сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P11-86-526

В.Ю.Пойда*, В.А.Ростовцев

РЕАЛИЗАЦИЯ АРИФМЕТИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ НАД ЧИСЛАМИ БОЛЬШОЙ РАЗРЯДНОСТИ НА ЕС ЭВМ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

* Ужгородский государственный университет

1986

Введение

Наиболее распространенным методом решения многомерного уравнения Шредингера является метод разложения решения по известным функциям от быстро меняющихся переменных /I/. В результате рассматриваемое уравнение в частных производных сводится к системе обыкновенных связанных дифференциальных уравнений от одной переменной. По другим переменным уравнение обычно удается проинтегрировать, и результат получается в виде комбинации специальных функций или многократных знакопеременных сумм. При вычислении таких сумм на ЭВМ в некоторых конкретных задачах (в частности, в гиперсферических координатах /2,3,4,5,6/) возникает проблема плохой обусловленности, т.е. члены суммы оказываются на много порядков больше самой суммы. При вычислении таких сумм необходимо сохранять разрядность, большую максимальной разности порядков членов суммы. Часто шестнадцати и даже тридцати двух десятичных разрядов оказывается недостаточно для получения правильного результата.

В настоящей работе описан алгоритм вычисления знакопеременной плохо обусловленной суммы вида

$$S = \sum_{k_1(n,m)} \sum_{k_2(n,m)} \ldots \sum_{k_p(n,m)} (-1)^{f_1(n,m)} \frac{n_1!\,n_2!\ldots n_i!\,f_2(n,m)}{m_1!\,m_2!\ldots m_j!\,f_3(n,m)}, \qquad (I)$$

где $n \equiv \{n_1, n_2, \ldots, n_i\}$, $m \equiv \{m_1, m_2, \ldots, m_j\}$, а $f_i(n,m)$ и $k_i(n,m)$ - целочисленные функции от целочисленных аргументов.

I. Арифметические операции с целыми многоразрядными числами

Алгоритмы арифметических операций над целыми числами описаны во многих монографиях (см., например, /7,8/). Мы рассмотрим арифметические операции на нескольких конкретных примерах.

Пример I. Пусть необходимо сложить два числа I234567890I234567890 и 24680I357924680I3579 на ЭВМ или микрокалькуляторе, который запоминает всего восемь десятичных разрядов числа.

Разделим решение этой задачи на три этапа.

I. Разобьем слагаемые на четверки, следуя справа налево: 7890 и 3579 - первые четверки, 3456 и 680I - вторые и т.д.

2. Сложим первую четверку первого слагаемого с первой четверкой второго слагаемого, вторую четверку первого слагаемого со второй четверкой второго слагаемого и т.д.

3. Появившийся у n - й четверки пятый разряд прибавим к первому разряду (n +I)- й четверки. Проделаем эту операцию, следуя справа налево.

```
I234 5678 90I2 3456 7890
2468 0I35 7924 680I 3579
------------------------
                  I I469
              I 0257
         I 6936
     58I3
3702
------------------------
3702 58I4 6937 0258.I469
```

<u>Пример 2.</u> Вычитание чисел. Пусть необходимо вычесть I234567890I234567890 из 24680I35792468901З579 .

Как и в предыдущем примере, разделим решение на три этапа.

I. Разобьем уменьшаемое и вычитаемое на четверки.

2. Если n - я четверка уменьшаемого меньше n - й четверки вычитаемого, то добавляем к ней единичку в пятый разряд, вычитая при этом единичку из первого разряда (n+I)- й четверки уменьшаемого. Проделаем эту операцию последовательно справа налево. Таким образом, у нас получились "модернизированные" четверки.

3. Вычитаем из n - й "модернизированной" четверки уменьшаемого n - ю четверку вычитаемого. Полученные четверки - разности как раз и образуют искомый результат.

```
2468 0I35 7924 680I 3579
I234 5678 90I2 3456 7890
------------------------
                  I 3579
                    7890
               6800
               3456
         I 7924
           90I2
    I 0I34
      5678
2467
I234
------------------------
I233 4456 89I2 3344 5689
```


<u>Пример 3.</u> Умножение многоразрядного числа на малоразрядное (число меньше I0000). Пусть необходимо умножить I234567890I234567890 на I234, проделав оптимальное количество арифметических операций на ЭВМ, запоминающей восемь десятичных разрядов числа.

Разделим решение задачи на три этапа.

I. Разбиваем первый многоразрядный множитель на четверки.

2. Умножаем n - ю четверку первого множителя на второй множитель и записываем результат под n - й четверкой первого множителя. Лишние разряды, таким образом, запишутся под (n +I)-й четверкой. Проделаем эту операцию со всеми четверками первого множителя действуя последовательно справа налево. В результате получаем пять "модернизированных" четверок. Этот результат можно интерпретировать и так, как показано на третьем участке схемы.

