

**ТОЧНІ І НАБЛИЖЕНІ РОЗВ'ЯЗКИ СПЕКТРАЛЬНИХ ЗАДАЧ
ДЛЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА ШРЬОДІНГЕРА
З ПОЛІНОМІАЛЬНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ У \mathbb{R}^k , $k \geq 2$**

В. Л. Макаров

*Ин-т математики НАН України
вул. Терещенківська, 3, Київ, 01004, Україна
e-mail: makarov@imath.kiev.ua*

We consider spectral problems for a Schrödinger operator with polynomial potentials on \mathbb{R}^k , $k \geq 2$. By using a functional-discrete (FD-) method and the computer algebra system Maple, we find exact values of a number of smallest eigenvalues for potentials of a particular form. In the case where the traditional FD-method is divergent (the degree of the polynomial potential exceeds 2 in any variable) we propose a modification of the method, which is rather effective for the class of problems under consideration. The obtained theoretical results are illustrated with numerical examples.

Розглянуто спектральні задачі для оператора Шррьодінгера з поліноміальними потенціалами у \mathbb{R}^k , $k \geq 2$, і за допомогою функціонально-дискретного (FD-) методу та системи комп'ютерної алгебри Maple знайдено ряд точних найменших власних значень для потенціалів конкретного вигляду. У випадку, коли традиційний FD-метод є розбіжним (ступінь поліноміального потенціалу хоча б по одній із незалежних змінних перевищує 2), запропоновано його модифікацію, яка виявилася досить ефективною для розглядуваного класу задач. Отримані теоретичні результати проілюстровано на чисельних прикладах.

1. Вступ. Проблемі знаходження точних і наближених розв'язків спектральних задач для оператора Шррьодінгера з поліноміальним потенціалом присвячено багато робіт (див. [1–4] і наведену там бібліографію). Але у цих роботах, крім роботи [5], автори розглядали або одновимірний випадок, або такі, які за рахунок симетрії зводились до звичайного диференціального оператора і саме його досліджували в [4]. У даній роботі розглянуто суттєво двовимірний та тривимірний випадки оператора Шррьодінгера з поліноміальним потенціалом. Для потенціалів конкретного вигляду за допомогою функціонально-дискретного (FD-) методу (варіанту методу гомотопій [6, 7]) і системи комп'ютерної алгебри (с. к. а.) Maple знайдено ряд точних найменших власних значень. При цьому доведено, що відносно власних функцій метод є збіжним, а відносно власних значень — експоненціально збіжним. У випадку, коли традиційний FD-метод є розбіжним (ступінь поліноміального потенціалу хоча б по одній із змінних перевищує 2), запропоновано його модифікацію, яка виявилася досить ефективною для розглядуваного класу задач. Суттєву роль у даній роботі відіграло систематичне застосування символної алгоритмізації FD-методу. Першими роботами з цією ідеологією були [8–11], які показали її перспективність.

Робота складається із вступу і шести пунктів. Пункти 2–4 присвячено знаходженню точних найменших власних значень у двовимірному випадку за допомогою найпростішого варіанту FD-методу. Результати цих пунктів частково було анонсовано у статті [12]. У пункті 5 наведено умови існування точних розв'язків спектральних задач для оператора

Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом у двовимірному випадку, а також сформульовано гіпотезу про збіжність та розбіжність FD-методу в залежності від значень коефіцієнтів поліноміального потенціалу та його степенів по обох змінних. Вірогідність гіпотези проілюстровано чисельними прикладами. Пункт 6 присвячено знаходженню точних розв'язків розглядуваного класу спектральних задач у тривимірному випадку. Завершальний пункт 7 містить виклад модифікованого FD-методу, коли найпростіший його варіант є розбіжним.

2. Двовимірний випадок $n = 0$. Розглянемо спектральну задачу

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda - x^2 - y^2 - q(x, y)) u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad (1)$$

$$\iint_{\mathbb{R}^2} u^2(x, y) dx dy < \infty.$$

При $q(x, y) \equiv 0$ розв'язок задачі (1) має вигляд

$$u_n(x, y) = \exp\left(-\frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2}\right) H_{n_1}(x) H_{n_2}(y), \quad \lambda_n = 2n, \quad n_1 + n_2 = n,$$

і власні функції містять окремий випадок поліномів Ерміта від двох змінних (див. формулу (10) у [13, с. 273]).

У цьому пункті розглянемо задачу (1) при

$$q(x, y) = xy \quad (2)$$

і для знаходження її точного розв'язку застосуємо найпростіший варіант FD-методу [14, 15] (варіант методу гомотопії) у поєднанні з аналітикою, пов'язаною з початковою задачею (1). Випадок такого потенціалу у роботі [5] не розглядався. Зауважимо, що заміною незалежних змінних задачу (1) можна звести до такої, де змінні розділяються. Але метою даної статті є розробка обґрунтованого символічного алгоритму для одержання точного або наближеного (з гарантованою точністю) розв'язку розглядуваної задачі у суто двовимірному випадку, що і буде наведено нижче у цьому пункті та у пунктах 3, 4.

Наближення до розв'язку задачі (1), (2) (до власної пари $\lambda_n, u_n(x, y)$) згідно з FD-методом m -го рангу шукаємо у вигляді усічених рядів

$$\lambda_n^m = \sum_{j=0}^m \lambda_n^{(j)}, \quad u_n^m(x, y) = \sum_{j=0}^m u_n^{(j)}(x, y),$$

члени яких $\lambda_n^{(j)}$ та $u_n^{(j)}(x, y)$ знаходяться із наведеної нижче рекурентної послідовності задач (3)–(6). Введено в даному пункті термінологію будемо використовувати далі в роботі.

За базову візьмемо задачу

$$\frac{\partial^2 u_n^{(0)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_n^{(0)}(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda_n^{(0)} - x^2 - y^2) u_n^{(0)}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad (3)$$

власні функції якої виражаються через поліноми Ерміта

$$u_n^{(0)}(x, y) = \exp\left(-\frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2}\right) H_{n_1}(x)H_{n_2}(y) \equiv h_{n_1, n_2}(x, y), \quad n_1 + n_2 = n, \quad (4)$$

з відповідними власними значеннями

$$\lambda_n^{(0)} = 2(n_1 + n_2) + 2. \quad (5)$$

У цьому пункті будемо розглядати випадок $n = 0$. Тоді рекурентна схема FD-методу з $\bar{q}(x, y) \equiv 0$ матиме вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_0^{(j+1)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_0^{(j+1)}(x, y)}{\partial y^2} - (x^2 + y^2) u_0^{(j+1)}(x, y) = \\ = - \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j+1-p)} u_0^{(p)}(x, y) + xy u_0^{(j)}(x, y) \equiv F_0^{(j+1)}(x, y), \end{aligned} \quad (6)$$

$$(x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad j = 0, 1, \dots$$

Із використанням рекурентного співвідношення для поліномів Ерміта [13]

$$xH_n(x) = \frac{1}{2} H_{n+1}(x) + nH_{n-1}(x)$$

доводиться наступне твердження про зображення розв'язку кожної із задач (6).

Лема 1. Для розв'язку задачі (6) має місце зображення

$$u_0^{(j)}(x, y) = \sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j a_{k,s}^{(j)} h_{k,s}(x, y), \quad a_{0,0}^{(j)} = \delta_{0,j}. \quad (7)$$

Підстановка (7) у (6) приводить до співвідношень

$$\begin{aligned} - \sum_{k=0}^{j+1} \sum_{s=0}^{j+1} a_{k,s}^{(j+1)} (2k + 2s) h_{k,s} = - \sum_{p=0}^j \lambda_0^{(j+1-p)} \sum_{k=0}^p \sum_{s=0}^p a_{k,s}^{(p)} h_{k,s} + \\ + \sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j a_{k,s}^{(j)} \left(\frac{1}{4} h_{k+1,s+1} + \frac{1}{2} kh_{k-1,s+1} + \frac{1}{2} sh_{k+1,s-1} + ksh_{k-1,s-1} \right) \end{aligned}$$

або, після нескладних перетворень,

$$\begin{aligned}
 -\sum_{k=0}^{j+1} \sum_{s=0}^{j+1} a_{k,s}^{(j+1)} (2k+2s) h_{k,s} &= -\sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j h_{k,s} \sum_{p=\max(k,s)}^j a_{k,s}^{(p)} \lambda_0^{(j+1-p)} + \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{j+1} \sum_{s=1}^{j+1} a_{k-1,s-1}^{(j)} h_{k,s} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{j-1} \sum_{s=1}^{j+1} a_{k+1,s-1}^{(j)} (k+1) h_{k,s} + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j+1} \sum_{s=0}^{j-1} a_{k-1,s+1}^{(j)} (s+1) h_{k,s} + \sum_{k=0}^{j-1} \sum_{s=0}^{j-1} a_{k+1,s+1}^{(j)} (k+1)(s+1) h_{k,s}. \quad (8)
 \end{aligned}$$

З (8), прирівнюючи до нуля коефіцієнт у правій частині при $h_{0,0}$, безпосередньо знаходимо

$$\lambda_0^{(j+1)} = a_{1,1}^{(j)}. \quad (9)$$

Подальший аналіз (8) показує, що правильними є співвідношення

$$a_{2k+1,2s+1}^{(2j)} = 0, \quad a_{2k,2s}^{(2j-1)} = 0, \quad k, s = 0, 1, \dots, j-1, \quad (10)$$

які дозволяють провести уточнення формули (9), а саме,

$$\lambda_0^{(2j)} = a_{1,1}^{(2j-1)}, \quad \lambda_0^{(2j-1)} = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

Замінивши j на $2j-1$ у (8) та використавши формули (10), будемо мати

$$\begin{aligned}
 -\sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j a_{2k,2s}^{(2j)} (4k+4s) h_{2k,2s} &= -\sum_{k=0}^{j-1} \sum_{s=0}^{j-1} h_{2k,2s} \sum_{p=\max(k,s)}^{j-1} a_{2k,2s}^{(2p)} \lambda_0^{(2j-2p)} + \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^j \sum_{s=1}^j a_{2k-1,2s-1}^{(2j-1)} h_{2k,2s} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{j-1} \sum_{s=1}^j a_{2k+1,2s-1}^{(2j-1)} (2k+1) h_{2k,2s} + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^j \sum_{s=0}^{j-1} a_{2k-1,2s+1}^{(2j-1)} (2s+1) h_{2k,2s} + \\
 &+ \sum_{k=0}^{j-1} \sum_{s=0}^{j-1} a_{2k+1,2s+1}^{(2j-1)} (2k+1)(2s+1) h_{2k,2s}, \quad (11)
 \end{aligned}$$

