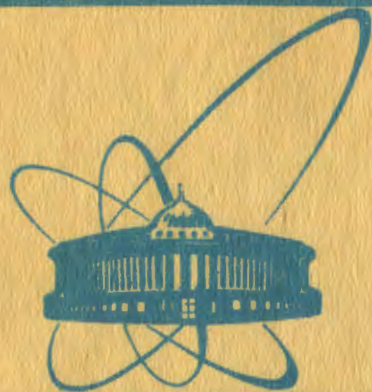


80-752



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

835/2-81

P11-80-752

Л.Александров, М.Дренска, М.Иванов,  
Д.Караджов

**ПРОГРАММА SPSOL**

**ДЛЯ РЕШЕНИЯ**

**РАДИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ТИПА ШРЕДИНГЕРА  
НА ОСНОВЕ МЕТОДА СТЕРЖНЕВЫХ СПЛАЙНОВ**

**1980**

## ВВЕДЕНИЕ

Метод стержневых сплайнов /1/ позволяет подойти единым образом к решению задач на собственные значения дифференциальных операторов высокого /1/ и низкого /2/ порядков. Эта особенность метода используется в программе SPSOL, где одновременно решаются следующие радиальные уравнения для связанных состояний:

- уравнение Шредингера /УШ/ /3/;
- релятивистское уравнение бесконечного порядка Кадышевского первого типа /УК1/ /4/;
- релятивистское уравнение второго порядка Тодорова /УТ/ /5/;
- релятивистское уравнение бесконечного порядка Кадышевского второго типа /УК2/ /6/.

Настоящая работа посвящена описанию алгоритма программы SPSOL.

## §1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ РЕШАЕМЫХ УРАВНЕНИЙ

Решаемые уравнения записываются в общем виде:

$$[L_\nu^n(x,z) + u_\nu(x,z)] y_\nu(x,z) = 0 \quad (x \in X, z \in Z, 2 \leq n \leq \infty), \quad /1/$$

$$J(s_2) \equiv \int_{x_H}^{x_k} [|w_\nu(x)| y_\nu(x,z)]^2 dx = 1, \quad /2/$$

где

$$y_\nu(x,z) = s_2(x) p_\nu(x,z), \quad /3/$$

$$X = [x_H, x_k], \quad (x_H, x_k \in \mathbb{R}^1, x_H < x_k), \quad Z = [z_H, z_k] \quad (z_H, z_k \in \mathbb{R}^1, z_H < z_k).$$

Индекс  $\nu = 1, 2, 3, 4$  отвечает четырем решаемым задачам. Для отдельных уравнений операторы  $L_\nu$ , функции  $u_\nu$ ,  $w_\nu$  и стержень решения  $p_\nu$  /1/ определены следующим образом:

$\nu = 1$  - уравнение Шредингера /2.3/:

$$L_1^2 = 2 \frac{\ell+1}{x} \frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2},$$

$$u_1 = 2\bar{m}_1 [z - v(x)], \quad \bar{m}_1 = m_2 / (1 + m_1/m_2), \quad \hbar = 1,$$

$$w_1 = x^{\ell+1},$$

/4/

$$p_1 = \exp(-k(z)x^q);$$

$\nu = 2$  - уравнение Кадышевского первого типа /4/:

$$L_2^\infty = \cos\left(\frac{d}{dx}\right) - \frac{\ell+1}{x} \sin\left(\frac{d}{dx}\right) - 1,$$

$$u_2 = 1 - \frac{z}{\bar{m}_2} + \frac{v(x,z)}{2\bar{m}_2}, \quad \bar{m}_2 = \frac{m_1 + m_2}{2}, \quad \hbar = c = \frac{1}{\sqrt{m_1 m_2}} = 1,$$

/5/

$$w_2 = (-x)^{(\ell+1)}, \quad (-x)^{(n)} \equiv (-x)(-x+i)\dots[-x+(n-1)i],$$

$$p_2 = \exp(-k(z)x);$$

$\nu = 3$  - уравнение Тодорова /5/:

$$L_3^2 = L_1^2,$$

$$u_3 = \frac{1}{4z^2} [z^2 - (m_1 + m_2)^2] [z^2 - (m_1 - m_2)^2] - 2v(x,z),$$

/6/

$$w_3 = w_1, \quad p_3 = p_1, \quad \hbar = c = 1;$$

$\nu = 4$  - уравнение Кадышевского второго типа /6/:

$$L_4^\infty = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2 + 1} \right] \left[ \cos\left(2 \frac{d}{dx}\right) - 1 \right] -$$

/7/

$$- \left[ \frac{\ell(\ell+1)}{2x(x^2+1)} + 2 \frac{\ell+1}{x} \right] \sin\left(2 \frac{d}{dx}\right) - \frac{z}{\bar{m}_2} L_2^\infty, \quad u_4 = u_2, \quad w_4 = w_2, \quad p_4 = p_2.$$

В формулах /1/-/7/ параметр  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  обозначает квантовое число углового момента, а параметры  $m_1$  и  $m_2$  - массы частиц. Относительно потенциала /квазипотенциала/ задачи предполагается включение  $v(x, z) \in C^{0,1}(X_0)$ , где  $X_0 = (0, \infty)$ .

