ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2020, том 60, № 8, с. 1315–1328

УДК 517.927.4

ПАРАМЕТРИЗАЦИИ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ЭМДЕНА–ФАУЛЕРА И МОДЕЛЬ ТОМАСА–ФЕРМИ СЖАТОГО АТОМА

© 2020 г. С. В. Пикулин

119234 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ ФИЦ ИУ РАН, Россия

e-mail: spikulin@gmail.com

Поступила в редакцию 15.02.2020 г.
Переработанный вариант 15.02.2020 г.
Принята к публикации 09.04.2020 г.

Для нелинейного уравнения Эмдена–Фаулера рассмотрены сингулярная задача Коши и сингулярная двухточечная краевая задача на полупрямой $r \in [0,+\infty)$ и на отрезке $r \in [0,R]$ с краевым условием первого рода в начале координат и условием третьего рода в правом конце промежутка. Данная постановка краевой задачи при специальных значениях параметров отвечает модели Томаса–Ферми распределения плотности заряда внутри сферически симметричного тяжелого охлажденного атома, заключенного в ограниченном объеме либо занимающего все доступное пространство, где величина R соответствует границе сжатого атома и обращается в бесконечность для несжатого атома. Для краевой задачи на полупрямой получено новое параметрическое представление решения, охватывающее полный промежуток изменения аргумента, т.е. числовой луч $r \in [0,+\infty)$, с параметром t, пробегающим единичный отрезок. Для входящих в данное представление аналитических функций дан алгоритм явного вычисления коэффициентов Тейлора при $t = 0$. В приложении к задаче Томаса–Ферми о свободном атоме предъявлены соответствующие тейлоровские разложения, и продемонстрирован экспоненциальный характер их сходимости на единичном отрезке $t \in [0,1]$ с более высокой скоростью сходимости, чем у построенного ранее аналогичного представления. Дан эффективный аналитико-численный метод, позволяющий вычислить решение задачи Томаса–Ферми на полупрямой с любой наперед заданной точностью не только в окрестности $r = +\infty$, но также и в любой точке луча $r \in [0,+\infty)$. Получена новая формула для критического значения производной при постановке задачи Коши в начале координат, соответствующего решению задачи на полупрямой. В численном эксперименте показано, что полученная формула является более эффективной по сравнению с известной формулой Майораны. Для решения задачи Коши с положительным значением производной в начале координат получена параметризация решения, обеспечивающая выполнение краевых условий сингулярной краевой задачи на отрезке $r \in [0,R]$ при подходящем $R > 0$. Построен эффективный аналитико-численный метод решения такой задачи Коши и проведена его численная реализация. Библ. 23. Фиг. 4. Табл. 1.

Ключевые слова: уравнение Эмдена–Фаулера, сингулярная задача Коши, параметрическое представление, задача Томаса–Ферми, модель сжатого атома, уравнение Абеля II рода, модифицированный тест Пенлеве.

DOI: 10.31857/S004446692008013X

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. Задача Томаса–Ферми и уравнение Эмдена–Фаулера

Согласно известной модели Томаса–Ферми (см. [1], [2]) распределение кулоновского потенциала и плотности электронов внутри охлажденного ионизированного тяжелого атома или иона может быть описано с помощью коэффициента экранирования $\Psi(r)$, удовлетворяющего уравнению

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{1}{\sqrt{r}}\Psi^{3/2}(r) = 0, \quad r \in (0,R), \quad R \in (0,+\infty]. \tag{1.1}$$

В данной модели рассматриваются как уединенные частицы (атомы и ионы), так и сжатые в ограниченном объеме, например, помещенные внутрь кристаллической решетки. Случай уединенной частицы отвечает краевым условиям

$$\lim_{r\to+0}\Psi(r) = Z, \tag{1.2}$$

$$\lim_{r\to R}\Psi(r) = 0, \tag{1.3}$$

для уравнения (1.1), где физически $R > 0$ – размер, $Z > 0$ – заряд ядра, причем $R = +\infty$ в модели атома и $R \in (0,+\infty)$ в модели положительно заряженного иона. В случае сжатой частицы постановка задачи для уравнения (1.1) включает условие (1.2) в начале координат и условие третьего рода

$$\Psi(R) - R\frac{d\Psi}{dr}(R) = 0 \tag{1.4}$$

в правом конце $r = R$ промежутка интегрирования. Отметим, что при $R = +\infty$ условие (1.3), понимаемое в смысле предела при $r \to \infty$, и условие (1.4) совпадают, так как решение $\Psi(r)$ задачи (1.1)–(1.3) при $R = +\infty$ удовлетворяет соотношениям (см. [3]):

$$\Psi(r) = O(r^{-3}), \quad \frac{d\Psi}{dr} = O(r^{-4}), \quad r \to \infty. \tag{1.5}$$

Уравнение (1.1) является частным примером следующего уравнения Эмдена–Фаулера (см. [4, гл. VII]):

$$\frac{d^2y}{dr^2} - a_0 r^{\nu} y^{1+\sigma}(r) = 0, \quad a_0 \neq 0, \quad \sigma \neq 0, \quad r > 0, \tag{1.6}$$

при $\nu = -1/2$, $\sigma = 1/2$, $a_0 = 1$. Помимо атомной теории (см. [5, § 70]), сингулярное нелинейное уравнение (1.6) возникает также в задачах астрофизики ([6], [7]), теории погранслоя (см. [8], [9]) и в других приложениях.

Разработке методов решения различных задач для уравнений (1.1), (1.6) посвящена обширная литература (см., например, работы [10]–[14], а также [15] и цитированные там источники).

1.2. Сингулярная задача Коши и двухточечные краевые задачи для уравнения Эмдена–Фаулера

Для уравнения

$$\frac{d^2y}{dr^2} - r^{\nu} y^{1+\sigma}(r) = 0, \quad r \in (0, R), \quad \nu > -1, \quad \sigma > 0, \tag{1.7}$$

вида (1.6) при $a_0 = 1$ с условиями, заданными в начале координат

$$\lim_{r\to+0} y(r) = Z, \quad Z \in (0,+\infty), \tag{1.8}$$

$$\frac{dy}{dr}(0) = b, \quad b = \mathrm{const} \in \mathbb{R}, \tag{1.9}$$

сингулярная задача Коши (1.7)–(1.9) имеет в окрестности нуля единственное решение для любого $b \in \mathbb{R}$ согласно теореме Каратеодори (см. [16, гл. 2, § 1]). При этом существует некоторый критический наклон $b = B < 0$ графика в нуле, приводящий к решению двухточечной краевой задачи для уравнения (1.7) на полупрямой с условиями первого рода (1.8) и

$$\lim_{r\to+\infty} y(r) = 0. \tag{1.10}$$

При $b < B$ траектория решения задачи (1.7)–(1.9) пересекает горизонтальную ось в некоторой конечной точке $r = R \in (0,+\infty)$, где выполняется условие типа (1.3):

$$y(R) = 0. \tag{1.11}$$

При $b > B$ решение $y(r)$ неограниченно растет с ростом r и при некотором конечном $r = R$ удовлетворяет условию

$$y(R) - R\frac{dy}{dr}(R) = 0, \quad R \in (0, +\infty). \tag{1.12}$$

Решаемая проблема заключается, во-первых, в вычислении критического значения B и, во-вторых, в построении таких аналитических представлений решений уравнения (1.7), подчиненных условиям (1.8) и (1.10), (1.11) или (1.12), которые допускают эффективную численную реализацию.

