

УДК 519.63

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ДЕСЯТОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ¹⁾

© 2024 г. М. А. Захаров^{1,*}¹141980 Дубна, М.о., ул. Жолио-Кюри, 6, Объединенный институт ядерных исследований, Россия

*e-mail: zakharovmax@jinr.ru

Поступила в редакцию 06.07.2023 г.

Переработанный вариант 01.09.2023 г.

Принята к публикации 19.10.2023 г.

Представлен метод численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера десятого порядка точности, основанный на аппроксимации оператора эволюции формулой произведения. Обсуждается проблема уменьшения числа операторных экспонент в итоговой формуле за счет оптимизации их последовательности. На основе идеи, предложенной Йошида, построены два алгоритма десятого порядка точности для аппроксимации оператора эволюции. Численные тесты продемонстрировали устойчивость этих алгоритмов и их порядок точности. Метод, использованный в статье, позволил значительно уменьшить количество экспоненциальных множителей в схеме по сравнению с известной формулой Ли–Троттера–Сузуки. Библ. 25. Фиг. 2. Табл. 2.

Ключевые слова: квантовая механика, нестационарное уравнение Шрёдингера, численные методы, аппроксимация высокого порядка точности.

DOI: 10.31857/S0044466924020079, EDN: YJYRQP

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование методов численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера имеет продолжительную историю и множество предложенных вычислительных схем. Одним из наиболее часто используемых методов, помимо широкого спектра разностных схем (см. [1]–[4]), является аппроксимация оператора эволюции. Достаточно давно известно (см. [5], [6]), что решение дифференциального уравнения

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = A(t) \Psi \quad (1)$$

можно представить в экспоненциальном виде

$$\Psi(t) = \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t A(\tau) d\tau \right\} \Psi(t_0). \quad (2)$$

Экспонента в выражении (2) обычно представляет собой довольно сложный дифференциальный оператор (оператор эволюции), аналитический расчет действия которого на волновую функцию является нетривиальной задачей. В связи с этим значительный интерес представляет построение приближенного численного выражения для действия такого оператора.

Существует несколько путей аппроксимации операторной экспоненты в (2). Один из двух наиболее часто встречающихся основан на представлении экспоненты в виде разложения Магнуса (см. [5], [7], [8]). Второй путь связан с представлением экспоненты в виде произведения более простых экспонент. В статье речь пойдет именно о втором направлении, оно носит название формулы произведения Ли–Троттера–Сузуки (см. [9], [10]). За последние 30 лет вышло большое количество работ, посвященных изучению области применимости этого метода, оптимизации, улучшению точности, поискам альтернативных подходов (см. [11]–[15]).

Основными критериями при оценке вычислительной эффективности являются устойчивость и порядок точности метода. Однако сегодня появляются задачи (см., например, [16], [17]), которые могут требовать не только высокой точности по временному шагу, но и высокого пространственного разрешения

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-11-20257).

при достаточно большой исследуемой области пространства. Такими требованиями, например, обладает любая задача, в которой волновой пакет с узким энергетическим спектром взаимодействует с тонкой потенциальной структурой, движущейся достаточно быстро.

В формуле произведения Ли–Троттера–Сузуки основной объем вычислений затрачивается на дискретное преобразование Фурье. Сегодня существуют хорошо оптимизированные алгоритмы и библиотеки для расчета дискретного преобразования Фурье (например, библиотека FFTW3, см. [18]), в том числе для распределенных вычислений (технология CUDA Nvidia¹). Тем не менее, рост необходимого для расчета времени происходит нелинейно с ростом числа точек в массиве волновой функции, и использование больших сеток по координате и времени сопряжено с большим временем расчета.

В связи с этим становятся актуальными численные схемы решения нестационарного уравнения Шрёдингера высокого порядка точности, в которых используется наименьшее количество экспонент-множителей. Настоящая статья посвящена построению схемы 10-го порядка точности с наименее возможным количеством множителей в формуле произведения.

Статья состоит из трех частей. В разд. 2 приведен общий обзор и краткий вывод формулы Ли–Троттера–Сузуки. Раздел 3 посвящен подробному построению схем аппроксимации 10-го порядка точности оператора эволюции с использованием аппроксимаций более низкого порядка, а именно, аппроксимаций 2-го и 4-го порядков точности. Такие численные схемы требуют гораздо меньшего числа операторных экспонент, чем в формуле Ли–Троттера–Сузуки. Раздел 4 включает численные тесты и обсуждение построенных схем.

2. ОПЕРАТОР ЭВОЛЮЦИИ

Решение нестационарного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = H(x,t) \Psi(x,t) \quad (3)$$

можно представить в виде результата действия унитарного оператора эволюции на начальное волновое состояние:

$$\Psi(x,t) = \hat{S}(x,t,t_0) \Psi(x,t_0). \quad (4)$$

Далее будет использоваться безразмерная система единиц, где $\hbar = 1$. В случае, если гамильтониан в (3) не зависит явно от времени, оператор эволюции запишется в виде

$$\hat{S}(x,t,t_0) = \exp\{-i(t-t_0)H(x)\}. \quad (5)$$

В случае гамильтониана, зависящего от времени, оператор $\hat{S}$ может быть выражен через упорядоченную операторную экспоненту:

$$\hat{S}(x,t,t_0) = T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t H(x,t') dt' \right] \right\} \quad (6)$$

или в более интуитивно понятной записи

$$\begin{aligned} \hat{S}(x,t,t_0) &= \lim_{n \rightarrow \infty} T \left\{ e^{-i \frac{\Delta t}{n} \sum_{j=1}^n H\left(t_0 + j \frac{\Delta t}{n}\right)} \right\} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(t_0 + \Delta t)} e^{-i \frac{\Delta t}{n} H\left(t_0 + \frac{n-1}{n} \Delta t\right)} \dots e^{-i \frac{\Delta t}{n} H\left(t_0 + \frac{2}{n} \Delta t\right)} e^{-i \frac{\Delta t}{n} H\left(t_0 + \frac{1}{n} \Delta t\right)}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Здесь $\Delta t = t - t_0$.

Рассмотрим оператор сдвига по времени, действующий *влево* (см. [19]):

¹ <https://docs.nvidia.com/cuda/cufft>

$$\tilde{T}^t(\tau) = \exp(\tau \tilde{D}_t) = \exp\left(\tau \frac{\tilde{\partial}}{\partial t}\right), \quad (7)$$

который определяется свойством

$$A(t) \tilde{T}^t(\tau) B(t) = \tilde{T}^t(\tau) A(t + \tau) B(t). \quad (7.1)$$

Используя формулу Троттера (см. [19], [20]) можно показать, что

$$\begin{aligned} \hat{S}(x, t, t_0) &= \lim_{n \rightarrow \infty} T \left\{ \exp \left[-i \frac{\Delta t}{n} \sum_{j=1}^n H \left(x, t_0 + j \frac{\Delta t}{n} \right) \right] \right\} = \\ &= \exp \left\{ -i \Delta t \left[H(x, t) + \tilde{D}_t \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Доказательство утверждения (8) следующее:

$$\begin{aligned} e^{-i \Delta t [H(x, t) + \tilde{D}_t]} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t)} e^{-i \frac{\Delta t}{n} \tilde{D}_t} \right)^n = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \overbrace{e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t)} e^{-i \frac{\Delta t}{n} \tilde{D}_t} \dots e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t)} e^{-i \frac{\Delta t}{n} \tilde{D}_t}}^n = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t + \Delta)} e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t + \frac{n-1}{n} \Delta t)} \dots e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t + 2 \frac{\Delta t}{n})} e^{-i \frac{\Delta t}{n} H(x, t + \frac{\Delta t}{n})} = \hat{S}(x, t, t_0) \end{aligned} \quad (8.1)$$

Гамильтониан можно представить в виде суммы кинетической и потенциальной частей, где от времени явно зависит лишь потенциальная часть:

$$H(x, t) = \hat{T}(x) + \hat{U}(x, t). \quad (9)$$

Поскольку кинетическая часть и оператор сдвига по времени (7) коммутируют, $[\hat{T}(x), \tilde{D}_t] = 0$, эти операторы можно объединить в один:

$$\exp\{\tilde{T}(x, t)\} = \exp\{\hat{T}(x) + \tilde{D}_t\} = \exp\{\hat{T}(x)\} \exp\{\tilde{D}_t\} = \exp\{\tilde{D}_t\} \exp\{\hat{T}(x)\}. \quad (10)$$

Тогда оператор эволюции S в итоге будет представлен в виде

$$\hat{S}(x, t, t_0) = \exp\left\{-i \Delta t \left[\tilde{T}(x, t) + \hat{U}(x, t)\right]\right\}. \quad (11)$$

Таким образом, проблема аппроксимации оператора эволюции (4) сводится к проблеме аппроксимации оператора вида $\exp\{\Delta t(A + B)\}$.

2.1. Аппроксимация оператора эволюции. Формула произведения

Рассмотрим аппроксимацию экспоненциального оператора формулой произведения (в матричном виде известной со времен Ли, однако, к численному решению нестационарного уравнения Шрёдингера впервые примененная, по-видимому, в работе [21]):

$$\exp\{\tau(A + B)\} = \prod_{j=1}^k \exp(a_j \tau A) \exp(b_j \tau B) + o(\tau^n). \quad (12)$$

Здесь k — необходимое количество пар экспоненциальных операторов A, B для аппроксимации оператора $(A + B)$ с точностью $o(\tau^n)$, a_i, b_i — вещественные коэффициенты, которые предстоит определить. Кратко изложим аналитический метод определения коэффициентов a_i, b_i , следуя работам [9], [10].

Прежде всего приведем необходимую для построения решения формулу Бэйкера–Кэмбелла–Хансдорфа (БКХ):

$$\exp\{X\}\exp\{Y\} = \exp\left\{X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + \dots\right\}. \quad (13)$$

Используя формулу БКХ дважды, можно получить аналогичное выражение для симметричного оператора:

$$\exp\{X\}\exp\{Y\}\exp\{X\} = \exp\left\{2X + Y - \frac{1}{6}([X, [X, Y]] - [Y, [Y, X]]) + \dots\right\}. \quad (14)$$

Из формул (13), (14) можно получить выражения для формулы (12) 2-го и 3-го порядков соответственно, отбрасывая все слагаемые с коммутаторами.

