

**СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

P11-87-459

А.Д.Гочева, И.В.Пузынин

**ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ  
УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ  
МЕЗОМОЛЕКУЛ ВОДОРОДА  
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ  
ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ**

**1987**

## I. Введение

Расчет уровней энергии и волновых функций мезомолекул с высокой точностью необходим как для определения характеристик процессов  $\mu$  - катализа /1/, так и для объяснения новейших экспериментальных данных в этой области /2/. Одной из интенсивно развиваемых в настоящее время вычислительных схем является схема расчета квантовомеханической задачи трех тел в адиабатическом представлении /3/.

В рамках этой схемы шестимерное уравнение Шредингера путем усреднения по угловым координатам и разложения искомого решения по адиабатическому базису сводится к бесконечной системе интегродифференциальных уравнений относительно набора радиальных волновых функций на полуоси  $0 \leq R < \infty$ . Для приближенного решения этой системы ограничиваются конечным числом  $N_m$  уравнений (что соответствует обрыванию ряда в разложении волновой функции). Интегрирование по бесконечному интервалу  $0 \leq k < \infty$  непрерывного спектра заменяют квадратурной формулой на конечном интервале  $k_{\min} \leq k \leq k_{\max}$  с шагом  $\Delta k$ , а условие регулярности радиальных волновых функций на полуоси  $0 \leq R < \infty$  приближают постановкой соответствующих граничных условий в граничных точках конечного интервала  $0 \leq R \leq R_m$ ,  $R_m \gg 1$ .

Полученную задачу Штурма-Лиувилля /4/ для системы большого числа  $N_m$  уравнений решают численно с помощью метода конечных разностей на сетке с шагом  $h$  и итерационных процедур.

Ясно, что точность вычисления в рамках изложенной схемы зависит от параметров  $N_m$ ,  $k_{\min}$ ,  $k_{\max}$ ,  $\Delta k$ ,  $R_m$ ,  $h$ . Соответствующие оценки приведены в работе /5/. Естественно, эта точность во многом определяется точностью решения полученной задачи Штурма-Лиувилля. Последняя может быть улучшена применением разностных схем повышенного порядка точности. Однако их применение связано как с увеличением требуемого объема оперативной памяти ЭЕМ, так и с усложнением расчетов. В связи с этим были разработаны модификации ньютоновских итерационных схем с включением возмущений /6/, позволяющие решать уравнения с операторами сложной структуры, обращая в процессе итераций операторы простой структуры.

Цель данной работы - описание вычислительной схемы и пакета программ для решения задачи Штурма-Лиувилля, возникающей в адиабати-

Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

ческом представлении задачи трех тел для вычисления уровней энергии мезомолекул. Пакет реализован на ЭВМ CDC-6500.

## 2. Постановка задачи

В соответствии с введенными в работе /4/ обозначениями задачу Штурма-Лиувилля можно представить в "двухкомпонентной форме":

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{d^2}{dR^2} \hat{I} + (\lambda \hat{I} + \hat{U}(R)) \right] \chi(R) = 0 \quad (2.1a) \\ \chi(0) = 0 \quad (2.1b) \\ \left[ \frac{d}{dR} \hat{I} + \hat{F}(\lambda, R_m) \right] \chi(R_m) = 0 \quad (2.1c) \\ (\chi(R), \chi(R)) - 1 = 0 \quad (2.1d) \\ \hat{f}_{ii} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \chi_c(R) = \begin{pmatrix} \chi_{ia}(R) \\ \chi_{ib}(R) \end{pmatrix} \quad \hat{U}_{ij} = \begin{pmatrix} U_{ija} & U_{ijb} \\ U_{ijc} & U_{ijd} \end{pmatrix} \end{array} \right.$$

Собственное значение  $\lambda = 2m\epsilon$ ,  $\chi(R)$  - вектор волновых функций размерности  $N(2 \times N = N_m)$ , матрица  $\hat{U}(R)$  размерности  $N \times N$  строится из эффективных потенциалов задачи трех тел  $\hat{K}(R)$  и  $\hat{Q}(R)$ , исходные данные для которых вычислены в работах /6/

$$\hat{U}(R) = -[\hat{K}(R) + 2\hat{Q}(R) \frac{d}{dR}].$$

Общий вид матрицы  $\hat{U}(R)$ :

$$\left( \begin{array}{cccc|cccc} \hat{U}_{11}(R) & \hat{U}_{12}(R) & \dots & \hat{U}_{1p}(R) & \hat{U}_{1,p+1}(R) & \dots & \hat{U}_{1N}(R) & \\ \hat{U}_{21}(R) & \hat{U}_{22}(R) & \dots & \hat{U}_{2p}(R) & 0 & \dots & 0 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ \hat{U}_{p1}(R) & \hat{U}_{p2}(R) & \dots & \hat{U}_{pp}(R) & 0 & \dots & 0 & \\ \hat{U}_{p+1,1}(R) & 0 & \dots & 0 & \hat{U}_{p+1,p+1}(R) & \dots & 0 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ \hat{U}_{N1}(R) & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & \hat{U}_{NN}(R) & \end{array} \right) \quad \begin{array}{l} 2 \leq p \leq N \\ (2.2) \end{array}$$

Важным является случай  $p=2, \hat{U}_{ij}=0 \quad (i \neq j \neq 1)$

$$\left( \begin{array}{cccccccc} \hat{U}_{11}(R) & \hat{U}_{12}(R) & \hat{U}_{13}(R) & \dots & \hat{U}_{1N}(R) & & & \\ \hat{U}_{21}(R) & \hat{U}_{22}(R) & 0 & \dots & 0 & & & \\ \hat{U}_{31}(R) & 0 & \hat{U}_{33}(R) & \dots & 0 & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ \hat{U}_{N1}(R) & 0 & 0 & & & & \hat{U}_{NN}(R) & \end{array} \right) \quad (2.3)$$

При этом матрицы  $\hat{K}(R)$  и  $\hat{Q}(R)$  вычислены на сетке  $R = 0.1/0.1/20/1/100, R_m = 100$ .