звідки випливають співвідношення

$$\begin{aligned}
 a_{1,2j-1}^{(2j-1)} &= -8ja_{0,2j}^{(2j)}, \quad j = 1, 2, \dots, \\
 \frac{1}{4} a_{2j-1,2j-1}^{(2j-1)} &= -8ja_{2j,2j}^{(2j)}, \quad j = 1, 2, \dots, \\
 -4(k+s)a_{2k,2s}^{(2j)} &= - \sum_{p=\max(k,s)}^{j-1} a_{2k,2s}^{(2p)} \lambda_0^{(2j-2p)} + \frac{1}{4} a_{2k-1,2s-1}^{(2j-1)} + \frac{(2s+1)}{2} a_{2k-1,2s+1}^{(2j-1)} + \\
 &+ \frac{(2k+1)}{2} a_{2k+1,2s-1}^{(2j-1)} + (2k+1)(2s+1) a_{2k+1,2s+1}^{(2j-1)}, \quad k, s = 1, 2, \dots, j-1, \\
 -2 \sum_{p=s}^{j-1} a_{0,2s}^{(2p)} \lambda_0^{(2j-2p)} &+ a_{1,2s-1}^{(2j-1)} + 2(2s+1) a_{1,2s+1}^{(2j-1)} + 8s a_{0,2s}^{(2j)} = 0, \quad s = 1, 2, \dots, j-1.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Замінивши j на $2j$ у (8) та використавши формули (10), отримаємо

$$\begin{aligned}
 - \sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j a_{2k+1,2s+1}^{(2j+1)} (4k+4s+4) h_{2k+1,2s+1} &= \\
 = - \sum_{k=1}^j \sum_{s=1}^j h_{2k-1,2s-1} \sum_{p=\max(k,s)}^j a_{2k-1,2s-1}^{(2p-1)} \lambda_0^{(2j-2p+2)} &+ \\
 + \frac{1}{4} \sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j a_{2k,2s}^{(2j)} h_{2k+1,2s+1} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^j \sum_{s=0}^j a_{2k,2s}^{(2j)} 2k h_{2k-1,2s+1} &+ \\
 + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^j \sum_{s=1}^j a_{2k,2s}^{(2j)} 2s h_{2k+1,2s-1} + \sum_{k=1}^j \sum_{s=1}^j a_{2k,2s}^{(2j)} (2k2s) h_{2k-1,2s-1}, &
 \end{aligned}$$

звідки випливають співвідношення

$$\begin{aligned}
 -4(2j+1) a_{2j+1,2j+1}^{(2j+1)} &= \frac{1}{4} a_{2j,2j}^{(2j)}, \quad j = 0, 1, \dots, \\
 -4(k+s-1) a_{2k-1,2s-1}^{(2j+1)} &= - \sum_{p=\max(k,s)}^j a_{2k-1,2s-1}^{(2p-1)} \lambda_0^{(2j-2p+2)} + \frac{1}{4} a_{2k-2,2s-2}^{(2j)} + \\
 &+ k a_{2k,2s-2}^{(2j)} + s a_{2k-2,2s}^{(2j)} + 4k s a_{2k,2s}^{(2j)}, \quad k, s = 1, 2, \dots, j, \tag{13} \\
 \sum_{s=1}^j \left[8(j+s) a_{2j+1,2s-1}^{(2j+1)} + \frac{1}{2} a_{2j,2s-2}^{(2j)} + 2s a_{2j,2s-2}^{(2j)} \right] &= 0, \quad s = 1, 2, \dots
 \end{aligned}$$

Експерименти із с. к. а. Марле дали можливість визначити такі аналітичні формули:

$$\begin{aligned}
 \lambda_0^{(2j)} &= a_{1,1}^{(2j-1)} = -\frac{(4j-3)!!}{(2j)!2^{4j-1}}, \\
 a_{2,0}^{(2j)} &= a_{0,2}^{(2j)} = \frac{(4j-1)!!}{(2j+1)!2^{4j+2}}, \\
 a_{1,3}^{(2j+1)} &= a_{3,1}^{(2j+1)} = -\frac{(4j+1)!!}{(2j+3)!} \frac{j}{2^{4j+4}}, \\
 a_{2j-2k,2j}^{(2j)} &= a_{2j,2j-2k}^{(2j)} = \frac{1}{k!(2j-2k)!2^{8j-k}}, \quad k = 0, 1, \dots, j, \\
 a_{2j-2,2j-2}^{(2j)} &= \frac{j+1}{(2j-3)!2^{8j-3}}, \quad a_{2j-4,2j-2}^{(2j)} = \frac{-124j^2 + 17j + 90}{3!(2j-3)!2^{8j-2}}, \\
 a_{2j+1-2k,2j+1}^{(2j+1)} &= a_{2j+1,2j+1-2k}^{(2j+1)} = -\frac{1}{k!(2j+1-2k)!2^{8j+4-k}}, \quad k = 0, 1, \dots, j, \\
 a_{2j-1,2j-1}^{(2j+1)} &= -\frac{2j+3}{(2j-2)!2^{8j+2}}, \quad a_{2j-3,2j-1}^{(2j+1)} = a_{2j-1,2j-3}^{(2j+1)} = -\frac{28j^2 + 31j - 30}{3!(2j-2)!2^{8j+2}}.
 \end{aligned} \tag{14}$$

Повернемось до задачі (1), (2), розв'язок якої будемо шукати у вигляді

$$u(x, y) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} a_{k,s} h_{k,s}(x, y), \quad a_{0,0} = 1. \tag{15}$$

Проведені експерименти свідчать про те, що FD-метод є збіжним і збігається до подвійного ряду (15). Свідченням цього є поведінка норми нев'язки

$$\|r_m\| = \left[\sum_{k,s=0}^m \left(\frac{\partial^2 r_m}{\partial h_{k,x} \partial h_{s,y}} \right)^2 2^{k+s} k! s! \right]^{1/2}, \tag{16}$$

значення якої для різних рангів m наведено у табл. 1. При цьому в (16) нев'язка FD-методу m -го рангу має вигляд

$$\begin{aligned}
 r_m(x, y) &= \sum_{k=0}^m \sum_{s=0}^m \left(-2k - 2s - 2 + \lambda_0 \right) \times \\
 &\times \sum_{j=\max(k,s)}^m a_{k,s}^{(j)} h_{k,x} h_{s,y} - \sum_{k=0}^m \sum_{s=0}^m \left(-2k - 2s - 2 + \lambda_0 \right) \times \\
 &\times \sum_{j=\max(k,s)}^m a_{k,s}^{(j)} \left(\frac{1}{2} h_{k+1,x} + k h_{k-1,x} \right) \left(\frac{1}{2} h_{s+1,y} + s h_{s-1,y} \right), \\
 h_{k,s}(x, y) &= h_{k,x} h_{s,y}.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Таблиця 1

m	$\ r_m\ $
2	0.7077888940e-1
4	0.1432863914e-1
8	0.7108095428e-3
16	0.2179064344e-5
32	0.4470184458e-9

Наведемо деякі формули, які вдається одержати граничним переходом з використанням (14):

$$\lambda_0 = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_0^{(2j)} = 2 + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_0^{(2j)} = 2 + \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,1}^{(2j-1)} = 2 - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j-3)!!}{(2j)! 2^{4j-1}} = \frac{\sqrt{2} + \sqrt{6}}{2},$$

$$a_{2,0} = a_{0,2} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{2,0}^{(2j)} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{0,2}^{(2j)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j-1)!!}{(2j+1)! 2^{4j+2}} = \frac{1}{4} (-1 - \sqrt{2} + \sqrt{6}), \quad (18)$$

$$a_{1,3} = a_{3,1} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,3}^{(2j-1)} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{3,1}^{(2j-1)} = - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j+1)!!}{(2j+3)!} \frac{(2j-1)!!}{(2j-1)!} \frac{j!}{2^{3j+5}} =$$

$$= \frac{1}{8} (8 + 3\sqrt{2} - 5\sqrt{6}).$$

Значення нескінченних сум у (18) знайдено за допомогою с. к. а. Марле. Покладемо у (13) $k = s = 1$, тоді матимемо

$$a_{2,2}^{(2j)} = \frac{1}{4} \left(-4a_{1,1}^{(2j+1)} + \sum_{p=1}^j a_{1,1}^{(2p-1)} \lambda_0^{(2j-2p+2)} - a_{2,0}^{(2j)} - a_{0,2}^{(2j)} \right)$$

або, з урахуванням (18),

$$a_{2,2}^{(2j-2)} = - \frac{(4j-5)!!}{(2j-1)! 2^{4j-1}} + \frac{(4j-3)!!}{(2j)! 2^{4j-1}} + \sum_{s=1}^{j-1} \frac{(4s-3)!!}{(2s)!} \frac{(4j-4s-3)!!}{(2j-2s)! 2^{4j}}, \quad j = 2, 3, \dots \quad (19)$$

Звідси, підсумовуючи обидві частини по j від 2 до ∞ за допомогою с. к. а. Марле, знаходимо

$$a_{2,2} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{2,2}^{(2j)} = \frac{1}{16} (57 - 14\sqrt{2} - 18\sqrt{6} + 4\sqrt{3}). \quad (20)$$

Слід зазначити, що за допомогою методу твірних функцій для суми, що входить у формулу (19), можна одержати зображення

$$\sum_{s=1}^{j-1} \frac{(4s-3)!!}{(2s)!} \frac{(4j-4s-3)!!}{(2j-2s)!2^{4j}} = \frac{1}{(j-1)!} \frac{d^{j-1}}{dz^{j-1}} \left[z^{-2} \left(-4 + \sqrt{4-2\sqrt{z}} + \sqrt{4+2\sqrt{z}} \right)^2 \right]_{z=0}.$$

Замінивши у (12) $k = s = 1$, отримаємо

$$a_{3,3}^{(2j-1)} = \frac{1}{9} \left(-8a_{2,2}^{(2j)} + \sum_{p=1}^{j-1} a_{2,2}^{(2p)} \lambda_0^{(2j-2p)} - \frac{1}{4} a_{1,1}^{(2j-1)} - 3a_{3,1}^{(2j-1)} \right). \quad (21)$$

Підсумуємо обидві частини (21) по j від 1 до ∞ і врахуємо (20). В результаті будемо мати

$$a_{3,3} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{3,3}^{(2j-1)} = \frac{1}{9} \left(-8a_{2,2} + a_{2,2}\lambda_0 - \frac{1}{4} a_{1,1} - 3a_{3,1} \right) = -\frac{113}{24} + \frac{103}{96} \sqrt{2} + \frac{53}{32} \sqrt{6} - \frac{\sqrt{3}}{2}.$$

Покладемо в (13) $k = 1$, $s = 2$ і перейдемо до границі при j , що прямує до ∞ . Тоді прийдемо до формули

$$a_{4,0} + 4a_{4,2} = \frac{1}{32} \left(-240 - 37\sqrt{2} - 8\sqrt{3} + 125\sqrt{6} \right).$$

Одержати аналогічні формули для кожного з $a_{4,0}$, $a_{4,2}$ подібною технікою не вдається. Задача зводиться до наступної: *знайти невідомі раціональні коефіцієнти лінійних комбінацій елементів $\{1, \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{6}\}$ у зображеннях $a_{4,0}$, $a_{4,2}$, якщо відомо зображення їх лінійної комбінації, а також відомо для кожного з них як завгодно точні наближення, одержані за допомогою FD-методу.* Розв'язок сформульованої задачі має вигляд

$$a_{4,2} = \frac{1}{128} \left(127\sqrt{6} - 39\sqrt{2} - 4\sqrt{3} - 249 \right),$$

$$a_{4,0} = a_{0,4} = \frac{1}{32} \left(9 + 2\sqrt{2} - 4\sqrt{3} - 2\sqrt{6} \right).$$

Справедливою є така теорема.

