

P11-2010-95

И. В. Пузынин*, Т. П. Пузынина**, В. Ч. Тхак***

**SLIPM — ПРОГРАММА НА ЯЗЫКЕ MAPLE
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ЧАСТИЧНОЙ ПРОБЛЕМЫ ШТУРМА–ЛИУВИЛЛЯ
НА ОСНОВЕ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА
МЕТОДА НЬЮТОНА.
II. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ**

Направлено в журнал «Computer Physics Communications»

*E-mail: ipuzynin@jinr.ru

**E-mail: puzynina@jinr.ru

***E-mail: votrongthach@jinr.ru

Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Тхак В. Ч.	P11-2010-95
SLIPM — программа на языке MAPLE	
для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля	
на основе непрерывного аналога метода Ньютона.	
II. Программная реализация	
<p>SLIPM (Sturm–Liouville Problem in Maple) — программный комплекс на языке системы компьютерной алгебры MAPLE, состоящий из главной программы SLIPM.mw и ряда процедур. Он предназначен для численного решения с помощью непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) частичной проблемы Штурма–Лиувилля, т. е. для вычисления некоторого собственного значения линейного дифференциального оператора второго порядка и соответствующей собственной функции, удовлетворяющей однородным граничным условиям общего вида. SLIPM является развитием написанных на языке фортран комплексов программ SLIP1 и SLIPH4. Он дополнен двумя новыми способами вычисления начального значения итерационного параметра τ_0, процедурой уточнения решения (собственного значения и соответствующей собственной функции) с использованием процедуры экстраполяции по методу Ричардсона, процедурами графической визуализации промежуточных и окончательных результатов итерационного процесса, процедурой сохранения результатов на дисковом файле. Даны описания назначений процедур и их параметров.</p>	
<p>Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.</p>	
<p>Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2010</p>	

Puzynin I. V., Puzynina T. P., Thach V. T.	P11-2010-95
SLIPM — a MAPLE Package for Numerical Solution	
of Sturm–Liouville Partial Problems Based	
on a Continuous Analog of Newton’s Method:	
II. Program Realization	
<p>SLIPM (Sturm–Liouville Problem in MAPLE) is a program complex written in the language of the computer algebras system MAPLE. It consists of the main program SLIPM.mw and of some procedures. It is intended for a numerical solution with the help of the continuous analog of Newton’s method (CANM) of Sturm–Liouville partial problems, i.e., for calculating some eigenvalue of linear second-order differential operator and a corresponding eigenfunction satisfying homogeneous boundary conditions of the general type. SLIPM is the development of the program complexes SLIP1 and SLIPH4 written in the Fortran language. It is added by two new ways of calculating the initial value of iterative parameter τ_0, by a procedure for calculating a higher precision solution (eigenvalue and corresponding eigenfunction) with the help of Richardson’s extrapolation method, by graphical visualization procedures of intermediate and final results of the iterative process and by saving of the results on a disk file. The descriptions of the procedures purposes and their parameters are given.</p>	
<p>The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.</p>	
<p>Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2010</p>	

Данная работа является продолжением работы [1], где в п. 1 дана постановка задачи, в п. 2 описан метод решения НАМН: алгоритмы вычисления начального приближения $\{\lambda^0, y^0\}$ к решению, итерационные схемы на основе НАМН, алгоритмы вычисления итерационного параметра τ_k и два новых алгоритма вычисления его начального значения τ_0 . В п. 3 приведены численные результаты применения программы SLIPM* для решения трех задач: уравнения Шредингера с потенциалом Морзе, уравнения Лежандра и уравнения Уиттекера. Показано, что использование двух новых алгоритмов вычисления начального значения итерационного параметра τ_0 привело к сокращению количества итераций в итерационном процессе.

В данной работе остановимся на программных аспектах комплекса — описании назначения процедур и их параметров — и вычислительных аспектах — оценке точности предложенных вычислительных схем и уточненных по методу Ричардсона результатов.

1. ОПИСАНИЕ ПРОЦЕДУР КОМПЛЕКСА

На рис. 1 дана блок-схема комплекса программ SLIPM. В начале главной программы MAIN помещается ряд необходимых команд:

restart: — перезагрузить все переменные и процедуры;

with(plots): — подключить пакет, поддерживающий графические рисунки;

Digits:=L: — переменная окружения, управляет числом цифр L, которые Maple использует при вычислениях с числами с плавающей запятой. По умолчанию Digits = 10; в тесте Digits = 20;

ts:=time(): — определяет реальное время начала вычислений.