Соотношения (2.1b)-(2.1c) задают граничные условия, матрица  $\hat{F}(\lambda, R_m)$  определяется асимптотическим поведением волновых функций при  $R_m \rightarrow \infty$

$$\frac{d}{dR} \chi_i(R) / \chi_i(R) \Big|_{R=R_m} = \sqrt{-\lambda}.$$

Условие (2.1d) является условием нормировки  $\chi(R)$

$$(\chi, \chi) = \sum_{i=1}^N \rho_i \int_0^{R_m} (\chi_{ia}(R) + \chi_{ib}(R)) dR,$$

значения коэффициентов  $\rho_i$  соответствуют квадратурной формуле, используемой при дискретизации интегрирования по непрерывному спектру  $k$ .

## 3. Итерационный метод

Задачу (2.1) можно рассматривать как нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(z) = 0 \quad (3.1)$$

относительно пары  $z = \{\lambda, \chi(R)\} \in R \times C^2[0, R_m]$ .

Предполагается, что существует простое изолированное решение  $z_* = \{\lambda_*, \chi_*(R)\}$  уравнения (3.1), известно начальное приближение  $z_0 = \{\lambda_0, \chi_0(R)\}$  к этому решению и выполнены условия теоремы существования и сходимости решения  $z(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} z_*$  для уравнения непрерывного аналога метода Ньютона

$$\varphi'_z(z(t)) \frac{dz}{dt} = -\varphi(z(t)), \quad z_0 = z(0), \quad 0 \leq t < \infty. \quad (3.2)$$

Уравнение (3.1) заменяется эволюционным уравнением <sup>/7/</sup>, которое является модификацией уравнения (3.2)

$$\varphi'_t(t, z(t)) + \varphi'_z(t, z(t)) \frac{dz}{dt} = -\varphi(t, z(t)), \quad z_0 = z(0), \quad 0 \leq t < \infty \quad (3.3)$$

Оператор  $\varphi$  представлен в виде суммы двух операторов

$$\varphi = \Psi + \Theta, \quad \Theta - \text{возмущение,}$$

а зависимость оператора  $\varphi$  от параметра  $t$  вводится посредством функции включения возмущения  $g(t)$

$$\varphi(t, z(t)) = \Psi(z(t)) + g(t) \Theta(z(t)).$$

В отличие от указанных работ, где функция  $g(t)$  на полубесконечном интервале  $0 \leq t < \infty$  задана формулой

$$g(t) = 1 - e^{-\alpha t}, \quad 0 < \alpha \leq 1, \quad (3.4)$$

здесь выбрана периодическая функция  $g(t)$   $0 \leq t = t' + nT < \infty$

$$g(t' + nT) = 1 - e^{-\alpha t'}, \quad t' \in [0, T], \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.5)$$

$(0 < \alpha \leq 1)$

Период  $T$  определяется из условия

$$\max_T e^{-\alpha T} < \eta, \quad \eta \sim 0.1. \quad (3.6)$$

Решение уравнения (3.3) сводится к решению методом Эйлера уравнения\*

$$\Psi'_z \frac{dz}{dt} = -[\Psi(z) + (g' + g) \Theta(z) + g \Theta'_z z'(t - \tau)] \quad (3.7)$$

$$z_0 = z(0), \quad z'_t = \{\lambda', \chi'(t)\} = \{\mu, \nu(t)\}, \quad t \in [nT, (n+1)T], \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

на равномерной сетке  $t_{k+1} = t_k + \tau$ ,  $t_0 = 0$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$

Таким образом на каждом шаге с номером  $k$  ( $t = t_k$ ) полученного итерационного процесса решается краевая задача

$$\Psi'_k \Delta z_k = -[\Psi_k + (g'_k + g_k) \Theta_k + g_k \Theta'_z(k) \Delta z_{k-1}] \quad (3.8)$$

$$\Psi_k = \Psi(z_k), \quad \Theta_k = \Theta(z_k), \quad g_k = g(t_k)$$

\* В случае  $\alpha = 1$  ( $g + g' = 1$ ) уравнение (3.7) отличается от уравнения Ньютона с запаздыванием ( $\Theta'_z z'_t(t - \tau)$  лишь запаздывающим членом ( $g \Theta'_z z'_t(t - \tau)$ )

относительно итерационной поправки  $\Delta z_k = \{\mu_k, \nu_k\}$  при известных  $z_k$  и  $\Delta z_{k-1}$ . Далее находится новое приближение  $z_{k+1} = \{\lambda_{k+1}, \chi_{k+1}\}$  к искомому решению  $z_*$

$$z_{k+1} = z_k + \tau \Delta z_k.$$

Можно ожидать, что последовательность  $z_k = z(t_k)$  сходится к решению  $z_*$  уравнения (3.1) при достаточно хорошем начальном приближении  $z_0 = z(0)$ . Условием окончания итерационного процесса является выполнение для невязки уравнения (3.1) неравенства

$$\|\varphi(z_k)\|_c < \varepsilon, \quad \varepsilon \sim 10^{-8}.$$

Как показали численные расчеты, замена функции (3.4) периодической функцией  $g(t)$  приводит к значительному сокращению числа итераций, необходимых для получения решения задачи с заданным значением  $\varepsilon$ , по сравнению с работами <sup>/7/</sup>. Наименьшее число итераций получено для  $\alpha = 1$  (при совпадении остальных параметров расчета).

