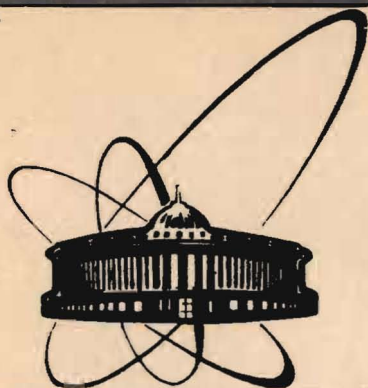


88-745



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

A 16

P11-88-745

А.Г.Абрашкевич*, С.И.Виницкий, Ю.Л.Грига*,
М.С.Касчиев, И.В.Пузынин

**NSATOM - ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ
ДЛЯ РАСЧЕТА СПЕКТРАЛЬНЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК ГЕЛИЕПОДОБНЫХ СИСТЕМ
В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ**

*Ужгородский государственный университет

1988

1. Введение

Экспериментальные достижения электронной спектроскопии, астрофизики и физики плазмы привели к необходимости детального теоретического изучения процессов возбуждения и ионизации атомов и ионов. Среди них важную роль играют так называемые резонансные процессы, происходящие с образованием промежуточных автоионизационных состояний (АИС). Образование АИС связано с возбуждением двух и большего числа электронов, что приводит к необходимости тщательного учета корреляции электронов [1]. Особый интерес вызывают двухэлектронные атомные системы [1-3], обладающие богатыми спектрами двухкратновозбужденных состояний. Динамическое поведение этих систем адекватно описывается в рамках гиперсферического адиабатического (HSA) подхода [4], в котором естественным образом учитывается коррелированное движение электронов. Адиабатическое приближение HSA-подхода давно применяется для качественного описания характеристик простейших атомных систем (см. обзоры [2,3]). Однако в многоканальном варианте этот метод стал применяться сравнительно недавно для количественного описания спектров двухэлектронных систем [5-10]. Такие расчеты необходимы при сопоставлении теоретических и экспериментальных положений уровней и термов.

В данной работе представлены вычислительная схема и соответствующий пакет программ решения задачи Штурма-Лиувилля, возникающей в HSA-подходе, предназначенные для вычисления уровней энергии и волновых функций гелиеподобных систем. Пакет реализован на ЭВМ ЕС-1061 ВЦ ОЯИ.

2. Постановка задачи

HSA-разложение для полной волновой функции имеет вид

$$\Psi^p(R, \Omega) = \left\{ R^{\frac{5}{2}} \sin \alpha \cos \alpha \right\}^{-1} \sum_{\mu} F_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega), \quad (1)$$

где

$$R = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}, \quad \Omega = \{\alpha, \hat{r}_1, \hat{r}_2\}, \quad \alpha = \arctg(r_2/r_1), \quad 0 \leq \alpha \leq \pi/2,$$

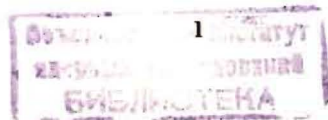
$$\hat{r}_i = \{\theta_i, \varphi_i\}, \quad 0 \leq \theta_i \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi_i \leq 2\pi, \quad i = 1, 2.$$

Здесь адиабатические базисные функции $\Phi_{\mu}(R; \Omega)$ являются решениями задачи [2-4]

$$h_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega) = R^2 U_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega)$$

на сфере $S^5 \equiv \Omega$, нормированные условием:

$$\int d\Omega \Phi_{\mu}^*(R; \Omega) \Phi_{\nu}(R; \Omega) = \delta_{\mu\nu},$$



$U_\mu(R)$ - собственные значения (термы), зависящие от R как от параметра. Подстановка (1) в уравнение Шредингера для двухэлектронной системы и усреднение по базисным функциям Φ_μ приводят к следующей системе N_R связанных дифференциальных уравнений для радиальных волновых функций $\vec{F}(R) = \{F_\mu(R)\}_{\mu=1}^{N_R}$:

$$\left[-\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + \hat{H}(R) - 2E\right] \vec{F}(R) + \frac{d}{dR} [\hat{Q}(R) \vec{F}(R)] + \hat{Q}(R) \frac{d\vec{F}(R)}{dR} = 0, \quad (2)$$

$$\vec{F}(0) = \vec{F}(R_{max}) = 0, \quad R \in [0, R_{max}], \quad (3)$$

где $\hat{I}, \hat{H}(R), \hat{Q}(R)$ - квадратные матрицы:

$$I_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 1, 2, \dots, N_R,$$

$$H_{\mu\nu}(R) = H_{\nu\mu}(R) = -\frac{1}{4R^2} \delta_{\mu\nu} - U_\mu(R) \delta_{\mu\nu} + \left\langle \frac{d\Phi_\mu}{dR} \left| \frac{d\Phi_\nu}{dR} \right\rangle_\Omega, \quad (4)$$

$$Q_{\mu\nu}(R) = -Q_{\nu\mu}(R) = -\left\langle \Phi_\mu \left| \frac{d\Phi_\nu}{dR} \right\rangle_\Omega.$$

В системе (2) мы ограничились конечным числом N_R уравнений и заменили полубесконечный интервал $R \in [0, \infty)$ на конечный $[0, R_{max}]$. Отметим, что данный подход есть метод приведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям Л.В. Канторовича [11].

