

547 / 4-80



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

B-486

P5 - 12787

С.И.Виницкий, В.С.Мележик, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

ПРОГРАММА ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

1979

P5 - 12787

С.И.Виницкий, В.С.Мележик, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

ПРОГРАММА ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ЧАСТИЧНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ
ДЛЯ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Виницкий С.И. и др.

P5 - 12787

Программа численного решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы линейных дифференциальных уравнений второго порядка

Описан алгоритм численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы большого числа линейных дифференциальных уравнений второго порядка. Алгоритм разработан на основе непрерывного аналога метода Ньютона. Приведена программа SYSTEM на языке ФОРТРАН, реализующая этот алгоритм. Программа позволяет решать на 38M CDC-6500 системы до 40 уравнений.

Программа успешно использовалась для решения задач мезомолекулярной физики, в которых коэффициенты системы уравнений задавались в виде таблиц.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Vinitsky S.I. et al.

P5 - 12787

Program of the Sturm-Liouville Partial Problem Numerical Solution for the System of the Second-Order Linear Differential Equations

An algorithm of the Sturm-Liouville problem numerical solution for a system of bound differential equations obtained on the basis of the Newton method continuous analogue is considered. The "SYSTEM" program in FORTRAN language realising the algorithm is given. The program enables one to solve systems up to 40 equations with the CDC-6500 computer.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1979

© 1979 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

Введение

Задача Штурма-Лиувилля для системы большого числа дифференциальных уравнений второго порядка часто возникает в различных областях математической физики. В качестве примеров можно привести задачи о вычислении уровней энергии M^- -мезомолекул /1/, о колебании связанных квантовых осцилляторов /2/, задачи ядерной физики /3/, решение многоканальной задачи рассеяния /4/.

В данной работе описана программа SYSTEM, которая предназначена для численного решения частичной задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений, то есть задачи о вычислении собственных значений и собственных функций системы до 40 линейных дифференциальных уравнений второго порядка, удовлетворяющих однородным граничным условиям. Программа успешно использовалась для решения задач мезомолекулярной физики /1/, в которых коэффициенты системы уравнений задавались в виде таблиц.

I. Постановка задачи

Для системы линейных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\varphi^{(1)}(\lambda, \bar{y}) \equiv \bar{y}''(x) - 2Q(x)\bar{y}'(x) + (\lambda I - H(x))\bar{y}(x) = 0 \quad (I.a)$$

требуется найти собственное значение λ и соответствующее собственное решение $\bar{y}(x)$, удовлетворяющее граничным условиям:

$$\varphi^{(2)}(\lambda, \bar{y}) \equiv S(\lambda, a)\bar{y}'(a) + L(\lambda, a)\bar{y}(a) = 0, \quad (I.б)$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda, \bar{y}) \equiv T(\lambda, b)\bar{y}'(b) + F(\lambda, b)\bar{y}(b) = 0. \quad (I.в)$$

Здесь $Q(x)$ и $H(x)$ - матрицы размерности $N \times N$, заданные на отрезке $[a, b]$ в виде таблиц с произвольным шагом по x ; I - единичная матрица; $S(\lambda, a)$, $L(\lambda, a)$, $T(\lambda, b)$, $F(\lambda, b)$ - матрицы размерности $N \times N$; $\bar{y}''(x)$, $\bar{y}'(x)$, $\bar{y}(x)$ - вектора размерности N .

Предполагается, что изолированное решение задачи (I) $(\lambda^*, \bar{y}^*(x))$ существует, и известно начальное приближение $(\lambda_0, \bar{y}_0(x))$ к этому решению.

2. Краткое описание метода решения

Для решения задачи (I) применяется непрерывный аналог метода Ньютона. Этот метод подробно рассмотрен в работах /5/ и является развитием идей работ /6/. Здесь приведем краткое описание метода применительно к задаче (I).