В статье [15] дана формула критического наклона B при условии рациональности показателя $\nu > -1$ в уравнения (1.7). Частным случаем этого результата является известная формула Майораны (см. [17]). Кроме того, в [15] построено параметрическое представление семейства решений двухточечной краевой задачи (1.7), (1.8), (1.11) при $R \in (0, +\infty]$, или, иначе говоря, семейства решений задачи Коши (1.7)–(1.9) при $b \in (-\infty, B]$.

В настоящей работе получены аналогичные параметрическое представление решения задачи Коши (1.7)–(1.9) при $b = B$, т.е. краевой задачи на полупрямой (см. теорему 1), а также представление решения задачи при $b > 0$, где в концах отрезка параметризации решение $y(r)$ удовлетворяет краевым условиям (1.8) и (1.12) (см. теорему 2). Отметим, что условие первого рода (1.10) является предельным случаем условия третьего рода (1.12) при обращении R в бесконечность. Задача Коши при отрицательных значениях b из промежутка $(B, 0]$ в данной работе не рассмотрена.

Построенная параметризация решения задачи Коши при $b > 0$ не дает, строго говоря, метода решения краевой задачи (1.7), (1.8), (1.12) при заданном R, поскольку значение b в этом случае не задано. Однако в приложениях требуемое значение b может быть известно: например, в модели Томаса–Ферми b имеет физический смысл энергии взаимодействия (см. [5]). Соответствующая величина R в этом случае находится как значение параметризующей функции $r(t)$ в конце отрезка параметризации.

Для критического значения B получена новая формула на основе суммирования сходящегося с экспоненциальной скоростью числового ряда, имеющего явно вычисляемые коэффициенты. Для задачи Томаса–Ферми начальный отрезок соответствующего ряда вычислен явно, и продемонстрирована его более быстрая сходимость по сравнению с аналогичным рядом в формуле Майораны.

1.3. Параметрические представления решения задачи на полуоси

Предполагая в дальнейшем, что входящие в уравнения (1.6), (1.7) показатели σ и ν удовлетворяют условиям

$$\nu \neq -2, \quad \nu + \sigma \neq -2, \tag{1.13}$$

введем следующие обозначения:

$$\beta := \frac{\nu + 2}{\sigma} \neq 0, \quad f_0 := \beta(\beta + 1) \neq 0, \quad \omega_0 := -(2\beta + 1), \quad K := \frac{1}{\sigma\beta} = \frac{1}{\nu + 2}. \tag{1.14}$$

Известно (см. [15, теорема 1]), что при $\sigma > 0$ и при рациональном $\nu > -1$, т.е.

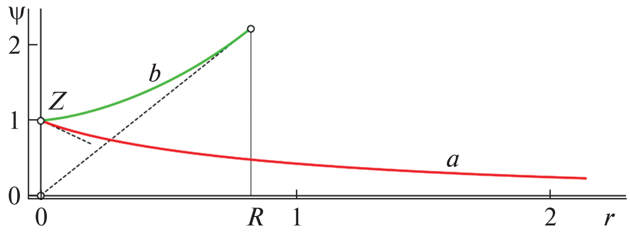
$$\nu =: \frac{N}{M}, \quad N \in \mathbb{Z}, \quad M \in \mathbb{N},$$

справедливо следующее параметрическое представление решения задачи (1.7), (1.8), (1.10) на полупрямой $r \in [0, +\infty)$:

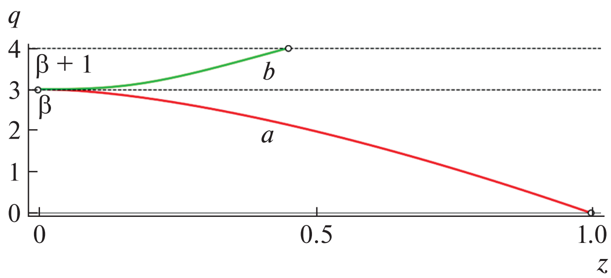
$$r(t) = \frac{f_0^K}{\mathcal{H}(1)} Z^{-1/\beta} t^{1/\alpha} (1 - t)^M \mathcal{H}(t), \quad y(t) = \mathcal{H}^\beta(1) Z t^{-\beta/\alpha} \mathcal{H}^{-\beta}(t), \quad t \in (0, 1], \tag{1.15}$$

где величины β, f_0, $K > 0$ заданы формулами (1.14),

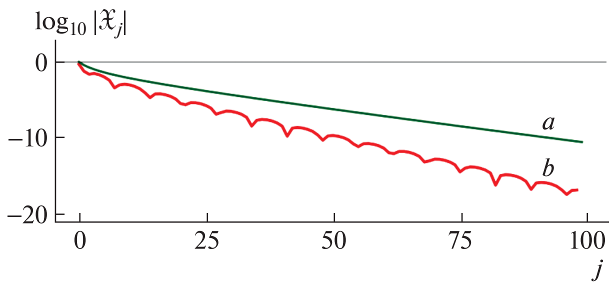
$$\alpha := -\frac{\omega_0 + \sqrt{\omega_0^2 + 4\sigma f_0}}{2} < 0, \tag{1.16}$$



Фиг. 1. Графики решений задачи (1.1), (1.2), (1.4), $Z = 1$: линия a – при $R = +\infty$, $y_r'(0) = B \approx -1.588$ (модель свободного атома Томаса–Ферми); линия b – при $R \approx 0.83$, $y_r'(0) = 10^{-3}$ (модель сжатого атома Томаса–Ферми).



Фиг. 2. Графики функции $q(z)$: линия a – сепаратриса седла $z = 1$, $q = 0$; линия b – траектория, ведущая из точки (2.10) в некоторую точку на прямой (2.12).



Фиг. 3. Абсолютные величины тейлоровских коэффициентов в полулогарифмической шкале: линия a – для функции $\mathcal{H}(t)$ из представления (1.15); линия b – для функции $\mathcal{F}(t)$ из представления (4.3).

положительная функция $\mathcal{H}(t)$ сохраняет аналитичность на всем отрезке параметризации $t \in [0,1]$, включая обе его концевые точки. В работе [15] построены формулы вычисления коэффициентов ряда Тейлора функции $\mathcal{H}(t)$ при $t = 0$ в конечном виде.

В случае задачи Томаса–Ферми (1.1)–(1.3) при $R = +\infty$, т.е. задачи (1.7), (1.8), (1.10) при $-\nu = \sigma = 1/2$ ряд Тейлора функции $\mathcal{H}(t)$ в представлении (1.15) демонстрирует в численном эксперименте экспоненциально быструю сходимость на всем отрезке параметризации $t \in [0,1]$ с радиусом сходимости ≈ 1.2 (см. [15, теорема 7]).