Разложим, далее, адиабатические базисные функции $\Phi_\mu(R; \Omega)$ по сферическим гармоникам $Y_{L, l_1, l_2}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$

$$\Phi_\mu(R; \Omega) = \sum_{l_1, l_2} g_{l_1, l_2}(R; \alpha) Y_{L, l_1, l_2}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2). \quad (5)$$

Здесь L и M - полный орбитальный момент системы и его проекция на ось Z д.с.к., а l_1 и l_2 - орбитальные моменты электронов. В результате усреднения по $Y_{L, l_1, l_2}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$ и ограничения конечным числом N_α членов в разложении (4) получаем систему N_α обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов $g_{l_1, l_2}(R; \alpha)$:

$$\left[\frac{d^2}{d\alpha^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{\cos^2 \alpha} - \frac{l_2(l_2+1)}{\sin^2 \alpha} + R^2 U_\mu(R) \right] g_{l_1, l_2}(R; \alpha) + R \sum_{l_1', l_2'} C_{l_1, l_2, l_1', l_2'}(\alpha) g_{l_1', l_2'}(R; \alpha) = 0. \quad (6)$$

Коэффициенты $C_{l_1, l_2, l_1', l_2'}(\alpha)$ определены в [2-4]. В точках $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi/4$ задаются граничные условия, выражающие свойства регулярности и антисимметрии функций $g_{l_1, l_2}(R; \alpha)$:

$$\begin{aligned} g_{l_1, l_2}(R; 0) &= 0, \\ g_{l_1, l_2}(R; \pi/4) &= (-1)^{l_1+l_2+L+S} g_{l_1, l_2}(R; \pi/4), \\ \frac{dg_{l_1, l_2}(R; \pi/4)}{d\alpha} &= (-1)^{l_1+l_2+L+S+1} \frac{dg_{l_1, l_2}(R; \pi/4)}{d\alpha}. \end{aligned} \quad (7)$$

В предложенной постановке вычисление уровней энергии и волновых функций двухэлектронных систем сводится к следующей последовательности задач: а) вычисление собственных значений - термов $U_\mu(R)$ и собственных функций задачи (6)-(7); б) формирование эффективных потенциалов $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$; в) нахождение спектра энергий и радиальных функций задачи (2)-(3). Первый и третий этапы сводятся к решению задачи Штурме-Лиувилля для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка.

3. Метод численного решения

Перепишем систему уравнений (2) и (6) в виде

$$\left[-\hat{I} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x)\right] \vec{Y}(x) + \frac{d}{dx} [\hat{Q}(x) \vec{Y}(x)] + \hat{Q}(x) \frac{d\vec{Y}(x)}{dx} = \lambda \vec{Y}(x), \quad (8)$$

где λ - искомое собственное значение, $\vec{Y}^T(x) = \{y_1(x), \dots, y_N(x)\}$ - собственный вектор системы (8), $\hat{I}, \hat{U}, \hat{Q}$ и \hat{Q} - квадратные матрицы размерности $N \times N$, \hat{I} - единичная; $\hat{U}(x)$ и $\hat{Q}(x)$ - симметричная и антисимметричная матрицы. Зададим граничные условия следующим образом (граничное условие (7) в точке $\alpha = \pi/4$ реализуется просто и не меняет общую схему решения)

$$\vec{Y}(0) = \vec{Y}(x_{max}) = 0. \quad (9)$$

Установим соответствие между задачами (2)-(3) и (6)-(7) и задачей (8)-(9). Для задачи (2)-(3): $N \equiv N_R, x \equiv R, x_{max} \equiv R_{max}, \lambda \equiv E, \vec{Y} \equiv \vec{F}$ и $\hat{U} \equiv \hat{H}$. Для задачи (6)-(7): $N \equiv N_\alpha, x \equiv \alpha, x_{max} \equiv \pi/4, \lambda \equiv U_\mu(R), \hat{Q} \equiv 0, \hat{U} \equiv \hat{C}, \vec{Y} \equiv \vec{G}$, где $\hat{C} = \{g_{l_1, l_2}(R; \alpha), g_{l_1, l_2}(R; \alpha), \dots, g_{l_1, l_2}(R; \alpha)\}$, $\hat{C}(\alpha) = \{C_{ij}(\alpha)\}_{i,j=1}^{N_\alpha}$. Численное решение задачи на собственные значения (8)-(9) состоит из двух этапов: аппроксимации дифференциальной задачи разностной и решения возникающей при этом алгебраической задачи на собственные значения.

Введем на отрезке $[0, x_{max}]$ неравномерную разностную сетку: $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N = x_{max}$, в также следующие обозначения: $h_k^- = x_k - x_{k-1}, h_k^+ = x_{k+1} - x_k, h_k = 0.5(h_k^- + h_k^+), Y_k(x) = \vec{Y}(x_k), U_k = \hat{U}(x_k), Q_k = \hat{Q}(x_k), k = 0, 1, \dots, n$. Заменяем задачу (8)-(9) симметричной разностной задачей второго порядка точности [12]:

$$-\dot{I} \left(\frac{Y_{k+1} - Y_k}{h_k^+} - \frac{Y_k - Y_{k-1}}{h_k^-} \right) + U_k Y_k h_k +$$

$$+ \frac{1}{2} (Q_{k+1} + Q_k) Y_{k+1} - \frac{1}{2} (Q_k + Q_{k-1}) Y_{k-1} = \lambda Y_k h_k, \quad (10)$$

$$Y_0 = Y_n = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n-1.$$

Выражение (10) перепишем в виде

$$AX = \lambda BX, \quad (11)$$

где X - $N(n-1)$ -мерный вектор с компонентами

$$X_\ell = Y_i(x_k), \quad \ell = (k-1)n + i, \quad k = 1, 2, \dots, n-1, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

A - квадратная симметричная матрица порядка $N(n-1)$, имеющая ленточную структуру с максимальной шириной ленты $2N+1$, а матрица B - диагональная с элементами вида $B_{\ell\ell} = h_k$, $\ell = (k-1)n + i$, $i = 1, \dots, N$, $k = 1, 2, \dots, n-1$. Для нахождения первых p собственных значений и собственных функций обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения (11) используем программу SSPACE [13], в которой реализован метод итерации подпространств [13].

4. Описание пакета программ NSATOM

4.1. Структура и общая характеристика пакета NSATOM

Пакет программ NSATOM предназначен для вычисления уровней энергии и волновых функций двухэлектронных атомных систем с произвольным полным орбитальным моментом и зарядом в рамках HSA-подхода. Пакет написан на языке ФОРТРАН-IV и предназначен для эксплуатации на ЭВМ серии ЕС под управлением операционной системы ОС ЕС. Все вычисления ведутся с двойной точностью. В качестве языка входных данных используется оператор NAMELIST, что позволяет упростить подготовку и модификацию входных данных. Для повышения эффективности программ и удобства работы с пакетом предусмотрены динамическое распределение памяти и автоматическая генерация конечно-разностной сетки.

