

РОССИЙСКАЯ
АКАДЕМИЯ
НАУК

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР С.В. ЕМЕЛЯНОВ

ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ



URSS

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

2/2012

Содержание

ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

- 3 **Перспективные подходы к созданию масштабируемых приложений для суперкомпьютеров гибридной архитектуры**
Ю.А. Климов, А.Ю. Орлов, А.Б. Шворин
- 11 **Направления развития суперкомпьютерных технологий в ОАО «НИЦЭВТ»**
А.С. Симонов, А.И. Слуцкий, А.Е. Леонова
- 19 **Применение реконфигурируемых вычислительных систем для обработки сигналов телевидения ультравысокой четкости**
В.П. Дворкович, И.И. Левин, Е.А. Семерников, М.К. Чобану
- 29 **Гибридный суперкомпьютер К-100: что дальше?**
С.С. Андреев, С.А. Дбар, А.А. Давыдов, А.О. Лацис,
Г.П. Савельев, В.Л. Орлов, Е.А. Плоткина, И.В. Простов

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

- 36 **Преимущества потоковой модели вычислений в условиях неоднородных сетей**
А.В. Климов, Н.Н. Левченко, А.С. Окунев
- 46 **Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шредингера**
Т.П. Пузынина, Во Чонг Тхак

МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ

- 54 **Алгоритмы обработки изображений для классификации состояний биологических систем**
В.В. Мажуга, М.В. Хачумов
- 64 **Анализ основных тенденций в области хранения данных**
Е.О. Тютляева, А.А. Московский
- 76 **Исследование структурных особенностей вредоносных документов методами Data Mining**
Д.В. Комашинский, И.В. Котенко

ОБЗОРЫ

- 93 **Имитационное моделирование. Теория и практика**
По материалам конференции ИММОД-2011
И.В. Никулина
- 97 **Abstracts**

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ 2/2012

Журнал основан в 1995 году
Журнал выходит ежеквартально

Учредители

Российская академия наук
Институт системного анализа РАН

Главный редактор

С.В. Емельянов

Заместители главного редактора

В.Б. Бетелин
Ю.С. Попков
Ю.М. Соломенцев

Редакционная коллегия

Е.И. Артамонов
С.Н. Васильев
В.А. Гуцин
В.К. Левин
Г.Г. Малинецкий
А.Я. Олейников
А.Б. Петровский
Н.Л. Прохоров
А.В. Смирнов
И.А. Соколов
А.Л. Стемповский
В.К. Финн
Ю.А. Флеров

Ответственный секретарь

С.А. Власов

Редакция

В.М. Афанасьев, e-mail: avtpr@isa.ru
Г.Н. Давыдова, e-mail: gdavidova@niisi.ras.ru
И.С. Зотова, e-mail: izotova@niisi.ras.ru

Адрес редакции

117997 Москва,
Нахимовский проспект д.36 кор. 1, ком.610
<http://www.jitcs.ru>
тел. (499)129 89 03, (499)135 32 79

Подписной индекс с 2008 года по каталогу Роспечати 80332

Журнал выпускается при научно-методическом руководстве
Отделения нанотехнологий и информационных технологий Российской академии наук

Журнал включен в перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий,
рекомендованных ВАК для публикации основных научных результатов диссертаций
на соискание ученой степени доктора и кандидата наук

Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шредингера¹

Т.П. Пузынина, Во Чонг Тхак

Аннотация. Представлен комплекс программ в системе компьютерной алгебры MAPLE для вычисления параметров модельных потенциалов радиального уравнения Шредингера, минимизирующих функционалы, которые описывают отклонения экспериментальных данных от соответствующих теоретических величин, зависящих от уровней энергии и волновых функций параметризованного уравнения.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, модельный потенциал, уровень энергии, волновая функция, функционал, минимизация.

Введение

Проверка в рамках радиального уравнения Шредингера применимости выбранного модельного потенциала взаимодействия, зависящего от параметров, для описания наблюдаемых характеристик изучаемой квантовой системы может привести к задаче вычисления значений этих параметров, обеспечивающих минимальное отклонение теоретических значений характеристик от экспериментальных. Таким образом, для исследуемой модели возникает обратная задача, в которой по заданным значениям характеристик квантовой системы требуется восстановить в параметрическом семействе конкретный потенциал, с помощью которого можно наилучшим образом воспроизвести эти значения.