В настоящей работе построено (см. теорему 1) аналогичное (1.15) новое параметрическое представление решения задачи (1.7), (1.8), (1.10), где в качестве параметра выбрана другая переменная, пробегающая также единичный отрезок. В применении к задаче Томаса–Ферми эта новая параметризация демонстрирует еще более быструю экспоненциальную сходимость с эмпирическим (т.е. найденным численно) радиусом сходимости ≈ 1.5 (см. фиг. 3, табл. 1).

Неформально говоря, параметризация (1.15) отвечает представлению о нейтральном атоме как о предельном случае положительного иона с нулевой ионизацией, а новое представление (3.16) – как о предельном случае сжатого атома при отсутствии сжатия.

Таблица 1. Коэффициенты тейлоровских разложений (4.7)

j	ζ_j	F_j	$\mathcal{F}_j$
0	1.0	0.0	0.5
1	−2.9533364544E−01	−3.83210945E−01	5.83945274E−02
2	−7.4161080174E−02	−1.80565206E−01	−2.43726822E−02
3	−2.6019524330E−02	−9.64937461E−02	−3.05254965E−02
4	−8.4242415553E−03	−5.12759165E−02	−2.04407837E−02
5	−1.4015234843E−03	−2.57139891E−02	−1.03946693E−02
6	1.1159354471E−03	−1.15211011E−02	−3.81327351E−03
7	1.6545126696E−03	−4.08944635E−03	−3.90582397E−04
8	1.4088585127E−03	−5.88964617E−04	9.57424468E−04
9	9.5001385209E−04	7.53253283E−04	1.19040694E−03
10	5.2745463992E−04	1.02089432E−03	9.50353629E−04
11	2.2419700374E−04	8.40391994E−04	5.96439141E−04
12	4.3457487590E−05	5.42688574E−04	2.92825462E−04
13	−4.2859665627E−05	2.78053388E−04	8.94672998E−05
14	−6.8780919226E−05	9.51891916E−05	−1.98371089E−05
15	−6.2863370748E−05	−7.31107997E−06	−6.16857848E−05
16	−4.4757016704E−05	−5.00969534E−05	−6.41907493E−05
17	−2.5773970513E−05	−5.65613698E−05	−4.90885115E−05
18	−1.1017091429E−05	−4.55747799E−05	−3.00754398E−05
19	−1.7074035119E−06	−2.95541670E−05	−1.40631083E−05
20	2.9176323006E−06	−1.51661066E−05	−3.34673631E−06
21	4.3165669692E−06	−4.97748979E−06	2.35322605E−06
22	3.9144385311E−06	8.65727547E−07	4.38542273E−06
23	2.7856075925E−06	3.33263893E−06	4.24937609E−06
24	1.5928187835E−06	3.66554426E−06	3.15143830E−06
25	6.5536267050E−07	2.93804847E−06	1.87554200E−06
26	6.0034153292E−08	1.89433614E−06	8.25219758E−07
27	−2.3391715372E−07	9.52644429E−07	1.33005016E−07
28	−3.1674809848E−07	2.82731613E−07	−2.25248222E−07
29	−2.8056606611E−07	−1.00591374E−07	−3.40629629E−07
30	−1.9673292863E−07	−2.58088731E−07	−3.13795121E−07
31	−1.1014089154E−07	−2.71590941E−07	−2.26005912E−07
32	−4.2691342596E−08	−2.13630271E−07	−1.30160788E−07
33	−2.8554025466E−10	−1.35365078E−07	−5.32640063E−08
34	2.0147810733E−08	−6.58699421E−08	−3.67867890E−09
35	2.5232707912E−08	−1.69394478E−08	2.10625465E−08
36	2.1741548744E−08	1.06142554E−08	2.80083528E−08
37	1.4936555241E−08	2.14120854E−08	2.47391569E−08
38	8.1273068843E−09	2.15975946E−08	1.73087461E−08
39	2.9121558037E−09	1.66123077E−08	9.61597008E−09
40	−3.0828748875E−10	1.02915883E−08	3.60709248E−09

Использованный метод состоит в редукции исходного уравнения Эмдена–Фаулера (1.6) к такому уравнению первого порядка, которое является регулярным на всем отрезке изменения независимой переменной; эта редукция проведена в п. 2.3. Возможность описанного перехода обусловлена свойством частичного прохождения модифицированного теста Пенлеве в узловой особой точке уравнения Абеля II рода (см. [18]), получаемого из уравнения (1.6) в результате обычной процедуры понижения порядка. Описанный метод применялся в работах [15], [19], а также для построения автомодельных решений типа бегущей волны нелинейного параболического уравнения Колмогорова–Петровского–Пискунова (см. [20]).

2. ПОНИЖЕНИЕ ПОРЯДКА УРАВНЕНИЯ ЭМДЕНА–ФАУЛЕРА

В п. 2.1 данного раздела дано обобщение известной (см. [17], [18], [21], [22]) процедуры редукции уравнения (1.6) к уравнению первого порядка, сохраняющему регулярность вдоль всего исследуемого отрезка изменения независимой переменной при условии рациональности показателя ν. На основе проведенного в п. 2.2 анализа краевых условий (1.8), (1.12) для уравнения Эмдена–Фаулера в п. 2.3 описана используемая далее модификация этой процедуры.

2.1. Редукция уравнения Эмдена–Фаулера к уравнению Абеля II рода

Предполагая справедливость условий (1.13) и пользуясь обозначениями (1.14), применим к уравнению (1.6) подстановку (см. [4, гл. VII]):

$$\psi := f_0^{-1/\sigma} r^{\beta} y(r), \quad \rho := \ln r, \tag{2.1}$$

тогда уравнение (1.6) принимает следующий вид:

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \omega_0 \frac{d\psi}{d\rho} + f_0\psi(1 - a_0\psi^{\sigma}) = 0. \tag{2.2}$$

Определяя новую переменную $p = p(\psi)$ в виде

$$p(\psi) := \frac{d\psi}{d\rho}, \tag{2.3}$$

понижаем порядок уравнения (2.2) и получаем уравнение Абеля II рода

$$p(\psi)\frac{dp}{d\psi} + \omega_0 p(\psi) + f_0\psi(1 - a_0\psi^{\sigma}) = 0. \tag{2.4}$$

Следуя работам [15], [18], введем в рассмотрение параметр $\tilde{N} \neq 0$ и переменные q, z, связанные с p, ψ равенствами

$$p =: \psi q, \quad \psi =: z^{\tilde{N}/\sigma}, \tag{2.5}$$

тогда относительно $q(z)$ уравнение (2.4) принимает вид

$$\frac{\sigma}{2\tilde{N}} z \frac{dq^2}{dz} + q^2(z) + \omega_0 q(z) + f_0(1 - a_0 z^{\tilde{N}}) = 0. \tag{2.6}$$