Весь процесс решения задачи разбит на четыре этапа: 1) вычисление термов $U_n(R)$ и базисных функций $g_{\ell_1 \ell_2}(R; d)$ и запись их на файл FILE1; 2) чтение термов и волновых функций из файла FILE1, формирование в соответствии с формулами (4) эффективных потенциалов $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$ и запись их на FILE2; 3) вычисление асимптотик термов $U_n(R)$ и эффективных потенциалов $H_{\mu\nu}(R)$ в дипольном приближении; 4) чтение из FILE2 потенциалов $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$, подшивание к ним дипольных асимптотик, вычисление уровней энергии и волновых функций и запись их на FILE3. Для первого и второго этапа предус-

мотрены два режима: а) начало счета; б) продолжение счета. Это позволяет полностью автоматизировать расчет и предусмотреть защиту от непредвиденных сбоев машины. В последнем случае счет продолжается с момента прерывания. В соответствии с количеством этапов решения пакет NSATOM состоит из четырех программ: NSTERM, NQMATR, ASIMP и NSEVHQ. Общая структура пакета и схема обмена файлами приведены на рис. 1. Ниже дано описание каждой из четырех программ пакета в отдельности.

В программах NSTERM, NQMATR и NSEVHQ реализовано динамическое распределение памяти. Образец главной программы, входящей в NSTERM, демонстрирующий конкретную реализацию такого распределения памяти, приведен на рис. 2. Соответствующие главные программы для NQMATR и NSEVHQ имеют аналогичный вид. Смысл параметров MTOT и IIN объяснен в комментариях. Во всех программах вычисляется и печатается последний адрес ILAST массива M. Если он превышает значение MTOT, то печатается сообщение об ошибке и происходит останов выполнения программы. В сообщении указывается недостающая память. Для выполнения требуемого расчета достаточно в соответствии с ее значением изменить параметр MTOT в главной программе и сделать повторный запуск.

Все файлы, используемые в пакете, должны быть описаны в соответствии с правилами, принятыми в ОС ЕС. В данном пакете использован бесформатный ввод-вывод, поэтому значение параметра RECFM в метке набора данных DCB для соответствующих файлов есть VBS. Максимальный размер блока BLKSIZE рекомендуется брать равным длине дорожки, а значение логической длины записи LRECL может быть произвольным (но не более BLKSIZE-4).

В пакете предусмотрен ряд остановов, которые происходят в следующих случаях:

1. Недостаточная размерность массива M
2. Некорректное задание значений исходных данных задачи
3. Превышение максимального числа итераций (для NSTERM и NSEVHQ)
4. Конец счета в автоматическом режиме (для NSTERM и NQMATR)
5. Остановы, предусмотренные в подпрограмме SSPACE [13].

4.2. Программа NSTERM

Комплекс программ NSTERM предназначен для вычисления собственных значений - термов $U_n(R)$ и собственных функций $g_{\ell_1 \ell_2}(R; d)$ задачи (6)-(7). Решение этой задачи разбито на четыре этапа: 1) ввод и обработка данных; 2) генерация конечно-разностной сетки по d ; 3) формирование матриц A и B, запись их профиля; 4) вычисление заданного количества собственных значений и собственных векторов задачи (11).

Комплекс программ NSTERM состоит из 15 подпрограмм и содержит 1964 карты. Ниже мы дадим краткое описание подпрограмм этого комплекса.

NSTERM - управляет процессом решения задачи (6)-(7). В этой программе осуществляются ввод и обработка начальных данных, автоматическая генерация квантовых чисел для каждого канала, выполняется проверка всех флагов и, наконец, печатается информация о решаемой задаче.

HSTEP - генерирует конечно-разностную сетку по α .

EIGVNC - формирует матрицы A и B, их профиль, а также задает граничные условия (7).

VPOT, VR12, - формируют матрицу потенциалов $\hat{C}(\alpha)$ в каждой точке QANG по α .

CLEBSH - вычисляет коэффициенты Клебша-Гордена

SIXJS - вычисляет 6J- символы

SSPACE - решает обобщенную алгебраическую задачу на собственные значения (II). Состоит из пяти подпрограмм. Описание SSPACE дано в [13].

EVSOLV - для заданного набора значений гиперрадиуса R вычисляет термы $U_n(R)$ и собственные функции g_{nl_2} задачи (6)-(7). Осуществляет чтение и запись термов и волновых функций, а также печать результатов счета.

Подготовке входных данных для программы NSTERM 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 № 2 содержит информацию о файлах, используемых в ходе решения задачи. Формат группы карт № 2 - NAMELIST /FILES/:

& FILES IOU=, NT18=, NT19, NT20=, NT21=, & END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOU	- номер выходного файла, по которому осуществляется вывод информации на печать	6
NT18	- временный рабочий файл	18
NT19	- временный рабочий файл	19
NT20	- в файле NT20 хранятся текущее значение R и функция $g_{nl_2}(R; \alpha)$, которая исполь-	20

зуется в качестве начального приближения в следующей точке по R. Файл сохраняется на все время счета термов.

NT21 - в файл NT21 записываются вычисленные значения термов U и волновых функций \hat{G} задачи (6)-(7). Запись выполняется в соответствии с оператором

21

```
WRITE(NT21)R, NN, NDIM, NWK, NROOT,
      (U(I), I=1, NROOT),
      ((G(I, J), I=1, NN), J=1, NROOT),
```

где R - значение гиперрадиуса, NN=NDIM*
*NGRID, NDIM - число уравнений, NGRID - число узлов сетки по α , NWK - размерность одномерного массива, в котором хранится матрица A, NROOT - число термов (корней уравнения (6)).

