

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

A 16

P11-88-744

А.Г.Абрашкевич*, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин

АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММЫ
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СХЕМ
МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

* Ужгородский государственный университет

1988

Введение

Разработка вычислительных схем высокого порядка точности в рамках различных подходов и методов – важная задача численных методов. Среди наиболее интенсивно исследуемых – схемы метода конечных элементов (МКЭ), метода конечных разностей и метода сплайнов (см., напр., /1-12/). При этом повышение точности расчетов достигается не за счет последовательного измельчения сетки, а за счет повышения при фиксированной сетке степени соответствующих аппроксимирующих полиномов и беззисных функций. Для практических приложений важно знать оптимальное соотношение между числом и гладкостью аппроксимирующих функций. Оно должно обеспечить максимально возможную точность при минимальных вычислительных затратах. Это соотношение зависит от степени гладкости и от способа задания коэффициентов уравнения (в виде формул или таблиц). Поэтому на практике при использовании аппроксимаций высокого порядка необходимо учитывать ограничения, налагаемые на коэффициенты уравнения и его решения.

Цель данной работы – численное исследование точности МКЭ при использовании элементов высоких степеней, установление на основе широкой системы тестов области применимости построенных схем МКЭ в задачах квантовой механики, а также создание соответствующего пакета программ.

Необходимость в разработке схем, обеспечивающих высокую точность вычислений на достаточно редких сетках, возникает, в частности, в связи с возросшими требованиями к точности расчетов характеристик мезомолекул и мезомолекулярных комплексов, которые проводятся для теоретического исследования процессов мюонного катализа /13,14/. Следует отметить, что построенные в работе схемы МКЭ высокого порядка позволяют охватить достаточно широкий класс спектральных задач атомной и молекулярной физики, а также ряда других разделов квантовой механики.

1. Постановка задачи

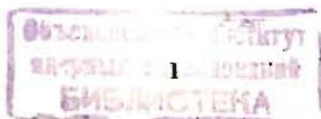
Пусть задано уравнение вида

$$-(p(x)y'(x))' + q(x)y(x) = \lambda z(x)y(x), \quad x \in [a, b], \quad (1)$$

где $p(x) \geq 0$ и $z(x) \geq 0$. Рассмотрим следующие два случая:

1. $p(x) > 0$.

Задача Штурме-Лиувилля для уравнения (1) определяется следующими граничными условиями:



$$d_L y'(a) + f_L y(a) = 0, \quad (2)$$

$$d_R y'(b) + f_R y(b) = 0, \quad (3)$$

$$d_L^2 + f_L^2 > 0, \quad d_R^2 + f_R^2 > 0.$$

$$2. p(x_0) = 0, x_0 = a, b.$$

Граничные условия, обеспечивающие ограниченность собственной функции, выводятся из исследования поведения функции $q(x)$ в окрестности граничных точек^{15/}. Различают следующие два случая:

а) $|q(x_0)| < \infty$. В этом случае граничное условие при $x = x_0$ имеет вид

$$\lim_{x \rightarrow x_0} p(x) y'(x) = 0; \quad (4)$$

б) $|q(x_0)| = \infty$. Граничное условие задается в виде

$$y(x_0) = 0. \quad (5)$$

Если $p(x) = 0$ только на одном конце интервала $[a, b]$, то на другом конце ставятся граничные условия (2) или (3).

Вариационный функционал Рэлея-Ритца задачи Штурма-Лиувилля для уравнения (I) с соответствующими граничными условиями имеет вид:

$$R(y) = \left\{ d_R y^2(b) + d_L y^2(a) + \int_a^b (p y'^2 + q y^2) dx \right\} \cdot \left\{ \int_a^b z y^2 dx \right\}^{-1}, \quad (6)$$

где

$$d_R = \begin{cases} 0, & d_R = 0, \\ p(b) f_R / d_R, & d_R \neq 0, \end{cases} \quad d_L = \begin{cases} 0, & d_L = 0, \\ p(a) f_L / d_L, & d_L \neq 0. \end{cases}$$

Если $p(a) = 0$ ($p(b) = 0$), то $d_L = 0$ ($d_R = 0$).

Таким образом, поставлены все граничные задачи для уравнения (I) и выведены соответствующие вариационные функционалы.

2. Метод численного решения

Вычислительные схемы выводятся из вариационного функционала (6) на основе метода конечных элементов. Пусть коэффициенты уравнения (I) $p(x)$, $q(x)$, $z(x)$ такие, что обеспечивают необходимую гладкость решения $y(x)$. Тогда имеет смысл разработка схем высокого порядка точности. В данной работе мы используем изопараметрические лагранж-вы элементы $\{\varphi_i^k(\eta)\}_{i=0}^k$ степени k , $k = 1, 2, 3, 4, 5$, которые определяются следующим образом. На интервале $[-1, 1]$ заданы точки