Задача (I) доопределяется условием нормировки:

$$\varphi^{(4)}(\lambda, \bar{y}) \equiv \sum_{i=1}^N \left[\int_a^b y_i^2(x) dx + \int_a^b (c_i \Psi_i(\lambda, x))^2 dx \right] - 1 = 0. \quad (I.г)$$

Здесь $\Psi_j(\lambda, x)$ - асимптотическое выражение при $x \rightarrow \infty$ для искомой собственной функции $y_j(x)$, которое считается известным. Условие нормировки в такой форме применимо для задачи (I), если решение ищется на полубесконечном интервале $[a, \infty)$ в классе квадратично интегрируемых функций. Константы c_j находятся из условия "сшивания" $y_j(x)$ и $\Psi_j(\lambda, x)$ в некоторой достаточно удаленной точке $x = b$

$$y_j(b) = c_j \Psi_j(\lambda, b). \quad (2)$$

Если задача (I) решается на конечном отрезке $[a, b]$, то в условии (I.г) следует положить $c_j = 0$.

Задачу (I) можно рассматривать как нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(z) = 0,$$

где φ - совокупность операторов $\{\varphi^j\}$, $j = 1, \dots, 4$, определенных в (I), $z = (\lambda, \bar{y}(x)) \in R \times \{C^2[a, b]\}$. Для построения эволюционного уравнения непрерывного аналога метода Ньютона z полагается зависящим от непрерывного параметра t ($0 \leq t < \infty$), $z(t) = (\lambda(t), \bar{y}(x, t))$.

Тогда вместо задачи (I) решается эволюционное уравнение:

$$\begin{aligned} \varphi'(z(t)) \cdot z'(t) &= -\varphi(z(t)), \\ z(0) &= (\lambda_0, \bar{y}_0(x)). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь φ' - производная Фреше оператора φ , а

$$z'(t) = (\mu(t), \bar{v}(x, t)), \quad (4)$$

где $\mu(t) = \lambda'(t)$, $\bar{v}(x, t) = \bar{y}'_t(x, t)$.

Сходимость решения задачи (3) при $t \rightarrow \infty$ к искомому решению

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t) - z^*\| = 0$$

в некоторой окрестности этого решения рассмотрена в работе /7/ для эрмитовых операторов.

3. Дискретное представление по параметру t

Дискретная аппроксимация эволюционного уравнения (3) по параметру t реализована на основе метода Эйлера /5/. Полуось

$0 \leq t < \infty$ разбивается узловыми точками t_k ($k = 0, 1, 2, \dots$)

$$t_{k+1} = t_k + \tau_k, \quad t_0 = 0,$$

а формула (4) заменяется разностными аналогами:

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k \mu_k,$$

$$\bar{y}_{k+1}(x) = \bar{y}_k(x) + \tau_k \bar{v}_k(x),$$

где $\lambda_k = \lambda(t_k), \mu_k = \mu(t_k),$

$$\bar{y}_k \equiv \bar{y}_k(x) = \bar{y}(x, t_k), \bar{v}_k \equiv \bar{v}_k(x) = \bar{v}(x, t_k).$$

При такой аппроксимации эволюционная задача (3) для задачи (I) может быть представлена в виде:

$$\varphi^{(1)}(\lambda_k, \bar{v}_k) = -\mu_k \bar{y}_k(x) - \varphi^{(1)}(\lambda_k, \bar{y}_k(x)),$$

$$\varphi^{(2)}(\lambda_k, \bar{v}_k) = -\mu_k (S'_{\lambda_k} \bar{y}'_k(a) + L'_{\lambda_k} \bar{y}_k(a)) - \varphi^{(2)}(\lambda_k, \bar{y}_k(a)),$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda_k, \bar{v}_k) = -\mu_k (T'_{\lambda_k} \bar{y}'_k(b) + F'_{\lambda_k} \bar{y}_k(b)) - \varphi^{(3)}(\lambda_k, \bar{y}_k(b)), \quad (5)$$

$$2 \left[\sum_{j=1}^N \int_a^b y_{jk}(x) v_{jk}(x) dx + \mu_k \sum_{i=1}^N c_j \int_b^{\infty} \psi_j(\lambda_k, x) \psi'_j(\lambda_k, x) dx \right] =$$

$$= -\varphi^{(4)}(\lambda_k, \bar{y}_k(x)).$$

Проблема заключается в нахождении итерационных поправок $\bar{v}_k(x)$ и μ_k , если приближения к искомому решению $\bar{y}_k(x)$ и λ_k известны.

