_n^{(0)}(x)\right\} = \{\lambda_n(0), u_n(0)\}$ – розв'язок базової задачі:

$$\begin{gathered}\frac{\partial^2 u_n^{(0)}(x)}{\partial x^2} + \left\{\lambda_n^{(0)} - \sum_{p=1}^{k} \gamma_p \delta(x - x_p) - \hat{\psi}'(x)\right\} u_n^{(0)}(x) = 0,\ x \in (0,1),\\ u_n^{(0)}(0) = u_n^{(0)}(1) = 0.\end{gathered} \tag{3.79}$$

Достатні умови збіжності для рядів (3.75) при $t = 1$, де $u_n(x) = u_n(x,1)$, $\lambda_n = \lambda_n(1)$, $n = 1, 2, ...$, будуть наведені нижче. Але спочатку наведемо алгоритмічну реалізацію FD-методу.

Запишемо задачу (3.79) в іншому вигляді

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^2 u_n^{(0)}(x)}{\partial x^2} + \left\{\lambda_n^{(0)} - \hat{\psi}'(x)\right\} u_n^{(0)}(x) = 0,\\ &x \in (0, x_1) \cup (x_1, x_2) \cup \ldots \cup (x_k, 1),\\ &u_n^{(0)}(0) = u_n^{(0)}(1) = 0,\end{aligned} \tag{3.80}$$

$$\left.\begin{gathered}\left[u_n^{(0)}(x)\right]_{x=x_p} = u_n^{(0)}(x_p + 0) - u_n^{(0)}(x_p - 0) = 0,\\ \left[\tfrac{du_n^{(0)}(x)}{dx}\right]_{x=x_p} = \tfrac{du_n^{(0)}(x_p+0)}{dx} - \tfrac{du_n^{(0)}(x_p-0)}{dx} = \gamma_p u_n^{(0)}(x_p),\\ p = \overline{1,k}. \qquad \text{(умови спряження)}\end{gathered}\right\} \tag{3.81}$$

Розв'язками рівняння (3.80) на проміжках $[x_p, x_{p+1}), p = \overline{0, k-1}$ та $[x_k, 1]$ будуть

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

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

де

$$\mu_{n,p}^{(0)}=\lambda_n^{(0)}-\psi_{x,p},\ \ p=\overline{0,k}.$$

Визначення сталих $A_{p,n}^{(0)}$, $p=\overline{0,k}$, $B_{p,n}^{(0)}$, $p=\overline{1,k-1}$ здійснюємо за допомогою використання умов спряження (3.81), які приводять до однорідної системи:

$$\begin{aligned}
&-A_{p-1,n}^{(0)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-x_{p-1})\right)-\\
&\qquad -B_{p-1,n}^{(0)}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-x_{p-1})\right)+B_{p,n}^{(0)}=0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&-A_{p-1,n}^{(0)}\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-x_{p-1})\right)+\\
&\qquad +B_{p-1,n}^{(0)}\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-x_{p-1})\right)+\\
&\qquad +\sqrt{\mu_{n,p}^{(0)}}A_{p,n}^{(0)}-\gamma_pB_{p,n}^{(0)}=0,\ \ p=\overline{1,k-1},\ \ B_{0,n}^{(0)}=0, \qquad (3.82)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&-A_{k-1,n}^{(0)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)-\\
&\qquad -B_{k-1,n}^{(0)}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)+\\
&\qquad +A_{k,n}^{(0)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(1-x_k)\right)=0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&-A_{k-1,n}^{(0)}\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)+\\
&\qquad +B_{k-1,n}^{(0)}\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)-\\
&\qquad -A_{k,n}^{(0)}\left[\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(1-x_k)\right)+\right.\\
&\qquad \left.+\gamma_k\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(1-x_k)\right)\right]=0.
\end{aligned}$$

Шукаємо корені визначника $\Delta\left(\lambda_n^{(0)}\right)$ системи (3.82) відмінні від $\psi_{x,p}$, $p=\overline{0,k}$. Кожне власне значення задачі (3.80)-(3.81) є нулем визначника $\Delta\left(\lambda_n^{(0)}\right)$ кратності 1. Власні значення утворюють монотонно зростаючу до нескінченності послідовність $\lambda_1^{(0)}<\lambda_2^{(0)}<...<\lambda_n^{(0)}<....$

Розв'язок системи (3.82) для конкретного значення $\lambda_n^{(0)}$ знаходиться з точністю до сталої, яку визначаємо з умови нормування

$$\left\| u_n^{(0)} \right\|_0 = \left\{ \int_0^1 \left[u_n^{(0)}(x) \right]^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} = 1.$$

Послідовність нормованих власних функцій $\left\{ u_n^{(0)}(x) \right\}_{n=1}^{\infty}$ утворює повну ортонормовану систему в $L_2[0,1]$. Наведені факти випливають з результатів розділу 12 в [1].

Перейдемо до розв'язання рекурентної послідовності задач (3.76)-(3.78). Спочатку запишемо її в еквівалентній формі:

$$\begin{gathered}
\hat{L}_n^{(0)} u_n^{(j+1)}(x) \equiv \frac{d^2 u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \mu_n^{(0)} u_n^{(j+1)}(x) = -F_n^{(j+1)}(x), \\
x \in (0, x_1) \cup (x_1, x_2) \cup \ldots \cup (x_k, 1), \\
\mu_n^{(0)}(x) = \mu_{n,p}^{(0)}, \;\; x \in (x_p, x_{p+1}), \;\; p = \overline{0,k}, \\
u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) = 0, \\
\left.\begin{array}{l}
\left[u_n^{(j+1)}(x) \right]_{x=x_p} = 0, \\
\left[\frac{du_n^{(j+1)}(x)}{dx} \right]_{x=x_p} = \gamma_p u_n^{(j+1)}(x_p), p = \overline{1,k}.
\end{array}\right\} \begin{array}{c}\text{(умови}\\ \text{спряження)}\end{array}
\end{gathered} \tag{3.83}$$

Розв'язок системи (3.83) подається у вигляді:

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

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

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

$$+ \int_{x}^{1} \frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}} (x - \xi) \right)}{\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}} F_n^{(j+1)}(\xi) \, d\xi, x \in [x_k, 1].$$

Враховуючи умови спряження, для визначення сталих $A_{p,n}^{(j+1)}$, $B_{p,n}^{(j+1)}$ з (3.83) одержуємо таку систему:

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

$$+B_{p,n}^{(j+1)}=-\int\limits_{x_{p-1}}^{x_p}\frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}}F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi,$$

$$-A_{p-1,n}^{(j+1)}\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-x_{p-1})\right)+B_{p-1,n}^{(j+1)}\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\times$$

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

$$=-\int\limits_{x_{p-1}}^{x_p}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-\xi)\right)F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi,$$

$$p=\overline{1,k-1},\ B_{0,n}^{(j+1)}=0, \tag{3.84}$$

$$-A_{k-1,n}^{(j+1)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)-B_{k-1,n}^{(j+1)}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)+$$

$$+A_{k,n}^{(j+1)}\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(1-x_k)\right)=-\int\limits_{x_k}^{1}\frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}}F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi-$$

$$-\int\limits_{x_{k-1}}^{x_k}\frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}}F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi,$$

$$-A_{k-1,n}^{(j+1)}\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)+B_{k-1,n}^{(j+1)}\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\times$$

$$\times\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-x_{k-1})\right)-A_{k,n}^{(j+1)}\left[\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(1-x_k)\right)+\right.$$

$$\left.+\gamma_k\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(1-x_k)\right)\right]=-\int\limits_{x_k}^{1}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi-$$

$$-\int\limits_{x_{k-1}}^{x_k}\cos\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi+\gamma_k\int\limits_{x_k}^{1}\frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}}F_n^{(j+1)}(\xi)d\xi.$$

Матриця системи лінійних алгебраїчних рівнянь (3.84) є виродженою, оскільки вона співпадає з матрицею системи (3.82). Для того щоб вона мала розв'язок, необхідно і достатньо, щоб її вектор правих частин був ортогональним до власного вектора спряженої матриці.

Введемо вектори

$$\vec{Y}_n^{(j+1)} = \left\{ A_{0,n}^{(j+1)}, \underbrace{A_{1,n}^{(j+1)}, B_{1,n}^{(j+1)}}, \ldots, \underbrace{A_{k-1,n}^{(j+1)}, B_{k-1,n}^{(j+1)}}, A_{k,n}^{(j+1)} \right\}^T,$$

$$\vec{H}_n^{(j+1)} = \left\{ \vec{H}_{n,p}^{(j+1)} \right\}_{p=\overline{1,k}}^T,$$

$$\vec{H}_{n,p}^{(j+1)} = \left\{ -\int\limits_{x_{p-1}}^{x_p} \frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}} F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi, \right.$$

$$\left. -\int\limits_{x_{p-1}}^{x_p} \cos\left(\sqrt{\mu_{n,p-1}^{(0)}}\,(x_p-\xi)\right) F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi \right\}, \quad p=\overline{1,k-1},$$

$$\vec{H}_{n,k}^{(j+1)} = \left\{ -\int\limits_{x_k}^{1} \frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}} F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi \right.$$

$$-\int\limits_{x_{k-1}}^{x_k} \frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}} F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi,$$

$$-\int\limits_{x_k}^{1} \cos\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right) F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi -$$

$$-\int\limits_{x_{k-1}}^{x_k} \cos\left(\sqrt{\mu_{n,k-1}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right) F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi +$$

$$\left. +\gamma_k \int\limits_{x_k}^{1} \frac{\sin\left(\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}\,(x_k-\xi)\right)}{\sqrt{\mu_{n,k}^{(0)}}} F_n^{(j+1)}(\xi)\,d\xi \right\}$$

і позначимо матрицю системи (3.82) через D_n, тоді системи (3.82), (3.84) можна зобразити у вигляді

$$D_n\vec{Y}_n^{(0)} = \vec{0}, \;\; D_n\vec{Y}_n^{(j+1)} = \vec{H}_n^{(j+1)}, j = 0, 1, \dots . \tag{3.85}$$

Нехай $\vec{Z}_n^T$ – власний вектор-рядок, що відповідає нульовому власному значенню матриці D_n, тобто

$$\vec{Z}_n^T D_n = \vec{0}.$$

Тоді необхідною і достатньою умовою розв'язності системи (3.85) буде

$$\vec{Z}_n^T \vec{H}_n^{(j+1)} = 0. \tag{3.86}$$

Легко показати, що умова (3.86) еквівалентна інтегральній умові вигляду

$$\int_0^1 F_n^{(j+1)}(x)\, u_n^{(0)}(x)\, dx = 0. \tag{3.87}$$

З умови (3.87), або, що те ж саме, з умови (3.86), знаходимо

$$\begin{aligned} \lambda_n^{(j+1)} = -\sum_{p=1}^{j} \lambda_n^{(j-p+1)} \int_0^1 u_n^{(0)}(x)\, u_n^{(p)}(x)\, dx + \\ + \int_0^1 u_n^{(0)}(x) \left[\psi'(x) - \hat{\psi}'(x)\right] u_n^{(j)}(x)\, dx. \end{aligned} \tag{3.88}$$

Оскільки розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь (3.85) знаходиться з точністю до сталої, то з точністю до сталої визначається $u_n^{(j+1)}(x)$, останню знаходимо з умови ортогональності (3.78). Тоді формула (3.88) спрощується до вигляду (3.77).

Викладене вище є основою реалізації FD-методу, але є досить незручним для встановлення достатніх умов його збіжності та одержання оцінок його точності (апріорно-апостеріорних).

Використовуючи повноту в $L_2[0,1]$ ортонормованої системи $\left\{u_n^{(0)}(x)\right\}_{n=1}^{\infty}$, запишемо розв'язок задачі (3.76) у вигляді

$$u_n^{(j+1)}(x) = -\sum_{\substack{p=1 \\ p\neq n}}^{\infty} \int_0^1 F_n^{(j+1)}(\xi)\, u_p^{(0)}(\xi)\, d\xi \frac{u_p^{(0)}(x)}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_p^{(0)}}.$$

Звідси одержуємо оцінку

$$\left\| u_n^{(j+1)} \right\| \le M_n \left\| F_n^{(j+1)} \right\| \le$$
$$\le M_n \left\{ \sum_{l=1}^{j} \left| \lambda_n^{(j+1-l)} \right| \left\| u_n^{(l)} \right\| + \left\| \left[\psi'(x) - \hat{\psi}'(x) \right] u_n^{(j)}(x) \right\| \right\}, \quad (3.89)$$

де

$$M_n = \max \left\{ \frac{1}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)}}, \frac{1}{\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)}} \right\}. \quad (3.90)$$

Введемо функцію

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

Тоді з (3.77), (3.89) одержуємо оцінки

$$\begin{aligned} &\left\| u_n^{(j+1)} \right\| \le M_n \left\{ \sum_{l=1}^{j} \left| \lambda_n^{(j+1-l)} \right| \left\| u_n^{(l)} \right\| + \omega(\psi') \left\| u_n^{(j)} \right\| \right\}, \\ &\left| \lambda_n^{(j+1)} \right| \le \omega(\psi') \left\| u_n^{(j)} \right\|, \end{aligned} \quad (3.91)$$

які приводять до наступної нерівності

$$\left\| u_n^{(j+1)} \right\| \le M_n \omega(\psi') \sum_{l=0}^{j} \left\| u_n^{(j-l)} \right\| \left\| u_n^{(l)} \right\|. \quad (3.92)$$

Розв'язок нерівності (3.92) одержуємо з використанням методу твірних функцій аналогічно до пункту 3.2.1 і він матиме вигляд (див. також [146])

$$\left\| u_n^{(j+1)} \right\| \le (4M_n \omega(\psi'))^{j+1} 2 \frac{(2j+1)!!}{(2j+4)!!} \le \frac{\hat{r}_n^{j+1}}{(j+2)\sqrt{\pi(j+1)}}. \quad (3.93)$$

де $\hat{r}_n^{j+1} = 4M_n \omega(\psi')$. Використовуючи оцінку (3.93), із (3.91) отримуємо відповідну оцінку для власних значень

$$\left| \lambda_n^{(j+1)} \right| \le \omega(\psi') \hat{r}_n^j 2 \frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!} \le \omega(\psi') \frac{\hat{r}_n^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}}. \quad (3.94)$$

Одержані оцінки (3.93), (3.94) переконують у справедливості такої теореми

Теорема 3.5. *Нехай*

$$\sigma(x) = \sum_{p=0}^{k} \gamma_p \, \mathrm{H}(x - x_p) + \psi(x) \tag{3.95}$$

і виконується умова

$$\hat{r}_n \stackrel{def}{=} 4M_n \omega(\psi') < 1, \tag{3.96}$$

тоді FD-метод для задачі Штурма-Ліувілля (3.74), (3.95) експоненціально збігається і справедливими є такі оцінки його точності:

$$\left\| u_n - \overset{m}{u}_n \right\| = \left\| u_n - \sum_{j=0}^{m} u_n^{(j)} \right\| \le \frac{\hat{r}_n^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}\,(1 - \hat{r}_n)}, \tag{3.97}$$

$$\left| \lambda_n - \overset{m}{\lambda}_n \right| = \left| \lambda_n - \sum_{j=0}^{m} \lambda_n^{(j)} \right| \le \frac{\omega(\psi')\,\hat{r}_n^{m}}{(m+1)\sqrt{\pi m}\,(1 - \hat{r}_n)}. \tag{3.98}$$

Зауваження 3.4. *Для того щоб визначити поведінку $\hat{r}_n$ відносно n, скористаємось формулою (3.90) та теоремою 3.4. Тоді для знаменників із (3.90) маємо нерівності*

$$\begin{aligned}
\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)} &= \pi^2 (2n-1) + \\
&\quad + 2\sum_{p=1}^{k} \gamma_p \left[\sin^2(n\pi x_p) - \sin^2((n-1)\pi x_p)\right] + R_n^{(2)} - R_{n-1}^{(2)} \ge \\
&\quad \ge \pi^2(2n-1) - 4\sum_{p=1}^{k} |\gamma_p| - \frac{2\sum_{p=1}^{k}|\gamma_p|}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{\hat{r}_n}{1-\hat{r}_n} + \frac{\hat{r}_{n-1}}{1-\hat{r}_{n-1}}\right], \\
\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)} &\ge \pi^2(2n+1) - 4\sum_{p=1}^{k} |\gamma_p| - \frac{\sum_{p=1}^{k}|\gamma_p|}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\hat{r}_{n+1}}{1-\hat{r}_{n+1}} + \frac{\hat{r}_n}{1-\hat{r}_n}\right],
\end{aligned}$$

які є справедливими при умові (3.65) з теореми 3.4, тобто оцінки (3.97), (3.98) і (3.66), (3.67) з теореми 3.4, грубо кажучи, будуть мати місце при однаковому обмеженні на n. Однак, $\hat{r}_n$ має ще резерв послаблення обмеження на n аж до його повного виключення. Цей резерв полягає у наявності в $\hat{r}_n$ множника $\omega(\psi')$, який буде відігравати свою роль, якщо мінімальний клас гладкості, якому повинна належати функція $\psi'(x)$, є клас кусково-неперервних функцій $Q^0[0,1]$, або, іншими словами, $\psi(x)$ є неперервною кусково-гладкою функцією: $\psi(x) \in C[0,1] \cap Q^1[0,1]$.

Зауваження 3.5. *При виконанні умов теореми 3.5 ряди (3.75) є абсолютно збіжними при $|t|\leq 1$ та справедливими є співвідношення:* $u_n(x)=u_n(x,1)=\sum_{j=0}^{\infty} u_n^{(j)}(x)$, $\lambda_n=\lambda_n(1)=\sum_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)}$.

Приклад 4. *Розглянемо задачу (3.56) з потенціалом* $q(x)=\delta\left(x-\frac{1}{2}\right)+100x$ *і застосуємо до неї FD-метод: а) без поділу інтервалу* $(0,1)$ $(\hat{\psi}'(x)\equiv 0,$ $k=1,$ $x_1=\frac{1}{2},$ $\gamma_1=1)$; *б) з поділом інтервалу* $(0,1)$ *на два підінтервали* $(\hat{\psi}'(x)\not\equiv 0,$ $k=1,$ $x_1=\frac{1}{2},$ $\gamma_1=1)$; *в) з поділом інтервалу* $(0,1)$ *на чотири підінтервали* $(\hat{\psi}'(x)\not\equiv 0,$ $k=3,$ $x_p=\frac{p}{4},$ $p=\overline{1,3},$ $\gamma_1=0,$ $\gamma_2=1,$ $\gamma_3=0)$.

Таблиця 3.2

Збіжність FD-методу для власного значення λ_1

m	а) $\hat{\psi}'(x)\equiv 0$, $k=1$, $\left\lvert\lambda_1^{ex}-\overset{m}{\lambda}_1\right\rvert$	б) $\hat{\psi}'(x)\not\equiv 0$, $k=1$, $\left\lvert\lambda_1^{ex}-\overset{m}{\lambda}_1\right\rvert$	в) $\hat{\psi}'(x)\not\equiv 0$, $k=3$, $\left\lvert\lambda_1^{ex}-\overset{m}{\lambda}_1\right\rvert$
0	39.79669103	2.270616222	$2.168801379\cdot 10^{-1}$
1	10.20330897	$8.341737964\cdot 10^{-1}$	$6.083140294\cdot 10^{-2}$
2	2.135818380	$1.901098870\cdot 10^{-2}$	$5.300909434\cdot 10^{-5}$
3	2.135818380	$3.157060409\cdot 10^{-3}$	$4.333553271\cdot 10^{-6}$
4	1.226920389	$2.930165507\cdot 10^{-4}$	$1.367746278\cdot 10^{-8}$
5	1.226920389	$2.102813177\cdot 10^{-5}$	$5.850330410\cdot 10^{-10}$
6	$9.509541771\cdot 10^{-1}$	$4.743628885\cdot 10^{-6}$	$3.835005760\cdot 10^{-12}$
7	$9.509541771\cdot 10^{-1}$	$5.240882809\cdot 10^{-8}$	$9.702842701\cdot 10^{-14}$
8	$8.506978298\cdot 10^{-1}$	$7.286716281\cdot 10^{-8}$	$1.229092383\cdot 10^{-15}$
9	$8.506978298\cdot 10^{-1}$	$2.930256199\cdot 10^{-9}$	$1.865391361\cdot 10^{-17}$
10	$8.276761403\cdot 10^{-1}$	$1.032042190\cdot 10^{-9}$	$4.064792983\cdot 10^{-19}$
11	$8.276761403\cdot 10^{-1}$	$1.038538699\cdot 10^{-10}$	$3.423104476\cdot 10^{-21}$
12	$8.508842593\cdot 10^{-1}$	$1.221151730\cdot 10^{-11}$	$1.238050539\cdot 10^{-22}$
13	$8.508842593\cdot 10^{-1}$	$2.481662360\cdot 10^{-12}$	$3.497226425\cdot 10^{-25}$
14	$9.094304891\cdot 10^{-1}$	$8.479672332\cdot 10^{-14}$	$3.323469489\cdot 10^{-26}$
15	$9.094304891\cdot 10^{-1}$	$4.980766446\cdot 10^{-14}$	$1.068874105\cdot 10^{-28}$
16	1.000506593	$1.155397490\cdot 10^{-15}$	$7.886548397\cdot 10^{-30}$
17	1.000506593	$8.676674901\cdot 10^{-16}$	$9.000481917\cdot 10^{-32}$
18	1.125540512	$6.964067548\cdot 10^{-17}$	$1.660871600\cdot 10^{-33}$
19	1.125540512	$1.270480995\cdot 10^{-17}$	$4.098653028\cdot 10^{-35}$
20	1.288866993	$2.045466355\cdot 10^{-18}$	$2.760733186\cdot 10^{-37}$

Обчислення проводилися за допомогою системи комп'ютерної алгебри

Maple 17 із значенням системної змінної `Digits=100`. *Найменше точне власне значення розглянутої задачі є таким*

$$\lambda_1^{ex} = 51.56855019480048558891973935119068439085.$$

В таблиці 3.2 наведено результати розрахунків, а саме абсолютні похибки наближень $|\lambda_1^{ex} - \overset{m}{\lambda}_1|$ *для першого власного значення* λ_1, *отримані за допомогою FD-методу рангу* $m = \overline{1, 20}$ *у випадках а) – в).*

З таблиці 3.2 видно, що найпростіший варіант FD-методу а) з $\hat{\psi}'(x) \equiv 0$ *для першого власного значення є розбіжним, тоді як вже при поділі інтервалу* $(0, 1)$ *на два і більше підінтервали метод збігається. Із збільшенням кількості точок розбиття (з однієї до трьох) вдвічі зросла швидкість збіжності методу.*

3.3 Висновки до розділу 3

В цьому розділі досліджено та обгрунтовано FD-метод та здійснено його алгоритмічну реалізацію для самоспряжених задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з рівнянням у формі Шрьодінгера. Розглянуто задачі з поліноміальним потенціалом (п. 3.1) та потенціалом, який є похідною від функції обмеженої варіації і містить скінченну лінійну комбінацію дельта-функцій Дірака (п. 3.2).

Одержані результати в **п. 3.1** є доповненням до відповідних результатів, отриманих в попередніх роботах Макарова В.Л. і його учнів, зокрема в [3]. Результати з **п. 3.2** є доповненням до роботи [148] у лінійному випадку $(N(u) \equiv 0)$, в якій потенціал $q(x)$ має єдину сингулярність $(k = 1)$, є узагальненням результатів пункту 2.5 (див. [27, п. 5]), де FD-метод (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) досліджений для задачі (3.56) з $q(x) = a\delta(x - 1/2)$, $a > 0$, та є узагальненням результатів теореми 1 з [8]. Теоретичні результати проілюстровано на чисельних прикладах.

Основні результати даного розділу:

1) 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 $\bar{q}(x) \equiv 0$), які є еквівалентними традиційним інтегральним зображенням (теорема 3.1). Завдяки цьому побудовано принципово новий алгоритм FD-методу, який є таким, що точно реалізується, містить тільки звичайні алгебраїчні операції та не потребує в ході рекурентного процесу розв'язання відповідних крайових задач і обчислення інтегралів.

2) Використовуючи асимтотичний розклад Марченка В. О. [29, 150], для задач Штурма-Ліувілля другого порядку на відрізку з поліноміальним потенціалом теоретико-експериментально досліджено поведінку поправок до власних значень відносно порядкового номера n (приклади 1, 2; зауваження 3.2).

3) Здійснено нову алгоритмічну реалізацію FD-методу при його застосуванні до задачі Штурма-Ліувілля другого порядку з крайовими умовами Діріхле і потенціалом, що є похідною від функції обмеженої варіації та містить скінченну лінійну комбінацію дельта-функцій Дірака. Встановлено достатні умови експоненціальної збіжності FD-методу та отримано оцінки його точності при $\bar{q}(x) \equiv 0$ (теорема 3.4) і в загальному випадку з $\bar{q}(x) \not\equiv 0$ (теорема 3.5).

4) Показано, що дослідження точності FD-методу другого рангу може бути більш ефективним, ніж підхід, запропонований у п. 2.5 при доведенні теореми 2.3 (див. [27, п.5]). Доведено, що FD-метод другого рангу згідно з теоремою 3.4 дає більш точні теоретичні оцінки залишкового члена асимптотичного розкладу Винокурова В.А., Садовничого В.А., ніж оцінки отримані в теоремі 1 [8] (зауваження 3.3).

Основні результати даного розділу опубліковано в трьох статтях [22, 23, 147] та доповідались на трьох міжнародних конференціях [20, 21, 24].

РОЗДІЛ 4
FD-МЕТОД ДЛЯ ЗАДАЧІ НА ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ З КРАТНИМИ ВЛАСНИМИ ЗНАЧЕННЯМИ БАЗОВОЇ ЗАДАЧІ В ГІЛЬБЕРТОВОМУ ПРОСТОРІ

4.1 Абстрактна постановка задачі

Пояснимо ідеї *збурення* і *гомотопії* (див., напр., [12, гл.1, §3], [13, 52, 62]), на яких базується *FD-метод*, для наступної задачі на власні значення для суми самоспряжених операторів A і B ($A = A^*$, $B = B^*$) з областями визначення $D(A)$ і $D(B)$ відповідно та дискретним спектром в гільбертовому просторі H із скалярним добутком $(\cdot, \cdot)$

$$(A + B)\, u - \lambda u = \theta, \tag{4.1}$$

де θ – нульовий елемент. Шукаємо власну пару із заданим фіксованим індексом n. Припустимо, що $\overline{D(A)} = H$, $D(A) \subset D(B)$ і оператор B *підпорядкований* оператору A, тобто для деякої додатної сталої c

$$\|Bv\| \leq c \|Av\|, \quad \forall v \in D(A). \tag{4.2}$$

Нехай $\bar{B} = \bar{B}^*$, $D(\bar{B}) = D(B)$ і апроксимуємо оператор B оператором $\bar{B}$ так, щоб *базова задача*

$$\left(A + \bar{B}\right) u^{(0)} - \lambda^{(0)} u^{(0)} = \theta \tag{4.3}$$

була «простішою», ніж задача (4.1) (тобто так, щоб (4.3) мала явний аналітичний (точний) розв'язок), а власні значення (4.3) є дійсними і впорядковані наступним чином:

$$0 \leq \lambda_1^{(0)} \leq \lambda_2^{(0)} \leq ... \leq \lambda_n^{(0)} \leq ... \,, \tag{4.4}$$

причому кожне власне значення в (4.4) повторюється стільки разів, яка його кратність. Відповідні власні вектори утворюють повну ортонормальну систему $\{u_i^{(0)}\}_{i=\overline{1,\infty}}$.