$\eta_i^k = -1 + 2i/k$, $i = 0, 1, \dots, k$. Функции $\varphi_i^k(\eta)$ определяются из условий

$$\varphi_i^k(\eta_j^k) = \delta_{ij}, \quad i, j = 0, 1, \dots, k.$$

Покроем интервал $\Delta = [a, b]$ системой подинтервалов $\Delta_j = [x_{j-1}, x_j]$, $\Delta = \bigcup_{j=1}^n \Delta_j$. Конечноэлементная сетка ω^k состоит из точек x_0, \dots, x_n и точек

$$x_{j,i}^k = x_{j-1} + \frac{x_j - x_{j-1}}{2} (1 + \eta_i^k), \quad i = 1, 2, \dots, k-1; j = 1, \dots, n.$$

В каждой точке $x_{j,i}^k$ сетки определим функцию

$$\phi_{\ell}^k(x) = \begin{cases} \varphi_{j,i}^k(\eta), & x = x_{j-1} + \frac{h_j}{2} (1 + \eta), \quad |\eta| \leq 1, \\ 0, & x \in \Delta_j, \end{cases}$$

$i = 1, 2, \dots, k-1$, $\ell = (j-1)k + i$, $h_j = x_j - x_{j-1}$. В точках x_0, \dots, x_n соответствующие функции имеют вид

$$\phi_{\ell}^k(x) = \begin{cases} \varphi_{j,k}^k(\eta), & x = x_{j-1} + \frac{h_j}{2} (1 + \eta), \quad |\eta| \leq 1, \\ \varphi_{j+1,0}^k(\eta), & x = x_j + \frac{h_{j+1}}{2} (1 + \eta), \quad |\eta| \leq 1, \\ 0, & x \in \Delta_j \cup \Delta_{j+1}, \end{cases} \ell = (j-1)k.$$

Функции $\{\phi_{\ell}^k(x)\}_{\ell=0}^N$, $N = nk + 1$, образуют базис в пространстве полиномов степени k . Представим решение $y(x)$ в виде

$y(x) = \sum_{\ell=0}^N y_{\ell} \phi_{\ell}^k(x)$ и подставим это разложение в вариационный функционал (6). Из условия минимума этого функционала получаем, что вектор $Y^T = (y_0, y_1, \dots, y_N)$ является собственным вектором обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения

$$A^k Y = \lambda B^k Y. \quad (7)$$

При этом выполняются следующие оценки^{1/1}, стр. 267, 271/:

$$0 \leq \lambda_n^h - \lambda_n \leq C(\lambda_n) h^{2k},$$

$$\|y_n^h - y_n\|_0 \leq \tilde{C}(\lambda_n) h^{k+1}, \quad (8)$$

где h - максимальный шаг конечноэлементной сетки, а n - номер соответствующего решения. Матрицы A^k и B^k симметричны и имеют ленточную структуру, B^k - положительно определена. Представим их в виде

$$A^k = \sum_{j=1}^n a_j^k, \quad B^k = \sum_{j=1}^n b_j^k.$$

Матрицы a_j^k и b_j^k (локальные матрицы на элементе Δ_j) имеют от-

личные от нуля элементы, соответствующие базисным функциям для данного конечного элемента Δ_j . Эти матричные элементы вычисляются по формулам

$$(a_j^k)_{pq} = \int_{-1/2}^{1/2} \left\{ p(x) \frac{4}{h_j^2} (\varphi_{j,p}^k)' (\varphi_{j,q}^k)' + q(x) \varphi_{j,p}^k \varphi_{j,q}^k \right\} \frac{h_j}{2} d\eta, \quad (9)$$

$$(b_j^k)_{pq} = \int_{-1/2}^{1/2} z(x) \varphi_{j,p}^k \varphi_{j,q}^k \frac{h_j}{2} d\eta, \quad (10)$$

$$x = x_{j-1} + \frac{h_j}{2} (1 + \eta), \quad p, q = 0, 1, \dots, k.$$

Интегралы (8) и (9) вычисляются при помощи квадратурных формул Гаусса с $k+1$ узлами.

Для решения задачи (7) целесообразно использовать метод, который позволял бы одновременно вычислять несколько первых собственных значений и векторов задачи (7) и эффективно учитывал бы ленточную структуру и симметричность матриц A и B . В настоящей работе для этой цели использован модифицированный вариант известной программы $SSPACE /I7/$, в которой реализован метод итерации подпространств $/I, I7/$.

3. Описание программ

Рассмотренные выше схемы МКЭ и алгоритмы реализованы в виде двух комплексов программ $FESSLIF$ и $FESSLIT$. Первый из них предназначен для решения задачи Штурма-Лиувилля (1)-(3) с коэффициентами уравнения $p(x)$, $q(x)$ и $z(x)$, заданными в виде формул, второй - для коэффициентов, заданных в виде таблиц. Программы написаны на языке Фортран-IV. Оба комплекса предназначены для эксплуатации на ЭВМ серии ЕС под управлением операционной системы ОС ЕС или VM/SP. Все вычисления ведутся с двойной точностью. В качестве языка входных данных используется оператор $NAMLIST$, что позволяет существенно упростить подготовку и модификацию входных данных. Для повышения эффективности программ и удобства пользователей предусмотрены также динамическое распределение памяти и автоматическая генерация конечно-элементной сетки.