Теорема 1. *FD-метод для задачі (1), (2) щодо власної пари $(\lambda_0, u_0(x, y))$ є збіжним, а відносно власного значення λ_0 — експоненціально збіжним і у границі дає точне власне значення*

$$\lambda_0 = \frac{\sqrt{2} + \sqrt{6}}{2}$$

з оцінкою точності

$$\left| \lambda_0 - \sum_{j=1}^m \lambda_0^{(2j)} \right| \leq \frac{e^2}{3\sqrt{2}\pi} \frac{1}{4^m \sqrt{m+1}}. \quad (22)$$

Відповідна точна власна функція має вигляд

$$u_0(x, y) = \exp\left(-\frac{\sqrt{2+\sqrt{3}}}{4}(x^2+y^2) - \frac{\sqrt{2-\sqrt{3}}}{2}xy\right) N_0, \quad (23)$$

$$N_0 = 2\sqrt{2} \left[\sqrt{6} + \sqrt{2} + \sqrt{3} + 2\right]^{-1/2}.$$

Доведення. Формули (11) є правильними при будь-яких значеннях $j = 1, 2, \dots$. Покладемо у другій із формул (13) $k = s = 1$ і скористаємось методом твірних функцій. З цією метою помножимо обидві частини одержаної рівності на z^j і підсумуємо по j від 1 до ∞ . В результаті для лівої частини одержимо вираз

$$L_{1,1} = -4 \left(\sum_{j=0}^{\infty} z^j a_{1,1}^{(2j+1)} - a_{1,1}^{(1)} \right) = -4 \left(f_{1,1}(z) - a_{1,1}^{(1)} \right) =$$

$$= -4 \left\{ -\frac{1}{z} \left(2 - \sqrt{1 - \frac{\sqrt{z}}{2}} - \sqrt{1 + \frac{\sqrt{z}}{2}} \right) + \frac{1}{16} \right\}, \quad (24)$$

а для правої — такий:

$$R_{1,1} = -z \sum_{j=1}^{\infty} z^{j-1} \sum_{p=1}^j a_{1,1}^{(2p-1)} \lambda_0^{(2j-2p+2)} + 2z \sum_{j=1}^{\infty} z^{j-1} a_{2,0}^{(2j)} + 4z \sum_{j=1}^{\infty} z^{j-1} a_{2,2}^{(2j)} =$$

$$= -z [f_{1,1}(z)]^2 + 2z f_{2,0}(z) + 4z f_{2,2}(z).$$

Можна переконатись, що справджуються формули

$$f_{2,0}(z) = -\frac{1}{4z} - \frac{\sqrt{1 - \frac{\sqrt{z}}{2}}}{2z^{3/2}} + \frac{\sqrt{1 + \frac{\sqrt{z}}{2}}}{2z^{3/2}},$$

$$f_{2,2}(z) = \frac{1}{16z^{5/2}} \left[56\sqrt{z} + z^{3/2} - 32\sqrt{z} \left(\sqrt{1 - \frac{\sqrt{z}}{2}} + \sqrt{1 + \frac{\sqrt{z}}{2}} \right) + 8\sqrt{z} \left(1 - \frac{z}{4} \right) + \right.$$

$$\left. + 4z \left(\sqrt{1 - \frac{\sqrt{z}}{2}} - \sqrt{1 + \frac{\sqrt{z}}{2}} \right) \right],$$

які разом з (20) приводять до співвідношень

$$L_{1,1} = -4(f_{1,1}(z) - a_{1,1}^{(1)}) = -4 \left\{ -\frac{1}{z} \left(2 - \sqrt{1 - \frac{\sqrt{z}}{2}} - \sqrt{1 + \frac{\sqrt{z}}{2}} \right) + \frac{1}{16} \right\},$$

$$R_{1,1} = -z[f_{1,1}(z)]^2 + 2z f_{2,0}(z) + 4z f_{2,2}(z).$$

Оскільки рекурентні формули (12), (13) разом з початковими умовами

$$\lambda_0^{(0)} = 0, \quad a_{0,0}^{(0)} = 1$$

однозначно визначають усі послідовності

$$\lambda_0^{(2j)}, \quad a_{2k,2s}^{(2j)}, \quad a_{2k-1,2s-1}^{(2j-1)}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

і, зокрема,

$$a_{2,2}^{(2j)}, \quad a_{2,0}^{(2j)}, \quad a_{1,1}^{(2j-1)}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

то перша та друга формули з (14) і формула (19) є правильними для всіх j .

Нами вже доведено, що ряди

$$\sum_{j=1}^{\infty} \lambda_0^{(2j)} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,1}^{(2j-1)}, \quad a_{2,0} = a_{0,2} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{2,0}^{(2j)} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{0,2}^{(2j)}$$

є збіжними. Припустимо за індукцією, що всі ряди

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{2p+1,2t+1}^{(2j-1)} \quad \forall p \leq k-1 \quad \forall t \leq s-1,$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{2p,2t}^{(2j)} \quad \forall p \leq k \quad \forall t \leq s, \quad p+t > 0,$$

збігаються. У третій із формул (12) замінимо j на $j+1$, тоді, використавши припущення індукції, неважко показати, що з (12) та (13) випливає збіжність рядів

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{2k\pm 1,2s\pm 1}^{(2j+1)}, \quad \sum_{j=1}^{\infty} a_{2k+1\pm 1,2s+1\pm 1}^{(2j+2)}.$$

Отже, збіжність FD-методу доведено. Експоненціальна збіжність відносно власного значення λ_0 впливає з оцінки (22), яка досить просто одержується з використанням перших формул з (14), (18). Формула (23) встановлюється за допомогою с. к. а. Марле.

Теорему 1 доведено.

3. Двовимірний випадок $n = 1$. У цьому випадку у базовій задачі

$$\frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial y^2} + (2 - x^2 - y^2) u^{(0)}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2,$$

$$\iint_{\mathbb{R}^2} [u^{(0)}(x, y)]^2 dx dy < \infty$$

власне значення $\lambda_1^{(0)} = 2$ є двократним і йому відповідає власна функція вигляду

$$u_1^{(0)}(x, y) = a_{1,0}^{(0)} h_{1,0}(x, y) + a_{0,1}^{(0)} h_{0,1}(x, y).$$

Тут сталі $a_{1,0}^{(0)}$ і $a_{0,1}^{(0)}$ визначаються на першому кроці FD-методу, тобто під час символічного розв'язування задачі

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 u_1^{(j+1)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_1^{(j+1)}(x, y)}{\partial y^2} + (2 - x^2 - y^2) u_1^{(j+1)}(x, y) = \\ & = - \sum_{p=0}^j \lambda_1^{(j+1p)} u_1^{(p)}(x, y) + xy u_1^{(j)}(x, y) \equiv F_1^{(j+1)}(x, y), \end{aligned} \quad (25)$$

$$(x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad j = 0, 1, \dots,$$

при $j = 0$. Перед тим як це здійснити зауважимо, що кратність власних значень базової задачі при побудові та дослідженні традиційного алгоритму FD-методу для задачі Штурма–Ліувілля на скінченному проміжку розглядалась у роботах [16, 17]. У випадку, який розглядається, з точки зору алгоритму, як буде показано нижче, все відбувається значно простіше та прозоріше.

Отже, маємо

$$\begin{aligned} F_1^{(1)}(x, y) = & -\lambda_1^{(1)} a_{1,0}^{(0)} h_{1,0}(x, y) - \lambda_1^{(1)} a_{0,1}^{(0)} h_{0,1}(x, y) + \frac{1}{4} a_{1,0}^{(0)} h_{2,1}(x, y) + \\ & + \frac{1}{2} a_{1,0}^{(0)} h_{0,1}(x, y) + \frac{1}{4} a_{0,1}^{(0)} h_{1,2}(x, y) + \frac{1}{2} a_{0,1}^{(0)} h_{1,0}(x, y). \end{aligned} \quad (26)$$

Оскільки права частина (26) не повинна залежати від $H_1(x)H_0(y)$ і $H_0(x)H_1(y)$, то ця вимога приводить до однорідної системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} -\lambda_1^{(1)} a_{1,0}^{(0)} + \frac{1}{2} a_{0,1}^{(0)} &= 0, \\ \frac{1}{2} a_{1,0}^{(0)} - \lambda_1^{(1)} a_{0,1}^{(0)} &= 0, \end{aligned}$$

розв'язками якої є

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm 1}^{(1)} &= \pm \frac{1}{2}, \quad u_{\pm 1}^{(0)}(x, y) = h_{1,0}(x, y) \pm h_{0,1}(x, y), \\ a_{1,0}^{(0)} &= 1, \quad a_{0,1}^{(0)} = \pm 1. \end{aligned}$$

Лема 2. Для розв'язку задачі (25) має місце структурне зображення

$$u_1^{(j+1)}(x, y) = \sum_{k=0}^{j+2} \sum_{s=0}^{j+2} a_{k,s}^{(j)} h_{k,s}, \quad a_{0,1}^{(j)} = a_{1,0}^{(j)} = 0. \quad (27)$$

Підстановка (27) у (25) приводить до співвідношень

$$\begin{aligned}
 -\sum_{k=0}^{j+2} \sum_{s=0}^{j+2} a_{k,s}^{(j+1)} (2k+2s-2) h_{k,s} &= -\sum_{p=0}^j \lambda_1^{(j+1-p)} \sum_{k=0}^{p+1} \sum_{s=0}^{p+1} \gamma_{k,s}^{(p)} a_{k,s}^{(p)} h_{k,s} + \\
 &+ \sum_{k=0}^{j+1} \sum_{s=0}^{j+1} \gamma_{k,s}^{(j)} a_{k,s}^{(j)} \left(\frac{1}{4} h_{k+1,s+1} + \frac{1}{2} k h_{k-1,s+1} + \frac{1}{2} s h_{k+1,s-1} + k s h_{k-1,s-1} \right), \\
 \gamma_{k,s}^{(p)} &= (1 - \delta_{k,1} \delta_{s,0})(1 - \delta_{k,0} \delta_{s,1})(1 - \delta_{p,0}) + \delta_{p,0} (1 - \delta_{k,s}),
 \end{aligned}$$

де $\delta_{i,j}$ — символ Кронекера. Після очевидних перетворень маємо

$$\begin{aligned}
 -\sum_{k=0}^{j+2} \sum_{s=0}^{j+2} a_{k,s}^{(j+1)} (2k+2s-2) h_{k,s} &= -\sum_{k=0}^{j+1} \sum_{s=0}^{j+1} h_{k,s} \sum_{p=\max(\max(k,s)-1,0)}^j \gamma_{k,s}^{(p)} a_{k,s}^{(p)} \lambda_1^{(j+1-p)} + \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{j+2} \sum_{s=1}^{j+2} \gamma_{k-1,s-1}^{(j)} a_{k-1,s-1}^{(j)} h_{k,s} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^j \sum_{s=1}^{j+2} \gamma_{k+1,s-1}^{(j)} a_{k+1,s-1}^{(j)} (k+1) h_{k,s} + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j+2} \sum_{s=0}^j \gamma_{k-1,s+1}^{(j)} a_{k-1,s+1}^{(j)} (s+1) h_{k,s} + \sum_{k=0}^j \sum_{s=0}^j \gamma_{k+1,s+1}^{(j)} a_{k+1,s+1}^{(j)} (k+1)(s+1) h_{k,s}.
 \end{aligned} \tag{28}$$

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при $h_{1,0}$ і $h_{0,1}$ у правій частині (28), одразу знаходимо

$$\begin{aligned}
 \lambda_1^{(j+1)} &= \frac{2a_{2,1}^{(j)}}{a_{1,0}^{(0)}} = \frac{2a_{1,2}^{(j)}}{a_{0,1}^{(0)}}, \\
 \lambda_{\pm 1}^{(0)} &= 2, \\
 \lambda_1^{(2j-1)} = \lambda_{-1}^{(2j-1)} &= -\frac{(4j-5)!!}{(2j-1)!2^{4j-3}}, \quad \lambda_1^{(2j)} = \lambda_{-1}^{(2j)} = -\frac{(4j-3)!!}{(2j)!2^{4j-2}}, \\
 \lambda_2^{(2j-1)} = \lambda_{+1}^{(2j-1)} &= \frac{(4j-5)!!}{(2j-1)!2^{4j-3}}, \quad \lambda_2^{(2j)} = \lambda_{+1}^{(2j)} = -\frac{(4j-3)!!}{(2j)!2^{4j-2}}, \quad j = 0, 1, \dots
 \end{aligned} \tag{29}$$

Справедливою є така теорема.