Згідно з ідеєю гомотопії (див., напр., [52, 62]) «занурюємо» (4.1), (4.3) в сімейство параметричних задач

$$(A+W(t))\,u_n(t)-\lambda_n(t)\,u_n(t)=\theta,\quad t\in[0,1] \tag{4.5}$$

з $W(t)=\overline{B}+t\varphi(B)$, $\varphi(B)=B-\bar{B}$, яке містить обидві задачі (4.1) і (4.3). Очевидно, що $u_n(0)=u_n^{(0)}$, $u_n(1)=u_n$. Розв'язок (4.5) будемо шукати у формі

$$\lambda_n(t)=\sum_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)}t^j,\ \ u_n(t)=\sum_{j=0}^{\infty}u_n^{(j)}t^j, \tag{4.6}$$

де формально

$$\lambda_n^{(j)}=\frac{1}{j!}\left.\frac{d^j\lambda_n(t)}{dt^j}\right|_{t=0},\ \ u_n^{(j)}=\frac{1}{j!}\left.\frac{d^ju_n(t)}{dt^j}\right|_{t=0}. \tag{4.7}$$

При умові, що ряди (4.6) збігаються для всіх $t\in[0,1]$, при $t=1$ в (4.6) отримуємо

$$\lambda_n=\sum_{j=0}^{\infty}\lambda_n^{(j)},\ \ u_n=\sum_{j=0}^{\infty}u_n^{(j)}. \tag{4.8}$$

Наближеннями рангу N згідно із FD-методом до власних значень і власних векторів задачі (4.1) є зрізані ряди:

$$\overset{N}{\lambda}_n=\sum_{j=0}^{N}\lambda_n^{(j)},\ \ \overset{N}{u}_n=\sum_{j=0}^{N}u_n^{(j)}. \tag{4.9}$$

4.2 Алгоритм FD-методу

Підставивши (4.6) в (4.5) та прирівнявши коефіцієнти при однакових степенях t, отримаємо рекурентні рівняння для визначення членів рядів (4.8), (4.9):

$$\left(A+\bar{B}\right)u_n^{(j+1)}-\lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}=F_n^{(j+1)},\quad j=0,1,... \tag{4.10}$$

з $F_n^{(0)}=0$ та

$$F_n^{(j+1)}=F_n^{(j+1)}\left(\lambda_n^{(0)},...,\lambda_n^{(j+1)};u_n^{(0)},...,u_n^{(j)}\right)=\sum_{p=0}^{j}\lambda^{(j+1-p)}u_n^{(p)}-\varphi(B)u_n^{(j)}=$$

$$=\lambda^{(j+1)}u_n^{(0)}-\varphi(B)u_n^{(j)}+\sum_{p=1}^{j}\lambda^{(j+1-p)}u_n^{(p)},\qquad \varphi(B)=B-\overline{B}.$$

Пара $\lambda_n^{(0)}$, $u_n^{(0)}$ є розв'язком базової задачі (4.3) та початковими даними для задач (4.10).

Однією з особливостей, які викликають труднощі при розв'язуванні задач на власні значення, є наявність *кратних власних значень* або *щільно згрупованих власних значень*. Так, при застосуванні FD-методу до розв'язування деяких задач вже на етапі базової задачі (4.3), з якої починається чисельний процес, виникають кратні власні значення. В ряді робіт по FD-методу вдалось подолати дані труднощі (див. [3, 71, 101], [102, п. 2]). При цьому базові задачі мали двократні власні значення. В даному розділі здійснено узагальнення результатів згаданих робіт, яке полягає в тому, що базова задача може містити власні значення довільної скінченної кратності.

Нехай $\lambda_n^{(0)}$ є k-кратним власним значенням, $k \geq 2$ 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 будемо опускати, якщо це не буде призводити до непорозумінь. Загальний розв'язок задачі (4.3) має вигляд

$$u^{(0)} = \sum_{p=1}^{k} C_p^{(0)} e_p, \tag{4.11}$$

де сталі $C_p^{(0)}$, $p = \overline{1,k}$ буде визначено нижче.

Позначимо через Γ^+ псевдообернений оператор Мура-Пенроуза до оператора $A + \bar{B} + \lambda^{(0)} E$. Тоді, при виконанні умов розв'язності

$$(F^{(j+1)}, e_m) = 0, \;\; m = \overline{1,k} \tag{4.12}$$

розв'язок рівняння (4.10) можна записати у вигляді

$$u^{(j+1)} = \sum_{p=1}^{k} C_p^{(j+1)} e_p + \hat{u}^{(j+1)}, \tag{4.13}$$

де

$$\hat{u}^{(j+1)} = \Gamma^+ \left(\sum_{s=1}^{j} \lambda^{(j+1-s)} u^{(s)} - \varphi(B) u^{(j)} \right), \tag{4.14}$$

причому, підсумовування за s в (4.14) здійснюється від 1, а не від 0, внаслідок такої властивості оператора Γ^+:

Лема 4.1. *Мають місце рівності:* $\Gamma^{+} e_p = 0,\ p = \overline{1,k}$.

Доведення леми 4.1 базується на наступному зображенні:

$$\Gamma^{+} v = -\sum_{\substack{p=1 \\ p\neq n}}^{\infty} \frac{(v, u_p^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_p^{(0)}} u_p^{(0)},\ \ \forall v \in L(e_1, e_2, ..., e_k),$$

де $L(e_1, e_2, ..., e_k)$ – лінійна оболонка елементів $e_1, e_2, ..., e_k$.

З вимоги ортогональності

$$(u^{(j+1)}, u^{(0)}) = 0,\ \ j = 0, 1, ... \tag{4.15}$$

випливає умова

$$(\vec{C}^{(j+1)}, \vec{C}^{(0)})_R = \sum_{p=1}^{k} C_p^{(j+1)} C_p^{(0)} = 0,\ j = 0, 1, ... \ , \tag{4.16}$$

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, $\vec{C}^{(0)} = |[C_p^{(0)}]|_{p=\overline{1,k}}$.

Виходячи з (4.12) та леми 4.1, приходимо до системи рівнянь

$$\begin{gathered}\sum_{s=1}^{k} C_s^{(j)} \Big((\varphi(B) - \lambda^{(1)} E) e_s, e_m \Big) = \\ = -\Big(\varphi(B) \hat{u}^{(j)}, e_m \Big) + \sum_{p=0}^{j-1} \lambda^{(j+1-p)} C_m^{(p)},\ m = \overline{1,k},\end{gathered} \tag{4.17}$$

де $E = |[\delta_{s,t}]|_{s,t=\overline{1,k}}$ – одинична матриця. Помножимо систему (4.17) на $C_m^{(0)}$ і підсумуємо за m від 1 до k, врезультаті одержимо одну з основних формул FD-методу

$$\lambda^{(j+1)} = \Big(\varphi(B) u^{(j)}, u^{(0)} \Big) = \Big(\varphi(B) \hat{u}^{(j)}, u^{(0)} \Big) = \Big(\hat{u}^{(j)}, \varphi(B) u^{(0)} \Big). \tag{4.18}$$

Нехай $\lambda_\nu^{(1)}$, $\nu = \overline{1,r}$ є μ_ν-кратним власним значенням матриці

$$D^{(1)} = |[d_{p,m}^{(1)}]|_{p,m=\overline{1,k}},\ \ d_{p,m}^{(1)} = (\varphi(B) e_p, e_m), \tag{4.19}$$

причому $\sum_{\nu=1}^{r} \mu_\nu = k$, $\lambda_1^{(1)} < ... < \lambda_\nu^{(1)} < ... < \lambda_r^{(1)}$. Введемо матрицю

$$D^{[\nu]} = |[d_{p,m}^{[\nu]}]|_{p,m=\overline{1,k}}, d_{p,m}^{[\nu]} = \Big((\varphi(B) - \lambda_\nu^{(1)} E) e_p, e_m \Big), 1 \leq \nu \leq r \tag{4.20}$$

та запишемо систему (4.17) у векторно-матричному вигляді

$$\begin{aligned} D^{[\nu]}\vec{C}^{(j)} &= \sum_{p=0}^{j-1} \lambda^{(j+1-p)}\vec{C}^{(p)} - \left\langle \varphi(B)\hat{u}^{(j)}, \vec{e} \right\rangle = \\ &= \sum_{p=0}^{j-1} \lambda^{(j+1-p)}\vec{C}^{(p)} - \left\langle \hat{u}^{(j)}, \varphi(B)\vec{e} \right\rangle, \ \ j = 0, 1, ..., \end{aligned} \tag{4.21}$$

де $\vec{e} = [e_1, e_2, ..., e_k]^T$, $\langle v, \vec{e} \rangle = [(v, e_1), (v, e_2), ..., (v, e_k)]^T$. З (4.21) при $j = 0$ із врахуванням умови $\hat{u}^{(0)} = 0$ одержуємо

$$D^{[\nu]}\vec{C}^{(0)} = \vec{0}. \tag{4.22}$$

Нехай розв'язками системи (4.22) при $\lambda^{(1)} = \lambda_\nu^{(1)}$, $\nu = \overline{1, r}$ буде ортонормальна система векторів

$$\vec{C}_{\nu,i}^{(0)} = |[C_{\nu,i,m}^{(0)}]|_{m=\overline{1,k}}, \ i = \overline{1, \mu_\nu}, \tag{4.23}$$

тобто $(\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}, \vec{C}_{\nu,s}^{(0)})_R = \delta_{i,s}$, $\left\| \vec{C}_{\nu,i}^{(0)} \right\|_R = 1$, $i,s = \overline{1,\mu_\nu}$. Система (4.21) перепишеться

$$\begin{aligned} D^{[\nu]}\vec{C}_{\nu,i}^{(j)} &= \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)} - \left\langle \varphi(B)\hat{u}_{\nu,i}^{(j)}, \vec{e} \right\rangle = \\ &= \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)} - \left\langle \hat{u}_{\nu,i}^{(j)}, \varphi(B)\vec{e} \right\rangle, \ i = \overline{1, \mu_\nu}, \ \ j = 0, 1, \ldots . \end{aligned} \tag{4.24}$$

З врахуванням (4.18) можна зробити висновок, що права частина системи (4.24) ортогональна до всіх векторів $\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}$, $i = \overline{1, \mu_\nu}$, тобто виконані необхідні й достатні умови її розв'язності. В якості розв'язку системи (4.24), а він є неоднозначним, візьмемо наступний

$$\begin{aligned} \vec{C}_{\nu,i}^{(j)} &= \left(D^{[\nu]}\right)^+ \left(\sum_{p=0}^{j-1} \lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)} - \left\langle \varphi(B)\hat{u}_{\nu,i}^{(j)}, \vec{e} \right\rangle \right) = \\ &= \left(D^{[\nu]}\right)^+ \left(\sum_{p=0}^{j-1} \lambda_{\nu,i}^{(j+1-p)}\vec{C}_{\nu,i}^{(p)} - \left\langle \hat{u}_{\nu,i}^{(j)}, \varphi(B)\vec{e} \right\rangle \right), i = \overline{1, \mu_\nu}, j = 0, 1, \ldots , \end{aligned} \tag{4.25}$$

де $\left(D^{[\nu]}\right)^+$ – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $D^{[\nu]}$.

Неважко переконатись, що

$$(D^{[\nu]})^+\vec{C}_{\nu,i}^{(0)} = \vec{0}, \ i = \overline{1, \mu_\nu}, \tag{4.26}$$

а отже, для розв'язку системи (4.21) у формі (4.25) будуть виконуватись умови ортогональності (4.16).

4.3 Збіжність FD-методу

Перейдемо до відшукання оцінок похибок методу, вважаючи, що $i=\overline{1,\mu_\nu}$, $\nu=\overline{1,r}$, $\sum_{\nu=1}^{r}\mu_\nu=k$. З (4.25), враховуючи (4.18) і (4.26), маємо

$$\left\|\vec{C}^{(j)}_{\nu,i}\right\|_R \le w\left(\sum_{p=1}^{j-1}\left\|\hat{u}^{(j-p)}_{\nu,i}\right\|\left\|\vec{C}^{(p)}_{\nu,i}\right\|_R+\left\|\hat{u}^{(j)}_{\nu,i}\right\|\right), \tag{4.27}$$

де

$$w=\left\|\left(D^{[\nu]}\right)^{+}\right\|\left|\langle\varphi(B)\vec{e}\rangle\right|,\ \|\vec{a}\|_R=(\vec{a},\vec{a})_R,\ \left|\left\langle\vec{b}\right\rangle\right|=\left\{\sum_{p=1}^{k}\|b_p\|^2\right\}^{1/2}$$

та використано оцінку, яка слідує із зображення (4.11):

$$\left\|\varphi(B)u^{(0)}\right\|=\left\|\varphi(B)\left\langle\vec{C}^{(0)},\vec{e}\right\rangle\right\|=\left|\left\langle\vec{C}^{(0)},\varphi(B)\vec{e}\right\rangle\right|\le$$
$$\le\left|\langle\varphi(B)\vec{e}\rangle\right|\left\|\vec{C}^{(0)}\right\|=\left|\langle\varphi(B)\vec{e}\rangle\right|.$$

З (4.13) і (4.14) одержуємо оцінку

$$\begin{aligned}\left\|\hat{u}^{(j+1)}_{\nu,i}\right\| &\le M_{\nu,i}\left(\sum_{s=1}^{j}\left\|\tilde{u}^{(j-s)}_{\nu,i}\right\|\left\|\hat{u}^{(s)}_{\nu,i}\right\|+\left\|\hat{u}^{(j)}_{\nu,i}\right\|+\left\|\vec{C}^{(j)}_{\nu,i}\right\|_R\right)\le\\ &\le M_{\nu,i}\left(\sum_{s=0}^{j}\left\|\tilde{u}^{(j-s)}_{\nu,i}\right\|\left\|\tilde{u}^{(s)}_{\nu,i}\right\|+\left\|\vec{C}^{(j)}_{\nu,i}\right\|_R\right),\end{aligned} \tag{4.28}$$

де

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

$$\left\|\tilde{u}^{(s)}_{\nu,i}\right\|=\begin{cases}\left\|\hat{u}^{(s)}_{\nu,i}\right\|,\ s>0,\\ 1,\ s=0.\end{cases}$$

Тут врахована наступна оцінка для розв'язку $u^{(j)}_{\nu,i}$, яка випливає із зображення (4.13):

$$\left\|u^{(j)}_{\nu,i}\right\|=\left(\left\|\hat{u}^{(j)}_{\nu,i}\right\|^2+\left\|\vec{C}^{(j)}_{\nu,i}\right\|^2_R\right)^{1/2}\le\left\|\hat{u}^{(j)}_{\nu,i}\right\|+\left\|\vec{C}^{(j)}_{\nu,i}\right\|_R. \tag{4.29}$$

Отримали рекурентну систему нерівностей (4.27), (4.28). Для її розв'язання спочатку зробимо заміну

$$U_j = (M_{\nu,i})^{-j} \left\| \tilde{u}_{\nu,i}^{(j)} \right\|, \; S_j = (M_{\nu,i})^{-j} \left\| \vec{C}_{\nu,i}^{(j)} \right\|_R, \; j = 1, 2, ..., \\ U_0 = \left\| \tilde{u}_{\nu,i}^{(0)} \right\| = 1, \; S_0 = \left\| \vec{C}_{\nu,i}^{(0)} \right\|_R = 1, \tag{4.30}$$

внаслідок якої приходимо до такої системи нерівностей

$$U_{j+1} \le \sum_{p=0}^{j} U_{j-p} U_p + S_j, \;\; S_{j+1} \le w \sum_{p=0}^{j} U_{j+1-p} S_p, \;\; j = 0, 1, 2, \dots . \tag{4.31}$$

Далі замінимо знаки нерівностей на рівності і одержимо мажорантну для (4.31) систему рекурентних рівнянь

$$\bar{U}_{j+1} = \sum_{p=0}^{j} \bar{U}_{j-p} \bar{U}_p + \bar{S}_j, \;\; \bar{S}_{j+1} = w \sum_{p=0}^{j} \bar{U}_{j+1-p} \bar{S}_p, \;\; j = 0, 1, 2, ..., \\ \bar{U}_0 = U_0 = \left\| \tilde{u}_{\nu,i}^{(0)} \right\| = 1, \;\; \bar{S}_0 = S_0 = \left\| \vec{C}_{\nu,i}^{(0)} \right\|_R = 1 \tag{4.32}$$

у тому розумінні, що

$$U_{j+1} \le \bar{U}_{j+1}, \;\; S_{j+1} \le \bar{S}_{j+1}. \tag{4.33}$$

Розв'язувати систему (4.32) будемо методом твірних функцій. З цією метою вводимо такі твірні функції

$$f(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar{U}_j, \;\; g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar{S}_j,$$

для яких, виходячи з (4.32), приходимо до системи рівнянь

$$f(z) - 1 = z \left(f^2(z) + g(z) \right), \;\; g(z) - 1 = w \left(f(z) - 1 \right) g(z). \tag{4.34}$$

Визначимо з другого рівняння $g(z) = 1/\left\{1 - w\left[f(z) - 1\right]\right\}$ і підставимо одержаний вираз у перше рівняння. Тоді одержимо

$$zwf^3(z) - (w + z + zw) f^2(z) + (2w + 1) f(z) - (w + 1 + z) = 0. \tag{4.35}$$

Поміняємо у рівнянні (4.35) місцями залежну і незалежну змінні, тобто будемо розглядати z як функцію від f:

$$z(f) = \frac{(f - 1) w \left(f - \frac{w+1}{w} \right)}{w f^2 \left(f - \frac{w+1}{w} \right) - 1}. \tag{4.36}$$

Аналіз функції (4.36) показує, що

$$z(1) = z\left(\frac{w+1}{w}\right) = 0;\ \ z(f) > 0\ \ \forall f \in \left(1, \frac{w+1}{w}\right);$$

$$z'(1) = \frac{1}{2} > 0,\ z'\left(\frac{w+1}{w}\right) = -1 < 0.$$

Звідси робимо висновок про те, що існує таке $z_{\max} = z(f_{\max})$, $f_{\max} \in \left(1, \frac{w+1}{w}\right)$, яке є радіусом збіжності ряду $f(z)$, а отже, існують такі додатні сталі L, ε, які не залежать від j, n, що виконується нерівність

$$(z_{\max})^j\, \bar{U}_j \leq \frac{L}{j^{1+\varepsilon}},\ j = 1, 2, \ldots\ . \tag{4.37}$$

З урахуванням заміни (4.30), нерівності (4.37) та введених позначень при $z \geq 0$ маємо

$$\sum_{j=0}^{\infty} z^j \left\|\tilde{u}_{\nu,i}^{(j)}\right\| \leq \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{z}{z_{\max}} M_{\nu,i}\right)^j \bar{U}_j (z_{\max})^j \leq$$

$$\leq 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{z}{z_{\max}} M_{\nu,i}\right)^j \frac{L}{j^{1+\varepsilon}}. \tag{4.38}$$

Нехай виконується умова

$$q_{n,\nu,i} = \frac{M_{n,\nu,i}}{z_{max}} < 1, \tag{4.39}$$

тоді нерівність (4.38) буде вірною $\forall z \in [0, 1]$, а отже, буде мати місце нерівність

$$\left\|\tilde{u}_{n,\nu,i}^{(j)}\right\| \leq \frac{L\, q_{n,\nu,i}^j}{j^{1+\varepsilon}},\ j = 1, 2, \ldots\ . \tag{4.40}$$

Визначимо тепер радіус збіжності ряду $g(z)$. Спочатку, за аналогією з попередніми викладками, знайдемо z як функцію від g:

$$z(g) = \frac{g(g-1)w}{(g-1)^2 + 2wg(g-1) + w^2 g^2 (g+1)}. \tag{4.41}$$

Для дослідження функції $z(g)$ знаходимо

$$z'(g) = -\frac{w[w^2 g^2((g-1)^2 - 2) + (g-1)^2]}{[(g-1)^2 + 2wg(g-1) + w^2 g^2 (g+1)]^2}. \tag{4.42}$$

З аналізу (4.41), (4.42) робимо висновок, що

$$z(g) > 0 \;\forall\, g \in (1, \infty);\;\; z(1) = 0, \;\;\; z(\infty) = 0;\;\; z'(1) = \frac{1}{2w} > 0,$$

$$z'\left(1+\sqrt{2}\right) = -\frac{2w}{\left(2+2(\sqrt{2}+2)w+(7\sqrt{2}+10)w^2\right)^2} < 0,$$

і, отже, існує таке $g_{\max} \in \left(1, 1+\sqrt{2}\right)$, при якому функція $z(g)$ досягає свого максимума

$$z_{\max} = \max_{g\in\left[1,1+\sqrt{2}\right]} z(g) = z(g_{\max}),$$

який є радіусом збіжності ряду $g(z)$ і співпадає з радіусом збіжності ряду $f(z)$. Далі, за аналогією з попередніми викладками, при виконанні умови (4.39) існують такі додатні сталі $\underline{L}$, $\underline{\varepsilon}$, що справедливою є оцінка

$$\left\|\vec{C}^{(j)}_{n,\nu,i}\right\|_R \leq \frac{\underline{L}\, q^j_{n,\nu,i}}{j^{1+\underline{\varepsilon}}},\; j = 1, 2, ... \,. \tag{4.43}$$

Нерівності (4.29), (4.40) і (4.43) приводять до першої потрібної оцінки

$$\left\|u^{(j)}_{n,\nu,i}\right\| \leq \frac{2\bar{L} q^j_{n,\nu,i}}{j^{1+\bar{\varepsilon}}},\; j = 1, 2, ..., \quad \bar{L} = \max(L, \underline{L}), \quad \bar{\varepsilon} = \min(\varepsilon, \underline{\varepsilon}), \tag{4.44}$$

а за допомогою формули (4.18) та оцінки (4.40) – до другої

$$\left|\lambda^{(j+1)}_{n,\nu,i}\right| \leq \frac{L\left\|\varphi(B)u^{(0)}_{n,\nu,i}\right\| q^j_{n,\nu,i}}{j^{1+\varepsilon}},\; j = 1, 2, ... \,. \tag{4.45}$$

Нерівності (4.44), (4.45) і міркування аналогічні міркуванням в [18] переконують у справедливості наступної теореми.

Теорема 4.1. *Нехай виконується умова* (4.39), *тоді FD-метод для задачі* (4.1) *є суперекспоненціально збіжним і справедливими є такі оцінки його точності:*

$$\begin{aligned}\left\|u_{n,\nu,i} - \overset{m}{u}_{n,\nu,i}\right\| &= \left\|u_{n,\nu,i} - \sum_{j=0}^{m} u^{(j)}_{n,\nu,i}\right\| \leq \frac{2\bar{L}}{(m+1)^{1+\bar{\varepsilon}}} \frac{q^{m+1}_{n,\nu,i}}{1-q_{n,\nu,i}},\\ \left|\lambda_{n,\nu,i} - \overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i}\right| &= \left|\lambda_{n,\nu,i} - \sum_{j=0}^{m} \lambda^{(j)}_{n,\nu,i}\right| \leq \frac{L\left\|\varphi(B)u^{(0)}_{n,\nu,i}\right\|}{(m+1)^{1+\varepsilon}} \frac{q^{m}_{n,\nu,i}}{1-q_{n,\nu,i}}.\end{aligned} \tag{4.46}$$

Якщо $q_{n,\nu,i} = 1$, *то замість оцінок* (4.46) *справедливими є наступні:*

$$\left\| u_{n,\nu,i} - \overset{m}{u}_{n,\nu,i} \right\| \leq 2\bar{L} \sum_{j=m+1}^{\infty} \frac{1}{j^{1+\bar{\varepsilon}}} \leq \frac{2\bar{L}}{\bar{\varepsilon} m^{\bar{\varepsilon}}},$$

$$\left| \lambda_{n,\nu,i} - \overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i} \right| \leq \bar{L} \left\| \varphi(B) u_{n,\nu,i}^{(0)} \right\| \sum_{j=m+1}^{\infty} \frac{1}{j^{1+\varepsilon}} \leq \frac{\bar{L} \left\| \varphi(B) u_{n,\nu,i}^{(0)} \right\|}{\varepsilon m^{\varepsilon}}.$$

Тут $i = \overline{1, \mu_\nu}$, $\nu = \overline{1, r}$, $\sum_{\nu=1}^{r} \mu_\nu = k$.

Наш підхід має наступні переваги:

1. Породжує нескінченний спектр, на відміну від матричних методів, таких як метод скінченних різниць (FDM), метод скінченних елементів (FEM) або варіаційні методи (VM).

2. Показав кращі результати збіжності та оцінки похибок (зокрема, має суперекспоненціальну швидкість збіжності) порівняно з FDM, FEM і VM.

3. Можна досягти довільної точності для великих індексів з оптимальними обчислювальними затратами, що не залежать від розріджування сітки.

Деякі з них схожі на особливості методу Pruess [161–163] для звичайних диференціальних рівнянь другого порядку або методів з [47].

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

Зробимо наступні припущення: якщо оператор $\Pi^{-}(B)$ є добутком самоспряжених операторів $\varphi(B)$ і Γ^{+} з непарною кількістю операторів $\varphi(B)$, тоді для $\forall p, m = \overline{1, k}$, $s = 0, 1, ...$ будуть справедливі співвідношення:

$$(\Pi^{-}(B) e_p, e_m) = 0, \tag{4.47}$$

$$((\varphi(B)\Gamma^{+})^{2s} \varphi(B) e_p, e_m) = 0, \ ((\varphi(B)\Gamma^{+})^{2s} \Gamma^{+} \varphi(B) e_p, e_m) = 0. \tag{4.48}$$

Має місце

Теорема 4.2. *Нехай виконується умова* (4.47), *тоді вірними є співвідношення:*

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

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

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

Доведення. Доведення проведемо методом повної математичної індукції. З рівняння (4.10) при $j = 0$ одержимо

$$\hat{u}^{(1)} = -\sum_{p=1}^{k} C_p^{(0)}\Gamma^+\varphi(B)e_p,\ \ \lambda^{(1)} = 0.$$

Запишемо умову розв'язності (4.12) рівняння (4.10) при $j = 1$

$$\lambda^{(2)}C_m^{(0)} - \Big(\varphi(B)\hat{u}^{(1)}, e_m\Big) =$$
$$= \lambda^{(2)}C_m^{(0)} + \sum_{p=1}^{k} C_p^{(0)}\left(\varphi(B)\Gamma^+\varphi(B)e_p, e_m\right) = 0,\ \ m = \overline{1,k}. \quad (4.49)$$

Нехай $\lambda_\nu^{(2)}$, $\nu = \overline{1,r}$ є μ_ν-кратним власним значенням матриці

$$D^{(2)} = |[d_{p,m}^{(2)}]|_{p,m=\overline{1,k}},\ \ d_{p,m}^{(2)} = -\left(\varphi(B)\Gamma^+\varphi(B)e_p, e_m\right), \quad (4.50)$$

причому $\sum_{\nu=1}^{r}\mu_\nu = k$ $(\lambda_1^{(2)} < \ldots < \lambda_\nu^{(2)} < \ldots < \lambda_r^{(2)})$, і розв'язками системи (4.49) при $\lambda^{(2)} = \lambda_\nu^{(2)}$, $\nu = \overline{1,r}$ нехай буде ортонормальна система векторів

$$\vec{C}_{\nu,i}^{(0)} = |[C_{\nu,i,m}^{(0)}]|_{m=\overline{1,k}},\ i = \overline{1,\mu_\nu}, \quad (4.51)$$

тобто $(\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}, \vec{C}_{\nu,s}^{(0)})_R = \delta_{i,s}$, $\left\|\vec{C}_{\nu,i}^{(0)}\right\|_R = 1$, $i,s=\overline{1,\mu_\nu}$. Система (4.49) при $m=\overline{1,k}$, $i = \overline{1,\mu_\nu}$ (а надалі саме такими вважатимемо діапазони, які пробігатимуть індекси m та i) перепишеться

$$\lambda_\nu^{(2)}C_{\nu,i,m}^{(0)} - \Big(\varphi(B)\hat{u}_{\nu,i}^{(1)}, e_m\Big) = \lambda_\nu^{(2)}C_{\nu,i,m}^{(0)}+$$
$$+\sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(0)}\left(\varphi(B)\Gamma^+\varphi(B)e_p, e_m\right) = 0. \quad (4.52)$$

Враховуючи (4.48) та (4.13), запишемо умову розв'язності (4.12) рівняння (4.10) при $j = 2$:

$$\begin{aligned}
&\lambda_{\nu,i}^{(3)} C_{\nu,i,m}^{(0)} + \lambda_{\nu}^{(2)} C_{\nu,i,m}^{(1)} - \left(\varphi(B) u_{\nu,i}^{(2)}, e_m\right) = \lambda_{\nu,i}^{(3)} C_{\nu,i,m}^{(0)} + \lambda_{\nu}^{(2)} C_{\nu,i,m}^{(1)} - \\
&- \sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(2)} \left(\varphi(B) e_p, e_m\right) + \sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(1)} \left(\varphi(B)\Gamma^{+}\varphi(B) e_p, e_m\right) - \\
&- \sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(0)} \left(\varphi(B)\left(\Gamma^{+}\varphi(B)\right)^2 e_p, e_m\right) = \lambda_{\nu,i}^{(3)} C_{\nu,i,m}^{(0)} + \lambda_{\nu}^{(2)} C_{\nu,i,m}^{(1)} + \\
&+ \sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(1)} \left(\varphi(B)\Gamma^{+}\varphi(B) e_p, e_m\right) = 0,
\end{aligned} \tag{4.53}$$

наслідком якої з врахуванням (4.52) і (4.15) є

$$\lambda_{\nu,i}^{(3)} = 0, \;\; (\lambda_{\nu}^{(2)} E + D^{(2)}) \vec{C}_{\nu,i}^{(1)} = \vec{0}, \tag{4.54}$$

тоді $\vec{C}_{\nu,i}^{(1)} = \vec{0}$.