3. Складываем четверки, добавляя "лишние" разряды к следующим четверкам (см. пример I).

```
     I234 5678 90I2 3456 7890
                         I234
     ------------------------
                     973 6260
                426 4704
           III2 0808
      700  6652
I52 2756
-----------------------------
                         6260
                   0973
                   4704
              0426
              0808
         III2
         6652
    0700
    2756
0I52
-----------------------------
0I52 3456 7764 I234 5677 6260
```

Первые два примера можно было выполнить и по-другому. Разбить многоразрядные числа не на четверки, а, допустим, на семерки и уменьшить таким образом количество операций, необходимых для выполнения задачи. При умножении, как видно из третьего примера, разбиение числа на четверки является оптимальным для ЭВМ, работающих с восьмиразрядными десятичными числами.

В третьем примере мы рассмотрели умножение многоразрядного числа на малоразрядное. По аналогии можно умножить и многоразрядные числа на многоразрядные.

Пример. 4. Умножение многоразрядного числа на многоразрядное. Умножим I2345678901I2 на 987654321098.

```
                 I234 5678 90I2
                 9876 5432 I098
      -------------------------
                      0989 5I76
                 0623 4444
            0I35 4932
                 4895 3I84
            3084 2896
       0670 3084
            8900 25I2
       5607 5928
  I2I8 6984
  -----------------------------
  I2I9 3263 II36 5858 86I7 5I76
```

При решении этой задачи мы выполнили 9 операций умножения и I6 операций сложения. Отсюда легко заключить, что для умножения $4n$ - разрядного десятичного числа на $4m$ -разрядное десятичное необходимо выполнить $(n+1)(m+1)$ операций умножения и $2(n+1)(m+1)-2$ операций сложения.

Пример 5. Деление многоразрядного числа на малоразрядное. Разделим 98765432I09876543210 на I234.

Как и в предыдущих примерах, разбиваем многоразрядное число, в данном случае делимое, на четверки и выполняем процесс деления по обычной классической схеме:

```
9876 5432 I098 7654 32I0    |        I234
9872                        |---------------------------
  4 5432                    | 8 0036 8I69 4479 4605 5I86
  4 4424
    I008 I098
    I008 0546
          552 7654
          552 7086
               568 32I0
               568 2570
                    640 0000
                    639 9524
                         476
```


Этот процесс можно продолжать и дальше, достигая требуемой точности результата.

При решении этого примера мы выполнили по шесть операций деления, умножения и вычитания. В общем случае для получения результата с точностью $4n$ десятичных разрядов необходимо выполнить примерно по $n+1$ операций деления, умножения и вычитания.

Правила, рассмотренные в приведенных примерах, легко алгоритмизируются для арифметических операций над числами с любым количеством разрядов. Для этого нужно представить многоразрядные числа в виде одномерных массивов (по четыре цифры в элементе массива) и ввести операции над числами - массивами.

Приведем значение факториала числа 35, вычисленного на ЭВМ с помощью алгоритмов, приведенных в данном параграфе:

35! = I 0333 I479 6638 6I44 9296 6665 I337 5232 0000 0000 .

Решение подобного рода задач, в том числе вычисление факториалов больших чисел, рассмотрено в /7/.

2. Сокращение дробей

Рассмотрим выражение вида

$$W = \frac{n_1!\, n_2! \dots n_i!\, f_1(n,m)}{m_1!\, m_2! \dots m_j!\, f_2(n,m)}, \qquad (2)$$

представляющее собой не что иное, как общий член суммы (I). Как отмечалось в первом разделе, его можно вычислить с любой требуемой точностью, пользуясь алгоритмами, рассмотренными в том же разделе.

Дальше пойдет речь о некоторых способах оптимизации, позволяющих существенно ускорить вычисление выражений типа (2).

В числителе и знаменателе (2) мы имеем произведение натуральных чисел. Разложим все множители числителя и знаменателя на произведения простых чисел, и тогда (2) перепишется в виде

$$W = \frac{2^{k_1}\cdot 3^{k_2}\cdot 5^{k_3}\cdot 7^{k_4}\cdot 11^{k_5}\dots(p_{1,max})^{k_{max}}}{2^{\ell_1}\cdot 3^{\ell_2}\cdot 5^{\ell_3}\cdot 7^{\ell_4}\cdot 11^{\ell_5}\dots(p_{2,max})^{\ell_{max}}}, \qquad (3)$$

или

$$W = 2^{k_1-\ell_1}\cdot 3^{k_2-\ell_2}\cdot 5^{k_3-\ell_3}\dots(p_{1,2;max})^{max(k_{max},\ell_{max})} = \prod_{i=1}^{max(k_{max},\ell_{max})} p_i^{k_i-\ell_i}, \qquad (4)$$

где k_1, k_2, ..., k_{max}, ℓ_1, ℓ_2, ..., ℓ_{max} – некоторые целые числа, значения которых определяются множествами чисел n, m и целочисленными функциями f_1, f_2;

$p_{1,max}$ – максимальное простое число в числителе,

$p_{2,max}$ – максимальное простое число в знаменателе,

$max(k_{max}, \ell_{max})$ – большее из двух чисел k_{max}, ℓ_{max};

$$p_{1,2;max} = \begin{cases} p_{1,max}, & \text{если } p_{1,max} > p_{2,max}, \\ p_{2,max}, & \text{если } p_{1,max} < p_{2,max}. \end{cases}$$

p_i – последовательность простых чисел ($p_1 = 2$, $p_2 = 3$, $p_3 = 5$, ...).