## §2. ОСНОВНЫЕ ОПЕРАЦИИ АЛГОРИТМА

Алгоритм программы SPSOL описывается при помощи следующих пятнадцати основных операций:

A1. Вычисление коэффициентов базисного сплайна /1/

$$\alpha_j^*, \beta_j^*, \{\alpha_j^*, \beta_j^*, \gamma_j^*\}, j = 2, 3, \dots, N;$$

A2. Решение нелинейного алгебраического уравнения /см. /1/ /, уравнение /1.18//

$$f(\tilde{z}) = 0 \quad /8/$$

относительно приближенной энергии  $\tilde{z} \in Z$ ;

A3. Вычисление нормировочного коэффициента  $\gamma_1$ ;

A4. Вычисление полной волновой функции

$$\tilde{Y}(x, \tilde{z}) = w(x) \tilde{y}(x, \tilde{z})$$

в заданных точках интервала  $X$ ;

A5. Проверка критерия

$$|C_y| w(x) \tilde{y}(x, \tilde{z})| + C_d \left| \frac{\partial (w(x) \tilde{y}(x, \tilde{z}))}{\partial x} \right| \Big|_{x=x_k} \leq C1 \quad /9/$$

по заданным значениям параметров управления программы  $C1, C_y$  и  $C_d$ .

A6. Построение нового значения  $x_k$  и нового числа узлов сетки сплайна  $N$  при условии сохранения постоянства заданного шага сетки  $h_1$ ;

A7. Вычисление верхних оценок  $(\Delta z)_{\text{верх}}$  и  $(\Delta y)_{\text{верх}}$ ;

A8. Проверка значения управляющего параметра программы  $C2$ :  $C2 = 0$  - оценка  $(\Delta z)_{\text{ниж}}$  не вычисляется;  $C2 = 1$  - оценка  $(\Delta z)_{\text{ниж}}$  вычисляется;

A9. Построение нового индекса  $\lambda$  шага сетки параболического сплайна  $h_\lambda$ ;

A10. Проверка равенства  $\lambda = 4$ : при  $\lambda = 2, 3$  вычисляются новые решения с шагами  $h_2$  и  $h_3$ ; при  $\lambda = 4$  программа переходит к вычислению оценки  $(\Delta z)_{\text{ниж}}$ ;

A11. Вычисление нижней оценки энергии  $(\Delta z)_{\text{ниж}}$ ;

A12. Вывод на печать и сохранение полученной информации относительно: приближенного решения  $(\tilde{z}(h, \lambda), \tilde{Y}(x, \tilde{z}(h, \lambda)))$ ; оценок  $(\Delta z)_{\text{верх}}$ ,  $(\Delta u)_{\text{верх}}$ ,  $(\Delta z)_{\text{ниж}}$ ; найденных значений  $x_k$  и  $N$ ; производной радиальной функции  $\tilde{Y}'_x(x_k, \tilde{z}(h, \lambda); h, \lambda)$ ;

A13. Построение следующего радиального числа  $l_x$ ;

A14. Проверка выполнения равенства  $l_x = \bar{l}_x$ , где  $\bar{l}_x$  - заданное верхнее значение радиального числа /входной параметр программы/; если  $l_x < \bar{l}_x$ , программа возвращается к выполнению операции A1; если  $l_x = \bar{l}_x$ , управление передается на выполнение операции A15;

A15. Конец работы подпрограммы SPSOL для заданного значения квантового числа  $l$  /входной параметр программы/.

Блок-схема общего алгоритма программы SPSOL представлена на рис.1.