Враховуючи (4.48), запишемо умову розв'язності (4.12) рівняння (4.10) при $j = 3$:

$$\begin{aligned}
\lambda_{\nu,i}^{(4)} C_{\nu,i,m}^{(0)} + \lambda_{\nu}^{(2)} C_{\nu,i,m}^{(2)} - \left(\varphi(B) u_{\nu,i}^{(3)}, e_m\right) = \lambda_{\nu,i}^{(4)} C_{\nu,i,m}^{(0)} + \lambda_{\nu}^{(2)} C_{\nu,i,m}^{(2)} - \\
- \left(\varphi(B) \hat{u}_{\nu,i}^{(3)}, e_m\right) - \sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(3)} \left(\varphi(B) e_p, e_m\right) = 0.
\end{aligned} \tag{4.55}$$

Звідси з врахуванням (4.48) та умови (4.15) одержуємо

$$\lambda_{\nu,i}^{(4)} = \left(\varphi(B) \hat{u}_{\nu,i}^{(3)}, u_{\nu,i}^{(0)}\right). \tag{4.56}$$

Для того, щоб одержати рівняння для $\vec{C}_{\nu,i}^{(2)} = |[C_{\nu,i,m}^{(2)}]|_{m=\overline{1,k}}$, повертаємось до рівняння (4.55), яке перетворимо до вигляду

$$\begin{aligned}
\lambda_{\nu}^{(2)} C_{\nu,i,m}^{(2)} + \sum_{p=1}^{k} C_{\nu,i,p}^{(2)} d_{p,m}^{(2)} = -\lambda_{\nu,i}^{(4)} C_{\nu,i,m}^{(0)} + \lambda_{\nu}^{(2)} \left(\varphi(B)\Gamma^{+} \hat{u}_{\nu,i}^{(1)}, e_m\right) - \\
- \left(\varphi(B)\Gamma^{+}\varphi(B) \hat{u}_{\nu,i}^{(2)}, e_m\right).
\end{aligned} \tag{4.57}$$

Розв'язок рівняння (4.57), а він визначається неоднозначно, візьмемо саме у такій векторно-матричній формі, яка забезпечує виконання умови (4.15), тобто:

$$\vec{C}^{(2)}_{\nu,i} = \left(D^{[2,\nu]}\right)^{+} \left[-\lambda^{(4)}_{\nu,i}\vec{C}^{(0)}_{\nu,i} + \lambda^{(2)}_{\nu} \left\langle\varphi(B)\Gamma^{+}\hat{u}^{(1)}_{\nu,i}, \vec{e}\right\rangle - \right.$$
$$\left. - \left\langle\varphi(B)\Gamma^{+}\varphi(B)\hat{u}^{(2)}_{\nu,i}, \vec{e}\right\rangle\right], \quad (4.58)$$

де $\left(D^{[2,\nu]}\right)^{+}$ – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $D^{[2,\nu]} = \lambda^{(2)}_{\nu} E + D^{(2)}$ та згідно із введеними вище позначеннями

$$\langle v, \vec{e}\rangle = [(v, e_1), (v, e_2), ..., (v, e_k)]^T, \quad \vec{e} = [e_1, e_2, ..., e_k]^T$$

.

Перед розглядом загального випадку запишемо умову розв'язності (4.12) рівняння (4.10) при $j = 4$:

$$\lambda^{(5)}_{\nu,i}C^{(0)}_{\nu,i,m} + \lambda^{(2)}_{\nu}C^{(3)}_{\nu,i,m} - \left(\varphi(B)u^{(4)}_{\nu,i}, e_m\right) = \lambda^{(5)}_{\nu,i}C^{(0)}_{\nu,i,m} + \lambda^{(2)}_{\nu}C^{(3)}_{\nu,i,m} -$$
$$- \left(\varphi(B)\hat{u}^{(4)}_{\nu,i}, e_m\right) - \sum_{p=1}^{k} C^{(4)}_{\nu,i,p}\left(\varphi(B)e_p, e_m\right) = 0. \quad (4.59)$$

Звідси з урахуванням (4.48) та умови (4.15) одержуємо

$$\lambda^{(5)}_{\nu,i} = \left(\varphi(B)\hat{u}^{(4)}_{\nu,i}, u^{(0)}_{\nu,i}\right). \quad (4.60)$$

Для того, щоб одержати рівняння для $\vec{C}^{(3)}_{\nu,i} = |[C^{(3)}_{\nu,i,m}]|_{m=\overline{1,k}}$, покажемо спочатку, що права частина (4.60) дорівнює нулю. Маємо

$$(\varphi(B)\hat{u}^{(4)}_{\nu,i}, e_m) = \left(\varphi(B)\Gamma^{+}\left(\lambda^{(2)}_{\nu}\hat{u}^{(2)}_{\nu,i} - \varphi(B)u^{(3)}_{\nu,i}\right), e_m\right) = -\sum_{p=1}^{k} C^{(3)}_{\nu,i,p}d^{(2)}_{p,m}. \quad (4.61)$$

Підставимо цей вираз в (4.59), тоді одержимо

$$\lambda^{(5)}_{\nu,i}C^{(0)}_{\nu,i,m} + \lambda^{(2)}_{\nu}C^{(3)}_{\nu,i,m} + \sum_{p=1}^{k} C^{(3)}_{\nu,i,p}d^{(2)}_{p,m} = 0, \quad (4.62)$$

звідки випливає, що $\lambda^{(5)}_{\nu,i} = 0$, $\vec{C}^{(3)}_{\nu,i} = \vec{0}$.

Надалі для спрощення викладок, якщо це не спричинятиме непорозумінь, опускатимемо індекси ν, i при записі векторів $\vec{C}^{(j)}_{\nu,i} = |[C^{(j)}_{\nu,i,m}]|_{m=\overline{1,k}}$ та власних пар $\lambda^{(j+1)}_{\nu,i}$, $u^{(j+1)}_{\nu,i}$ з $j = 0, 1, 2, ...$

Застосуємо метод повної математичної індукції. Припустимо, що для деякого фіксованого j при $m=\overline{1,k}$, $s=\overline{1,j}$ доведено, що

$$\begin{gathered}\lambda^{(2s-1)}=0, \quad \vec{C}^{(2s-1)}=\vec{0}, \\ \left(\Pi^{+}\hat{u}^{(2s-1)}, e_m\right)=0, \ \forall\Pi^{+}\in\Omega^{+}, \ \left(\Pi^{-}\hat{u}^{(2s)}, e_m\right)=0, \ \forall\Pi^{-}\in\Omega^{-}.\end{gathered} \tag{4.63}$$

Покажемо, що (4.63) виконуються і при $s=j+1$. З (4.63) і властивостей оператора Γ^{+} маємо

$$\begin{gathered}u^{(2j+1)}=\sum_{p=1}^{k} C_p^{(2j+1)}e_p+\Gamma^{+}\left(\sum_{s=1}^{j}\lambda^{(2j-2s+2)}\hat{u}^{(2s-1)}-\varphi(B)u^{(2j)}\right), \\ \lambda^{(2j+1)}C_m^{(0)}-(\varphi(B)\hat{u}^{(2j)}, e_m)=0.\end{gathered} \tag{4.64}$$

Розглянемо друге рівняння з (4.64) і використаємо припущення індукції (4.63) та лему 4.1, тоді

$$\begin{gathered}\lambda^{(2j+1)}C_m^{(0)}-(\varphi(B)\hat{u}^{(2j)}, e_m)=\lambda^{(2j+1)}C_m^{(0)}- \\ -\left(\varphi(B)\Gamma^{+}\left(\sum_{s=1}^{j-1}\lambda^{(2j-2s)}\hat{u}^{(2s)}-\varphi(B)\hat{u}^{(2j-1)}\right), e_m\right)=\lambda^{(2j+1)}C_m^{(0)}=0.\end{gathered}$$

Звідси одержуємо $\lambda^{(2j+1)}=0$.

Для $\forall\Pi^{+}\in\Omega^{+}$ з (4.63) маємо

$$\left(\Pi^{+}\hat{u}^{(2j+1)}, e_m\right)=\left(\Pi^{+}\Gamma^{+}\left(\sum_{s=1}^{j}\lambda^{(2j-2s+2)}\hat{u}^{(2s-1)}-\varphi(B)\hat{u}^{(2j)}\right), e_m\right)=0,$$

бо у оператора $\Pi^{+}\Gamma^{+}$ парність кількості входжень не змінюється, а у оператора $\Pi^{+}\Gamma^{+}\varphi(B)$ кількість входжень $\varphi(B)$ стає непарною.

Далі $\forall\Pi^{-}\in\Omega^{-}$ маємо

$$\begin{gathered}(\Pi^{-}\hat{u}^{(2j+2)}, e_m)=\left(\Pi^{-}\Gamma^{+}\left(\sum_{s=1}^{j}\lambda^{(2j-2s+2)}\hat{u}^{(2s)}-\varphi(B)u^{(2j+1)}\right), e_m\right)= \\ =-\sum_{p=1}^{k} C_p^{(2j+1)}\left(\Pi^{-}\Gamma^{+}\varphi(B)e_p, e_m\right).\end{gathered} \tag{4.65}$$

Для того щоб показати, що останні вирази дорівнюють нулю, запишемо умови розв'язності (4.12) рівняння (4.10) при заміні j на $2j+2$

$$\lambda^{(2j+3)}C_m^{(0)} + \sum_{s=1}^{j} \lambda^{(2j-2s+4)}(\hat{u}^{(2s-1)}, e_m) + \lambda^{(2)}C_m^{(2j+1)} - (\varphi(B)\hat{u}^{(2j+2)}, e_m) = 0,$$

а оскільки має місце (4.65), то попередня система набуває вигляду

$$\lambda^{(2j+3)}C_m^{(0)} + \lambda^{(2)}C_m^{(2j+1)} - \sum_{p=1}^{k} d_{p,m}^{(2)}C_p^{(2j+1)} = 0.$$

Звідси одержуємо $\lambda^{(2j+3)} = 0$, $C_m^{(2j+1)} = 0$, що разом із (4.65) доводить справедливість рівностей

$$(\Pi^- \hat{u}^{(2j+2)}, e_m) = 0.$$

Зауважимо, що вибір вектора $\vec{C}^{(0)}$ як розв'язок системи $(\lambda^{(2)}E+D^{(2)})\vec{C}^{(2j+1)} = \vec{0}$ обумовлений тим, що в подальшому не виникає неоднорідних умов на цей вектор.

На цьому індукцію завершено, а з нею і доведення теореми. □

Використовуючи доведену теорему 4.2 та формули (4.13), (4.14) і (4.18), запишемо праву частину рівнянь (4.2) при заміні j на $2j+1$ $(j=1,2,...)$

$$\begin{gathered}
F^{(2j+2)} = \lambda^{(2j+2)}u^{(0)} - \varphi\left(B\right)\hat{u}^{(2j+1)} + \sum_{s=1}^{j} \lambda^{(2j+2-2s)}u^{(2s)} = \\
= \sum_{p=1}^{k} C_p^{(2j)}\varphi\left(B\right)\Gamma^+\varphi\left(B\right)e_p + \lambda^{(2)}\sum_{p=1}^{k} C_p^{(2j)}e_p + \\
+ \sum_{s=1}^{j-1} \lambda^{(2j+2-2s)}\left[\hat{u}^{(2s)} + \sum_{p=1}^{k} C_p^{(2s)}e_p - \varphi\left(B\right)\Gamma^+\hat{u}^{(2s-1)}\right] + \\
+ \lambda^{(2)}\left[\hat{u}^{(2j)} - \varphi\left(B\right)\Gamma^+\hat{u}^{(2j-1)}\right] + \varphi\left(B\right)\Gamma^+\varphi\left(B\right)\hat{u}^{(2j)} + \lambda^{(2j+2)}\sum_{p=1}^{k} C_p^{(0)}e_p.
\end{gathered} \tag{4.66}$$

Згідно з умовою розв'язності (4.12), використовуючи лему 4.1, помножимо скалярно (4.66) на e_m, $m=\overline{1,k}$. Отримаємо систему рівнянь

$$\begin{gathered}
\lambda^{(2)}C_m^{(2j)} + \sum_{p=1}^{k} C_p^{(2j)}d_{p,m}^{(2)} = \sum_{s=1}^{j-1} \lambda^{(2j+2-2s)}\left[\Big(\varphi\left(B\right)\Gamma^+\hat{u}^{(2s-1)}, e_m\Big) - C_m^{(2s)}\right] + \\
+ \lambda^{(2)}\Big(\varphi\left(B\right)\Gamma^+\hat{u}^{(2j-1)}, e_m\Big) - \Big(\varphi\left(B\right)\Gamma^+\varphi\left(B\right)\hat{u}^{(2j)}, e_m\Big) - \lambda^{(2j+2)}C_m^{(0)},
\end{gathered}$$

або у векторно-матричному вигляді:

$$\left(\lambda^{(2)}E+D^{(2)}\right)\vec{C}^{(2j)}=\sum_{s=1}^{j-1}\lambda^{(2j+2-2s)}\left[\left\langle\varphi\left(B\right)\Gamma^{+}\hat{u}^{(2s-1)},\vec{e}\right\rangle-\vec{C}^{(2s)}\right]+ \\ +\lambda^{(2)}\left\langle\varphi\left(B\right)\Gamma^{+}\hat{u}^{(2j-1)},\vec{e}\right\rangle-\left\langle\varphi\left(B\right)\Gamma^{+}\varphi\left(B\right)\hat{u}^{(2j)},\vec{e}\right\rangle-\lambda^{(2j+2)}\vec{C}^{(0)}. \tag{4.67}$$

Використовуючи співвідношення

$$\sum_{p=1}^{k}C_p^{(2j)}\sum_{t=1}^{k}C_t^{(0)}d_{p,t}^{(2)}=0,$$

підставимо наступний вираз для $\lambda^{(2j+2)}$, отриманий з (4.18) і (4.64),

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

у рівняння (4.67). Маємо систему рівнянь

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

З останньої системи рівнянь, леми 4.1, теореми 4.2 та формул (4.13), (4.14) і (4.18) одержуємо *основні формули* алгоритму FD-методу для задачі (4.1) (при $j=1,2,...$):

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

$$\hat{u}^{(2j)}=\Gamma^{+}\left(\sum_{s=1}^{j-1}\lambda^{(2j-2s)}\hat{u}^{(2s)}-\varphi(B)\hat{u}^{(2j-1)}\right), \tag{4.68}$$

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

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

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

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

4.5 Збіжність FD-методу в особливому випадку

Перейдемо до відшукання оцінок. Використовуючи введені в п.4.3 позначення, з (4.68) при $j = 1, 2, ...$ маємо:

$$\left|\lambda^{(2j)}_{n,\nu,i}\right| \le \left\|\varphi(B)u^{(0)}_{n,\nu,i}\right\| \left\|\hat{u}^{(2j-1)}_{n,\nu,i}\right\|,$$

$$\left\|\hat{u}^{(2j-1)}_{n,\nu,i}\right\| \le \alpha\left(\sum_{s=1}^{j-1}\left\|\hat{u}^{(2j-2s-1)}_{n,\nu,i}\right\|\left\|\hat{u}^{(2s-1)}_{n,\nu,i}\right\| + \left\|\hat{u}^{(2j-2)}_{n,\nu,i}\right\| + \left\|\vec{C}^{(2j-2)}_{n,\nu,i}\right\|_R\right),$$

$$\left\|\hat{u}^{(2j)}_{n,\nu,i}\right\| \le \alpha\left(\sum_{s=1}^{j-1}\left\|\hat{u}^{(2j-2s-1)}_{n,\nu,i}\right\|\left\|\hat{u}^{(2s)}_{n,\nu,i}\right\| + \left\|\hat{u}^{(2j-1)}_{n,\nu,i}\right\|\right), \tag{4.69}$$

$$\left\|\vec{C}^{(2j)}_{n,\nu,i}\right\| \le \beta\left\{\alpha\sum_{s=1}^{j}\left\|\hat{u}^{(2j+1-2s)}_{n,\nu,i}\right\|\left\|\hat{u}^{(2s-1)}_{n,\nu,i}\right\| + \alpha\left\|\hat{u}^{(2j)}_{n,\nu,i}\right\| + \right.$$
$$\left. + \sum_{s=1}^{j-1}\left\|\hat{u}^{(2j+1-2s)}_{n,\nu,i}\right\|\left\|\vec{C}^{(2s)}_{n,\nu,i}\right\|\right\},$$

де $\alpha = M_{n,\nu,i}$, $\beta = \left\|\left(D^{[2,\nu]}\right)^+\right\| |\langle\varphi(B)\,\vec{e}\rangle| \max(\sqrt{k-1}, 2)$. Тут, при одержанні останньої нерівності були використані такі співвідношення:

$$\left|\left\langle \vec{e} - u^{(0)}\vec{C}^{(0)}\right\rangle\right|^2 = k-1, \quad \left|\left\langle \varphi(B)(\vec{e} - u^{(0)}\vec{C}^{(0)})\right\rangle\right| \le 2\left|\langle\varphi(B)\vec{e}\rangle\right|.$$

Виконаємо в (4.69) заміни

$$c_{2j} = (M_{n,\nu,i})^{-2j-1}\left\|\vec{C}^{(2j)}_{n,\nu,i}\right\|_R, u_j = (M_{n,\nu,i})^{-j}\left\|\hat{u}^{(j)}_{n,\nu,i}\right\|, \quad j = 1, 2, ...,$$

$$c_0 = 1, \quad u_0 = 0.$$

Тоді система нерівностей (4.69) набуде вигляду

$$\begin{aligned} u_{2j-1} &\le \sum_{s=1}^{j-1} u_{2j-2s-1}u_{2s-1} + u_{2j-2} + \alpha c_{2j-2}, \\ u_{2j} &\le \sum_{s=1}^{j-1} u_{2j-2s-1}u_{2s} + u_{2j-1}, \\ c_{2j} &\le \beta\left[\sum_{s=1}^{j} u_{2j-2s+1}u_{2s-1} + u_{2j}\right] + \alpha\beta\sum_{s=1}^{j-1} u_{2j-2s+1}c_{2s}, \\ & j = 1,2,...,\ \ c_0 = 1,\ \ u_0 = 0. \end{aligned} \tag{4.70}$$

Замінивши в (4.70) знак нерівності на знак рівності, приходимо до мажоруючої системи рівнянь

$$\begin{aligned} \bar u_{2j-1} &= \sum_{s=1}^{j-1} \bar u_{2j-2s-1}\bar u_{2s-1} + \bar u_{2j-2} + \alpha\,\bar c_{2j-2}, \\ \bar u_{2j} &= \sum_{s=1}^{j-1} \bar u_{2j-2s-1}\bar u_{2s} + \bar u_{2j-1}, \\ \bar c_{2j} &= \beta\left[\sum_{s=1}^{j} \bar u_{2j-2s+1}\bar u_{2s-1} + \bar u_{2j}\right] + \alpha\beta\sum_{s=1}^{j-1} \bar u_{2j-2s+1}\bar c_{2s}, \\ j &= 1,2,...,\ \bar u_0 = u_0 = 0,\ \bar c_0 = c_0 = 1, \end{aligned} \tag{4.71}$$

в тому розумінні, що

$$u_{2j-1} \le \bar u_{2j-1},\ \ u_{2j} \le \bar u_{2j},\ \ c_{2j} \le \bar c_{2j},\ \ j = 1,2,\dots .$$

Будемо розв'язувати систему (4.71) методом твірних функцій. Введемо позначення

$$f(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar u_{2j+1},\ g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar u_{2j+2},\ w(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \bar c_{2j}. \tag{4.72}$$

Із (4.71) одержуємо таку систему:

$$\begin{aligned} f(z) &= zf^2(z) + zg(z) + \alpha w(z), \\ g(z) &= zf(z)g(z) + f(z), \\ w(z) - 1 &= \beta z\left\{[f(z)]^2 + g(z)\right\} + \alpha\beta\,[f(z) - \alpha]\,[w(z) - 1]\,. \end{aligned} \tag{4.73}$$

Звідси маємо квадратне рівняння відносно z

$$[\alpha\beta f-\alpha\beta(\alpha+1)-1]f^3z^2+[-2\alpha\beta f^2+(3\alpha^2\beta+2)f-$$
$$-(\alpha^2-\alpha-1)\alpha\beta-\alpha+1]fz+\alpha\beta f^2-(2\alpha^2\beta+1)f+\alpha^3\beta+\alpha=0,$$

з якого знаходимо z як функцію від f, вибравши серед двох коренів той, для якого виконується співвідношення $z(\alpha)=0$, тобто

$$\begin{aligned}z(f)=\big(&2\alpha\beta f^2-(3\alpha^2\beta+2)f+\alpha(\alpha^2-\alpha-1)\beta+\alpha-1+\\&+\big[4\alpha^2\beta^2f^3+(\alpha(\alpha^2-12\alpha-4)\beta-8)\alpha\beta f^2+\\&+(4-2\alpha^3(\alpha^2-5\alpha-3)\beta^2-2\alpha(\alpha^2-7\alpha-2)\beta)f+\\&+\alpha\beta(\alpha^2-\alpha-1)(\alpha(\alpha^2-\alpha-1)\beta+2\alpha-2)+(\alpha-1)^2\big]^{1/2}\big)/\\&/\left[2f^2(\alpha\beta f-1-\alpha(\alpha+1)\beta)\right].\end{aligned}\tag{4.74}$$

Помножимо чисельник і знаменник на вираз

$$\begin{aligned}m=-\big(&2\alpha\beta f^2-(3\alpha^2\beta+2)f+\alpha(\alpha^2-\alpha-1)\beta+\alpha-1-\\&-\big[4\alpha^2\beta^2f^3+(\alpha(\alpha^2-12\alpha-4)\beta-8)\alpha\beta f^2+\\&+(4-2\alpha^3(\alpha^2-5\alpha-3)\beta^2-2\alpha(\alpha^2-7\alpha-2)\beta)f+\\&+\alpha\beta(\alpha^2-\alpha-1)(\alpha(\alpha^2-\alpha-1)\beta+2\alpha-2)+(\alpha-1)^2\big]^{1/2}\big).\end{aligned}$$

Тоді після нескладних перетворень одержуємо

$$z\left(f\right)=-2\alpha\beta\frac{(f-\alpha)\left(f-\alpha-\frac{1}{\alpha\beta}\right)}{f\,m}.\tag{4.75}$$

Неважко показати, що

$$z(f)>0\quad\forall f\in\left(\alpha,\alpha+\frac{1}{\alpha\beta}\right),$$

а отже, існує таке $f_{\max}\in\left(\alpha,\alpha+\frac{1}{\alpha\beta}\right)$, що

$$\max_{f\in\left(\alpha,\alpha+\frac{1}{\alpha\beta}\right)}z\left(f\right)=z(f_{\max})=z_{\max}$$

і $z_{\max}$ є радіусом збіжності ряду $f(z)$, а також рядів $g(z)$, $w(z)$, тобто існують такі додатні сталі L_i,ε_i, $i=1,2,3$, що

$$(z_{\max})^j\bar{u}_{2j-1}\le\frac{L_1}{j^{1+\varepsilon_1}},\ (z_{\max})^j\bar{u}_{2j}\le\frac{L_2}{j^{1+\varepsilon_2}},\ (z_{\max})^j\bar{c}_{2j}\le\frac{L_3}{j^{1+\varepsilon_3}},\ j=1,2,\ldots.$$

Викладене вище переконує нас у справедливості наступної теореми.

Теорема 4.3. *Нехай* $(\varphi(B)e_{n,p}, e_{n,m}) = 0, \forall p, m = \overline{1,k}$ *та виконується умова*

$$q_{n,\nu,i} = \frac{M_{n,\nu,i}}{z_{\max}} < 1, \tag{4.76}$$

тоді FD-метод для задачі (4.1) *є суперекспоненціально збіжним і справедливими є такі оцінки його точності:*

$$\begin{aligned} \left\| u_{n,\nu,i} - \overset{m}{u}_{n,\nu,i} \right\| &= \left\| u_{n,\nu,i} - \sum_{j=0}^{m} u_{n,\nu,i}^{(j)} \right\| \leq \frac{2\bar{L}}{(m+1)^{1+\varepsilon}} \frac{q_{n,\nu,i}^{m+1}}{1 - q_{n,\nu,i}}, \\ \left| \lambda_{n,\nu,i} - \overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i} \right| &= \left| \lambda_{n,\nu,i} - \sum_{j=0}^{m} \lambda_{n,\nu,i}^{(j)} \right| \leq \frac{\bar{L} \left\| \varphi(B) u_{n,\nu,i}^{(0)} \right\|}{(m+1)^{1+\varepsilon}} \frac{q_{n,\nu,i}^{m}}{1 - q_{n,\nu,i}}. \end{aligned} \tag{4.77}$$

Якщо $q_{n,\nu,i} = 1$, *то замість оцінок* (4.77) *справедливими є наступні:*

$$\begin{aligned} \left\| u_{n,\nu,i} - \overset{m}{u}_{n,\nu,i} \right\| &\leq 2\bar{L} \sum_{j=m+1}^{\infty} \frac{1}{j^{1+\varepsilon}} \leq \frac{2\bar{L}}{\varepsilon m^{\varepsilon}}, \\ \left| \lambda_{n,\nu,i} - \overset{m}{\lambda}_{n,\nu,i} \right| &\leq \bar{L} \left\| \varphi(B) u_{n,\nu,i}^{(0)} \right\| \sum_{j=m+1}^{\infty} \frac{1}{j^{1+\varepsilon}} \leq \frac{\bar{L} \left\| \varphi(B) u_{n,\nu,i}^{(0)} \right\|}{\varepsilon m^{\varepsilon}}. \end{aligned} \tag{4.78}$$

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

Приклад 5. *Розглянемо одновимірну по простору векторно-матричну задачу Штурма-Ліувілля другого порядку з крайовими умовами Діріхле на відрізку* $(0, 1)$, *тобто задачу (4.1), в якій оператори* A, B *визначені наступним чином:*

$$D(A) = \left\{ v \in W_2^2(0,1) : v(0) = v(1) = 0 \right\}, \; Av = \frac{d^2 v(x)}{dx^2}, \; \forall v \in D(A),$$

$$D(B) = L_2(0,1), \quad Bv = Q(x) v(x),$$

$$Q(x) = (1/2 - x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & (1/2-x)^2 \\ 1 & 1 & 1 \\ (1/2-x)^2 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad x \in (0,1).$$

В таблиці 4.1 наведено трійки власних значень $\lambda_{n,l}^{ex}$, $l = \overline{1,3}$, $n = \overline{1,4}, 8$, *отримані методом стрільби з використанням методу Гіра для інтегрування відповідних задач Коші. Обчислення здійснено за допомогою системи*

Таблиця 4.1

Обчислення, здійснені за допомогою методу стрільби (з використанням методу Гіра з maxord=11, abserr=10^{-36}, relerr=10^{-24}) та методу CPM$\{10,8\}$ (з tol=10^{-15}, nint=25).

n	l	$\lambda^{ex}_{n,l}$	t	E_t	ΔE_t
1	1	9.863005897991451947257214	0	9.86300589799145	+3.55e-015
	2	9.868665687828881068818954	1	9.86866568782887	+2.19e-015
	3	9.869448153557578352854274	2	9.86944815355757	+2.19e-015
2	1	39.47847505309593329887386	3	39.4784750530959	+8.77e-015
	2	39.47875905307639709887213	4	39.4784750530959	+8.77e-015
	3	39.48029773815411128857833	5	39.4802977381541	-1.42e-014
3	1	88.82646667897491171279617	6	88.8264666789749	+1.97e-014
	2	88.82660431609601029718887	7	88.8264666789749	+1.97e-014
	3	88.82761296473985512606048	8	88.8276129647398	+2.84e-014
4	1	157.9136858376700168133047	9	157.913685837670	+3.51e-014
	2	157.9137647274037242550664	10	157.913685837670	+3.51e-014
	3	157.9143992106911288540809	11	157.913685837670	+3.51e-014
8	1	631.6546855642199543269033	21	631.654685564219	+1.40e-013
	2	631.6547055560593258633251	22	631.654685564219	+1.40e-013
	3	631.6548807432349298044469	23	631.654685564219	+1.40e-013

комп'ютерної алгебри Maple 17 (з `Digits=128`*,* `maxord=11`*,* `abserr`=10^{-36}*,* `relerr`=10^{-24}*).*

За допомогою реалізованого в пакеті MATSCS в Matlab методу CPM$\{10,8\}$ *(див. [137] та Додаток В) знайдено власні значення* E_t *в режимі обчислень з подвійною точністю та допустимим відхиленням* `tol=`10^{-15}*. Деякі з них при* $t=\overline{0,11}$ *та* $t=\overline{21,23}$ *разом з похибками обчислень* ΔE_t *наведено в таблиці 4.1. Кількість інтервалів розбиття «основної» сітки* `nint=25`*. Як видно з таблиці 4.1, вже при невеликих номерах* t *власні значення в трійках співпадають, а саме* $E_3 = E_4$*,* $E_6 = E_7$*,* $E_{3t} = E_{3t+1} = E_{3t+2}$*,* $t >= 3$*. Це зумовлено близькістю власних значень в трійках та використанням розбиття відрізку, яке генерується на початку виконання алгоритму CPM-методу, для обчислення всіх власних значень.*

Застосуємо найпростіший варіант FD-методу, коли $\bar{B}=0$. Псевдообернений оператор Мура-Пенроуза Γ^+ має вигляд:

$$\Gamma^+ v = (g_n(x,\cdot), v_n(\cdot)) = \int_0^1 g_n(x,\xi) v_n(\xi) d\xi,$$

$$g_n(x,\xi) = \frac{1}{4\pi^2 n^2}(\cos(n\pi(x+\xi)) - \cos(n\pi(x-\xi))) - \frac{1}{2\pi n}(\sin(n\pi(x+\xi)) \times \\ \times (1-x-\xi) - \sin(n\pi|x-\xi|)(1-|x-\xi|)),$$

де $g_n(x,\xi)$ – узагальнена функція Гріна.