Весь процесс решения задачи (1)-(3) разбит на четыре фазы, а именно: 1) ввод и обработка данных, 2) генерация конечно-элементной сетки, 3) формирование матриц жесткости и массы, запись их профиля, 4) вычисление заданного количества собственных чисел и собственных векторов задачи (7). Во всем этом процессе пользователь принимает непосредственное участие только в первой фазе, где он задает входные данные для работы комплекса и составляет главную программу и подпрограммы для задания коэффициентов $p(x)$, $q(x)$ и $z(x)$ уравнения (1). Отметим, что входные данные для обоих комплексов задаются практически одинаково, а семи программы $FESSLIF$ и $FESSLIT$ отличаются с точки

зрения пользователя лишь подпрограммами, составляемыми самим пользователем для задания коэффициентов уравнения (1). Образец главной программы для комплекса $FESSLIF$ приведен на рис. 1.

```

C
C   СЛЕДУЮЩИЕ ДВЕ КАРТЫ ИСПОЛЬЗУЮТСЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МАКСИМАЛЬНОЙ
C   РАЗМЕРНОСТИ МТОТ МАССИВА М, ТРЕБУЕМОЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ. ОБ-
C   ЩАЯ ПАМЯТЬ В КИЛОБАЙТАХ ОПРЕДЕЛЯЕТСЯ КАК
C
C
C   ILAST * 4 / 1024 + 100 ,
C
C   ГДЕ ILAST - ПОСЛЕДНИЙ ИСПОЛЬЗОВАННЫЙ АДРЕС В МАССИВЕ М.
C   ДЛЯ ИЗМЕНЕНИЯ МАКСИМАЛЬНОГО РАЗМЕРА ПАМЯТИ, НЕОБХОДИМОЙ
C   ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ, СЛЕДУЕТ ИЗМЕНИТЬ ЗНАЧЕНИЯ МТОТ
C   И СООТВЕТСТВУЮЩЕГО МАССИВА М(МТОТ).
C
C   DIMENSION M(200000)
C
C   МТОТ = 200000
C
C   IIN - НОМЕР ФАЙЛА, ПО КОТОРОМУ ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ ВВОД ДАННЫХ
C   IIN = 5
C
C   CALL FESSLF (M, МТОТ, IIN)
C
C   STOP
C   END
C

```

Рис. 1. Образец главной программы для комплекса $FESSLIF$.

Аналогично выглядит и главная программа комплекса $FESSLIT$ (с заменой подпрограммы $FESSLF$ на $FESSLIT$). Смысл параметров $МТОТ$ и IIN понятен из комментариев. В обеих программах вычисляется и печатается последний адрес $Ilast$ массива M , а в случае, если он превышает значение $МТОТ$, печатается сообщение об ошибке и происходит останов выполнения программы. В сообщении указывается недостающая память, так что для выполнения требуемого расчета достаточно изменить соответствующим образом параметр $МТОТ$ в главной программе.

Для задания коэффициентов $p(x)$, $q(x)$ и $z(x)$ уравнения (I) необходимо составить соответствующие подпрограммы. Для комплекса FESSLLF необходимо написать три подпрограммы функции FUNP(X), FUNQ(X) и FUNR(X). Тип функций должен быть DOUBLE PRECISION. В качестве примера рассмотрим уравнение Шредингера для атома водорода (см. рис. 2).

```

C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FUNQ(X)
REAL*8 FUNQ , X
C
FUNQ = -2.DO / X
C
RETURN
END
C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FUNP(X)
REAL*8 FUNP , X
C
FUNP = 1.DO
C
RETURN
END
C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FUNR(X)
REAL*8 FUNR , X
C
FUNR = 1.DO
C
RETURN
END
C

```

Рис. 2. Пример задания коэффициентов уравнения Шредингера для атома водорода для комплекса FESSLLF.

В программе FESSLLF коэффициенты уравнения (I) задаются таблично. В этом случае необходимо составить подпрограмму COEFF, предназначенную для заполнения массивов P, Q и R таблицами значений коэффициентов $p(x)$, $q(x)$ и $z(x)$ уравнения (I). Обращение к этой подпрограмме имеет вид

```

C
CALL COEFF(BL , BR , X , XS , P , Q , R , N , NSPL , NT11)
C
C
C ЗДЕСЬ
C
C BL, BR - ЛЕВАЯ И ПРАВАЯ ГРАНИЦЫ ОБЛАСТИ ИЗМЕНЕНИЯ X
C X, P, Q, R - МАССИВЫ РАЗМЕРНОСТИ N
C XS - МАССИВ РАЗМЕРНОСТИ NSPL (ЕСЛИ NSPL > 0)
C N - КОЛИЧЕСТВО УЗЛОВ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЙ СЕТКИ
C NSPL - КОЛИЧЕСТВО ТАБЛИЧНЫХ ТОЧЕК (NSPL ≤ N)
C NT11 - НОМЕР ФАЙЛА, ИЗ КОТОРОГО ПРИ НЕОБХОДИМОСТИ
C ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ ЧТЕНИЕ ТАБЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЙ
C КОЭФФИЦИЕНТОВ УРАВНЕНИЯ (I)
C