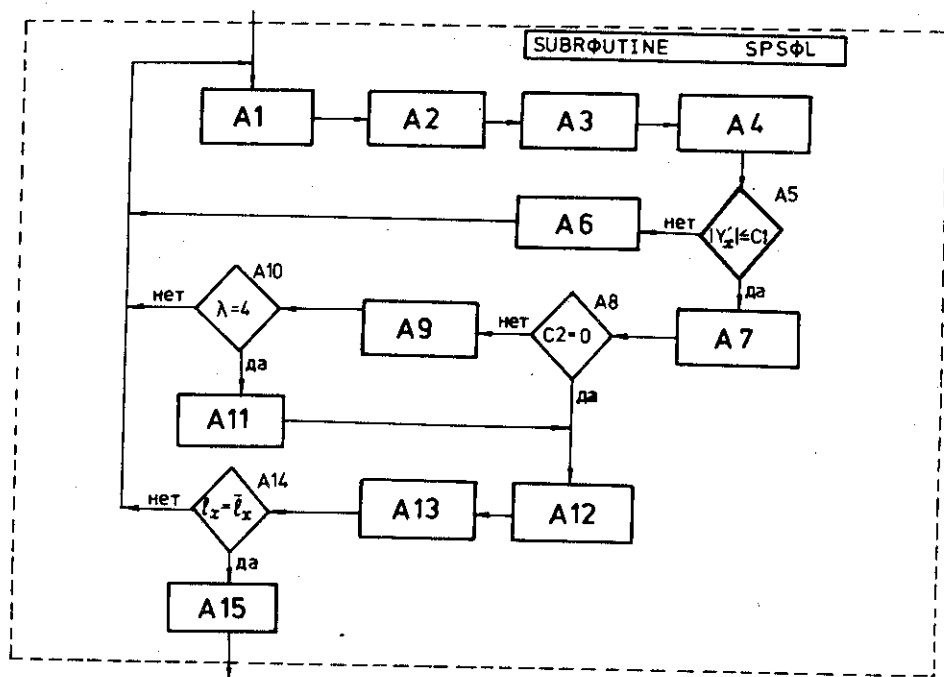


Рис. 1

### §3. ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ПРОГРАММЫ

Основными входными параметрами программы SPSOL являются следующие величины:

$x_H$  - начало интервала  $X = [x_H, x_k] \subset X_0$ ;

$x_k$  - конец интервала  $X$ ;

$N$  - начальное число звеньев параболического сплайна;

$z_H$  - начало интервала энергий  $Z$ ;

$\ell_x$  - начальное значение радиального числа;

$\bar{\ell}_x$  - максимальное число искомых радиальных решений;

$\nu$  - признак решаемого уравнения;

постоянные  $C1$  и  $C2$  /см. операции A5 и A8/;

$\bar{m}_\nu$  - значение приведенной массы /в случае УТ ( $\nu=3$ ) задаются массы обеих частиц  $m_1$  и  $m_2$  /;

$\ell$  - значение орбитального квантового числа решаемой парциальной задачи;

$s$  - значение квантового числа спина /задается только в случае решения УШ ( $\nu=1$ ) /;

$q$  и  $\nu_0$  - параметры стержневой функции<sup>1,2/</sup>.

Кроме перечисленных величин одним из главных входных параметров программы является также потенциал задачи  $v(x, z)$ .

Параметры второстепенного значения сообщаются при детальном описании операций алгоритма.

### §4. ДЕТАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ОПЕРАЦИЙ АЛГОРИТМА

Операция A1. Согласно теореме 1 из работы<sup>1/</sup> коэффициенты базисного сплайна  $s_2^*(x)$  вычисляются по формулам:

$$\alpha_1^* = (h_1^{(2)} h_2^{(3)} - h_1^{(3)} h_2^{(2)}) / \Delta,$$

$$\beta_1^* = (h_2^{(1)} h_1^{(3)} - h_1^{(1)} h_2^{(3)}) / \Delta, \quad \gamma_1^* = 1;$$

$$\alpha_2^* = \alpha_1^*, \quad \beta_2^* = \beta_1^*, \quad \gamma_2^* = \gamma_1^* ;$$

$$\alpha_j^* = -\frac{h_j^{(2)}}{t_j} [\beta_1^* + 2\bar{x}_j \alpha_{j-1}^* + 2 \sum_{\nu=3}^{j-1} (\alpha_{\nu-1}^* - \alpha_\nu^*) \bar{x}_\nu] -$$

$$-\frac{h_j^{(3)}}{t_j} [1 - \bar{x}_j^2 \alpha_{j-1}^* - \sum_{\nu=3}^{j-1} (\alpha_{\nu-1}^* - \alpha_\nu^*) \bar{x}_\nu^2],$$

$$\beta_j^* = \beta_1^* + 2 \sum_{\nu=2}^j (a_{\nu-1}^* - a_{\nu}^*) \bar{x}_{\nu} .$$

$$\gamma_j^* = 1 - \sum_{\nu=2}^j (a_{\nu-1}^* - a_{\nu}^*) \bar{x}_{\nu}^2 ; \quad (j=3,4,\dots,N-1);$$

$$a_N^* = a_{N-1}^* , \quad \beta_N^* = \beta_{N-1}^* , \quad \gamma_N^* = \gamma_{N-1}^* .$$

Здесь

$$\Delta = h_1^{(1)} h_2^{(2)} - h_1^{(2)} h_2^{(1)} ,$$

$$t_j = h_j^{(1)} - 2 \bar{x}_j h_j^{(2)} + \bar{x}_j^2 h_j^{(3)} \quad (j=3,4,\dots,N),$$

$$h_j^{(\mu)} = u_j x_j^{3-\mu} p_{\nu,j} + D_j^{(\mu)} \quad (\mu=1,2,3),$$

$$u_j = u(x_j, z),$$

$$p_{\nu,j} = p_{\nu}(x_j, z), \quad \nu=1,2,3,4$$

}  $j=3,4,\dots,N$ .