Далее следуют тела всех процедур комплекса и команды обращения к процедурам от INPUT до RICHARDSON. Последняя команда главной программы tc:=time()-ts: дает время выполнения всего вычислительного процесса.

Процедуры INPUT, PQRX, D1F1, D2F2, ANALYT составляются пользователем комплекса с учетом постановки конкретной задачи. Затем подробно описаны возможности и параметры этих процедур для теста с уравнением Шредингера с потенциалом Морзе.

*<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/slipm/>
<http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/slipm/index.html>
<http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/slipm/index.html>

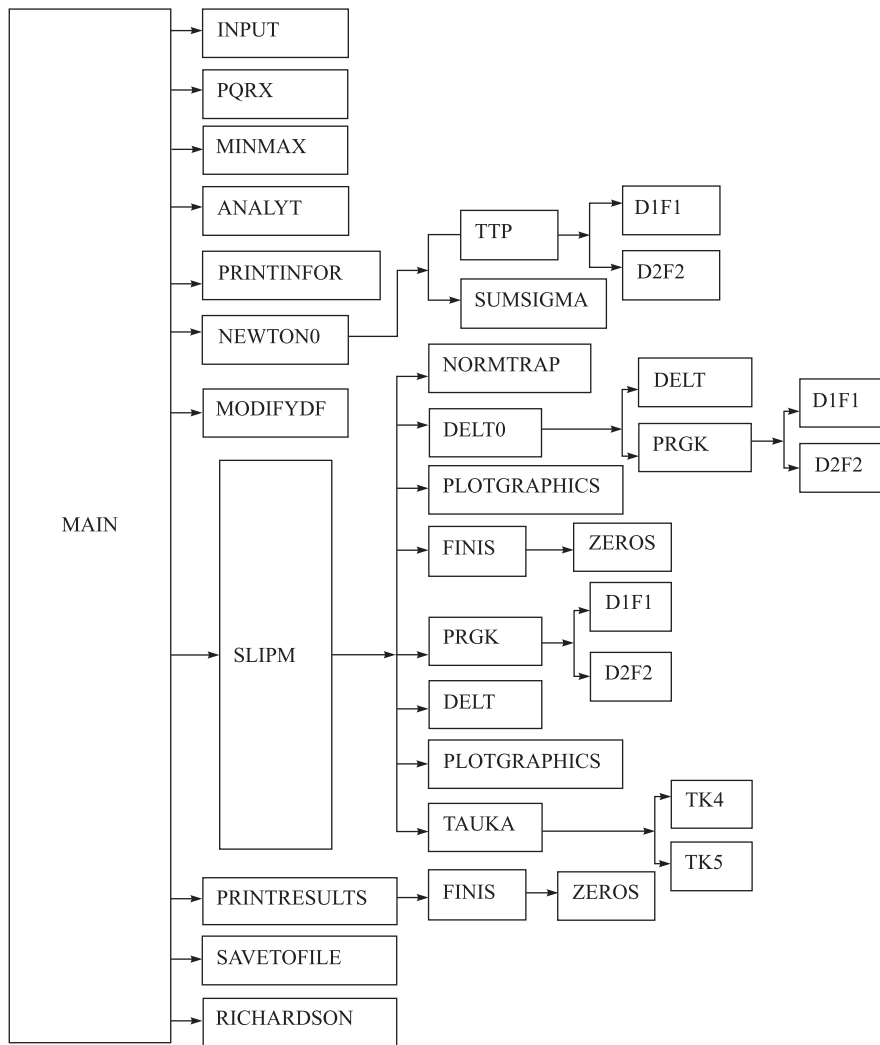


Рис. 1. Блок-схема комплекса программ SLIPM

Процедуры MINMAX, PRINTINFOR, NEWTON0, MODIFYDF, SLIPM, PRINTRESULTS, SAVETOFILE, RICHARDSON являются внутренними процедурами комплекса. Ниже дается их краткое описание, обращение к ним и к используемым в них процедурам второго–четвертого ряда: TTP, SUMSIGMA, NORMTRAP, DELT0, DELT, PRGK, PLOTGRAPHICS, FINIS, ZEROS, TAUKA, TK4, TK5.

1.1. Процедуры INPUT, PQRX, D1F1, D2F2, ANALYT.