```

Величины BL, BR, N, NSPL, X, NT11 задаются в вызывающей программе. Пользователем должны быть сформированы лишь массивы P, Q и R. Способ формирования зависит от параметра NSPL, ненулевое значение которого указывает на необходимость интерполяции таблично заданных коэффициентов уравнения (I). Если NSPL > 0, то необходимо задать или сформировать массив узлов XS(NSPL) таблицы и заполнить массивы P, Q и R значениями коэффициентов уравнения (I) в этих узлах. В этом случае таблично заданные в NSPL точках потенциалы (шаг таблицы может быть неравномерным) интерполируются в вызывающей программе с помощью кубической сплайн-интерполяции, и последующее заполнение массивов P, Q и R в N узлах конечно-элементной сетки осуществляется автоматически. Если NSPL=0, интерполяция не производится. В этом случае необходимо заполнить массивы P, Q и R таблицами значений соответствующих коэффициентов уравнения (I), заданных в узлах сетки X(N). Сама конечно-элементная сетка генерируется программой в соответствии с выбранным разбиением интервала $[a, b]$ на подинтервалы с заданным числом элементов на этих подинтервалах (если последних несколько). При этом должно соблюдаться соответствие между шагом таблицы и шагом сетки, а также между числом узлов сетки и заданным количеством табличных значений коэффициентов уравнения (I).

В качестве примера одного из возможных вариантов составления подпрограммы COEFF рассмотрим снова уравнение Шредингера для атома водорода (см. рис. 3).

В приведенном примере мы использовали то обстоятельство, что коэффициенты рассматриваемого уравнения задаются в аналитическом виде, и воспользовались готовыми подпрограммами FUNP, FUNQ и FUNR из

```

C SUBROUTINE COEFF(BL, BR, X, XS, P, Q, R, N, NSPL, NT11)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
  DIMENSION X(N) , P(N) , Q(N) , R(N) , XS(1)

C XP = 0.001D0
  P(1) = FUNP(XP)
  Q(1) = FUNQ(XP)
  R(1) = FUNR(XP)

C IF (NSPL .GT. 0) GO TO 20

C DO 10 I = 2 , N

C     XP = X(I)
     P(I) = FUNP(XP)
     Q(I) = FUNQ(XP)
     R(I) = FUNR(XP)

C 10 CONTINUE

C RETURN

C 20 H = (BR - BL) / (NSPL - 1)

C DO 30 I = 2 , NSPL

C     XS(I) = BL + H * (I - 1)
     XP = XS(I)
     P(I) = FUNP(XP)
     Q(I) = FUNQ(XP)
     R(I) = FUNR(XP)

C 30 CONTINUE
  RETURN
  END

```

Рис. 3. Пример составления подпрограммы COEFF для комплекса FESSLIT

предыдущего примера. Рассмотренный пример показывает также связь между комплексами программ FESSLIF и FESSLIT .

Подготовка входных данных для обоих комплексов осуществляется следующим образом. Описание данных начинается с карты I. Она предназначена для идентификации вводимых данных. Формат карты - 8A8.

Переменная	Назначение
TITLE	Заголовок задачи , 64 символа

Группа карт N 2 содержит информацию о файлах, используемых в ходе решения задачи. Формат группы карт N 2 - NAMELIST /FILES/:

```
&FILES IOUF = , NT10 = , NT11 = , NT12 = , IOUF = &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOUF	- Номер выходного файла, по которому осуществляется вывод информации на печать	6
NT10	- Временный файл, в который производится запись матриц жесткости и массы, их профиля и другой необходимой информации. Использован бесформатный ввод-вывод	IO
NT11	- Файл, из которого производится (в случае необходимости) чтение табличных значений коэффициентов уравнения (I). Используется только в программе FESSLIT	II
NT12	- Временный рабочий файл	I2
IOUF	- Файл, в который записываются вычисленные значения собственных чисел EIGV и собственных векторов FN IOUF=0 - запись не производится IOUF > 12 - выполняется бесформатная запись в соответствии с оператором WRITE (IOUF) NROOT, NGRID, (EIGV(I), I = 1 , NROOT), ((FN(I, J), I=1, NGRID), J=1, NROOT), где NROOT - число корней уравнения (1), а NGRID - число узлов сетки	0

Все файлы должны быть описаны в соответствии с правилами ОС ЕС или VM/SP. Отметим, что поскольку здесь использован бесформатный ввод-вывод, то значение параметра RECFM в метке набора данных DSB для соответствующих файлов должно быть VBS.

Группа карт N 3 содержит информацию, необходимую для построения конечно-элементной сетки, задания граничных условий, формирования матриц жесткости и массы и их профиля, задания порядка конечно-элементной аппроксимации. Формат группы карт N 3 NAMELIST /GRID/:

```
&GRID IBOUND = , FL = , DL = , FR = , DR = , IPRINT = ,
      NSPL = , NPOL = , NMESH = , XMESSH = &END
```

Переменные	Назначение	Значение по умолчанию
IBOUND	- Параметр, задающий тип граничных условий на концах области изменения X. Для удобства пользователей значение параметра IBOUND задается таким образом, чтобы охватывались все виды граничных условий: граничное условие первого рода или условие Дирихле (Д) $Y(X) = 0, X = A, B,$ Граничное условие второго рода или условие Неймана (Н) $Y'(X) = 0, X = A, B,$ и смешанное или естественное граничное условие (E) /I,I6/ вида (2), (3). В зависимости от требуемого вида граничных условий следует задать одно из возможных значений параметра IBOUND : = 1 : Д - Д = 2 : Д - Н = 3 : Н - Д = 4 : Н - Н = 5 : Е - Е = 6 : Е - Д = 7 : Е - Н = 8 : Д - Е = 9 : Н - Е	I
FL, DL,	- Значения констант, входящих в граничные	0.

FR,DR	условия (2) и (3). Используются только для IBOUND \geq 5.	
IPRINT	- Уровень печати: = 0 - Минимальный уровень печати. Печатаются входные данные, число узлов, число элементов, порядок аппроксимации, результаты счета = 1 - Дополнительно печатается информация о сгенерированных номерах узлов конечно-элементной сетки и проверке задания граничных условий \geq 2 - Расширенная печать. Распечатываются матрицы жесткости и массы, их локальные матрицы для каждого элемента, коэффициенты уравнения и другая информация. Используется при отладке входных данных	0
NSPL	- Число таблично заданных коэффициентов уравнения (I). Используется только в программе FESSLIT. Если NSPL = 0, то число значений в таблице совпадает с числом узлов сетки. Если NSPL > 0 (NSPL всегда меньше числа узлов сетки), то таблица из NSPL значений коэффициентов уравнения интерполируется с помощью кубической сплайн-интерполяции, после чего восстанавливаются значения коэффициентов во всех узлах конечно-элементной сетки	0
NPOL	- Степень интерполяционного многочлена Лагранжа (порядок функции формы). Принимает значения от 1 до 5	3
NMESH	- Размерность массива NMESH (не более 25). Значение NMESH всегда нечетное и \geq 3	3
XMESSH	- Массив данных для разбиения интервала изменения X на подинтервалы и всех элементов на группы элементов. Формируется следующим образом: XMESSH(1) - левый конец области интегрирования,	-

XMESH(NMESH) - правый конец области интегрирования ,
 Значения XMESH(M) (M - четные и $2 \leq M < NMESH$)
 задают число элементов для подинтервала
 XMESH(M+1) - XMESH (M-1), где XMESH(M-1) -
 левый конец подинтервала, а XMESH(M+1) -
 его правый конец. Такая конструкция позво-
 ляет разбить всю область интегрирования на
 неравномерные интервалы, и на каждом из них
 задать нужное число элементов

Группа карт N 4 содержит информацию, необходимую для решения
 обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения. Формат
 группы карт N 4 NAMELIST /SOLVE/:

```
&SOLVE NROOT = , NITEM = , SHIFT = , RTOL = , IPRTFN = &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NROOT	- Число искомых собственных значений	1
NITEM	- Максимальное число итераций	30
SHIFT	- Сдвиг спектра. Ищутся собственные значения, ближайšie к сдвигу	1.
RTOL	- Относительная точность вычисления собственных значений	1.D-07
IPRTFN	- Флаг печати вычисленных собственных функций: IPRTFN = 0, печать не производится IPRTFN > 0, печатаются NROOT собственных функций	

Напомним, что все группы карт читаются из карточного файла с номером IIN. Ниже приведен пример задания начальных данных для рассмотренного выше уравнения Шредингера для атома водорода:

```
Тестовый пример - спектр атома водорода
&FILES IOUT = 6 , IOUF = 0 &END
&GRID IBOUND = 1 , IPRINT = 0 , NSPL = 0 ,
      NPOL = 3 , NMESH = 5 ,
      XMESH = 0. , 50. , 10. , 30. , 60. &END
&SOLVE NROOT = 3 , NITEM = 15 ,
      SHIFT = 1. , IPRTFN = 1 &END
```

В программах FESSLIF и FESSLIT предусмотрен ряд остановов, которые происходят в следующих случаях:

1. Недостаточная размерность массива M.
2. Некорректное задание значений исходных данных.
3. Превышение максимального числа итераций.
4. Остановы, предусмотренные в подпрограмме SSPACE^{/17/}, используемой для решения обобщенной алгебраической задачи на собственные значения.

Во всех случаях печатаются соответствующие информационные сообщения.

4. Численные исследования

Рассмотренные выше схемы высокого порядка МКЭ проверены на ряде тестов^{/18,19/}. При этом ставились две задачи. Первая состояла в тестировании составленных программ и проверке их работы для различных типов задач, вторая - в исследовании на основе численных экспериментов области применимости построенных схем МКЭ.

Тесты охватывают достаточно широкий класс задач квантовой механики и включают практически все виды взаимодействий, встречающихся в атомной и молекулярной физике и представляющих практический интерес. Среди этих задач можно выделить такие хорошо известные задачи, как определение спектра атома водорода, уравнение Лежандра, уравнение Бесселя, уравнение для гармонического осциллятора, уравнение с потенциалом Морзе и другие. Во всех случаях были получены решения, с требуемой точностью совпадающие с точными или известными приближенными решениями рассматриваемых задач. В данной работе мы ограничимся рассмотрением только некоторых наиболее характерных задач.