Поправка $\bar{v}_k(x)$ ищется в виде

$$\bar{v}_k(x) = \bar{\omega}_k(x) + \mu_k \bar{u}_k(x), \quad \text{где}$$

$\bar{\omega}_k(x)$ - решение краевой задачи:

$$\varphi^{(1)}(\lambda_k, \bar{\omega}_k) = -\varphi^{(1)}(\lambda_k, \bar{y}_k),$$

$$\varphi^{(2)}(\lambda_k, \bar{\omega}_k) = -\varphi^{(2)}(\lambda_k, \bar{y}_k),$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda_k, \bar{\omega}_k) = -\varphi^{(3)}(\lambda_k, \bar{y}_k), \quad (6)$$

а $\bar{u}_k(x)$ - решение краевой задачи

$$\varphi^{(1)}(\lambda_k, \bar{u}_k) = -\bar{y}_k(x),$$

$$\varphi^{(2)}(\lambda_k, \bar{u}_k) = -[S'_{\lambda_k} \bar{y}'_k(a) + L'_{\lambda_k} \bar{y}_k(a)], \quad (7)$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda_k, \bar{u}_k) = -[T'_{\lambda_k} \bar{y}'_k(b) + F'_{\lambda_k} \bar{y}_k(b)].$$

Решив эти задачи, можно найти из последнего соотношения системы (5) выражение для μ_k . Далее по формулам (3) находятся следующие приближения \bar{y}_{k+1} , λ_{k+1} , если задать значение шага интегрирования τ_k . Следует отметить, что

$$\bar{\omega}_k(x) = -\bar{y}_k(x). \quad (8)$$

4. Дискретная схема по x

Для дискретного представления по x краевой задачи (7) была использована трехточечная конечно-разностная аппроксимация дифференциальных операторов $\varphi^{(1)}$, $\varphi^{(2)}$ и $\varphi^{(3)}$, а условие нормировки аппроксимировалось с помощью квадратурных формул Симпсона. Для численного решения краевой задачи (7) был применен алгоритм прогонки /6/.

Ниже рассмотрена конечно-разностная аппроксимация задачи

(7), приводятся формулы для прогоночных коэффициентов в случае постоянного и переменного h .

5. Постоянный шаг

Отрезок $[a, b]$ разбивается узловыми точками x_i ($i = 0, 1, \dots, n$)

$$x_{i+1} = x_i + h, \quad x_0 = a, \quad x_n = b. \quad (9)$$

Задача (7) заменяется на разностную:

$$N_i \bar{u}_{i+1} + M_i \bar{u}_i + R_i \bar{u}_{i-1} = -h^2 \bar{y}_i, \quad (10)$$

$$S_1 \bar{u}_2 + 2hL_1 \bar{u}_1 - S_1 \bar{u}_0 = -[S'_{1\lambda} \bar{y}_2 + 2hL'_{1\lambda} \bar{y}_1 - S'_{1\lambda} \bar{y}_0],$$

$$T_n \bar{u}_{n+1} + 2hF_n \bar{u}_n - T_n \bar{u}_{n-1} = -[T'_{n\lambda} \bar{y}_{n+1} + 2hF'_{n\lambda} \bar{y}_n - T'_{n\lambda} \bar{y}_n],$$

(индекс λ здесь и ниже опущен)

где матрицы N_i , M_i и R_i имеют вид:

$$N_i = I - Q_i \cdot h, \quad (11)$$

$$M_i = h^2 \lambda - 2I - h^2 H_i,$$

$$R_i = I + h \cdot Q_i = 2I - N_i.$$

Прямой ход прогонки заключается в вычислении прогоночных коэффициентов C_i , \bar{D}_i в соотношении

$$\bar{u}_i = C_i \bar{u}_{i+1} + \bar{D}_i \quad (12)$$

по формулам

$$C_i = -(M_i + R_i C_{i-1})^{-1} N_i,$$

$$\bar{D}_i = (M_i + R_i C_{i-1})^{-1} (-h^2 \bar{y}_i - R_i \bar{D}_{i-1}), \quad (13)$$

$$C_0 = -(R_1 S_1 + N_1 S'_1)^{-1} (M_1 S_1 - 2h N_1 L_1),$$

$$\bar{D}_0 = (R_1 S_1 + N_1 S'_1)^{-1} [-h^2 S'_1 \bar{y}_1 + N_1 (S'_{1\lambda} \bar{y}_2 + 2h L'_{1\lambda} \bar{y}_1 - S'_{1\lambda} \bar{y}_0)]. \quad (14)$$

Для обратной прогонки используется выражение

$$\bar{u}_{n+1} = (T_n + 2hF_n C_n - T_n C_{n-1} C_n)^{-1} \cdot (-2h(F'_{n\lambda} \bar{y}_n + F_n \bar{D}_n) + T_n \bar{D}_{n-1} + T_n C_{n-1} \bar{D}_n - T'_{n\lambda} \bar{y}_{n+1} + T'_{n\lambda} \bar{y}_{n-1}) \quad (15)$$

и соотношение (12), с помощью которых вычисляются компоненты \bar{u}_i .