В цьому випадку кожне власне значення $\lambda_n^{(0)} = (n\pi)^2$ базової задачі має кратність 3 і йому відповідає ортонормальна система власних векторів $e_{n,m}(x) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)|[\delta_{m,s}]|_{s=\overline{1,3}}$, $m = \overline{1,3}$. Загальними розв'язками базової задачі є власні вектори

$$u_{n,p}^{(0)}(x) = \sum_{m=1}^{3} C_{n,p,m}^{(0)} e_{n,m}(x),\ p = \overline{1,3},$$

де $\vec{C}_{n,p}^{(0)} = |[C_{n,p,m}^{(0)}]|_{m=\overline{1,3}}$, $p = \overline{1,3}$ – ортонормальна система векторів, що є розв'язком відповідної системи (4.49). *Кожне власне значення $\lambda_{n,\nu}^{(2)}$ матриці* (4.50) *має кратність 1 ($\mu_\nu = 1, \nu = \overline{1,3}$), тому індекс i (введений згідно з позначеннями п. 4.4) можна опустити.*

FD-метод в даному прикладі є таким, що точно реалізується (див. [145]). Для матричного потенціала $Q(x)$ виконуються співвідношення:

$$(Q(x)e_{n,p}(x), e_{n,m}(x)) = 0,\ \ p,m = \overline{1,3}.$$

Умови теореми 4.2 виконуються, зокрема, $\lambda_{n,l}^{(2j-1)} = 0$, $l = \overline{1,3}$, $j = 1, 2, ...$.

Наближення $\overset{2j}{\lambda}_{n,l}$, $\overset{2j}{u}_{n,l}(x)$, $\overset{2j-1}{u}_{n,l}(x)$, $l = \overline{1,3}$, $j = \overline{1,3}$ знайдені в аналітичній формі, яка дає можливість проаналізувати їх залежність від номера n трійки власних значень. Завдяки цьому при використанні FD-методу вдається уникнути наведених вище труднощів, які виникають при обчисленнях за допомогою методу CPM$\{10,8\}$. Асимптотична поведінка знайдених поправок до власних значень відносно n є наступною: $\lambda_{n,2}^{(2j)} = \mathcal{O}(n^{-2j+2})$, $\lambda_{n,l}^{(2j)} = \mathcal{O}(n^{-2j}), l = 1,3,\ j = 1,2,3.$

Таблиця 4.2

Збіжність FD-методу для власних значень $\lambda_{n,l}, l=\overline{1,3}$ з номерами $n=1,2,3,4,8$.

n	j	$\left\lvert\lambda_{n,1}^{(j)}\right\rvert$	$\Delta_{n,1}(j)$	$\left\lvert\lambda_{n,2}^{(j)}\right\rvert$	$\Delta_{n,2}(j)$	$\left\lvert\lambda_{n,3}^{(j)}\right\rvert$	$\Delta_{n,3}(j)$
1	0	9.870	6.6e-3	9.870	9.4e-4	9.870	1.6e-4
	2	6.599e-3	7.8e-7	9.387e-4	1.8e-8	1.562e-4	5.0e-10
	4	7.877e-7	2.3e-10	1.778e-8	7.9e-13	4.995e-10	3.7e-15
	6	2.301e-10	8.7e-14	7.916e-13	4.9e-17	3.746e-15	1.4e-18
2	0	39.48	5.7e-5	39.48	3.4e-4	39.48	1.9e-3
	2	5.745e-5	6.8e-10	3.415e-4	1.7e-8	1.881e-3	7.6e-7
	4	6.796e-10	2.2e-14	1.778e-8	8.0e-13	7.567e-7	2.3e-10
	6	2.125e-14	1.2e-15	8.050e-13	4.5e-17	2.329e-10	4.4e-14
3	0	88.83	2.7e-5	88.83	1.6e-4	88.83	1.2e-3
	2	2.707e-5	3.5e-12	1.647e-4	4.3e-11	1.173e-3	3.0e-8
	4	3.477e-12	3.1e-16	4.269e-11	1.3e-14	2.968e-8	2.7e-12
	6	3.314e-16	2.4e-17	1.322e-14	8.5e-20	2.710e-12	9.2e-16
4	0	157.9	1.5e-5	157.9	9.4e-5	157.9	7.3e-4
	2	1.542e-5	3.3e-12	9.431e-5	2.4e-11	7.288e-4	1.6e-9
	4	3.334e-12	5.9e-17	2.438e-11	1.4e-16	1.604e-9	1.6e-13
	6	6.218e-17	2.8e-18	1.408e-16	1.2e-19	1.635e-13	5.9e-17
8	0	631.8	3.9e-6	631.8	2.4e-5	631.8	2.0e-4
	2	3.895e-6	2.4e-13	2.389e-5	6.3e-13	1.991e-4	4.4e-11
	4	2.373e-13	8.5e-19	6.257e-13	2.8e-20	4.364e-11	2.1e-17
	6	8.430e-19	1.1e-20	3.603e-20	7.7e-21	2.111e-17	1.2e-19

Для прикладу наведемо другі поправки до трійок власних значень (інші не наводимо через їх громіздкість):

$$\lambda_{n,1}^{(2)} = -\frac{1181}{17920\pi^2 n^2} + \frac{2921}{2560 n^4 \pi^4} - \frac{267}{128\pi^6 n^6} + \frac{621}{128\pi^8 n^8} + \frac{1}{53760\pi^2 n^2} \times$$

$$\times \left[11630417 - \frac{416639286}{\pi^2 n^2} + \frac{4510913841}{\pi^4 n^4} - \frac{14640469200}{\pi^6 n^6} + \right.$$

$$\left. + \frac{28240070040}{\pi^8 n^8} - \frac{58496709600}{\pi^{10} n^{10}} + \frac{68027072400}{\pi^{12} n^{12}} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_{n,2}^{(2)} = -\frac{407}{26880\pi^2 n^2} + \frac{41}{1280 n^4 \pi^4} + \frac{69}{64\pi^6 n^6} + \frac{621}{64\pi^8 n^8},$$

$$\lambda_{n,3}^{(2)} = -\frac{1181}{17920\pi^2 n^2} + \frac{2921}{2560 n^4 \pi^4} - \frac{267}{128\pi^6 n^6} + \frac{621}{128\pi^8 n^8} - \frac{1}{53760\pi^2 n^2} \times$$

$$\times\left[11630417-\frac{416639286}{\pi^2n^2}+\frac{4510913841}{\pi^4n^4}-\frac{14640469200}{\pi^6n^6}+\right.$$
$$\left.+\frac{28240070040}{\pi^8n^8}-\frac{58496709600}{\pi^{10}n^{10}}+\frac{68027072400}{\pi^{12}n^{12}}\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Аналітичні перетворення та чисельні розрахунки згідно з FD-методом здійснювались за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17 (з `Digits=128`*). Поправки до власних значень по абсолютній величині та абсолютні похибки наближень FD-методу* $\Delta_{n,l}(N)=|\lambda_{n,l}^{ex}-\overset{N}{\lambda}_{n,l}|$ *рангу* $N=0,2,4,6$ *до власних значень* $\lambda_{n,l}^{ex}, l=\overline{1,3}$ *з номерами* $n=\overline{1,4},8$ *наведені в таблиці 4.2. Як видно з таблиці 4.2, чисельні розрахунки підтверджують теорему 4.3 про суперекспоненціальну швидкість збіжності алгоритму.*

4.6 Висновки до розділу 4

Результати даного розділу є узагальненням роботи [101], в якій обгрунтовано FD-метод та здійснено його алгоритмічну реалізацію для абстрактної постановки задачі на власні значення в гільбертовому просторі у випадку, коли базова задача може мати двократні власні значення. Також узагальнено результати робіт по FD-методу [3, 71], [102, п. 2]. Узагальнення полягає в тому, що базова задача може містити власні значення довільної (скінченної) кратності.

Основні результати даного розділу:

1) Розроблено та обгрунтовано 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.

2) Знайдено достатні умови суперекспоненціальної збіжності запропонованого підходу (теореми 4.1, 4.3), зокрема в особливому випадку, для якого алгоритм FD-методу побудовано на основі доведеної теореми 4.2, що визначає його властивості в цьому випадку.

Ефективність FD-методу в особливому випадку успішно проілюстровано на прикладі векторно-матричної задачі Штурма-Ліувілля другого порядку з рівнянням у формі Шрьодінгера на скінченному проміжку із симетричним матричним потенціалом розмірності 3 та базовою задачею, кожне власне значення якої є трикратним (приклад 5).

Основні результати даного розділу опубліковано у двох статтях [25, 28] та доповідались на конференції [20].

РОЗДІЛ 5
FD-МЕТОД ДЛЯ ЗАДАЧІ НА ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ З КРАТНИМИ ВЛАСНИМИ ЗНАЧЕННЯМИ БАЗОВОЇ ЗАДАЧІ В БАНАХОВОМУ ПРОСТОРІ

5.1 Абстрактна постановка задачі

Розглянемо задачу на власні значення в банаховому просторі X з нульовим елементом θ

$$(A+B)u_n - \lambda_n u_n = \theta \tag{5.1}$$

в припущенні, що спектр оператора $A+B$ є дискретним. Шукаємо власну пару $\{\lambda_n, u_n\}$ із заданим фіксованим індексом n. Нехай X^* є дуальним банаховим простором лінійних функціоналів на X і $(\cdot,\cdot)$ є білінійним відношенням. Апроксимуємо оператор B оператором $\bar{B}$ таким, щоб *базова задача*

$$(A+\overline{B})u_n^{(0)} - \lambda_n^{(0)} u_n^{(0)} = \theta \tag{5.2}$$

була «простішою», ніж задача (5.1), тобто так, щоб (5.2) мала явний аналітичний (точний) розв'язок.

Визначимо формально гомотопію між двома задачами P_1 та P_2 із розв'язками u_1 та u_2 з топологічного простору X як параметричну задачу $P_H(t)$ із розв'язком $u(t)$, який неперервно залежить від параметра $t \in [0,1]$ і $u(0) = u_1$, $u(1) = u_2$ (див., напр., [52, 62]). Згідно з ідеєю гомотопії для деякого фіксованого номера n власної пари «занурюємо» (5.2) в сімейство параметричних задач

$$(A+W(t))u_n(t) - \lambda_n(t)u_n(t) = \theta, \quad t \in [0,1] \tag{5.3}$$

з $W(t) = \overline{B} + t(B - \overline{B})$, яке містить обидві задачі (5.1) і (5.2). Очевидно, що

$$u_n(0) = u_n^{(0)},\ \lambda_n(0) = \lambda_n^{(0)}, \quad u_n(1) = u_n,\ \lambda_n(1) = \lambda_n. \tag{5.4}$$

Розв'язок (5.3) будемо шукати у вигляді степеневих рядів по змінній t:

$$\lambda_n(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_n^{(j)} t^j,\ u_n(t) = \sum_{j=0}^{\infty} u_n^{(j)} t^j, \tag{5.5}$$

де

$$\lambda_n^{(j)} = \frac{1}{j!}\left.\frac{d^j\lambda_n(t)}{dt^j}\right|_{t=0}, \quad u_n^{(j)} = \frac{1}{j!}\left.\frac{d^j u_n(t)}{dt^j}\right|_{t=0}. \tag{5.6}$$

При $t = 1$ в (5.5) отримуємо

$$\lambda_n = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_n^{(j)}, \quad u_n = \sum_{j=0}^{\infty} u_n^{(j)} \tag{5.7}$$

при умові, що ряди (5.5) збігаються для всіх $t \in [0, 1]$.

Згідно з ідеологією FD-методу зрізані ряди

$$\overset{N}{\lambda}_n = \sum_{j=0}^{N} \lambda_n^{(j)}, \quad \overset{N}{u}_n = \sum_{j=0}^{N} u_n^{(j)} \tag{5.8}$$

є *наближеннями рангу* N до власних значень і власних векторів задачі (5.1) і разом з наведеними нижче формулами для $\lambda_n^{(j)}, u_n^{(j)}$ становлять алгоритм для їх обчислення.

5.2 Алгоритм FD-методу

Для того щоб знайти члени рядів (5.7), (5.8) підставимо (5.5) в (5.3) і прирівняємо коефіцієнти при однакових степенях t. Отримаємо наступну рекурентну послідовність рівнянь:

$$(A + \overline{B})u_n^{(j+1)} - \lambda_n^{(0)} u_n^{(j+1)} = F_n^{(j+1)}, \ j = -1, 0, 1, ... \tag{5.9}$$

з $F_n^{(0)} = 0$ та

$$\begin{aligned} F_n^{(j+1)} &= F_n^{(j+1)}(\lambda_n^{(0)}, ..., \lambda_n^{(j+1)}; u_n^{(0)}, ..., u_n^{(j)}) = \\ &= \lambda_n^{(j+1)} u_n^{(0)} - \varphi(B) u_n^{(j)} + \sum_{p=1}^{j} \lambda_n^{(j+1-p)} u_n^{(p)}, \quad \varphi(B) = B - \overline{B}. \end{aligned} \tag{5.10}$$

Початкові значення $\lambda_n^{(0)}$, $u_n^{(0)}$ для задач (5.9), (5.10) є розв'язками *базової задачі* :

$$(A + \overline{B})u_n^{(0)} - \lambda_n^{(0)} u_n^{(0)} = \theta, \tag{5.11}$$

яка є «простішою», ніж задача (5.1). Нехай базова задача має дійсні власні значення

$$0 \leq \lambda_1^{(0)} \leq \lambda_2^{(0)} \leq ... \leq \lambda_n^{(0)} \leq ... . \tag{5.12}$$

Будемо вважати, що в (5.12) кожне власне значення $\lambda_n^{(0)}$ входить k_n разів відповідно до його кратності k_n. Нехай $e_{n,p}$, $p = \overline{1, k_n}$, $n = 1, 2, ...$ утворюють базис в X, де $e_{n,p}$, $p = \overline{1, k_n}$ є власними векторами, які відповідають $\lambda_n^{(0)}$. Позначимо через $\vec{e}_n = (e_{n,1}, e_{n,2}, ..., e_{n,k_n})^T$ та 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 $(e_{m,i}, f_{n,j}) = \delta_{n,j}\delta_{m,i}$, $n, m = 1, 2, ...$, $i = 1, 2, ..., k_m$, $j = 1, 2, .., k_n$, яка утворює базис в X^*. Тут і надалі позначатимемо через $\delta_{n,j}$ символ Кронекера. Зауважимо, що у випадку гільбертового простору внаслідок теореми Ріса про зображення скалярний добуток можна розглядати як білінійне відношення. Рекурентні рівняння згідно з нашим методом мають вигляд:

$$\tilde{A}u - \lambda_n^{(0)} u = g, \tag{5.13}$$

де $\lambda_n^{(0)}$ є власним значенням оператора $\tilde{A} = A + \overline{B}$, тобто оператор $\tilde{A} + \lambda_n^{(0)} E$ з тотожним оператором E є сингулярним. Частинний розв'язок будемо шукати у такій формі:

$$\hat{u} = \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{k_p} c_{p,i} e_{p,i}. \tag{5.14}$$

Після підстановки (5.14) в рівняння (5.13) з використанням біортогональності систем $\{e_{p,i}\}$ та $\{f_{p,i}\}$ одержимо

$$c_{n,i} = 0, \quad c_{p,i} = \frac{(g, f_{p,i})}{\lambda_p^{(0)} - \lambda_n^{(0)}}, \tag{5.15}$$

тобто

$$\hat{u} = \Gamma_n^+ g = \sum_{p=1, p \neq n}^{\infty} \frac{1}{\lambda_p^{(0)} - \lambda_n^{(0)}} \sum_{i=1}^{k_p} (g, f_{p,i}) e_{p,i}, \tag{5.16}$$

де через Γ_n^+ позначено псевдообернений оператор Мура-Пенроуза до оператора $\tilde{A} + \lambda_n^{(0)} E$.

Загальний розв'язок рівняння (5.11) має вигляд

$$u_n^{(0)} = \sum_{p=1}^{k_n} C_{n,p}^{(0)} e_{n,p}, \tag{5.17}$$

де сталі $C_{n,p}^{(0)}$ $p = \overline{1, k_n}$ будуть визначені нижче.

Використовуючи умови розв'язності

$$(F_n^{(j+1)}, f_{n,p}) = 0, \;\; p = \overline{1, k_n}, \tag{5.18}$$

розв'язок (5.9) можна записати у вигляді

$$u_n^{(j+1)} = \sum_{p=1}^{k_n} C_{n,p}^{(j+1)} e_{n,p} + \hat{u}_n^{(j+1)}, \tag{5.19}$$

де перший доданок є загальним розв'язком однорідного рівняння і

$$\hat{u}_n^{(j+1)} = \Gamma_n^+ \left(\sum_{p=1}^{j} \lambda_n^{(j+1-p)} u_n^{(p)} - \varphi(B) u_n^{(j)} \right) \tag{5.20}$$

є частинним розв'язком неоднорідного рівняння. Причому, підсумовування за p в (5.20) здійснюється від 1, а не від 0, внаслідок властивості оператора Γ_n^+, яку сформульовано в лемі 5.1.

Лема 5.1. *Виконуються такі рівності:* $\Gamma_n^+ e_{n,p} = 0, \; p = \overline{1, k_n}$.

Доведення леми 5.1 слідує із зображення (5.16).

Умова (5.18) приводить до системи рівнянь

$$\begin{gathered} \sum_{s=1}^{k_n} C_s^{(j)} \Big((\varphi(B) - \lambda_n^{(1)} E) e_{n,s}, f_{n,m} \Big) = \\ = - \Big(\varphi(B) \hat{u}_n^{(j)}, f_{n,m} \Big) + \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_n^{(j+1-p)} C_m^{(p)} \,, \;\; m = \overline{1, k_n}. \end{gathered} \tag{5.21}$$

Тут через $\lambda_n^{(1)}$ позначено одне з власних значень $\lambda_n^{(1)} = \lambda_{n,i}^{(1)}$, $i = \overline{1, k_n}$ матриці $[(\varphi(B) e_{n,s}, f_{n,m})]_{s,m=\overline{1,k_n}}$, які відповідають впорядкуванню:

$$\lambda_{n,1}^{(1)} \le \lambda_{n,2}^{(1)} \le ... \le \lambda_{n,k_n}^{(1)}, \tag{5.22}$$

в яке кожне власне значення входить таку кількість разів, яка його кратність. Введемо вектор $\vec{C}^{(j)}$ із компонентами $C_s^{(j)}$, $s = 1, ..., k_n$ та матрицю

$$D^{[\nu]} = [d_{s,m}^{[\nu]}]_{s,m=\overline{1,k_n}} \,, \; d_{s,m}^{[\nu]} = \Big((\varphi(B) - \lambda_{n,\nu}^{(1)} E) e_{n,s}, f_{n,m} \Big) \,, \quad 1 \le \nu \le k_n \tag{5.23}$$

і перепишемо рівняння (5.21) у векторно-матричній формі

$$D^{[\nu]}\vec{C}^{(j)} = \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_n^{(j+1-p)} \vec{C}^{(p)} - \left\langle \varphi(B)\hat{u}^{(j)}, \vec{f} \right\rangle, \;\; j = 0, 1, ..., \tag{5.24}$$

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 (5.24) при $j = 0$, враховуючи умову $\hat{u}^{(0)} = 0$, отримуємо

$$D^{[\nu]}\vec{C}^{(0)} = \vec{0}. \tag{5.25}$$

Тут вектори

$$\vec{C}_i^{(0)}, \;\; i = \overline{1, \mu_\nu}, \;\; 1 \leq \mu_\nu < k_n, \;\; (\vec{C}_i^{(0)}, \vec{C}_t^{(0)})_R = \delta_{i,t}$$

є розв'язками системи (5.25), 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}.

Вимагатимемо, щоб коефіцієнти $C_{n,p}^{(j+1)}$, $p = \overline{1, k}$ задовольняли умову:

$$(u_n^{(j+1)}, f_n^{(0)}) = \left(u_n^{(j+1)}, \sum_{i=1}^{k_n} C_{n,i}^{(0)} f_{n,i} \right) = 0, \tag{5.26}$$

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

$$(\vec{C}_i^{(j+1)}, \vec{C}_i^{(0)})_R = \sum_{p=1}^{k_n} C_{n,p}^{(j+1)} C_{n,p}^{(0)} = 0, \; j = 0, 1, \ldots . \tag{5.27}$$

Помножимо (5.21) на $C_m^{(0)}$ та підсумуємо за m від 1 до k_n. Отримаємо наступне співвідношення:

$$\lambda_n^{(j+1)} = \left(\varphi(B)\hat{u}_n^{(j)}, f_n^{(0)} \right), \tag{5.28}$$

звідки отримаємо оцінку

$$\left| \lambda_n^{(j+1)} \right| \leq \left\| \varphi(B)\hat{u}_n^{(j)} \right\| \; \left\| f_n^{(0)} \right\|_*, \tag{5.29}$$

де $\|\cdot\|_*$ – норма в X^*.

Враховуючи (5.28), видно, що права частина (5.24) ортогональна до векторів $\vec{C}_i^{(0)}$, $i = \overline{1, \mu_\nu}$, тобто необхідні і достатні умови її розв'язності виконуються.

Розглянемо наступний розв'язок системи (5.24) (цей розв'язок є неоднозначним):

$$\vec{C}_i^{(j)} = (D^{[\nu]})^+ \left(\sum_{p=0}^{j-1} \lambda_i^{(j+1-p)} \vec{C}_i^{(p)} - \left\langle \varphi(B) \hat{u}_i^{(j)}, \vec{f} \right\rangle \right), \tag{5.30}$$

де $(D^{[\nu]})^+$ – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $D^{[\nu]}$. Зауважимо, що в даному розділі при детальному записі замість індексу i або n слід писати трійку n, ν, i. Використання у викладках одного із вказаних індексів здійснено з метою їх спрощення та у випадках, коли це не призводить до непорозумінь.

Легко показати, що

$$(D^{[\nu]})^+ \vec{C}_i^{(0)} = \vec{0}, \tag{5.31}$$

тобто для розв'язання системи (5.24) у формі (5.30) виконуються такі умови ортогональності:

$$(\vec{C}_i^{(j+1)}, \vec{C}_i^{(0)})_R = 0, \; j = 0, 1, \ldots .$$

5.3 Збіжність FD-методу

Перейдемо до відшукання оцінок похибок методу. Беручи до уваги (5.28), (5.31), із (5.30) отримаємо

$$\left\| \vec{C}_i^{(j)} \right\|_R \le w \cdot \sum_{p=0}^{j-1} \left\| \hat{u}_i^{(j-p)} \right\| \; \left\| \vec{C}_i^{(p)} \right\|_R, \tag{5.32}$$

де

$$w = \|\varphi(B)\| \left\| \left(D^{[\nu]} \right)^+ \right\|_R \left(\left\| f_n^{(0)} \right\|_* + \left| \left\langle \vec{f} \right\rangle \right| \right),$$

$$\left| \left\langle \vec{f} \right\rangle \right| = \left(\sum_{s=1}^{k_n} \|f_s\|_*^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \; \|\vec{a}\|_R = (\vec{a}, \vec{a})_R .$$

Із (5.19), (5.20) одержуємо оцінки

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{u}_n^{(j+1)} \right\| &\le M_n \left\{ \sum_{s=0}^{j} \left\| \tilde{u}_n^{(j-s)} \right\| \; \left\| \tilde{u}_n^{(s)} \right\| + \left\| \vec{C}_n^{(j)} \right\|_R \right\}, \\ \left\| \varphi(B) \tilde{u}_n^{(j+1)} \right\| &\le N_n \left\{ \sum_{s=0}^{j} \left\| \tilde{u}_n^{(j-s)} \right\| \; \left\| \tilde{u}_n^{(s)} \right\| + \left\| \vec{C}_n^{(j)} \right\|_R \right\}, \end{aligned} \tag{5.33}$$

де

$$
\begin{aligned}
&M_n = \max\left\{\|\varphi(B)\|\,\|\Gamma_n^+\|\,\left\|f_n^{(0)}\right\|_*,\,\|\Gamma_n^+\varphi(B)\|\,k_n\right\},\\
&N_n = \max\left\{\|\varphi(B)\|\,\|\varphi(B)\Gamma_n^+\|\,\left\|f_n^{(0)}\right\|_*,\,\|\varphi(B)\Gamma_n^+\varphi(B)\|\,k_n\right\},\\
&\tilde{u}_i^{(s)} = [1-\operatorname{sgn}(s)]u_i^{(0)} + \operatorname{sgn}(s)\hat{u}_i^{(s)} = \begin{cases}\hat{u}_i^{(s)},\ s\geq 1,\\ u_i^{(0)},\ s=0.\end{cases}
\end{aligned}
\tag{5.34}
$$

Тут використано оцінку $\left\|u_i^{(j+1)}\right\| \leq \left\|\hat{u}_i^{(j+1)}\right\| + \left\|\vec{C}_i^{(j+1)}\right\|_R$.