#### 4. Выбор оператора $\Psi(z_k)$ и вычисление итерационной поправки $\Delta z_k$

4.1 В предположении, что диагональные элементы матрицы  $\hat{0}(R)$  являются преобладающими, оператор  $\Psi_k = \Psi(z_k)$  определяется следующим образом:

$$\Psi_k = \begin{cases} \hat{S}(R) + \lambda \hat{I} \\ \hat{I}|_{R=0} \\ \hat{A}(R) + g_k(\hat{B}(\lambda_k, R) - \hat{A}(R))|_{R=R_m} \\ (\chi(R), \chi(R)) - 1. \end{cases} \quad (4.1)$$

где  $\hat{S}(R) = \frac{d^2}{dR^2} \hat{I} + \hat{0}^d(R)$ ,  $\hat{0}^d(R) = \begin{pmatrix} \hat{0}_{11} & & 0 \\ & \hat{0}_{22} & \vdots \\ 0 & \dots & \hat{0}_{NN} \end{pmatrix}$ ,

$\hat{A}(R)$  - граничные условия для начального приближения  $z_0$  в точке  $R_m$ .  
 $\hat{B}(\lambda, R)$  - более общий вид граничных условий для волновых функций  
 $\chi(R)$  задачи (2.1) в точке  $R_m$ ,

$$v(\lambda, R) = \frac{d}{dR} \hat{B}_1(\lambda, R) + \hat{B}_2(\lambda, R), \quad \hat{B}_1, \hat{B}_2 - \text{диагональные матрицы.}$$

4.2 Задание матриц эффективных потенциалов в узлах сетки  $R = 0.1/0.1/20/1/100$  предопределяет конечноразностную аппроксимацию операторов и тип сетки на интервале  $[0, R_m]$ . Полная дискре-

тизация задачи осуществляется на квазиравномерной сетке  $\omega_{[0, R_m]}$  с постоянным шагом  $h_j$  на  $j$ -том подинтервале. Предполагается, что  $h_{j+1} = m_j h_j$ ,  $m_j > 1$  - целые числа. Для получения решения задачи (2.1) с точностью  $O(h^4)$  используется соотношение, введенное в работе [7]

$$\varphi(4) = \psi(2) + (\varphi(4) - \psi(2))$$

$(\varphi(4) - \psi(2))$  - разностное представление оператора  $\Theta$ , индекс указывает порядок аппроксимаций операторов. Такая аппроксимация позволяет в ходе итерационного процесса получить требуемую точность решения  $O(h^4)$  обращением в итерациях оператора более простого вида (трехдиагонального) -  $\Psi_k^{(2)}$ . Точность решения проверяется численно на последовательности сходящихся сеток. Неравенство для невязки уравнения (3.1) в разностном представлении имеет вид

$$\| \varphi(4)(z_k) \|_{C_h^2} < \varepsilon \quad (4.1)$$

Для аппроксимации операторов с точностью  $O(h^4)$  и  $O(h^2)$  применяются конечноразностные формулы с постоянным шагом  $h/8$ . В узлах, являющихся граничными для подинтервалов, берется шаг правого подинтервала для симметричных разностных формул. Интегралы вычисляются по квадратурной формуле Симпсона.

4.3 Решение задачи (3.8) в разностном представлении сводится к решению двух линейных краевых задач относительно  $\psi_k^{(1)}$ ,  $\psi_k^{(2)}$  методом матричной (2x2) прогонки, модифицированным для квазиравномерной сетки  $\omega_{[0, R_m]}$

$$\begin{cases} [\hat{S}^{(2)}(R_1) + \lambda_k \hat{I}] \psi_k^{(1)}(R_1) = -(\varepsilon_k' + \varepsilon_k) w^h \chi_k(R_1) - \varepsilon_k w^h \psi_{k-1}^{(1)}(R_1) \\ \psi_k^{(1)}(R_1) \Big|_{R_1=0} = 0 \\ [\hat{A}^{(2)}(R_1) + \varepsilon_k T_k^{(2)}] \psi_k^{(1)}(R_1) \Big|_{R_1=R_m} = -(\varepsilon_k' + \varepsilon_k) P_k^h \chi_k(R_1) - \varepsilon_k T_k^{(2)} \chi_k(R_1) - \varepsilon_k P_k^h \psi_{k-1}^{(1)}(R_1) \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\begin{cases} [\hat{S}^{(2)}(R_1) + \lambda_k \hat{I}] \psi_k^{(2)}(R_1) = -\chi_k(R_1) \\ \psi_k^{(2)}(R_1) \Big|_{R_1=0} = 0 \\ [\hat{A}^{(2)}(R_1) + \varepsilon_k T_k^{(2)}] \psi_k^{(2)}(R_1) \Big|_{R_1=R_m} = \varepsilon_k B_k^{(4)}(R_1) \chi_k(R_1) \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\text{где } w^h = \hat{S}^{(4)}(R_1) - \hat{S}^{(2)}(R_1), \quad \hat{S} = \frac{d^2}{dR^2} \hat{I} + \hat{U}$$

$$T_k^{(2)} = \hat{B}_k^{(2)}(R_m) - \hat{A}^{(2)}(R_m)$$

$$P_k^h = \hat{B}_k^{(4)}(R_m) - \hat{B}_k^{(2)}(R_m)$$

$$\hat{B} = \hat{B}_\lambda'$$

Затем находятся  $\mu_k$  и  $\psi_k(R_1)$  по формулам

$$\mu_k = \frac{1 + (\chi_k(R_1), \chi_k(R_1) - 2\psi_k^{(1)}(R_1))}{2(\chi_k(R_1), \psi_k^{(2)}(R_1))} \quad (4.4)$$

$$\psi_k(R_1) = -\chi_k(R_1) + \psi_k^{(1)}(R_1) + \mu_k \psi_k^{(2)}(R_1) \quad (4.5)$$

Отметим, что здесь отсутствуют внутренние итерации для уточнения поправки  $\psi_k$  на  $k$ -той итерации  $h/4$ . Уточнение искомого решения осуществляется в ходе ньютоновского итерационного процесса.