Для рассматриваемой здесь задачи дискретного спектра теоретические значения экспериментальных величин являются функционалами, зависящими от уровней энергии (собственных значений) и волновых функций (собственных

функций) уравнения Шредингера. В этом случае обратная задача может быть сведена к минимизации квадратичного функционала отклонений между заданными и теоретическими значениями в области параметров модельного потенциала. При заданном наборе параметров вычисление минимизируемого функционала реализуется с использованием программы SLIPH4M [1]. Это обосновано тем, что для некоторых модельных потенциалов уравнение Шредингера может быть решено только численно. Примером может служить широко используемый в ядерной физике потенциал Вудса-Саксона, задача для которого будет рассмотрена ниже [2]. Поскольку в модельных потенциалах число параметров сравнительно невелико [3], применяется метод покоординатного спуска, сводящий исходную задачу минимизации к последовательности одномерных задач минимизации [4]. Отметим, что при численной реализации решения обратной задачи в рассматриваемой постановке, в отличие от общей задачи (например, [5]), не возникают

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 09-01-00770а и 10-01-00467а

плохо обусловленные уравнения, поскольку восстановление потенциала выполняется в рамках выбранного параметрического семейства.

В работе дано описание комплекса программ решения поставленной обратной задачи и примеры его применения к численному исследованию двух моделей из ядерной физики [1, 2].

1. Структура комплекса программ PIPES

Комплекс программ предназначен для минимизации по параметрам $\bar{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$ функционала специального вида

$$\Phi(\bar{p}) = \sum_{j=1}^m [f_j - \Phi_j(\bar{E}(\bar{p}), \bar{y}(\bar{p}, x))]^2. \quad (1)$$

Здесь f_j - экспериментальные (или предлагаемые для исследования) значения некоторых характеристик моделируемой квантовой системы; функционалы $\Phi_j(\bar{E}(\bar{p}), \bar{y}(\bar{p}, x))$ соответствуют теоретическим значениям этих характеристик

и зависят от вычисляемых решений радиального уравнения Шредингера

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + [2ME - \frac{L(L+1)}{x^2} - V(\bar{p}, x)]y(x) = 0 \quad (2)$$

на полуоси $0 \leq x < \infty$ с граничными условиями

$$y(0) = \lim_{x \rightarrow \infty} y(x) = 0, \quad (3)$$

где M - приведенная масса, $L = 0, 1, 2, \dots$ - орбитальный момент. В задаче (2)-(3) модельный потенциал $V(\bar{p}, x)$ зависит от параметров \bar{p} , поэтому вычисляемые уровни энергии и соответствующие им волновые функции

$$\bar{E}(\bar{p}) = \{E_v(\bar{p})\}, \bar{y}(\bar{p}, x) = \{y_v(\bar{p}, x)\}, v = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

где v - вибрационное число (номер собственного значения), также зависят от этих параметров.

Структура комплекса программы PIPES показана на Рис. 1.