Что представляет собой выражение (4)? Это дробь, в числителе которой мы имеем произведение степеней некоторых простых чисел, в знаменателе мы также имеем произведение степеней простых чисел, но таких, которые отсутствуют в числителе.

После того как в выражении (2) проведены все возможные сокращения, вычислим выражение (4) с помощью алгоритмов, развитых в первом разделе. При этом необходимо выполнить

$$N_1 = \sum_{i=1}^{max(k_{max}, \ell_{max})} (k_i - \ell_i)$$

операций умножения (деления) многоразрядного числа на малоразрядное; каждая из них включает в себя довольно большое количество арифметических операций.

Для ускорения счета удобно преобразовать (4) к следующему виду:

$$W = \prod_i p_i^{k_i - \ell_i} = \prod_i g_i^{\alpha_i} p_i^{\beta_i}, \tag{5}$$

где

$$g_i = p_i^{\left[\frac{\ln 10000}{p_i}\right]},$$
$$k_i - \ell_i = \left[\frac{\ln 10000}{p_i}\right]\alpha_i + \beta_i, \tag{6}$$
$$\alpha_i = \left[(k_i - \ell_i)/\left[\frac{\ln 10000}{p_i}\right]\right],$$

квадратные скобки в этих выражениях обозначают целую часть числа. При вычислении выражения (5) необходимо выполнить

$$N_2 = \sum_{i=1}^{max(k_{max}, \ell_{max})} (\alpha_i + \beta_i)$$

операций умножения (деления) многоразрядного числа на малоразрядное. Практически $N_2 \ll N_1$, и поэтому расчет W по формуле (5), а в конечном счете и вычисление суммы (I) значительно ускоряется.

Заключение

Опишем кратко порядок вычисления суммы (I) с учетом приемов оптимизации, изложенных во втором разделе.

I. Члены суммы (I) привести к виду (4).

2. Исходя из формул (6) вычислить g_i, α_i, β_i.

3. Вычислить члены суммы (I), то есть W, по формуле (5), воспользовавшись операциями умножения (деления) числа-массива на целое малоразрядное число.

4. Сложить (вычесть) элементы суммы (I), представляющие собой числа-массивы.

5. Преобразовать конечный результат из числа-массива в обычное число.

Метод и алгоритмы работы с многоразрядными числами, описанные в данной работе, реализованы в комплексе программ FENOM на ЕС ЭВМ в вычислительных центрах Ужгородского госуниверситета и ЛВТА ОИЯИ. Подробное описание комплекса программ FENOM будет опубликовано позже.

В заключение авторы выражают благодарность И.В. Пузынину и С.И. Виницкому за поддержку в работе.

Литература

I. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. М.-Л., ГИТТЛ, 1952.

2. Lin C.D. Phys. Rev. A10, 1986, 1974.
3. Lin C.D. Phys. Rev. Lett., 35, 1150, 1975.
4. Klar H. Klar M. J. Phys. B13, 1057, 1980.
5. Pelikan E., Klar H. Z. Phys. A310, 153, 1983.
6. Greene C.H. J. Phys. B, 13, 39, 1980.
7. Дрейфус М., Гонглоф К. Практика программирования на фортране.- М.,"Мир", 1978.
8. Кнут Д. Искусство программирования для ЭВМ, т. 2,"Мир", М., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 июля 1986 года.

Пойда В.Ю., Ростовцев В.А. Р11-86-526
Реализация арифметических операций над числами большой разрядности на ЕС ЭВМ при вычислении матричных элементов в квантовой механике

Описан алгоритм работы с многозарядными числами с ориентацией на алгоритмический язык Фортран ЕС ЭВМ. Необходимость сохранять при промежуточных вычислениях намного больше шестнадцати десятичных разрядов чисел возникает, в частности, при вычислении знакопеременных сумм, члены которых намного больше их самих. Предлагается универсальный алгоритм решения подобного рода задач. Он может быть использован при вычислении специальных функций математической физики и матричных элементов в квантовой механике, где возникает упомянутая выше проблема.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Pojda V.Yu., Rostovtsev V.A. P11-86-526
Realisation of Arithmetic Operations with Longintegers on ES Computer when Calculating Matrix Elements in Quantum Mechanics

A longinteger algorithm is described. It is oriented on ES Fortran language. The necessity to keep much more than sixteen decimal digits appears in some calculations, in particular, when alternating sums are calculated where summands are biggest than sums themselves. The proposed algorithm is general for these tasks. It can be used in calculations of special functions and matrix elements in quantum mechanics.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986