Теорема 2. *FD-метод для задачі (1), (2) щодо власних пар $(\lambda_1, u_1(x, y))$, $(\lambda_2, u_2(x, y))$ є збіжним, а відносно власних значень λ_1, λ_2 — експоненціально збіжним і у границі дає точні власні значення*

$$\lambda_1 = \frac{3\sqrt{2} + \sqrt{6}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{\sqrt{2} + 3\sqrt{6}}{2}$$

з оцінками його точності

$$\left| \lambda_1 - \sum_{j=1}^{2m} \lambda_{-1}^{(j)} \right| \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{4^m \sqrt{(m+1/2)^3}},$$

$$\left| \lambda_2 - \sum_{j=0}^{2m} \lambda_{+1}^{(j)} \right| \leq \frac{3}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{4^{m+1} \sqrt{(m+1/2)^3}}.$$

Доведення. За допомогою (29) одержуємо нерівності

$$\left| \lambda_{-1}^{(2j+1)} \frac{4j+1}{(2j+2)2} \right| = \left| \lambda_{-1}^{(2j+2)} \right| < \left| \lambda_{-1}^{(2j+1)} \right|,$$

$$\left| \lambda_{-1}^{(2j+1)} \right| = \left| \lambda_{-1}^{(2j-1)} \right| \frac{(4j-3)(4j-1)}{(2j)(2j+1)2^4} < \frac{1}{4} \left| \lambda_{-1}^{(2j-1)} \right| \leq \dots \leq \frac{1}{4^{j-m}} \left| \lambda_{-1}^{(2m+1)} \right|,$$

які приводять до оцінки

$$\left| \lambda_1 - \sum_{j=1}^{2m} \lambda_{-1}^{(j)} \right| \leq 2 \sum_{j=m}^{\infty} \left| \lambda_{-1}^{(2j+1)} \right| \leq \frac{8}{3} \left| \lambda_{-1}^{(2m+1)} \right|. \quad (30)$$

Оцінка

$$\left| \lambda_2 - \sum_{j=0}^{2m} \lambda_{+1}^{(j)} \right| \leq \lambda_{+1}^{(2m+1)} \quad (31)$$

є очевидною. Використовуючи класичну формулу Стірлінга (див. [18, с. 59])

$$n! = \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n e^{\frac{\theta}{12n}}, \quad 0 < \theta < 1,$$

одержуємо

$$\lambda_{+1}^{(2m+1)} = \left| \lambda_{-1}^{(2m+1)} \right| \leq \frac{3}{2^{2j+2} \sqrt{2\pi(j+1/2)^3}},$$

що разом з (30), (31) доводить справедливість твердження теореми.

4. Двовимірний випадок $n = 2$. У цьому випадку власне значення $\lambda_2^{(0)} = 4$ базової задачі

$$\frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial y^2} + (4 - x^2 - y^2) u^{(0)}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2,$$

$$\iint_{\mathbb{R}^2} [u^{(0)}(x, y)]^2 dx dy < \infty$$

є трикратним і йому відповідає власна функція вигляду

$$u_2^{(0)}(x, y) = a_{2,0}^{(0)}h_{2,0}(x, y) + a_{1,1}^{(0)}h_{1,1}(x, y) + a_{0,2}^{(0)}h_{0,2}(x, y).$$

Тут сталі $a_{2,0}^{(0)}$, $a_{1,1}^{(0)}$, $a_{0,2}^{(0)}$ визначаються на першому кроці FD-методу, тобто під час символічного розв'язування задачі

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_2^{(j+1)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_2^{(j+1)}(x, y)}{\partial y^2} + (4 - x^2 - y^2) u_2^{(j+1)}(x, y) = \\ = - \sum_{p=0}^j \lambda_2^{(j+1-p)} u_2^{(p)}(x, y) + xy u_2^{(j)}(x, y) \equiv \\ \equiv F_2^{(j+1)}(x, y), \end{aligned} \quad (32)$$

$$(x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad j = 0, 1, \dots,$$

при $j = 0$. Тоді маємо

$$\begin{aligned} F_2^{(1)}(x, y) = -l_2^{(1)} \left(a_{2,0}^{(0)}h_{2,0}(x, y) - a_{1,1}^{(0)}h_{1,1}(x, y) - a_{0,2}^{(0)}h_{0,2}(x, y) \right) + \\ + \frac{1}{4} a_{2,0}^{(0)}h_{3,1}(x, y) + a_{2,0}^{(0)}h_{1,1}(x, y) + \frac{1}{4} a_{1,1}^{(0)}h_{2,2}(x, y) + \\ + \frac{1}{2} a_{1,1}^{(0)}h_{2,0}(x, y) + \frac{1}{2} a_{1,1}^{(0)}h_{0,2}(x, y) + a_{1,1}^{(0)}h_{0,0}(x, y) + \\ + \frac{1}{4} a_{0,2}^{(0)}h_{1,3}(x, y) + a_{0,2}^{(0)}h_{1,1}(x, y). \end{aligned}$$

Оскільки права частина (26) не повинна залежати від $h_{2,0}(x, y)$, $h_{1,1}(x, y)$ і $h_{0,2}(x, y)$, то ця вимога приводить до однорідної системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} -l_2^{(1)} a_{2,0}^{(0)} + \frac{1}{2} a_{1,1}^{(0)} &= 0, \\ a_{2,0}^{(0)} - l_2^{(1)} a_{2,0}^{(0)} + a_{0,2}^{(0)} &= 0, \\ \frac{1}{2} a_{1,1}^{(0)} - l_2^{(1)} a_{0,2}^{(0)} &= 0, \end{aligned}$$

розв'язками якої є

$$\begin{aligned} l_2^{(1)} = -1, \quad u_3^{(0)}(x, y) = h_{2,0}(x, y) - 2h_{1,1}(x, y) + h_{0,2}(x, y), \\ a_{2,0}^{(0)} = 1, \quad a_{1,1}^{(0)} = -2, \quad a_{0,2}^{(0)} = 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
l_2^{(1)} &= 0, & u_4^{(0)}(x, y) &= h_{2,0}(x, y) - h_{0,2}(x, y), \\
a_{2,0}^{(0)} &= 1, & a_{1,1}^{(0)} &= 0, & a_{0,2}^{(0)} &= -1, \\
l_2^{(1)} &= 1, & u_5^{(0)}(x, y) &= h_{2,0}(x, y) + 2h_{1,1}(x, y) + h_{0,2}(x, y), \\
a_{2,0}^{(0)} &= 1, & a_{1,1}^{(0)} &= 2, & a_{0,2}^{(0)} &= 1.
\end{aligned}$$

Лема 3. Для розв'язку задачі (32) має місце структурне зображення

$$u_2^{(j+1)}(x, y) = \sum_{k=0}^{j+3} \sum_{s=0}^{j+3} a_{k,s}^{(j+1)} h_{k,s}(x, y), \quad a_{2,0}^{(j+1)} = a_{1,1}^{(j+1)} = a_{0,2}^{(j+1)} = 0. \quad (33)$$

Обмежимо випадком застосування FD-методу до знаходження четвертого власного значення, оскільки для третього і п'ятого власних значень не вдається одержати аналітичні вирази точних власних значень, хоча сам метод для них є збіжним.

Підстановка (33) у (32) приводить до співвідношень

$$\begin{aligned}
-\sum_{k=0}^{j+3} \sum_{s=0}^{j+3} a_{k,s}^{(j+1)} (2k + 2s - 4) h_{k,s} &= -\sum_{p=0}^j \lambda_4^{(j+1-p)} \sum_{k=0}^{p+2} \sum_{s=0}^{p+2} \gamma_{k,s}^{(p)} a_{k,s}^{(p)} h_{k,s} + \\
&+ \sum_{k=0}^{j+2} \sum_{s=0}^{j+2} \gamma_{k,s}^{(j)} a_{k,s}^{(j)} \left(\frac{1}{4} h_{k+1,s+1} + \frac{1}{2} k h_{k-1,s+1} + \frac{1}{2} s h_{k+1,s-1} + k s h_{k-1,s-1} \right), \\
\gamma_{k,s}^{(p)} &= (1 - \delta_{k,2} \delta_{s,0})(1 - \delta_{k,1} \delta_{s,1})(1 - \delta_{k,0} \delta_{s,2})(1 - \delta_{p,0}) + \delta_{p,0} (1 - \delta_{k,s}).
\end{aligned}$$

Після очевидних перетворень маємо

$$\begin{aligned}
-\sum_{k=0}^{j+3} \sum_{s=0}^{j+3} a_{k,s}^{(j+1)} (2k + 2s - 4) h_{k,s} &= -\sum_{k=0}^{j+2} \sum_{s=0}^{j+2} h_{k,s} \sum_{p=\max(\max(k,s)-2,0)}^j \gamma_{k,s}^{(p)} a_{k,s}^{(p)} \lambda_4^{(j+1-p)} + \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{j+3} \sum_{s=1}^{j+3} \gamma_{k-1,s-1}^{(j)} a_{k-1,s-1}^{(j)} h_{k,s} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{j+1} \sum_{s=1}^{j+3} \gamma_{k+1,s-1}^{(j)} a_{k+1,s-1}^{(j)} (k+1) h_{k,s} + \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{j+3} \sum_{s=0}^{j+1} \gamma_{k-1,s+1}^{(j)} a_{k-1,s+1}^{(j)} (s+1) h_{k,s} + \sum_{k=0}^{j+1} \sum_{s=0}^{j+1} \gamma_{k+1,s+1}^{(j)} a_{k+1,s+1}^{(j)} (k+1)(s+1) h_{k,s}.
\end{aligned} \quad (34)$$

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при $h_{2,0}$, $h_{1,1}$ і $h_{0,2}$ у правій частині (34), одразу знаходимо

$$\begin{aligned}
\lambda_4^{(2j)} &= \frac{1}{2} a_{1,1}^{(2j-1)} + 3a_{3,1}^{(2j-1)} = -\frac{1}{2} a_{1,1}^{(2j-1)} - 3a_{1,3}^{(2j-1)} = -\frac{3(4j-3)!!}{(2j)! 2^{4j-1}}, \\
\lambda_4^{(0)} &= 4, \quad \lambda_4^{(2j-1)} = 0, \quad j = 1, 2, \dots
\end{aligned}$$

Справедливою є така теорема.