## 5. Краткая характеристика пакета программ VZMADM.

Интерпретация входных данных и решения  $\{\lambda, \chi(R_i)\}$  задачи (2.1) в программах пакета

5.1 При программной реализации описанного метода решения задачи (2.1) предусмотрены следующие возможности (в скобках указаны параметры, значения которых устанавливают соответствующие режимы):

- для волновых функций  $\chi(R)$  в точке  $R_m$  задана асимптотика (2.1с) или нулевые граничные условия (NBAS);
- матрица потенциалов  $\hat{U}(R)$  имеет вид (2.2),  $p > 2$ , или (2.3),  $p = 2$ , (KDIM);
- точность аппроксимации задачи  $O(h^4)$  или  $O(h^2)$  (KAPP);
- сетка на интервале  $[0, R_m]$  равномерная или квазиравномерная (KINT).

С учетом того, что число уравнений в задаче может быть большим ( $N_m \sim 800$ ) и проводится численная проверка точности решения в зависимости от  $R$  (насыщение по интервалу) и от  $h$ , предусмотрены также режимы:

- начало счета;
- продолжение счета;
- начало счета с разрежением сетки (IREG).

5.2 Для численного решения задачи (2.1) необходимо задать значения эффективных потенциалов  $\hat{K}(R_1)$  и  $\hat{Q}(R_1)$ , веса для волновых функций  $\int_1$ ,  $i=1, \dots, N$ , начальные приближения энергии и волно-

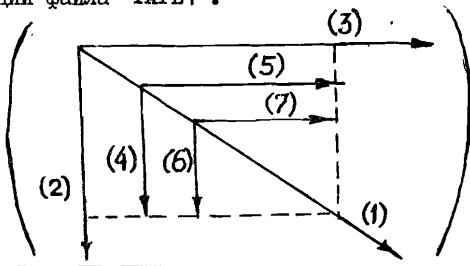
вых функций  $\{\lambda_o, \chi_o(R_1)\}$  и значения входных параметров. Эта информация поступает для пакета программ ВЗМАДМ в виде входных файлов на диске и перфокартах:

- файл ТАРЕ1 (тип S <sup>ж</sup>) содержит значения  $\hat{K}(R_1)$  и  $\hat{Q}(R_1)$ ;
- файл ТАРЕ13 (тип D) содержит веса  $\rho_i$  (если  $\rho_i=1$ ,  $i=1, \dots, N$ , то ТАРЕ13 не задается);
- файл ТАРЕ3 (тип S или D) содержит начальные приближения  $\chi_o(R_1)$ ; п/к файл состоит из 8 перфокарт:

Параметры	Формат
1. IREG	I5
2. MDIM, KDIM, NBAS, KINT, KAPP, LTIM, ITMAX, ISTEP	2I5
3. HK(1), ..., HK(KINT)	5F10
4. RX(1), ..., RX(KINT)	5F10
5. NVAR, LJ, AMN1, AMN2, AM3, RV	2I5, 3F10, E20
6. EV, EPS, RG, TAU	2E20, 2F10
7. LDIM1, LDIM3, INPU, ITYPE, NREC	5I5
8. HINP(1), ..., HINP(KINT)	5F10

Решение задачи  $\{\lambda, \chi(R_1)\}$  записывается в файл ТАРЕ5 (тип D).

5.2.1 Матрицы эффективных потенциалов  $\hat{K}(R_1)$  и  $\hat{Q}(R_1)$  имеют вид (2.2) или (2.3). Каждая запись файла ТАРЕ1 содержит значения пары элементов  $\{-k_{ij}, -q_{ij}\}$ , структура записи соответствует двум последовательно расположенным массивам  $\{M(2,2,L_\Omega), M(2,2,L_\Omega)\}$ ,  $L_\Omega$  - число узлов сетки  $\Omega$ , на которой заданы значения потенциалов. В программах запись считывается в массивы  $P(4,L_\Omega)$ ,  $Q(4,L_\Omega)$ . Число записей в файле равно числу элементов матрицы  $\hat{U}$ . Для  $N_m = 844$  сетки 0.1/0.1/200/1/100 ( $R_m = 100$ ) и матрицы  $\hat{U}(R)$  вида (2.3) файл занимает весьма большой объем памяти на диске (~ 45000 слов). На схеме показан порядок следования элементов  $\{-k_{ij}, -q_{ij}\}$  при организации файла ТАРЕ1.



<sup>ж</sup>) S - последовательный файл, D - файл с прямым доступом.

Сначала записаны диагональные элементы, затем I-ый столбец, I-ая строка и т.д.

На каждой итерации файл считывается один раз. При решении задачи с матрицей коэффициентов вида (2.2),  $p > 2$ , можно найти решение для случая (2.3),  $p = 2$  и затем использовать его как начальное приближение. Файл ТАРЕ1 при этом создается только один раз для матрицы вида (2.2).

Сетка  $\omega_{[0,R_m]}$ , на которой решается задача (2.1), может совпадать с сеткой  $\Omega$ , а также являться разрежением сетки  $\Omega$  или ее усечением. Существенно, что для полного решения задачи (2.1), включая численную проверку точности решения по R и по  $h^*$ , файл ТАРЕ1 создается только один раз.