6. Переменный шаг

Отрезок $[a, b]$ разбивается узловыми точками x_i следующим образом:

$$x_{i+1} = x_i + h_{i+1}.$$

Задача (7) заменяется конечно-разностной:

$$\tilde{N}_i \bar{u}_{i+1} + \tilde{M}_i \bar{u}_i + \tilde{R}_i \bar{u}_{i-1} = \tilde{P}_i,$$

$$\tilde{S}_1 \bar{u}_2 + \tilde{L}_1 \bar{u}_1 - \tilde{S}_1 \bar{u}_0 = -[\tilde{S}'_{1\lambda} \bar{y}_2 + \tilde{L}'_{1\lambda} \bar{y}_1 - \tilde{S}'_{1\lambda} \bar{y}_0], \quad (16)$$

$$\tilde{T}_n \bar{u}_{n+1} + \tilde{F}_n \bar{u}_n - \tilde{T}_n \bar{u}_{n-1} = -[\tilde{T}'_{n\lambda} \bar{y}_{n+1} + \tilde{F}'_{n\lambda} \bar{y}_n - \tilde{T}'_{n\lambda} \bar{y}_{n-1}],$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{N}_i &= h_i (\hat{I} - Q_i h_i) \\ \tilde{M}_i &= (h_i + h_{i+1}) \left\{ \frac{1}{2} h_i h_{i+1} (\lambda \hat{I} - H_i) - I - (h_{i+1} - h_i) Q_i \right\} \\ \tilde{R}_i &= h_{i+1} (I + Q_i h_{i+1}) \\ \tilde{P}_i &= -\frac{1}{2} h_i h_{i+1} (h_i + h_{i+1}) \bar{Y}_i \\ \tilde{S}_1 &= h_1^2 S_1, \quad \tilde{S}_2 = h_2 S_2 \\ \tilde{L}_1 &= 2 h_1 h_2 (h_1 + h_2) L_1 + (h_2^2 - h_1^2) I \\ \tilde{T}_n &= h_n^2 T_n, \quad \tilde{T}'_n = h_{n+1}^2 T'_n \\ \tilde{F}_n &= 2 h_n h_{n+1} (h_n + h_{n+1}) F_n + (h_{n+1}^2 - h_n^2) I. \end{aligned} \quad (I7)$$

Формулы для прогоночных коэффициентов и \bar{u}_i полностью совпадают с (I2-I3), за исключением начальных условий для прямой и обратной прогонок, которые принимают вид:

$$\begin{aligned} C_1 &= -[\tilde{M}_1 \tilde{S}_1 + \tilde{R}_1 \tilde{L}_1]^{-1} [\tilde{N}_1 \tilde{S}_1 + \tilde{R}_1 \tilde{S}_1] \\ \bar{D}_1 &= [\tilde{M}_1 \tilde{S}_1 + \tilde{R}_1 \tilde{L}_1]^{-1} [\tilde{S}'_1 \bar{P} - (\tilde{R}_1 \tilde{S}'_1 \bar{Y}_2 + \tilde{R}_1 \tilde{L}'_1 \bar{Y}_1 - \tilde{R}_1 \tilde{S}'_1 \bar{Y}_1)] \\ \bar{u}_{n+1} &= -[\tilde{T}'_n + (\tilde{F}_n - \tilde{T}'_n C_{n+1}) C_n]^{-1} \\ &\quad \times [(\tilde{F}_n - \tilde{T}'_n C_{n+1}) \bar{D}_n + \tilde{T}'_n \bar{Y}_{n+1} + \tilde{F}'_n \bar{Y}_n - \tilde{T}'_n \bar{Y}_{n-1} - \tilde{T}'_n \bar{D}_{n-1}]. \end{aligned} \quad (I9)$$

Заметим, что в данной реализации рассмотренная итерационная схема решения конечно-разностной задачи, аппроксимирующей задачу (I), является обобщением известного метода обратных итераций /6/.