Теорема 3. *FD-метод для задачі (1), (2) щодо власної пари $(\lambda_4, u_4(x, y))$ є збіжним, а відносно власного значення λ_4 — експоненціально збіжним і у границі дає точне власне значення*

$$\lambda_4 = \frac{3\sqrt{2} + 3\sqrt{6}}{2}$$

з оцінкою його точності

$$\left| \lambda_4 - \sum_{j=1}^m \lambda_4^{(2j)} \right| = \sum_{j=m+1}^{\infty} |\lambda_4^{(2j)}| \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{4^{m+1} \sqrt{(m+1)^3}} \left(1 + \frac{9}{16(m+1)} \right).$$

Аналіз результатів обчислень за допомогою с. к. а. Марле дозволив сформулювати гіпотезу

$$\lambda_3^{(j)} = \frac{(2j-3)!(2+(-1)^j)}{j!2^{(4j-3+(-1)^j)/2}},$$

яку вдалось строго довести і одержати граничним переходом (комп'ютерним) точне власне значення

$$\lambda_3 = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_3^{(j)} = \frac{5\sqrt{2} + \sqrt{6}}{2}.$$

Слід зауважити, що власне значення $\lambda_2^{(0)}$ базової задачі, починаючи з $j = 1$, розгалуджується на три гілки і лема 3 про зображення поправок до власних функцій відноситься лише до другої гілки, яка приводить до точного четвертого власного значення. Що стосується першої та третьої гілок, то тут потрібно зробити уточнення леми 3, а саме, повинні виконуватись співвідношення

$$a_{2,0}^{(j+1)} = a_{0,2}^{(j+1)}, \quad a_{1,1}^{(j+1)} = \pm 2a_{2,0}^{(j+1)}, \quad (35)$$

де знак плюс відповідає першій гілці, а знак мінус — третій. Довільну сталу $a_{2,0}^{(j+1)}$ визначаємо у такий спосіб: у виразі для $F_2^{(j+2)}(x, y)$ прирівнюємо до нуля коефіцієнти при $h_{2,0}(x, y)$, $h_{1,1}(x, y)$, $h_{0,2}(x, y)$. Одержуємо систему рівнянь

$$\begin{aligned} -\lambda_3^{(j+2)} - \lambda_3^{(1)} a_{2,0}^{(j+1)} + 3a_{3,1}^{(j+1)} + \frac{1}{2} a_{1,1}^{(j+1)} &= 0, \\ 2\lambda_3^{(j+2)} + a_{2,0}^{(j+1)} + a_{1,1}^{(j+1)} + a_{0,2}^{(j+1)} + 4a_{2,2}^{(j+1)} + \frac{1}{4} a_{0,0}^{(j+1)} &= 0, \\ -\lambda_3^{(j+2)} - \lambda_3^{(1)} a_{0,2}^{(j+1)} + 3a_{1,3}^{(j+1)} + \frac{1}{2} a_{1,1}^{(j+1)} &= 0. \end{aligned} \quad (36)$$

Додаємо до другого з рівнянь (36) подвоєне перше, враховуючи коефіцієнтну симетрію та співвідношення (35). Одержуємо рівняння, з якого знаходимо

$$a_{2,0}^{(j+1)} = -\frac{1}{8} \left(4a_{2,2}^{(j+1)} + \frac{1}{4} a_{0,0}^{(j+1)} + 6a_{1,3}^{(j+1)} \right),$$

що, у свою чергу, приводить до формули

$$\lambda_3^{(j+2)} = 2a_{2,0}^{(j+1)} + 3a_{3,1}^{(j+1)} = -\frac{1}{4} \left(4a_{2,2}^{(j+1)} + \frac{1}{4}a_{0,0}^{(j+1)} - 6a_{1,3}^{(j+1)} \right).$$

Зауваження 1. Проведений аналіз знайдених точних власних значень дозволив знайти для них аналітичні формули при всіх $n = 0, 1, \dots$. Ці власні значення, пронумеровані у порядку зростання їх величин, мають вигляд

$$\lambda_{\frac{n(n+1)}{2}} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{6} + (2n+1)\sqrt{2} \right], \quad \lambda_{\frac{n(n+1)}{2}+1} = \frac{1}{2} \left[3\sqrt{6} + (2n-1)\sqrt{2} \right], \dots,$$

$$\lambda_{\frac{n(n+1)}{2}+n} = \frac{1}{2} \left[(2n+1)\sqrt{6} + \sqrt{2} \right], \quad n = 0, 1, \dots$$

5. Умови існування точних розв'язків. У цьому пункті частково використано результати роботи [5]. Нехай поліноміальний потенціал має вигляд

$$q(x, y) = \sum_{k=1}^{2\mu} \sum_{i=0}^k \beta_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i} y^i.$$

Виконаємо у рівнянні (1) заміну

$$u(x, y) = \exp \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i} y^i \right) v(x, y) \quad (37)$$

і визначимо, яке співвідношення повинно бути між μ і ν , щоб диференціальне рівняння відносно функції $v(x, y)$ мало поліноміальні розв'язки. Перетворене рівняння після скорочення на експоненту матиме вигляд

$$\frac{\partial^2 v(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v(x, y)}{\partial y^2} + p_{1,1}(x, y) \frac{\partial v(x, y)}{\partial x} + p_{1,2}(x, y) \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} + p_2(x, y)v(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad (38)$$

$$p_{1,1}(x, y) = 2 \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k (k-i) \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i-1} y^i, \quad (39)$$

$$p_{1,2}(x, y) = 2 \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k i \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i} y^{i-1},$$

$$\begin{aligned}
p_2(x, y) = & \lambda - x^2 - y^2 - \sum_{k=1}^{2\mu} \sum_{i=0}^k \beta_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i} y^i + \\
& + \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k (k-i)(k-i-1) \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i-2} y^i + \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k (k-i) \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i-1} y^i \right)^2 + \\
& + \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k i(i-1) \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i} y^{i-2} + \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k i \alpha_{k-i,i}^{(k)} x^{k-i} y^{i-1} \right)^2. \quad (40)
\end{aligned}$$

Аналізуючи (37)–(40), приходимо до висновку: для того щоб рівняння (38) мало своїм розв'язком поліном, необхідно, щоб

$$\mu = \nu - 1. \quad (41)$$

Виконання цієї умови дає можливість одержати систему нелінійних алгебраїчних рівнянь відносно $\alpha_{k-i,i}^{(k)}$, $i = 0, 1, \dots, k$, $k = \mu, \mu + 1, \dots, 2\mu$, шляхом прирівнювання до нуля коефіцієнтів при $x^{k-i} y^i$, $i = 0, 1, \dots, k$, $k = \mu, \mu + 1, \dots, 2\mu$. Після знаходження розв'язку згаданої системи і підстановки його у рівняння (38) коефіцієнт $p_2(x, y)$ стає поліномом $(\mu - 1)$ -го степеня, і це рівняння вже буде мати поліноміальні розв'язки. Для ілюстрації обмежимося розглядом випадку $\mu = 1$, оскільки загальний випадок є занадто громіздким.

Маємо дві системи рівнянь

$$-\beta_{1,0}^{(1)} + 4\alpha_{1,0}^{(1)}\alpha_{2,0}^{(2)} + 2\alpha_{0,1}^{(1)}\alpha_{1,1}^{(2)} = 0, \quad (42)$$

$$-\beta_{0,1}^{(1)} + 4\alpha_{0,1}^{(1)}\alpha_{0,2}^{(2)} + 2\alpha_{1,0}^{(1)}\alpha_{1,1}^{(2)} = 0;$$

$$-2 - 2b_{2,0}^{(2)} + 8[a_{2,0}^{(2)}]^2 + 2[a_{1,1}^{(2)}]^2 = 0,$$

$$-b_{1,1}^{(2)} + 4a_{1,1}^{(2)}(a_{2,0}^{(2)} + a_{0,2}^{(2)}) = 0, \quad (43)$$

$$-2 - 2b_{0,2}^{(2)} + 8[a_{0,2}^{(2)}]^2 + 2[a_{1,1}^{(2)}]^2 = 0.$$

Спочатку знаходимо розв'язок системи (43):

$$\alpha_{2,0}^{(2)} = \pm \frac{1}{2} \left(1 + \beta_{2,0}^{(2)} - [\alpha_{1,1}^{(2)}]^2 \right)^{(1/2)}, \quad \alpha_{0,2}^{(2)} = \pm \frac{1}{2} \left(1 + \beta_{0,2}^{(2)} - [\alpha_{1,1}^{(2)}]^2 \right)^{(1/2)}, \quad (44)$$

$$\alpha_{1,1}^{(2)} = \pm \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_{0,2}^{(2)} + \beta_{2,0}^{(2)} + 2 \pm \left(4(\beta_{0,2}^{(2)} + 1)(\beta_{2,0}^{(2)} + 1) - [\beta_{1,1}^{(2)}]^2 \right)^{(1/2)}}{[\beta_{1,1}^{(2)}]^2 + [\beta_{0,2}^{(2)}]^2 - 2\beta_{0,2}^{(2)}\beta_{2,0}^{(2)} + [\beta_{2,0}^{(2)}]^2} \right)^{(1/2)} \beta_{1,1}^{(2)},$$

а потім з його допомогою одержуємо розв'язок системи (42):

$$a_{1,0}^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{-2b_{0,1}^{(1)}a_{2,0}^{(2)} + a_{1,1}^{(2)}b_{1,0}^{(1)}}{4a_{0,2}^{(2)}a_{2,0}^{(2)} - [a_{1,1}^{(2)}]^2}, \quad a_{0,1}^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{-2b_{1,0}^{(1)}a_{0,2}^{(2)} + a_{1,1}^{(2)}b_{0,1}^{(1)}}{4a_{0,2}^{(2)}a_{2,0}^{(2)} - [a_{1,1}^{(2)}]^2}. \quad (45)$$

Тепер ми можемо записати точні власні значення і відповідні їм точні власні функції. Зокрема, при власному значенні

$$\lambda_0 = -\left(2a_{2,0}^{(2)} + 2a_{0,2}^{(2)} + [a_{1,0}^{(1)}]^2 + [a_{0,1}^{(1)}]^2\right) \quad (46)$$

точною власною функцією буде функція (37) з

$$v_0(x, y) = 1$$

і відповідними знайденими значеннями всіх параметрів, які вона містить. Так, при $\beta_{2,0}^{(2)} = \beta_{0,2}^{(2)} = \beta_{0,1}^{(1)} = \beta_{1,0}^{(1)} = 0$, $\beta_{1,1}^{(2)} = 1$ вибираємо з формул (44) значення

$$\alpha_{2,0}^{(2)} = \alpha_{0,2}^{(2)} = -\frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{8}, \quad \alpha_{1,1}^{(2)} = \frac{-\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4}.$$

Тоді з формул (45) одержуємо

$$\alpha_{1,0}^{(1)} = \alpha_{0,1}^{(1)} = 0,$$

і точне власне значення, згідно з формулою (46), набирає вигляду

$$\lambda_0 = \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{2},$$

який збігається з одержаним раніше.