Величины  $x_j$  и  $\bar{x}_j$  являются узлами сеток

$$\{\bar{x}_j / \bar{x}_1 = x_N, \quad \bar{x}_{N+1} = x_k, \quad \bar{x}_j = \bar{x}_{j-1} + h \quad (j=2,\dots,N), \quad h = \frac{x_k - x_N}{N}\} -$$

сетка сплайна  $s_2(x)$  и

$$\{x_j / x_1 = x_N, \quad x_N = x_k, \quad x_j = \frac{\bar{x}_j + \bar{x}_{j+1}}{2} \quad (j=2,3,\dots,N-1)\} -$$

сетка интерполяционных точек сплайна.

Величины  $D_j^{(\mu)}$  ( $\mu=1,2,3; j=1,2,\dots,N$ ) принимают следующие значения для различных уравнений:

в случае УШ ( $\nu=1$ ) и УТ ( $\nu=3$ ) <sup>/2/</sup>

$$D_j^{(\mu)} = (3-\mu) \sum_{r=\mu}^2 a_{3-r,j} x_j^{r-\mu} p_{\nu,j} + \sum_{r=1}^{4-\mu} \frac{d_{rj}}{(r-1)!} \left. \frac{d^{r-1}(x^2)}{dx^{r-1}} \right|_{x=x_j}$$

$$d_{1j} = qk(z) x_j^{q-2} \{qk(z) x_j^q - [2(\ell+1) + q-1]\} p_{\nu,j}$$

$$d_{2j} = -2qk(z) x_j^{q-1} p_{\nu,j}, \quad d_{3j} = 0, \quad a_{1j} = 2 \frac{\ell+1}{x_j}, \quad a_{2j} = 1;$$

в случае УК1 ( $\nu = 2$ ) /1/

$$D_j^{(\mu)} = \left\{ \cos[(3-\mu)\omega_{1j} - k(z)] \rho_{1j}^{3-\mu} - \frac{\ell+1}{x_j} \times \right. \\ \left. \times \sin[(3-\mu)\omega_{1j} - k(z)] \rho_{1j}^{3-\mu} - x_j^{3-\mu} \right\} e^{-k(z)x_j}, \quad \mu = 1, 2, 3;$$

в случае УК2 ( $\nu = 4$ ) /1/

$$D_j^{(\mu)} = \left\{ \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x_j^2 + 1} \right] \left[ \cos[(3-\mu)\omega_{2j} - 2k(z)] \rho_{2j}^{3-\mu} - x_j^{3-\mu} \right] - \right. \\ \left. - \left[ \frac{\ell(\ell+1)}{2x_j(x_j^2 + 1)} + 2 \frac{\ell+1}{x_j} \right] \sin[(3-\mu)\omega_{2j} - 2k(z)] \rho_{2j}^{3-\mu} - \right. \\ \left. - \frac{z}{m_2} \left[ \cos((3-\mu)\omega_{1j} - k(z)) \rho_{1j}^{3-\mu} - \frac{\ell+1}{x_j} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \sin((3-\mu)\omega_{1j} - k(z)) \rho_{1j}^{3-\mu} - x_j^{3-\mu} \right] \right\} e^{-k(z)x_j}, \quad \mu = 1, 2, 3.$$

В случаях  $\nu = 2, 4$  использованы еще обозначения:

$$\rho_{rj} = \sqrt{x_j^2 + r^2},$$

$$\omega_{rj} = \arctg(r/x_j) \quad (r = 1, 2).$$

Операция А2. Функция  $f(z)$  имеет вид:

$$f(z) \equiv h_N^{(1)}(x_k, z) \alpha_N^*(z) + h_N^{(2)}(x_k, z) \beta_N^*(z) + h_N^{(3)}(x_k, z) \gamma_N^*(z) = 0. \quad /8/$$

Уравнение /8/ решается при предположении, что существует хотя бы один вещественный корень на заданном интервале  $Z$ .

Операция А2 содержит следующие подоперации.