Группа карт № 3 содержит данные, необходимые для решения задачи (6)-(7) в заданных точках по гиперрадиусу R. Формат группы карт № 3 - NAMELIST /RMESH/

&RMESH IREAD=, IRBEG=, IREND=, NGRID=,
RGRID=, RVALUE=, NRECRD=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IREAD	- задает режимы работы программы: = 0 - начало счета. Начальное приближение к собственным функциям вырабатывается программой = 1 - продолжение счета. Начальное приближение считывается с файла NT20	0
IRBEG	- начальное значение переменной цикла по R	I
IREND	- конечное значение переменной цикла по R (приращение равно I)	I
NGRID	- размерность массива RGRID (не более 25). Значение NGRID всегда нечетно.	3
RGRID	- массив данных для разбиения интервала изменения гиперрадиуса $R \in [R_{min}, R_{max}]$ на подинтервалы RGRID(i-1), RGRID(i+1) с постоянным шагом $h_R = RGRID(i)$ на каждом из подинтервалов. Здесь RGRID(1)=R _{min} .	

работке начальных данных, автоматическая генерация квантовых чисел для каждого канала, выполняется проверка входных данных, значений флагов и квантовых чисел рассматриваемой задачи, вызываются основные подпрограммы и печатается информация о решаемой задаче.

HQMAT - для заданного набора значений гиперрадиуса R считывает из файла NT20 записанные программой NSTERM термы и волновые функции, формирует эффективные потенциалы H и Q и записывает их на файл NT21

HQPOT - по формулам (4) вычисляет матричные элементы $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$ в каждой точке по R. Численное дифференцирование осуществляется с использованием конечно-разностных формул 2-го и 4-го порядков точности, а также с помощью кубического интерполяционного сплайна (по желанию пользователя).

SPLINE - вычисляет коэффициенты кубического интерполяционного сплайна

SEVAL - вычисляет значение кубического сплайна

SEVALP - вычисляет значение производной кубического сплайна

MULTB - перемножает матрицу B и вектор решения FUN

VPOT, VRI2, QANG, SIXJS, CLEBSH - описаны в предыдущем разделе.

Подготовка входных данных для программы HQMATR. Описание данных начинается с карты I. Она предназначена для идентификации вводимых данных. Формат карты 8A8.

Переменная	Назначение
TITLE	Заголовок задачи, 64 символа

Группа карт № 2 содержит информацию об используемых в программе файлах. Формат группы карт № 2 - NAMELIST /FILES/:

&FILES IOUT=, NT18=, NT19=, NT20=, NT21=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOUT	- номер выходного файла, по которому осуществляется вывод информации на печать	6
NT18	- в этом файле хранится текущее значение R и другая рабочая информация. Сохраняется на все время счета	18
NT19	- временный рабочий файл	19
NT20	- в этом файле хранятся термы и собственные функции σ , вычисленные на предыдущем этапе программой NSTERM	

NT21 - в файле NT21 записываются матричные элементы 21
 $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$ с помощью оператора
 WRITE(NT21) R, NROOT, (U(I), I=1, NROOT),
 ((Q(I,J), I=1, NROOT), J=1, NROOT),
 ((H(I,J), I=1, NROOT), J=1, NROOT)

Группе карт № 3 содержит информацию, необходимую для организации процесса вычисления матричных элементов $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$ в заданных точках по R. Формат этой группы карт - NAMELIST/RMESH/

&RMESH IREAD=, IRBEG=, IREND=, NGRID=, RGRID=,
 RVALUE=, NRECRD=, NRECHQ=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
------------	------------	-----------------------

Переменные IREAD, IRBEG, IREND, NGRID, RGRID, RVALUE имеют тот же смысл, что и в группе карт № 3 из пункта 4.2

NRECRD	- число записей в файле NT20, после которых записаны вычисленные по программе NSTERM термы и собственные функции	0
NRECHQ	- число записей в файле NT21 до начала счета матричных элементов H и Q	0

Группа карт № 4 содержит информацию о способе вычисления матричных элементов. Формат группы карт № 4 - NAMELIST /TERMAT/

&TERMAT NROOT=, IPRINT=, IPRTHQ=, INQ=,
 NPART=, NP1=, ..., NP5=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
------------	------------	-----------------------

NROOT	- размерность матрицы потенциалов (должна совпадать с числом NROOT вычисленных термов)	1
IPRINT	- имеет тот же смысл, что и в пункте 4.2	
IPRTHQ	- флаг печати вычисленных матричных элементов $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$ в каждой заданной точке R =0 - печать не производится	0

- =1 - печатаются термы U_{μ} и матрицы $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$ в каждой точке по R
- INQ - задает способ вычисления производных базисных функций по R
- =1 - используются трехточечные конечно-разностные формулы 2-го порядка точности
- =2 - используются пятиточечные конечно-разностные формулы 4-го порядка точности
- =3 - используется кубическая сплайн-интерполяция функций (по пяти точкам). Дифференцирование по R осуществляется аналитически.
- NPART, NP1, ..., NP5 - имеют тот же смысл, что и в пункте 4.2

Группа карт № 5 содержит информацию о рассматриваемой атомной системе и идентична группе карт № 5 из пункта 4.2.

В результате работы программы NQMTR на файл NT21 будут записаны матричные элементы $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$ для заданного набора значений R .

4.4. Программа ASYMP

Программа ASYMP предназначена для вычисления асимптотик термов $U_{\mu}(R)$ и эффективных потенциалов $H_{\mu\mu}(R)$ с точностью $O(R^{-2})$. Эквивалентные дипольные операторы \tilde{A} и \tilde{L} , снимающие кулоновское вырождение во втором порядке теории возмущений по обратным степеням R , построены в работах [14,15]. Правильные волновые функции нулевого приближения в представлении полного момента строятся с помощью линейной комбинации кулоновских параболических функций во вращающейся системе координат. Коэффициенты этого разложения находятся из решений секулярных уравнений для \tilde{A} и \tilde{L} . Соответствующие асимптотические разложения для $U_{\mu}(R)$ и $H_{\mu\mu}(R)$ при больших R имеют вид

$$U_{\mu}(R) \approx -\frac{Z^2}{n^2} - \frac{2(Z-1)}{R} + \frac{U_{\mu}^{(2)}}{R^2}, \quad (12)$$

$$H_{\mu\mu}(R) \approx -\frac{Z^2}{n^2} - \frac{2(Z-1)}{R} + \frac{H_{\mu\mu}^{(2)}}{R^2}, \quad (13)$$

где $U_{\mu}^{(2)}$ и $H_{\mu\mu}^{(2)}$ - собственные значения дипольных интегралов движения \tilde{A} и \tilde{L} (подробности см. в [15]).