Аппроксимация формулы (12) второго порядка

$$\exp\{\tau(A + B)\} = \exp\{\tau A\}\exp\{\tau B\} + o(\tau^2). \quad (15)$$

Аппроксимация формулы (12) третьего порядка

$$\exp\{\tau(A + B)\} = \exp\left\{\frac{1}{2}\tau A\right\}\exp\{\tau B\}\exp\left\{\frac{1}{2}\tau A\right\} + o(\tau^3). \quad (16)$$

При определении точности выражений (15), (16) учитывалось следующее тождество:

$$\exp\{\tau(A + B) + o(\tau^n)\} = \exp\{\tau(A + B)\} + o(\tau^n). \quad (17)$$

Для определения выражения формулы (12) 4-го порядка обозначим выражение (16) следующим образом:

$$S_2(\tau) \equiv \exp\left\{\frac{\tau}{2}A\right\}\exp\{\tau B\}\exp\left\{\frac{\tau}{2}A\right\} = \exp\{\tau\Theta_1 + \tau^3\Theta_3 + \tau^5\Theta_5 + \dots\} \equiv \exp\{\Omega(\tau)\}. \quad (18)$$

Здесь под функциями Θ_n обозначены коммутаторные выражения из (14):

$$\begin{aligned} \Theta_1 &= A + B; \\ \Theta_3 &= \frac{1}{12}[B, [B, A]] - \frac{1}{24}[A, [A, B]]; \\ \Theta_5 &= \frac{7}{5760}[A, [A, [A, [A, B]]]] + \dots; \dots \end{aligned}$$

Рассмотрим следующую операторную конструкцию:

$$S_4 \equiv S_2(\alpha_1\tau)S_2(\alpha_0\tau)S_2(\alpha_1\tau) = \exp\{\Omega(\alpha_1\tau)\}\exp\{\Omega(\alpha_0\tau)\}\exp\{\Omega(\alpha_1\tau)\}, \quad (19)$$

где α_i — вещественные коэффициенты. Применим к формуле (19) формулу (14), оставляя в степени экспоненты только слагаемые меньше 5-го порядка:

$$S_4 = \exp\left\{\tau(\alpha_0 + 2\alpha_1)\Theta_1 + \tau^3(\alpha_0^3 + 2\alpha_1^3)\Theta_3 + o(\tau^5)\right\}. \quad (20)$$

Выражение (20) будет аппроксимацией оператора (12) 4-го порядка в том случае, когда коэффициенты α_i удовлетворяют следующим условиям:

$$\begin{cases} \alpha_0 + 2\alpha_1 = 1 \\ \alpha_0^3 + 2\alpha_1^3 = 0 \end{cases} \rightarrow \alpha_0 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}; \alpha_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}. \quad (21)$$

Подставив результаты (21) в (19), с учетом (18) получим в итоге

$$S_4 = e^{\frac{1}{2}\alpha_1\tau A} e^{\alpha_1\tau B} e^{\frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_0)\tau A} e^{\alpha_0\tau B} e^{\frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_0)\tau A} e^{\alpha_1\tau B} e^{\frac{1}{2}\alpha_1\tau A} = \prod_{i=1}^4 e^{a_{4,i}\tau A} e^{b_{4,i}\tau B} + o(\tau^5). \quad (22)$$

Аналогичным образом строятся схемы порядков 6, 8, 10 соответственно:

$$S_6(\tau) \equiv S_4(\beta_1\tau)S_4(\beta_0\tau)S_4(\beta_1\tau) = \prod_{i=1}^{10} e^{a_i\tau A} e^{b_i\tau B} + o(\tau^7), \quad (23)$$

$$S_8(\tau) \equiv S_6(\gamma_1\tau)S_6(\gamma_0\tau)S_6(\gamma_1\tau) = \prod_{i=1}^{28} e^{a_i\tau A} e^{b_i\tau B} + o(\tau^9), \quad (24)$$

$$S_{10}(\tau) \equiv S_8(\delta_1\tau)S_8(\delta_0\tau)S_8(\delta_1\tau) = \prod_{i=1}^{82} e^{a_i\tau A} e^{b_i\tau B} + o(\tau^{11}). \quad (25)$$

Важным преимуществом формул (22)–(25) является тот факт, что для любого порядка точности коэффициенты a_i , b_i можно найти аналитически. Вместе с тем за подобную простоту и удобство приходится платить большим количеством используемых экспоненциальных операторов. В схеме 8-го порядка количество конструкций S_2 равно 28, в схеме 10-го порядка — уже 82.

3. СХЕМЫ АППРОКСИМАЦИИ ОПЕРАТОРА ЭВОЛЮЦИИ С МЕНЬШИМ КОЛИЧЕСТВОМ ЭКСПОНЕНТ

Количество используемых конструкций S_2 можно значительно сократить, если воспользоваться следующей симметричной операторной конструкцией:

$$S^{(m)}(\tau) = S_k(n_m\tau)S_k(n_{m-1}\tau)\dots S_k(n_1\tau)S_k(n_0\tau)S_k(n_1\tau)\dots S_k(n_{m-1}\tau)S_k(n_m\tau). \quad (26)$$

Метод аппроксимации оператора эволюции формулой (26) был предложен в работе [9], где представлены результаты для схем 6-го и 8-го порядков для конструкций S_2 . В формуле (26) возможно также использование конструкций S_4 , S_6 , S_8 и т.д. Данный раздел посвящен расчету коэффициентов n_i для схем 10-го порядка по формуле (26) для конструкций S_2 и S_4 .

Идея метода состоит в применении формулы БКХ к выражению (26), приведению его к виду одной экспоненты и определению условий, при которых коэффициенты при всех выражениях с коммутаторами становятся равными нулю.

3.1. Схема аппроксимации 10-го порядка с использованием конструкций S_2

Рассмотрим вначале решение с операторами S_2 , поскольку оно является наиболее общим для данного подхода. Для этого представим операторы $S_2(n_i\tau)$ в виде экспонент, аналогично формуле (18):

$$S_2(n_0\tau) = \exp\{\Omega_0\}; S_2(n_1\tau) = \exp\{\Omega_1\}; \dots; S_2(n_m\tau) = \exp\{\Omega_m\}. \quad (27)$$

Строим симметричную операторную конструкцию, последовательно «приставляя» слева и справа очередной оператор $S_2(n_i\tau)$. Полученную конструкцию с помощью формулы БКХ вновь представляем в виде одной экспоненты:

$$S_2(n_1\tau)S_2(n_0\tau)S_2(n_1\tau) = \exp\{\Omega_1\}\exp\{\Omega_0\}\exp\{\Omega_1\} = \exp\{\Omega^{(1)}\}, \quad (28.1)$$

$$S_2(n_2\tau)S_2(n_1\tau)S_2(n_0\tau)S_2(n_1\tau)S_2(n_2\tau) = \exp\{\Omega_2\}\exp\{\Omega^{(1)}\}\exp\{\Omega_2\} = \exp\{\Omega^{(2)}\}, \quad (28.2)$$

, ...,

$$S_2(n_m\tau)\dots S_2(n_0\tau)\dots S_2(n_m\tau) = \exp\{\Omega_m\}\exp\{\Omega^{(m-1)}\}\exp\{\Omega_m\} = \exp\{\Omega^{(m)}\}. \quad (28.3)$$

Итоговую экспоненту будем искать в виде

$$\Omega^{(m)} = \tau F_1^{(m)}(\Theta_1, n_0, n_1, \dots, n_m) + \tau^3 F_3^{(m)}(\Theta_3, n_0, n_1, \dots, n_m) + \tau^5 F_5^{(m)}(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, n_0, n_1, \dots, n_m) + \\ + \tau^7 F_7^{(m)}(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7, n_0, n_1, \dots, n_m) + \tau^9 F_9^{(m)}(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7, \Theta_9, n_0, n_1, \dots, n_m), \quad (29)$$

где Θ_i — выражения, содержащие коммутаторы, определяемые из формулы БКХ.

Таким образом, задача сводится к определению всех функций $F_i^{(m)}$, которые будем искать рекуррентным образом. Чтобы рассчитать схему 10-го порядка, необходимо знать слагаемые формулы БКХ до 7-го порядка. В работе будут использоваться результаты расчета слагаемых формулы БКХ в базисе Холла–Веннота (см. [23]). Все слагаемые формулы БКХ вплоть до 7-го порядка в базисе Холла–Веннота приведены в приложении А.

Введем следующие обозначения для коммутаторных конструкций:

$$\begin{aligned} \Xi_a &= a, \\ \Xi_{abc} &= [[a, b], c], \\ \Xi_{abcde} &= [[[[a, b], c], d], e], \\ \Xi_{abc, de} &= [[[[a, b], c], [d, e]], \\ \Xi_{abs, de, fg} &= [[[[a, b], c], [d, e], [f, g]], \\ \Xi_{abcd, efg} &= [[[[[a, b], c], d], [e, f], g]]. \end{aligned} \quad (30)$$

В итоге формула БКХ до 7-го порядка точности запишется в виде

$$\begin{aligned} Z(X, Y)_{e^X e^Y e^X} &= 2\Xi_X + \Xi_Y + N_{YXX} \Xi_{YXX} + N_{YXY} \Xi_{YXY} + N_{YXXXX} \Xi_{YXXXX} + \\ &+ N_{YXXXXY} \Xi_{YXXXXY} + N_{YXXYY} \Xi_{YXXYY} + N_{YXYYY} \Xi_{YXYYY} + N_{YXX, YX} \Xi_{YXX, YX} + \\ &+ N_{YXY, YX} \Xi_{YXY, YX} + N_{YXXXXXX} \Xi_{YXXXXXX} + N_{YXXXXXY} \Xi_{YXXXXXY} + \\ &+ N_{YXXXXYY} \Xi_{YXXXXYY} + N_{YXXYYYY} \Xi_{YXXYYYY} + N_{YXXYYYY} \Xi_{YXXYYYY} + \\ &+ N_{YXXYYYY} \Xi_{YXXYYYY} + N_{YXXXX, YX} \Xi_{YXXXX, YX} + N_{YXXXY, YX} \Xi_{YXXXY, YX} + \\ &+ N_{YXXYY, YX} \Xi_{YXXYY, YX} + N_{YXYYY, YX} \Xi_{YXYYY, YX} + N_{YXX, YX, YX} \Xi_{YXX, YX, YX} + \\ &+ N_{YXY, YX, YX} \Xi_{YXY, YX, YX} + N_{YXXX, YXX} \Xi_{YXXX, YXX} + N_{YXXY, YXX} \Xi_{YXXY, YXX} + \\ &+ N_{YXYY, YXX} \Xi_{YXYY, YXX} + N_{YXXX, YXY} \Xi_{YXXX, YXY} + N_{YXXY, YXY} \Xi_{YXXY, YXY} + \\ &+ N_{YXYY, YXY} \Xi_{YXYY, YXY}. \end{aligned} \quad (31)$$

Символами N_i обозначены коэффициенты при коммутаторах. Количественное значение коэффициентов N_i также приведено в приложении А.

Чтобы определить рекуррентные формулы для функций $F_i^{(m)}$, достаточно посчитать первые два шага $\Omega^{(1)}$ и $\Omega^{(2)}$. Подставляя выражения $\Omega_0(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ и $\Omega_1(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ в формулу (31), можно получить выражение для $\Omega^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \Omega^{(1)} &= \tau A_{1,1} \Xi_{\Theta_1} + \tau^3 A_{3,1} \Xi_{\Theta_3} + \tau^5 (A_{5,1} \Xi_{\Theta_5} + B_{5,1} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1}) + \\ &+ \tau^7 (A_{7,1} \Xi_{\Theta_7} + B_{7,1} \Xi_{\Theta_5 \Theta_1 \Theta_1} + B_{7,1}^3 \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_3} + C_{7,1} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1}) + \\ &+ \tau^9 (A_{9,1} \Xi_{\Theta_9} + B_{9,1} \Xi_{\Theta_7 \Theta_1 \Theta_1} + B_{9,1}^1 \Xi_{\Theta_5 \Theta_3 \Theta_1} + B_{9,1}^3 \Xi_{\Theta_5 \Theta_1 \Theta_3} + B_{9,1}^5 \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_5} + C_{9,1} \Xi_{\Theta_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} + \\ &+ C_{9,1}^{311} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_3 \Theta_1} + C_{9,1}^{131} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_3} + C_{9,1}^{113} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_3} + E_{9,1} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1, \Theta_3 \Theta_1} + D_{9,1} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1}). \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь функции A, B, C, D, E содержат неизвестные n_0, n_1 . Подставляя так же выражения $\Omega^{(1)}$ и Ω_2 в формулу (31), можно получить выражения для $\Omega^{(2)}$ в форме, аналогичной (32), и определить, какие новые слагаемые по сравнению с $\Omega^{(1)}$ появляются. Используя результаты первых двух итераций, можно

записать рекуррентные формулы для $F_i^{(m)}$, поскольку следующие итерации уже не принесут никаких новых слагаемых.