7. Принцип реализации алгоритма (программа SYSTEM)

Для приближенного решения задачи (I) необходимо реализовать следующий алгоритм:

- 1) Вычислить прогоночные коэффициенты по формулам (I3). При этом используются матрицы коэффициентов H , Q и начальное приближение к собственной функции \bar{Y}_0 и собственному решению λ_0 .
- 2) По формулам (I2) и дискретному аналогу последнего выражения (5) найти итерационные поправки \bar{u}_k к собственным функциям и собственному значению μ_k .
- 3) Задать значение τ_k .
- 4) Вычислить $(k+1)$ -ое приближение к собственным функциям и собственному значению

$$\begin{aligned} \lambda_{k+1} &= \lambda_k + \tau_k \mu_k \\ \bar{Y}_{k+1} &= \bar{Y}_k + \tau_k (-\bar{Y}_k + \mu_k \bar{u}_k). \end{aligned}$$

- 5) Вычислить невязку $S_k = \|\varphi_k^{(1)}(\lambda_{k+1}, \bar{Y}_{k+1})\|$, соответствующую этому приближению.
- 6) Если заданная точность вычисления \bar{Y} и λ не достигнута, то процесс повторяется.

Трудности реализации этого алгоритма заключены в следующем.

На различных этапах вычислительного процесса необходимо хранить в оперативной памяти ЭВМ матрицы H , Q , C . Например, при расчете уровней энергии и волновых функций M^- -мезомолекул водорода используется система 40 уравнений с параметрами $a = 0$, $b = 60$, $h = 0,1$, и каждая из этих матриц содержит $\sim 10^6$ элементов. Такой объем информации нельзя поместить в оперативную память ЭВМ (БЭСМ-6, СДС-6500), имеющихся в ЛВГА ОИЯИ.

Для устранения этой трудности были использованы внешние запоминающие устройства (магнитные диски).

Остановимся подробно на описании программной реализации алгоритма на ЭВМ СДС-6500.

ся этот слой, вычисляется слой итерационных поправок \bar{u}_k и записывается на TAPE 3. Затем на TAPE 2 делается возврат на две логические единицы записи назад и читается предпоследний слой коэффициентов C и \bar{D} , вычисляется следующий слой итерационных поправок \bar{u}_k и записывается на TAPE 3. В конце на TAPE 3 будут записаны итерационные поправки \bar{u}_k . Параллельно происходит суммирование в квадратурных формулах для вычисления μ_k . Выбирается τ_k , соответствующее минимуму невязки. Далее аналогично описанной выше процедуре вычисления \bar{u}_k вычисляются функции \bar{y}_{k+1} и записываются на TAPE 5, вычисляется λ_k . Если невязка S_{k+1} больше заданной величины, информация с TAPE 5 переписывается на TAPE 4, и вычислительный процесс повторяется сначала.

Оптимизация рассмотренного алгоритма достигается следующим:

- за счет выбора τ_k расширяется область сходимости метода Ньютона;
- менее подробная сетка по X на участках медленного изменения коэффициентов H и Q приводит к уменьшению числа операций, т.е. к ускорению вычислительного процесса.

Текст программы SYSTEM на языке ФОРТРАН-4 находится в библиотеке программ ОИЯИ, блок-схема дана на рис.3.

8. Описание параметров программы SYSTEM

Все фактические значения параметров, необходимые для работы SYSTEM, а также все размерности массивов коэффициентов задаются программой-редактором FLOWER. (Программа SYSTEM может работать и без программы-редактора).

NDIM - число уравнений в системе (I).

$NBL\phi C \times KBL\phi C$ - число узлов сетки по X .

($NBL\phi C$ должно уменьшаться с ростом $NDIM$: например, при $NDIM=40 - NBL\phi C = 5$, при $NDIM = 6 - NBL\phi C = 50$).

E_0 - начальное приближение к искомому собственному значению ($\lambda_0 = 2 \cdot AMN \cdot E_0 / BETA$, где $AMN, BETA$ - величины, которые задаются пользователем).

$AM1, AM2, AM3$ - фактические параметры, обеспечивающие перевод λ в различные физические единицы. (Смысл этих параметров объясняется в п.9, так же как и параметров $Z1, Z2, LJ$).