Тест I: Классическая задача об определении спектра атома водорода, для которой известно точное решение. Результаты вычисления первых двух собственных чисел в зависимости от порядка аппроксимации и числа элементов представлены в таблице Ia. Вычисления проводились на базе комплекса FESSLIF с относительной точностью 10^{-12} . Анализ таблицы Ia показывает, что при фиксированном числе элементов наиболее высокая точность достигается на элементах наивысшего порядка, причем скорость сходимости по порядку аппроксимации (так называемая K-сходимость^{/2/}) существенно выше скорости по числу элементов при фиксированной степени базисного многочлена (h-сходимость^{/2/}). Исследование скорости сходимости вычисленных собственных чисел для рассматриваемой задачи, проведенное на последовательности вдвое сгущающихся сеток, показало хорошее согласие полученных из расчета оценок скорости сходимости с известными теоретическими оценками (8).

Таблица 1а. Спектр атома водорода. $P(X)=R(X)=1$, $Q(X)=-2/X$, $A=0$, $B=70$, $Y(A)=Y(B)=0$. Точное решение $\lambda_n^* = -1 / N^2$

Степень полинома	Число элементов	λ_1	λ_2
1	15	-0.804971950045	-0.210547296663
2		-0.988081681497	-0.248199121553
3		-0.999813562756	-0.249979012138
4		-0.99998708022	-0.24999476926
5		-0.99999990586	-0.24999769351
1	30	-0.924951379581	-0.236115445455
2		-0.999007469385	-0.249871458880
3		-0.99996427013	-0.24999658496
4		-0.9999992949	-0.24999954870
5		-0.9999999926	-0.2499998218
1	60	-0.976901239820	-0.245911270913
2		-0.99932116740	-0.249991871349
3		-0.9999940247	-0.24999980559
4		-0.9999999959	-0.24999999559
5		-0.9999999999	-0.2499999997
1	120	-0.993738427976	-0.248910582667
2		-0.99995639629	-0.24999481191
3		-0.9999999044	-0.24999999553
4		-0.9999999999	-0.2499999998
5		-0.9999999999	-0.2499999999

В таблице 1б приведены результаты вычисления норм $\|y_n - y_n^*\|_0$ для первых трех решений уравнения Шредингера для атома водорода в зависимости от числа элементов и порядка аппроксимации. Здесь y_n - приближенное сеточное решение, y_n^* - известное точное решение, $n = 1, 2, 3$. Из этой таблицы видно, что скорость K -сходимости для собственных векторов при $K \leq 4$ несколько выше скорости h -сходимости. Однако для базисных функций 5-го порядка (и выше) точность вычисления собственных векторов (в отличие от собственных чисел) резко падает, что связано с особенностями выбранного способа полиномиальной аппроксимации решения. Таким образом, из анализа таблиц 1а и 1б можно сделать вывод о том, что для решения рассматриваемой задачи оптимальной является схема МКЭ 4-го порядка.

Таблица 1б. Зависимость значения $\|y_n - y_n^*\|_0$ от числа и порядка конечных элементов для первых трех решений уравнения Шредингера для атома водорода. Здесь y_n - приближенное сеточное решение, а y_n^* - известное точное решение ($n = 1, 2, 3$).

Степень полинома	Число элементов	$\ y_1 - y_1^*\ _0$	$\ y_2 - y_2^*\ _0$	$\ y_3 - y_3^*\ _0$
1	15	.362E+00	.561E+00	.614E+00
2		.627E-01	.863E-01	.943E-01
3		.563E-02	.487E-02	.451E-02
4		.164E-02	.468E-03	.507E-03
5		.514E-01	.459E-01	.431E-01
1	30	.164E+00	.258E+00	.297E+00
2		.110E-01	.101E-01	.105E-01
3		.563E-03	.253E-03	.212E-03
4		.734E-04	.188E-04	.235E-04
5		.365E-01	.252E-01	.236E-01
1	60	.635E-01	.919E-01	.105E+00
2		.962E-03	.781E-03	.789E-03
3		.476E-04	.142E-04	.183E-04
4		.251E-05	.611E-06	.161E-04
5		.208E-01	.131E-01	.1211-01
1	120	.197E-01	.272E-01	.307E-01
2		.659E-04	.519E-04	.524E-04
3		.322E-05	.884E-06	.159E-04
4		.802E-07	.192E-07	.160E-04
5		.107E-01	.663E-02	.607E-02
1	240	.536E-02	.724E-02	.812E-02
2		.422E-05	.331E-05	.159E-04
3		.205E-06	.552E-07	.169E-04
4		.252E-08	.599E-09	.168E-04
5		.542E-02	.333E-02	.304E-02

Табл 2: Решение уравнения Шредингера для первого собственного значения с потенциалом Морзе, широко используемым в молекулярной физике, представлено в таблице 2. Этот потенциал наряду с экспоненциальными членами содержит дальнедействующий центробежный член. Для воспроизведения решения с таким сложным потенциалом необходимо взять достаточно большое число элементов. Однако и в этом случае, как легко ви-

Таблица 2. $P(X) = R(X) = 1$, $Q(X) = L(L + 1) / X^2 - 2000(2 \exp(-1.7(X-1.3)) - \exp(-3.4(X-1.3)))$,
 $L = 1$, $A = 0$, $B = 70$, $Y(A) = Y(B) = 0$.
 $\lambda_1^* = -1923.5296551$