У випадку $\mu = 3$, $\nu = 4$, $n = 2$ матимемо

$$u(x, y) = \exp\left(\sum_{k=1}^2 \sum_{i=0}^k \alpha_{2k-2i, 2i}^{(2k)} x^{2k-2i} y^{2i}\right) (c_0 + c_2 (x^2 + y^2)),$$

$$q(x, y) = \sum_{k=1}^3 \sum_{i=0}^k \beta_{2k-2i, 2i}^{(2k)} x^{2k-2i} y^{2i}.$$

З відповідної системи рівнянь одержуємо

$$\alpha_{4,0}^{(4)} = \alpha_{0,4}^{(4)} = -\frac{\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)}}}{4}, \quad \alpha_{2,2}^{(4)} = \frac{\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)}}}{2} - \frac{\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)} + \beta_{4,2}^{(6)}}}{2},$$

$$\alpha_{2,0}^{(2)} = \alpha_{0,2}^{(2)} = -\frac{\beta_{4,0}^{(4)}}{\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)}}},$$

$$\beta_{6,0}^{(6)} = \beta_{0,6}^{(6)}, \quad \beta_{4,2}^{(6)} = \beta_{2,4}^{(6)}, \quad \beta_{4,0}^{(4)} = \beta_{0,4}^{(4)}, \quad \beta_{4,2}^{(6)} = 3\beta_{6,0}^{(6)},$$

$$\beta_{2,2}^{(4)} = -2\beta_{0,4}^{(4)} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{\beta_{4,2}^{(6)}}{\beta_{6,0}^{(6)}}} \right),$$

$$\beta_{2,0}^{(2)} = \beta_{0,2}^{(2)} = -\frac{1}{4\beta_{6,0}^{(6)}} \left[4\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)} + \beta_{4,2}^{(6)}} + 24\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)}} - \frac{(\beta_{4,0}^{(4)})^2}{\beta_{6,0}^{(6)}} \right],$$

$$c_2 = \frac{4(\beta_{6,0}^{(6)})^{3/2}}{-\lambda_2\beta_{6,0}^{(6)} + 3\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)}\beta_{4,0}^{(4)}}} c_0,$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{\beta_{6,0}^{(6)}}} \left[2\beta_{4,0}^{(4)} + \sqrt{(\beta_{4,0}^{(4)})^2 + 16(\beta_{6,0}^{(6)})^2} \right].$$

Звідси при

$$q(x, y) = -16(x^2 + y^2) + \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^3,$$

зокрема, впливає такий розв'язок:

$$u_2(x, y) = \exp\left(-\frac{1}{8}(x^2 + y^2)^2\right) (1 - x^2 - y^2), \quad \lambda_2 = 2.$$

Наведемо ще один частковий наслідок, що доповнює теорему 3. Нехай

$$q(x, y) = xy,$$

тоді за допомогою аналітики, пов'язаної безпосередньо з початковою задачею, знаходимо

$$\lambda_3 = \frac{\sqrt{6}}{2} + \frac{5\sqrt{2}}{2}, \quad \lambda_5 = \frac{5\sqrt{6}}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

З точністю до мультиплікативної сталої для відповідних точних власних функцій маємо

такі вирази:

$$u_3(x, y) = \left(x^2 - 2xy + y^2 - \sqrt{2} \right) \times \\ \times \exp \left(-\frac{\sqrt{2}}{8} \left(x^2\sqrt{3} + 2xy\sqrt{3} + y^2\sqrt{3} + x^2 - 2xy + y^2 \right) \right),$$

$$\lambda_3 = \frac{\sqrt{6}}{2} + \frac{5\sqrt{2}}{2},$$

$$u_5(x, y) = \left(x^2 + 2xy + y^2 - \frac{\sqrt{6}}{3} \right) \times \\ \times \exp \left(-\frac{\sqrt{2}}{8} \left(x^2\sqrt{3} + 2xy\sqrt{3} + y^2\sqrt{3} + x^2 - 2xy + y^2 \right) \right),$$

$$\lambda_5 = \frac{5\sqrt{6}}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

Проведені чисельні експерименти дали підставу сформулювати таку гіпотезу.

Гіпотеза 1. *FD-метод для спектральної задачі для рівняння Шрьодінгера (1) з поліноміальним потенціалом*

$$q(x, y) = \sum_{p,k=0, p^2+k^2>0}^{\mu} c_{p,k} x^p y^k, \quad \mu \leq 2,$$

буде збіжним при певних значеннях коефіцієнтів $c_{p,k}$. Якщо ж $\mu > 2$ і знайдеться хоча б один коефіцієнт $c_{p,k} \neq 0$ з $p > 2$ або $k > 2$, то FD-метод буде розбіжним.

Для підтвердження вірогідності гіпотези наведемо результати деяких розрахунків.

Приклад 1. Нехай $q(x, y) = \frac{1}{3}xy^2$, $\lambda_0^{(0)} = 2$, $u_0^{(0)}(x, y) = 1$. Результати розрахунків, а саме, поправки $\lambda_0^{(2k)}$, $k = 0, 1, \dots, 7, 13$, до власного значення λ_0 , згідно з FD-методом з $\bar{q}(x, y) \equiv 0$ при $n = 0$ наведено в табл. 2, $\lambda_0^{(2k-1)} = 0$, $k = 1, 2, \dots$, на непарних кроках. Послідовність $\lambda_0 = \sum_{j=0}^{2m} \lambda_0^{(2j)}$ при $m \rightarrow \infty$ прямує до значення

$$\lambda_0 = 1,98799172177 \dots$$

Контроль точності методу здійснюється за допомогою порівняння норми нев'язки рівняння (1) при підстановці у нього

$$\lambda = \lambda_0, \quad u(x, y) = u_0^{2m}(x, y) = \sum_{j=0}^{2m} u_0^{(j)}(x, y).$$

Таблиця 2

j	$\lambda_0^{(j)}$
0	2
2	-0.1157407407e-1
4	-0.3983053269e-3
6	-0.3153471014e-4
8	-0.3682233104e-5
10	-0.5534692723e-6
12	-0.1005494624e-6
14	-0.2130939275e-7
26	-0.1962171900e-10

Приклад 2. Нехай $q(x, y) = \frac{1}{3}x^2y^2$, $\lambda_0^{(0)} = 2$, $u_0^{(0)}(x, y) = 1$. Результати розрахунків, а саме, поправки $\lambda_0^{(j)}$, $j = 0, 1, \dots, 9, 50, 51$, до власного значення λ_0 , згідно з FD-методом з $\bar{q}(x, y) \equiv 0$ при $n = 0$ наведено в табл. 3. Послідовність $\lambda_0^m = \sum_{j=0}^m \lambda_0^{(j)}$ при $m \rightarrow \infty$ прямує до значення λ_0 , для якого правильною є оцінка

$$2,074265720986340 < \lambda_0 < 2,074265720996361.$$

Таблиця 3

j	$\lambda_0^{(j)}$
0	2
1	0.8333333333e-1
2	-0.1041666667e-1
3	0.1724054784e-2
4	-0.5423672732e-3
5	0.2645662038e-3
6	-0.1604017266e-3
7	0.1060781630e-3
8	-0.7240192694e-4
9	0.4996429136e-4
50	-0.1449580913e-10
51	0.1002067088e-10

6. Точні розв'язки спектральної задачі для рівняння Шрьодінгера у \mathbb{R}^3 . У цьому пункті на прикладі однієї конкретної спектральної задачі для рівняння Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом у \mathbb{R}^3 продемонструємо можливості викладеної вище методології щодо узагальнення її на багатовимірний випадок.

Розглянемо задачу

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 u(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u(x, y, z)}{\partial z^2} + \\ & + (\lambda - x^2 - y^2 - z^2 - q(x, y, z)) u(x, y, z) = 0, \quad (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \\ & \iiint_{\mathbb{R}^3} u^2(x, y, z) dx dy dz < \infty, \end{aligned} \quad (47)$$

де

$$q(x, y, z) = \sum_{k=1}^{2\mu} \sum_{i=0}^k \sum_{s=0}^i \beta_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s} z^s.$$

Виконаємо у рівнянні (47) заміну

$$u(x, y, z) = \exp \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k \sum_{s=0}^i \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s} z^s \right) v(x, y, z),$$

в результаті якої, після скорочення на експоненту, отримаємо

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 v(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v(x, y, z)}{\partial z^2} + \\ & + p_{1,1}(x, y, z) \frac{\partial v(x, y, z)}{\partial x} + p_{1,2}(x, y, z) \frac{\partial v(x, y, z)}{\partial y} + \\ & + p_{1,3}(x, y, z) \frac{\partial v(x, y, z)}{\partial z} + p_2(x, y, z) v(x, y, z) = 0, \quad (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \end{aligned} \quad (48)$$

де

$$\begin{aligned} p_{1,1}(x, y, z) &= 2 \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k \sum_{s=0}^i (k-i) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i-1} y^{i-s} z^s, \\ p_{1,2}(x, y, z) &= 2 \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k \sum_{s=0}^i (i-s) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s-1} z^s, \\ p_{1,3}(x, y, z) &= 2 \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^k \sum_{s=0}^i s \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s} z^{s-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_2(x, y, z) = & \lambda - \sum_{k=1}^{2\mu} \sum_{i=0}^k \sum_{s=0}^i \beta_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s} z^s + \\
& + \sum_{k=2}^{\nu} \sum_{i=0}^{k-2} \sum_{s=0}^i (k-i)(k-i-1) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i-2} y^{i-s} z^s + \\
& + \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{s=0}^i (k-i) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i-1} y^{i-s} z^s \right)^2 + \\
& + \sum_{k=2}^{\nu} \sum_{i=2}^k \sum_{s=0}^{i-2} (i-s)(i-s-1) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s-2} z^s + \\
& + \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=1}^k \sum_{s=0}^{i-1} (i-s) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s-1} z^s \right)^2 + \\
& + \sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=2}^k \sum_{s=2}^i s(s-1) \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s} z^{s-2} + \\
& + \left(\sum_{k=1}^{\nu} \sum_{i=1}^k \sum_{s=1}^i s \alpha_{k-i, i-s, s}^{(k)} x^{k-i} y^{i-s} z^{s-1} \right)^2.
\end{aligned}$$

Аналіз формул для $p_{1,k}(x, y, z)$, $k = 1, 2, 3$, та $p_2(x, y, z)$ показує, що буде правильним таке твердження.

Теорема 4. Для того щоб рівняння (48) мало розв'язок $v(x, y, z) \equiv 1$, необхідно і достатньо, щоб виконувалось співвідношення (41) і система рівнянь відносно λ , $\alpha_{j,i,s}^{(k)}$, $i + j + s = k$, $i, j, s \geq 0$, $k = 1, 2, \dots, 2\mu$, що утворюється прирівнюванням до нуля коефіцієнтів полінома $p_2(x, y, z)$, мала розв'язок.

Доведення. Необхідність. Нехай рівняння (48) має своїм розв'язком тотожну одиницю. Тоді поліном $p_2(x, y, z)$ повинен бути тотожним нулем. Прирівнюючи до нуля його коефіцієнти, одержуємо систему рівнянь відносно невідомих λ , $\alpha_{j,i,s}^{(k)}$, $i + j + s = k$, $i, j, s \geq 0$, $k = 1, 2, \dots, 2\mu$, яка є перевизначеною. Проте ця система має розв'язок, бо у протилежному випадку поліном $p_2(x, y, z)$ не дорівнював би тотожно нулю. Зауважимо, що тут природним чином виникають функціональні залежності між коефіцієнтами поліноміального потенціалу $\beta_{k-i, i-s, s}^{(k)}$, $s = 0, 1, \dots, i$, $i = 0, 1, \dots, k$, $k = 1, 2, \dots, 2\mu$, кількість яких буде дорівнювати кількості невідомих.

Достатність. Нехай система рівнянь відносно λ , $\alpha_{j,i,s}^{(k)}$, $i + j + s = k$, $i, j, s \geq 0$, $k = 1, 2, \dots, 2\mu$, що утворюється прирівнюванням до нуля коефіцієнтів полінома $p_2(x, y, z)$ і вибором певних значень коефіцієнтів поліноміального потенціалу $\beta_{k-i, i-s, s}^{(k)}$, $s = 0, 1, \dots, i$, $i = 0, 1, \dots, k$, $k = 1, 2, \dots, 2\mu$, має розв'язок. Тоді поліном $p_2(x, y, z)$ після підстановки цього розв'язку перетворюється у тотожний нуль і рівняння (48), очевидно, буде мати в якості розв'язку тотожну одиницю.

Теорему 4 доведено.

У наступному прикладі поліноміальний потенціал взято таким, для якого не вдається одержати точний аналітичний розв'язок спектральної задачі (1). Проте тут, на думку автора, також буде правильним узагальнення гіпотези 1 на тривимірний випадок. Підтвердженням цього є наступний приклад.