Программа ASYMP состоит из программы-редактора и 5 подпрограмм - всего 279 карт. Программа-редактор EDASYMP выполняет следующие действия: определяет размерности всех массивов, читает и обрабатывает исходные данные, редактирует остальные подпрограммы комплекса ASYMP и контролирует их выполнение. В подпрограмме ASHEL генерируются параболические квантовые числа атома Z_e , решается секулярное уравнение и распечатываются потенциалы. Подпрограммы SLMATR, DELTA и GAMJM вычисляют матричные элементы. Подпрограмма JACOBV решает алгебраическую задачу на собственные значения и собственные функции.

Для ввода данных используются две группы карт. Первая группа карт содержит информацию о файлах. Она имеет формат - NAMELIST /FILES/ &FILES IOUT=, NT18=, NT19=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOUT	- номер выходного файла	6
NT18	- временный рабочий файл	18
NT19	- номер библиотечного набора данных, в котором содержатся подпрограммы комплекса ASIMP.	19

Группе карт № 2 содержит информацию о рассматриваемой задаче. Ее формат - NAMELIST /ASYMP/

&ASYMP Z=, NPOR=, LMIN=, LMAX=, LSTEP=, KEY=, IPRINT=, RBEG=, RSTEP=, RMAX=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
Z	- заряд ядра	1.
NPOR	- порог, к которому сходятся термы	1
LMIN	- минимальное значение полного момента системы	0
LMAX	- максимальное значение полного момента системы	1
LSTEP	- шаг по полному моменту	1
KEY	- флаг вычисления дипольных асимптотик =0 - вычисляется асимптотика потенциалов $H_{\mu\mu}$ =1 - вычисляется асимптотика термов U_{μ}	0
IPRINT	- уровень печати =0 - минимальный уровень печати.	0

Печатается информация о задаче, рассчитываются коэффициенты при R^{-2} и асимптотики в заданном наборе точек по R .

>0 - расширенная печать.

Дополнительно рассчитываются матричные элементы дипольного оператора

RBEG - левый конец интервала изменения R 5.
 RMAX - правый конец интервала изменения R 40.
 RSTEP - шаг по R на интервале $[R_{min}, R_{max}]$ 1.

В результате работы программы ASYMP пользователь имеет необходимую информацию о дипольных асимптотиках термов и эффективных потенциалов. Эта информация используется при вычислении уровней энергии и радиальных волновых функций двухэлектронных систем - подшивкой к вычисленным потенциальным кривым их асимптотик.

4.5. Программа HSEVHQ

Комплекс программ HSEVHQ предназначен для вычисления уровней энергии и радиальных функций гелиеподобных систем, а также средних значений $\langle R^n \rangle$, $n = -2, -1, 1, 2$. Решение задачи (2)-(3) разбито на четыре этапа: 1) ввод и обработка данных; 2) генерация конечно-разностной сетки по R ; 3) формирование матриц A и B и их профиля; 4) вычисление заданного количества собственных значений и собственных векторов задачи (II). Программа HSEVHQ состоит из 3 подпрограмм и содержит 834 карты. Ниже дано краткое описание подпрограмм.

EIGVHQ - предназначена для ввода и обработки начальных данных и печати информации о решаемой задаче

EVSOL - генерирует конечно-разностную сетку по R , формирует матрицы A и B , их профиль, задает граничные условия (3), вычисляет заданное количество собственных значений и векторов задачи (2)-(3), величины $\langle R^n \rangle$, $n = -2, -1, 1, 2$, и печатает результаты счета.

HQROT - формирует матрицы потенциалов $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$, осуществляет по желанию пользователя их сплайн-интерполяцию, подшивку к $H_{\mu\mu}(R)$ дипольных асимптотик, выполняет при наличии точек квазипересечения термов диабетическую интерполяцию $[I6, I7]$ в заданной области изменения R .

Подготовке входных данных для программы HSEVHQ. Описание начинается с карты I, предназначенной для идентификации вводимых данных. Формат карты - 8A8.

Переменная	Назначение
TITLE	Заголовок задачи, 64 символа

Группа карт № 2 предназначена для описания рассматриваемой двухэлектронной системы. Формат этой группы карт - 2A4, 2A6.

Текстовые переменные	Назначение	Значение по умолчанию
ATOM	- обозначение двухэлектронной системы	H ⁺
TERM	- терм: $(2S+1)L\pi$, где S - спин системы, L - ее полный момент, π - четность	1S ⁺
CONFIG	- электронная конфигурация в приближении независимых электронов. (Может быть использована любая другая классификация состояний).	1S ⁺ S

Группе карт № 3 содержит информацию о файлах, используемых в ходе решения задачи. Формат группы карт № 3 - NAMELIST /FILES/:

&FILES IOUF=, NT19=, NT20=, IOUF=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IOUF	- номер выходного файла, по которому осуществляется вывод информации на печать	6
NT19	- временный рабочий файл	19
NT20	- в файле NT20 хранятся термы и эффективные потенциалы H и Q , вычисленные программой HQMATR	20
IOUF	- в файл IOUF записываются вычисленные значения энергий и радиальных функций задачи (2)-(3). =0 - запись не производится >20 - выполняется бесформатная запись с помощью оператора WRITE (IOUF) ATOM, TERM, CONFIG, NN, NROOT, (E(I), I=1, NROOT), ((FUN(I,J), I=1, NN), J=1, NROOT).	0

Здесь E и FUN соответственно уровни энергии и радиальные функции рассматриваемой задачи, $ATOM$, $TERM$ и $CONFIG$ - описаны выше, $NN=NDIM \cdot NSTEP$, где $NDIM$ - размерность системы (2), $NSTEP$ - число узлов конечно-разностной сетки по R , $NROOT$ - число собственных значений радиальной задачи (2)-(3), т.е. число уровней энергии, которые необходимо определить.