А2.1. Проверяется знак входного параметра  $\bar{\ell}_x$ : если  $\bar{\ell}_x > 0$ , выполняются подоперации А2.2, А2.3 и А2.4; если  $\bar{\ell}_x < 0$  - выполняется подоперация А2.5.

А2.2. Проводится разделение интервала  $Z$  на подынтервалы, на которых функция  $f(z)$  меняет свой знак. Для этой цели проверяется знак  $f(z)$  на "мелкой сетке":



$$z_0 = z_H, \quad z_i = z_0 - i \delta z_\nu \quad (i=1,2,\dots,i^* ; \nu = 1,2,3,4),$$

где

$$\delta z_1 = C_z \cdot z_0 \quad \text{для УШ;}$$

$$\delta z_2 = \delta z_4 = C_z (z_0 - 1) \quad \text{для УК1 и УК2;}$$

$$\delta z_3 = C_z (z_0 - (m_1 + m_2)^2) \quad \text{для УТ;}$$

$C_z$  - входной параметр программы.

Примечание. 1. Значение  $i^*$  получается при выполнении подоперации А2.2. Предполагая, что уравнение /8/ имеет вещественный корень, очевидно, имеем  $i^* \geq 1$ .

После выполнения подоперации А2.2 найден подынтервал  $Z_{i^*} = [z_{i^*-1}^*, z_{i^*}^*]$ , содержащий вещественный корень уравнения /8/.

А2.3. Образуется последовательность

$$z_{i^*,0} = z_{i^*}^*,$$

$$z_{i^*,j} = z_{i^*,j-1} - \frac{\delta z_\nu}{2^j} \text{sign} [f(z_{i^*,j-1}) \cdot f(z_{i^*,j})],$$

где  $\nu = 1, 2, 3, 4; j = 1, 2, 3, \dots, \bar{j}$ , где  $\bar{j}$  - заданный входной параметр программы. На этой последовательности вычисляется  $f(z_{i^*,j})$ .

Подоперация А2.3 заканчивается: а/ по достижении заданного значения параметра  $j$ ; б/ при удовлетворении неравенства

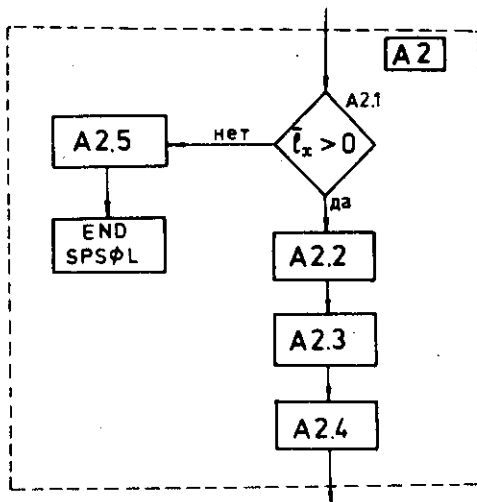
$$|f(z_{i^*,j^*})| \leq T_{z1}, \quad j^* \in \{1, 2, \dots, \bar{j}\},$$

/10/

где  $\bar{j}$  и  $T_{z1}$  - входные параметры программы.

А2.4. Найденное приближение для корня уравнения /8/  $z_{i^*,\bar{j}}$  /или  $z_{i^*,j^*}$  / уточняется авторегуляризованным итерационным процессом Ньютона /7,8/. Реализуется следующий метод:

$$\left\{ \begin{array}{l} z_0 \equiv z_{i^*,\bar{j}} \quad \text{или} \quad z_0 \equiv z_{i^*,j^*} \\ z_{k+1} = z_k - [f'(z_k)f(z_k)]/[f'^2(z_k) + \epsilon_k] \quad (k=0,1,\dots,\bar{k}), \\ \epsilon_k = \frac{1}{2} [\sqrt{f'^4(z_k) + 4N_0|f'(z_k)f(z_k)| - f'^2(z_k)}] + \epsilon_L, \\ N_0 = \epsilon_0 [ \epsilon_0 + f'^2(z_k) ] / [ |f'(z_k)f(z_k)| ], \end{array} \right.$$



где  $k$  - номер итерации, а  $\epsilon_0$  и  $\epsilon_L$  - входные параметры программы. Подоперация A2.4 заканчивает работу по достижении максимального числа итераций  $\bar{k} / \bar{k}$  - входной параметр программы/ или при удовлетворении неравенства

$$|f(z_{k^*})| \leq T_{z_2}, \quad /11/$$

$$k^* \in \{0, 1, \dots, \bar{k}\}.$$

где  $T_{z_2}$  - входной параметр программы.