Приклад 3. Нехай $q(x, y, z) = \frac{1}{2}xyz$, $\lambda_0^{(0)} = 3$, $u_0^{(0)}(x, y, z) = 1$. Результати розрахунків, а саме, поправки $\lambda_0^{(2k)}$, $k = 0, 1, \dots, 7, 13$, до власного значення λ_0 , згідно з FD-методом з $\bar{q}(x, y, z) \equiv 0$ при $n = 0$ наведено в табл. 4, $\lambda_0^{(2k-1)} = 0$, $k = 1, 2, \dots$, на непарних кроках. Послідовність $\lambda_0 = \sum_{j=0}^{2m} \lambda_0^{(2j)}$ при $m \rightarrow \infty$ прямує до значення

$$\lambda_0 = 2.994692474619 \dots$$

Таблиця 4

j	$\lambda_0^{(j)}$
0	3
2	-0.5208333333e-2
4	-0.9494357639e-4
6	-0.3978744946e-5
8	-0.2494962332e-6
10	-0.1838161780e-7
12	-0.1647606604e-8
14	-0.1749263490e-9
26	-0.3132579863e-14

7. Модифікований FD-метод. Якщо стандартна стратегія FD-методу, що полягає у виборі в якості базової задачі найпростішого рівняння, для якого відповідна спектральна задача має точний аналітичний розв'язок, приводить до розбіжного рекурентного процесу (див. гіпотезу 1), то пропонується модифікація методу. Ця модифікація у ряді випадків є збіжною, що і буде продемонстровано у цьому пункті. Слід зазначити, що використання кусково-сталого наближення частини поліноміального потенціалу не приводить до збіжності методу через її необмеженість та необмеженість області \mathbb{R}^k .

Аналіз структури поліноміального потенціалу, для якого відповідна спектральна задача має точний аналітичний розв'язок (див. [5]), показує, що його старші коефіцієнти, окрім знака, можуть бути довільними, а молодші виражаються через них. Виникає така ідея: якщо у конкретній задачі молодші коефіцієнти поліноміального потенціалу не дорівнюють тим «точним» молодшим коефіцієнтам, що забезпечують точний аналітичний розв'язок, то за базову задачу у FD-методі доцільно взяти спектральну задачу для оператора Шрьодінгера з «точним» поліноміальним потенціалом. Конкретну реалізацію цієї ідеї викладено нижче.

Розглядається задача

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda - q(x, y))u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2,$$

$$q(x, y) = 16x^6 + 16y^6 + 48x^2y^2(x^2 + y^2) - 33x^2 - 33y^2,$$

$$\iint_{\mathbb{R}^2} u(x, y)^2 dy dx < \infty.$$

«Точний» потенціал є таким:

$$q^{ex}(x, y) = 16x^6 + 16y^6 + 48x^2y^2(x^2 + y^2) - 32x^2 - 32y^2.$$

У якості базової беремо задачу

$$\frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda^{(0)} - q^{ex}(x, y))u^{(0)}(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2,$$

$$\iint_{\mathbb{R}^2} u^{(0)}(x, y)^2 dy dx < \infty,$$

одним із точних аналітичних розв'язків якої є (див. [5])

$$\lambda^{(0)} = 0, \quad u^{(0)}(x, y) = (x^2 - y^2) \exp(-(x^2 + y^2)^2).$$

При цьому

$$\hat{q}(x, y) = x^2 + y^2.$$

Загальний рекурентний процес FD-методу m -го рангу буде таким:

$$\frac{\partial^2 u^{(j+1)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^{(j+1)}(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda^{(0)} - q^{ex}(x, y))u^{(j+1)}(x, y) =$$

$$= - \sum_{p=0}^j \lambda^{(j+1-p)} u^{(p)}(x, y) + \hat{q}(x, y)u^{(j)}(x, y) \equiv F^{(j+1)}(x, y), \quad (49)$$

$$(x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m-1,$$

$$\iint_{\mathbb{R}^2} u^{(j+1)}(x, y)u^{(0)}(x, y) dx dy = 0, \quad j = 0, 1, \dots \quad (50)$$

Умова розв'язності задачі (49) приводить до формули

$$\lambda^{(j+1)} = \frac{\iint_{\mathbb{R}^2} \hat{q}(x, y)u^{(j)}(x, y)u^{(0)}(x, y) dx dy}{\iint_{\mathbb{R}^2} [u^{(0)}(x, y)]^2 dx dy}. \quad (51)$$

В результаті виконання рекурентного процесу (49)–(51) одержуємо наближення m -го рангу

$$\lambda^m = \sum_{j=0}^m \lambda^{(j)}, \quad u^m(x, y) = \sum_{j=0}^m u^{(j)}(x, y). \quad (52)$$

Розв'язок кожної із задач (49) шукаємо у вигляді

$$u^{(j+1)}(x, y) = u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p a_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} x^{2s} y^{2p-2s} = u^{(0)}(x, y) v^{(j+1)}(x, y), \quad (53)$$

попередньо перетворивши $F^{(j+1)}(x, y)$ до форми

$$F^{(j+1)}(x, y) = u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p f_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} x^{2s} y^{2p-2s}. \quad (54)$$

При побудові символічного алгоритму FD-методу будемо використовувати таблицю позначень

$$\beta_{2s, 2p} = \frac{\iint_{\mathbb{R}^2} x^{2s} y^{2p} [u^{(0)}(x, y)]^2 dx dy}{\iint_{\mathbb{R}^2} [u^{(0)}(x, y)]^2 dx dy}, \quad s, p = 0, 1, \dots, \quad (55)$$

а при конкретних обчисленнях — таблицю попередньо знайдених їх числових значень. З урахуванням введених позначень формулу (51) можна перетворити до вигляду

$$\lambda^{(j+1)} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p a_{2s, 2p-2s}^{(j)} (\beta_{2s+2, 2p-2s} + \beta_{2s, 2p-2s+2}). \quad (56)$$

Далі підставляємо (53) у ліву частину рівняння (49) і прирівнюємо коефіцієнти при однакових добутках $x^{2s} y^{2p}$, $s, p = 0, 1, \dots$, зліва і справа, що приводить до нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів із зображення (53). Для одержання цієї системи проведемо попередньо певні перетворення. Спочатку наведемо формули для коефіцієнтів із зображення (54). Маємо

$$f_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} = -A_{2s, 2p-2s}^{(j)} + a_{2s-2, 2p-2s}^{(j)} + a_{2s, 2p-2s-2}^{(j)}, \quad s = 0, 1, \dots, p-1, \quad p = 1, 2, \dots,$$

$$f_{0,0}^{(j+1)} = -A_{0,0}^{(j)}, \quad f_{2s,0}^{(j+1)} = -A_{2s,0}^{(j)} + a_{2s-2,0}^{(j)}, \quad s = 1, 2, \dots,$$

$$A_{2s, 2t-2s}^{(j)} = \sum_{p=0}^j \lambda^{(j+1-p)} a_{2s, 2t-2s}^{(p)}.$$

Займемося тепер перетвореннями результату підстановки (53) у ліву частину рівняння (49) до потрібного нам вигляду. Внаслідок цього виникають такі доданки:

$$2 \frac{\partial u^{(0)}(x, y)}{\partial x} \frac{\partial v^{(j+1)}(x, y)}{\partial x} = 4 \exp \left(- (x^2 + y^2)^2 \right) [1 - 2(x^4 - y^4)] \times \\ \times \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p 2s a_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} x^{2s} y^{2p-2s}, \quad (57)$$

$$2 \frac{\partial u^{(0)}(x, y)}{\partial y} \frac{\partial v^{(j+1)}(x, y)}{\partial y} = 4 \exp \left(- (x^2 + y^2)^2 \right) [-1 - 2(x^4 - y^4)] \times \\ \times \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p 2(p-s) a_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} x^{2s} y^{2p-2s}, \quad (58)$$

$$u^{(0)}(x, y) \left[\frac{\partial^2 v^{(j+1)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^{(j+1)}(x, y)}{\partial y^2} \right] = \\ = u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p a_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} \times \\ \times [2s(2s-1)x^{2s-2}y^{2p-2s} + (2p-2s)(2p-2s-1)x^{2s}y^{2p-2s-2}] = \\ = u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p \left[(2s+2)(2s+1)a_{2s+2, 2p-2s}^{(j+1)} + \right. \\ \left. + (2p-2s+2)(2p-2s+1)a_{2s, 2p-2s+2}^{(j+1)} \right] x^{2s} y^{2p-2s}.$$

Підсумовуючи (57) і (58), отримуємо

$$2 \left[\frac{\partial u^{(0)}(x, y)}{\partial x} \frac{\partial v^{(j+1)}(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial u^{(0)}(x, y)}{\partial y} \frac{\partial v^{(j+1)}(x, y)}{\partial y} \right] = 4 \exp \left(- (x^2 + y^2)^2 \right) \times \\ \times \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{s=1}^p 2s a_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} \{ x^{2s} y^{2p-2s} - x^{2p-2s} y^{2s} - 2(x^4 - y^4) [x^{2s} y^{2p-2s} + x^{2p-2s} y^{2s}] \} = \\ = 8u^{(0)}(x, y) a_{2,0}^{(j+1)} [1 - 2(x^2 + y^2)^2] + 8u^{(0)}(x, y) \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{s=1}^p a_{2p-2s}^{(j+1)} \left[\sum_{k=1}^{p-2s} y^{2p-2s-2k} x^{2s+2k-2} - 2(x^2 + y^2) (x^{2s} y^{2p-2s} + x^{2p-2s} y^{2s}) \right] = \\
& = 8u^{(0)}(x, y) \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\lfloor \frac{p}{2} \rfloor} \left[- \sum_{k=0}^s (p-2k+1) a_{2p-2k+2, 2k}^{(j+1)} - 2(p-1) \left(a_{2p-2s, 2s-2}^{(j+1)} + a_{2p-2s-2, 2s}^{(j+1)} \right) \right] \times \\
& \times (x^{2p-2s} y^{2s} + x^{2s} y^{2p-2s}) (1 + \delta_{2p-2s, 2s})^{-1}, \tag{59}
\end{aligned}$$

де $\lfloor y \rfloor$ — ціла частина дійсного числа y . Тут і далі будемо враховувати симетрію коефіцієнтів у зображенні до власних функцій

$$a_{2p, 2k}^{(j+1)} = a_{2k, 2p}^{(j+1)}, \quad k, p = 0, 1, \dots, \quad j = 0, 1, \dots$$

Те ж саме стосується коефіцієнтів у зображенні (54), яке можна записати таким чином:

$$F^{(j+1)}(x, y) = u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\lfloor \frac{p}{2} \rfloor} f_{2p-2s, 2s}^{(j+1)} (x^{2p-2s} y^{2s} + x^{2s} y^{2p-2s}) (1 + \delta_{2p-2s, 2s})^{-1}. \tag{60}$$

Оскільки вирази (59), (60) повинні тотожно збігатися, то звідси приходимо до нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned}
& 8 \left(- \sum_{k=0}^s (p-2k+1) a_{2p-2k+2, 2k}^{(j+1)} - 2(p-1) \left(a_{2p-2s, 2s-2}^{(j+1)} + a_{2p-2s-2, 2s}^{(j+1)} \right) \right) = f_{2p-2s, 2s}^{(j+1)}, \\
& s = 0, \dots, \lfloor \frac{p}{2} \rfloor, \quad p = 0, 1, \dots, \quad 8a_{2,0}^{(j+1)} = f_{0,0}^{(j+1)},
\end{aligned} \tag{61}$$

яка явно розв'язується і знаходяться всі коефіцієнти зображення (53), крім коефіцієнта $a_{0,0}^{(j+1)}$. Останній визначається з умови (50):

$$a_{0,0}^{(j+1)} = - \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{s=0}^p a_{2s, 2p-2s}^{(j+1)} \beta_{2s, 2p-2s}. \tag{62}$$

Як наслідок викладеного вище, одержано символічний алгоритм, результатом дії якого

для m -го рангу ϵ

$$\begin{aligned} \lambda^m &= \sum_{j=0}^m \lambda^{(j)}, \quad a_{2s,2p-2s}^m = \left(\sum_{j=0}^m a_{2s,2p-2s}^{(j)} \right), \quad s = 0, 1, \dots, p, \quad p = 0, 1, \dots, \\ u^m(x, y) &= \sum_{j=0}^m u^{(j)}(x, y) = \\ &= u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p \left(\sum_{j=0}^m a_{2s,2p-2s}^{(j)} \right) x^{2s} y^{2p-2s} = \\ &= u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p a_{2s,2p-2s}^m x^{2s} y^{2p-2s}. \end{aligned} \quad (63)$$

При імplementації модифікованого FD-методу використовуємо скорочені варіанти наведених формул, задаючи у сумах натуральне число N замість ∞ . При цьому виконуємо послідовність дій, наведену в алгоритмі 1.