Группа карт № 4 содержит информацию, необходимую для решения радиальных уравнений (2). Формат группы карт № 4 - `NAMLIST /GRID/`:

```
&GRID NDIM=, MDIM=, IDIM=, NROOT=, NGRID=,
      RGRID=, NITEM=, RTOL=, SHIFT=, NSPL=,
      IPRINT=, IPRTPN=, IPRSTP=, NRECRD= &END
```

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NDIM	- размерность системы радиальных уравнений (2), $NDIM \leq MDIM$	I
MDIM	- исходная размерность матриц потенциалов $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$, записанных на файле NT20	I
IDIM	- задает номер потенциальной кривой $H_{\mu\mu}(R)$. Используется для вычисления уровней энергии и радиальных функций в адиабатическом приближении при значении NDIM равном I, в противном случае IDIM игнорируется	I
NROOT	- число уровней энергии и радиальных функций, вычисляемых пользователем ($NROOT < 20$)	I
NGRID	- размерность массива RGRID (не более 25). NGRID всегда нечетно	3
RGRID	- массив данных для разбиения интервала изменения гиперрадиуса $R \in [R_{min}, R_{max}]$ на подинтервалы с постоянным шагом на каждом из подинтервалов. R_{min} мо-	-

жет быть нулем. Формируется следующим образом: $RGRID(1)=R_{min}$, $RGRID(NGRID)=R_{max}$.

Значения $RGRID(I)$ (I - четные и $2 \leq I < NGRID$) задают шаг по R на подинтервале $[RGRID(I-1), RGRID(I+1)]$.

- NITEM - максимальное число итераций 20
- RTOL - относительная точность вычисления собственных значений радиальной задачи (II) 1.D-8
- SHIFT - сдвиг спектра. При решении задачи (2)-(3) вычисляются NROOT собственных значений и векторов, ближайших к сдвигу SHIFT. Использование сдвига позволяет вычислять дважды возбужденные состояния [IO].
- NSPL - число табличных потенциалов $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$, записанных на файле NT20. Если NSPL=0, то число значений в таблице совпадает с числом узлов NSTEP конечно-разностной сетки, генерируемой в соответствии с NGRID и RGRID. Из файла NT20 читается столько записей, сколько имеется узлов в сетке по R. Если NSPL > 0 ($NSPL < NSTEP$), то из файла NT20 читается NSPL записей потенциалов $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$. Эти потенциалы интерполируются с помощью кубической сплайн-интерполяции, после чего автоматически восстанавливаются значения $H_{\mu\nu}$ и $Q_{\mu\nu}$ во всех узлах конечно-разностной сетки. 0
- IPRINT - уровень печати: 0
 - =0 - минимальный уровень печати. Печатаются входные данные, число узлов сетки NSTEP, число уравнений NDIM, NROOT уровней энергии в а.е., R_{μ} и ϵB , а также средние значения $\langle R^n \rangle$, $n = -2, -1, 1, 2$.
 - =1 - расширенная печать. Дополнительно распечатываются эффективные потенциалы $H_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$
 - =2 - максимальная печать. Распечатываются матрицы A и B, их профиль, а также дополнительная информация, используемая при отладке.

IPRTFN - флаг печати радиальных функций 0
 =0 - печать не производится
 =I - печатаются NROOT радиальных функций с шагом IPRSTP по R
 IPRSTP - шаг печати радиальных функций 10
 NRECRD - число записей в файле NT20, после которых записаны табличные потенциалы H_{mv} и Q_{mv} 0

В группе карт № 5 содержится дополнительная информация о рассматриваемой системе. Ее формат - NAMELIST /ATMSYS/
 &ATMSYS Z=, EGRND=, &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
Z	- заряд ядра	I.
EGRND	- энергия основного состояния одноэлектронной системы в а.е.	-0.5

Группа карт № 6 содержит информацию о дипольных асимптотиках потенциалов и точках сшивки с численными потенциалами. Формат этой группы карт - NAMELIST /ASYMP/:

&ASYMP IASYMP=, NPOR=, RAS=, CFDIP= &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
IASYMP	- флаг задания асимптотик =0 - асимптотики не используются =I - асимптотики подшиваются к потенциальным кривым $H_{mv}(R)$	0
NPOR	- массив размерности NDIM содержит номера порогов, к которым сходятся в порядке возрастания потенциальные кривые H_{mv}	
RAS	- массив размерности MDIM. В нем содержится информация о точках сшивки каждой потенциальной кривой $H_{mv}(R)$ со своей асимптотикой.	
CFDIP	- массив размерности MDIM содержит коэффициенты при R^{-2} в разложении (3)	

Недиагональные метричные элементы $H_{mv}^{(0)}$ и $Q_{mv}^{(0)}$ сшиваются в точке RSTEP(NSPL) с асимптотиками вида $H_{mv}^{(0)}/R^2$ и $Q_{mv}^{(0)}/R^2$, где коэффициенты $H_{mv}^{(0)}$ и $Q_{mv}^{(0)}$ определяются из условия сшивки с численными значениями потенциалов в точке RSTEP(NSPL).

В программе HSEVHQ предусмотрена возможность диабатической интерполяции [16,17] в окрестности точек квазипересечения термов. Формат группы карт № 7 - NAMELIST /CROSSP/
 &CROSSP NCROSS=, NCROSS1=, NCROSS2=,
 RCROSS1=, RCROSS2= &END

Переменная	Назначение	Значение по умолчанию
NCROSS	- число точек квазипересечения (если = 0 диабатическая интерполяция не выполняется)	0
NCROSS1, NCROSS2	- номера пересекаемых потенциальных кривых. Например, для $^2P^o$ состояния H^- - NCROSS1=2, NCROSS2=3	-
RCROSS1, RCROSS2	- левая и правая границы области диабатической интерполяции. Например, для $^2P^o$ состояния H^- RCROSS1=12.5, а RCROSS2=14.7	-