Степень полинома	Число элементов	λ_1
1	30	-1779.18908820
2		-1893.26594683
3		-1916.11123476
4		-1920.47168187
5		-1923.04958328
1	60	-1899.93119087
2		-1920.68520336
3		-1923.20152858
4		-1923.49914245
5		-1923.52825440
1	120	-1918.10762578
2		-1923.29194827
3		-1923.52159779
4		-1923.52952876
5		-1923.52965154
1	240	-1922.16104827
2		-1923.51301112
3		-1923.52952965
4		-1923.52965443
5		-1923.52965511

деть из таблицы 2, использование наивысших аппроксимаций позволяет получить результат с требуемой высокой точностью при относительно небольшом числе элементов. Более того, "точное" решение $\lambda_1^* / 19$ для этого потенциала воспроизводится со всеми значащими цифрами лишь при использовании 140 элементов 5-го порядка. Для достижения такой же точности с помощью аппроксимаций более низкого порядка требуется значительно большее число элементов. Естественно, что при этом существенно возрастают запросы к требуемому объему оперативной памяти и время счета.

Тест 3: Достоинством разработанных программ является возможность нахождения решений с большим номером за счет соответствующего сдвига

Таблица 3. 1) $P(X) = R(X) = 1$, $Q(X) = 2 \cos(2X)$,
 $A = 0$, $B = \pi/2$, $Y(A) = Y(B) = 0$.
 $\lambda_{100}^* = 40000.00$
 2) $P(X) = R(X) = 1$, $Q(X) = X^2$,
 $A = 0$, $B = 1$, $Y(A) = Y'(B) = 0$,
 $\lambda_{100}^* = 97711.884296$

Степень полинома	Число элементов	1)	λ_{100}	2)	λ_{100}
2	300	40063.254408	97735.2700462	97713.0784198	
3		40000.503410	97711.8895019		
4		40000.002061	97711.8843489		
5		39999.999855			
5				97732.2029906	
2	500	40008.484438	97711.9414009		
3		40000.023931	97711.8843994		
4		39999.999871	97711.8843107		
5		39999.999849			
5				97713.1734288	
2	1000	40000.538233	97711.8852118		
3		40000.000229	97711.8843109		
4		39999.999849	97711.8843109		
5		39999.999849			
5				97711.9651885	
2	2000	40000.033628	97711.8843247		
3		39999.999855	97711.8843106		
4		39999.999849	97711.8843106		
5		39999.999849			
5				97711.8843106	

спектра. В таблице 3 представлены результаты вычисления своего собственного значения для двух разных потенциалов (и с различными граничными условиями). Анализ таблицы 3 подтверждает вывод о преимуществе использования аппроксимаций высших порядков для достижения требуемой точности результата без существенного увеличения числа элементов. Легко видеть, например, что даже 2000 квадратичных элементов не позволяют получить точность, достигнутую с помощью 300 элементов 5-го порядка.

Тест 4: Для всех рассмотренных выше уравнений коэффициенты задавались в виде формул. Представляет интерес выяснить, в какой степени изменятся сделанные выше выводы для случая, когда коэффициенты уравнения заданы таблично. С этой целью проведены расчеты одного и того же

Таблица 4. $P(X) = X$, $R(X) = 4X(1-X^2)$, $R(X) = 0$,
 $A = 0$, $B = 1$. $\lim_{X \rightarrow A} XY(X) = 0$, $\lim_{X \rightarrow B} XY(X) = 0$.
 $\lambda_2^* = 6.41990$. $X \rightarrow A$ $X \rightarrow B$

Степень полинома	Число элементов	FESSLI1F λ_2	FESSLI1T λ_2
1	15	6.4438199890	6.473273639I
2		6.4I99547974	6.4I99379545
3		6.4I99030339	6.4I99030339
4		6.4I99030005	6.4I99030005
5		6.4I99030005	6.4I3097233I
1	30	6.4260934270	6.4332490I50
2		6.4I99062582	6.4I99052057
3		6.4I990300I0	6.4I990300I0
4		6.4I99030005	6.4I99030005
5		6.4I99030005	6.4I82094420
1	60	6.42I4559976	6.4232407009
2		6.4I99032044	6.4I9903I386
3		6.4I99030005	6.4I99030005
4		6.4I99030005	6.4I99030005
5		6.4I99030005	6.4I9480I6I6
1	120	6.42029I6495	6.4207375609
2		6.4I99030I33	6.4I9903009I
3		6.4I99030005	6.4I99030005
4		6.4I99030005	6.4I99030005
5		6.4I99030005	6.4I9797329I

состояния для различных значений числа и порядка элементов с помощью программ FESSLI1F и FESSLI1T. Результаты этих расчетов приведены в таблице 4. Сравнительный анализ представленных в ней данных показывает, что наилучшее согласие результатов вычислений (во всех значащих цифрах) достигается для элементов 3-го и 4-го порядков, менее удовлетворительное — для элементов других порядков, что связано, очевидно, с погрешностями применяемой интерполяции таблично заданных потенциалов и способом полиномиальной аппроксимации решения.