Окончательная формула для $\Omega^{(m)}$ может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \Omega^{(m)} = & \tau A_{1,m} \Xi_{\Theta_1} + \tau^3 A_{3,m} \Xi_{\Theta_3} + \tau^5 (A_{5,m} \Xi_{\Theta_5} + B_{5,m} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1}) + \\ & + \tau^7 (A_{7,m} \Xi_{\Theta_7} + B_{7,m} \Xi_{\Theta_5 \Theta_1 \Theta_1} + B_{7,m}^3 \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_3} + C_{7,m} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1}) + \\ & + \tau^9 (A_{9,m} \Xi_{\Theta_9} + B_{9,m} \Xi_{\Theta_7 \Theta_1 \Theta_1} + B_{9,m}^1 \Xi_{\Theta_5 \Theta_3 \Theta_1} + B_{9,m}^3 \Xi_{\Theta_5 \Theta_1 \Theta_3} + B_{9,m}^5 \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_5} + C_{9,m} \Xi_{\Theta_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} + \\ & + C_{9,m}^{311} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_3 \Theta_1 \Theta_1} + C_{9,m}^{131} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_3 \Theta_1} + C_{9,m}^{113} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_3} + E_{9,m} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_3 \Theta_1} + D_{9,m} \Xi_{\Theta_3 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1}). \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь функции A, B, C, D, E содержат неизвестные $n_0, \dots, n_{18}$. Полные математические выкладки и точный вид коэффициентов функции (33) приведены в приложении В.

Условием аппроксимации оператора эволюции (12) является равенство нулю всех функций A, B, C, D, E (кроме $A_{1,m} = 1$):

$$\begin{aligned} A_{1,m} - 1 = A_{3,m} = A_{5,m} = A_{7,m} = A_{9,m} = 0, \\ B_{5,m} = B_{7,m} = B_{7,m}^3 = B_{9,m} = B_{9,m}^1 = B_{9,m}^3 = B_{9,m}^5 = 0, \\ C_{7,m} = C_{9,m} = C_{9,m}^{311} = C_{9,m}^{131} = C_{9,m}^{113} = E_{9,m} = D_{9,m} = 0. \end{aligned} \quad (34)$$

Таблица 1. Некоторые результаты численного решения системы (34)

№	1	2	3
Значение функции невязки	0.00062	0.00061	0.00075
n_1	0.25596748726158713	0.15258923803377555	-0.13729497885984
n_2	-0.007803892018322212	0.008013207919534027	0.00165029350899004
n_3	0.06078650054710946	0.04034373194522631	0.068057054219662
n_4	-0.2106213291618254	-0.1619185810304815	0.0706939494581959
n_5	0.013374554087768997	0.11339287384911442	0.0419912057755932
n_6	0.040828812743666815	-0.06008855109018835	0.091334638627057
n_7	0.11754081338889102	0.0927048339212293	-0.000255226291493715
n_8	0.06355483224567013	0.12934029854283247	-0.1404231284529
n_9	0.06070957480623204	0.057849977072719553	0.06448480160075
n_{10}	-0.18375967470208748	-0.17035112690414977	0.117633619535249
n_{11}	0.09163708826251835	0.10813778785242215	-0.162841812844147
n_{12}	0.028120797452049817	0.06970196439055515	0.062471615933172
n_{13}	0.09425234692400111	0.01830413288019983	-0.199629079192461
n_{14}	-0.03201600580713401	0.0849105484960073	0.152547998021664
n_{15}	-0.044068114910998546	-0.003814424982338	0.203136087501066
n_{16}	0.12566396849270714	0.087081938943613	0.059142843468599
n_{17}	-0.0257093171535282	-0.0522776167118995	0.064429738489327
n_{18}	0.08793327900898343	0.0154549048217179	-0.015307036307547
n_{19}	0.09159202216350396	0.046919487412522	0.089529926379149

Таким образом, мы получаем систему из 19 нелинейных алгебраических уравнений, которую необходимо решить численно. Система (34) чрезвычайно громоздка и хаотична, с большим количеством локальных минимумов, поэтому большинство известных методов решения систем нелинейных алгебраических уравнений (см. [24]) здесь не сходятся.

Для нахождения приближенных решений системы в Mathematica был реализован алгоритм решения системы методом минимизации невязки. Для этого методом Монте-Карло разыгрывалось приближенное решение. Затем каждый неизвестный параметр в решении варьировался, пока невязка не окажется минимальной. В качестве значения невязки принималась сумма значений функций A, B, C, D, E (34) для данного набора параметров n_i . Некоторые найденные решения системы (34) приведены в табл. 1.

Итоговая формула для аппроксимации оператора эволюции (12) будет выглядеть следующим образом:

$$S_{S_2}(\tau) = S_2(n_{18}\tau) \dots S_2(n_0\tau) \dots S_k(n_{18}\tau) = \prod_{i=1}^{37} e^{\bar{a}_{10,i}\tau A} e^{\bar{b}_{10,i}\tau B} + o(\tau^{11}). \quad (35)$$

3.2. Схема аппроксимации 10-го порядка с использованием конструкций S_4

Гораздо более простое решение представляет построение формулы (26) через конструкции S_4 , оператор которого можно представить в виде

$$S_4(\tau) \equiv \exp\{\tau\Theta_1 + \tau^5\tilde{\Theta}_5 + \tau^7\tilde{\Theta}_7 + \tau^9\tilde{\Theta}_9 + \dots\}. \quad (36)$$

Здесь $\tilde{\Theta}_i$ по аналогии с Θ_i представляют собой некоторые коммутаторные выражения. Интересно отметить, что $\tilde{\Theta}_i$ отличаются от Θ_i , но их точный вид в данной работе значения не имеет.

По аналогии с предыдущим пунктом строится функция

$$\begin{aligned} \Omega^{(m)} = & \tau F_1^{(m)}(\Theta_1, n_0, n_1, \dots, n_m) + \tau^5 F_5^{(m)}(\tilde{\Theta}_5, n_0, n_1, \dots, n_m) + \\ & + \tau^7 F_7^{(m)}(\Theta_1, \tilde{\Theta}_5, \tilde{\Theta}_7, n_0, n_1, \dots, n_m) + \tau^9 F_9^{(m)}(\Theta_1, \tilde{\Theta}_5, \tilde{\Theta}_7, \tilde{\Theta}_9, n_0, n_1, \dots, n_m) \end{aligned} \quad (37)$$

и определяется рекурсивными формулами. Для этого необходимо найти функции $\Omega^{(1)}$ и $\Omega^{(2)}$, подобные (28), но записанные для S_4 :

$$S_4(n_1\tau)S_4(n_0\tau)S_4(n_1\tau) = \exp\{\Omega_1\}\exp\{\Omega_0\}\exp\{\Omega_1\} = \exp\{\Omega^{(1)}\}, \quad (38.1)$$

$$S_4(n_2\tau)S_4(n_1\tau)S_4(n_0\tau)S_4(n_1\tau)S_4(n_2\tau) = \exp\{\Omega_2\}\exp\{\Omega^{(1)}\}\exp\{\Omega_2\} = \exp\{\Omega^{(2)}\}, \quad (38.2)$$

, ...,

$$S_4(n_m\tau) \dots S_4(n_0\tau) \dots S_4(n_m\tau) = \exp\{\Omega_m\}\exp\{\Omega^{(m-1)}\}\exp\{\Omega_m\} = \exp\{\Omega^{(m)}\}. \quad (38.3)$$

Проделав все математические операции, как и в предыдущем пункте, можно получить рекуррентную формулу для выражения $\Omega^{(m)}$:

$$\begin{aligned} \Omega^{(m)} = & \tau A_{1,m} \Xi_{\Theta_1} + \tau^5 A_{5,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_5} + \tau^7 (A_{7,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_7} + B_{7,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_5\Theta_1}) + \\ & + \tau^9 (A_{9,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_9} + B_{9,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_7\Theta_1} + C_{9,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_5\Theta_1\Theta_1}) \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь функции A, B, C содержат неизвестные $n_0, \dots, n_6$. Полные математические выкладки и точный вид функций приведены в приложении С.

Условием аппроксимации оператора эволюции в данном случае является система семи нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} A_{1,m} - 1 = A_{5,m} = A_{7,m} = A_{9,m} = 0, \\ B_{7,m} = B_{9,m} = C_{9,m} = 0. \end{aligned} \quad (40)$$

Таблица 2. Шесть решений системы (40) с наименьшими по величине значениями n_i

Решение 1	Решение 2	Решение 3
$n_0 \rightarrow -0.944263162369538$	$n_0 \rightarrow 0.9138389914113408$	$n_0 \rightarrow 0.8799651058319341$
$n_1 \rightarrow -0.001699669869606$	$n_1 \rightarrow -0.5761621584448674$	$n_1 \rightarrow -0.6895760778774856$
$n_2 \rightarrow 0.901856109289368$	$n_2 \rightarrow 0.2847691807605744$	$n_2 \rightarrow 0.5022004328862611$
$n_3 \rightarrow -0.776519231974205$	$n_3 \rightarrow 0.2097456771750264$	$n_3 \rightarrow 0.2422465593742511$
$n_4 \rightarrow 0.042244707029581$	$n_4 \rightarrow -0.8748957631571992$	$n_4 \rightarrow -0.8650419726013663$
$n_5 \rightarrow 0.570335703509034$	$n_5 \rightarrow 0.2391267522973746$	$n_5 \rightarrow 0.0625099903030752$
$n_6 \rightarrow 0.235913963200597$	$n_6 \rightarrow 0.7604968156634205$	$n_6 \rightarrow 0.8076785149992974$
Решение 4	Решение 5	Решение 6
$n_0 \rightarrow -0.96028501069323$	$n_0 \rightarrow -1.046841102301594$	$n_0 \rightarrow 0.8796664129952768$
$n_1 \rightarrow 0.43745939094565$	$n_1 \rightarrow -1.054334166569394$	$n_1 \rightarrow -0.7725703942483008$
$n_2 \rightarrow 0.92116736423630$	$n_2 \rightarrow 1.051838045363935$	$n_2 \rightarrow 0.5660708443785679$
$n_3 \rightarrow 0.32276673964696$	$n_3 \rightarrow 0.250073053930700$	$n_3 \rightarrow 0.2599557921889106$
$n_4 \rightarrow 0.65920326505061$	$n_4 \rightarrow 1.004899649890149$	$n_4 \rightarrow -0.9423452393494703$
$n_5 \rightarrow -0.55059025299523$	$n_5 \rightarrow -0.865766610376252$	$n_5 \rightarrow 0.0190648617779735$
$n_6 \rightarrow -0.80986400153768$	$n_6 \rightarrow 0.636710578911658$	$n_6 \rightarrow 0.9299909287546806$

Система (40) оказывается намного проще системы (34) и может быть решена с помощью встроенных средств Mathematica. Список некоторых полученных решений приведен в табл. 2.