Рис.2

A2.5. На сетке

$$z_0 = z_H, \quad z_i = z_{i-1} + C_z, \quad i = 1, 2, \dots, |\bar{l}_x|$$

вычисляется и отпечатывается таблица  $\{f(z_i)\}_{i=1,2,\dots,|\bar{l}_x|}$ . После выполнения подоперации A2.5 программа SPSOL заканчивает работу.

Блок-схема операции A2 приведена на рис.2.

Операция A3. Коэффициент  $\gamma_1$  вычисляется по формуле

$$\gamma_1 = [J(s_2^*)]^{-1/2},$$

в которой

$$J(s_2^*) = \sum_{i=1}^N \{ \alpha_i^{*2} J_{4,i} + (\beta_i^{*2} + 2\alpha_i^* \gamma_i^*) J_{2,i} + 2\alpha_i^* \beta_i^* J_{3,i} + 2\beta_i^* \gamma_i^* J_{1,i} + \gamma_i^{*2} J_{0,i} \},$$

$$J_{\mu,i} = \int_{\bar{x}_i}^{\bar{x}_{i+1}} x^\mu (|w_\nu(x)| e^{-k(z)x^q})^2 dx, \quad \mu = 0, 1, 2, 3, 4, \quad \nu = 1, 2, 3, 4.$$

Интегралы  $J_{\mu,i}$  при  $q=1$  вычисляются точно, а при  $q > 1$  - по методу Симпсона.

Операция А4 /рис.3/. Согласно теореме 1 из работы /1/ приближенная радиальная функция вычисляется по формуле

$$\tilde{Y}(x, \tilde{z}) = w(x) \gamma_1 s_2^*(x) \exp(-k(z)x^q).$$

Операция А4 состоит из следующих подопераций:

А4.1. Проверка значения внутреннего алгоритмического параметра NT /обозначение взято из "внутреннего языка" подпрограммы RECOV1 /, при  $NT < 0$  выполняется подоперация А.4.5, при  $NT > 0$  - подоперации А4.2-А4.5;

А4.2. Вычисляется таблица  $T_a = \{\tilde{Y}(x_i, \tilde{z})\}_{i=0,1,\dots,N \cdot N_a}$  на сетке  $x_0 = x_H$ ,  $x_{i+1} = x_i + h/N_a$ , где  $N_a$  - заданный входной параметр программы;

А4.3. Из таблицы  $T_a$  приближенно находятся локальные экстремумы функции  $\tilde{Y}(x, \tilde{z})$  и ее нули;

А4.4. Вычисляются величины

$$\bar{M}_1 = \max_{T_a} |s_2''(x)|,$$

$$M_4 = \max_{T_a} |qk(z)x^{q-1}s_2(x)e^{-k(z)x^q}|;$$

/12/

А4.5. Вычисляются значения  $\tilde{Y}(x_k, \tilde{z})$  и  $|\tilde{Y}'_x(x_k, \tilde{z})|$ .

Примечание 2. Для релятивистских уравнений УК1 и УК2, для которых функция  $w(x)$  комплексна, в подоперациях А4.2 и А4.5 анализируются соответственно таблицы реальной и мнимой частей функции  $\tilde{Y}(x, \tilde{z})$  с одинаковыми шагами и числом точек.

Блок-схема операции А4 представлена на рис.3.

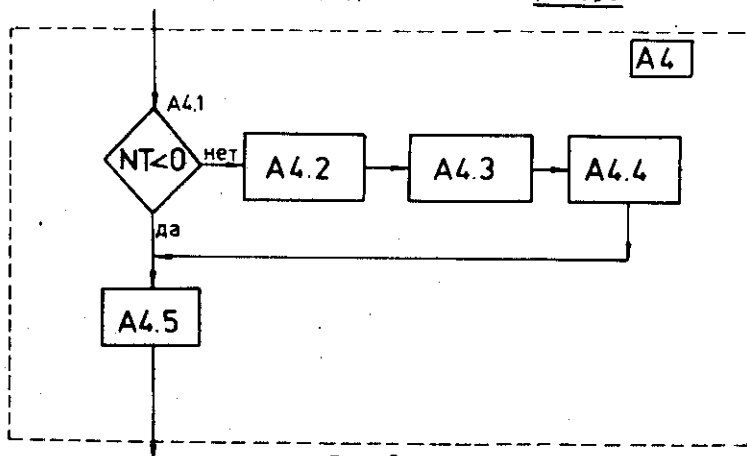


Рис.3

Операция А5. В случае уравнений УК1 и УК2 ( $\nu=2,4$ ) неравенство /9/ проверяется только для реальной части функции  $\bar{Y}(x_k, \bar{z})$ , так как реальная часть весовой функции  $w(x)$  всегда убывает медленнее мнимой.