Проведенные тестовые исследования позволяют утверждать, что использование конечных элементов высоких степеней повышает эффективность решения задач при одновременном увеличении точности расчетов в классе уравнений с достаточно гладкими коэффициентами.

Заклучение

В настоящей работе на основе выполненных численных экспериментов исследованы некоторые свойства и особенности аппроксимаций высших порядков МКЭ для решения задачи Штурма-Лиувилля, а также установлена область применимости таких аппроксимаций в зависимости от способа задания коэффициентов уравнений и требуемых свойств гладкости решений. Отмечена более быстрая K -сходимость решений (при последовательном возрастании степени K базисного многочлена на фиксированной сетке) по сравнению с h -сходимостью (последовательном увеличении числа элементов при фиксированной степени интерполяционного многочлена). Оптимальными, по нашему мнению, являются конечные элементы четвертого порядка для решения уравнений с коэффициентами, заданными как в виде формул, так и в виде таблиц, при выбранном нами способе интерполяции. Показано, что использование схем высокого порядка МКЭ позволяет повысить эффективность решения рассматриваемого класса задач при одновременном повышении точности вычислений. Достигается значительная экономия требуемой оперативной памяти и времени счета, что очень важно для практических приложений. Программные комплексы FESSLI1F и FESSLI1T могут быть успешно использованы для решения широкого класса задач Штурма-Лиувилля, возникающих в квантовой механике и других разделах теоретической физики.

В заключение авторы благодарят Д.Г.Абрашкевича за помощь в работе.

Литература

1. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М., Мир, 1977.
2. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. М., Мир, 1986.
3. Cowper G.R. et al. AIAA J., 1969, v. 7, p. 1957.
4. Молчанов И.Н., Попов А.В. "Вариационно-резонансные методы в мат. физике". Москва, 1984, с. 183-195.
5. Черненко А.С. "Оптимальные вычисл. и числ. методы". Киев, 1987, с. 31-34.
6. Huntley E. Int. J. Numer. Meth. Eng., 1986, v. 23, p. 2325.
7. Neittaanmaki P. Saarinen K. Z. Angew. Math. and Mech., 1987, v. 67, p. 436.
8. Gupta M.M., Manohar R.P., Stephenson J.W. Numer. Meth. Part. Diff. Eqs., 1985, v. 1, p. 71; Manohar R., Stephenson J.W. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1984, v. 5, p. 69.
9. Пузынин И.В. и др. ОИЯИ, PII-87-332, Дубна, 1987.

10. Гочева А.Д., Пузынин И.В. ОИЯИ, РИ-87-459, Дубна, 1987.
11. Демьянович Ю.К., "Вариационно-разностные методы в математической физике". Москва, 1984, с. 98-109.
12. Ляшенко И.Н., Байлыев К.Н. "Вычисл. и прикл. мат.". Киев, 1987, № 61, с. 3-8.
13. Puzynin I.V., Vinitzky S.I. Muon Catalyzed Fusion, 1988, v. 3, 307.
14. Gocheva A.D. et al. Phys. Lett. B, 1985, v.153, 349; Гочева А.Д. Препринт ОИЯИ Р4-84-642, Дубна, 1984.
15. Фрязинов И.Н. ЖВМФ, 1971, т. II, с. 1219.
16. Becker E.B. et al. Finite elements. An introduction. Vol. 1. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York, 1981.
17. Bathe K.-J., Finite element procedures in engineering analysis. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York, 1982.
18. Bailey P.B. et al. ACM Trans. on Math. Software, 1978, v. 4, p. 193.
19. Bailey P.B. et al. Rep. SAND76-0560, Sandia Labs, Albuquerque, N. Mex., 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 октября 1988 года.

Абрашкевич А.Г., Касчиев М.С., Пузынин И.В.
Алгоритмы и программы решения задачи Штурма-Лиувилля
с использованием схем метода конечных элементов
повышенного порядка точности

P11-88-744

На основе выполненных численных экспериментов для широкого набора тестов исследованы некоторые свойства и особенности аппроксимаций повышенного порядка точности метода конечных элементов для решения задачи Штурма-Лиувилля. Установлена область применимости таких аппроксимаций в зависимости от способа задания коэффициентов уравнений и требуемых свойств гладкости решений. Показано, что использование схем высокого порядка позволяет повысить эффективность решения рассматриваемого класса задач при одновременном повышении точности вычислений; дано описание пакета программ, предназначенных для решения задачи Штурма-Лиувилля методом конечных элементов повышенного порядка точности.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод О.С.Виноградовой

Abbrashkevich A.G., Kaschiev M.S., Pusynin I.V.
Algorithms and Programs for Solution of Sturm-Liouville
Problem Using the High Order Accuracy Finite Element
Method Schemes

P11-88-744

Some properties and peculiarities of high order accuracy approximations of finite element method for Sturm-Liouville problem have been investigated on the basis of numerical experiments for broad set of tests. The region of applicability of such approximations depending from a way setting of equation coefficients and need smoothness of solutions have been established. The use of high order schemes allowing to increase the effectiveness of solution of problems under consideration with simultaneous increase of calculation accuracy is shown. A description of program package intended for solving the Sturm-Liouville problem of high order finite element method is given.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988