Используя значения n_i , полученные при решении системы (40), можно получить численную аппроксимацию оператора эволюции (12):

$$S_{S_4}(\tau) = S_4(n_6\tau) \dots S_4(n_0\tau) \dots S_4(n_6\tau) = \prod_{i=1}^{39} e^{\tilde{a}_{10,i}\tau A} e^{\tilde{b}_{10,i}\tau B} + o(\tau^{11}). \quad (41)$$

4. ОБСУЖДЕНИЕ

При сравнении становится ясно, что наименьшее количество экспонент потребуется при использовании в формуле (26) конструкций S_2 , и что при увеличении k формула (26) становится все менее выгодной по сравнению с формулами (22)–(25). С другой стороны, построение формулы (26) и расчет коэффициентов n_i для конструкций S_2 значительно более сложные, чем расчет аналогичных коэффициентов для конструкций S_4 , поскольку требует решения гораздо более сложной системы нелинейных алгебраических уравнений. Кроме того, количество экспонент в формуле (26) с S_4 лишь ненамного больше варианта формулы (26) с S_2 .

Были проведены тестовые расчеты, в которых сравнивались порядки точности схем, основанных на формулах (25), (35), (41). В качестве тестовой задачи был взят одномерный осциллятор с частотой, зависящей от времени, по аналогии с работой [8]. Уравнение Шрёдингера такой системы выглядит следующим образом:

$$i \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2(t)x^2}{2} \right) \Psi(x,t), \quad (42)$$

где $\omega^2(t) = 4 - 3\exp(-t)$ (см. [25]).

В качестве начального состояния берется волновой пакет

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{A}} \exp \left[-\frac{1}{2} (x - \sqrt{2})^2 \right]. \quad (43)$$

Точное решение задачи известно и может быть записано как

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-X(t)x^2 + 2Y(t)x - Z(t) \right]. \quad (44)$$

Здесь функции $X(t)$, $Y(t)$, $Z(t)$ удовлетворяют следующей задаче Коши:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} X(t) &= 2X^2(t) - \frac{\omega^2(t)}{2}, & X(0) &= \frac{1}{2}, \\ i \frac{d}{dt} Y(t) &= 2X(t)Y(t), & Y(0) &= \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ i \frac{d}{dt} Z(t) &= -X(t) + 2Y^2(t), & Z(0) &= 1. \end{aligned} \quad (45)$$

Рассматриваемая область пространства определена как $[x_{\min} = -10, x_{\max} = 10]$. Количество узлов в сетке было взято 1000. Шаг по времени $\tau = 0.1$.

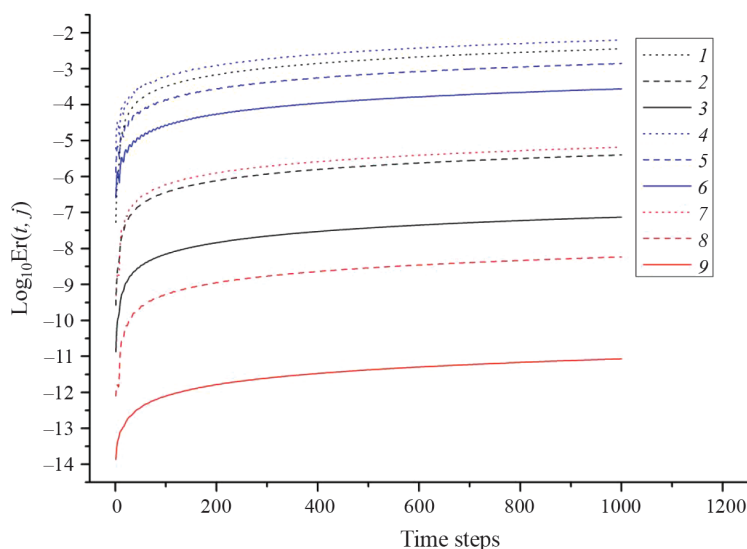
Для анализа сходимости представленных схем на последовательности трех сгущающихся по времени временных сетках вычислялась функция погрешности

$$\text{Er}^2(t, j) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |\Psi(x, t) - \Psi_{\tau_j}(x, t)|^2 dx. \quad (46)$$

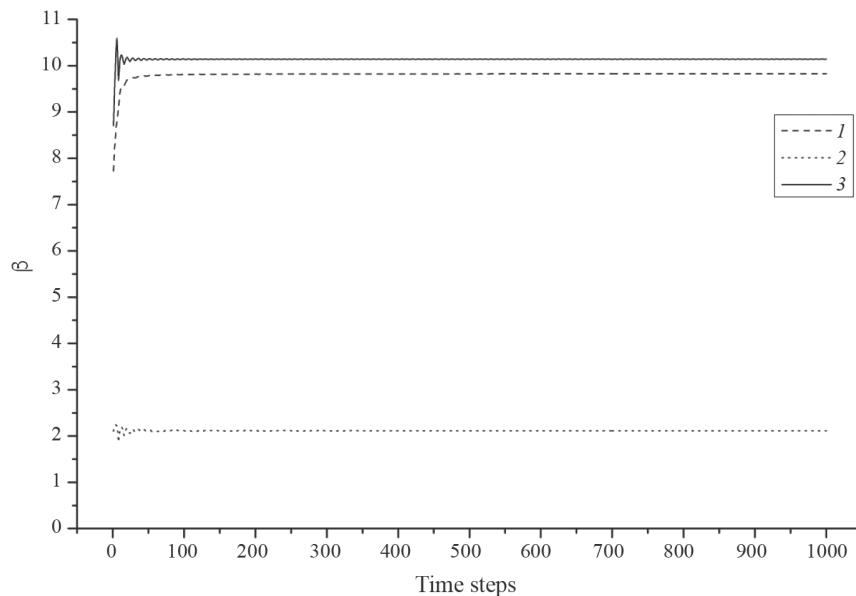
Здесь индекс $j = 1, 2, 3$ нумерует решения, полученные для шагов τ , $\tau/2$, $\tau/4$ по временной переменной. В качестве функции $\Psi(x, t)$ берется решение (44), (45).

Затем рассчитывался коэффициент Рунге

$$\beta(t) = \log_2 \frac{|\text{Er}(t, 1) - \text{Er}(t, 2)|}{|\text{Er}(t, 2) - \text{Er}(t, 3)|}. \quad (47)$$



Фиг. 1. Результаты тестовых расчетов в виде функций $\text{Er}(t, j)$, $j = 1, 2, 3$. Цифрами обозначены формулы, по которым проводился численный расчет: 1, 2, 3 — (25), 4, 5, 6 — (35), 7, 8, 9 — (41) с шагом по времени τ , $\tau/2$, $\tau/4$ соответственно.



Фиг. 2. Поведение функции $\beta(t)$ для схем расчета по формулам: 1 — (25), 2 — (35), 3 — (41) с течением времени.

На фиг. 1 приведены кривые $\log_{10}Er(t, j)$, $j = 1, 2, 3$, для схем 10-го порядка точности (25), (35), (41). Как следует из графиков, среди трех представленных схем наилучший результат показывает схема (41). Несколько хуже результаты для схемы (25). Наихудший результат выдает формула (35).

На фиг. 2 представлены графики функции $\beta(t)$ для (25), (35), (41) в зависимости от времени. По результатам тестовых расчетов численная схема (35) не оправдала ожиданий. Среднее значение коэффициента Рунге равно 2. Наиболее вероятной причиной подобного поведения является относительно низкая точность численного решения нелинейной системы алгебраических уравнений (34). Несмотря на то что в формуле (41) содержится на 4 экспоненциальных множителя больше, чем в формуле (35), в силу ее точности и более простой практической реализации предпочтительнее использовать именно формулу (41) для численных расчетов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлена схема аппроксимации оператора эволюции (12) 10-го порядка точности с гораздо меньшим числом показателей, чем в формуле Ли–Троттера–Сузуки.

Рассмотрены две численные схемы с использованием операторных конструкций S_2 и S_4 . Для обоих случаев определены системы нелинейных алгебраических уравнений для вычисления коэффициентов при операторных показателях. Решения систем для случая S_2 находились методом Монте-Карло с последующим варьированием коэффициентов для минимизации функции невязки, для случая S_4 система решалась в программном продукте Mathematica.

Были проведены тестовые расчеты для сравнения эффективности трех численных схем 10-го порядка: (25), (35) и (41). Результаты показывают хорошую относительную точность схемы (41). Крайне слабая эффективность схемы (35), по-видимому, объясняется недостаточной точностью найденных коэффициентов при экспонентах.

Автор благодарит д.ф.-м.н. Владимира Степановича Мележика за ценные замечания и полезные обсуждения. Автор также благодарит команду гетерогенной платформы кластера «HybriLIT» Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова Объединенного института ядерных исследований за предоставленные расчетные ресурсы.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Список необходимых слагаемых формулы Бэйкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа

$$\exp\left(\frac{1}{2}X\right)\exp(Y)\exp\left(\frac{1}{2}X\right) = \exp\{Z(X, Y)\}:$$

Список необходимых слагаемых формулы Бэйкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа $\exp\left(\frac{1}{2}X\right)\exp(Y)\exp\left(\frac{1}{2}X\right) = \exp\{Z(X, Y)\}$:

$$E_i = [E_i', E_i'']$$

$E_1 = N_X X$	$N_X = 2$	$E_{16} = [E_9, E_2] = N_{YXXXXY} \Xi_{YXXXXY}$	$N_{YXXXXY} = 0$
$E_2 = N_Y Y$	$N_Y = 1$	$E_{17} = [E_{10}, E_2] = N_{YXXXY} \Xi_{YXXXY}$	$N_{YXXXY} = 0$
$E_3 = [E_2, E_1] = N_{YX} \Xi_{YX}$	$N_{YX} = 0$	$E_{18} = [E_{11}, E_2] = N_{YXXYY} \Xi_{YXXYY}$	$N_{YXXYY} = 0$
$E_4 = [E_3, E_1] = N_{YXX} \Xi_{YXX}$	$N_{YXX} = -\frac{1}{6}$	$E_{19} = [E_{12}, E_2] = N_{YXYYY} \Xi_{YXYYY}$	$N_{YXYYY} = 0$
$E_5 = [E_3, E_2] = N_{YXY} \Xi_{YXY}$	$N_{YXY} = -\frac{1}{6}$	$E_{20} = [E_6, E_3] = N_{YXXX, YX} \Xi_{YXXX, YX}$	$N_{YXXX, YX} = 0$
$E_6 = [E_4, E_1] = N_{YXXX} \Xi_{YXXX}$	$N_{YXXX} = 0$	$E_{21} = [E_7, E_3] = N_{YXXY, YX} \Xi_{YXXY, YX}$	$N_{YXXY, YX} = 0$
$E_7 = [E_4, E_2] = N_{YXXY} \Xi_{YXXY}$	$N_{YXXY} = 0$	$E_{22} = [E_8, E_3] = N_{YXY, YX} \Xi_{YXY, YX}$	$N_{YXY, YX} = 0$
$E_8 = [E_5, E_2] = N_{YXY} \Xi_{YXY}$	$N_{YXY} = 0$	$E_{23} = [E_5, E_4] = N_{YXY, YXX} \Xi_{YXY, YXX}$	$N_{YXY, YXX} = 0$
$E_9 = [E_6, E_1] = N_{YXXXX} \Xi_{YXXXX}$	$N_{YXXXX} = \frac{7}{360}$	$E_{24} = [E_{15}, E_1] = N_{YXXXXXX} \Xi_{YXXXXXX}$	$N_{YXXXXXX} = -\frac{31}{15120}$
$E_{10} = [E_6, E_2] = N_{YXXXY} \Xi_{YXXXY}$	$N_{YXXXY} = \frac{7}{180}$	$E_{25} = [E_{15}, E_2] = N_{YXXXXXY} \Xi_{YXXXXXY}$	$N_{YXXXXXY} = -\frac{31}{5040}$
$E_{11} = [E_7, E_2] = N_{YXXYY} \Xi_{YXXYY}$	$N_{YXXYY} = \frac{1}{45}$	$E_{26} = [E_{16}, E_2] = N_{YXXXY} \Xi_{YXXXY}$	$N_{YXXXY} = -\frac{13}{1890}$
$E_{12} = [E_8, E_2] = N_{YXYYY} \Xi_{YXYYY}$	$N_{YXYYY} = \frac{1}{360}$	$E_{27} = [E_{17}, E_2] = N_{YXXYY} \Xi_{YXXYY}$	$N_{YXXYY} = -\frac{53}{15120}$
$E_{13} = [E_4, E_3] = N_{YXX, YX} \Xi_{YXX, YX}$	$N_{YXX, YX} = \frac{1}{60}$	$E_{28} = [E_{18}, E_2] = N_{YXXYYY} \Xi_{YXXYYY}$	$N_{YXXYYY} = -\frac{1}{1260}$
$E_{14} = [E_5, E_3] = N_{YXY, YX} \Xi_{YXY, YX}$	$N_{YXY, YX} = -\frac{1}{90}$	$E_{29} = [E_{19}, E_2] = N_{YXYYYY} \Xi_{YXYYYY}$	$N_{YXYYYY} = -\frac{1}{15120}$
$E_{15} = [E_9, E_1] = N_{YXXXX} \Xi_{YXXXX}$	$N_{YXXXX} = 0$		