Ввівши позначення

$$
\begin{gathered}
u_{j+1} = \left\|\tilde{u}_n^{(j+1)}\right\|,\ v_{j+1} = \left\|\varphi(B)\tilde{u}_n^{(j+1)}\right\|,\ c_{j+1} = \left\|\vec{C}_n^{(j+1)}\right\|_R,\ j=0,1,...,\\
c_0 = 1,\ \ u_0 = \left\|u_n^{(0)}\right\|,
\end{gathered}
\tag{5.35}
$$

перепишемо рекурентну систему нерівностей (5.32), (5.33) у формі

$$
\begin{gathered}
c_{j+1} \leq w\sum_{p=0}^{j} u_{j-p}c_p,\\
u_{j+1} \leq M_n\left\{\sum_{s=0}^{j} u_{j-s}u_s + c_j\right\},\\
v_{j+1} \leq N_n\left\{\sum_{s=0}^{j} u_{j-s}u_s + c_j\right\},\\
j = 0,1,\ldots.
\end{gathered}
\tag{5.36}
$$

Далі замінимо знаки нерівностей на рівності і одержимо мажорантну для (5.36) систему рекурентних рівнянь

$$
\begin{gathered}
C_{j+1} = w\sum_{p=0}^{j} U_{j-p}C_p,\\
U_{j+1} = M_n\left\{\sum_{s=0}^{j} U_{j-s}U_s + C_j\right\},\\
V_{j+1} = N_n\left\{\sum_{s=0}^{j} U_{j-s}U_s + C_j\right\},\\
j = 0,1,\ldots.\\
C_0 = 1,\ U_0 = \left\|u_n^{(0)}\right\|,
\end{gathered}
$$

тобто $c_j \le C_j$, $u_j \le U_j$, $v_j \le V_j$, $j = 0, 1, \ldots$. Враховуючи співвідношення

$$N_n U_{j+1} = M_n V_{j+1}, \tag{5.37}$$

з першого та другого рівнянь отримуємо

$$C_{j+1} = w \sum_{p=0}^{j} U_{j-p} C_p, \quad U_{j+1} = M_n \left\{ \sum_{s=0}^{j} U_{j-s} U_s + C_j \right\}, \quad j = 0, 1, ...,$$
$$C_0 = 1, \quad U_0 = \left\| u_n^{(0)} \right\|.$$

Ввівши нові змінні та нові мажорантні змінні

$$M_n^{-j} U_j = \tilde{U}_j, \quad M_n^{-j} C_j = \tilde{C}_j, \tag{5.38}$$

перейдемо до нової мажорантної системи

$$\begin{gathered} \tilde{C}_{j+1} = w \sum_{p=0}^{j} \tilde{U}_{j-p} \tilde{C}_p, \quad \tilde{U}_{j+1} = \sum_{s=0}^{j} \tilde{U}_{j-s} \tilde{U}_s + \tilde{C}_j, \quad j = 0, 1, ..., \\ \tilde{C}_0 = 1, \quad \tilde{U}_0 = \left\| u_n^{(0)} \right\|. \end{gathered} \tag{5.39}$$

Для того щоб розв'язати (5.39) введемо такі твірні функції:

$$f(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \tilde{U}_j \ , \ \ g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \tilde{C}_j.$$

Виходячи з (5.39), отримаємо систему рівнянь

$$f(z) - U_0 = z \left[f^2(z) + g(z) \right], \ \ g(z) - 1 = w \left[f(z) - U_0 \right] g(z). \tag{5.40}$$

Виразивши з другого рівняння $g(z) = 1/\left\{1 - w\left[f(z) - U_0\right]\right\}$ та підставивши цей вираз в перше, отримаємо

$$-zwf^3(z) + (w + z + zwU_0) f^2(z) - (zwU_0 + 1) f(z) + (wU_0^2 + U_0 + z) = 0. \tag{5.41}$$

Поміняємо у рівнянні (5.41) місцями залежну і незалежну змінні, тобто будемо розглядати z як функцію від f:

$$z(f) = \frac{w(f - U_0)\left(f - \frac{wU_0+1}{w}\right)}{w\, f^2\left(f - \frac{wU_0+1}{w}\right) - 1}. \tag{5.42}$$

Аналіз функції (5.42) показує, що

$$z(U_0) = z\left(\frac{wU_0+1}{w}\right) = 0; \qquad z(f) > 0 \ \ \forall f \in \left(U_0, \frac{wU_0+1}{w}\right);$$

$$z'(U_0) = \frac{1}{U_0^2+1} > 0, \quad z'\left(\frac{w\,U_0+1}{w}\right) = -1 < 0.$$

Звідси робимо висновок про те, що існує таке $z_{\max} = z(f_{\max})$, $f_{\max} \in \left(U_0, \frac{wU_0+1}{w}\right)$, яке є радіусом збіжності ряду $f(z)$, а отже, існують такі додатні сталі L, ε, які не залежать від j, n, що виконується наступне:

$$(z_{\max})^j\, \tilde{U}_j \le \frac{L}{j^{1+\varepsilon}}, \ j = 1, 2, \ldots . \tag{5.43}$$

Враховуючи (5.43), для $z \ge 0$ отримуємо

$$\sum_{j=0}^{\infty} z^j \left\|\tilde{u}_i^{(j)}\right\| \le \sum_{j=0}^{\infty}\left(\frac{z}{z_{\max}}M_n\right)^j \tilde{U}_j\,(z_{\max})^j \le 1 + \sum_{j=1}^{\infty}\left(\frac{z}{z_{\max}}M_n\right)^j \frac{L}{j^{1+\varepsilon}}.$$

Нехай виконується умова

$$q_n = \frac{M_n}{z_{\max}} < 1, \tag{5.44}$$

тоді остання нерівність буде вірною $\forall z \in [0, 1]$, а отже, буде вірною нерівність

$$\left\|\tilde{u}_i^{(j)}\right\| \le \frac{L\,[q_n]^j}{j^{1+\varepsilon}}, \ j = 1, 2, \ldots . \tag{5.45}$$

Із (5.32) та (5.45) отримуємо наступну рекурентну систему нерівностей:

$$\left\|\vec{C}_n^{(j)}\right\|_R \le wL\sum_{p=0}^{j-1}[q_n]^{j-p}\left\|\vec{C}_n^{(p)}\right\|_R, \ j = 1, 2, ...,$$

розв'язок якої мажорується розв'язком такої системи рівнянь:

$$C_j = wL\sum_{p=0}^{j-1}[q_n]^{j-p}\,C_p\,, \ j = 1, 2, ..., \ C_0 = 1, \qquad \left\|\vec{C}_n^{(j)}\right\|_R \le C_j.$$

Використовуючи метод твірних функцій, отримуємо

$$g(z) = \frac{1}{1 - 2wL(\tilde{f}(z) - 1)}, \quad \tilde{f}(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j\,[q_n]^j\,.$$

Із розкладу функції $g(z)$ в ряд Тейлора $\tilde{g}(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \tilde{C}_j$, $C_j \le \tilde{C}_j$ випливає $\tilde{C}_j = \frac{wL}{1+wL}\,[q_n(1+wL)]^j$. Цей ряд збігається $\forall z \in [0, 1]$ за умови, що

$$q_n(1 + wL) < 1. \tag{5.46}$$

Теорема 5.1. *Нехай виконуються умови* (5.44), (5.46). *Тоді FD-метод для задачі* (5.1) *є експоненціально збіжним для власних елементів та суперекспоненціально збіжним для власних значень з оцінками його точності:*

$$\left\| u_{n,i} - \overset{m}{u}_{n,i} \right\| \leq L\ [wk_n + 1]\, \frac{[q_n(1+wL)]^{m+1}}{1 - q_n(1+wL)}, \tag{5.47}$$

$$\left| \lambda_{n,i} - \overset{m}{\lambda}_{n,i} \right| \leq L \left\| \varphi(B) \right\| \left\| f_n^{(0)} \right\|_* \frac{[q_n]^m}{(m+1)^{1+\varepsilon}(1-q_n)}. \tag{5.48}$$

Тут $i = \overline{1, k_n}$.

Зауваження 5.1. *Оцінка* (5.47) *може бути покращена. З цією метою записуємо подібно до* (5.41) *рівняння для твірної функції* $g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \tilde{C}_j$

$$g(z) = \left\{ 1 - wz \left((g(z)\,(U_0\, w + 1) - 1)^2 / [w^2 g^2(z)] + g(z) \right) \right\}^{-1},$$

і розв'язуємо відносно z*, тобто запишемо* z *як функцію від* g

$$z(g) = (wg\,(g-1))/(g^3 w^2 + (g\,(U_0\, w + 1) - 1)^2). \tag{5.49}$$

Для дослідження функції $z(g)$ *знаходимо*

$$z'(g) = -\frac{w(w^2 g^2((g-1)^2 - 1 - (U_0)^2) + (g-1)^2)}{[g^3 w^2 + (g(U_0\, w + 1) - 1)^2]^2}.$$

З аналізу $z(g)$ *та* $z'(g)$ *робимо висновок, що*

$$z(g) > 0\ \forall\, g \in (1, \infty); \;\; z(1) = 0, \;\; z(\infty) = 0; \;\; z'(1) = \frac{1}{w((U_0)^2 + 1)} > 0,$$

$$z'\left(1 + \sqrt{(U_0)^2 + 1}\right) =$$
$$= -\frac{w((U_0)^2 + 1)}{\left[\left(1 + \sqrt{(U_0)^2+1}\right)^3 w^2 + \left((1 + \sqrt{(U_0)^2+1})(U_0 w + 1) - 1 \right)^2 \right]^2} < 0,$$

і, отже, існує таке $g_{\max} \in \left(1, 1 + \sqrt{(U_0)^2 + 1}\right)$*, при якому функція* $z(g)$ *досягає свого максимума* $z_{1,\max} = \max\limits_{g \in \left[1, 1+\sqrt{(U_0)^2+1}\right]} z(g) = z(g_{\max})$*, який є радіусом збіжності ряду* $g(z)$*, причому* $z_{1,\max} = z_{\max}$*. Тоді при виконанні умови*

(5.44) *існують такі додатні сталі* L_1, ε_1, *які не залежать від* j, n, *що виконується нерівність*

$$(z_{\max})^j \tilde{C}_j \leq \frac{L_1}{j^{1+\varepsilon_1}}, \, j = 1, 2, ... \tag{5.50}$$

З (5.50), *враховуючи введені вище позначення та заміни* (5.35), (5.38), *для* $z \geq 0$ *отримуємо*

$$\sum_{j=0}^{\infty} z^j \|\vec{C}_n^{(j)}\|_R \leq \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{z}{z_{\max}} M_n\right)^j \tilde{C}_j (z_{\max})^j \leq 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{z}{z_{\max}} M_n\right)^j \frac{L_1}{j^{1+\varepsilon_1}},$$

яка буде вірною $\forall z \in [0, 1]$ *при виконанні умови* (5.44), *а отже, виконується*

$$\|\vec{C}_n^{(j)}\|_R \leq \frac{L_1 \, [q_n]^j}{j^{1+\varepsilon_1}}, \, j = 1, 2, ... \tag{5.51}$$

З (5.51), (5.45) *та оцінки* $\|u_i^{(j+1)}\| \leq \|\hat{u}_i^{(j+1)}\| + \|\vec{C}_i^{(j+1)}\|_R$ *випливає*

$$||u_{n,i}^{(j)}|| \leq \frac{2\bar{L}[q_n]^j}{j^{1+\bar{\varepsilon}}}, \; j = 1, 2, ..., \quad \bar{L} = \max(L, L_1), \quad \bar{\varepsilon} = \min(\varepsilon, \varepsilon_1).$$

Таким чином, посилено оцінку (5.47) *такою:*

$$\|u_{n,i} - \overset{N}{u}_{n,i}\| \leq 2\bar{L} \frac{[q_n]^{N+1}}{(N+1)^{1+\bar{\varepsilon}}(1-q_n)}, \tag{5.52}$$

де $\bar{\varepsilon} = \min(\varepsilon, \varepsilon_1)$, $\bar{L} = \max(L, L_1)$. *Тобто при виконанні умови* (5.44) *FD-метод для задачі* (5.1) *є суперекспоненціально збіжним як для власних значень, так і для власних векторів.*

Зауваження 5.2. *Контроль за умовою збіжності* (5.44) *за допомогою* n *та* $\overline{B}$ *відбувається таким чином, щоб*

$$M_n = \max\left\{\|\varphi(B)\| \, \left\|\Gamma_n^+\right\| \, \left\|f_n^{(0)}\right\|_* , \, \left\|\Gamma_n^+ \varphi(B)\right\| k_n\right\}$$

було достатньо малим. Із (5.16) *маємо*

$$\left\|\Gamma_n^+\right\| \leq \max\left\{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)})^{-1}, \, (\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)})^{-1}\right\}. \tag{5.53}$$

Нехай оператор $\varphi(B) = B - \overline{B}$ *підпорядковується оператору* $(A+B)^\alpha$, $\alpha > 0$, *тобто*

$$\left\|(A+\bar{B})^{-\alpha}\varphi(B)v\right\| \leq c\,\|v\|$$

з деякою додатною сталою c. З іншого боку, у випадку гільбертового простору, простих власних значень і самоспряженого оператора $A + \bar{B}$ для довільного v маємо

$$\Gamma_n^+\varphi(B)v = -\sum_{p=1,p\neq n}^{\infty} \frac{((A+\bar{B})^{-\alpha}\varphi(B)v, (A+\bar{B})^{\alpha}u_p^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_p^{(0)}} u_p^{(0)} = $$
$$= -\sum_{p=1,p\neq n}^{\infty} \frac{[\lambda_p^{(0)}]^{\alpha}((A+\bar{B})^{-\alpha}\varphi(B)v, u_p^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_p^{(0)}} u_p^{(0)},$$

звідки одержуємо наступну оцінку:

$$\|\Gamma_n^+\varphi(B)v\|^2 = \sum_{p=1,p\neq n}^{\infty} \frac{[\lambda_p^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_p^{(0)})^2}((A+\bar{B})^{-\alpha}\varphi(B)v, u_p^{(0)})^2 \leq$$
$$\leq \max\left\{\frac{[\lambda_{n+1}^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)})^2}, \frac{[\lambda_n^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)})^2}\right\} \|(A+\bar{B})^{-\alpha}\varphi(B)v\|^2 \leq$$
$$\leq c^2 \max\left\{\frac{[\lambda_{n+1}^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)})^2}, \frac{[\lambda_n^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)})^2}\right\} \|v\|^2.$$

Легко бачити, що $\|\Gamma_n^+\varphi(B)\| \to 0$ при $n \to \infty$ за умови, що дроби у фігурних дужках прямують до нуля при $n \to \infty$. Поведінка цієї норми як функції від n залежить від асимптотики власних значень. Наприклад, оператори звичайних диференціальних рівнянь порядку m з регулярними крайовими умовами володіють такою асимптотикою $\lambda_n^{(0)} = \mathcal{O}(n^m)$ (див., напр., [30]), що обидва значення $\frac{[\lambda_{n+1}^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)})^2}$ та $\frac{[\lambda_n^{(0)}]^{2\alpha}}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)})^2}$ мають порядок $\mathcal{O}(n^{2(\alpha-1)m+2})$. Це означає, що $\|\Gamma_n^+\|$, $\|\Gamma_n^+\varphi(B)\| \to 0$ при $n \to \infty$ та при умові

$$0 < \alpha < 1 - \frac{1}{m}.$$

Якщо n фіксоване і не виконується умова збіжності (5.46)*, то її виконання можна досягти за рахунок кращого наближення оператора B, тобто зменшення $\|\Gamma_n^+\varphi(B)\|$.*

Випадок банахового простору та довільної (скінченної) кратності власних значень можна розглядати аналогічно до вище викладеного.

Приклад 6. *Подальші обчислення, які здійснено за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17, демонструють різницю між поведінкою* *поправок до власних значень згідно з FD-методом для диференціального рівняння другого порядку в залежності від наявності або відсутності в диференціальному рівнянні першої похідної від власного вектора.*

Розглянемо задачу на власні значення

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}+r(x)\,\frac{du(x)}{dx}+(\lambda-x)u(x)=0,\;\; x\in(0,1),\;\; u(0)=0,\;\; u(1)=0, \quad (5.54)$$

в якій оператори A, B *визначено наступним чином:* $Au = \frac{d^2u}{dx^2}$*,* $Bu = r(x)\frac{du(x)}{dx} - xu(x)\ \forall u \in \overset{\circ}{H}{}^1(0,1)\cap H^2$ *з вибором апроксимуючого оператора* $\overline{B}=0$*. Тут* $\overset{\circ}{H}{}^1(0,1)$ *– замикання простору* $C_0^1[0,1]$ *функцій з компактним носієм на* $(0,1)$ *(використано позначення згідно з [2, §2, гл.2]).*

У випадку $r(x)\equiv 0$ *згідно з нашим алгоритмом отримано поправки до власних значень*

$$\begin{aligned}&\lambda_n^{(0)}=(n\pi)^2,\ \lambda_n^{(1)}=\frac{1}{2},\ \lambda_n^{(2)}=\frac{1}{48n^2\pi^2}-\frac{15}{48n^4\pi^4},\ \lambda_n^{(3)}=0,\\&\lambda_n^{(4)}=\frac{1}{2304\pi^6n^6}-\frac{35}{384\pi^8n^8}+\frac{55}{64\pi^{10}n^{10}},\end{aligned}$$

тобто $\lim\limits_{n\to\infty}\lambda_n^{(j)}=0$.

У випадку

$$r(x)=\mathrm{H}(x)=0.5(\mathrm{sgn}(x)+1)=\begin{cases}0, & x<0,\\ 0.5, x=0.5, & \\ 1, & x>0,\end{cases}$$

де $\mathrm{H}(x)$ *– функція Хевісайда, маємо*

$$\begin{aligned}&\lambda_n^{(0)}=(n\pi)^2,\;\; \lambda_n^{(1)}=\frac{1}{2}(2-\cos(n\pi)),\\&\lambda_n^{(2)}=\frac{1}{48}\left(1-\frac{5}{(n\pi)^2}-\frac{15}{(n\pi)^4}\right),\ \lambda_n^{(3)}=\frac{1}{1536}\left(1+\frac{7}{(n\pi)^2}-\frac{78}{(n\pi)^4}\right),\\&\lambda_n^{(4)}=\frac{-1}{2580480}\left(49-\frac{7081}{(n\pi)^2}+\frac{5027}{(n\pi)^4}-\frac{26320}{(n\pi)^6}-\frac{195720}{(n\pi)^8}-\frac{2217600}{(n\pi)^{10}}\right).\end{aligned}$$

Принциповою різницею між наведеними випадками є те, що в останньому прикладі $\lim\limits_{n\to\infty}\lambda_n^{(j)}=const\neq 0.$

Ці результати узгоджуються з нашою теорією. Для норми оператора $\Gamma_n^+ : L_2(0,1) \to L_2(0,1)$ *виконується оцінка:*

$$\left\|\Gamma_n^+\right\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} = \sup_{v\in L_2(0,1)} \|v\|^{-1} \left\{ \int\limits_0^1 \left[\sum_{\substack{p=1,\\ p\neq n}}^{\infty} \frac{2v_n \sin(p\pi x)}{\pi^2(n^2-p^2)} \right]^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \leq \frac{1}{\pi^2(2n-1)},$$

де $v_n = \int_0^1 v(\xi)\sin(p\pi\xi)d\xi$ *– коефіцієнти Фур'є для* v. *Слід звернути увагу на те, що загальна оцінка* (5.53) *має той же порядок відносно параметра* n. *Насправді, оскільки* $\lambda_n^{(0)} = n^2\pi^2$, *тоді маємо* $\lambda_{n+1}^{(0)} - \lambda_n^{(0)} = \mathcal{O}(n)$, $\lambda_n^{(0)} - \lambda_{n-1}^{(0)} = \mathcal{O}(n)$, *тобто* $\|\Gamma_n^+\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} = \mathcal{O}(n^{-1})$.

Для того щоб отримати оцінку для $\varphi(B)\Gamma_n^+$ *оцінимо кожний доданок окремо. Для* $k(x)\frac{d}{dx}\Gamma_n^+$ *отримуємо*

$$\left\|k(\cdot)\frac{d}{dx}\Gamma_n^+\right\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} \leq$$

$$\leq \frac{\|k\|_\infty}{\pi^2} \sup_{v\in L_2(0,1)} \|v\|^{-1} \left\{ \int\limits_0^1 \left[\sum_{\substack{p=1,\\ p\neq n}}^{\infty} \frac{2p^2\pi^2 v_n \sin(p\pi x)}{(n^2-p^2)^2} \right]^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \leq$$

$$\leq \frac{\|k\|_\infty}{\pi} \frac{n+1}{(n+1)^2-n^2} \leq \frac{2\,\|k\|_\infty}{3\pi}$$

і далі

$$\left\|\varphi(B)\Gamma_n^+\right\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} \leq \left\|k(x)\frac{d}{dx}\Gamma_n^+\right\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} + \left\|x\Gamma_n^+\right\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} \leq$$

$$\leq \frac{2\,\|k\|_\infty}{3\pi} + \frac{1}{\pi^2(2n-1)} \leq \frac{2\,\|k\|_\infty}{3\pi} + \frac{1}{\pi^2}.$$

Після інтегрування частинами маємо

$$\Gamma_n^+\left(k(\xi)\frac{dv}{d\xi}\right) = \sum_{p=1,p\neq n}^{\infty} \frac{-p\pi\int_0^1 k(\xi)v(\xi)\sqrt{2}\cos(p\pi\xi)d\xi}{\pi^2(n^2-p^2)}\sqrt{2}\sin(p\pi x) -$$

$$- \sum_{p=1,p\neq n}^{\infty} \frac{\int_0^1 [k'(\xi)+\xi]v(\xi)\sqrt{2}\sin(p\pi\xi)d\xi}{\pi^2(n^2-p^2)}\sqrt{2}\sin(p\pi x)$$

та аналогічно вище викладеному отримуємо оцінку

$$\left\|\Gamma_n^+\varphi(B)\right\|_{L_2(0,1)\to L_2(0,1)} \leq c\cdot\max\{\|k\|_\infty, \|k'+\xi\|_\infty\}$$

з деякою сталою c.

Зауваження 5.3. *Отримані оцінки в прикладі 6 ілюструють той факт, що у випадку ненульового коефіцієнта, який стоїть перед першою похідною власного вектора у диференціальному рівнянні* (5.54), M_n *залишається обмеженим, а в іншому випадку* $M_n = \mathcal{O}(n^{-1}) \to 0$ *при* $n \to \infty$.

5.4 Застосування FD-методу до диференціальних операторів четвертого порядку

У даному підрозділі застосуємо вище наведений експоненціально збіжний алгоритм FD-методу до чисельного розв'язання наступного класу задач на власні значення (див. також [102]):

$$\begin{aligned} & y^{(4)}(\xi)+g_3(\xi)y^{(3)}(\xi)+g_2(\xi)y''(\xi)+g_1(\xi)y'(\xi)+g_0(\xi)y(\xi)-g(\xi)\lambda y(\xi)=0, \\ & y^{(p)}(0) = y^{(q)}(0) = y^{(r)}(1) = y^{(s)}(1) = 0, \\ & 0 \le p < q \le 3, \qquad 0 \le r < s \le 3, \end{aligned} \tag{5.55}$$

які відіграють особливу роль в застосуваннях.

Тип крайових умов визначається чотирма натуральними числами $(p, q; r, s)$, $\quad p, q, r, s \in \{0, 1, 2, 3\}$. Всі ці крайові умови регулярні і, зокрема, впливають на таку важливу властивість, як кратність власних значень.

Одне з найстаріших і, ймовірно, основне з відомих застосувань цієї математичної моделі – це опис вільних і вимушених коливань балки Бернуллі-Ейлера (цю теорію називають також теорією балки Да Вінчі-Ейлера-Бернуллі) (див., напр., [114]). Теорія балки Бернуллі-Ейлера виникла в середині XVIII-го століття як спрощення від лінійної ізотропної теорії пружності. Завдяки своїй простоті і в той же час з достатньою точністю теорія балки стала важливим інструментом у науках, особливо в конструюванні та машинобудуванні. Це успішно продемонстровано за допомогою багатьох практичних застосувань, зокрема в процесі побудови Ейфелевої вежі та колеса огляду в кінці XIX-го століття. За допомогою таких крайових задач (5.55), зокрема, моделюють задачі поздовжньої вібрації пружнього стержня, а саме: балок перекриттів будинків, колон, елементів наземних трубопроводів, лопастей в турбіні тощо.

Рівняння четвертого порядку (5.55) в самоспряженій формі

$$\frac{d^2}{d\xi^2}(a(\xi)\frac{d^2}{d\xi^2}y(\xi)) - \frac{d}{d\xi}(b(\xi)\frac{d}{d\xi}y(\xi)) + (c(\xi) - \lambda d(\xi))y(\xi) = 0 \tag{5.56}$$

може бути зведено до форми

$$u^{(4)}(x) + k_2(x)u''(x) + k_1(x)u'(x) + k_0(x)u(x) - \lambda u(x) = 0, \tag{5.57}$$

тобто ми можемо зробити коефіцієнт, що стоїть біля третьої похідної, рівним нулю, а коефіцієнт, що стоїть біля $\lambda u(x)$ рівним одиниці. Зауважимо, що у випадку звичайного диференціального рівняння n-го порядку

$$u^{(n)}(x) + k_{n-1}(x)u^{(n-1)}(x) + \cdots + k_1(x)u'(x) + \rho^n \cdot 1 \cdot u(x) = 0 \tag{5.58}$$

із коефіцієнтом, що стоїть біля λ, рівним 1 можна звести до рівняння із коефіцієнтом при $(n-1)$-ій похідній рівним нулю за допомогою такого перетворення змінних [30]:

$$u = e^{-\frac{1}{n}\int k_{n-1}(x)dx}\tilde{u}. \tag{5.59}$$

Звести рівняння (5.55) до форми (5.57) можна також аналогічно до перетворення Ліувілля [30] для рівняння другого порядку через перетворення змінних $\xi = \varphi(x)$, $y(\xi) = v(x)u(x)$, матимемо дві вільні функції. Це перетворення зводить (5.55) до (5.57) із

$$\varphi'(x) = g^{-\frac{1}{4}}(\xi), \quad v(x) = [\varphi']^{\frac{3}{2}}(x)e^{-\frac{1}{4}\int\limits_{\xi_0}^{\xi} g_3(\varphi)d\varphi}, \quad x = \int\limits_{\xi_0}^{\xi} g^{\frac{1}{4}}(\varphi)d\varphi,$$

$$k_2(x) = \left[\frac{45}{32}g^{-\frac{5}{2}}(\xi)\left[g'\right]^2(\xi) - \frac{5}{4}g^{-\frac{3}{2}}(\xi)g''(\xi) - \frac{3}{8}(\xi)g^{-\frac{1}{2}}(\xi)g_3^2(\xi) - \right.$$
$$\left. -\frac{3}{2}g^{-\frac{1}{2}}(\xi)g_3'(\xi) + g^{-\frac{1}{2}}(\xi)g_2(\xi)\right]_{\xi=\varphi(x)},$$

$$k_1(x) = \left[-\frac{225}{64}g^{-\frac{15}{4}}(\xi)\left[g'\right]^3(\xi) + \frac{75}{16}g^{-\frac{11}{4}}(\xi)g'(\xi)g''(\xi) - \frac{5}{4}g^{-\frac{7}{4}}(\xi)g'''(\xi) + \right.$$

$$+\frac{3}{16}g^{-\frac{7}{4}}(\xi)g'(\xi)g_3^2(\xi)+\frac{3}{4}g^{-\frac{7}{4}}(\xi)g'(\xi)g_3'(\xi)+\frac{1}{8}g^{-\frac{3}{4}}(\xi)g_3^3(\xi)-$$
$$-g^{-\frac{3}{4}}(\xi)g_3''(\xi)-\frac{1}{2}g^{-\frac{7}{4}}(\xi)g'(\xi)g_2(\xi)-\frac{1}{2}g^{-\frac{3}{4}}(\xi)g_3(\xi)g_2(\xi)+$$
$$\left.+g^{-\frac{3}{4}}(\xi)g_1(\xi)\right]_{\xi=\varphi(x)},$$

$$k_0(x)=\left[\frac{16929}{4096}g^{-5}(\xi)\left[g'\right]^4(\xi)-\frac{1881}{256}g^{-4}(\xi)\left[g'\right]^2(\xi)g''(\xi)+\frac{33}{16}g^{-3}(\xi)g'(\xi)g'''(\xi)+\right.$$
$$+\frac{99}{64}g^{-3}(\xi)\left[g''\right]^2(\xi)-\frac{3}{8}g^{-2}(\xi)g^{(4)}(\xi)-\frac{99}{512}g^{-3}(\xi)\left[g'\right]^2(\xi)g_3^2(\xi)-$$
$$-\frac{99}{128}g^{-3}(\xi)\left[g'\right]^2(\xi)g_3'(\xi)-\frac{3}{64}g^{-2}(\xi)g'(\xi)\left[g_3\right]^3(\xi)+\frac{3}{8}g^{-2}(\xi)g'(\xi)g''{}_3(\xi)+$$
$$+\frac{9}{64}g^{-2}(\xi)g''(\xi)g_3^2(\xi)+\frac{9}{16}g^{-2}(\xi)g''(\xi)g'{}_3(\xi)-\frac{3}{256}g^{-1}(\xi)g_3^4(\xi)+$$
$$+\frac{3}{32}g^{-1}(\xi)g_3^2(\xi)g'{}_3(\xi)+\frac{3}{16}g^{-1}(\xi)\left[g_3'\right]^2(\xi)-\frac{1}{4}g^{-1}(\xi)g'''{}_3(\xi)+$$
$$+\frac{33}{64}g^{-3}(\xi)\left[g'\right]^2(\xi)g_2(\xi)-\frac{3}{8}g^{-2}(\xi)g''(\xi)g_2(\xi)+\frac{3}{16}g^{-2}(\xi)g'(\xi)g_3(\xi)g_2(\xi)+$$
$$+\frac{1}{16}g^{-1}(\xi)g_3^2(\xi)g_2(\xi)-\frac{1}{4}g^{-1}(\xi)g_3'(\xi)g_2(\xi)-\frac{3}{8}g^{-2}(\xi)g'(\xi)g_1(\xi)-$$
$$\left.-\frac{1}{4}g^{-1}(\xi)g_3(\xi)g_1(\xi)+g^{-1}(\xi)g_0(\xi)\right]_{\xi=\varphi(x)}.$$

В механіці часто використовують наближення $A+\overline{B}$ до диференціального оператора $A+B$, де $A=\frac{d^2}{d\xi^2}(a(\xi)\frac{d^2}{d\xi^2}y(\xi))$ або $A=\frac{d^4}{d\xi^4}$ виду (5.55), (5.56) з відповідними крайовими умовами: інтервал $(0,1)$ покривається сіткою $\omega=\{t_i : i=1,...,N-1,\ 0=t_0<t_1<...<t_{N-1}<t_N=1\}$ з максимальним кроком розбиття $h=\max\limits_{i=1,...,N}(t_i-t_{i-1})$, змінні коефіцієнти на кожному відрізку замінюють сталими (наприклад, деякі фіксовані значення відповідних змінних коефіцієнтів) і розв'язок такої задачі приймається за наближений розв'язок (5.55) або (5.56). Отже, основна ідея полягає в наближенні диференціального рівняння (тобто його коефіцієнтів). Дані методи, які вже було згадано в підрозділі 1.2, для задачі Штурма-Ліувілля другого порядку названо методами Прюса («Pruess methods») [162,163], оскільки у 1973 році Pruess S. обгрунтував строгу збіжність та здійснив аналіз похибок методу. Водночас для випадку кусково-сталого наближення коефіцієнтів лінійних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку метод був відомий набагато раніше під назвою «metodo dei tronconi» [11, 75].