INPUT:=proc(). Обращение: INPUT(0).

global A, B, N, H, P, Q, R, X, NZERO, EV0, Y0, EPS, NT, LST0, LST, LDEL, LPR, EV, Y, EV0USER, LX, T0USER, EPS0, CEV0, CY0, SHIFTY0, LVISU, LMOD, CMAX, LRICH, EVANALYT, YANALYT, EV0NEWTON, Y0NEWTON, EVARRAY, OXLG, EQNAME, где

A, B — левая и правая границы отрезка изменения x ;

N — количество узлов равномерной сетки ω_h . N должно быть нечетным числом. Если N задано четным числом, то в программе вычисляется новое $N = N + 1$;

H — шаг разностной сетки, вычисляется по формуле $H = (B - A)/(N - 1)$;

P, Q, R, X — массивы размерности N, которые должны быть вычислены в процедуре PQRX;

NZERO — число нулей функции y ;

EV0 и Y0 — начальное приближение к собственному значению и собственной функции, задаваемое пользователем. Оно может быть получено способом, изложенным в [1, п. 2], с помощью процедуры NEWTON0 или каким-то другим образом.

После завершения работы процедуры SLIPM в EV и Y находится вычисленное сеточное решение задачи $\{\lambda, y\}$.

EPS — малое число ε , характеризующее точность по невязке δ_k [1, (2.13) или (2.14)] вычисления решения задачи.

NT — максимальное допустимое количество итераций.

LST0 — параметр, определяющий способ выбора шага τ_0 [1, пп. 2.3, 2.4]:

при LST0 = 1–3 значение $0 < \tau_0 \leq 1$ задается пользователем;

при LST0 = 4 — по алгоритму [1, (2.18)];

при LST0 = 5 — по алгоритму 5 [1, п. 2.3];

при LST0 = 6 — по алгоритму [1, (2.19)];

при LST0 = 7 — по алгоритму [1, (2.20)].

LST — параметр, определяющий способ выбора шага τ_k ([1, п. 2.3]):

при LST = 1 — по алгоритму [1, (2.15)];

при LST = 2 — по алгоритму [1, (2.16)];

при LST = 3 — по алгоритму [1, (2.17)];

при LST = 4 — по алгоритму [1, (2.18)];

при LST = 5 — по алгоритму 5 [1, п. 2.3].

LDEL — параметр, задающий способ вычисления невязки δ_k :

при LDEL = 1 — по формуле [1, (2.13)];

при LDEL = 2 — по формуле [1, (2.14)].

В таблице представлены все наборы значений параметров LST0, LST, LDEL.

LPR — параметр, определяющий шаг по итерациям выдачи результатов промежуточных итераций.

LST0	1	2	3	4	5	6	6	6	7	7	7
LST	1	2	3	4	5	1	2	3	1	2	3
LDEL	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	1

EV0USER — заданное пользователем начальное собственное значение.

LX — параметр, задающий количество строк, равное $LX + 1$, в таблицах x_k, y_k при выводе на монитор и сохранении в файлах RICHARDSON*.dat (* = 1, 2, 4), SLIPM.txt и SLIPMON4.txt.

T0USER — заданное начальное значение τ_0 . Рекомендуемые значения $\tau_0 = 0,01; 0,05; 0,1$.

EPS0 — заданное значение ε_T [1, (2.4)].

LMOD — параметр, задающий модификацию начального решения перед обращением к процедуре SLIPM по формулам $EV0 = EV0 + CEV0$, $Y0 = CY0(Y0 + SHIFTY0)$.

CEV0, CY0, SHIFTY0 — заданное значение константы (см. [1, п. 3]). Рекомендуемые значения 1; 1,5; 2.

LVISU — параметр, задающий графическую визуализацию промежуточных и окончательных результатов итерационного процесса.

CMAX — максимальное положительное число с плавающей запятой. В тесте CMAX := $1 \cdot 10^{30}$.

LRICH — параметр, задающий возможность уточнения решений с помощью экстраполяционного метода Ричардсона. Пользователь может задавать значение этого параметра 0 или 1. Если LRICH = 0, экстраполяция не выполняется. Если LRICH = 1, процедура выполняет экстраполяцию решений, предварительно вычисленных на последовательности сгущающихся сеток с шагами $h, h/2, h/4$ и находящихся в файлах RICHARDSON1.dat, RICHARDSON2.dat, RICHARDSON4.dat соответственно.