Здесь

$$\Xi_{ab} = [a, b]$$

$$\Xi_{abc} = [[a, b], c]$$

$$\Xi_{abcde} = [[[[a, b], c], d], e]$$

$$\Xi_{abc, de} = [[a, b], c], [d, e]$$

$$\Xi_{abs, defg} = [[a, b], c], [d, e], [f, g]$$

$$\Xi_{abcd, efg} = [[[[a, b], c], d], [e, f], g]$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Подставим $\Omega_0(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ и $\Omega_1(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ в формулу (31).

Введем следующие обозначения:

$$A_{1,0} = n_0; A_{3,0} = n_0^3; A_{5,0} = n_0^5; A_{7,0} = n_0^7; A_{9,0} = n_0^9. \quad (\text{B.1})$$

Первые два слагаемых, $2\Xi_X + \Xi_Y$, можно записать как

$$\begin{aligned} \Omega_0 + 2\Omega_1 &= \tau A_{1,0}\Theta_1 + \tau^3 A_{3,0}\Theta_3 + \\ &+ \tau^5 A_{5,0}\Theta_5 + \tau^7 A_{7,0}\Theta_7 + \tau^9 A_{9,0}\Theta_9 + \\ &+ 2\tau n_1\Theta_1 + 2\tau^3 n_1^3\Theta_3 + 2\tau^5 n_1^5\Theta_5 + 2\tau^7 n_1^7\Theta_7 + 2\tau^9 n_1^9\Theta_9. \end{aligned} \quad (\text{B.2.1})$$

Остальные слагаемые:

$$\begin{aligned} N_{YXX}\Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1} &= \tau^5 N_{YXX} \left\{ A_{1,0}n_1^4\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + A_{3,0}n_1^2\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^7 N_{YXX} \left\{ A_{1,0}n_1^6\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3} + A_{3,0}n_1^4\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + A_{1,0}n_1^6\Xi_{\Theta_1\Theta_5\Theta_1} + A_{5,0}n_1^2\Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^9 N_{YXX} \left\{ A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_5} + A_{3,0}n_1^6\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_5} + A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_5\Theta_3} + A_{5,0}n_1^4\Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ &\left. + A_{3,0}n_1^6\Xi_{\Theta_3\Theta_5\Theta_1} + A_{5,0}n_1^4\Xi_{\Theta_5\Theta_3\Theta_1} + A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_7\Theta_1} + A_{7,0}n_1^2\Xi_{\Theta_7\Theta_1\Theta_1} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.2})$$

$$\begin{aligned} N_{YXY}\Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_0} &= \tau^5 N_{YXY} \left\{ (A_{1,0})^2 n_1^3\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + A_{1,0}A_{3,0}n_1\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^7 N_{YXY} \left\{ A_{1,0}A_{3,0}n_1^3\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3} + (A_{3,0})^2 n_1\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + (A_{1,0})^2 n_1^5\Xi_{\Theta_1\Theta_5\Theta_1} + A_{1,0}A_{5,0}n_1\Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^9 N_{YXY} \left\{ A_{1,0}A_{5,0}n_1^3\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_5} + A_{3,0}A_{5,0}n_1\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_5} + A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\Xi_{\Theta_1\Theta_5\Theta_3} + A_{3,0}A_{5,0}n_1\Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ &\left. + A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\Xi_{\Theta_3\Theta_5\Theta_1} + A_{1,0}A_{5,0}n_1^3\Xi_{\Theta_5\Theta_3\Theta_1} + (A_{1,0})^2 n_1^7\Xi_{\Theta_1\Theta_7\Theta_1} + A_{1,0}A_{7,0}n_1\Xi_{\Theta_7\Theta_1\Theta_1} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.3})$$

$$\begin{aligned} N_{YXXXX}\Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_1} &= \tau^7 N_{YXXXX} \left\{ A_{1,0}n_1^6\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0}n_1^4\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^9 N_{YXXXX} \left\{ A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3\Theta_1} + A_{3,0}n_1^6\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ &\left. + A_{3,0}n_1^6\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + A_{3,0}n_1^6\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ &\left. + A_{1,0}n_1^8\Xi_{\Theta_1\Theta_5\Theta_1\Theta_1} + A_{5,0}n_1^4\Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.4})$$

$$\begin{aligned} N_{YXXXY}\Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_0} &= \tau^7 N_{YXXXY} \left\{ (A_{1,0})^2 n_1^5\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + A_{1,0}A_{3,0}n_1^3\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^9 N_{YXXXY} \left\{ (A_{1,0})^2 n_1^7\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3\Theta_1} + A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + (A_{1,0})^2 n_1^7\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ &\left. + A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + (A_{3,0})^2 n_1^3\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ &\left. + (A_{1,0})^2 n_1^7\Xi_{\Theta_1\Theta_5\Theta_1\Theta_1} + A_{1,0}A_{5,0}n_1^3\Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.5})$$

$$\begin{aligned} N_{YXXYY}\Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_0} &= \tau^7 N_{YXXYY} \left\{ (A_{1,0})^3 n_1^4\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^2\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ &+ \tau^9 N_{YXXYY} \left\{ (A_{1,0})^3 n_1^6\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3\Theta_1} + A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^4\Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^4\Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + \right. \end{aligned} \quad (\text{B.2.6})$$

$$+A_{1,0} \left(A_{3,0}\right)^2 n_1^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + A_{3,0} \left(A_{1,0}\right)^2 n_1^4 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + A_{1,0} \left(A_{3,0}\right)^2 n_1^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + \\ + \left(A_{1,0}\right)^3 n_1^6 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \left(A_{1,0}\right)^2 A_{5,0} n_1^2 \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \Big\},$$

$$N_{YXYXY} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_0\Omega_0\Omega_0} = \tau^7 N_{YXYXY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^4 n_1^3 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \left(A_{1,0}\right)^3 A_{3,0} n_1 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\} + \\ + \tau^9 N_{YXYXY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^3 A_{3,0} n_1^3 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + \left(A_{1,0}\right)^2 \left(A_{3,0}\right)^2 n_1 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + \left(A_{1,0}\right)^3 A_{3,0} n_1^3 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + \right. \\ \left. + \left(A_{1,0}\right)^2 \left(A_{3,0}\right)^2 n_1 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + \left(A_{1,0}\right)^3 A_{3,0} n_1^3 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + \left(A_{1,0}\right)^2 \left(A_{3,0}\right)^2 n_1 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + \right. \\ \left. + \left(A_{1,0}\right)^4 n_1^5 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \left(A_{1,0}\right)^3 A_{5,0} n_1 \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.7})$$

$$N_{YXX,YX} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1,\Omega_0\Omega_1} = N_{YXX,YX} \tau^9 \left\{ \left(A_{1,0}\right)^2 n_1^7 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1,\Theta_1\Theta_3} + A_{1,0} A_{3,0} n_1^5 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1,\Theta_1\Theta_3} \right. \\ \left. + A_{1,0} A_{3,0} n_1^5 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1,\Theta_3\Theta_1} + \left(A_{3,0}\right)^2 n_1^3 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1,\Theta_3\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.8})$$

$$N_{YXY,YX} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_0,\Omega_0\Omega_1} = N_{YXY,YX} \tau^9 \left\{ \left(A_{1,0}\right)^3 n_1^6 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1,\Theta_1\Theta_3} + \left(A_{1,0}\right)^2 A_{3,0} n_1^4 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1,\Theta_1\Theta_3} \right. \\ \left. + \left(A_{1,0}\right)^2 A_{3,0} n_1^4 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1,\Theta_3\Theta_1} + A_{1,0} \left(A_{3,0}\right)^2 n_1^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1,\Theta_3\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.9})$$

$$N_{YXXXXXX} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1} = \tau^9 N_{YXXXXXX} \left\{ A_{1,0} n_1^8 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0} n_1^6 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.10})$$

$$N_{YXXXXXY} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_0} = \tau^9 N_{YXXXXXY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^2 n_1^7 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0} A_{1,0} n_1^5 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.11})$$

$$N_{YXXXXYY} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_0\Omega_0} = \tau^9 N_{YXXXXYY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^3 n_1^6 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0} \left(A_{1,0}\right)^2 n_1^4 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.12})$$

$$N_{YXXXXYY} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_0\Omega_0\Omega_0} = \tau^9 N_{YXXXXYY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^4 n_1^5 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0} \left(A_{1,0}\right)^3 n_1^3 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.13})$$

$$N_{YXYYYY} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_1\Omega_0\Omega_0\Omega_0\Omega_0} = \tau^9 N_{YXYYYY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^5 n_1^4 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0} \left(A_{1,0}\right)^4 n_1^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}, \quad (\text{B.2.14})$$

$$N_{YXYYYYY} \Xi_{\Omega_0\Omega_1\Omega_0\Omega_0\Omega_0\Omega_0\Omega_0} = \tau^9 N_{YXYYYYY} \left\{ \left(A_{1,0}\right)^6 n_1^3 \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + A_{3,0} \left(A_{1,0}\right)^5 n_1 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right\}. \quad (\text{B.2.15})$$

В итоге выражение $\Omega^{(1)}$ можно представить в виде

$$\Omega^{(1)} = \tau A_{1,1} \Xi_{\Theta_1} + \tau^3 A_{3,1} \Xi_{\Theta_3} + \tau^5 \left(A_{5,1} \Xi_{\Theta_5} + B_{5,1} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1} \right) \\ + \tau^7 \left(A_{7,1} \Xi_{\Theta_7} + B_{7,1} \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1} + B_{7,1}^3 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + C_{7,1} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right) \\ + \tau^9 \left(A_{9,1} \Xi_{\Theta_9} + B_{9,1} \Xi_{\Theta_7\Theta_1\Theta_1} + B_{9,1}^1 \Xi_{\Theta_5\Theta_3\Theta_1} + B_{9,1}^3 \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_3} + B_{9,1}^5 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_5} + C_{9,1} \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right. \\ \left. + C_{9,1}^{311} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + C_{9,1}^{131} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + C_{9,1}^{113} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + E_{9,1} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1,\Theta_3\Theta_1} + D_{9,1} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \right). \quad (\text{B.3})$$