Оцінимо точність методу «tronconi» для тестової задачі на власні значення:

$$\begin{aligned}&\frac{d^2}{dt^2}(a(t)\frac{d^2}{dt^2}v(t)) - \lambda v(t) = 0,\\&v(0) = v(1) = \frac{d^2}{dt^2}v(0) = \frac{d^2}{dt^2}v(1) = 0\end{aligned} \tag{5.60}$$

з $0 < \kappa \leq a(t) \leq K < \infty$. Згідно з описаним методом розглянемо замість (5.60) задачу

$$\begin{aligned}&\frac{d^2}{dt^2}(\overline{a}(t)\frac{d^2}{dt^2}v^{(0)}(t)) - \lambda^{(0)}v^{(0)}(t) = 0,\\&v^{(0)}(0) = v^{(0)}(1) = \frac{d^2}{dt^2}v^{(0)}(0) = \frac{d^2}{dt^2}v^{(0)}(1) = 0\end{aligned} \tag{5.61}$$

із $\bar{a}(t) = \min\limits_{t\in[t_{i-1},t_i]} a(t)$, $t \in [t_{i-1}, t_i]$, $i = 1, ..., N$. У точках розриву коефіцієнта $\overline{a}(t)$ вимагаємо, щоб виконувались наступні умови узгодження:

$$[v(t)]_{t=t_i} = \left[\frac{d}{dt}v(t)\right]_{t=t_i} = \left[\bar{a}(t)\frac{d^2}{dt^2}v(t)\right]_{t=t_i} = \left[\frac{d}{dt}\left(\bar{a}(t)\frac{d^2}{dt^2}v(t)\right)\right]_{t=t_i} = 0, \tag{5.62}$$

де $[w(t)]_{t=t_i} = w(t_i+0) - w(t_i-0)$ є стрибком функції $w(t)$ в точці $t = t_i$. Легко показати (див., напр., [30]), що спектри обох задач (5.60), (5.61) є дискретними і власні значення можуть бути впорядковані в неспадному порядку, тобто

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n \leq ..., \;\; \lambda_1^{(0)} \leq \lambda_2^{(0)} \leq ... \leq \lambda_n^{(0)} \leq ..., \tag{5.63}$$

Знайдемо похибку після заміни (5.60) на (5.61). З цією метою розглянемо допоміжне диференціальне рівняння з параметром $s \in [0, 1]$:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\bar{a}(t,s)\frac{\partial^2}{\partial t^2}v(t,s)\right) - \lambda(s)v(t,s) = 0,\\&v(0,s) = v(1,s) = \frac{\partial^2}{\partial t^2}v(0,s) = \frac{\partial^2}{\partial t^2}v(1,s) = 0, \quad s \in [0,1],\end{aligned} \tag{5.64}$$

де $\bar{a}(t,s) = \bar{a}(t) + s(a(t) - \bar{a}(t))$. Очевидно, маємо

$$v(t,1) = v(t), \;\; \lambda(1) = \lambda, \;\; v(t,0) = v^{(0)}(t), \;\; \lambda(0) = \lambda^{(0)}. \tag{5.65}$$

При цьому для розв'язку виконується нормалізуюча умова

$$\int\limits_0^1 v^2(t,s)dt = 1 \quad \forall s \in [0,1]. \tag{5.66}$$

Оскільки параметр s входить у (5.64) аналітично, дане рівняння можна диференціювати по s. Так, одержуємо

$$\begin{gathered}
\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\bar{a}(t,s)\frac{\partial^2}{\partial t^2}\frac{\partial}{\partial s}v(t,s)\right) - \lambda(s)\frac{\partial}{\partial s}v(t,s) = \\
= -\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left((a(t)-\bar{a}(t))\frac{\partial^2}{\partial t^2}v(t,s)\right) + v(t,s)\frac{d}{ds}\lambda(s), \\
\frac{\partial}{\partial s}v(0,s) = \frac{\partial}{\partial s}v(1,s) = \frac{\partial^2}{\partial t^2}\frac{\partial}{\partial s}v(0,s) = \frac{\partial^2}{\partial t^2}\frac{\partial}{\partial s}v(1,s) = 0,\ s\in[0,1].
\end{gathered} \tag{5.67}$$

Умова розв'язності разом із нормалізуючою умовою та інтегрування частинами приводять до формули

$$\frac{d\lambda(s)}{ds} = \int\limits_0^1 (a(t)-\bar{a}(t))\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}v(t,s)\right)^2 dt. \tag{5.68}$$

З іншого боку, з рівності (5.64) випливає

$$\lambda(s) = \int\limits_0^1 a(t,s)\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}v(t,s)\right)^2 ds. \tag{5.69}$$

Із цих двох співвідношень одержуємо

$$0 < \frac{d\lambda(s)}{ds} \le \max_{t\in[0,1]}|a(t)-\bar{a}(t)| \int\limits_0^1 \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}v(t,s)\right)^2 dt \le \max_{t\in[0,1]}|a(t)-\bar{a}(t)|\frac{\lambda(s)}{\kappa}, \tag{5.70}$$

яке разом із

$$\lambda(s) = \lambda^{(0)} + \int\limits_0^s \frac{d}{d\eta}\lambda(\eta)d\eta \tag{5.71}$$

веде до оцінки:

$$0 \le \lambda_n - \lambda_n^{(0)} \le \max_{t\in[0,1]}(a(t)-\bar{a}(t))\frac{\lambda_n}{\kappa}. \tag{5.72}$$

Припустивши, що $a(t)\in C^{(2)}[0,1]$ з асимптотикою $\lambda_n = \mathcal{O}(n^4)$, із (5.72) отримуємо

$$0 \le \lambda_n - \lambda_n^{(0)} = \mathcal{O}(h\,n^4), \qquad h = \max_{i=\overline{1,N}}(t_i - t_{i-1}). \tag{5.73}$$

Отже, порівнюючи (5.73) з оцінкою $|\lambda_n - \lambda_n^{(0)}| \leq C \max\{1, n^2\}h$ для задач Штурма-Ліувілля другого порядку [163, с. 119], бачимо, що розглянутий метод «tronconi» доцільно застосовувати при не дуже великих n, а саме, тільки для деяких найменших власних значень.

5.4.1 Збіжність FD-методу у випадку кратних власних значень базової задачі

Приклад 7. *Розглянемо задачу на власні значення*

$$(A + B)u - \lambda u = 0, \tag{5.74}$$

в якій оператори A, B визначені наступним чином:

$$\begin{aligned}
&D(A) = \{v \in C^4(0,1) : v^{(p)}(0) = v^{(p)}(1), p = 0,1,2,3\}, \quad D(A) \subseteq D(B),\\
&Au = u^{(4)}(x) \quad \forall\, u \in D(A), \quad B = B_1 + B_2 + B_3 + B_0,\\
&B_j u = k_{4-j}(x)u^{(j)}(x) \quad \forall\, u \in D(A),\ j = 0,1,2,3.
\end{aligned} \tag{5.75}$$

Вибравши $\overline{B} = 0$, запишемо базову задачу згідно з FD-методом

$$\begin{aligned}
&(A + \overline{B})u - \lambda u = u^{(4)}(x) - \lambda u = 0, \quad x \in (0,1),\\
&u^{(p)}(0) = u^{(p)}(1),\ p = 0,1,2,3.
\end{aligned} \tag{5.76}$$

Кожне власне значення

$$\lambda_n = (2n\pi)^4 \tag{5.77}$$

цієї задачі на власні значення (5.76) є двократним і йому відповідають два власні елементи:

$$u_{n,1}(x) = \sqrt{2}\sin(2n\pi x), \ \ u_{n,2}(x) = \sqrt{2}\cos(2n\pi x). \tag{5.78}$$

Оператор $A + \overline{B} - \lambda_n E = A - \lambda_n E$ є сингулярним, тобто його псевдообернення Γ^+ діє на функції g, що задовольняють умови розв'язності

$$\int_0^1 \sin(2n\pi x)g(x)dx = 0, \ \ \int_0^1 \cos(2n\pi x)g(x)dx = 0. \tag{5.79}$$

Легко перевірити, що $\Gamma^+ g(\cdot)$ *при фіксованому* x *можна записати у вигляді лінійного неперервного функціоналу*

$$l(\varphi(\cdot)) = \int\limits_0^1 \varphi(t) d \int\limits_0^t g(s) ds \tag{5.80}$$

від функції

$$\varphi(t) = \frac{1}{32(n\pi)^3}\left[\sin(2n\pi(x-t)) + \sin(2n\pi\,|x-t|) + \frac{\cosh(n\pi(2|x-t|-1))}{\sinh(n\pi)}\right] \tag{5.81}$$

із функцією обмеженої варіації $\int_0^t g(s)ds$. *Цей функціонал є визначеним на множині неперервних функцій* $\varphi(t) \in C[0,1]$ *(див., напр., [15]), а його норма дорівнює*

$$\|l\| = V_0^1\left[\int\limits_0^t g(s)ds\right], \tag{5.82}$$

де $V_a^b[\varphi] = \sup \sum\limits_{k=1}^{r} |\varphi(t_k) - \varphi(t_{k-1})|$ *– повна варіація функції* $\varphi(t)$ *на відрізку* $[a,b]$.

Позначимо через $V[0,1]$ *множину функцій обмеженої варіації неперервних зліва і таких, що перетворюються в нуль на лівому кінці відрізка* $[0,1]$. *Тоді одержуємо*

$$\left\|\Gamma^+\right\| = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\|\Gamma^+ g\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} \leq \frac{2+\coth(n\pi)}{32n^3\pi^3}, \tag{5.83}$$

$$\begin{aligned} \left\|\varphi(B_1)\Gamma^+\right\| &= \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\|\varphi(B_1)\Gamma^+ g\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|k_1(\cdot)\frac{d}{dx}\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} \leq \\ &\leq \frac{\|k_1\|_{C[0,1]}}{16n^2\pi^2} \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \max_{x\in[0,1]} \frac{\left[3V_0^x[\tilde{g}] + V_x^1[\tilde{g}]\right]}{V_0^1[\tilde{g}]} \leq \frac{3\|k_1\|_{C[0,1]}}{16n^2\pi^2}, \end{aligned} \tag{5.84}$$

$$\begin{aligned} \left\|\varphi(B_2)\Gamma^+\right\| &= \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\|\varphi(B_2)\Gamma^+ g\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|k_2(\cdot)\frac{d^2}{dx^2}\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} \leq \\ &\leq \frac{2+\coth(n\pi)}{8n\pi}\|k_2\|_{C[0,1]}, \end{aligned} \tag{5.85}$$

$$\begin{aligned} \left\|\varphi(B_3)\Gamma^+\right\| &= \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\|\varphi(B_3)\Gamma^+ g\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|k_3(\cdot)\frac{d^3}{dx^3}\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1[\tilde{g}]} \leq \\ &\leq \frac{3}{4}\|k_3\|_{C[0,1]}, \end{aligned} \tag{5.86}$$

де $\tilde{g}(t) = \int_0^t g(s)ds$.

Для того щоб отримати оцінки знизу, виберемо $\tilde{g}(t) = \mathrm{H}(t-\frac{1}{4}) - \mathrm{H}(t-\frac{3}{4})$ *з функцією Хевісайда* $\mathrm{H}(t)$, *тобто* $g(x) = \delta(x-\frac{1}{4}) - \delta(x-\frac{3}{4})$, *де* $\delta(t)$ *– дельта-функція Дірака (див., напр., [157]). Розглядаючи* ***випадок парних*** n, *отримуємо*

$$\left\|\Gamma^+\right\| = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1\left[\tilde{g}\right]} \geq$$
$$\geq \max_{x\in[0,1]} \frac{1}{32(n\pi)^3\cosh(\frac{n\pi}{2})} \left|\begin{cases} -\sinh(2n\pi x), x\in\left[0,\frac{1}{4}\right], \\ \sinh\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{2}\right)\bigr) - 2\sin\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{4}\right)\bigr)\times \\ \times\cosh(\frac{n\pi}{2}), x\in\left[\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right], \\ -\sinh(2n\pi\left(x-1\right)), x\in\left[\frac{3}{4},1\right], \end{cases}\right| \geq \tag{5.87}$$
$$\geq \frac{\left|\sinh(\frac{n\pi}{2}) - 2\cosh(\frac{n\pi}{2})\right|}{32(n\pi)^3\cosh(\frac{n\pi}{2})} \geq \frac{2-\tanh(\frac{\pi}{2})}{32n^3\pi^3},$$

оскільки $V_0^1\left[\tilde{g}\right] = 2$. *Аналогічно отримуємо*

$$\left\|\varphi(B_1)\Gamma^+\right\| = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|\varphi(B_1)\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1\left[\tilde{g}\right]} = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|k_1(\cdot)\frac{d}{dx}\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1\left[\tilde{g}\right]} \geq$$
$$\geq \max_{x\in[0,1]} \frac{|k_1(x)|}{16(n\pi)^2\cosh(\frac{n\pi}{2})} \left|\begin{cases} -\cosh(2n\pi x), x\in\left[0,\frac{1}{4}\right], \\ \cosh\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{2}\right)\bigr) - 2\cos\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{4}\right)\bigr)\times \\ \times\cosh(\frac{n\pi}{2}), x\in\left[\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right], \\ -\cosh(2n\pi\left(x-1\right)), x\in\left[\frac{3}{4},1\right], \end{cases}\right| \geq \tag{5.88}$$
$$\geq \frac{1}{16n^2\pi^2}\left\|k_1\right\|_{C[0,1]}$$

та

$$\left\|\varphi(B_2)\Gamma^+\right\| = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|k_2(\cdot)\frac{d^2}{dx^2}\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1\left[\tilde{g}\right]} \geq$$
$$\geq \max_{x\in[0,1]} \frac{|k_2(x)|}{8n\pi\cosh(\frac{n\pi}{2})} \left|\begin{cases} -\sinh(2n\pi x), x\in\left[0,\frac{1}{4}\right], \\ \sinh\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{2}\right)\bigr) + 2\sin\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{4}\right)\bigr)\times \\ \times\cosh(\frac{n\pi}{2}), x\in\left[\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right], \\ -\sinh(2n\pi\left(x-1\right)), x\in\left[\frac{3}{4},1\right], \end{cases}\right| \geq \tag{5.89}$$
$$\geq \frac{2-\tanh\left(\frac{\pi}{2}\right)}{8n\pi}\left\|k_2\right\|_{C[0,1]},$$

$$\left\|\varphi(B_3)\Gamma^+\right\| = \sup_{\tilde{g}(t)\in V[0,1]} \frac{\left\|k_3(\cdot)\frac{d^3}{dx^3}\Gamma^+ g\right\|_{C[0,1]}}{V_0^1\left[\tilde{g}\right]} \geq$$
$$\geq \max_{x\in[0,1]} \frac{|p_3(x)|}{4\cosh(\frac{n\pi}{2})} \left\| \begin{cases} -\sinh(2n\pi x), x\in\left[0,\frac{1}{4}\right], \\ \sinh\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{2}\right)\bigr)+2\cos\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{4}\right)\bigr)\times \\ \times\cosh(\frac{n\pi}{2}), x\in\left[\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right], \\ -\sinh(2n\pi\left(x-1\right)), x\in\left[\frac{3}{4},1\right], \end{cases} \right\| \geq \tag{5.90}$$
$$\geq \frac{\|k_3\|_{C[0,1]}}{4}\frac{|\sinh(\frac{n\pi}{2})-2\cosh(\frac{n\pi}{2})|}{\cosh(\frac{n\pi}{2})} \geq \frac{1}{4}\|k_3\|_{C[0,1]}.$$

Таким чином, отримано оцінки з обох сторін однакового порядку відносно n. Випадок ***непарного*** *n можна розглядати аналогічно. Зауважимо, що $\Gamma^+ g$ обчислено як розв'язок крайової задачі*

$$\begin{aligned} &\frac{d^4v(x)}{dx^4} - (2n\pi)^4 v(x) = \delta\left(x-\frac{1}{4}\right) - \delta\left(x-\frac{3}{4}\right), \quad x\in(0,1) \\ &\frac{d^i v(0)}{dx^i} = \frac{d^i v(1)}{dx^i}, \ \ i=\overline{0,3}, \end{aligned} \tag{5.91}$$

яка є еквівалентною такій задачі:

$$\begin{aligned} &\frac{d^4v(x)}{dx^4} - (2n\pi)^4 v(x) = 0, \quad x\in(0,1), x\neq\frac{1}{4},\frac{3}{4}, \\ &\frac{d^i v(0)}{dx^i} = \frac{d^i v(1)}{dx^i}, \ \ i=\overline{0,2}, \\ &\frac{d^3v(\frac{1}{4}+0)}{dx^3} - \frac{d^3v(\frac{1}{4}-0)}{dx^3} = 1, \ \ \frac{d^3v(\frac{3}{4}+0)}{dx^3} - \frac{d^3v(\frac{3}{4}-0)}{dx^3} = -1. \end{aligned} \tag{5.92}$$

Звідси легко визначити

$$v(x) = \frac{1}{32(n\pi)^3\cosh(\frac{n\pi}{2})} \begin{cases} -\sinh(2n\pi x), x\in\left[0,\frac{1}{4}\right], \\ \sinh\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{2}\right)\bigr)-2\sin\bigl(2n\pi\left(x-\frac{1}{4}\right)\bigr)\times \\ \times\cosh(\frac{n\pi}{2}), x\in\left[\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right], \\ -\sinh(2n\pi\left(x-1\right)), x\in\left[\frac{3}{4},1\right]. \end{cases} \tag{5.93}$$

Оцінки для $\|\Gamma^+\varphi(B)\|$ можна отримати аналогічно, і вони мають такий самий порядок відносно n як $\|\varphi(B)\Gamma^+\|$.

5.4.2 FD-метод для крайових умов типу $(p, q; r, s)$.

У цьому підпункті розглянемо варіант алгоритму FD-методу, коли $Au = u^{(4)}(x)$, тобто для задачі на власні значення з рівнянням (5.57) та відповідними крайовими умовами. Очевидно, що оператор $\overline{B}$ є наближенням до частини рівняння B, яка містить похідні від власних елементів порядку не вищого, ніж другий. В загальному формулюванні FD-методу коефіцієнти перед цими похідними в (5.57) апроксимуються деякими кусково-сталими коефіцієнтами на деякій обраній сітці. Умови теореми 5.1 виконуються для FD-методу, який описано вище в підрозділі 5.2, тобто ми отримуємо всі власні пари $\lambda_n, u_n(x)$ з експоненціальною точністю для всіх $n \geq n_0$ починаючи з деякого n_0 (див. також зауваження 5.1). Наведені чисельні результати підтверджують та ілюструють цей результат.

Розглянемо задачу (5.57) з крайовими умовами типу $(0, 2; 0, 2)$

$$u(0) = \frac{d^2}{dx^2}u(0) = u(1) = \frac{d^2}{dx^2}u(1) = 0 \tag{5.94}$$

та з вибором $\overline{B} = 0$. Базова задача для (5.57), (5.94)

$$\begin{aligned} &\frac{d^4}{dx^4}u^{(0)}(x) - \lambda^{(0)}u^{(0)}(x) = 0, \\ &u^{(0)}(0) = \frac{d^2}{dx^2}u^{(0)}(0) = u^{(0)}(1) = \frac{d^2}{dx^2}u^{(0)}(1) = 0 \end{aligned} \tag{5.95}$$

має розв'язок

$$u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2}\sin(n\pi x), \quad \lambda_n^{(0)} = (n\pi)^4, \quad n = 1, 2 \dots .$$

Поправки до власних пар $\lambda_n^{(j+1)}, u_n^{(j+1)}(x), j = 0, 1, ...$ знаходяться як розв'язки рекурентної послідовності задач

$$\begin{aligned} \frac{d^4}{dx^4}u_n^{(j+1)}(x) - \lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}(x) = -k_2(x)\frac{d^2}{dx^2}u_n^{(j)}(x) - k_1(x)\frac{d}{dx}u_n^{(j)}(x) - \\ - k_0(x)u_n^{(j)}(x) + \sum_{s=0}^{j}\lambda^{(j+1-s)}u_n^{(s)}(x), \qquad x \in (0, 1) \end{aligned} \tag{5.96}$$

$$u_n^{(j+1)}(0) = \frac{d^2}{dx^2}u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) = \frac{d^2}{dx^2}u_n^{(j+1)}(1) = 0,$$

$$j = 0, 1, ..., m$$

та задовольняють нормалізуючу умову

$$\left(u_n^{(j)}, u_n^{(0)}\right) = \left(u_n^{(j)}, u_n^{(0)}\right)_{L_2(0,1)} = \int\limits_0^1 u_n^{(j)}(x) u_n^{(0)}(x) dx = 0. \tag{5.97}$$

Із умови розв'язності для задачі (5.96), враховуючи умову (5.97), одержуємо співвідношення:

$$\lambda_n^{(j+1)} = \int\limits_0^1 \left(k_2(x) \frac{d^2}{dx^2} u_n^{(j)}(x) + k_1(x) \frac{d}{dx} u_n^{(j)}(x) + k_0(x) u_n^{(j)}(x) \right) u_n^{(0)}(x) dx. \tag{5.98}$$

Розв'язок задачі (5.96) задається формулою

$$\begin{gathered} u_n^{(j+1)}(x) = \sum_{\alpha=1}^{4} u_{n,\alpha}^{(j+1)}(x) = -\frac{1}{\pi^4} \sum_{\substack{l=1,\\ l\neq n}}^{\infty} \frac{u_l^{(0)}(x)}{n^4 - l^4} \int\limits_0^1 \left(-k_2(\xi) \frac{d^2}{d\xi^2} u_n^{(j)}(\xi) - \right. \\ \left. - k_1(\xi) \frac{d}{d\xi} u_n^{(j)}(\xi) - k_0(\xi) u_n^{(j)}(\xi) + \sum_{s=0}^{j} \lambda_n^{(j+1-s)} u_n^{(s)}(\xi) \right) u_n^{(0)}(\xi) d\xi = \\ = -\frac{2}{\pi^4} \sum_{\substack{l=1,\\ l\neq n}}^{\infty} \frac{\sin(l\pi x)}{n^4 - l^4} \int\limits_0^1 \Big(\Big[(l\pi)^2 k_2(\xi) \sin(l\pi\xi) + l\pi \big(-2k_2'(\xi) + \\ + k_1(\xi) \big) \cos(l\pi\xi) + \big(-k_2''(\xi) + k_1'(\xi) - k_0(\xi) \big) \sin(l\pi\xi) \Big] u_n^{(j)}(\xi) + \\ + \sum_{s=0}^{j} \lambda_n^{(j+1-s)} u_n^{(s)}(\xi) \sin(l\pi\xi) \Big) d\xi. \end{gathered} \tag{5.99}$$

Оцінимо кожний доданок у правій частині (5.99) окремо:

$$\left\| u_{n,1}^{(j+1)} \right\| = \tfrac{1}{\pi^4} \left\{ \sum_{l=1, l\neq n}^{\infty} \tfrac{(l\pi)^4}{(n^4-l^4)^2} \left[\int_0^1 k_2(\xi) u_n^{(j)}(\xi) \sin(l\pi\xi) d\xi \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \leq$$

$$\leq \tfrac{1}{\pi^2} \tfrac{(n+1)\|k_2\|_\infty}{2n^2-2n+1} \left\| u_n^{(j)} \right\|,$$

$$\left\| u_{n,2}^{(j+1)} \right\| = \tfrac{2}{\pi^3} \left\{ \sum_{l=1, l\neq n}^{\infty} \tfrac{(l\pi)^2}{(n^4-l^4)^2} \left[\int_0^1 (-2k_2'(\xi) + k_1(\xi))\ u_n^{(j)}(\xi) \cos(l\pi\xi) d\xi \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \leq$$

$$\leq \tfrac{1}{\pi^3} \tfrac{\|-2k_2'+k_1\|_\infty}{2n^2-2n+1} \left\| u_n^{(j)} \right\|,$$

$$\left\|u_{n,3}^{(j+1)}\right\| \leq \frac{1}{\pi^4}\frac{\left\|-k_2''+k_1'-k_0\right\|_\infty}{n(2n^2-2n+1)}\left\|u_n^{(j)}\right\|,$$

$$\left\|u_{n,4}^{(j+1)}\right\| \leq \frac{1}{\pi^4}\frac{1}{n(2n^2-2n+1)}\left\|\sum_{s=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-s)}u_n^{(s)}\right\|.$$

Звідси та із (5.98), (5.99) отримуємо

$$\left|\lambda_n^{(j+1-s)}\right| \leq \sqrt{2}\mu\left[(n\pi)^2+n\pi+1\right]\left\|u_n^{(j-s)}\right\|$$

і

$$\begin{aligned}
&\left\|u_n^{(j+1)}\right\| \leq \sum_{t=1}^{4}\left\|u_{n,t}^{(j+1)}\right\| \leq \\
&\leq \frac{1}{\pi^2}\frac{1}{2n^2-2n+1}\left[\left[(n+1)\left\|q_2\right\|_\infty+\frac{1}{\pi}\left\|-2q_2'+q_1\right\|_\infty+\right.\right.\\
&\left.+\frac{1}{\pi^2}\frac{\left\|-q_2''+q_1'-q_0\right\|_\infty}{n}\right]\left\|u_n^{(j)}\right\|+\sqrt{2}\mu\left[n+\frac{1}{\pi}+\frac{1}{n\pi^2}\right]\sum_{s=0}^{j}\left\|u_n^{(j-s)}\right\|\left\|u_n^{(s)}\right\|\Bigg]\leq \qquad (5.100)\\
&\leq \frac{1}{\pi^2}\frac{\mu}{2n^2-2n+1}\left[\left[n+1+\frac{1}{\pi}+\frac{1}{n\pi^2}\right]\left\|u_n^{(j)}\right\|+\right.\\
&\left.+\sqrt{2}\left[n+\frac{1}{\pi}+\frac{1}{n\pi^2}\right]\sum_{s=0}^{j}\left\|u_n^{(j-s)}\right\|\left\|u_n^{(s)}\right\|\right]\leq M_n\sum_{s=0}^{j}\left\|u_n^{(j-s)}\right\|\left\|u_n^{(s)}\right\|,
\end{aligned}$$

де

$$M_n=\frac{1}{\pi^2}\frac{\mu\sqrt{2}}{2n^2-2n+1}\left[n+1+\frac{1}{\pi}+\frac{1}{n\pi^2}\right],$$

$$\mu=\max\left(\left\|k_2\right\|_\infty,\left\|-2k_2'+k_1\right\|_\infty,\left\|-k_2''+k_1'-k_0\right\|_\infty\right).$$

Розв'язком останньої нерівності є наступний:

$$\left\|u_n^{(j)}\right\| \leq (4M_n)^j\,2\frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!}\leq\frac{(4M_n)^j}{(j+1)\sqrt{\pi j}}.$$

Це означає, що якщо виконується умова

$$r_n=4M_n<1, \qquad (5.101)$$

тоді справедливою є модифікація оцінок з основної теореми 5.1, а саме:

$$\begin{aligned}
\left|\lambda_n-\overset{m}{\lambda}_n\right|=\left|\lambda_n-\sum_{j=0}^{m}\lambda_n^{(j)}\right|&\leq\mu\sqrt{2}\left[(n\pi)^2+n\pi+1\right]\frac{(r_n)^m}{1-r_n}\frac{(2m-1)!!}{(2m+2)!!}\leq \\
&\leq\frac{\mu}{\sqrt{2}}\left[(n\pi)^2+n\pi+1\right]\frac{(r_n)^m}{1-r_n}\frac{1}{(m+1)\sqrt{\pi m}},
\end{aligned} \qquad (5.102)$$

$$\left\|u_n-\overset{m}{u}_n\right\|=\left\|u_n-\sum_{j=0}^{m}u_n^{(j)}\right\|\leq 2\frac{(r_n)^{m+1}}{1-r_n}\frac{(2m+1)!!}{(2m+4)!!}\leq\frac{(r_n)^{m+1}}{(m+2)\sqrt{\pi\,(m+1)}}. \quad (5.103)$$

Приклад 8. *Розглянемо задачу на власні значення* (5.57), (5.94) *із*

$$k_2(x)=x,\quad k_1(x)\equiv 0,\quad k_0(x)\equiv 0.$$

Найменше власне значення цієї задачі обчислено за допомогою стандартного інструменту системи комп'ютерної алгебри Maple

$$\lambda_1^{ex}=102.3353144965013. \quad (5.104)$$

Порівняємо цей результат з наближеним розв'язком, отриманим згідно з нашим алгоритмом FD-методу. В результаті Maple-розрахунків одержуємо

$$\begin{aligned}
&\lambda_1^{(0)}=\pi^4,\quad \left|\lambda_1^{ex}-\lambda_1^{(0)}\right|=4.926223462,\\
&\lambda_1^{(1)}=\frac{\pi^2}{2},\quad \left|\lambda_1^{ex}-\overset{1}{\lambda}_1\right|=\left|\lambda_1^{ex}-\lambda_1^{(0)}-\lambda_1^{(1)}\right|=0.008578738,\\
&\lambda_1^{(2)}=-\frac{1}{96}\left(1+\frac{15}{\pi^2}-\frac{48}{\pi^3}-\frac{96}{(e^{\pi}-1)\pi^3}\right),\\
&\left|\lambda_1^{ex}-\overset{2}{\lambda}_1\right|=\left|\lambda_1^{ex}-\lambda_1^{(0)}-\lambda_1^{(1)}-\lambda_1^{(2)}\right|=0.000086933,
\end{aligned} \quad (5.105)$$

що добре узгоджується із точним розв'язком (5.104).

Аналогічно можна розглянути рівняння (5.57) з крайовою умовою типу $(0,1;0,1)$. В наступному прикладі наведено експериментальне підтвердження основного результату.