Подставим $q(z)$ в левую часть уравнения (2.6) в виде

$$q(z) =: \beta(1 - z^M \mathfrak{Q}(z)), \quad M := K\tilde{N}, \tag{2.7}$$

где K задано последним равенством (1.14). С учетом (1.14) и соотношения $\beta^2 + \omega_0\beta + f_0 = 0$ получаем

$$\frac{\sigma}{2\tilde{N}} z \frac{dq^2}{dz} + q^2(z) + \omega_0 q(z) + f_0(1 - a_0 z^{\tilde{N}}) = -\frac{\sigma\beta}{\tilde{N}} zq\left(z^M \frac{d\mathfrak{Q}}{dz} + Mz^{M-1}\mathfrak{Q}(z)\right) + \beta^2(1 - 2z^M\mathfrak{Q}(z) +$$
$$+ z^{2M}\mathfrak{Q}^2(z)) + \omega_0\beta(1 - z^M\mathfrak{Q}(z)) + f_0(1 - a_0 z^{\tilde{N}}) = -\frac{1}{M} z^{M+1} q \frac{d\mathfrak{Q}}{dz} + \beta^2 z^{2M}\mathfrak{Q}^2 + (\beta - q) z^M \mathfrak{Q} - a_0 f_0 z^{\tilde{N}} =$$
$$= \beta z^{M+1}\left(-\frac{q}{\beta M}\frac{d\mathfrak{Q}}{dz} + (\beta + 1) z^{M-1}\mathfrak{Q}^2 - a_0(\beta + 1) z^{\tilde{N}-M-1}\right),$$

тем самым, уравнение (2.6) принимает вид

$$\frac{d\mathcal{Q}}{dz} = K\tilde{N}(\beta+1)\frac{z^{K\tilde{N}-1}\mathcal{Q}^2(z) - a_0 z^{(1-K)\tilde{N}-1}}{1 - z^{K\tilde{N}}\mathcal{Q}(z)}. \tag{2.8}$$

Наличие произвольного параметра $\tilde{N}$ в уравнениях (2.6) и (2.8) связано с тем, что эти уравнения сохраняют свой вид при степенных заменах переменной z. Если K является рациональным и лежит в единичном интервале, т.е.

$$-1 < \nu =: \frac{N}{M} \in \mathbb{Q}, \quad N \in \mathbb{Z}, \quad M \in \mathbb{N}, \quad K = \frac{M}{M+2N} \in (0,1) \cap \mathbb{Q}, \quad \tilde{N} = M + 2N, \tag{2.9}$$

то за счет выбора $\tilde{N}$ равным знаменателю K, т.е. $(M+2N)$, получаем, что правая часть уравнения (2.8) содержит только целые степени z и, более того, аналитическим образом зависит от переменных z, $\mathcal{Q}$ в окрестности $z = 0$. Тем самым для уравнения (2.8) при указанных условиях справедлива теорема Коши (см. [23, гл. I, § 3]) о существовании единственного аналитического решения $\mathcal{Q}(z)$ в окрестности точки $z = 0$, $\mathcal{Q} = C$ для любого $C \in \mathbb{C}$. В этом случае все решения уравнения (2.6), проходящие через точку $z = 0$, $\mathcal{Q} = \beta$, имеют вид (2.7) с аналитической функцией $\mathcal{Q}(z)$. Все такие решения являются аналитическими функциями при $z = 0$ в силу того, что $M \in \mathbb{N}$ (см. [15, гл. I, § 3]).

Отметим, что редукция уравнения (1.6) к уравнению (2.8) была ранее известна (см. [21], [22]) в частном случае $-\nu = \sigma \in (0,1)$ при $\tilde{N} = (2-\sigma)(1+\sigma^2/(1-\sigma)^2)$. При $-\nu = \sigma = 1/2$ уравнение (2.8) с параметрами $K = 2/3$, $\tilde{N} = 3$, $\beta = 3$ было выведено Э. Майораной (см. [17]). В работах [15], [18] указанная редукция проведена при $\sigma > 0$ и $-1 < \nu \in \mathbb{Q}$, а в данной работе – при любых σ, ν, удовлетворяющих условиям (1.13).

Отметим, что функция $\mathcal{H}(t)$ в представлении (1.15) выражается через решение $\mathcal{Q}(z)$ соответствующего уравнения (2.8) (см. [15, п. 2.1.1]).

2.2. Краевые условия типа сжатого атома в терминах переменной q

Известно (см., например, [15, п. 1.5], [20, предложение 1]), что краевое условие (1.8) для уравнения (1.7) при $\sigma > 0$, $\nu > -1$ влечет равенства

$$z = 0, \quad q = \beta \tag{2.10}$$

при всяком $Z \in (0, +\infty)$.

Известно также (см., например, [4]), что при $R = +\infty$ условие (1.12) приводит в пределе при $r \to +\infty$, $y \to 0$ к равенствам

$$z = 1, \quad q = 0. \tag{2.11}$$

Отметим, что точка (2.11) является седловой для уравнения (2.6), а соответствующая траектория этого уравнения – сепаратрисой седла (см. фиг. 2, линия *a*).

Легко видеть, что условие (1.12), достигаемое при $y \neq 0$ (при конечных значениях R), выражается равенством

$$q = \beta + 1. \tag{2.12}$$

В самом деле, из первого равенства (2.5) и из (2.3) находим $q = d(\ln\psi)/d\rho$, и с учетом (2.1) имеем

$$y(R) - R\frac{dy}{dr}(R) = \left[\left(1 - \frac{d\ln y}{d\ln r}\right)y\right](R) = \left[\left(1 + \beta - \frac{d\ln\psi}{d\rho}\right)y\right](R).$$

Таким образом, траектории решения уравнения (2.6) на плоскости (z, q), отвечающие решениям задачи (1.7)–(1.12), при различных R, Z имеют один конец в точке (2.10), а второй конец – либо в точке (2.11), либо на прямой (2.12) (см. фиг. 2).

2.3. *Модифицированная схема редукции*

Преобразуем уравнение (2.6) таким образом, чтобы независимая переменная оказалась связана с q взаимно однозначным образом. Введем в рассмотрение новую переменную w с помощью следующей подстановки, аналогичной (2.7):

$$q =: \beta(1-\epsilon w^M), \quad \epsilon = \pm 1, \quad M = K\tilde{N} = \frac{\tilde{N}}{\sigma\beta}, \tag{2.13}$$

где параметр знака ϵ выбирается в зависимости от поведения q в окрестности точки (2.10) в исследуемой задаче: $\epsilon = 1$ при $q < \beta$ либо $\epsilon = -1$ при $q > \beta$.