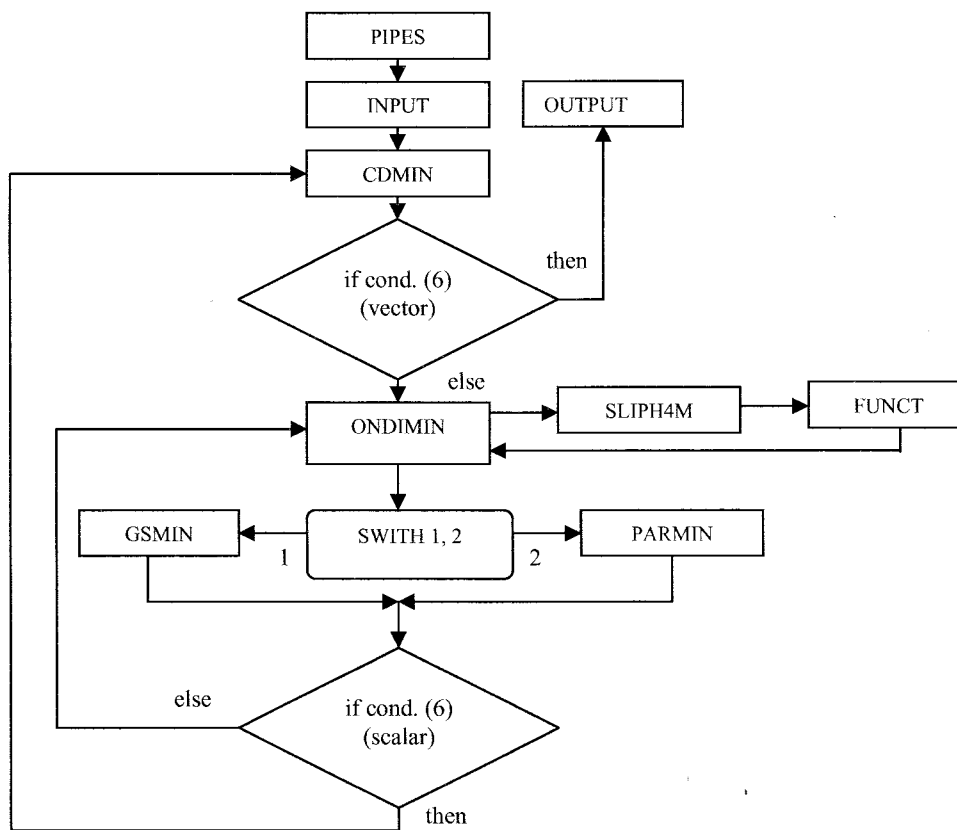


Рис. 1.

Идентификаторы программ: *PIPES* – *parametric inverse problem for the equation of Schrödinger*, *CDMIN* – *coordinate descent minimization*, *ONDIMIN* – *one-dimension minimization*, *GSMIN* – *golden section minimization*, *PARMIN* – *method of parabola minimization*, *SLIPH4M* – *Sturm-Liouville problem with accuracy $O(h^4)$ in system Maple*, *FUNCT* – *functional*.

Процедура покоординатного спуска CDMIN реализует последовательный перебор параметров, от которых зависит минимизируемый функционал (1), в области их изменения

$$\Omega = \{a_k \leq p_k \leq b_k, k = 1, 2, \dots, n\}. \quad (5)$$

Границы a_k, b_k оцениваются, исходя из рассматриваемой модели. На каждом шаге с номером $k = 1, 2, 3, \dots, n$ осуществляется одномерная минимизация функционала по выбранному параметру p_k при фиксированных значениях остальных параметров. Вычисленное значение параметра $p_{k, \min}$, реализующее одномерный минимум функционала, включается в число фиксированных значений и далее осуществляется следующий шаг $k + 1$ минимизации функционала по следующему параметру p_{k+1} при фиксированных значениях остальных. При $k = n$ завершается цикл спусков [4]. Эти циклы повторяются до выполнения условия

$$|\Phi(\bar{p}_i) - \Phi(\bar{p}_{i-1})| \leq \varepsilon_\Phi \text{ и } \|\bar{p}_i - \bar{p}_{i-1}\| \leq \varepsilon, \quad (6)$$

где i – номер повторения цикла спусков, ε_Φ и ε ($\varepsilon_\Phi \leq \varepsilon$) – заданные достаточно малые положительные числа. Выполнение этого условия позволяет судить о близости вычисленного минимума функционала $\Phi(\bar{p}_i)$ к точному значению и о точности вычисления параметров \bar{p}_i , реализующих этот минимум.

Если вычисленное значение минимума функционала (1) близко к нулю, то можно ожидать, что теоретическая модель, описываемая найденными параметрами \bar{p} , потенциалом $V(\bar{p}, x)$ задачи (2)-(3) и функционалами

Φ_j ($j = 1, 2, \dots, m$), соответствует заданным характеристикам f_j ($j = 1, 2, \dots, m$) исследуемой квантовой системы. В противном случае, как сама модель, так и задаваемые характеристики требуют дополнительного уточнения.

Программа одномерной минимизации ONDIMIN состоит из двух отдельных процедур, реализующих два алгоритма одномерной минимизации функционала (1) относительно заданного параметра p_k на отрезке $[a_k, b_k]$ при фиксированных значениях остальных параметров, то есть $\Phi(p_k)$.