$NITER$ - максимальное число шагов по оси t .

EPS' - параметр, характеризующий точность вычисления собственного значения и собственной функции задачи (I). В качестве меры точности приближения (λ_k, \bar{y}_k) к искомому решению выбирается величина:

$$S_k = \max_{2 < i < N-1} \frac{2}{h_i \cdot h_i (h_i + h_{i+1})} \cdot |h_i (I - h_i Q_i) \bar{y}_{i+1, k} + (h_i + h_{i+1}) [\frac{1}{2} h_i h_{i+1} (I \lambda - H_i) - I - (h_{i+1} - h_i) Q_i] \bar{y}_{i, k} + h_{i+1} (I + h_{i+1} Q_i) \bar{y}_{i-1, k}|$$

$NTAU$ - параметр, задающий режим выбора шага τ_k

$$NTAU = 0, \tau_k = 1;$$

$$NTAU \neq 0, NTAU \neq 1, \tau_k = 0.1 + \frac{0.9}{NTAU - 0.1} i$$

выбирается из условия $\tau_k = \min_{k < i < NTAU} S_k$.

Как показывает опыт вычислений, этот режим обеспечивает наибольшую устойчивость итераций.

$IPRINT$ - определяет частоту выдачи на печать промежуточной информации.

При $IPRINT = 0$ функции \bar{y}_{k+1} печатаются после выполнения одного из условий: либо $k+1 > NITER$, либо $S_{k+1} < EPS'$.

При $IPRINT=1$ функции \bar{Y}_{k+1} печатаются после каждой итерации.

$STEP$ - шаг разностной сетки по x .
 $STEP=HH$ в случае равномерной сетки, $STEP(nbl\phi c+1) = HH(nbl\phi c+1)$ - в случае неравномерной сетки.

$NSTEP$ - этот параметр задает режим работы программы с постоянным либо с переменным шагом сетки,

$NSTEP=0$ постоянный шаг

$NSTEP=1$ переменный шаг.

E - этот параметр соответствует λ в задаче (I), т.е. $\lambda=E$.

Кроме перечисленных выше параметров для работы программы $SISTEM$ с внешними запоминающими устройствами TAPE 1, TAPE 4, TAPE 6, нужно записать на них коэффициенты H и Q , функции начального приближения \bar{Y}_0 и шаг по $x-h_i$ (в случае постоянного шага по x $h_i=h$, TAPE 6 не используется, h задается в программе-редакторе).

H, Q - трехмерные массивы размерности $NDIM \times NDIM \times NBL\phi C$.

Y - двумерный массив размерности $NDIM \times NBL\phi C$.

HH - в случае $NSTEP=1$ одномерный массив размерности $NBL\phi C+1$.

H, Q, Y, HH - записываются на внешние запоминающие устройства следующим образом:

$D\phi 1$ $KB=1, KBL\phi C$

$WRITE(1) H, Q$

$WRITE(4) Y$

$WRITE(6) STEP$

1 $C\phi NTINUE$

Для программы $SISTEM$ необходимо также предусмотреть внешние устройства TAPE 2, TAPE 3, TAPE 5.

После каждой итерации печатаются:

K - число итераций

$$TAU = \tau_k, \quad TM = \mu_k,$$

$$SY = \int_a^b \sum_{j=1}^{N_j} [y_{j,k}(x)]^2 dx,$$

$$SV = \int_a^b \sum_{j=1}^{N_j} y_{j,k}(x) u_{j,k}(x) dx, \quad E = \lambda.$$

После последней итерации, кроме того, печатаются вычисленные первые шесть функций \bar{Y}_k и значения $E : ES, EV, EM$ в различных физических системах единиц: $ES = 0.5 \cdot E / AMN$,

$EV = ES \cdot BETA, EM = ES \cdot ALFA$; переводной параметр

$ALFA$, так же как и $BETA$, задается пользователем.

Программой $SISTEM$ вызываются следующие подпрограммы: $CDPR\phi G, FPR\phi G, TAUKA$ и $DELTA$.

$SUBROUTINE CDPR\phi G(NDIM, KB, NB, CC, VECT, M, R, HH2)$

Эта подпрограмма вычисляет прогоночные коэффициенты C и \bar{D} , которые через $C\phi MM\phi N$ -блок попадают в основную программу и записываются на TAPE 2.