Приклад 9. *Розглянемо рівняння* (5.56) *із* $a(\xi)=1+\xi$, $b(\xi)=c(\xi)\equiv 0$, $d(\xi)\equiv 1$. *Після заміни змінних*

$$\xi=\left(1+\frac{3}{4}x\right)^{\frac{4}{3}}-1,\quad v(\xi)=\left(1+\frac{3}{4}x\right)^{-\frac{1}{6}}u(x) \quad (5.106)$$

рівняння (5.56) *переходить у рівняння*

$$u^{(4)}(x)+\frac{13}{18\left(x+\frac{4}{3}\right)^2}u''(x)+\frac{13}{9\left(x+\frac{4}{3}\right)^3}u'(x)+\left[-\lambda+\frac{17}{16\left(x+\frac{4}{3}\right)^4}\right]u(x)=0. \quad (5.107)$$

Крайові умови типу $(0,1;0,1)$ *після підстановки* (5.106) *переходять в крайові умови того ж типу для рівняння* (5.107) *на відрізку* $(0,a)$ *з* $a = \frac{4}{3}(2^{3/4}-1)$, *тобто*

$$u(0) = u'(0) = u(a) = u'(a) = 0. \tag{5.108}$$

Найменше точне власне значення задачі (5.107), (5.108) *є*

$$\lambda_1^{ex} = 729.5132640790354497. \tag{5.109}$$

FD-метод рангу 1 *дає наступні результати:*

$$\begin{aligned} &\lambda_1^{(0)} = 729.0804175123859275, \quad \left|\lambda_1^{ex} - \lambda_1^{(0)}\right| = 0.432846566, \\ &\lambda_1^{(1)} = 0.4329291815470396, \\ &\left|\lambda_1^{ex} - \overset{1}{\lambda}_1\right| = \left|\lambda_1^{ex} - \lambda_1^{(0)} - \lambda_1^{(1)}\right| = 0.000082614. \end{aligned} \tag{5.110}$$

Тепер розглянемо підхід, при якому коефіцієнти диференціального рівняння замінюються на кусково-сталі функції («metodo dei tronconi» [75]). Для прикладу, розглянемо замість

$$\frac{d^2}{d\xi^2}((1+\xi)\frac{d^2}{d\xi^2}y(\xi)) - \tilde{\lambda}y(\xi) = 0,\ y(0) = y'(0) = y(1) = y'(1) = 0 \tag{5.111}$$

задачу

$$\frac{d^4}{d\xi^4}\tilde{y}(\xi) - \frac{2}{3}\tilde{\lambda}\tilde{y}(\xi) = 0, \qquad \tilde{y}(0) = \tilde{y}'(0) = \tilde{y}(1) = \tilde{y}'(1) = 0. \tag{5.112}$$

Тоді згідно з нашим методом отримуємо наступне наближення до найменшого власного значення

$$\tilde{\lambda}_1 = 750.8458526104090604, \quad \lambda_1^{ex} - \tilde{\lambda}_1 = 21.33258853, \tag{5.113}$$

що є набагато грубішим, ніж наближення $\lambda_1^{(0)}$ *в* (5.110), *отримане згідно з FD-методом рангу нуль.*

Приклад 10. *Розглянемо диференціальне рівняння* (5.57) *з*

$$k_2(x) = k_1(x) \equiv 0, \qquad k_0(x) = k_0(1-x) = \left(x - \frac{1}{2}\right)^2$$

та крайовими умовами типу $(2,3;2,3)$, *тобто*

$$u^{(4)}(x)+\left[\left(x-\frac{1}{2}\right)^2-\lambda\right]u(x)=0,\ u^{(k)}(0)=u^{(k)}(1)=0,\ k=2,3. \quad (5.114)$$

Найменші два власні значення (5.114) *обчислено за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17, а саме*

$$\lambda_{0,1}^{ex}=0.0833223112249938...,\ \lambda_{0,2}^{ex}=0.14999891773580\dots.$$

Базова задача

$$\begin{aligned}&\frac{d^4u_n^{(0)}(x)}{dx^4}-\lambda_n^{(0)}u_n^{(0)}(x)=0, \quad x\in(0,1),\\ &\frac{d^ju_n^{(0)}(0)}{dx^j}=\frac{d^ju_n^{(0)}(1)}{dx^j}=0,\ \ j=2,3\end{aligned} \quad (5.115)$$

володіє двократним власним значенням $\lambda^{(0)}=0$, *якому відповідають ортонормовані власні функції*

$$u_{0,1}^{(0)}(x)=1 \quad \textit{та} \quad u_{0,2}^{(0)}(x)=2\sqrt{3}\left(\frac{1}{2}-x\right)$$

(див., напр., [12]). Інші власні значення є простими. Наведемо чисельні результати, отримані згідно з FD-методом рангу $m=\overline{0,3}$

$$\begin{aligned}&\overset{0}{\lambda}_0=0,\ \overset{1}{\lambda}_{0,1}=\frac{1}{12}=0.08(3),\ \overset{1}{\lambda}_{0,2}=\frac{3}{20}=0.15,\\ &\overset{2}{\lambda}_{0,1}=\frac{7559}{90720}=0.0833223104056437...,\ \overset{2}{\lambda}_{0,2}=\frac{138599}{924000}=0.14999891774891...,\\ &\overset{3}{\lambda}_{0,1}=\frac{163437676007}{1961511552000}=0.0833223112249098...,\\ &\overset{3}{\lambda}_{0,2}=\frac{34306024477}{228708480000}=0.14999891773580\dots.\end{aligned}$$

5.5 Висновки до розділу 5

Результати даного розділу є узагальненням робіт по FD-методу для задач на власні значення у гільбертовому просторі:

– для випадку двократних власних значень базової задачі – [3,71,101,102];

– для випадку власних значень базової задачі довільної (скінченної) кратності – результатів розділу 4, опублікованого в [25, 28].

Узагальнення полягає в тому, що задача на власні значення розглядається у банаховому просторі і базова задача може містити власні значення довільної (скінченної) кратності.

Основні результати даного розділу:

1) Розроблено та обгрунтовано нову схему алгоритму FD-методу для задачі 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.

2) Знайдено достатні умови суперекспоненціальної збіжності FD-методу та оцінки його точності (теорема 5.1, зауваження 5.1, 5.2).

Отримані теоретичні результати щодо FD-методу успішно проілюстровано на прикладі задач типу Штурма-Ліувілля другого та четвертого порядку на скінченному проміжку з різними крайовими умовами.

Основні результати даного розділу опубліковано у статті [103] та доповідались на конференції [26].

ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота присвячена розробці, обгрунтуванню та алгоритмізації функціонально-дискретного методу (FD-методу) для спектральних задач типу Штурма-Ліувілля, зокрема, 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 та коли 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 $\bar{q}(x) \equiv 0$), 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 $\bar{q}(x) \equiv 0$). 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Аткинсон Ф. В. Дискретные и непрерывные граничные задачи / Аткинсон Ф. В., под ред. И. С. Каца, М. Г. Крейна. – М.: Мир, 1968. – С. 749.

2. Бабенко К. И. Основы численного анализа / Бабенко К. И. – М.-Иж.: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. – С. 848.

3. Бандирський Б. Й. FD-метод для задач Штурма-Ліувілля. Експоненційна швидкість збіжності / Бандирський Б. Й., Макаров В. Л., Уханьов О. Л. // Ж. обч. прикл. матем. – 2000. – Вип. 1, № 85. – С. 1–60.

4. Бандирський Б. Й. Функціонально-дискретні методи в задачах на власні значення / Бандирський Б. Й. // Л.: Видав. Нац. унів. «Львівська політехніка», 2004. – С. 184.

5. Василик В. Б. Функціонально-дискретний метод розв'язування операторних рівнянь та його застосування / Василик В. Б., Драгунов Д. В., Ситник Д. О. – К.: Наукова думка, 2011. – С. 176.

6. Виленкин Н. Я. Комбинаторика / Н. Я. Виленкин. – М.: Наука, 1968. – С. 328.

7. Винокуров В. Собственное значение и след оператора Штурма–Лиувилля как дифференцируемые функции суммируемого потенциала / Винокуров В., Садовничий В. // Докл. РАН. – 1999. – Т. 365, № 3. – С. 295–297.

8. Винокуров В. А. Асимптотика собственных значений и собственных функций и формула следа для потенциала, содержащего δ-функции / В. А. Винокуров, В. А. Садовничий // Дифф. уравн. – 2002. – Т. 38, № 6. – С. 735-751.

9. Во Чонг Тхак. SLIPH4M – программа для численного решения частичной проблемы Штурма-Лиувилля / Во Чонг Тхак, Пузынина Т. П. // Программные продукты и системы. – 2011. – №3. – С. 75–80.

10. Гаврилюк І. П. FD-метод для задачі на власні значення з нелінійним потенціалом / Гаврилюк І.П., Клименко А.В., Макаров В.Л., Россохата Н.О. // Укр. мат. журн. – 2007. – Т. 59, № 1. – С. 14-28.

11. Гордієнко М. Математичні дослідження М. М. Боголюбова періоду 1923–1932 років / Гордієнко М., Самойленко В. // Вісник КНУ ім. Т.Шевченка. Матем. Мех. – 2013. – Vol. 30, № 2. – P. 25-32.

12. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям / Камке Э.; [Пер. с нем. 4-е изд., испр.] – М.: Наука, 1971. – С. 576.

13. Като Т. Теория возмущений линейных операторов. / Като Т. – М.: Мир, 1972. – С. 740.

14. Коллатц Л. Задачи на собственные значения (с техническими приложениями) / Коллатц Л.; [Пер. со 2-го нем. под ред. Никольского В. В.]. - М.: Глав. ред. физ.-мат. лит., «Наука», 1968. – С. 504.

15. Колмогоров А. Н. Элементы теории функций и функционального анализа/ А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М.: Глав. ред. физ.-мат. лит., «Наука», 1976. – С. 543.

16. Лаборатория Информационных Технологий. Библиотеки программ [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/ (дата звернення: 05.09.2015).

17. Макаров В. Л. О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма-Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами // ДАН СССР.– 1991.– Т. 320, №1. – С. 34-39.

18. Макаров В. Л. FD-метод – экспоненциальная скорость сходимости / Макаров В. Л. // Обч. прикл. матем. – 1997. – Вип. 82. – С. 69–74.

19. Макаров В. Л. Достатні умови збіжності асимптотичного ряду В. О. Марченка для власних значень задачі Штурма-Ліувілля / Макаров В. Л. // Доп. НАН України. – 2014. – № 11. – С. 16–21.

20. 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 трав. 2013р., Львів: Матеріали конф. – Львів: ІППММ ім. Я.С. Підстригана НАН України, 2013. – Т. 3. – С. 35–37.

21. 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 2013 р., Київ: Матеріали конференції. – С. 158–161.

22. 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.

23. 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 матем. НАН Белар, 2014. – Т.22, №1. – С. 98–106.

24. 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.

25. 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.

26. Макаров В. Л. Нова алгоритмічна реалізація FD-методу для задачі Штурма-Ліувілля четвертого порядку / В. Л. Макаров, Н. М. Романюк // Міжнародна конференція молодих математиків, 03-06 червня 2015 р., Київ: Матеріали конференції. – С. 106.

27. 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. пр. Інст. матем. НАНУ. – 2013. – Т. 10, № 3. – Р. 145-170.

28. 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. пр. Ін-ту матем. НАН України, 2014. – Т.11, №4. – С. 239–265.

29. Марченко В. А. Операторы Штурма-Лиувилля и их приложения / В. А. Марченко. – К.: «Наук. думка», 1977. – С. 330.

30. Наймарк М. А. Линейные дифференциальные операторы. Часть I: Елементарная теория линейних дифференциальных операторов / Наймарк М. А. – М.: «Наука», Гл. ред. физ.-мат. лит., 1969. – С. 526.

31. Нелин Е. А. Импедансная модель для «барьерных» задач квантовой механики / Нелин Е. А. // Усп. физ. наук. – 2007. – Т. 177, № 3. – Р. 307-313.

32. Пузынин И. В. SLIPH4 — программа для численного решения задачи Штурма–Лиувилля / Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Стриж Т. А. // Сообщения ОИЯИ Дубна, Изд. Отд. ОИЯИ. – 1987. – Р11-87-332. – С. 18.

33. Пузынина Т. П. SLIPS2 – программа численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений / Пузынина Т. П. // Сообщения ОИЯИ Дубна, Изд. Отд. ОИЯИ. – 1989. – Р11-89-728. – С. 15.

34. Пузынин И. В. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых квантово-полевых моделей / И. В. Пузынин, И. В. Амирханов, Е. В. Земляная и др. // Физ. элем. част. атом. ядра (ЭЧАЯ). – 1999. – Т. 30, вып. 1. – С. 210–265.

35. Пузынин И. В. SLIPM – программа на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма-Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона / И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Во Чонг Тхак // Вестник РУДН, сер. «Математика. Информатика. Физика». – 2010. – Vol. 2, №2. – С. 90-98.

36. Савчук А. М., Регуляризованный след первого порядка оператора Штурма–Лиувилля с δ-потенциалом / А. М. Савчук // Усп. мат. наук. – 2000. – Т. 55, №6. – Р. 155-156.

37. Садовничий В. А. Следы операторов / В. А. Садовничий, В. Е. Подольский // Усп. мат. наук. – 2006. – Т. 61, № 5(371). – Р. 89-156.

38. Фихтенгольц Г. М. Основы математического анализа / Фихтенгольц Г. М. – М.: Наука, 1968. – Т. 1. – С. 328.

39. Abbasbandy S. A new application of the homotopy analysis method: Solving the Sturm–Liouville problems / Abbasbandy S., Shirzadi A. // Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simulat. – 2011. – № 16. – P. 112–126.

40. Albeverio S. Solvable Models in Quantum Mechanics [Second edition. With an appendix by Pavel Exner] / S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden. – Providence, State RI.: AMS Chelsea Publishing, 2005. – P. XIV+488.

41. Aceto L. Numerical computation of eigenvalues in spectral gaps of Sturm–Liouville operators / Aceto L., Ghelardoni P., Marletta M. // J. Comp. & Appl. Math. – 2006. – № 189. – P. 453–470.

42. Aceto L. Boundary Value Methods as an extension of Numerov's method for Sturm–Liouville eigenvalue estimates / Aceto L., Ghelardoni P., Magherini C. // Appl. Numer. Math. – 2009. – № 59. – P. 1644–1656.

43. Adomian G. A new approach to nonlinear partial differential equations / Adomian G. // J. Math. An. & Appl. – 1984. – Vol.102, № 2. – P. 420-434.

44. Adomian G. Convergent series solution of nonlinear equations / Adomian G. // J. Comp. & Appl. Math. – 1984. – Vol.11, № 2. – P. 225-230.

45. Adomian G. On the convergence region for decomposition solutions / Adomian G. // J. Comp. & Appl. Math. – 1984. – Vol.11, № 3. – P. 379-380.

46. Adomian G. Solving frontier problems of physics: The Decomposition method / Adomian G. – Dordrecht and Boston: Kluwer Academic Publishers, 1994. – P. 352.

47. Akulenko L. High-Precision Methods in Eigenvalue Problems and their Applications / Akulenko L., Nesterov S. – Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2005. – Ser. Differential and Integral Equations and Their Applications, Vol. 6 – P. 264.

48. Babuska I. Estimates for the Errors in Eigenvalue and Eigenvector Approximation by Galerkin Methods, with Particular Attention to the Case of Multiple Eigenvalues / Babuska I., Osborn J.E. – SIAM J. Num. An. – Dec. 1987. – Vol. 24, № 6. – P. 1249-1276.

49. M. A. Al-Gwaiz. Sturm-Liouville Theory and its Applications / M. A. Al-Gwaiz. – Springer-Verlag London Lim. (Springer Undergraduate Mathematics Series), 2008. – P. X+264.

50. Alici H. A general pseudospectral formulation of a class of Sturm-Liouville systems: PhD thesis / Alici Haydar; The Graduate School of Natural and Applied Sciences of Middle East Technical University. – Ankara, 2010. – P. XII+83.

51. Alici H. Pseudospectral methods for solving an equation of hypergeometric type with a perturbation / Alici H., Taseli H. // J. Comp. & Appl. Math. – June 2010. – Vol. 234, № 4. – P. 1140–1152.

52. Allgower E. L. Introduction to Numerical Continuation Methods / Allgower E. L., Georg K. // Colorado State University, Colorado, 1990, P. 397.

53. Altintan D. Variational iteration method for Sturm–Liouville differential equations/ Altintan D., Ugur Ö. // Comp. & Math. Applic. – July 2009. – Vol. 58, № 2. – P. 322-328.

54. Amodio P. Symmetric Boundary Value Methods for second order initial and boundary value problems / Amodio P., Iavernaro F. // Mediterr. J. Math. – 2006. – № 3. – P. 383–398.

55. Sturm-Liouville Theory: Past and Present / ed. Amrein W. O., Hinz A. M., Pearson D. B. – Birkhäuser Basel, 2005. – P. XIX+336.

56. Anderssen R. S. On the correction of finite difference eigenvalue approximations for Sturm-Liouville problems with general boundary conditions / Anderssen R. S., De Hoog F. R. // BIT Numer. Math. – December 1984. – Vol. 24, № 3. – P. 401-412.

57. Andrew A. L. The accuracy of Numerov's method for eigenvalues / Andrew A. L. // BIT Numer. Math. – 1986. – Vol. 26, № 2. – P. 251-253.

58. Andrew A. L. Correction of finite difference eigenvalues of periodic Sturm-Liouville problems / Andrew A. L. // J. Austral. Math. Soc. Series B. Appl. Math. – April 1989. – Vol. 30, № 4. – P. 460-469.

59. Andrew A. L. Asymptotic correction of Numerov's eigenvalue estimates with natural boundary conditions / Andrew A. L. // J. Comp. & Appl. Math. – December 2000. – Vol. 125, № 1-2. – P. 359-366.

60. Andrew A. L. Correction of Numerov's eigenvalue estimates / Andrew A. L., Paine J. W. // Numer. Math. – June 1985. – Vol. 47, № 2. – P. 289-300.

61. Andrew A. L. Correction of Finite Element Estimates for Sturm-Liouville Eigenvalues / Andrew A. L., Paine J. W. // Numer. Math. – March 1986. – Vol. 50, № 2. – P. 205-215.

62. Armstrong M. A. Basic Topology / Armstrong M. A. – Springer-Verlag New York Inc., 1983. – P. XII+251.

63. Ashour H. S. Coherent Tunneling through Quantum Wire Tailored by Gaussian Profile / H. S. Ashour. // J. Mod. Phys. – 2011. – Vol. 2, №3. – P. 124-130.

64. Atay M. T. Computation of Eigenvalues of Sturm-Liouville Problems using Homotopy Perturbation Method / Atay M. T., Kartal S. // Int. J. Nonlin. Sci. & Numer. Simul. – February 2010. – Vol. 11, № 2. – P. 105-111.

65. Atkinson F. V. Multiparameter eigenvalue problems: Sturm-Liouville theory / F. V. Atkinson, A. B. Mingarelli. – Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2011. – P. XVII+278.

66. Attili B. S. The Adomian decomposition method for computing eigenelements of Sturm-Liouville two point boundary value problems / Attili B. S. // Appl. Math. & Comp. – 2005. – Vol. 168, № 2. – P. 1306-1316.

67. Attili B. S. An efficient method for computing eigenelements of Sturm-Liouville fourth-order boundary value problems / Attili B. S., Lesnic D. // Appl. Math. & Comp. – 2006. – Vol. 182, № 2. – P. 1247–1254.

68. Bailey P. B. ALGORITHM 700: A FORTRAN software package for Sturm-Liouville problems/ P. B. Bailey, B. S. Garbor, H. G. Kaper, A. Zettl //

ACM Transactions on Mathematical Software. – December 1991. – Vol. 17, №4. – P. 500-501.

69. Bailey P. B. Eigenvalue and Eigenfunction Computaitions for Sturm–Liouville Problems/ P. B. Bailey, B. S. Garbor, H. G. Kaper, A. Zettl // ACM Transactions on Mathematical Software. – December 1991. – Vol. 17, №4. – P. 491-499.

70. Bailey P. B. Algorithm 810: The SLEIGN2 Sturm-Liouville Code/ P. B. Bailey, W. N. Everitt, A. Zettl // ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS) — June 2001. — Vol. 27, №2. – P. 143-192.

71. Bandyrskii B. I. Functional-discrete method (FD-method) for matrix Sturm-Liouville problems / Bandyrskii B. I., Gavrilyuk I. P., Lazurchak I. I., Makarov V. L. // CMAM. – 2005. – Vol. 5, № 4. – P. 362 -386.

72. Bell E. T. Partition Polynomials / Bell E. T. // Annals of Mathematics; Second Ser. – 1927-1928. – Vol. 29, № 1/4. – P. 38-46.

73. Belloni M. The infinite well and Dirac delta function potentials as pedagogical, mathematical and physical models in quantum mechanics / M. Belloni, R. W. Robinett // Physics Reports. – July 2014. – Vol. 540, № 2. – P. 25-122.

74. Binding P. A Prüfer Angle Approach to the Periodic Sturm-Liouville Problem / Binding P., Volkmer H. // Amer. Math. Month. – June-July 2012. – Vol. 119, № 6. – P. 477-484.

75. Bogoliouboff N. N. Sopra il metodo dei coefficienti constanti (metodo dei tronconi) per l'integrazione approssimata delle equazioni differenziali della fisica matematica / Bogoliouboff N. N., Kryloff N. M. // Boll. Unione mat. ital. – 1928. – Vol. 7, № 2. – P. 72-77.

76. Boumenir A. Eigenvalues of periodic Sturm-Liouville problems by the Shannon-Whittaker sampling theorem / Boumenir A. // Math. Comp. – February 1999. – Vol. 68, № 227. – P. 1057-1066.

77. Browne P. J. A Prüfer approach to half-linear Sturm Liouville problems / Browne P. J. // Proc. Edinb. Math. Soc. (Ser. 2) – October 1998. – Vol. 41, № 03. – P. 573-583.

78. Chanane B. Eigenvalues of fourth order Sturm-Liouville problems using Fliess series / Chanane B. // J. Comp. & Appl. Math. – September 1998. – Vol. 96, № 2. – P. 91–97.

79. Chanane B. Fliess series approach to the computation of the eigenvalues of fourth order Sturm-Liouville problems / Chanane B. // Appl. Math. Lett. – May 2002. – Vol. 15, № 4. – P. 459–463.

80. Chanane B. Computation of the eigenvalues of Sturm-Liouville problems with parameter dependent boundary conditions using the regularized sampling method / Chanane B. // Math. Comp. – 2005. – Vol. 74, № 252. – P. 1793-1801.

81. Chanane B. Accurate solutions of fourth order Sturm–Liouville problems / Chanane B. // J. Comp. & Appl. Math. – September 2010. – Vol. 234, № 10. – P. 3064–3071.

82. Chawla M. M. On Noumerov's method for computing eigenvalues / Chawla M. M., Katti C. P. // BIT Numer. Math. – March 1980. – Vol. 20, № 1. – P. 107-109.

83. Chen H. The quadrature discretization method (QDM) in the solution of the Schrödinger equation / Chen H., Shizgal B. D. // J. Math. Chem. – December 1998. – Vol. 24, № 4. – P. 321–343.

84. Chen H. A spectral solution of the Sturm–Liouville equation: comparison of classical and nonclassical basis sets / Chen H., Shizgal B. D. // J. Comp. & Appl. Math. – November 2001. – Vol. 136, № 1-2. – P. 17–35.

85. COMSOL Multiphysics. Multiphysics Software Product Suite [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.comsol.com/products (дата звернення: 05.09.15).

86. Collected Algorithms (CALGO), ACM. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://netlib.org/toms/ (дата звернення: 05.09.15).

87. Computer Physics Communications Program Library. Programs in Physics & Physical Chemistry. adqf_v1_0.gz [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADQF (дата звернення: 05.09.15).

88. Computer Physics Communications Program Library. Programs in Physics & Physical Chemistry. aeon_v1_0.tar.gz [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEON_v1_0.html (дата звернення: 05.09.15).

89. Computer Physics Communications Program Library. Programs in Physics & Physical Chemistry. adjv_v1_0.gz [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADJV_v1_0.html (дата звернення: 05.09.15).

90. Dähnn J. Anwendung eines direkten Verfahrens zur numerischen Behandlung von selbstadjungierten, positiv definiten Eigenwertaufgaben bei linearen gewöhnlichen Differentialgleichungen mit stückweise stetigen Koeffizientenfunktionen / Dähnn J. // ZAMM – J. Appl. Math. & Mech. – 1982. – Vol. 62, № 12. – P. 687-695.

91. Dwyer H. I. Computing Eigenvalues of Regular Sturm-Liouville Problems [Електронний ресурс] / Dwyer H. I., Zettl A. // El.J. Diff. Eq. – 1994. – Vol. 1994, №06. – P. 1–10. – Режим доступу: http://ejde.math.txstate.edu/Volumes/1994/06/Dwyer.pdf (дата звернення: 05.09.15).

92. Dwyer H. I. Eigenvalue Computations for Regular Matrix Sturm-Liouville Problems [Електронний ресурс] / Dwyer H. I., Zettl A. // El. J. Diff. Eq. – 1995. – Vol. 1995, №05. – P. 1–13. – Режим доступу: http://ejde.math.txstate.edu/Volumes/1995/05/Dwyer.pdf (дата звернення: 05.09.15).

93. El-Daou M. K. Exponentially weighted Legendre–Gauss Tau methods for linear second-order differential equations / El-Daou M. K. // Comp. & Math. Appl. – July 2011. – Vol. 62, № 1. – P. 51–64.

94. El-Daou M. K. An improved Tau method for a class of Sturm–Liouville problems / El-Daou M. K., Al-Matar N. R. // Appl. Math. & Comp. – June 2010. – Vol. 216, № 7. – P. 1923-1937.

95. Djakova P. Simple and double eigenvalues of the Hill operator with a two-term potential / Djakova P., Mityagin B. // J. Appr. Th. – July 2005. – Vol. 135, № 1. – P. 70–104.

96. Duman M. Asymptotic expansions for the Sturm–Liouville problem by homotopy perturbation method / Duman M. // Appl. Math. & Comp. – March 2010. – Vol. 216, № 2. – P. 492-496.

97. Eastham M. S. P. Using the SLEDGE Package on Sturm-Liouville Problems Having Nonempty Essential Spectra / Eastham M. S. P., Fulton Ch. T., Pruess S. // ACM Trans. Math. Softw. – 1996. – Vol. 22, №4. – P. 423-446.

98. Ewa B. Weinmüller. Numerics and Simulation of Differential Equations [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.asc.tuwien.ac.at/~ewa/ (дата звернення: 05.09.15).

99. Fulton C. A user's guide to the subroutine SPDNSF / C. Fulton, S. Pruess // Proceedings of the Focused Research Program on Spectral Theory and Boundary Value Problems. Argonne National Laboratory Mathematical and Computer Sciences. — 1989. – Vol. 504. – P. 77-102.

100. Gavrilyuk I. P. Exponentially convergent parallel algorithm for nonlinear eigenvalue problems [Електронний ресурс] / Gavrilyuk I. P., Klimenko A. V., Makarov V. L., Rossokhata N. O. // 2007. – P. 1-21. – Режим доступу: http://imajna.oxfordjournals.org/content/early/2007/01/27/imanum.drl042.short (дата звернення: 05.09.15).

101. Gavrilyuk I. P. Super-exponentially convergent parallel algorithm for eigenvalue problems in Hilbert spaces / Gavrilyuk I. P., Makarov V. L. // Intern. conf. «Diff. eq. & appl. (DETA 2009)» [ed. V. Kleiza, S. Rutkauskas, A. Stikonas], September 10-12, 2009, Panevezys, Lithuania, Kaunas university of technology Panevezys institute, Vilnius university, Institute of mathematics and informatics. – Kaunas, Technologija, 2009. – P. 86-92.

102. Gavrilyuk I. P. Super-exponentially convergent parallel algorithm for eigenvalue problems for the fourth order ODE's / Gavrilyuk I. P., Makarov V. L., Popov A. M. // J. Numer. & Appl. Math. – 2010. – Vol. 100, № 1. – P. 60-81.

103. 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. – P. 332-356.

104. Ghelardoni P. Approximations of Sturm–Liouville eigenvalues using boundary value methods / Ghelardoni P. // Appl. Numer. Math. – May 1997. – Vol. 23, № 3. – P. 311-325.

105. Ghelardoni P. Spectral corrections for Sturm-Liouville problems / Ghelardoni P., Gheri G., Marletta M. // J. Comp. & Appl. Math. – July 2001. – Vol. 132, № 2. – P. 443–459.

106. Gladwell I. The development of the boundary-value codes in the ordinary differential equations chapter of the NAG library / Gladwell I. // Codes for Boundary-Value Problems in Ordinary Differential Equations. Ser. Lect. Not. Comp. Sci.; ed. Childs B. and all. – Berlin Heidelberg: Springer, 1979. – Vol. 76. – P. 122-143.

107. Gladwell I. The NAG Library Ordinary Differential Equations Chapter and Short Term Plans for Its Extension / Gladwell I. // ACM, SIGNUM Newsl. – 1985. – Vol. 20, №3. – P. 35-40.