Операция А6. Новые значения параметра  $x_k$  вычисляются по формуле

$$x_{k,0} = x_k, \quad /13/$$

$$x_{k,i} = C_x x_{k,i-1} \exp [ |\bar{Y}'_x(x_{k,i-1}, \bar{z})| ] \quad (i=1,2,\dots,\bar{i}),$$

где постоянная  $C_x$  и граничное значение  $\bar{i}$  являются входными параметрами программы.

В соответствии с полученным значением  $x_{k,i}$  определяется и новое значение числа звеньев сплайна

$$N_i = \mathcal{E} \left[ \frac{x_{k,i} - x_H}{h_1} \right]^* \quad (N_0 = N), \quad /14/$$

где  $h_1 = (x_k - x_H) / N$  - постоянный шаг сетки.

Операция А7. Оценки  $(\Delta z)_{\text{верх}}$  и  $(\Delta y)_{\text{верх}}$  вычисляются на основе теоремы 2 из работы /1/. Их значениями являются соответственно правые части неравенств:

$$|\bar{z} - \tilde{z}| \leq M_1 M_3 h^2, \quad /15/$$

$$\max_X |\tilde{y}(x, \tilde{z}) - \bar{y}(x, \bar{z})| \leq M_1 (M_2 + M_3 M_4) h^2 + O(h^4), \quad /16/$$

где

$$M_1 = 2,5 \bar{M}_1, \quad M_2 = 1,$$

$$M_3 = \frac{\int_{x_H}^{x_k} s_2(x) [ |w(x)| e^{-k(z)x^q} ]^2 dx}{\int_{x_H}^{x_k} q k(z) x^{q-1} [ |w(x)| s_2(x) e^{-k(z)x^q} ]^2 dx}$$

В оценках /15/ и /16/  $(\bar{z}, \bar{y}(x, \bar{z}))$  - точное решение задачи /1/, /2/.

Примечание 3. Обоснование оценок /15/, /16/ в случае сингулярных дифференциальных уравнений дано в работах /1,2/.

\*  $\mathcal{E}[r]$  обозначает целую часть от  $r \in R^1$ .

Операция A10. Новые шаги сетки сплайна вычисляются как

$$h_{\lambda} = C_{h,\lambda} h_{\lambda-1} \quad (\lambda = 2, 3),$$

где  $C_{h,2}$  и  $C_{h,3}$  - входные параметры программы.

Операция A11. Оценка  $(\Delta z)_{\text{НИЖ}}$  вычисляется по формуле

$$(\Delta z(h_2))_{\text{НИЖ}} = \frac{1}{2} |\tilde{z}(h_2) - \tilde{z}(h_3)|. \quad /17/$$

В операции A11 вычисляются значения специального критерия для качества нижней оценки /17/. Этим критерием является близость к 1 значения величины

$$C_{\text{НИЖ}} = \frac{|\tilde{z}(h_1) - \tilde{z}(h_2)|}{|\tilde{z}(h_2) - \tilde{z}(h_3)|} C_{h,2}. \quad /18/$$

Операция A12 /рис.4/ содержит следующие подоперации:

A12.1. Проверяется значение внутреннего алгоритмического параметра NT /см. описание операции A4/; если  $NT < 0$ , происходит переход к подоперации A12.3; если  $NT > 0$ , выполняется подоперация A12.2;

A12.2. Печатается "подтаблица"  $T_p$  таблицы  $T_a$  /см. операцию A4/, составленной из значений  $\tilde{Y}(x_i, \tilde{z})$  для чисел  $i$ , кратных числу  $\mathcal{E}[N \cdot N_a / N_t]$ , где  $N_t$  - заданный входной параметр программы /остаётся в силе Примечание 2/;

A12.3. Проверяется равенство  $MO = 0$ ; при выполнении этого равенства управление передается к подоперации A12.5; если  $MO \neq 0$ , выполняется подоперация A12.4;  $MO$  является входным параметром программы;

A12.4. Проверяется равенство  $MP = 7$ ; если оно выполнено, трехмерный массив  $OQ(i_1, i_2, i_3)$  ( $i_1 = l, i_2 = l_x, i_3 = 1, 2, \dots, 7$ ) заполняется следующим образом:

$$OQ(i_1, i_2, 1) = a_1, \quad OQ(i_1, i_2, 2) = \beta_1,$$

$$OQ(i_1, i_2, 3) = \gamma_1, \quad OQ(i_1, i_2, 4) = \tilde{z},$$

$$OQ(i_1, i_2, 5) = x_H, \quad OQ(i_1, i_2, 6) = x_k,$$

$$OQ(i_1, i_2, 7) = N.$$

Если  $MP$  больше 7 и  $MP = 3N + 4$ , то массив  $OQ(i_1, i_2, i_3)$ , где  $i_3 = 1, 2, \dots, 3N + 4$ , заполняется следующим образом:

$$OQ(i_1, i_2, 1) = \alpha_1, \quad OQ(i_1, i_2, 2) = \beta_1, \quad OQ(i_1, i_2, 3) = \gamma_1,$$