$SUBROUTINE FPR\phi G(NDIM, KB, NB, FREST, NBL\phi C, HH)$

Эта подпрограмма вычисляет функции \bar{u} , через $C\phi MM\phi N$ -блок они попадают в основную программу и записываются на TAPE 2.

$SUBROUTINE TAUKA(HH, HH2, TM, TK, NTAU, E, N, H, Q, NDIM, KBL\phi C, NBL\phi C)$

Подпрограмма выбирает τ_k из условия $\tau_k = \min_{1 \leq i \leq N} \tau_{ki}$ и присваивает τ_k параметру TK . Для работы этой подпрограммы нужна подпрограмма $DELTA$, вычисляющая τ_k .

**SUBROUTINE DELTA (DEL, NBLØC,
NDIM, N, H, Q, HH, HH2, EH)**

Эта подпрограмма вычисляет $\tilde{\chi}_k \cdot h^2$ на отрезке $[\alpha', \beta']$, где $\alpha' = (KB-1) \cdot NBLØC$, $\beta' = KB \cdot NBLØC$, $1 \leq KB \leq KBLØC$ (в точках α' и β' - $\tilde{\chi}_k \cdot h^2$ не вычисляется).

Пользователю необходимо также составить следующие подпрограммы:

SUBROUTINE FC1D1 (HH, S, L)

Эта подпрограмма вычисляет по формулам (I4), (I8) коэффициенты C_1 и \bar{D}_1 , которые через COMMON-блок попадают в подпрограмму CDPRØG.

SUBROUTINE FUN (HH, T, F)

Подпрограмма вычисляет по формулам (I5), (I9) \bar{U}_n , если $T=0$, $F=I$ то $\bar{U}_n=0$.

В программе используются библиотечные подпрограмма-функция MATIN и функция AMAX I.

9. Пример использования программы SISTEM.

Вычисление энергии связи и волновых функций мезомолекулы $p d \mu$.

Программа использовалась для нахождения уровней энергии $\bar{\mu}$ -мезомолекул водорода. В качестве примера рассмотрено вычисление уровня энергии и волновых функций мезомолекулы $p d \mu$ с квантовыми числами $J=0$, $\nu=0$ в адиабатическом представлении задачи трех тел с кулоновским взаимодействием /8/. Для этого случая существует независимый вариационный расчет /9/.

В качестве начального приближения к волновым функциям и энергии использовались волновые функции и собственное значение.

$$\bar{Y}_0 = \begin{pmatrix} Y_{1,0} \\ Y_{2,0} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, E_0$$

полученные из двухуровневого приближения для системы $p d \mu$. Перед обращением к программе параметрам были присвоены следующие значения:

$$AM1 = 3670,481, AM2 = 1836,152, AM3 = 206,769, Z1=Z2 = 1, E0 = -214, LJ = 0, STEP = 0,1, NSTEP = 0, EPS' = 10^{-10}, NITER = 10, NTAU = 0, IPRINT = 0.$$

Здесь:

AM1, AM2, AM3 - массы ядер p, d и масса $\bar{\mu}$ -мезона m_μ ,
Z1, Z2 - заряды ядер,
LJ - момент системы $p d \mu$.

Задача рассматривалась на отрезке $[0, 20]$ с нулевыми граничными условиями

$$T = S' = 0, L = F = I.$$

Пакет программы изображен на рис.2.

На файлах TAPE I6, P3, FLOWER, SISTEM записаны эффективные потенциалы задачи трех тел в адиабатическом представлении, $H(x)$, $Q(x)$, волновые функции начального приближения $\bar{Y}_0(x)$, программа-редактор FLOWER, программа SISTEM.

Для работы программы необходимо задать на перфокарте N^2-24 форматом 6I5 величины: NDIM, NBLØC, KBLØC, MSTAR (ключ, по которому формируются коэффициенты H и Q),

NTAU, IPRINT и на перфокарте N² -25 величин:

NVAR (номер варианта), Z1, Z2, AM1, AM2, AM3, E0 (в эВ), LJ форматом (I5, 2F3.2, 6F10.4, I2).