Процедура GSMIN использует известный метод золотого сечения [4], который может быть применен к кусочно-непрерывным функциям. Поэтому процедуру рекомендуется использовать в тех случаях, когда гладкость функционала (1) не является очевидной, например, если потенциал $V(\bar{p}, x)$ в уравнении (2) строится на основе предварительных расчетов.

Процедура PARMIN реализует итерационную схему, являющуюся модификацией метода парабол [4] и предполагающую гладкость квадратичного функционала (1). На каждой итерации с номером i для отрезка $a_{ki} \leq p_k \leq b_{ki}$, где значения a_{ki}, b_{ki} известны (для $i = 0$ значения $a_{k0} = a_k, b_{k0} = b_k$ заданы), вычисляется средняя точка $c_{ki} = (a_{ki} + b_{ki}) / 2$. Через точки с координатами $(a_{ki}, \Phi(a_{ki}))$, $(c_{ki}, \Phi(c_{ki}))$, $(b_{ki}, \Phi(b_{ki}))$ проводится парабола

$$\Phi_2(p) = A_{ki} p^2 + B_{ki} p + C_{ki},$$

то есть находятся ее коэффициенты. Далее вычисляется значение параметра p , обеспечивающее минимум $\Phi_2(p)$, $p_{ki} = -\frac{B_{ki}}{2A_{ki}}$, и функционала (1) $\Phi(p_{ki})$. Затем определяется подинтервал $[a_{ki}, c_{ki}]$ или $[c_{ki}, b_{ki}]$, которому принадлежит p_{ki} , и найденный подинтервал переопределяется как $[a_{ki+1}, b_{ki+1}]$. Таким образом, обеспечен переход к следующей итерации.

Итерации повторяются до выполнения скалярного варианта условия (6). Это же условие используется в процедуре GDMIN.

Программа SLIPH4M [1] по заданным значениям параметров \bar{p} вычисляет ту часть множества (4) собственных значений и соответствующих им собственных функций граничной задачи (2)-(3), которая необходима для нахождения значения функционала (1).

Процедура FUNCT составляется специально для изучаемой модели и реализует вычисленные значения функционала (1).

2. Численные примеры

2.1. Коррекция потенциала для расчета спектра молекулы водорода

В работе [1] рассмотрена задача вычисления спектра (уровней энергии и соответствующих волновых функций) молекулы водорода H_2 с применением программы SLIPH4M. Эта задача является тестовой для программы, поскольку точность численных результатов определяется их сравнением с высокоточными данными спектроскопических измерений уровней энергии H_2 . По этим же данным была восстановлена потенциальная кривая, представляющая таблично заданную функцию на отрезке $0,4 \leq x \leq 10$ с неравномерным шагом. Для использования программы SLIPH4M потенциальная кривая с помощью экстраполяции и интерполяции непрерывно продолжается на интервал $0 < x \leq 10$, и строится потенциал $V(x)$, который проектируется на разностную сетку с равномерным шагом, соответствующим требуемой точности расчетов. Было отмечено, что на точность решения рассматриваемой задачи оказывают влияние ошибки, обусловленные алгоритмами непрерывного продолжения потенциала.

Для уменьшения указанных ошибок рассмотрим коррекцию продолженного потенциала $V(x)$ при сохранении всех параметров вычислительной схемы программы SLIPH4M[1]. Введем параметризацию продолженного потенциала в виде

$$V(p, x) = pV(x), \quad (7)$$

где p – параметр, изменяющийся на отрезке $0,8 \leq p \leq 1,2$.

Составим функционал

$$\Phi(p) = \sum_{v=0}^{13} [E_v^{Table}(eV) - \omega_v E_v(p)(eV)]^2. \quad (8)$$

Здесь $E_v^{Table}(eV)$ – экспериментальное значение уровня энергии H_2 , измеренное в электрон-вольтах; $E_v(p)(eV)$ – вычисленное значение уровня энергии при заданном значении параметра p для потенциала $V(p, x)$ (7), приведенное к началу отсчета экспериментальных данных и переведенное в электрон-вольты; ω_v – весовой коэффициент, значение которого задается.