5.2.2 Тип файла ТАРЕ3 указывается входным параметром ITYPE. Файл ТАРЕ3 последовательный, если ITYPE=1, и с прямым доступом, если ITYPE=0. В последнем случае параметр NREC указывает число записей в файле (без служебной). В j-ой записи файла ТАРЕ3 содержатся значения j-той двухкомпонентной функции  $\chi_{oi,j}(R_1)$ , вычисленные в узлах сетки  $\omega_{[0,R_o]}$  ( $R_o \geq R_m$ ). Сетки  $\omega_{[0,R_o]}$  и  $\omega_{[0,R_m]}$  совпадают на пересечении интервалов. Число узлов  $L_o$  сетки  $\omega_{[0,R_o]}$  указывается входным параметром LDIM3. Структура записи соответствует массиву  $M(2,L_o)$ . Если  $R_o < R_m$ , то в остальных узлах сетки  $\omega_{[0,R_m]}$  начальные функции задачи автоматически доопределяются нулями. Число функций может быть не равно N ( $> N$ ). Входной параметр INPU указывает, сколько записей файла ТАРЕ3 будет считано ( $0 < INPU \leq N$ ). Если  $INPU < N$ , то вектор  $\chi_o(R_1)$  автоматически дополняется нулевыми функциями.

5.2.3 Найденное приближение  $\{\lambda_k, \chi_k(R_1)\}$  записывается в файл ТАРЕ5 на каждой итерации. Таким образом по окончании итерационного процесса в этом файле содержится решение задачи. Структура записи файла соответствует массиву  $M(2,L)$ , где L - число узлов сетки  $\omega_{[0,R_m]}$  для задачи (2.1). Число записей в файле (без служебной) равно  $N+1$ . В первые N записей помещаются значения волновых функций  $\chi_k(R_1)$ . В первую ячейку  $N+1$ -ой записи заносится собственное значение  $\lambda_k$ .

5.2.4 Веса  $\rho_i, i = 1, \dots, N$  ( $0 \leq i \leq N$ ) считываются с файла ТАРЕ13 (если файл присоединен) в массив DK(N), предварительно заполненный единицами.

## 6. Описание программ пакета

Пакет программ BSMADM включает пять программ

EDITR, SNOOSE, UFILE, CREATE, BSMN4

и представляет файл с именем BSMADM, который состоит из двух записей. В первую запись помещен текст программ EDITR на языке FORTRAN, вторая запись содержит набор операторов FORTRANa и ключи для программы EDITR.

При работе пакета программ BSMADM производится:

1) определение оптимальной длины массивов и файлов, выбор программ для заданного параметром IREG режима и их редактирование на язык FORTRAN

2) трансляция и исполнение этих программ.

6.1 Программа-редактор EDITR выполняет действия, указанные в пункте 1.

Вход: 1) библиотека KERN

2) файл TARE1 с именем BSMADM

3) файл TARE13 с весами  $\rho_i$

4) п/к файл, содержащий входные параметры.

Выход: 1) файл TARE35 с отредактированными, готовыми к трансляции, программами для указанного режима;

2) печатаются значения параметров п/к файла и массив весов  $\rho_i, i = 1, \dots, N$ .

6.2 Программа SNOOSE осуществляет разрежение по шагу значений решения  $X(R_1)$  задачи (2.1). Используется при численной проверке точности решения по  $h$ . Включение программы SNOOSE происходит при IREG=1.

Вход: 1) файл TARE20, содержащий значения проверяемого решения  $X(R_1)$  (тип D).

Выход: 1) файл начальных приближений TARE3 (тип D) для решения задачи (2.1) на разреженной сетке;

2) печатаются первая входная и первая выходная двухкомпонентные функции, а также значения параметров, задающих сетки и файл TARE3.

6.3 Программа UFILE создает (форматирует нулями) файл TARE5, предназначенный для приближений  $\{\lambda_k, X_k(R_1)\}$  и записывает в этот файл функции из файла TARE3.

Включение программы UFILE происходит при IREG=0 или IREG=1

Вход: 1) файл начальных приближений TARE3 (тип S или D)

Выход: 1) файл TARE5

2) печатаются значения параметров, определяющих файл TARE5.

6.4 Программа CREATE создает последовательные файлы и файлы с прямым доступом для хранения и обновления рабочей информации при работе программы BSMN4.

Включается при любом значении IREG.

6.5 Программа BSMN4 реализует описанную выше итерационную схему. Предполагается, что  $X_0$  нормированы. Внешний цикл /3 CONTINUE ... GOTO 3/ осуществляется по итерациям. На каждой итерации выполняются последовательно 4 основных цикла. В первом цикле при известных приближениях  $X_k, D^{(4)}v_{k-1}, D^{(4)}x_{k-1}, S^{(2)}x_{k-1}, S^{(2)}v_{k-1}$  вычисляются посредством линейного преобразования  $D^{(4)}x_k, S^{(2)}x_k$ , затем вычисляются правые части краевых задач (4.2)-(4.3) и невязка уравнения (2.1a)

$$\delta_k = \| D^{(4)}x_k + \lambda_k \frac{f_k}{c_k} \|_{c_k^2} \quad (6.5.1)$$

Во втором цикле для каждой пары двухкомпонентных уравнений в задачах (4.2)-(4.3) методом матричной прогонки находятся  $\{v_k^{(1)}, v_k^{(2)}\}$ . После завершения цикла вычисляются  $\mu_k$  и  $\lambda_{k+1}$ .

В третьем цикле находятся  $v_k$  и новые приближения  $X_{k+1}$  и обновляется файл TARE5.