⋮

$$OQ(i_1, i_2, 3N-2) = \alpha_N, \quad OQ(i_1, i_2, 3N-1) = \beta_N, \quad OQ(i_1, i_2, 3N) = \gamma_N,$$

$$OQ(i_1, i_2, 3N+1) = \tilde{z}, \quad OQ(i_1, i_2, 3N+2) = x_N, \quad OQ(i_1, i_2, 3N+3) = x_K,$$

$$OQ(i_1, i_2, 3N+4) = N.$$

MP - входной параметр программы;

A12.5. Проверяется значение параметра управления C2 /см. операцию A8/; если C2=0, выполняется только подоперация A12.6; если C2=1, выполняются подоперации A12.6 и A12.7;

A12.6. Выводятся на печать следующие величины:  $\tilde{z}$ , энергия связи  $\tilde{w}$ , где

$$\tilde{w} = \tilde{z} \quad \text{при} \quad \nu = 1,$$

$$\tilde{w} = 2(1 - \tilde{z}) \quad \text{при} \quad \nu = 2, 4,$$

$$\tilde{w} = \sqrt{\tilde{z}} - (m_1 + m_2) \quad \text{при} \quad \nu = 3;$$

$$\alpha_1, \beta_1, \gamma_1; \alpha_N, \beta_N, \gamma_N; (\Delta z(h_1))_{\text{верх}}, (\Delta y(h_1))_{\text{верх}};$$

A12.7. Печатаются величины  $(\Delta z(h_2))_{\text{ниж}}$ ,  $(\Delta z(h_3))_{\text{верх}}$ ,  $(\Delta y(h_3))_{\text{верх}}$  и  $C_{\text{ниж}}$ .

Блок-схема операции A12 представлена на рис.4.

Операции A13 и A14. При построении следующего радиального решения /с номером  $\ell_x + 1$  / в качестве начального приближения по энергии используется значение  $z_0 = \tilde{z} \ell_x$  /см. операцию A2.2/; параметры алгоритма  $x_K$  и  $N$  принимают значения, полученные после выполнения операции A6.

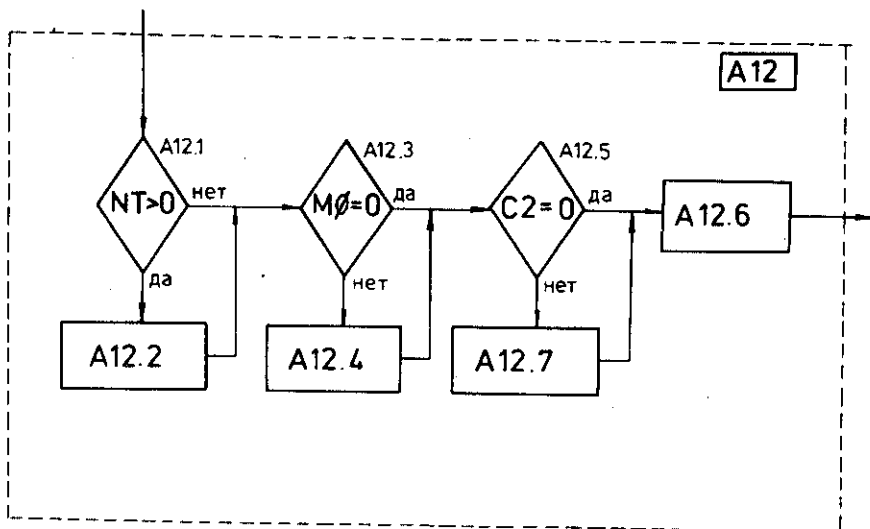


Рис. 4

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Александров Л., Караджов Д. ЖВМ и МФ, 1980, 20, №4, с.923-938.
2. Александров Л., Дренска М., Караджов Д. ОИЯИ, P5-80-751, Дубна, 1980.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. ГИФМЛ, М., 1963.
4. Freeman M., Mateev M.D., Mir-Kassimov R.M. Nucl. Phys., 1969, B12, p.197-215.
5. Todorov I.T. Phys. Rev., 1971, D3, p.2351-2360.
6. Кадышевский В.Г., Мир-Касимов Р.М., Скачков Н.Б. ЭЧАЯ, 1972, т.2, №3, Атомиздат, М., с.637-690.
7. Александров Л. ЖВМ и МФ, 1971, 11, №1, с.36-43.
8. Александров Л. ОИЯИ, P5-5515, Дубна, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел  
21 ноября 1980 года.