Подставляя (2.13) в правую часть уравнения (2.6), находим

$$\frac{\sigma}{2\tilde{N}} z\frac{dq^2}{dz} + q^2(z) + \omega_0 q(z) + f_0(1-a_0 z^{\tilde{N}}) - \epsilon z q w^{M-1}\frac{dw}{dz} + \beta^2(1-2\epsilon w^M + w^{2M}) +$$
$$+ \omega_0\beta(1-\epsilon w^M) + f_0(1-a_0 z^{\tilde{N}}) = \beta(-\epsilon z(1-\epsilon w^m)w^{M-1}\frac{dw}{dz} + \epsilon w^M + \beta w^{2M} - a_0(\beta+1)z^{\tilde{N}}),$$

откуда получаем уравнение

$$\frac{dw}{dz} = \frac{\beta w^{2M} + \epsilon w^M - a_0(\beta+1)z^{\tilde{N}}}{z(\epsilon - w^M)w^{M-1}}. \tag{2.14}$$

Переходя в уравнении (2.14) к w как независимой переменной и вводя новую переменную ζ по формуле

$$z =: \zeta w, \tag{2.15}$$

находим

$$\zeta + w\frac{d\zeta}{dw} = \frac{\zeta(\epsilon - w^M)w^M}{\beta w^{2M} + \epsilon w^M - a_0(\beta+1)\zeta^{\tilde{N}} w^{\tilde{N}}},$$

далее, перенося слагаемое ζ в правую часть и сокращая полученную дробь на w^M, получаем

$$w\frac{d\zeta}{dw} = \zeta\frac{-(\beta+1)w^M + a_0(\beta+1)w^{\tilde{N}-M}\zeta^{\tilde{N}}}{\beta w^M + \epsilon - a_0(\beta+1)w^{\tilde{N}-M}\zeta^{\tilde{N}}}, \quad \frac{d\zeta}{dw} = (\beta+1)\zeta\frac{-w^{K\tilde{N}-1} + a_0 w^{(1-K)\tilde{N}-1}\zeta^{\tilde{N}}}{\epsilon + \beta w^{K\tilde{N}} - a_0(\beta+1)w^{(1-K)\tilde{N}}\zeta^{\tilde{N}}}. \tag{2.16}$$

Отметим, что если выполнены условия (2.9), то правая часть уравнения (2.16) подобно уравнению (2.8) содержит только целые неотрицательные степени переменных ζ, w и удовлетворяет условиям теоремы Коши при $\zeta = 0$.

3. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЭМДЕНА–ФАУЛЕРА

В этом разделе получены параметрические представления решений сингулярной задачи Коши (1.7)–(1.9) при $b > 0$, удовлетворяющих в концах отрезка параметризации краевым условиям (1.8) и (1.12), а также параметризация решения сингулярной краевой задачи на полупрямой. Предполагается, что для показателя ν в уравнении (1.7) выполнены условия рациональности (2.9).

3.1. *Задача на полупрямой*

Рассмотрим задачу (1.7), (1.8), (1.10) на луче $r \in (0,+\infty)$. Известно (см. [4]), что при любом $Z \in (0,+\infty)$ эта задача имеет единственное решение, которое представляет собой положительную монотонно убывающую аналитическую функцию, имеющую на бесконечности асимптотику

$$y(r) \sim f_0^{1/\sigma} r^{-\beta}, \quad r \to +\infty, \tag{3.1}$$

где константы $f_0 > 0$, $\beta > 0$ заданы равенствами (1.14). Согласно (2.1) имеем $\psi \sim 1$ при $r \to \infty$.

Проводя анализ фазовой диаграммы, можно показать (см., например, [15], [20]), что решение $y(r)$ задачи (1.7), (1.8), (1.10) в результате подстановок (2.1), (2.3), (2.5) приводит к траектории уравнения (2.6), выходящей из его седловой точки (2.10) в виде сепаратрисы с отрицательным наклоном к оси z и входящей в точку (2.11), при этом решение $q(z)$ является монотонно убывающей аналитической функцией на полуинтервале $z \in (0,1]$. Если, кроме того, выполнено условие рациональности (2.9), то функция $q(z)$ аналитична при $z = 0$ и имеет разложение в ряд Тейлора по степеням z (см. [15]) в виде

$$q(z) = \beta(1 - Cz^M + g_{\tilde{N}} z^{\tilde{N}} + g_{\tilde{N}+1} z^{\tilde{N}+1} + \cdots), \quad C > 0, \tag{3.2}$$

где число C связано с производной в начале координат $y_r'(0)$ решения исходной задачи (1.7)–(1.12) следующей формулой (см. [15, теорема 6]):

$$\frac{dy}{dr}(0) = -\frac{\beta C}{f_0^K} Z^{1+1/\beta}. \tag{3.3}$$

Переходя с помощью подстановок (2.13), (2.15) при $\epsilon = 1$ к переменным ζ, w, получаем относительно $\zeta = \zeta(w)$ задачу Коши для уравнения (2.16) на отрезке $w \in [0,1]$ с условиями

$$\zeta(1) = 1, \quad \frac{d\zeta}{dw}(1) > 0, \tag{3.4}$$

где значение производной при $w = 1$ задается требованием аналитичности решения $\zeta(w)$, соответствующего сепаратрисе седла $w = 1$, $\zeta = 1$.

Вводя новую переменную

$$t := 1 - w, \tag{3.5}$$

получаем из (2.16), (3.4) следующую задачу относительно $\zeta(t)$:

$$\frac{d\zeta}{dt} = (\beta + 1)\zeta(t)\frac{(1 - t)^{M-1} - (1 - t)^{\tilde{N}-M-1}\zeta^{\tilde{N}}(t)}{1 + \beta(1 - t)^M - (\beta + 1)(1 - t)^{\tilde{N}-M}\zeta^{\tilde{N}}(t)}, \quad t \in [0,1], \tag{3.6}$$

$$\zeta(0) = 1, \quad \frac{d\zeta}{dt}(0) = \gamma := \frac{1}{\alpha} + 1 < 0, \tag{3.7}$$

где α задано формулой (1.16), начальное значение γ удовлетворяет требованию равенства членов нулевого порядка по t в уравнении (3.6) относительно аналитической функции $\zeta(t)$:

$$\gamma = (\beta + 1)\frac{1 - M - (\tilde{N}\gamma - (\tilde{N} - M - 1))}{-\beta M - (\beta + 1)(\tilde{N}\gamma - (\tilde{N} - M))} \equiv \frac{-2(\beta + 1)M - (\beta + 1)\tilde{N}(\gamma - 1)}{\omega_0 M - (\beta + 1)\tilde{N}(\gamma - 1)},$$

$$\gamma - 1 = \frac{-1}{\omega_0 - \sigma\beta(\beta + 1)(\gamma - 1)}, \quad -\sigma f_0(\gamma - 1)^2 + \omega_0(\gamma - 1) + 1 = 0.$$

Ряд Тейлора функции $\zeta(t)$ в точке $t = 0$ можно найти из уравнения (3.6) методом неопределенных коэффициентов по аналогии с рядом Тейлора для решения $\mathcal{Q}(z)$ уравнения (2.8) при $z = 1$ (см. [15, п. 2.1.2]).