5. Вычисление основного состояния отрицательного иона водорода

Работа пакета HSATOM демонстрируется на примере расчета основного состояния H^- . Для всех этапов решения этой задачи управляющие операторы ОС ЕС формируются единым образом. Считаем, что каждая из 4 программ пакета оттранслирована, отредактирована и записана под своим именем в библиотеку загрузочных модулей ZLIB. Одним из возможных вариантов управляющих операторов ОС ЕС может быть следующий пакет:

```
//HSATOM JOB ...
//GEN EXEC PGM=IEBGENER
//SYSPRINT DD DUMMY
//SYSIN DD DUMMY
//SYSUT1 DD *
        начальные данные
//SYSUT2 DD DSN=*&P&P&PARM, UNIT=SYSDA, DISP=(,PASS),
// DCB=(BLKSIZE=80,RECFM=F,LRECL=80),
// SPACE=(80,(40,10),RLSE)
```

```
//EV EXEC PGM=PROGRM, REGION=1100K
//STEPLIB DD DSN=ZLIB, DISP=SHR
//FT05FOO1 DD DSN=*GEN.SYSUT2, DISP=(OLD,PASS)
//FT06FOO1 DD SYSCUT=A,DCB=(BLKSIZE=121,RECFM=UA)
//FT19FOO1 DD DISP=(NEW,PASS), DSN=&RAB19,
UNIT=SYSDA, SPACE=(TRK,(10,2))
:
//FT21FOO1 DD DSN=FILEN, DISP=OLD
//
```

Здесь PROGRAM - имя соответствующего загрузочного модуля из библиотеки ZLIB. Под номером I9 описан временный рабочий файл, а под номером 21 - постоянный файл пользователя. Остальные файлы описываются аналогично.

Ниже приведено задание начальных данных и результаты счета для каждой из 4 программ. Начальные данные для расчета термов и адиабатических базисных функций в HSTERM задаются следующим образом:

```
ISE HYPERSPHERICAL TERMS FOR H-
&FILES IOU=6; NT18=18, NT19=19, NT20=20, NT21=21 &END
&RMESH IREAD=0, IRBEG=1, IREND=264,
NGRID=13,
RGRID=0.1, 0.1, 12. 0.2, 20., 0.25, 30., 0.5, 40., 1., 50., 2., 60.,
RVALUE=0., NRECRD=0 &END
&TERMAT NROOT=, SHIFT=4., NITEM=30,
IPRINT=0, IPRSTP=1, IPRTFN=0,
NPART=1, NP1=440, NP2=0 &END
&ATMSYS L=0, ISPIN=0, IPI=0. Z=1., LMAX=7 &END
```

В результате работы HSTERM имеем следующие значения термов $\mathcal{U}_\mu(R)$, $\mu=1, 2, \dots, 6$, в точке $R=5$: -1.06984, -0.22589, 0.017868, 0.82736, 1.44931, 2.01882.

Начальные данные для программы HQMATR задаются следующим образом:

```
H- ISE HYPERSPHERICAL MATRIX ELEMENTS
&FILES &END
&RMESH &END
&TERMAT NROOT=6, IPRINT=0, IPRTHQ=1,
INQ=3, NPART=1, NP1=440 &END
&ATMSYS &END
```

Для программ HSTERM и HQMATR требуются одни и те же группы карт № 2, 3 и 5.

Вычисление эффективных потенциалов с ключом INQ=3 приводит к следующим значениям матричных элементов $\tilde{H}_{\mu\nu}(R)$ и $Q_{\mu\nu}(R)$, $\mu \leq \nu = 1, \dots, 6$, в точке $R=5$:

$$\tilde{H}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1.045E+1 & .2933E-1 & -.3366E-1 & .2357E-3 & .1953E-2 & .1136E-1 \\ & -.1504E+0 & .1704E-1 & .5947E-2 & .1119E-1 & .1661E-1 \\ & & .8405E-1 & .7456E-2 & .9422E-2 & .2325E-1 \\ & & & .8233E+0 & .1932E-2 & .9246E-2 \\ & & & & .1448E+1 & .2014E-1 \\ & & & & & .2119E+1 \end{pmatrix},$$

$$Q_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} .0 & .1448E+0 & .1068E+0 & .1181E-1 & .9117E-2 & .1521E-1 \\ & .0 & .2465E+0 & .1450E-1 & .2769E-1 & .1972E-1 \\ & & .0 & -.2182E-1 & -.2508E-1 & .2247E-2 \\ & & & .0 & -.5452E-1 & -.3370E-1 \\ & & & & .0 & .1379E-1 \\ & & & & & .0 \end{pmatrix},$$

где

$$\tilde{H}_{\mu\nu}(R) = \left\langle \frac{d\Phi_\mu(R; \Omega)}{dR} \middle| \frac{d\Phi_\nu(R; \Omega)}{dR} \right\rangle.$$

Исходные данные для программы ASYMP имеют вид

```
&FILES IOU=6, NT18=18, NT19=19 &END
&ASYMP Z=1., NPOR=1, LMIN=0, LMAX=0,
LSTEP=1, KEY=0, IPRINT=1,
RBEG=4., RMAX=60., RSTEP=0.1 &END
```

В результате счета по программе ASYMP имеем следующие значения для коэффициентов при R^{-2} :

0., -5.08276, 7.08276, -16.1991, 3.95125, 20.24787.

Сравнение численных термов с асимптотическими проведено в работе [10].

Для последнего этапа HSEVHQ начальные данные задаются следующим образом:

```
GROUND STATE ENERGY FOR H-
H- ISE IS2
&FILES IOU=6, IOUF=0, NT19=19, NT20=20 &END
&GRID NDIM=6, MDIM=6, IDIM=1, NROOT=1,
NGRID=3, NRECRD=0,
RGRID=0.01, 0.01, 20.01,
SHIFT=1.0556, NSPL=249,
IPRINT=0, IPRTFN=0, IPRSTP=10, &END
&ATMSYS Z=1., EGRND=-0.5 &END
```

```

&ASYMP IASYMP=1, NPOR=1,2,2,3,3,3,
RaS=14.0,23.8,35.0,36.6,39.0,24.8,
CFDIP=0.,-5.0828,7.0828,-16.199,
      3.9513,20.2479          &END
&CROSSP NCROSS=0           &END

```

В результате работы программы HSEVHQ имеем следующее значение для энергии основного состояния H^- в шестиканальном приближении HSA - подхода: $E_0 = -0.52775 \pm 0.0001$ а.е.