В четвертом цикле (в подпрограмме VEGA) вычисляются  $D^{(4)}v_k$  и  $S^{(2)}v_k$ .

Условие  $\delta_k < \varepsilon$  проверяется после первого цикла. Полученное решение  $X$  нормируется.

Вход: файлы TARE1, TARE5 и рабочие файлы.

Выход: 1) файл TARE5

2) на каждой итерации печатается строка  $k$  - номер итерации,  $\delta$  - невязка,  $\tau, t_k, s_k, \mu_k, \lambda_k, T_k$  - время  $k$ -той итерации; на последней итерации печатается также невязка по уравнениям (2.1a) и (2.1d), в начале и в конце работы программы печатаются 6 волновых функций с учетом множителя ISTER для печати.

## 7. Остановы, предусмотренные в пакете программ BSMADM

Останов работы происходит в следующих случаях:

1) некорректное задание значений параметров в п/к файле (программа EDITR) - печатается сообщение "ERRORS IN DATA";

2)  $\delta_k \leq \varepsilon$   $\delta_k$  - невязка (6.5.1),  $\varepsilon$  - точность для итерационного процесса;

3)  $\delta_k \geq 10^6$ ;

4)  $k = ITMAX$   $k$ -номер итерации,  $ITMAX$  - максимально допустимое число итераций;

5)  $T_k < LTIM$ ,  $T_k$  - оставшееся время центрального процессора для работы программы после завершения  $k$ -той итерации, параметр  $LTIM$  задает время, достаточное для исполнения одной итерации;

6) деление на ноль при матричной прогонке, печатается сообщение "PROGONKA IS INCORRECT".

Остановы (2)-(6) предусмотрены в программе BSMN4. Условия (2)-(5) проверяются на каждой итерации, при останове в файле TARBE5 содержатся последние найденные приближения  $\{\lambda_k, \chi_k\}$ .

### 8. Подпрограммы программы BSMN4

Подпрограмма VEGA вычисляет для вектора двухкомпонентных функций  $\chi$  векторы  $\hat{d}^{(4)}\chi$ ,  $\hat{s}^{(2)}\chi$ .

Подпрограмма GAUSS осуществляет матричную (2x2) прогонку, модифицированную для квазиравномерной сетки  $\omega [0, R_m]$ , одновременно для задач (4.2)-(4.3).

Подпрограмма DIFN вычисляет для двухкомпонентной функции  $\chi(R)$

$$\hat{f} \frac{d^2}{dR^2} \chi(R) \quad \text{и} \quad \hat{f} \frac{d}{dR} \chi(R), \quad \hat{f} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

с точностью  $O(h^4)$  или  $O(h^2)$  в зависимости от значения параметра KAPP.

Подпрограмма BOUND вычисляет  $\hat{f}(\lambda, R_m)$ , определяющую асимптотику функций в точке  $R_m$ .

Подпрограмма VARI осуществляет перевод безразмерного собственного значения  $\lambda$  в энергию  $\epsilon$  (эВ) и обратно ( $\epsilon \rightarrow \lambda$ ), если  $NVAR \neq 0$ , и оформляет печать. В легенде используются следующие обозначения: DIMENSION указывает вид матрицы  $\hat{U}$  (печатаются числа  $2N$  и  $2p$ ), NREC и LDIM указывают соответственно число записей в файле TARBE5 и число узлов сетки, на которой решается задача (2.1), NUMBER OF ASIMPT - число двухкомпонентных функций с асимптотикой в точке  $R_m$ , APPR KOD - точность аппроксимации задачи, EV - значение найденного уровня энергии (эВ).

### 9. Входные параметры п/к файла

IREG=  $\begin{cases} \emptyset & \text{- начало счета} \\ 1 & \text{- начало счета с разрежением сетки} \\ 2 & \text{- продолжение счета по умолчанию IREG=0} \end{cases}$

MDIM - размерность  $N_m$  ( $N_m = 2 \times N$ ) вектора волновых функций в задаче (2.1).

KDIM=  $2p$  - матрица  $\hat{U}$  имеет вид (2.2),  $p \geq 2$ ; по умолчанию  $KDIM=4$ , т.е. матрица  $\hat{U}$  имеет специальный вид (2.3).

NBAS - число двухкомпонентных функций  $\chi_j(R)$  ( $j=1, \dots, NBAS$ ) с асимптотикой в точке  $R_m$ ,  $0 \leq NBAS \leq N$ , для остальных функций задаются нулевые граничные условия в точке  $R_m$ ; по умолчанию для всех функций задаются нулевые граничные условия в точке  $R_m$ .

KAPP=  $\begin{cases} 2 & \text{- точность аппроксимации } O(h^2) \\ 4 & \text{- точность аппроксимации } O(h^4) \end{cases}$   
по умолчанию точность аппроксимации  $O(h^4)$ .

KINT - число подинтервалов с постоянным шагом на квазиравномерной сетке  $\omega [0, R_m]$ ,  $1 \leq KINT \leq 5$ ; по умолчанию  $KINT=1$ , т.е. сетка равномерная.

LTIM - время в секундах, достаточное для исполнения одной итерации; по умолчанию  $LTIM=20$ .

ITMAX - максимально допустимое число итераций; по умолчанию  $ITMAX=50$ .

ISTEP - множитель, увеличивающий шаг по  $R$  при печати функций; по умолчанию  $ISTEP=10$ .

NK(1), ..., NK(KINT) - массив значений шагов для подинтервалов квазиравномерной сетки  $\omega [0, R_m]$

RX(1), ..., RX(KINT) - массив значений правых концов подинтервалов сетки  $\omega [0, R_m]$

NVAR - номер варианта; по умолчанию  $NVAR=0$ .