Из подстановок (2.3), (2.5), (2.7), (2.15) находим

$$\rho = \int^{\psi} \frac{d\psi}{p(\psi)} = \int^{\psi} \frac{d\ln\psi}{q(\psi)} = \frac{\tilde{N}}{\sigma}\int^{z}\frac{d\ln z}{q(z)} = \frac{\tilde{N}}{\sigma\beta}\left(\int^{w}\frac{d\ln w}{1 - w^M} + \int^{w}\frac{d\ln\zeta(w)}{1 - w^M}\right) =: J_1(w) + J_2(w),$$

где с учетом последнего равенства (2.13) получаем

$$J_1 = M\int^{w}\frac{d\ln w}{1 - w^M} = \int^{w}\left(\frac{1}{w^M} + \frac{1}{1 - w^M}\right)dw^M = \ln\frac{w^M}{1 - w^M} + c_1, \quad c_1 = \text{const}, \tag{3.8}$$

$$J_2 = M\int^{w}\frac{d\ln\zeta(w)}{1 - w^M} = M\int^{w}\frac{\zeta'(w)/\zeta(w)}{(1 - w)(1 + w + \cdots + w^{M-1})}dw. \tag{3.9}$$

Исходя из условий (3.4) и подстановки (3.5), находим $(\zeta'_w/\zeta) = -\gamma$ при $w = 1$, следовательно, подынтегральное выражение в правой части равенства (3.9) имеет при $w = 1$ полюс с вычетом (γ/M). Таким образом, имеем

$$J_2 = \gamma\int^w \frac{dw}{w-1} + \int^w \frac{h(w)}{1 + w + \cdots + w^{M-1}}dw, \tag{3.10}$$

где функция

$$h(w) := \frac{M\zeta'(w)/\zeta(w) + \gamma(1 + w + \cdots + w^{M-1})}{1-w},$$

является аналитической при $w = 1$, точнее, имеет устранимую особенность в этой точке (полюс первого порядка с нулевым вычетом).

Переходя к переменной t с помощью замены (3.5) и вводя в рассмотрение многочлен

$$P(t) := 1 + (1-t) + \cdots + (1-t)^{M-1} = \frac{1-(1-t)^M}{t} \ge P(1) = 1, \quad t \in [0,1], \tag{3.11}$$

на основании подстановок (2.1), (2.5), (2.15) и равенств (2.13), (3.8)–(3.10) получаем

$$\begin{gathered} r(t) = \exp\rho = C_1 t^{\gamma-1}(1-t)^M \mathcal{F}(t), \quad C_1 = \mathrm{const} > 0, \\ y(t) = f_0^{1/\sigma} r^{-\beta}(\zeta w)^{\widetilde{N}/\sigma} = C_2 t^{(1-\gamma)\beta}\mathcal{F}^{-\beta}(t)\zeta^{\widetilde{N}/\sigma}(t), \quad C_2 = f_0^{1/\sigma}C_1^{-\beta}, \end{gathered} \tag{3.12}$$

где

$$\mathcal{F}(t) = \frac{\exp F(t)}{P(t)}, \quad F(t) := \int_0^t f(t)dt, \quad f(t) := \frac{(M\zeta'(t)/\zeta(t) - \gamma P(t))t^{-1}}{P(t)}. \tag{3.13}$$

Отметим, что коэффициенты ряда Тейлора для функций $f(t)$, $F(t)$, $\mathcal{F}(t)$ выражаются в конечном виде через соответствующие коэффициенты $\zeta(t)$ (аналогичные формулы см., например, [15, п. 2.12]).

Вводя обозначения

$$\zeta_e := \zeta(t)\big|_{t=1}, \quad \mathcal{F}_e := \mathcal{F}(t)\big|_{t=1}, \tag{3.14}$$

находим константу C_1 в представлении (3.12) из краевого условия (1.8), т.е. $y = Z$ при $t = 1$:

$$Z = f_0^{1/\sigma}C_1^{-\beta}\mathcal{F}_e^{-\beta}\zeta_e^{\tilde{N}/\sigma}, \quad C_1 = Z^{-1/\beta}f_0{}^K\frac{\zeta_e^M}{\mathcal{F}_e}.$$

Найдем производную решения $y(r)$ в начале координат $r = 0$. Сопоставляя (3.2), (2.15) и (2.13) при $\varepsilon = 1$, находим $C = 1/\zeta^M$ при $z = w = 0$, откуда по формуле (3.3) получаем

$$\frac{dy}{dr}(0) = BZ^{1+1/\beta}, \quad B = -\frac{\beta}{f_0^K\zeta_e^M} < 0. \tag{3.15}$$

На основании изложенного приходим к следующему результату.

Теорема 1. *Для решения задачи* (1.7), (1.8), (1.10) *при рациональном* ν *вида* (2.9) *справедливо следующее параметрическое представление*:

$$r(t) = Z^{-1/\beta}f_0{}^K\frac{\zeta_e^M}{\mathcal{F}_e}t^{1/\alpha}(1-t)^M\mathcal{F}(t), \quad y(t) = Z\frac{\mathcal{F}_e^\beta}{\zeta_e^{\tilde{N}/\sigma}}t^{-\beta/\alpha}\frac{\zeta^{\tilde{N}/\sigma}(t)}{\mathcal{F}^\beta(t)}, \tag{3.16}$$

где функции $\zeta(t)$, $\mathcal{F}(t)$ *являются положительными и аналитическими на отрезке* $[0,1]$, *причем* $\zeta(t)$ *удовлетворяет уравнению* (3.6) *и условиям* (3.7), *а* $\mathcal{F}(t)$ *выражается через* $\zeta(t)$ *по формулам* (3.11), (3.13), *константы* β, f_0, M, $\tilde{N}$, K, α, ζ_e, $\mathcal{F}_e$ *находятся по формулам* (1.14), (2.9), (1.16), (3.14). *Производная решения в нуле* $y_r(0)$ *вычисляется по формуле* (3.15).

3.2. Задача на отрезке

Рассмотрим задачу (1.7)–(1.12), (2.9) при $R \in (0, +\infty)$. В качестве входных данных вместо пары (Z, R) будем рассматривать данные Коши – пару (Z, b), где наклон $b := y_r'(0)$ графика решения в начале координат превышает критическое значение (3.15): $b > BZ^{1+1/\beta}$.

Построим параметрическое представление решения $y(r)$ этой задачи, ограничившись рассмотрением случая $b > 0$, когда соответствующая этому решению траектория уравнения (2.6) взаимно однозначным образом проектируется на отрезок вертикальной оси $q \in [\beta, \beta + 1]$, соединяя точку (2.10) и некоторую точку на прямой (2.12) (см. фиг. 2, линия b).