В библиотечном тесте имеются файлы RICHARDSON1.dat, RICHARDSON2.dat, RICHARDSON4.dat и программный комплекс SLIPM-MORSE.ws со значением LRICH = 1. Имеются также наборы пользовательских процедур SLIPM_Legendre_UP.ws и SLIPM_Whittaker_UP.ws для решения уравнений Лежандра и Уиттекера.

EVANALYT, YANALYT и EV0NEWTON, Y0NEWTON — аналитическое и полученное с помощью процедуры NEWTON0 решение соответственно.

EVARRAY — массив собственных значений.

OXLG = 1 для уравнения Лажандра, иначе OXLG = 0.

EQNAME — название задачи. В тесте EQNAME := “Schredinger equation for the Morse potential \n”.

Значения параметров LST0, LST, LDEL, LPR, LX, LVISU, LMOD, LRICH и констант A, B, N, NZERO, EPS, NT, EV0USER, T0USER, EPS0, CEV0, CY0, SHIFTY0, CMAX задаются пользователем.

Процедура PQRX предназначена для заполнения массивов P, Q, R таблицами значений коэффициентов $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$ уравнения [1, (1.1)–(1.4)] во внутренних ($i = 2, \dots, N - 1$) узлах x сетки ω_h . Значения x помещаются в массив X.

Обращение: PQRX(0).

global A, B, N, H, P, Q, R, X, AM, DD, X0, AP, где AM, DD, X0, AP — константы для вычисления потенциала Морзе [1, пример 1 в п. 3].

Процедуры D1F1 и D2F2 вычисляют значения коэффициентов d_1, f_1, d_2, f_2 в граничных условиях [1, (1.2), (1.3)] в левом и правом концах отрезка $[a, b]$ соответственно.

Обращение: D1F1(EV).

global A, AM, DD, X0, AP, D1, F1, DD1, DF1,

где EV — собственное значение λ_k ;

AM, DD, X0, AP — константы потенциала Морзе;

D1 — $d_1(\lambda_k, a)$;

F1 — $f_1(\lambda_k, a)$;

DD1 — $d'_{1\lambda}(\lambda_k, a)$;

DF1 — $f'_{1\lambda}(\lambda_k, a)$.

Обращение: D2F2(EV).

global B, AM, DD, X0, AP, D2, F2, DD2, DF2,

где EV — значение λ_k ;

AM, DD, X0, AP — константы потенциала Морзе;

D2 — $d_2(\lambda_k, b)$;

F2 — $f_2(\lambda_k, b)$;

DD2 — $d'_{2\lambda}(\lambda_k, b)$;

DF2 — $f'_{2\lambda}(\lambda_k, b)$.

Процедура ANALYT предназначена для вычисления аналитического решения $\{\text{EVANALYT}, \text{YANALYT}\} \equiv \{\lambda_a, Y_a\}$, которое присваивается также начальному решению EV0, Y0.

Обращение: ANALYT0.

global AM, DD, X0, AP, EVANALYT, EV0, YANALYT, Y0.

1.2. Процедуры вычисления начального приближения MINMAX, NEWTON0, MODIFYDF.

Процедура MINMAX определяет значения величин XMIN = Q_{\min} , XMAX = Q_{\max} , точку сшивки XW как $Q(XW) = Q_{\max}$ и M — ее номер в массиве X. M должно удовлетворять условию $4 \leq M \leq N - 3$.

Обращение: MINMAX (N, X).

global XMIN, XMAX, CMAX, M, XW, NZERO, Q.

Процедура NEWTON0 определяет начальное приближение к решению задачи [1, (1.1)–(1.4)] по алгоритму, изложенному в [1, п. 2.1].

Обращение: NEWTON0 (A, B, N, NZERO, XMIN, XMAX, X, H, EPS0, ITMAX, NIS, NNEC).

global CMAX, M, XW, SIGMA, T, TP, EVANALYT, EV0, EV0USER, EV0NEWTON, Y0, Y0NEWTON, EVARRAY, где

ITMAX — максимально допустимое число итераций. Если точность после этого не достигнута, выдается сообщение, значение найденного приближения, его точность и значение полинома T (см. [1, (2.1)]);

NIS — количество уже найденных корней полинома (собственных значений). Их значения до обращения к этой процедуре должны быть присвоены первым NIS элементам массива EV;

NNEC — номер корня, до которого включительно надо найти все корни полинома, начиная с NIS-го, и определить функцию Y0;

XMIN, XMAX, M и XW описаны в процедуре MINMAX;

SIGMA — значение суммы из выражения [1, (2.3)];

T — значение полинома $T(\lambda)$ из выражения [1, (2.1)];

TP — значение производной $T'(\lambda)$.