LJ - орбитальный момент; LJ не задается, если  $NVAR=0$ .

RV - константа Ридберга; RV не задается, если  $NVAR=0$ .

AMN1, AMN2, AM3 - массы ядер для варианта, указанного параметром NVAR; массы не задаются, если  $NVAR=0$ .

EV - начальное приближение уровня энергии (эВ), если  $NVAR=0$ , то EV - безразмерное ( $EV = \lambda_0$ ).

EPS - точность итерационного процесса, по умолчанию  $EPS=10^{-8}$ .

PG= $\alpha$  - показатель функции включения  $g(t) = 1 - e^{-\alpha t}$ ; по умолчанию  $g(t) = 1 - e^{-t}$ .

TAU= $\tau$  - шаг по параметру  $t$ ; по умолчанию  $TAU=0.5$ .

Параметр KINT и массивы NK и RX всегда задают сетку, на которой решается задача (2.1).



Параметры LDIM1 , LDIM3 , INPU , ITYRF , NREC и массив HINP(1) , ..., HINP(KINT) описаны в том режиме (IREG) , где они используются.

### 10. Описание режимов, заданных параметром IREG, и управляющие карты ( NOS/BE-6500 )

10.1 IREG=0 . Последовательно исполняются программы EDITP, UFILE, CREATE, BSMN4 . Этот режим является начальным и основным при решении задачи (2.1).

Описание параметров LDIM3 , INPU , ITYRF , NREC , определяющих входной файл TAPE3 , дано в п. 5.2.1 . По умолчанию ITYRF=0 (тип D) , INPU=NREC=N - число двухкомпонентных функций задачи, LDIM3=L - число узлов сетки  $\omega_{[0,R_m]}$  для задачи (2.1).

Параметр LDIM1 указывает число узлов сетки  $\Omega$  , на которой заданы значения потенциалов. В этом режиме сетки  $\Omega$  и  $\omega_{[0,R_m]}$  или совпадают, или сетка  $\omega_{[0,R_m]}$  является усечением сетки  $\Omega$  . По умолчанию LDIM1=L , т.е. сетки совпадают.

Режим IREG=0 используется также при решении задачи (2.1) на усеченной сетке  $\omega_{[0,R_m]}$  для проверки точности решения в зависимости от  $h$  . Предполагается, что на сетке  $\Omega$  заданы значения потенциалов и решения  $\chi(R_1)$  , которое берется в качестве начального приближения (в соответствующее значение  $\lambda$  вносится погрешность  $\sim 10^{-6}$  ). В данных задается LDIM1=LDIM3=L $_{\Omega}$  , где L $_{\Omega}$  - число узлов сетки  $\Omega$  . Значения параметров INPU , ITYRF , NREC не указываются.

В общем случае значения параметров LDIM1 и LDIM3 могут быть различными.

Массив HINP в режиме IREG=0 не требуется, в п/к файл параметров ставится чистая карта.

10.2 IREG=1 . Последовательно исполняются программы EDITP, CHOOSE, UFILE, CREATE, BSMN4 . В этом режиме сетка  $\omega_{[0,R_m]}$  является разрежением сетки  $\Omega_{[0,R_m]}$  , на которой заданы значения потенциалов и решения  $\chi(R_1)$  , рассматриваемого как начальное приближение. Режим используется при решении задачи (2.1) на разреженной сетке  $\omega_{[0,R_m]}$  для проверки точности решения в зависимости от  $h$  . Массив HINP задает значения шагов для подинтервалов сетки  $\Omega_{[0,R_m]}$  . Имеют место соотношения  $h_k(i) = \ell_1 HINP(i)$  ,  $\ell_1 \geq 1$  - целые числа ( $i=1, \dots, KINT$ ) . Значения параметров LDIM1 , LDIM3 , INPU , ITYRF , NREC устанавливаются автоматически, а в п/к файл ставится чистая карта.

10.3 IREG=2 . Исполняются программы EDITP, CREATE, BSMN4 . Этот режим следует за любым режимом IREG=0,1,2 в случае, если счет не был закончен. В п/к файле меняется при необходимости только первая карта с параметром IREG . Однако, если ограничением счета считать не время, а число итераций ITMAX , то значение ITMAX также должно меняться. Например, можно полагать ITMAX =5,10,15 и т.д., тогда в каждом счете выполняются только 5 итераций.

10.4 Первые семь управляющих операторов являются общими для всех режимов

1. ATTACH, K, PRONOSBEKERNLIB4, ID=PROGLIB, MR=1.
2. LIBRARY, K.
3. ATTACH, TAPE1, BSMADM, ID= ..., ..
4. ATTACH, TAPE13, VVV, ID= ..., ..
5. FTN (I=TAPE1, B=EDITP, OPT=2)
6. EDITP.
7. ATTACH, TAPE=1, YYY, ID= ..., ..

YYY - имя файла потенциалов

VVV - имя файла, содержащего веса функций  $\rho_1$  ; оператор 4 может отсутствовать.

10.4.1. IREG=0

8. ATTACH, TAPE3, XXX, ID=..., ..
9. REQUEST, TAPE5, ZZZ, ID= ..., ..
10. FTN (I=TAPE35, B=UFILE, OPT=2).
11. UFILE.
12. CATALOG, TAPE5, ZZZ, ID= ..., ..
13. FTN (I=TAPE35, B=CREATE, OPT=2)
14. CREATE.
15. FTN (I=TAPE35, B=BSMN4, OPT=2)
16. RETURN, CHOOSE, UFILE, CREATE, TAPE35.
17. BSMN4.