Воспользуемся подстановкой (2.13) при $\epsilon = -1$, $a_0 = 1$,

$$q =: \beta(1 + w^M), \tag{3.17}$$

приведя уравнение (2.6) к виду (2.16):

$$\frac{d\zeta}{dw} = (\beta + 1)\zeta(w)\frac{-w^{M-1} + w^{\tilde{N}-M-1}\zeta^{\tilde{N}}(w)}{-1 + \beta w^M - (\beta + 1)w^{\tilde{N}-M}\zeta^{\tilde{N}}(w)}, \quad w \in [0, \beta^{-1/M}], \quad \zeta(0) = \zeta_0, \tag{3.18}$$

где начальное значение ζ_0 функции $\zeta(w)$ при $w = 0$ находится из формулы (3.3) с учетом равенства $C = -1/\zeta_0^M$, следующего из разложения (3.2) и подстановки (3.17):

$$b = \frac{\beta}{f_0^K \zeta_0^M} Z^{1+1/\beta}, \quad \zeta_0 = \frac{\beta^{1/M}}{f_0^{1/\tilde{N}} b^{1/M}} Z^{(\beta+1)/(\beta M)}. \tag{3.19}$$

Из подстановок (2.3), (2.5), (3.17), (2.15) находим

$$\rho = \int^{\psi} \frac{d\psi}{p(\psi)} = \int^{\psi} \frac{d\ln\psi}{q(\psi)} = \frac{\tilde{N}}{\sigma}\int^{z} \frac{d\ln z}{q(z)} = \frac{\tilde{N}}{\sigma\beta}\left(\int^{w} \frac{d\ln w}{1 + w^M} + \int^{w} \frac{d\ln\zeta(w)}{1 + w^M}\right) =: I_1(w) + I_2(w),$$

где с учетом последнего равенства (2.13) имеем

$$I_1 = M\int^{w} \frac{d\ln w}{1 + w^M} = \int^{w} \left(\frac{1}{w^M} - \frac{1}{1 + w^M}\right) dw^M = \ln\frac{w^M}{1 + w^M} + c_2, \quad c_2 = \text{const}, \tag{3.20}$$

$$I_2 = M\int^{w} \frac{d\ln\zeta(w)}{1 + w^M} = M\int^{w} \frac{\zeta'(w)}{(1 + w^M)\zeta(w)} dw. \tag{3.21}$$

Из подстановок (2.1), (2.5), (2.15) и равенств (3.20), (3.21) получаем

$$\begin{gathered} r(t) = \exp\rho = C_3 w^M \mathcal{G}(t), \quad C_3 = \text{const} > 0, \\ y(t) = f_0^{1/\sigma} r^{-\beta}(\zeta w)^{\tilde{N}/\sigma} = f_0^{1/\sigma} C_3^{-\beta} \mathcal{G}^{-\beta}(w)\zeta^{\tilde{N}/\sigma}(w), \end{gathered} \tag{3.22}$$

где функция

$$\mathcal{G}(w) = \frac{1}{1 + w^M}\exp\left\{M\int_0^{w} \frac{\zeta'(w)}{(1 + w^M)\zeta(w)} dw\right\} \tag{3.23}$$

является аналитической на отрезке $w \in [0, \beta^{-1/M}]$. Константа C_3 находится из условия $y = Z$ при $r = w = 0$ с учетом равенств (3.19):

$$Z = f_0^{1/\sigma} C_3^{-\beta} \zeta_0^{\tilde{N}/\sigma}, \quad C_3 = Z\frac{\beta}{b}. \tag{3.24}$$

Получаем следующий результат.

Теорема 2. *Для решения* $y(r)$ *задачи* (1.7)–(1.12), (2.9), *производная которого в нуле равна*

$$b = \frac{dy}{dr}(0) > 0,$$

справедливо следующее параметрическое представление с параметром w:

$$r(w) = Z\frac{\beta}{b}w^M\mathcal{G}(w), \quad y(w) = Z\mathcal{G}^{-\beta}(w)\left(\frac{\zeta(w)}{\zeta_0}\right)^{\tilde{N}/\sigma}, \quad w \in [0, w_1], \quad w_1 := \beta^{-1/M}, \tag{3.25}$$

где функции $\zeta(w)$, $\mathcal{G}(w)$ являются положительными и аналитическими на отрезке $[0, w_1]$, причем $\zeta(w)$ есть решение задачи Коши (3.18), (3.19), *а $\mathcal{G}(w)$ выражается через $\zeta(w)$ по формуле* (3.23), *константы β, f_0, M, $\tilde{N}$ находятся по формулам* (1.14), (2.9).

Коэффициенты Тейлора функции $\zeta(w)$ при $w = 0$ (и в любой точке отрезка $[0, w_1]$, где известно значение функции) получаются методом неопределенных коэффициентов из уравнения (3.18). Тейлоровское разложение функции $\mathcal{G}(w)$ находится из соответствующего разложения функции $\zeta(w)$ при помощи арифметики степенных рядов.

4. ЗАДАЧА ТОМАСА–ФЕРМИ

Для уравнения (1.1) введенные выше константы (1.14), (1.16), (2.9), (3.7) имеют следующие числовые значения:

$$\nu = -\frac{1}{2}, \quad \sigma = \frac{1}{2}, \quad M = 2, \quad \tilde{N} = 3, \quad K = \frac{2}{3}, \quad \beta = 3, \quad \omega_0 = -7, \quad f_0 = 12, \tag{4.1}$$

$$\alpha = \frac{7 - \sqrt{73}}{2} \approx -0.772, \quad \gamma = \frac{1}{\alpha} + 1 = \frac{5 - \sqrt{73}}{12} \approx -0.295. \tag{4.2}$$

4.1. Задача на полупрямой

Применим теорему 1 к решению задачи (1.1)–(1.3) при $R = +\infty$, отвечающей модели свободного атома Томаса–Ферми. Представление (3.16) с учетом равенств (4.1) в этом случае принимает вид

$$r(t) = Z^{-1/3}12^{2/3}\frac{\zeta_e^{\,2}}{\mathcal{F}_e}t^{1/\alpha}(1-t)^2\mathcal{F}(t), \quad y(t) = Z\frac{\mathcal{F}_e^{\,3}}{\zeta_e^{\,6}}t^{-3/\alpha}\frac{\zeta^6(t)}{\mathcal{F}^3(t)}, \tag{4.3}$$

где аналитическая функция $\zeta(t)$ является решением задачи (3.6), (3.7) на отрезке $t \in [0, 1]$:

$$\frac{d\zeta}{dt} = 4\zeta(t)\frac{1 - t - \zeta^3(t)}{1 + 3(1-t)^2 - 4(1-t)\zeta^3(t)}, \quad \zeta(0) = 1, \quad \frac{d\zeta}{dt}(0) = \gamma, \tag{4.4}$$

аналитическая функция $\mathcal{F}(t)$ выражается через $\zeta(t)$ по формулам

$$\mathcal{F}(t) = \frac{\exp F(t)}{2 - t}, \quad F(t) := \int_0^t f(t)dt, \quad f(t) := \frac{(2\zeta'(t)/\zeta(t) - (2-t)\gamma)t^{-1}}{2 - t}, \tag{4.5}$$

числа α, γ принимают значения (4.2), а константы ζ_e, $\mathcal{F}_e$ определены равенствами (3.14).