Здесь

$$A_{1,1} \equiv A_{1,0} + 2n_1, \quad (\text{B.4.1})$$

$$A_{3,1} \equiv A_{3,0} + 2n_1^3, \quad (\text{B.4.2})$$

$$A_{5,1} \equiv A_{5,0} + 2n_1^5, \quad (\text{B.4.3})$$

$$A_{7,1} \equiv A_{7,0} + 2n_1^7, \quad (\text{B.4.4})$$

$$A_{9,1} \equiv A_{9,0} + 2n_1^9, \quad (\text{B.4.5})$$

$$B_{5,1} = N_{YXX} \{A_{3,0}n_1^2 - A_{1,0}n_1^4\} + N_{YXY} \{A_{1,0}A_{3,0}n_1 - (A_{1,0})^2 n_1^3\}, \quad (\text{B.4.6})$$

$$B_{7,1} = N_{YXX} \{A_{5,0}n_1^2 - A_{1,0}n_1^6\} + N_{YXY} \{A_{1,0}A_{5,0}n_1 - (A_{1,0})^2 n_1^5\}, \quad (\text{B.4.7})$$

$$B_{7,1}^3 = N_{YXX} \{A_{3,0}n_1^4 - A_{1,0}n_1^6\} + N_{YXY} \{(A_{3,0})^2 n_1 - A_{1,0}A_{3,0}n_1^3\}, \quad (\text{B.4.8})$$

$$B_{9,1} = N_{YXX} \{A_{7,0}n_1^2 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXY} \{A_{1,0}A_{7,0}n_1 - (A_{1,0})^2 n_1^7\}, \quad (\text{B.4.9})$$

$$B_{9,1}^1 = N_{YXX} \{A_{5,0}n_1^4 - A_{3,0}n_1^6\} + N_{YXY} \{A_{1,0}A_{5,0}n_1^3 - A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\}, \quad (\text{B.4.10})$$

$$B_{9,1}^3 = N_{YXX} \{A_{5,0}n_1^4 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXY} \{A_{3,0}A_{5,0}n_1 - A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\}, \quad (\text{B.4.11})$$

$$B_{9,1}^5 = N_{YXX} \{A_{3,0}n_1^6 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXY} \{A_{3,0}A_{5,0}n_1 - A_{1,0}A_{5,0}n_1^3\}, \quad (\text{B.4.12})$$

$$\begin{aligned} C_{7,1} &= N_{YXXXX} \{A_{3,0}n_1^4 - A_{1,0}n_1^6\} + N_{YXXXY} \{A_{1,0}A_{3,0}n_1^3 - (A_{1,0})^2 n_1^5\} \\ &+ N_{YXXYY} \{A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^2 - (A_{1,0})^3 n_1^4\} + N_{YXYY} \{(A_{1,0})^3 A_{3,0}n_1 - (A_{1,0})^4 n_1^3\}, \end{aligned} \quad (\text{B.4.13})$$

$$\begin{aligned} C_{9,1} &= N_{YXXXX} \{A_{5,0}n_1^4 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXXXY} \{A_{1,0}A_{5,0}n_1^3 - (A_{1,0})^2 n_1^7\} \\ &+ N_{YXXYY} \{(A_{1,0})^2 A_{5,0}n_1^2 - (A_{1,0})^3 n_1^6\} + N_{YXYY} \{(A_{1,0})^3 A_{5,0}n_1 - (A_{1,0})^4 n_1^5\}, \end{aligned} \quad (\text{B.4.14})$$

$$\begin{aligned} C_{9,1}^{311} &= N_{YXXXX} \{A_{3,0}n_1^6 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXXXY} \{A_{1,0}A_{3,0}n_1^5 - (A_{1,0})^2 n_1^7\} \\ &+ N_{YXXYY} \{A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^4 - (A_{1,0})^3 n_1^6\} + N_{YXYY} \{(A_{1,0})^2 (A_{3,0})^2 n_1 - (A_{1,0})^3 A_{3,0}n_1^3\}, \end{aligned} \quad (\text{B.4.15})$$

$$\begin{aligned} C_{9,1}^{131} &= N_{YXXXX} \{A_{3,0}n_1^6 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXXXY} \{A_{1,0}A_{3,0}n_1^5 - (A_{1,0})^2 n_1^7\} \\ &+ N_{YXXYY} \{A_{1,0}(A_{3,0})^2 n_1^2 - A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^4\} + N_{YXYY} \{(A_{1,0})^2 (A_{3,0})^2 n_1 - (A_{1,0})^3 A_{3,0}n_1^3\}, \end{aligned} \quad (\text{B.4.16})$$

$$\begin{aligned} C_{9,1}^{113} &= N_{YXXXX} \{A_{3,0}n_1^6 - A_{1,0}n_1^8\} + N_{YXXXY} \{(A_{3,0})^2 n_1^3 - A_{1,0}A_{3,0}n_1^5\} \\ &+ N_{YXXYY} \{A_{1,0}(A_{3,0})^2 n_1^2 - A_{3,0}(A_{1,0})^2 n_1^4\} + N_{YXYY} \{(A_{1,0})^2 (A_{3,0})^2 n_1 - (A_{1,0})^3 A_{3,0}n_1^3\}, \end{aligned} \quad (\text{B.4.17})$$

$$E_{9,1} = N_{YXX,YX} \left\{ (A_{3,0})^2 n_1^3 + (A_{1,0})^2 n_1^7 - 2A_{1,0}A_{3,0}n_1^5 \right\} + N_{YXY,YX} \left\{ A_{1,0} (A_{3,0})^2 n_1^2 + (A_{1,0})^3 n_1^6 - 2(A_{1,0})^2 A_{3,0}n_1^4 \right\}, \quad (B.4.18)$$

$$D_{9,1} = N_{YXXXXXX} \left\{ A_{3,0}n_1^6 - A_{1,0}n_1^8 \right\} + N_{YXXXXXY} \left\{ A_{3,0}A_{1,0}n_1^5 - (A_{1,0})^2 n_1^7 \right\} + N_{YXXXXYY} \left\{ A_{3,0} (A_{1,0})^2 n_1^4 - (A_{1,0})^3 n_1^6 \right\} + N_{YXXXYYY} \left\{ A_{3,0} (A_{1,0})^3 n_1^3 - (A_{1,0})^4 n_1^5 \right\} + N_{YXXYYYY} \left\{ A_{3,0} (A_{1,0})^4 n_1^2 - (A_{1,0})^5 n_1^4 \right\} + N_{YXYYYYY} \left\{ A_{3,0} (A_{1,0})^5 n_1 - (A_{1,0})^6 n_1^3 \right\}. \quad (B.4.19)$$

Подставим теперь $\Omega^{(1)}(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ и $\Omega_2(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ в формулу (31).

Первые два слагаемых, $2\Xi_X + \Xi_Y$, можно записать в виде

$$\Omega^{(1)} + 2\Omega_2 = \tau A_{1,1}\Theta_1 + \tau^3 A_{3,1}\Theta_3 + \tau^5 A_{5,1}\Theta_5 + \tau^7 A_{7,1}\Theta_7 + \tau^9 A_{9,1}\Theta_9 + 2\tau n_2\Theta_1 + 2\tau^3 n_2^3\Theta_3 + 2\tau^5 n_2^5\Theta_5 + 2\tau^7 n_2^7\Theta_7 + 2\tau^9 n_2^9\Theta_9. \quad (B.5.1)$$

Обозначим $G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7)$ как вклад, схожий по форме для предыдущего шага. Тогда выражения с новыми слагаемыми запишутся как

$$N_{YXX}\Xi_{\Omega^{(1)}\Omega_2\Omega_2} = G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7) + \tau^7 N_{YXX} B_{5,1} n_2^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \tau^9 N_{YXX} B_{5,1} n_2^4 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + \tau^9 N_{YXX} B_{5,1} n_2^4 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + \tau^9 N_{YXX} B_{7,1} n_2^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \tau^9 N_{YXX} B_{7,1}^3 n_2^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + \tau^9 N_{YXX} C_{7,1} n_2^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1}, \quad (B.5.2)$$

$$N_{YXY}\Xi_{\Omega^{(1)}\Omega_2\Omega^{(1)}} = G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5, \Theta_7) + \tau^7 N_{YXY} B_{5,1} A_{1,1} n_2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \tau^9 N_{YXY} B_{5,1} A_{1,1} n_2^3 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + \tau^9 N_{YXY} B_{5,1} A_{3,1} n_2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + \tau^9 N_{YXY} B_{7,1} A_{1,1} n_2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + \tau^9 N_{YXY} B_{7,1}^3 A_{1,1} n_2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + \tau^9 N_{YXY} C_{7,1} A_{1,1} n_2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} + N_{YXY} \tau^9 A_{1,1} n_2^3 B_{5,1} \Xi_{\Theta_1\Theta_3\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + N_{YXY} \tau^9 A_{3,1} n_2 B_{5,1} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1}, \quad (B.5.3)$$

$$N_{YXXX}\Xi_{\Omega^{(1)}\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega_1} = G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5) + \tau^9 N_{YXXX} B_{5,1} n_2^4 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1}, \quad (B.5.4)$$

$$N_{YXXXY}\Xi_{\Omega^{(1)}\Omega_1\Omega_1\Omega_1\Omega^{(1)}} = G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5) + \tau^9 N_{YXXXY} B_{5,1} A_{1,1} n_2^3 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1}, \quad (B.5.5)$$

$$N_{YXXYY}\Xi_{\Omega^{(1)}\Omega_1\Omega_1\Omega^{(1)}\Omega^{(1)}} = G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5) + \tau^9 N_{YXXYY} B_{5,1} (A_{1,1})^2 n_2^2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1}, \quad (B.5.6)$$

$$N_{YXYYY}\Xi_{\Omega^{(1)}\Omega_1\Omega^{(1)}\Omega^{(1)}\Omega^{(1)}} = G(\Theta_1, \Theta_3, \Theta_5) + \tau^9 N_{YXYYY} B_{5,1} (A_{1,1})^3 n_2 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1}. \quad (B.5.7)$$

Подстановка функций более высокого порядка $\Omega^{(m)}$ не обнаружит новых слагаемых. Поэтому окончательный результат может быть записан следующей рекуррентной формулой:

$$\begin{aligned} \Omega^{(m)} = & \tau A_{1,m} \Xi_{\Theta_1} + \tau^3 A_{3,m} \Xi_{\Theta_3} + \tau^5 (A_{5,m} \Xi_{\Theta_5} + B_{5,m} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1}) \\ & + \tau^7 (A_{7,m} \Xi_{\Theta_7} + B_{7,m} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + B_{7,m}^3 \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3} + C_{7,m} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1}) \\ & + \tau^9 (A_{9,m} \Xi_{\Theta_9} + B_{9,m} \Xi_{\Theta_7\Theta_1\Theta_1} + B_{9,m}^1 \Xi_{\Theta_5\Theta_3\Theta_1} + B_{9,m}^3 \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_3} + B_{9,m}^5 \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_5} + C_{9,m} \Xi_{\Theta_5\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1} \\ & + C_{9,m}^{311} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_3\Theta_1\Theta_1} + C_{9,m}^{131} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + C_{9,m}^{113} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_3} + E_{9,m} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_3\Theta_1} + D_{9,m} \Xi_{\Theta_3\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1\Theta_1}). \end{aligned} \quad (B.6)$$