Алгоритм 1. Модифікований FD-метод.

Вхідні параметри: $N, m, a_{0,0}^{(0)} = 1, a_{2s,2p-2s}^{(0)} = 0$ ($s = 0, 1, \dots, p, p = 1, 2, \dots, N$),
 $\lambda^{(0)} = 0$.

Результат: $\lambda, a_{2s,2p-2s}^m$ ($s = 0, 1, \dots, p, p = 0, 1, \dots, N$), $\lambda^{(m)}$,
 обчислити $\beta_{2k,2p-2k}$ ($k = 0, 1, \dots, p, p = 0, 1, \dots, N + 1$) за формулою (55);

цикл по j від 0 (з кроком 1) по m виконувати

обчислити $\lambda^{(j+1)}$ за скороченою формулою (56):

$$\lambda^{(j+1)} = \sum_{p=0}^N \sum_{s=0}^p a_{2s,2p-2s}^{(j)} (\beta_{2s+2,2p-2s} + \beta_{2s,2p-2s+2});$$

знайти $a_{2s,2p-2s}^{(j+1)}$ ($s = 0, 1, \dots, p, p = 1, 2, \dots, N$) із системи (61);

знайти $a_{0,0}^{(j+1)}$ за скороченою формулою (62):

$$a_{0,0}^{(j+1)} = - \sum_{p=1}^N \sum_{s=0}^p a_{2s,2p-2s}^{(j+1)} \beta_{2s,2p-2s}$$

кінець.

Тут величина $\lambda^{(m)}$ характеризує точність імplementації.

Приклад 4. За допомогою с. к. а. Maple (Digits = 16) згідно з модифікованим FD-методом з $\hat{q}(x, y) = x^2 + y^2$ та $N = 6, m = 6$ обчислено наближення до власного значення λ_0 , а саме,

$$\lambda_0^6 = 0.7863301850443145.$$

Результати розрахунків наведено в табл. 5, а саме, наведено поправки $\lambda_0^{(j)}, j = 1, 2, \dots, 7$, до власного значення λ_0 .

Таблиця 5

j	$\lambda_0^{(j)}$
1	0.7978845608028654
2	-0.1067861937157927e-1
3	-0.8566485705929936e-3
4	-0.2196694150259330e-4
5	0.2634656238956339e-5
6	0.2244688851304913e-6
7	-0.1795600285161990e-8

Перевірку якості одержаного наближення проводимо за допомогою дослідження нев'язки, яку обчислюємо у такий спосіб. Будуємо вираз

$${}^{m,N}u(x, y) = u^{(0)}(x, y) \sum_{p=0}^N \sum_{s=0}^p a_{2s, 2p-2s}^m x^{2s} y^{2p-2s}, \quad (64)$$

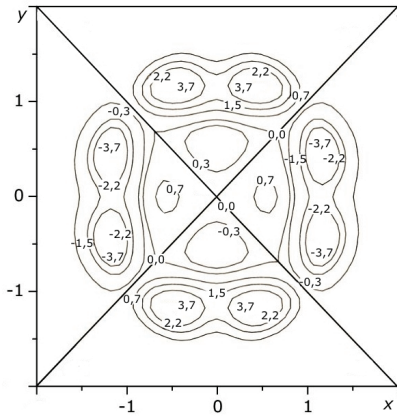
за допомогою якого знаходимо поліном

$$\begin{aligned} \exp\left(\left(x^2 + y^2\right)^2\right) &= \left(\frac{d^2 {}^{m,N}u_0(x, y)}{dx^2} + \left(\lambda_0 - q(x, y)\right) {}^{m,N}u_0(x, y)\right) = \\ &= \sum_{p=0}^{N+1} \sum_{s=0}^p r_{m, 2s, 2p-2s} x^{2s} y^{2p-2s}. \end{aligned}$$

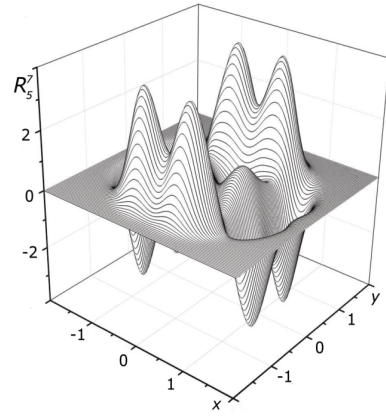
За нев'язку приймаємо функцію

$$R_m(x, y) = \exp\left(-\left(x^2 + y^2\right)^2\right) \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{s=0}^p r_{m, 2s, 2p-2s} x^{2s} y^{2p-2s}.$$

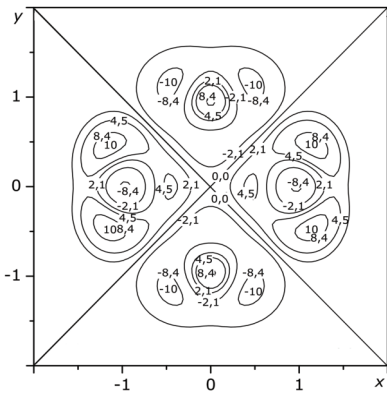
Зменшення верхнього індексу підсумовування у зовнішній сумі пов'язане із тим, що при чисельній імплементації замість формули (63) використовується формула (64). Зображені на рисунку лінії рівня функцій $R_m^s = 10^s R_m(x, y), x, y \in [-2, 2]$ (а, в, д) та їх 3D-графіки (б, г, е) (при $m = 5, s = 7$ (а, б), $m = 6, s = 8$ (в, г), $m = 7, s = 9$ (д, е)) демонструють експоненціальну швидкість збіжності запропонованої модифікації FD-методу.



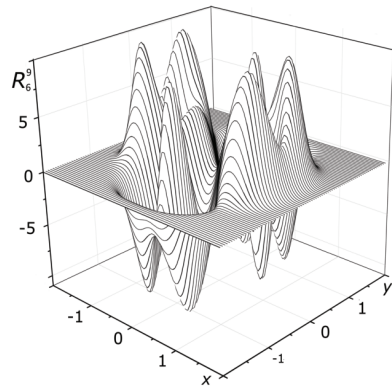
a



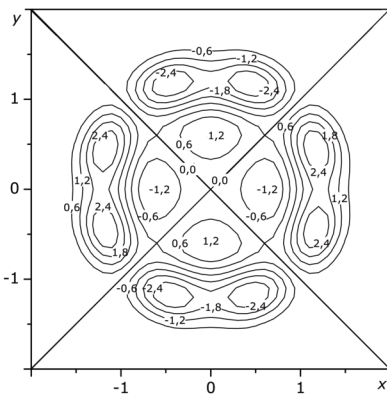
б



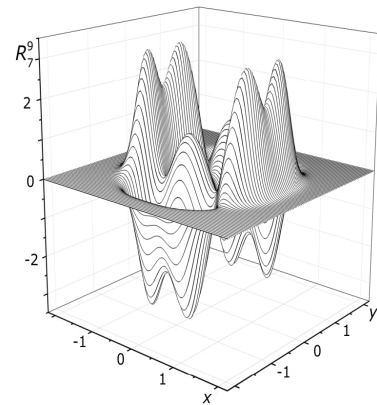
в



г



д



е

Література

1. *Magyari E.* Exact quantum-mechanical solutions for anharmonic oscillators // *Phys. Lett. A.* — 1981. — **81**, № 2. — P. 116–118.
2. *Banerjee K.* General anharmonic oscillators // *Proc. Roy. Soc. London A. Math., Phys., Eng. Sci.* — 1978. — **364**. — P. 265–275.
3. *Chaudhuri R. N., Mondal M.* Improved Hill determinant method: General approach to the solution of quantum anharmonic oscillators // *Phys. Rev. A.* — 1991. — **43**. — P. 3241–3246.
4. *Adhikari R., Dutt R., Varshni Y.* Exact solutions for polynomial potentials using supersymmetry inspired factorization method // *Phys. Lett. A.* — 1989. — **141**, № 1. — P. 1–8.
5. *Taylor D. R., Leach P. G.* Exact solutions of the Schrödinger equation for nonseparable anharmonic oscillator potentials in two dimensions // *J. Math. Phys.* — 1989. — **30**. — P. 1525–1532.
6. *Allgower E. L., Georg K.* Introduction to numerical continuation methods // *Soc. Industr. and Appl. Math.* — 2003.
7. *Armstrong M. A.* Basic topology. — New York: Springer-Verlag, 1983.
8. *Макаров В. Л., Романюк Н. М.* Нові властивості FD-методу при його застосуваннях до задач Штурма–Ліувілля // *Доп. НАН України.* — 2014. — № 2. — С. 26–31.
9. *Макаров В. Л., Романюк Н. М.* Новая реализация FD-метода для случая задачи Штурма–Ліувілля с краевыми условиями Дирихле–Неймана // *Тр. Ин-та математики НАН Украины.* — 2014. — **22**, № 1. — С. 98–106.
10. *Demkiv I., Gavrilyuk I. P., Makarov V. L.* Super-exponentially convergent parallel algorithm for eigenvalue problems with fractional derivatives // *Comput. Methods Appl. Math.* — 2016. — **16**, № 4. — P. 633–652.
11. *Gavrilyuk I., Makarov V., Romaniuk N.* Super-exponentially convergent parallel algorithm for a fractional eigenvalue problem of Jacobi-type // *Comput. Methods Appl. Math.* — 2018. — **18**, № 1. — P. 21–32.
12. *Макаров В. Л.* Точні розв'язки однієї спектральної задачі з диференціальним оператором Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом у \mathbb{R}^2 // *Доп. НАН України.* — 2017. — № 1. — С. 3–9.
13. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. — М.: Наука, 1974. — Т. 2.
14. *Макаров В. Л.* О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма–Ліувілля с кусочно-гладкими коэффициентами // *Докл. АН СССР.* — 1991. — **320**, № 1. — С. 34–39.
15. *Makarov V. L.* FD-method — an exponential convergence rate // *J. Comput. and Appl. Math.* — 1997. — **82**. — P. 69–74.
16. *Макаров В. Л., Романюк Н. М.* FD-метод для задачі на власні значення в гільбертовому просторі у випадку базової задачі з власними значеннями довільної кратності // *Доп. НАН України.* — 2015. — № 5. — С. 26–34.
17. *Макаров В. Л., Романюк Н. М., Лазурчак І. І.* FD-метод для задачі на власні значення з кратними власними значеннями базової задачі // *Зб. пр. Ін-ту математики НАН України.* — 2014. — **11**, № 4. — P. 239–265.
18. *Фихтенгольц Г. М.* Основы математического анализа. — М.: Наука, 1968. — Т. 2.

Одержано 28.09.17