Одномерная по параметру p минимизация функционала (8) выполнена с помощью процедур GDMIN и PARMIN. Результаты вычислений приведены в Табл. 1. Для сравнения в ней также представлены данные из работы [1]: экспериментальные значения уровней энергии молекулы H_2 (колонка 1) и вычисленные значения с потенциалом $V(x)$ (колонка 2). В колонках 3, 4 даны значения уровней энергии H_2 , вычисленные с помощью процедур GDMIN и PARMIN соответственно. В функционале (8) все веса $\omega_v = 1$. В колонке 5 показаны полученные с помощью процедуры PARMIN значения уровней энергии H_2 для функционала (8), в котором $\omega_v = 1$ для $v = 0, 1, 2$ и $\omega_{13} = 2, 5$. В таблице также приведены вычисленные значения параметра p , величины $\Delta = \max_v |E_v^{Table} - E_v(p)|$ и значения $\Phi(p)$.

Анализ данных из Табл. 1 показывает, что коррекция потенциала (7) путем минимизации функционала (8) приводит к определенному улучшению точности вычисления уровней энергии, о чем свидетельствует уменьшение величины Δ . Более заметного уменьшения ошибки при продолжении потенциала можно достичь подходящим выбором весовых коэффициентов ω_v за счет более детального учета ошибок вычисления каждого уровня энергии.

Табл. 1.

	1	2	3	4	5	6
ν	$E_\nu^{Table}(eV)$	$E_\nu(eV)$ [1]	$E_\nu(p)(eV)$ (GSMIN)	$E_\nu(p)(eV)$ (PARMIN)	$E_\nu^\omega(p)(eV)$ (PARMIN)	$J_\nu^\omega(p)$
0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,496696
1	0,5159	0,516185	0,516081	0,516080	0,516100	0,111295
2	1,0025	1,003174	1,002966	1,002965	1,003003	0,039735
3	1,4606	1,461588	1,461277	1,461276	1,461333	0,017221
4	1,8906	1,891739	1,891324	1,891324	1,891399	0,008470
5	2,2925	2,293774	2,293254	2,293254	2,293348	0,004574
6	2,6662	2,667535	2,666912	2,666912	2,667024	0,002659
7	3,0112	3,012535	3,011807	3,011807	3,011938	0,001642
8	3,3266	3,327849	3,327014	3,327014	3,327165	0,001067
9	3,6109	3,612100	3,611156	3,611156	3,611326	0,000724
10	3,8622	3,863244	3,862187	3,862187	3,862377	0,000509
11	4,0774	4,078432	4,077255	4,077254	4,077467	0,000368
12	4,2530	4,253699	4,252391	4,252391	4,252627	0,000270
13	4,3831	4,383513	4,382060	4,382060	4,382322	0,000194
14	-	4,460185	4,458563	4,458563	4,458856	0,000120
p	-	-	0,999619	0,999619	0,999688	
Δ	-	0,001335	0,001040	0,001040	0,000848	
$\Phi(p)$	-	1,4E-5	4,4E-6	4,4E-6	5,6E-7	

Отметим также, что в Табл. 1 приведены результаты вычисления колебательного уровня энергии H_2 при $\nu = 14$, экспериментальное значение которого отсутствует. Это означает, что вычислительный спектр шире, чем экспериментальный, и рассмотренные вычислительные процедуры могут быть успешно применены в аналогичных задачах. Для иллюстрации в колонке 6 таблицы приведены вычисленные значения матричных элементов дипольного момента

$$J_\nu = \int_0^\infty y_0(x) y_\nu(x) \frac{dx}{x^2},$$

важные для теоретического изучения процессов с участием молекулы H_2 .

В Табл. 2 представлены дополнительные вычислительные характеристики результатов из столбцов 3 и 4 Табл. 1.

Процедуры GSMIN и PARMIN (при $\omega_\nu = 1$) дают практически одинаковые результаты. Однако, при минимизации функционала (8) процедура PARMIN требует почти в два раза меньше итераций по сравнению с процедурой GSMIN, что и демонстрирует Табл. 2.