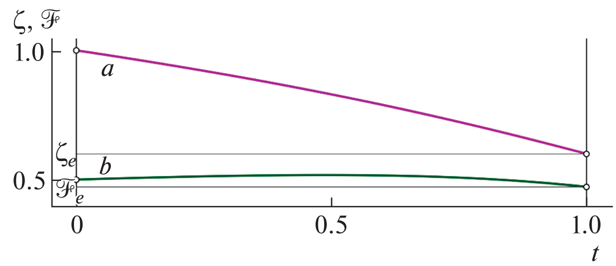
Производная решения $y(r)$ в нуле вычисляется по формуле (3.15):

$$\frac{dy}{dr}(0) = BZ^{4/3}, \quad B = -\frac{3}{12^{2/3}\zeta_e^{\,2}}. \tag{4.6}$$

В табл. 1 даны значения нескольких коэффициентов тейлоровских разложений при $t = 0$ функций, используемых в представлении (4.3):

$$\zeta(t) =: \sum_{j=0}^{\infty}\zeta_j t^j, \quad F(t) =: \sum_{j=0}^{\infty}F_j t^j, \quad \mathcal{F}(t) =: \sum_{j=0}^{\infty}\mathcal{F}_j t^j, \tag{4.7}$$

где коэффициенты ζ_j найдены методом неопределенных коэффициентов из данных задачи (4.4), а коэффициенты F_j, $\mathcal{F}_j$ получены из ζ_j в соответствии с формулами (4.5). На фиг. 3 дана зависимость от порядкового номера абсолютных величин тейлоровских коэффициентов функций $\mathcal{F}(t)$, $\mathcal{H}(t)$, входящих в параметрические представления соответственно (4.3) и (1.15). Приведенные графики демонстрируют экспоненциальный характер сходимости обоих представлений на



Фиг. 4. Графики функций, входящих в параметризацию (4.3): линия a – график функции $\zeta(t)$; линия b – график функции $\mathcal{F}(t)$.

единичном отрезке с преимуществом по скорости сходимости у нового представления (4.3). Графики функций $\zeta(t)$, $\mathcal{F}(t)$ приведены на фиг. 4.

4.2. Задача на отрезке

Рассмотрим задачу (1.1), (1.2), (1.4) при $R \in (0,+\infty)$, отвечающую модели сжатого атома Томаса–Ферми. Накладывая дополнительно условие положительности производной $\Psi'_r(0)$ решения в нуле, применим теорему 2 к решению этой задачи. Представление (3.25) с учетом равенств (4.1) принимает следующий вид:

$$r(w) = Z\frac{3}{b}w^2\mathcal{G}(w), \quad y(w) = Z\mathcal{G}^{-3}(w)\left(\frac{\zeta(w)}{\zeta_0}\right)^6, \quad w \in [0, w_1], \quad w_1 := \frac{1}{\sqrt{3}}, \tag{4.8}$$

где $\zeta(w)$ является решением задачи Коши (3.18), (3.19):

$$\begin{gathered} \frac{d\zeta}{dw} = 4\zeta(w)\frac{\zeta^3(w) - w}{-1 + 3w^2 - 4w\zeta^3(w)}, \quad w \in [0, w_1], \quad w_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \\ \zeta(0) = \zeta_0 = \frac{\sqrt{3}Z^{2/3}}{12^{1/3}\sqrt{b}}, \end{gathered} \tag{4.9}$$

функция $\mathcal{G}(w)$ имеет вид

$$\mathcal{G}(w) = \frac{1}{1 + w^2}\exp\left\{2\int_0^w \frac{\zeta'(w)}{(1 + w^2)\zeta(w)}dw\right\}. \tag{4.10}$$

На фиг. 1, линия b, приведен график решения задачи (1.1), (1.2), (1.4), полученного в численном эксперименте с использованием формул (4.8)–(4.10).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Fermi E.* Un metodo statistico per la determinazione di alcune prioprieta dell'atomo // Rend. Accad. Naz. Lincei 6. 1927. P. 602–607.
2. *Thomas L.H.* The calculations of atomic fields // Proc. Cambridge Philos. Soc. 1927. № 23. P. 542–598.
3. *Sommerfeld A.* Integrazione asintotica dell'equazione differenziale di Fermi–Thomas // Rend. R. Accademia dei Lincei 15. 1932. P. 293–308.
4. *Беллман Р.* Теория устойчивости решений дифференциальных уравнений. М.: Изд-во иностр. лит., 1954.
5. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
6. *Lane J.H.* On the theoretical temperature of the Sun under the hypothesis of a gaseous mass maintaining its volume by its internal heat and depending on the laws of gases known to terrestrial experiment // The American Journal of Science and Arts. 1870. V. 2. P. 57–74.
7. *Emden R.* Gaskugeln: Anwendungen der mechanischen W armetheorie auf kosmologische und meteorologische Probleme. Leipzig, Berlin: Teubner, 1907.

8. *Nachman A., Callegari A.* A nonlinear singular boundary value problem in the theory of pseudoplastic fluids // SIAM J. Appl. Math. 1980. V. 38. № 2. P. 275–281.
9. *Олейник О.А., Самохин В.Н.* Математические методы в теории пограничного слоя. М.: Физматгиз, 1997.
10. *Laurenzi B.J.* An analytic solution to the Thomas–Fermi equation // Jour. Math. Phys. 1990. V. 31. № 10. P. 2535–2537.
11. *Wazwaz A.* The variational iteration method for solving linear and nonlinear ODEs and scientific models with variable coefficients // Cent. Eur. J. eng. 2019. V. 135. P. 186–205.
12. *Parand K., Delkhosh M.* Accurate solution of the Thomas–Fermi equation using the fractional order of rational chebyshev functions // J. Comput. Appl. Mathem. 2017. V. 317. P. 624–642.
13. *Zhang X., Boyd J.P.* Revisiting the Thomas–Fermi equation: Accelerating rational chebyshev series through coordinate transformations // Appl. Numer. Mathem. 2019. V. 135. P. 186–205.
14. *Ahmad S.U.I., Faisal F., Shoaib M., Raja M.A.Z.* A new heuristic computational solver for nonlinear singular Thomas–Fermi system using evolutionary optimized cubic splines // Eur. Phys. J. Plus. 2020. V. 135. N. 55. P. 1–29.
15. *Пикулин С.В.* О задаче Томаса–Ферми и о решениях уравнения Эмдена–Фаулера // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2019. Т. 59. № 8. С. 1358–1380.
16. *Коддингтон Э.А., Левинсон Н.* Теория обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Изд-во иностр. лит., 1958.
17. *Esposito S.* Majorana solution of the Fermi–Thomas equation // Am. J. Phys. 2002. V. 70. № 8. P. 852–856.
18. *Пикулин С.В.* О поведении решений уравнения Абеля II рода специального вида вблизи узловой особой точки // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2018. Т. 58. № 12. С. 2074–2095.
19. *Pikulin S.V.* Analytical-numerical method for calculating the Thomas–Fermi potential // Russ. J. Math. Phys. 2019. V. 26. № 4. P. 544–552.
20. *Пикулин С.В.* О решениях типа бегущей волны уравнения Колмогорова–Петровского–Пискунова // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2018. Т. 58. № 2. С. 244–252.
21. *Lampariello G.* Su una classe notevole di equazioni differenziali del 2 o ordine non lineari (i, ii) // Atti Accad. Lincei. 1934. V. 6 (2.3). P. 284–290, 386–393.
22. *Rosu Haret C., Mancas Stefan C.* Generalized Thomas–Fermi equations as the Lampariello class of Emden–Fowler equations // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2017. V. 471. P. 212–218.
23. *Голубев В.В.* Курс аналитической теории дифференциальных уравнений. М.: Гостехтеориздат, 1950.