В случае IPRINT = 0 распечатываются волновые функции (первые 6) на последнем шаге по t. Уровни энергии вычисляются в различных системах единиц:

$$ES (UNITS \text{ OF } MSTAR) = 0.5 \cdot E / AMN$$

$$EV (ELECTRON VOLTS) = ES \cdot BETA$$

$$EM (MESON UNITS) = ES \cdot ALFA$$

в единицах задачи (AMN = 6.25260328), в электронвольтах (BETA = 5326.28397) и мезоатомных единицах (ALFA = 0.9466712).

Расчет был проведен для случаев NDIM = 2, NBLFC = 100, KBLFC = 2, NDIM = 6, NBLFC = 20, KBLFC = 10, NDIM = 10, NBLFC = 20, KBLFC = 10, NDIM = 20, NBLFC = 10, KBLFC = 20, NDIM = 40, NBLFC = 4, KBLFC = 50.

В первой колонке таблицы I печатается число уравнений в системе NDIM, во второй и третьей колонках - время работы центрального процессора, затраченное на одну итерацию, и время работы периферийных устройств в сек, в четвертой и пятой колонках приведены значения λ в единицах задачи и в эВ. Процесс сходится за три итерации, при этом невязка τ_к уменьшалась от 10⁻¹ до 10⁻¹⁰.

Результаты расчета уровня p_{0m} с квантовыми числами J=0, V=0 при учете непрерывного спектра (непрерывный спектр задачи двух кулоновских центров квантовой механики учитывался по теории возмущений) хорошо согласуются с вариационным расчетом /9/:

$$E_{\text{вар}} = -221.28 \text{ эВ}, E = -221.48 \text{ эВ.}$$

Таблица I

NDIM	Время на одну итерацию в сек		λ	E (эВ)
	CP	PP		
2	1,5	40,8	-0,5092	-215,1
6	7,8	40,8	-0,5160	-218,4
10	21,6	55,2	-0,5166	-218,6
20	118,2	135,0	-0,5172	-218,9
40	715,8	399,0	-0,5177	-219,1

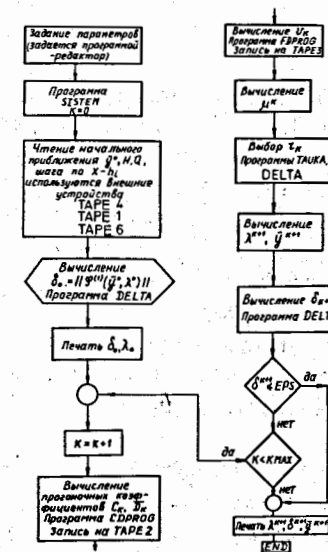


Рис.3 Блок-схема программы SYSTEM.

Ю. Заключение

При решении физических задач коэффициенты в системе уравнений (I) могут быть заданы в виде таблиц как с равномерным, так и с неравномерным шагом по X . Большинство алгоритмов программ /Ю/ предназначены для решения систем с коэффициентами, заданными аналитически.

Данная программа ориентирована на решение систем большого числа уравнений с потенциалами, заданными численно, причем никаких ограничений на матрицы коэффициентов относительно их симметрии не накладывалось.

В заключение авторы благодарят Л.И.Пономарева за интерес к работе и полезные обсуждения.

Литература

1. Веницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.
2. J. Damgaard, H.C.Pauli, V.V.Pashkevitch and V.M.Strutinsky. Nucl.Phys. 1969, A135, p.432.
3. Гареев Ф.А., Пузынина Т.П., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. ОИЯИ, II-8081, Дубна, 1974.
4. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina and L.N.Somov. Annals of Phys. 1978, 110, p.274.
5. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, 1973, 127. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. ЖЭТФ, 1973, 65, с.28. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сб. "Algorithms and Programs" КФКИ-34, Budapest, 1974, p.93. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J.Comp.Phys. 1973, 13, p.10.

6. Гаури М.К. Известия вузов, Математика; 1958, 5(6), с.18. Канторович Л.В. УМН, 1956, II, с.99. Калиткин Н.Н. Численные методы. "Наука", М., 1978.
7. Гареев Ф.А. и др. ЖВМ и МФ, 1977, 17, с.407.
8. Веницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н.—В кн.: "Мезоны в веществе", ДИ-10908, Дубна, 1977, с.187.
9. S.P.Carter. Phys.Rev., 1966, 141, p.863.
10. Олдер Б. Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений. "Мир", М., 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 сентября 1979 года.