Табл. 2

Метод	GSMIN	PARMIN
eps	10^{-4}	10^{-4}
eps_Φ	10^{-10}	10^{-10}
Номер итераций i	24	13
$ x_i - x_{i-1} \leq eps$ (6)	0,39E-5	0,34E-5
$ \Phi(x_i) - \Phi(x_{i-1}) \leq eps_\Phi$ (6)	4,28E-11	2,37E-12

2.2. Уточнение среднеквадратичного радиуса ядра гелия-6

В работе [2] для изучения модели высокоэнергетического рассеяния ядер гелия-6 (6He) на ядрах углерода-12 (${}^{12}C$) использовалось представление ядра 6He в виде кластера из двух фрагментов: ядра 4He и dineйтрона ($2n$) (ha -модель).

В рамках уравнения Шредингера (2) с граничными условиями (3) взаимодействие фрагментов описывается потенциалом Вудса-Саксона

$$U(x) = U_0 \left(1 + \exp\left(\frac{x-R}{a}\right)\right)^{-1}, \quad (9)$$

где U_0, R, a - параметры. В уравнении (2) для перехода в систему единиц задачи необходимо выполнить следующие подстановки: $E = -\lambda$, $2M = C$, $V(x) = -CU(x)$. Здесь $C = 0,06380480686$ – константа, которая выражается через приведенную массу двух фрагментов. Безузловая волновая функция $y(x)$ ($v = 0, L = 0$) преобразованного уравнения (2) представляет собой функцию связи фрагментов. Энергия разделения фрагментов Σ связана с собственным значением λ , соответствующим $y(x)$, соотношением $\lambda = 2,25 \cdot \Sigma$, а среднеквадратичный радиус ядра ${}^6\text{He}$ вычисляется по формуле

$$R_{rms} = \left(\int_0^\infty y(x)^2 x^2 dx\right)^{1/2}. \quad (10)$$

При значениях параметров потенциала (9) $U_0 = 28,3$, $R = 1,45$, $a = 0,3$ в работе [2] вычислены значения $\Sigma = 0,975$ ($\lambda = 2,19375$) и $R_{rms} = 2,62$. Там же отмечено, что ранее другими авторами было получено значение $R_{rms} = 2,586$ в рамках крупномасштабной оболочечной модели (LSSM) ядра.

В связи с этим можно рассмотреть следующую задачу: используя изложенную методику минимизации функционала (1), уточнить значения R_{rms} , полученные для двух указанных моделей, в рамках $h\alpha$ -модели и сравнить эти значения.

Для решения этой задачи составим функционал

$$\Phi(\bar{p}) = (\lambda^* - \lambda(\bar{p}))^2 + (R_{rms}^* - R_{rms}(\bar{p}))^2, \quad (11)$$

где $\bar{p} = (U_0, R, a)$ – вектор параметров потенциала (9), λ^*, R_{rms}^* – проверяемые на соответствие $h\alpha$ -модели значения физических величин, $\lambda(\bar{p})$ – вычисляемое для заданного вектора параметров \bar{p} при помощи программы SLIPН4М [1] безузловое решение уравнения

Шредингера $\{\lambda(\bar{p}), y(\bar{p}, x)\}$, а также соответствующее ему значение $R_{rms}(\bar{p})$ (10). Для программы SLIPН4М задается интервал $0 \leq x \leq 20$ и шаг разностной сетки $h=0,02$. Значение $R_{rms}(\bar{p})$ вычисляется с применением квадратурной формулы Симпсона на той же разностной сетке.

Область изменения параметров (5) задается следующим образом:

$$\Omega = \{27,5 \leq U_0 \leq 28,5; 1,40 \leq R \leq 1,60; 0,20 \leq a \leq 0,40\}. \quad (12)$$

При минимизации функционала (11) задаем два варианта проверяемых значений:

а) $\lambda^* = 2,19375$ и $R_{rms}^* = 2,62$;

б) $\lambda^* = 2,19375$ и $R_{rms}^* = 2,586$.

Значение λ^* считается правильным, поскольку хорошо воспроизводит экспериментальное значение энергии развала ядра ${}^6\text{He}$. В условиях (6) положим $\varepsilon = \varepsilon_\Phi = 5 \cdot 10^{-4}$.

Процесс минимизации функционала (11) демонстрируют таблицы. В Табл. 3 показана сходимость итераций (i -номер) процедуры CDMIN вместе с процедурой PARMIN минимизации функционала (11) для варианта (а). Результаты вычислений: $\lambda = 2,1937$, $R_{rms} = 2,6202$.