XXX - имя файла с начальными функциями  $\chi_0(R_1)$

ZZZ - имя файла, в котором содержится решение  $\{\lambda, \chi(R_1)\}$  задачи (2.1). Операторы 9 и 12 отсутствуют, если файл с именем ZZZ не нужно сохранять.

10.4.2. IREG=1

8. ATTACH, TAPE20, UUU, ID= ..., ..
9. FTN (I=TAPE35, B=CHOOSE, OPT=2)
10. CHOOSE.

Затем следуют операторы 9-17, указанные в режиме IREG=0.

UUU - имя файла, содержащего проверяемое решение задачи (2.1); это решение рассматривается как начальное приближение.

ZZZ - имя файла, содержащего решение задачи (2.1) на разреженной сетке.

IO.4.3. IREG=2

7. ATTACH, TAPES, ZZZ, ID= ..., ...

Затем следуют операторы I3-I7, указанные в режиме IREG=0.

ZZZ - имя файла, в котором содержится  $k$ -тое приближение  $\{\lambda_k, \chi_k(R_1)\}$ ; предполагается, что файл с именем ZZZ предварительно был каталогизирован.

## II. Пример вычисления уровня энергии и волновых функций

### сильносвязного состояния мезомолекулы $dt\mu$ .

Задача (2.1) рассматривается на отрезке  $[0, 20]$ . В точке  $R_m = 20$  для волновых функций задана асимптотика (2.1с). Матрица потенциалов имеет вид (2.2),  $N=p=10$ . Значения потенциалов вычислены на равномерной сетке с шагом 0,1. Файлы потенциалов и начальных приближений для волновых функций созданы программой BSMFLOW. Последний содержит одну двухкомпонентную функцию (тип файла S). Для варианта NVAR=3, LJ=1, AMN1=5496.180, AMN2=3670.481, AM3=206.769 проведены расчеты с матрицей  $\hat{U}$  вида (2.3), точность  $O(n^2)$ , и вида (2.2) -  $O(n^4)$ . Для второго расчета в качестве начального приближения взято решение задачи с матрицей  $\hat{U}$  специального вида.

Константа Ридберга  $RV = 13.6058041$

Дополнительные параметры расчетов:

1) MDIM=20, NBAS=10, KAPP=2, EV=-320, ITUPF=1, INPU=1, НК(1)=0.1, РК(1)=20; остальные параметры принимают значения по умолчанию.

2) MDIM=20, KDIM=20, NBAS=10, EV=-159.147,

НК(1)=0.1, РК(1)=20

Решение задачи с матрицей  $\hat{U}(R)$  специального вида полностью совпадает с решением, полученным по программе SYSTEM <sup>74</sup>.

Таблица I

MDIM	KDIM	Число итераций	Время на одну итерацию (сек)		Время работы пакета	
			CP	PP	CP	PP
20	4	27	4	7	143	241
20	20	19	6	10	200	254

Таблица 2

MDIM	KDIM	$\delta_0$	$\lambda$	EV
20	4	0,6725	-I,297III5	-159,147
20	20	0,0026	-I,296538I	-159,218

Память, занимаемая программой BSMN4 в каждом из расчетов, ~57100 В. В заключение выражаем благодарность С.И.Виницкому и В.С.Мележику за большую помощь в работе.

## Литература

1. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849; Leon M. Phys. Rev. Lett., 1984, 42, p.605; Меньшиков Л.И. ЯФ, 1985, 42, с.1184.
2. Balin D.V. et al. Phys. Lett. B, 1984, 141, p.173  
Breundlich W.H. et al. Invited paper presented at the Internat. Sympos. on Muon Catalysed Fusion. Tokyo, Japan. Sept. 1-3, 1986; Preprint LBL-22560, Berkeley, 1986.
3. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, 13, с.556.
4. Melezhik V.S. et al. J. Comput. Phys., 1984, 54, p.221.
5. Gocheva A.D. et al. Phys. Lett. B., 1985, 153, p.349.
6. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖВММФ, 1968, 8, с.1256; ОИЯИ, P4-5040, 1970.  
Трускова Н.Ф. ОИЯИ, PII-II218, 1978; ЯФ, 1978, 28, с.850; Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J. Phys. B, 1978, 11, p.3861.  
Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J. Phys. B., 1977, 10, p.1335.
7. Виницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, PII-81-837, PII-82-314, PII-82-315.  
Виницкий С.И. и др. В кн.: Математ. моделирование, программирование и матем. методы решения физ. задач. ОИЯИ, Д10-II-84, Дубна, 1984.
8. Справочник по специальным функциям. Под ред. Абрамовица М. и Стигана И. Наука, М., 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел  
23 июня 1987 года.

Гочева А.Д., Пузынин И.В.

P11-87-459

Программа вычисления уровней энергии и волновых функций мезомолекул водорода в адиабатическом представлении задачи трех тел

Дано описание пакета программ BSMADM для численного решения частичной задачи Штурма-Лиувилля, возникающей при вычислении уровней энергии и волновых функций связанных состояний системы трех частиц с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении. Этот пакет использовался для вычисления характеристик слабосвязанных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ , представляющих интерес в теории мезокатализа.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Gocheva A.D., Puzynin I.V.

P11-87-459

Program for Calculation of Level Energies and Wave Functions of Hydrogen Mesic Molecules in the Three Body Problem Adiabatic Representation

The description of BSMADM program package for numerical solution of a particular Sturm-Liouville problem is presented. This problem arises in the calculation of energy levels and wave functions of bound states of three particles with Coulomb interaction in adiabatic representation. The program package was used for calculating characteristics of weakly bound states of mesic molecules  $dd\mu$  and  $dt\mu$  which are of main interest for muon-catalysed fusion.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1987