Здесь

$$A_{1,m} = A_{1,m-1} + 2n_m, \quad (\text{B.7.1})$$

$$A_{3,m} = A_{3,m-1} + 2n_m^3, \quad (\text{B.7.2})$$

$$A_{5,m} = A_{5,m-1} + 2n_m^5, \quad (\text{B.7.3})$$

$$A_{7,m} = A_{7,m-1} + 2n_m^7, \quad (\text{B.7.4})$$

$$A_{9,m} = A_{9,m-1} + 2n_m^9, \quad (\text{B.7.5})$$

$$B_{5,m} = B_{5,m-1} + N_{YXX} \{A_{3,m-1}n_m^2 - A_{1,m-1}n_m^4\} + N_{YXY} \{A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m - (A_{1,m-1})^2 n_m^3\}, \quad (\text{B.7.6})$$

$$B_{7,m} = B_{7,m-1} + N_{YXX} \{A_{5,m-1}n_m^2 - A_{1,m-1}n_m^6\} + N_{YXY} \{A_{1,m-1}A_{5,m-1}n_m - (A_{1,m-1})^2 n_m^5\}, \quad (\text{B.7.7})$$

$$B_{7,m}^3 = B_{7,m-1}^3 + N_{YXX} \{A_{3,m-1}n_m^4 - A_{1,m-1}n_m^6\} + N_{YXY} \{(A_{3,m-1})^2 n_m - A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m^3\}, \quad (\text{B.7.8})$$

$$B_{9,m} = B_{9,m-1} + N_{YXX} \{A_{7,m-1}n_m^2 - A_{1,m-1}n_m^8\} + N_{YXY} \{A_{1,m-1}A_{7,m-1}n_m - (A_{1,m-1})^2 n_m^7\}, \quad (\text{B.7.9})$$

$$B_{9,m}^1 = B_{9,m-1}^1 + N_{YXX} \{A_{5,m-1}n_m^4 - A_{3,m-1}n_m^6\} + N_{YXY} \{A_{1,m-1}A_{5,m-1}n_m^3 - A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m^5\}, \quad (\text{B.7.10})$$

$$B_{9,m}^3 = B_{9,m-1}^3 + N_{YXX} \{A_{5,m-1}n_m^4 - A_{1,m-1}n_m^8\} + N_{YXY} \{A_{3,m-1}A_{5,m-1}n_m - A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m^5\}, \quad (\text{B.7.11})$$

$$B_{9,m}^5 = B_{9,m-1}^5 + N_{YXX} \{A_{3,m-1}n_m^6 - A_{1,m-1}n_m^8\} + N_{YXY} \{A_{3,m-1}A_{5,m-1}n_m - A_{1,m-1}A_{5,m-1}n_m^3\}, \quad (\text{B.7.12})$$

$$\begin{aligned} C_{7,m} = C_{7,m-1} + N_{YXXX} \{A_{3,m-1}n_m^4 - A_{1,m-1}n_m^6\} + N_{YXXY} \{A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m^3 - (A_{1,m-1})^2 n_m^5\} \\ + N_{YXXY} \{A_{3,m-1}(A_{1,m-1})^2 n_m^2 - (A_{1,m-1})^3 n_m^4\} + N_{YXYY} \{(A_{1,m-1})^3 A_{3,m-1}n_m - (A_{1,m-1})^4 n_m^3\} \\ + N_{YXX} B_{5,m-1}n_m^2 + N_{YXY} B_{5,m-1}A_{1,m-1}n_m, \end{aligned} \quad (\text{B.7.13})$$

$$\begin{aligned} C_{9,m} = C_{9,m-1} + N_{YXXX} \{A_{5,m-1}n_m^4 - A_{1,m-1}n_m^8\} + N_{YXXY} \{A_{1,m-1}A_{5,m-1}n_m^3 - (A_{1,m-1})^2 n_m^7\} \\ + N_{YXXY} \{(A_{1,m-1})^2 A_{5,m-1}n_m^2 - (A_{1,m-1})^3 n_m^6\} + N_{YXYY} \{(A_{1,m-1})^3 A_{5,m-1}n_m - (A_{1,m-1})^4 n_m^5\} \\ + N_{YXX} B_{7,m-1}n_m^2 + N_{YXY} B_{7,m-1}A_{1,m-1}n_m, \end{aligned} \quad (\text{B.7.14})$$

$$\begin{aligned} C_{9,m}^{311} = C_{9,m-1}^{311} + N_{YXXX} \{A_{3,m-1}n_m^6 - A_{1,m-1}n_m^8\} + N_{YXXY} \{A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m^5 - (A_{1,m-1})^2 n_m^7\} \\ + N_{YXXY} \{A_{3,m-1}(A_{1,m-1})^2 n_m^4 - (A_{1,m-1})^3 n_m^6\} + N_{YXYY} \{(A_{1,m-1})^2 (A_{3,m-1})^2 n_m - (A_{1,m-1})^3 A_{3,m-1}n_m^3\} \\ + N_{YXX} B_{7,m-1}^3 n_m^2 + N_{YXY} B_{7,m-1}^3 A_{1,m-1}n_m, \end{aligned} \quad (\text{B.7.15})$$

$$\begin{aligned} C_{9,m}^{131} = C_{9,m-1}^{131} + N_{YXXX} \{A_{3,m-1}n_m^6 - A_{1,m-1}n_m^8\} + N_{YXXY} \{A_{1,m-1}A_{3,m-1}n_m^5 - (A_{1,m-1})^2 n_m^7\} \\ + N_{YXXY} \{A_{1,m-1}(A_{3,m-1})^2 n_m^2 - A_{3,m-1}(A_{1,m-1})^2 n_m^4\} \\ + N_{YXYY} \{(A_{1,m-1})^2 (A_{3,m-1})^2 n_m - (A_{1,m-1})^3 A_{3,m-1}n_m^3\} + N_{YXX} B_{5,m-1}n_m^4 + N_{YXY} B_{5,m-1}A_{1,m-1}n_m^3, \end{aligned} \quad (\text{B.7.16})$$

$$C_{9,m}^{113} = C_{9,m-1}^{113} + N_{YXXXX} \left\{ A_{3,m-1} n_m^6 - A_{1,m-1} n_m^8 \right\} + N_{YXXXY} \left\{ (A_{3,m-1})^2 n_m^3 - A_{1,m-1} A_{3,m-1} n_m^5 \right\} \\ + N_{YXXYY} \left\{ A_{1,m-1} (A_{3,m-1})^2 n_m^2 - A_{3,m-1} (A_{1,m-1})^2 n_m^4 \right\} \quad (B.7.17)$$

$$+ N_{YXYYY} \left\{ (A_{1,m-1})^2 (A_{3,m-1})^2 n_m - (A_{1,m-1})^3 A_{3,m-1} n_m^3 \right\} + N_{YXX} B_{5,m-1} n_m^4 + N_{YXY} B_{5,m-1} A_{3,m-1} n_m, \\ E_{9,m} = E_{9,m-1} + N_{YXX,YX} \left\{ (A_{3,m-1})^2 n_m^3 + (A_{1,m-1})^2 n_m^7 - 2A_{1,m-1} A_{3,m-1} n_m^5 \right\} \\ + N_{YXY,YX} \left\{ A_{1,m-1} (A_{3,m-1})^2 n_m^2 + (A_{1,m-1})^3 n_m^6 - 2(A_{1,m-1})^2 A_{3,m-1} n_m^4 \right\} \quad (B.7.18) \\ + N_{YXY} A_{1,m-1} B_{5,m-1} n_m^3 - N_{YXY} A_{3,m-1} B_{5,m-1} n_m,$$

$$D_{9,m} = D_{9,m-1} + N_{YXXXXXX} \left\{ A_{3,m-1} n_m^6 - A_{1,m-1} n_m^8 \right\} + N_{YXXXXXY} \left\{ A_{3,m-1} A_{1,m-1} n_m^5 - (A_{1,m-1})^2 n_m^7 \right\} \\ + N_{YXXXXYY} \left\{ A_{3,m-1} (A_{1,m-1})^2 n_m^4 - (A_{1,m-1})^3 n_m^6 \right\} + N_{YXXXYYY} \left\{ A_{3,m-1} (A_{1,m-1})^3 n_m^3 - (A_{1,m-1})^4 n_m^5 \right\} \\ + N_{YXXYYY} \left\{ A_{3,m-1} (A_{1,m-1})^4 n_m^2 - (A_{1,m-1})^5 n_m^4 \right\} + N_{YXYYYY} \left\{ A_{3,m-1} (A_{1,m-1})^5 n_m - (A_{1,m-1})^6 n_m^3 \right\} \quad (B.7.19) \\ + N_{YXX} C_{7,m-1} n_m^2 + N_{YXY} C_{7,m-1} A_{1,m-1} n_m + N_{YXXX} B_{5,m-1} n_m^4 + N_{YXXY} B_{5,m-1} A_{1,m-1} n_m^3 \\ + N_{YXXYY} B_{5,m-1} (A_{1,m-1})^2 n_m^2 + N_{YXYYY} B_{5,m-1} (A_{1,m-1})^3 n_m,$$

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Подставим $\Omega_0(\Theta_1, \tilde{\Theta}_5, \tilde{\Theta}_7, \tilde{\Theta}_9)$ и $\Omega_1(\Theta_1, \tilde{\Theta}_5, \tilde{\Theta}_7, \tilde{\Theta}_9)$ в формулу (31).

Введем следующие обозначения:

$$A_{1,0} = n_0; \quad A_{3,0} = n_0^3; \quad A_{5,0} = n_0^5; \quad A_{7,0} = n_0^7; \quad A_{9,0} = n_0^9. \quad (C.1)$$

Первые два слагаемых, $2\Xi_X + \Xi_Y$, будут записаны как

$$\Omega_0 + 2\Omega_1 = \tau A_{1,0} \Theta_1 + \tau^3 A_{3,0} \tilde{\Theta}_3 + \tau^5 A_{5,0} \tilde{\Theta}_5 + \tau^7 A_{7,0} \tilde{\Theta}_7 + \tau^9 A_{9,0} \tilde{\Theta}_9 + \\ + 2\tau n_1 \Theta_1 + 2\tau^3 n_1^3 \tilde{\Theta}_3 + 2\tau^5 n_1^5 \tilde{\Theta}_5 + 2\tau^7 n_1^7 \tilde{\Theta}_7 + 2\tau^9 n_1^9 \tilde{\Theta}_9. \quad (C.2)$$