На Рис.2 изображены потенциал Вудса-Саксона $-CU(\bar{p}, x)$ с вычисленными параметрами и соответствующая ему безузловая волновая функция $y(x)$ уравнения Шредингера.

Табл. 4 демонстрирует сходимость процесса минимизации функционала (11) для варианта (б). Результаты вычислений: $\lambda = 2,1937$, $R_{rms} = 2,5860$.

Отметим, что для каждого варианта использование процедур CDMIN и GSMIN дает аналогичные результаты.

Сравнивая результаты, представленные в Табл. 3 и 4, можно сделать следующий вывод. Значение $R_{rms} = 2,586$, вычисленное в рамках LSSM модели, является более точным, чем значение $R_{rms} = 2,62$, полученное для $h\alpha$ -модели.

Табл. 3. Процедуры CDMIN, PARMIN, проверка для $R_{rms} = 2,62$, вариант (а)

i	U_0	R	a	λ	R_{rms}	$\Phi(p_i)$
0	28,300	1,4537	0,3000	2,2196	2,6199	0,000676
1	28,2341	1,4537	0,3000	2,1976	2,6292	0,000100
	28,2341	1,4537	0,3000	2,1976	2,6293	0,000100
	28,2341	1,4537	0,2920	2,1905	2,6253	0,000039
2	28,2341	1,4537	0,2920	2,1904	2,6254	0,000039
	28,2341	1,4542	0,2920	2,1950	2,6236	0,000015
	28,2341	1,4542	0,2888	2,1925	2,6219	5,094E-6
3	28,2341	1,4542	0,2888	2,1924	2,6219	5,094E-6
	28,2341	1,4543	0,2888	2,1941	2,6212	1,696E-6
	28,2341	1,4543	0,2877	2,1933	2,6206	5,515E-7
4	28,2341	1,4543	0,2877	2,1932	2,6208	5,515E-7
	28,2341	1,4544	0,2877	2,1940	2,6204	1,792E-7
	28,2341	1,4544	0,2873	2,1937	2,6202	3,329E-8

Проверка этих значений (варианты (а) и (б)) путем минимизации функционала (11) показывает, что в обоих случаях значения параметров U_0, R, a потенциала (9), минимизирующие функционал, принадлежат области Ω (12). Однако, для варианта (б) достигнуто значение минимума функционала (11) на порядок меньшее, чем для варианта (а), причем на одну итерацию меньше.

Таким образом, поставленная задача решена.

Расчеты выполнялись на PC (Intel(R) Pentium(R) M processor 1.8GHz) в системе Maple версий 13 и 14. Переменное окружение Digits управляет числом цифр, которые Maple использует при вычислениях с числами с плавающей запятой. При Digits=10 (по умолчанию) алгоритм в пакете SLIPH4M не сходится, поэтому при расчетах устанавливался Digits=20. Каждый вариант считается около 7 минут.

Авторы благодарят д.ф.-м.н. Е.В. Земляную, обратившую наше внимание на работу [2], и профессора И.В. Пузынина (ОИЯИ, г.Дубна) за постоянный интерес, помощь и поддержку.

Табл. 4. Процедуры CDMIN, PARMIN, проверка для $R_{rms} = 2,586$, вариант (б)

i	U_0	R	a	λ	R_{rms}	$\Phi(p_i)$
0	28,300	1,4537	0,3000	2,2198	2,6199	0,001828
1	28,2704	1,4537	0,3000	2,2097	2,6241	0,001710
	28,2704	1,4537	0,3000	2,2098	2,6241	0,001710
2	28,2704	1,4537	0,2700	2,1879	2,6078	0,000510
	28,2698	1,4537	0,2700	2,1878	2,6079	5,105E-4
3	28,2698	1,4549	0,2700	2,2003	2,6030	3,327E-4
	28,2698	1,4549	0,2450	2,1923	2,5863	2,104E-4
	28,2698	1,4549	0,2450	2,1922	2,5863	2,104E-4
4	28,2698	1,4550	0,2450	2,1937	2,5857	8,139E-5
	28,2698	1,4550	0,2438	2,1937	2,5860	2,437E-9