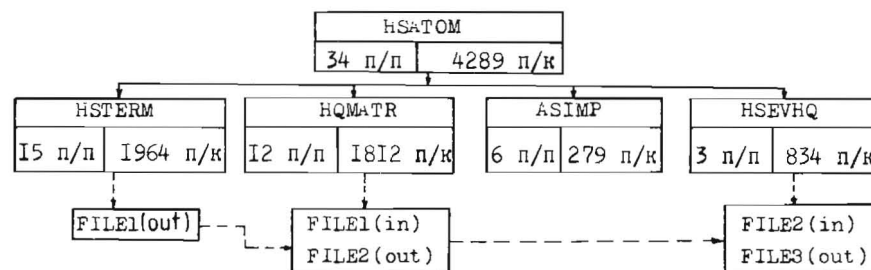


Рис. 1. Общая структура пакета HSATOM и схема обмена файлами.

С Следующие две карты используются для определения максимальной размерности МТОТ массива М, требуемой для решения задачи. Об-
С щая память в килобайтах определяется как
С $ILAST * 4 / 1024 + 100$,
С где ILAST - последний использованный адрес в массиве М. Для из-
С менения максимального размера памяти, необходимой для проведения
С вычислений, следует изменить значения МТОТ и, соответственно, -
С массива М(МТОТ).

```
DIMENSION M(200000)
```

```
MTOТ = 200000
```

```
IIN - номер файла, по которому осуществляется ввод  
данных
```

```
IIN = 5
```

```
CALL HSTERM (M, MTOТ, IIN)
```

```
STOP
```

```
END
```

Рис. 2. Образец главной программы комплекса HSTERM

Для сравнения приведем некоторые другие известные результаты:
 $E_0^{var} = -0.527751$ а.е. - вариационный расчет [18], $E_0^{CI35} = -0.52751$ а.е.
- метод наложения конфигураций [19], $E_0^{MCHF11} = -0.52751$ а.е. - мно-
гоконфигурационный метод Хартри-Фока [20]. Подробный анализ термов и
уровней энергии в зависимости от числа уравнений и числа узлов конеч-
но-разностной сетки дан в работе [10]. Средние значения $\langle R^n \rangle$,
 $n = -2, -1, 1, 2$ соответственно равны: 0.117, 0.298, 4.302, 23.308.
Пакет HSATOM использовался для вычисления основных состояний
He, Li⁺ и Be⁺⁺ [9] и расчета спектра двукратно возбужденных состояний
 H^- ниже второго порога [10]. Во всех случаях получено хорошее согла-
сие с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными
($\sim 10^{-4}$ а.е.).

В заключение авторы выражают благодарность Д.Г.Абрешкевичу и
В.Ю.Пойде за помощь в работе.

Литература

1. Fano U., Rau A.R.P. Atomic collisions and spectra. J.Wiley, New York, 1985.
2. Fano U. Rep. Progr. Phys., 46 (1983) 97.
3. Lin C.D. Adv. Atom. Mol. Phys., 22 (1986) 77.
4. Macek J. J.Phys. B, 1 (1968) 831.
5. Greene C.H. Phys. Rev., A23 (1981) 661.
6. Hornos J.E. et al. Phys. Rev., A33 (1986) 2212.
7. Christensen - Dalsgaard B.L. Phys. Rev., A29 (1984) 470.
8. Watanabe S. Phys. Rev., A25 (1982) 2074.
9. Абрешкевич А.Г., Гейсак М.И., Лендвел В.И., Пойде В.Ю., Пузынин И.В. Препринт ОИЯИ, Р4-88-91, Дубна, 1988.
10. Абрешкевич А.Г., Абрешкевич Д.Г., Виноцкий С.И., Касчиев М.С., Пойде В.Ю., Пузынин И.В. Препринт ОИЯИ, Р4-88-640, Дубна, 1988.
11. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. ГИТТЛ, Москва, 1952.
12. Касчиев М., Касчиева В. Препринт ОИЯИ, Р5-12787, Дубна, 1979.
Касчиев М., Мележик В.С. Препринт ОИЯИ, Р4-12671, Дубна, 1979.
13. Bathe K.-J. Finite element procedures in engineering analysis. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1982.
14. Nikitin S.I., Ostrovsky V.N. J.Phys. B, 11(1978)1681; 15(1982) 1609.

15. Kadomtsev M.B., Vinitsky S.I., Vuceljovich F.R. Phys.Rev., A36 (1987) 4652.
16. Lin C.D. Phys. Rev. Lett., 35 (1975) 1150.
17. Botero J. Phys.Rev., A35 (1987) 36.
18. Pekeris C.L. Phys. Rev., 126 (1962) 1470.
19. Weiss A.W. Phys. Rev., 122 (1961) 1826.
20. Fischer C.F. Hartree-Fock method for atoms. Acad. Press., N.Y., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
II октября 1988 года.

Абрашкевич А.Г. и др.

P11-88-745

HSATOM – пакет прикладных программ для расчета спектральных характеристик гелиеподобных систем в гиперсферических координатах

Дано описание пакета программ HSATOM для вычисления уровней энергии и волновых функций гелиеподобных систем в гиперсферическом адиабатическом подходе с точностью не хуже 10^{-4} а.е. Для аппроксимации соответствующих задач Штурма-Лиувилля применяется разностная схема второго порядка точности. При решении полученной алгебраической задачи используется метод итерации подпространств. Работа пакета иллюстрируется на примере расчета основного состояния отрицательного иона водорода.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Abrashkevich A.G. et al.

P11-88-745

HSATOM – Computer Code Package for Calculation of Spectral Characteristics of Helium-Like Systems in Hyperspherical Coordinates

Description is given for the computer code package HSATOM assigned to compute the energy levels and wave functions of helium-like systems in the hyperspherical adiabatic approach with an accuracy of about 10^{-4} a.u. Approximation of the corresponding Sturm-Liouville problems is made with the difference scheme of the second order of accuracy. The obtained algebraic problem is solved by subspace iteration method. Work of the package is demonstrated by calculating the ground state of a negative hydrogen ion.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988