108. Gordon R. G. New Method for Constructing Wave functions for Bound States and Scattering / Gordon R. G. // J. Chem. Phys.– May 1969. – Vol. 51, № 1. – P. 14-25.

109. Gottlieb D. Numerical analysis of spectral methods: theory and applications / Gottlieb D., Orszag S. A. –SIAM, Montpelier, Vermont.: Capital City Press, (Sixth printing) 1993. – P.V+171

110. Greenberg L. Oscillation theory and numerical solution of fourth-order Sturm—Liouville problems / L. Greenberg, M. Marletta // IMA J. Numer. Anal. – 1995. – Vol. 15, № 3. – P. 319-356.

111. Greenberg L. Oscillation Theory and Numerical Solution of Sixth Order Sturm-Liouville Problems / L. Greenberg, M. Marletta // SIAM J. Numer. Anal. – October 1998. – Vol. 35, № 5. – P. 2070–2098.

112. Greenberg L. Numerical methods for higher order Sturm–Liouville problems / L. Greenberg, M. Marletta // J. Comp. & Appl. Math. – December 2000. – Vol. 125, № 1-2. – P. 367-383.

113. Guo B. Y. Some progress in spectral methods / Guo B. Y. // Sci. Ch. Math. – December 2013. – Vol. 56, № 12. – P. 2411-2438.

114. Han S. Dynamics of transversely vibrating beams using four engineering theories / Han S., Benaroya H., Wei T. // J. Sound and Vibration. – 1999. – Vol. 225, № 5. – P. 935–988.

115. Hammerling R. Numerical Solution of Singular Eigenvalue Problems for ODEs with a Focus on Problems Posed on Semi-Infinite Intervals [Електронний ресурс] / R. Hammerling, O. Koch, Ch. Simon, E. Weinmüller. — Austria, ASC Preprint, 2010. – P. 95. – Режим доступу: http://www.asc.tuwien.ac.at/ ewa/PDF_Files/NumSolEVPs.pdf (дата звернення: 31.08.2015).

116. Hargrave B. A. Numerical Approximation of Eigenvalues of Sturm-Liouville Systems / Hargrave B. A. // J. Comp. Phys. – April 1976. – Vol. 20, № 4. – P. 381–396.

117. He J.-H. Variational iteration method – a kind of non-linear analytical technique: some examples / He J.-H. // Int. J. Non-Lin. Mech. – July 1999. – Vol. 34, № 4. – P. 699–708.

118. He J.-H. Homotopy perturbation technique / He J.-H. // Comp. Methods Appl. Mech. & Eng. – August 1999. – Vol. 178, № 3-4. – P. 257–262.

119. He J.-H. Variational iteration method—Some recent results and new interpretations / He J.-H. // J. Comp. & Appl. Math. – October 2007. – Vol. 207, № 1. – P. 3–17.

120. Spectral Theory and Computational Methods of Sturm–Liouville Problems / ed. Hinton D., Schaefer P. W. – New York, Basel, Hong Kong: Marcel Dekker Inc., 1997. – P. VIII+400.

121. Jung-Chang Hsu. An Innovative Eigenvalue Problem Solver by Using Adomian Decomposition Approach / Jung-Chang Hsu, Shao-Shu Chu // Adv. Mater. Res. – January 2012. – Vols. 433-440. – P. 6742-6750.

122. Huang Ch.-Ch. Semiconductor nanodevice simulation by multidomain spectral method with Chebyshev, prolate spheroidal and Laguerre basis functions / Huang Ch.-Ch. // Comp. Phys. Comm. -– 2009. – Vol. 180, № 3. – P. 375–383.

123. Irandoust-pakchin S. Homotopy Analysis Method for Computing Eigenvalues of Sturm-Liouville Problems / Irandoust-pakchin S., Ahmadian D. // Int. J. Nonlin. Sci. – 2015. – Vol. 19, № 2. – P. 100-106.

124. Ixaru L. Gr. CP methods for the Schrödinger equation revisited / Ixaru L. Gr., De Meyer H., Vanden Berghe G. // J. Comp. Appl. Math. – 1997. – Vol. 88. – P. 289-314.

125. Ixaru L. Gr. SLCPM12 – A program for solving regular Sturm-Liouville problems / Ixaru L. Gr., De Meyer H., Vanden Berghe G. // Comp. Phys. Commun. – 1999. – Vol. 118, № 2. – P. 259-277.

126. Ixaru L. Gr. CP methods for the Schrödinger equation / Ixaru L. Gr. // J. Comp. & Appl. Math. – 2000. – Vol. 125, № 1-2. – P. 347-357.

127. Ixaru L. Gr. LILIX – A package for the solution of the coupled channel Schrödinger equation / Ixaru L. Gr. // Comput. Phys. Commun. – 2002. – Vol. 147, № 3. – P. 834–852.

128. Jafari M. A. Homotopy Perturbation Method for Computing Eigenelements of Sturm-Liouville Two Point Boundary Value Problems / Jafari M. A., Aminataei A. // Appl. Math. Sci. – 2009. – Vol. 3, № 3. – P. 1519-1524.

129. Kozlov V. Theory of a higher order Sturm-Liouville equation / V. Kozlov, V. Maz'ya; ed. A. Dold, F. Takens. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1997. – P. XI+140.

130. Kravchenko V. V. Modified spectral parameter power series representations for solutions of Sturm–Liouville equations and their applications / Kravchenko V. V., Torba S. M. // Appl. Math. & Comp. – July 2014. – Vol. 238. – P. 82-105.

131. Kravchenko V. V. Analytic approximation of transmutation operators and applications to highly accurate solution of spectral problems / Kravchenko V. V., Torba S. M. // J. Comp. & Appl. Math. – 2015. – Vol. 275. – P. 1–26.

132. Liao Sh. The proposed homotopy analysis technique for the solution of nonlinear problems: Ph.D. Thesis / Liao Sh.; Shanghai Jiao Tong Univ., 1992.

133. Ledoux V. CP methods of higher order for Sturm-Liouville and Schrodinger equations / Ledoux V., Van Daele M., Vanden Berghe G. // Comput. Phys. Commun. – 2004. – Vol. 162, № 3. – P. 151-165.

134. Ledoux V. MATSLISE: A MATLAB Package for the Numerical Solution of Sturm-Liouville and Schrödinger Equations/ V. Ledoux, M. Van Daele, G. Vanden Berghe // ACM Trans. Math. Soft. — December 2005. — Vol. 31, № 4. – P. 532-554.

135. Ledoux V. Solution of the Schrödinger equation by a high order perturbation method based on a linear reference potential / Ledoux V., Rizea M., Ixaru L., Vanden Berghe G., Van Daele M. // Comput. Phys. Commun. – 2006. – Vol. 175, № 6. – P. 424–439.

136. Ledoux V. Study of Special Algorithms for Solving Sturm-Liouville and Schrödinger Equations: Ph.D. Thesis/ V. Ledoux; Depart. Appl. Math. & Comp. Sci.; Ghent University, 2007. - P. 223.

137. Ledoux V. A numerical procedure to solve the multichannel Schrödinger eigenvalue problem / Ledoux V., Van Daele M., Vanden Berghe G. // Comp. Phys. Comm. – 2007. – Vol. 176, № 3. – P. 191-199.

138. Ledoux V. Eigenvalue problem for a coupled channel Schrödinger equation with application to the description of deformed nuclear systems / V. Ledoux, M. Rizea, M. Van Daele, G. Vanden Berghe, I. Silisteanu // J. Comp. & Appl. Math. – 2009. – Vol. 228, № 1. – P. 197-211.

139. Ledoux V. Solution of Sturm–Liouville Problems Using Modified Neumann Schemes / V. Ledoux, M. Van Daele // SIAM J. Sci. Comp. – 2010. – Vol. 32, № 2. – P. 563-584.

140. Ledoux V. Automatic computation of quantum-mechanical bound states and wavefunctions / Ledoux V., Van Daele M. // Comp. Phys. Commun. – 2013. – Vol. 184, № 4. – P. 1287-1296.

141. Lesnic D. An Efficient Method for Sixth-order Sturm-Liouville Problems / Lesnic D., Attili B. S. // Int. J. Sci. & Techn. – 2007. – Vol. 2, № 2. – P. 109-114.

142. Levitan B. M. Sturm-Liouvi1le and Dirac operators / Levitan B. M., Sargsjan I. S.; ed. Kirillov A. A. and al. – Dordrecht: Kluwer Acad. Publ. (Ser. Math. & appl. (Soviet series), 1991. – Vol. 59. – P. XI+350.

143. Lo J. Q. W. Pseudospectral methods of solution of the Schrödinger equation / Lo J. Q. W., Shizgal B. D. // J. Math. Chem. – October 2008. – Vol. 44, № 3. – P. 787-801.

144. Lützen J. Sturm and Liouville's work on ordinary linear differential equations. The emergence of Sturm-Liouville theory / Lützen J. // Arch. Hist. Exact Sci. – 1984. – Vol. 29, № 4. – P. 309-376.

145. Makarov V. L. The FD-method for first-order linear hyperbolic differential equations with piecewise smooth coefficients / V. L. Makarov, V. V. Vinokur // J. Math. Sci. – 1995. – Vol. 77, № 5. – P. 3399-3405.

146. Makarov V. L. FD-method for Sturm-Liouville Problems. Exponential Rate of Convergence/ V. L. Makarov, O. L. Ukhanev // Appl. Math. & Inf. – Tbilisi University Press. – 1997. – Vol. 2. – P. 1-19.

147. 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.

148. Makarov V. L. An exponentially convergent functional-discrete method for solving Sturm-Liouville problems with a potential including the Dirac δ-function / V. L. Makarov, N. O. Rossokhata, D. V. Dragunov // J. Comput. Appl. Math. – 2013. – № 250. – P. 39-57.

149. Marasi H. R. The Adomian Decomposition Method For Boundary Eigenvalue Problems / Marasi H. R., Nikbakht M. // Austr. J. Bas. & Appl. Sci. – December 2011. – Vol. 5, № 12. – P. 2106-2111.

150. Marchenko V. A. Sturm–Liouville operators and applications / V. A. Marchenko; Oper. Th.: Adv. & Appl. – Bas., Bost., Stutt.: Birkhäuser Verlag, Vol. 22, 1986. – P. 367.

151. Marletta M. Automatic solution of Sturm-Liouville problems using the Pruess method/ M. Marletta, J. D. Pryce. // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 1992. – Vol. 39, № 1. – P. 57-78.

152. Marletta M. Automatic solution of regular and singular vector Sturm-Liouville problems / Marletta M. // Numer. Algor. – 1993. – Vol. 4, № 1. – P. 65-99.

153. Marletta M. Numerical solution of eigenvalue problems for Hamiltonian systems / Marletta M. // Numer. Algor. – 1994. – Vol. 2, № 2. – P. 155-184.

154. Marletta M. Algorithm 775: The Code SLEUTH for Solving Fourth-Order Sturm-Liouville Problems / M. Marletta, L. Greenberg // ACM Trans. Math. Soft. – December 1997. – Vol. 23, № 4. – P. 453–493.

155. The NAG Fortran Library Manual, Mark 20 [Електронний ресурс]. – Режим доступу: URL: http://www.nag.co.uk/numeric/fl/manual20/html/mark20.html (дата звернення: 05.09.15).

156. Neamaty A. Comparison between the variational iteration method and the homotopy perturbation method for the Sturm-Liouville differential equation / Neamaty A., Darzi R. // Bound. Value Probl. – 2010. – Vol. 2010, № 1. – P. 1687-2770.

157. NIST Digital Library of Mathematical Functions [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://dlmf.nist.gov (дата звернення 05.09.2015р.)

158. Paine J. W. Numerical approximation of Sturm-Liouville eigenvalue / Paine J. W. // Austral. Math. Soc. – 1980. – Vol. 21. – P. 477-478.

159. Paine J. W. Uniformly valid approximation of eigenvalues of Sturm-Liouville problems in geophysics / Paine J. W., Anderssen R. S. // Geophys. J. R. Astr. Soc. – 1980. – Vol. 63, № 2. – P. 441–465.

160. Paine J. W. On the correction of finite difference eigenvalue approximations for Sturm-Liouville problems / Paine J. W., de Hoog F. R., Anderssen R. S. // Bound. Value Probl. – June 1981. – Vol. 26, № 2. – P. 123-139.

161. Pruess S. Mathematical software for Sturm-Liouville problems / S. Pruess, C. T. Fulton // ACM Trans. Math. Soft. — September 1993. – Vol. 19, № 3. – P. 360-376.

162. Pruess S. Estimating the eigenvalues of Sturm-Liouville problems by approximating the differential equation / Pruess S. // SIAM J. Numer. Anal. – 1973. – Vol. 10, № 1. – P. 55–68.

163. Pryce J. D. Numerical Solution of Sturm-Liouville Problems / Pryce J. D.; Oxford, New York, Tokyo: Clarendon Press, 1993. – P.323.

164. Pryce J. D. Algorithm 789: SLTSTPAK: a test package for Sturm-Liouville solvers/ J. D. Pryce // ACM Trans. Math. Soft. — March 1999. — Vol. 25, № 1. – P. 58-69.

165. Pryce J. D. A Test Package for Sturm-Liouville Solvers/ J. D. Pryce // ACM Trans. Math. Soft. — March 1999. — Vol. 25, №1. – P. 21-57.

166. Rach R. A bibliography of the theory and applications of the Adomian decomposition method, 1961-2011 [Електронний ресурс] / Rach R. — Kybernetes, 2012.– Vol. 41, № 7/8. – Режим доступу: http://www.emeraldinsight.com/doi/abs/10.1108/k.2012.06741gaa.007 (дата звернення: 31.08.2015), DOI: 10.1108/k.2012.06741gaa.007.

167. Rattana A. Matrix Methods for Computing Eigenvalues of Sturm-Liouville Problems of Order Four / Rattana A., Böckmann Ch. // J. Comp. & Appl. Math. – 2013. – Vol. 249. – P. 144–156.

168. Savchuk A. M. Trace Formula for Sturm–Liouville Operators with Singular Potentials [Translated from Matematicheskie Zametki, Vol. 69, №3, 2001, P. 427–442.] / A. M. Savchuk, A. A. Shkalikov // Math. Not. – 2001. – Vol. 69, №3. – P. 387-400.

169. Singh N. Adomian Decomposition Method for Computing Eigen-Values of Singular Sturm–Liouville Problems / Singh N., Kumar M. // Natl. Acad. Sci. Lett. – June 2013. – Vol. 36, № 3. – P. 311-318.

170. Somali S. Adomian decomposition method for nonlinear Sturm-Liouville problems / Somali S., Gokmen G. // Surv. Math. & Appl. – 2007. – Vol. 2. – P. 11-20.

171. Syam M. I. An efficient technique for finding the eigenvalues of fourth-order Sturm–Liouville problems / Syam M. I., Siyyam H. I. // Chaos, Sol. & Fract. – 2009. – Vol. 39, № 2. – P. 659–665.

172. Syam M. I. Adomian Decomposition Method for Computing Eigen-Values of Singular Sturm–Liouville Problems / Syam M. I., Siyyam H. I. // Appl. Math. Sci. – June 2013. – Vol. 5, № 49. – P. 2425-2436.

173. Sturm-Liouville Problems. SLEIGN2 [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.math.niu.edu/SL2/ (дата звернення: 05.09.2015).

174. Taher A. H. S. An efficient algorithm for solving high order Sturm-Liouville problems using variational iteration method / Taher A. H. S., Malek A. // Fix. Point Th. – 2013. – Vol. 14, № 1. – P. 193-210.

175. Taher A. H. S. Semi-analytical Approximation for Solving High-order Sturm-Liouville Problems / Taher A. H. S., Malek A., Thabet A. S. A. // Brit. J. Math. & Comp. Sci. – 2014. – Vol. 4, № 23. – P. 3345-3357.

176. Solution of regular second- and fourth- order Sturm–Liouville problems by exact dynamic stiffness method analogy / [Yuan S., Ye K., Xiao C. and al.] // J. Eng. Math. – June 2014. – Vol. 86, № 1. – P. 157-173.

177. Universiteit Gent. Vakgroep Toegepaste Wiskunde, Informatica en Statistiek. Onderzoek. Numerical Mathematics. The numerical solutions of Sturm-Liouville and Schrödinger equations. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.twist.ugent.be/index.php?page=onderzoek&ot=SLsoftware (дата звернення: 05.09.15).

178. Vanden Berghe G. A modified Numerov method for higher Sturm-Liouville eigenvalues / Vanden Berghe G., De Meyer H. // Int. J. Comput. Math. – 1990. – Vol. 37, № 1-2. – P. 63-77.

179. Vanden Berghe G. Exponentially-fitted Numerov methods / Vanden Berghe G., Van Daele M. // J. Comp. & Appl. Math. – March 2007. – Vol. 200, № 1. – P. 140–153.

180. Weideman J. A. C. Spectral Methods Based on Nonclassical Orthogonal Polynomials / Weideman J. A. C. // Appl. & Comp. Orthog. Polyn. (ser. Int. Ser. Numer. Math.). – 1999. – Vol. 131. – P. 239-251.

181. Weideman J. A. C. Spectral differentiation matrices for the numerical solution of Schrödinger's equation / Weideman J. A. C. // J. Phys. A: Math. Gen. – 2006. – Vol. 39, № 32. – P. 10229–10237.

182. Williams F. W. Application of the Wittrick-Williams algorithm to the Sturm-Liouville problem on homogeneous trees: a structural mechanics analogy / Williams F. W., Howson W. P., Watson A. // Proc. R. Soc. Lond. A: Math., Phys. & Eng. Sci. – May 2004. – Vol. 460. – P. 1243-1268.

183. Zettl A. Sturm-Liouville theory (Mathematical surveys and monographs; Vol. 121)/ Anton Zettl; ed. Bona J. L., Eastwood M. G., Landweber P. S. and al. – USA: AMS, 2005. – P. XI+330.

184. Zhang Zhimin. How Many Numerical Eigenvalues Can We Trust? / Zhang Zhimin // Springer US, J. Sci. Comp. – 2015, First online: 23 December 2014. – Vol. 65, № 2. – P. 455-466.

ДОДАТКИ

Додаток А (до п. 3.1.1)

За допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple 17 знайдено аналітичні вирази для декількох перших поправок згідно з новим алгоритмом FD-методу (з $\bar{q}(x) \equiv 0$) для скалярної задачі Штурма–Ліувілля другого порядку (3.1) з поліноміальним потенціалом $q(x) = \sum_{l=0}^{r} c_l x^l$ та крайовими умовами Діріхле (3.2). Дані вирази ілюструють асимптотичну поведінку поправок $u_n^{(j+1)}(x), j = 0, 1$, та $\lambda_n^{(j+1)}$, $j = 0, 1, 2$ відносно n.

Позначимо через $A^{(j+1)}(x)$, $j = 0, 1$ – добуток деякого тригонометричного многочлена та полінома від змінної x, степінь якого менший, ніж степінь доданків у квадратних дужках. Тоді маємо

$$\lambda_n^{(1)} = \sum_{l=0}^{r} \left(\frac{c_l}{l+1} - \frac{l c_l}{4\pi^2 n^2} + \frac{l(l-1)(l-2)c_l}{16\pi^4 n^4} \right) + \frac{c_1}{4\pi^2 n^2} - \frac{3c_3}{8\pi^4 n^4} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^6}\right),$$

$$u_n^{(1)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\sum_{l=0}^{r} \left(-\frac{c_l\left(x^{l+1} - x\right)}{(l+1)\,\pi\, n} + \frac{c_l l\left(x^{l-1} - x\right)}{4n^3\pi^3} \right) + \frac{c_1\,(x-1)}{4n^3\pi^3} \right] \cos\left(\pi n x\right) +$$
$$+ \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\sum_{l=0}^{r} \left(\frac{c_l\left(x^l\,(l+1) - 1\right)}{(l+1)\,n^2\pi^2} - \frac{c_l l\left((l-1)\,x^{l-2} - 3\right)}{4\pi^4 n^4} \right) - \frac{3c_1}{4\pi^4 n^4} \right] \sin\left(\pi n x\right) +$$
$$+ \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^5}\right) \cdot A^{(1)}(x),$$

$$\lambda_n^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{s=0}^{r} \sum_{p=0}^{r} c_s c_p \left(\frac{1}{n^2\pi^2} \left[\frac{1}{p+s+1} - \frac{1}{(p+1)\,(s+1)} \right] + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{4\pi^4 n^4} \left[-3p - 2s + \frac{ps}{p+s-1} - \frac{(p-2)s}{p+1} + \frac{3p}{s+1} \right] \right) -$$
$$- \frac{3c_1}{8\pi^4 n^4} \sum_{p=0}^{r} \frac{c_p}{p+1} + \frac{5c_0 c_1}{16\pi^4 n^4} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^6}\right),$$

$$u_n^{(2)}(x) = \frac{\sqrt{2}}{4n^2\pi^2} \left[\sum_{p=0}^{r} c_p \left(\frac{-1 + x^{p+2}\,(p+3)}{(p+1)\,(p+3)} - \frac{3x^2 - 1}{6(p+1)} \right) \sum_{l=0}^{r} \frac{c_l}{l+1} - \right.$$

$$-\sum_{s=0}^{r}\sum_{p=0}^{r}\frac{c_s c_p\left(-1+x^{p+s+2}\left(p+s+3\right)\right)}{\left(p+s+3\right)\left(p+s+2\right)\left(p+1\right)}\Bigg]\ \sin\left(\pi n x\right)+$$

$$+\frac{\sqrt{2}}{8n^3\pi^3}\left[\sum_{p=0}^{r}c_p\left(-x+x^{p+1}\right)\left(1+\frac{3}{p+1}\right)\sum_{l=0}^{r}\frac{c_l}{l+1}+\right.$$

$$\left.-\sum_{s=0}^{r}\sum_{p=0}^{r}c_s c_p\left(x^{p+s+1}-x\right)\left(\frac{1}{p+1}+\frac{1}{p+s+1}\right)\right]\cos\left(\pi\, n x\right)+\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^4}\right)\cdot A^{(2)}(x),$$

$$\lambda_n^{(3)}=\frac{1}{16\pi^4 n^4}\left[\sum_{l=0}^{r}c_l l\sum_{m=0}^{r}\sum_{p=0}^{r}\frac{c_m c_p\left(p+m+6\right)pm}{3\left(m+3\right)\left(p+m+3\right)\left(p+1\right)\left(m+1\right)\left(p+3\right)}-\right.$$

$$-\sum_{m=0}^{r}\sum_{s=0}^{r}\sum_{p=0}^{r}c_m c_s c_p\left(\frac{pm\left(m+p+2s+4\right)}{\left(s+3\right)\left(p+m+s+1\right)}\left[\frac{m-2}{\left(m+s+1\right)\left(p+1\right)\left(p+s+3\right)}+\right.\right.$$

$$\left.+\frac{p-2}{\left(m+s+3\right)\left(m+1\right)\left(p+s+1\right)}\right]-\frac{m}{m+1}\left[\frac{p+s}{\left(p+m+s+1\right)\left(p+s+1\right)}-\right.$$

$$\left.\left.-\frac{s}{\left(p+1\right)\left(m+s+1\right)\left(s+1\right)}\right]\right)-\sum_{l=0}^{r}\frac{c_l}{l+1}\sum_{m=0}^{r}\sum_{p=0}^{r}c_m c_p pm\times$$

$$\times\left(\frac{3}{\left(p+1\right)\left(m+1\right)\left(p+m+1\right)}-\frac{1}{3\left(p+1\right)\left(p+3\right)}-\frac{1}{3\left(m+1\right)\left(m+3\right)}\right)+$$

$$+c_1\sum_{l=0}^{r}\frac{c_l}{l+1}\sum_{m=0}^{r}\frac{c_m m\left(m+5\right)}{3\left(m+1\right)\left(m+2\right)\left(m+3\right)}+$$

$$\left.-c_1\sum_{m=0}^{r}\sum_{s=0}^{r}\frac{c_m c_s\left(\left(s^2+8\,s+6\right)m+9\,s\right)}{3\left(m+3\right)\left(s+1\right)\left(m+1\right)\left(s+3\right)\ \left(s+2\right)}\right]+\mathcal{O}\left(\frac{1}{n^6}\right).$$

Додаток В (до п. 1.2): Пакети прикладних програм для розв'язування самоспряжених задач на власні значення типу Штурма-Ліувілля

№	Пакет, кластер підпрограм	Мова коду	Доступ до коду	Публікації	Типи розв'язуваних задач	Реалізовані чисельні методи
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
NAG Fortran Library (абревіатура від Numerical Analysis Group), розділ D02						
1	D02KAF, D02KDF	Fortran77	[155]	[106]	Регулярні ЗШЛ другого порядку	Перетворення Прюфера, метод стрільби
2	D02KEF	Fortran77	[155]	[107]	Регулярні та сингулярні ЗШЛ другого порядку	– // –
CALGO (абревіатура від Collected Algorithms)						
3	SL02F	Fortran77		[151]	Регулярні та сингулярні ЗШЛ другого порядку	Методи Прюса
4	SLEDGE	Fortran77		[97,161]	Регулярні та сингулярні ЗШЛ другого порядку	– // –
5	SLEIGN	Fortran77	[86, file: 700.gz]	[68, 69]	Регулярні та сингулярні ЗШЛ другого порядку	Перетворення Прюфера, метод стрільби (комбінуються метод бісекції та метод Ньютона)
6	SLEIGN2	Fortran77	[173], [86, file: 810.gz]	[70]	– // – (розширився перелік сингулярних задач порівняно із SLEIGN)	– // –

	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
7	SLTSTPAK	Fortran77, Fortran90	[86, file: 789.gz]	[55, с.271-331], [164, 165]	Регулярні та сингулярні ЗШЛ другого порядку.	SL02F, SLEDGE, SLEIGN та SLEIGN2 об'єднано в пакеті SLTSTPAK
8	SLEUTH	Fortran77	[86, file: 775.gz]	[154]	Регулярні ЗШЛ четвертого порядку	Метод стрільби з використанням Тета матриць
JINRLIB (абревіатура від Joint Institute for Nuclear Research Library)						
9	SLIP (SLIP1, SLIPH4, SLIPS2)	Fortran	[16]	[32, 33]	Регулярні та сингулярні ЗШЛ другого порядку з фіксованим номером власної пари (SLIPS2 – для матричних ЗШЛ розмірності 2, SLIPH4 – для скалярних ЗШЛ)	Неперервний аналог методу Ньютона
10	SLIPH4M	Maple	[16]	[9]	Різницеві ЗШЛ другого порядку (застосовано до рівняння Шрьодінгера для молекули водню)	– // –
11	SLIPM	Maple	[16]	[35]	Застосовано до ЗШЛ другого порядку із потенціалом Морзе, рівнянь Лежандра та Віттакера	– // –
CPC Program Library (абревіатура від Computer Physics Communications)						
12	SLCPM12	Fortran77	[89]	[125]	Регулярні ЗШЛ другого порядку	Перетворення Ліувілля, CPM[12,10]
13	LILIX	Fortran77	[87]	[127]	Матричні ЗШЛ з рівнянням у формі Шрьодінгера	CPM шостого порядку

	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
Vakgroep Toegepaste Wiskunde, Informatica en Statistiek, Universiteit Gent						
14	MATSLISE, MATSLI-SE_AD	Matlab	[177]	[133, 134, 136]	Регулярні ЗШЛ у формі Шрьодінгера	CPM[P,N] та LPM[P,N] високого порядку
15	lpm42ws.f, params.dat	Fortran77	[177]	[135]	Регулярні ЗШЛ другого порядку у формі Шрьодінгера	LPM[4,2]
16	LPMmatlab	Matlab	[177]	– // –	– // – Застосовано до ЗШЛ у формі Шрьодінгера з потенціалами «Woods-Saxon, Paine, Mathieu»	– // –
17	MATSCS	Matlab	[177]	[137]	Регулярні матричні ЗШЛ другого порядку у формі Шрьодінгера	CPM[P,N] високого порядку в процесі стрільби
18	MATCAS (належить до **CPC Program Library**)	Matlab	[88, 177]	[140]	Регулярні матричні ЗШЛ другого порядку у формі Шрьодінгера	– // –
19	sysper.f, sysdop.f, sys.inp, params	Fortran	[177]	[138]	Матричні ЗШЛ другого порядку у формі Шрьодінгера	– // –
20	MATSLEMN	Matlab	[177]	[139]	ЗШЛ другого порядку	Модифікований метод Ноймана шостого порядку, метод стрільби
21	bvpsuite	Matlab	[98]	[115]	Регулярні і сингулярні ЗШЛ	Метод колокації

	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
22	SL09F, SL10F	Fortran77		[152]	Регулярні і сингулярні векторно-матричні ЗШЛ другого порядку	Метод стрільби з використанням Тета матриць
23	SL11F, SL12F	Fortran77		[153]	Регулярні і сингулярні векторно-матричні ЗШЛ другого порядку, що зводяться до Гамільтонової системи	Метод стрільби з використанням Тета матриць, SL12F додатково використовує методи Прюса