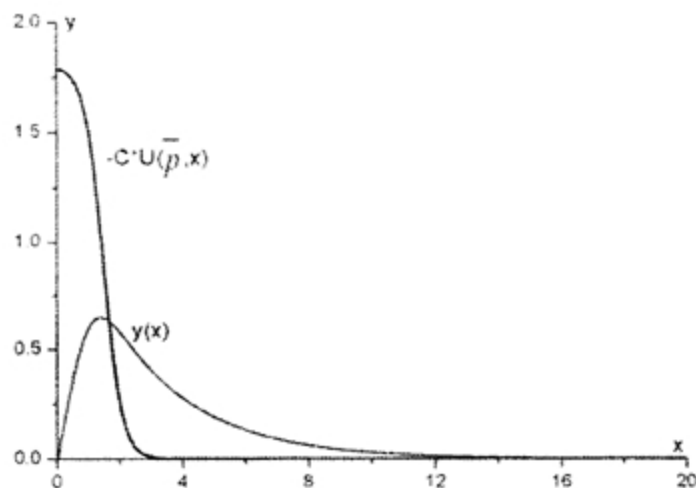


Рис.2

Литература

1. Во Чонг Тхак, Пузынина Т.П. SLIPH4M – программа для численного решения частичной проблемы Штурма-Лиувилля // Программные продукты и системы. №3 (2011), С. 75-80.
2. V.K. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, K.V. Lukyanov. Estimation of the breakup cross sections in ${}^6\text{He} + {}^{12}\text{C}$ reaction within high-energy approximation and microscopic optical potential// International Journal of Modern Physics E. Vol.20, N.9 (2011), p. 2039-2047.
3. З. Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 1, Москва «Мир» 1974.

4. Н.Н. Калиткин. Численные методы. Москва «Наука» 1978. физики // Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ), том 4(1973), вып.1. С. 127-166.
5. Е.П. Жидков, Г.И. Макаренко, И.В. Пузынин. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах

Пузынина Таисия Петровна. Ведущий научный сотрудник Лаборатории Информационных Технологий Объединенного института ядерных исследований. Доктор физико-математических наук. E-mail: puzynina@jinp.ru

Во Чонг Тхак. Научный сотрудник Лаборатории Информационных Технологий Объединенного института ядерных исследований. E-mail: votrongthach@jinp.ru

Keywords: Dataflow computations model, non-uniform access, memory wall, asynchronous programming, dynamic adaptation.

The application package to solve a parametric inverse problem for the Schrödinger equation

T.P. Puzynina, Vo Chong Thach

The application package is presented which written in the computer algebra system MAPLE for calculating parameters of model potentials of the radial Schrödinger equation to minimize functionals, which describe deviations of the experimental data from the corresponding theoretical values, that depend on energy levels and wave functions of the parametric equation.

Keywords: Schrödinger equation, model potential, energy level, wave function, functional.

DATA PROCESSING

Algorithms of images processing for biological systems status classification

V.V. Mazhuga, M.V. Khachumov

This article is about diagnostics of biological systems on an example of recognition of urolithic illness of the person on the basis of the analysis of samples of the crystallized drops of the biological liquids presented as color and half-tone pictures.

Keywords: algorithm, processing, a biological liquid, system, the image, a sign, processing, recognition

Challenges and opportunities in Data Storage

E.O. Tyutlyayeva, A.A. Moskovsky

Examples of the most recent data-intensive applications are discussed. The recent advances in storage systems of the Top 500 supercomputers list are reviewed. A brief review of recent progress in data storage tools with prospect to exascale systems is also given.

Keywords: Storage systems, Data-Intensive Computing, supercomputing.

Investigation of structural specificities of malicious documents by Data Mining

D.V. Komashinskiy, I.V. Kotenko

The paper is devoted to a issue of detecting malicious documents with Data Mining methods. A static detection approach based on search for specific structural and content features is proposed. The approach's evaluation is done by using Portable Document Format sample files. During the experiments we evaluate both particular classification methods and combined classification ways using separate feature spaces for learning of included classifiers.

Keywords: information security, malicious documents, Portable Document Format, classification, Data Mining.

ISBN 978-5-9710-0493-6

Отпечатано в ООО «ЛЕНАНД» с готового оригинал-макета.
117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 11А, стр. 11.
Формат 60×84/8. Печ. л. 12,5. Зак. № ВХ-75.

Тел./факс: (499) 724–25–45