Остальные слагаемые:

$$N_{YXX} \Xi_{\Omega_0 \Omega_1 \Omega_1} = N_{YXX} \left[\left[\tau A_{1,0} \Theta_1 + \tau^5 A_{5,0} \tilde{\Theta}_5 + \tau^7 A_{7,0} \tilde{\Theta}_7, \tau n_1 \Theta_1 + \tau^5 n_1^5 \tilde{\Theta}_5 + \tau^7 n_1^7 \tilde{\Theta}_7 \right], \tau n_1 \Theta_1 \right] = \\ = \tau^7 N_{YXX} \left\{ A_{1,0} n_1^6 \Xi_{\Theta_1 \Theta_5 \Theta_1} + A_{5,0} n_1^2 \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1} \right\} + \tau^9 N_{YXX} \left\{ A_{1,0} n_1^8 \Xi_{\Theta_1 \Theta_7 \Theta_1} + A_{7,0} n_1^2 \Xi_{\tilde{\Theta}_7 \Theta_1 \Theta_1} \right\}, \quad (C.3.1)$$

$$N_{YXY} \Xi_{\Omega_0 \Omega_1 \Omega_0} = N_{YXY} \left[\left[\tau A_{1,0} \Theta_1 + \tau^5 A_{5,0} \tilde{\Theta}_5 + \tau^7 A_{7,0} \tilde{\Theta}_7, \tau n_1 \Theta_1 + \tau^5 n_1^5 \tilde{\Theta}_5 + \tau^7 n_1^7 \tilde{\Theta}_7 \right], \tau A_{1,0} \Theta_1 \right] = \\ = \tau^7 N_{YXY} \left\{ (A_{1,0})^2 n_1^5 \Xi_{\Theta_1 \tilde{\Theta}_5 \Theta_1} + A_{1,0} A_{5,0} n_1 \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1} \right\} + \tau^9 N_{YXY} \left\{ (A_{1,0})^2 n_1^7 \Xi_{\Theta_1 \tilde{\Theta}_7 \Theta_1} + A_{1,0} A_{7,0} n_1 \Xi_{\tilde{\Theta}_7 \Theta_1 \Theta_1} \right\}, \quad (C.3.2)$$

$$N_{YXXX} \Xi_{\Omega_0 \Omega_1 \Omega_1 \Omega_1} = \tau^9 N_{YXXX} \left\{ A_{1,0} n_1^8 \Xi_{\Theta_1 \tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1} + A_{5,0} n_1^4 \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} \right\}, \quad (C.3.3)$$

$$N_{YXXXY} \Xi_{\Omega_0 \Omega_1 \Omega_1 \Omega_1 \Omega_0} = \tau^9 N_{YXXXY} \left\{ (A_{1,0})^2 n_1^7 \Xi_{\Theta_1 \tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} + A_{1,0} A_{5,0} n_1^3 \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} \right\}, \quad (C.3.4)$$

$$N_{YXXYY} \Xi_{\Omega_0 \Omega_1 \Omega_1 \Omega_0 \Omega_0} = \tau^9 N_{YXXYY} \left\{ (A_{1,0})^3 n_1^6 \Xi_{\Theta_1 \tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} + (A_{1,0})^2 A_{5,0} n_1^2 \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} \right\}, \quad (C.3.5)$$

$$N_{YXYXY} \Xi_{\Omega_0 \Omega_1 \Omega_0 \Omega_0} = \tau^9 N_{YXYXY} \left((A_{1,0})^4 n_1^5 \Xi_{\Theta_1 \tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1} + (A_{1,0})^3 A_{5,0} n_1 \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1} \right). \quad (C.3.6)$$

Итоговое выражение для $\Omega^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \Omega^{(1)} = & \tau A_{1,1} \Xi_{\Theta_1} + \tau^5 A_{5,1} \Xi_{\tilde{\Theta}_5} + \tau^7 (A_{7,1} \Xi_{\tilde{\Theta}_7} + B_{7,1} \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1}) \\ & + \tau^9 (A_{9,1} \Xi_{\tilde{\Theta}_9} + B_{9,1} \Xi_{\tilde{\Theta}_7 \Theta_1 \Theta_1} + C_{9,1} \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1}). \end{aligned} \quad (C.4)$$

Здесь

$$A_{1,1} = n_0 + 2n_1 \equiv A_{1,0} + 2n_1, \quad (C.4.1)$$

$$A_{3,1} = n_0^3 + 2n_1^3 \equiv A_{3,0} + 2n_1^3, \quad (C.4.2)$$

$$A_{5,1} = n_0^5 + 2n_1^5 \equiv A_{5,0} + 2n_1^5, \quad (C.4.3)$$

$$A_{7,1} = n_0^7 + 2n_1^7 \equiv A_{7,0} + 2n_1^7, \quad (C.4.4)$$

$$A_{9,1} = n_0^9 + 2n_1^9 \equiv A_{9,0} + 2n_1^9, \quad (C.4.5)$$

$$B_{7,1} = B_{7,0} + N_{YXY} \left\{ A_{1,0} A_{5,0} n_1 - (A_{1,0})^2 n_1^5 \right\} + N_{YXX} \left\{ A_{5,0} n_1^2 - A_{1,0} n_1^6 \right\}, \quad (C.4.6)$$

$$B_{9,1} = B_{9,0} + N_{YXX} \left\{ A_{7,0} n_1^2 - A_{1,0} n_1^8 \right\} + N_{YXY} \left\{ A_{1,0} A_{7,0} n_1 - (A_{1,0})^2 n_1^7 \right\}, \quad (C.4.7)$$

$$\begin{aligned} C_{9,1} = & C_{9,0} + N_{YXXX} \left\{ A_{5,0} n_1^4 - A_{1,0} n_1^8 \right\} + N_{YXXXY} \left\{ A_{1,0} A_{5,0} n_1^3 - (A_{1,0})^2 n_1^7 \right\} \\ & + N_{YXXYX} \left\{ (A_{1,0})^2 A_{5,0} n_1^2 - (A_{1,0})^3 n_1^6 \right\} + N_{YXYXY} \left\{ (A_{1,0})^3 A_{5,0} n_1 - (A_{1,0})^4 n_1^5 \right\}, \end{aligned} \quad (C.4.8)$$

Вычисление выражения $\Omega^{(2)}$ показывает, что только одна функция, C_9 , будет иметь слагаемые, отличающиеся по форме от предыдущего шага.

В итоге

$$\begin{aligned} \Omega^{(m)} = & \tau A_{1,m} \Xi_{\Theta_1} + \tau^5 A_{5,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_5} + \tau^7 (A_{7,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_7} + B_{7,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1}) + \\ & + \tau^9 (A_{9,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_9} + B_{9,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_7 \Theta_1 \Theta_1} + C_{9,m} \Xi_{\tilde{\Theta}_5 \Theta_1 \Theta_1 \Theta_1}). \end{aligned} \quad (C.5)$$

Здесь

$$A_{1,m} = A_{1,m-1} + 2n_m, \quad (C.6.1)$$

$$A_{5,m} = A_{5,m-1} + 2n_m^5, \quad (C.6.2)$$

$$A_{7,m} = A_{7,m-1} + 2n_m^7, \quad (C.6.3)$$

$$A_{9,m} = A_{9,m-1} + 2n_m^9, \quad (C.6.4)$$

$$B_{7,m} = B_{7,m-1} + N_{YXY} \left\{ A_{1,m-1} A_{5,m-1} n_m - (A_{1,m-1})^2 n_m^5 \right\} + N_{YXX} \left\{ A_{5,m-1} n_m^2 - A_{1,m-1} n_m^6 \right\}, \quad (C.6.5)$$

$$B_{9,m} = B_{9,m-1} + N_{YXX} \left\{ A_{7,m-1} n_m^2 - A_{1,m-1} n_m^8 \right\} + N_{YXY} \left\{ A_{1,m-1} A_{7,m-1} n_m - (A_{1,m-1})^2 n_m^7 \right\}, \quad (C.6.6)$$

$$\begin{aligned}
C_{9,m} = & C_{9,m-1} + N_{YXXX} \left\{ A_{5,m-1} n_m^4 - A_{1,m-1} n_m^8 \right\} + N_{YXXY} \left\{ A_{1,m-1} A_{5,m-1} n_m^3 - (A_{1,m-1})^2 n_m^7 \right\} + \\
& + N_{YXXY} \left\{ (A_{1,m-1})^2 A_{5,m-1} n_m^2 - (A_{1,m-1})^3 n_m^6 \right\} + N_{YXY} \left\{ (A_{1,m-1})^3 A_{5,m-1} n_m - (A_{1,m-1})^4 n_m^5 \right\} + \\
& + N_{YXX} B_{7,m-1} n_m^2 + N_{YXY} B_{7,m-1} A_{1,m-1} n_m.
\end{aligned} \quad (C.6.7)$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Marchuk G. I.* Partial Differential Equations: II SYNSPADE-1970. New York: Academic, 1971.
2. *Samarskii A. A.* Teoriya raznostnykh skhem (The Theory of Difference Schemes). Moscow: Nauka, 1977.
3. *Strang G., Fix G.* An Analysis of the Finite Element Method. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1973.
4. *Bathe K. J.* Finite Element Procedures in Engineering Analysis. New York: Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1982.
5. *Magnus W.* On the Exponential solution of differential equations for a linear operator // Commun. Pure Appl. Math. 1954. V. 7. P. 649.
6. *Wilcox R. M.* Exponential operators and parameter differentiation in quantum physics // J. Math. Phys. 1967. V. 8. P. 962.
7. *Blanes S., Casas F., Ros J.* Improved high order integrators based on the Magnus expansion // BIT Numer. Math. 2000. V. 40. P. 434.
8. *Chuluunbaatar O., Derbov V. L., Galtbayar A., Gusev A. A., Kaschiev M. S., Vinitsky S. I., Zhanlav T.* Explicit Magnus expansions for solving the time-dependent Schrödinger equation // J. Phys. A: Math. Theor. 2008. V. 41. P. 295203.
9. *Yoshida H.* Construction of higher order symplectic integrators // Phys. Lett. A. 1990. V. 150. P. 262.
10. *Suzuki M.* Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations // Phys. Lett. A. 1990. V. 146. № 6. P. 319.
11. *Chin S. A., Chen C. R.* Gradient symplectic algorithms for solving the Schrödinger equation with time-dependent potentials // J. Chem. Phys. 2002. V. 117. P. 1409.
12. *McLachlan R. I.* On the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations by Symmetric Composition // SIAM J. Sci. Comput. 1995. V. 16. P. 1.
13. *McLachlan R. I.* Families of High-Order Composition Methods // Numer. Alg. 2002. V. 31. P. 233.
14. *Blanes S.* High order numerical integrators for differential equations using composition and processing of low order methods // Appl. Numer. Math. 2001. V. 37. P. 289.
15. *Blanes S., Casas F., Ros J.* Symplection integration with processing: A general study // SIAM J. Sci. Comput. 1999. V. 21. P. 711.
16. *Zakharov M. A., Frank A. I., Kulin G. V., Goryunov S. V.* Interaction of Ultracold Neutrons with a Neutron Interference Filter Oscillating in Space // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2020. V. 14. P. 6.
17. *Zakharov M. A., Frank A. I., Kulin G. V.* Reflection of neutrons from a resonant potential structure oscillating in space // Phys. Lett. A. 2021. V. 420. P. 127748.
18. *Frigo M., Johnson S. G.* The Design and Implementation of FFTW3 // Proc. IEEE. 2005. V. 93. P. 216.
19. *Suzuki M.* General Decomposition Theory of Ordered Exponentials // Proc. Japan Acad. B. 1993. V. 69. P. 161.
20. *Trotter H.* On the product of semi-groups of operators // Proc. Am. Math. Soc. 1959. V. 10. P. 545.
21. *Feit M. D., Jr. Fleck J. A., Steiger A.* Solution of the Schrödinger equation by a spectral method // J. Comp. Phys. 1982. V. 47. P. 412.
22. *Wiebe N., Berry D., Hoyer P., Sanders B.* Higher order decompositions of ordered operator exponentials // J. Phys. A: Math. Theor. 2010. V. 43. P. 065203.
23. *Casas F., Murua A.* An efficient algorithm for computing the Baker–Campbell–Hausdorff series and some of its applications // J. Math. Phys. 2009. V. 50. P. 033513.
24. *Bakhvalov N. S.* Numerical methods, Analysis, Algebra, Ordinary Differential Equations. MIR Publ., 1977.
25. *Puzynin I. V., Selin A. V., Vinitsky S. I.* A high-order accuracy method for numerical solving of the time-dependent Schrödinger equation // Comput. Phys. Commun. 1999. V. 123. P. 1.