Значение EV0USER определяется в процедуре INPUT. Если оно $\neq 999$, то оно присваивается начальному значению EV0.

Остальные величины описаны в процедуре INPUT.

Процедура MODIFYDF предназначена для модификации решения EV0, Y0 по формулам $EV0 = EV0 + CEV0$; $Y0 = CY0(Y0 + SHIFTY0)$, где константы CEV0, CY0, SHIFTY0 заданы пользователем в процедуре INPUT.

Обращение: MODIFYDF (N, CEV0, CY0, SHIFTY0).

global: EV0, Y0.

Процедура NEWTON0 обращается к внутренним процедурам TTP и SUMSIGMA. Процедура TTP вычисляет значения полинома $T(\lambda)$ (см. [1, (2.1)]), его производной $T'(\lambda)$ и функции Y. Процедура SUMSIGMA вычисляет значение суммы из выражения [1, (2.3)]:

$$\sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{\lambda_n^k - \lambda_j}$$

1.3. Процедура для уточнения начального приближения SLIPM.

Процедура SLIPM организует итерационный процесс, описанный в [1, п. 2.2].

Обращение: SLIPM (A, B, N, P, Q, R, EV0, Y0, EPS, NT, LST0, LST, LDEL, LPR, LX, EV, Y).

global TSUM, AM, TEMEV, EV1, YANALYT, V1, V2, AL10, H, X, SYA2, SYDYA, KEPS, DELTA, DELTA0, TK, T0, LSTT0, T0TRUE, YTEMP, ETEMP, LVISU.

Вспомогательные процедуры NORMTRAP, DELT0, DELT, PRGK, PLOTGRAPHICS, FINIS, ZEROS, TAUKA, TK4, TK. Процедура NORMTRAP нормирует функцию Y с использованием метода трапеций при

вычисления интеграла от квадрата функции Y . Вычисляется новое значение $y = y / \sqrt{\int_a^b y^2(x) dx}$.

Процедуры DELT и DELT0 вычисляют значение невязок δ_k и δ_0 по формулам [1, (2.13) или (2.14)].

В процедуре PRGK методом прогонки определяются функции v_k в задаче [1, (2.8)].

Процедура PLOTGRAPHICS предназначена для наглядного представления в виде графиков результатов итерационного процесса. При значении параметра LVISU = 1 на графики выдаются функции Y0, YANALYT, Y_k , где k — номер итерации, $k = 0, LPR, 2LPR, \dots$

Процедуры ТАУКА, ТК4, ТК5 реализуют описанные в [1, пп. 2.3 и 2.4] алгоритмы вычисления параметров τ_k и τ_0 .

Процедура ZEROS определяет число перемен знака в таблице значений функции Y . Оно засылается в NZERO и отождествляется с числом нулей функции Y .

1.4. Процедуры PRINTINFOR, PRINTRESULTS, SAVETOFILE, RICHARDSON.

Процедура PRINTINFOR выдает данные об авторском коллективе и месте выполнения работы и краткое описание задачи.

Процедуры PRINTRESULTS и FINIS выдают результаты промежуточных и конечных вычислений при выполнении итерационного процесса (TEST RUN OUTPUT).

Процедура SAVETOFILE осуществляет запись на файл SLIPM.txt информации, аналогичной двум предыдущим процедурам совместно.

2. ТОЧНОСТЬ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СХЕМЫ

Точность вычислительной схемы определяется следующим образом.

Пусть $z^* = \{\lambda^*, y^*(x)\}$ — решение задачи, существование которого предполагается. В результате вычислений с использованием трехточечных разностных и квадратурных формул с точностью аппроксимации порядка $O(h^2)$ на равномерной сетке $x \in [a, b]$ с шагом h по изложенной в [1, п. 2.2] схеме за конечное число итераций K , т. е. при выполнении условия $\delta_K < \varepsilon$ (δ_K — невязка в сеточной C -норме), получается приближенное решение: $z_h^K = \{\lambda_h^K, y_h^K(x)\}$.

Если z_h — точное разностное решение, то в сеточной C -норме можно написать следующую оценку:

$$\|z^* - z_h^K\| \leq \|z^* - z_h\| + \|z_h - z_h^K\|. \quad (2.1)$$

Для первого слагаемого в правой части (2.1) имеется следующая оценка из [2]:

$$\|z^* - z_h\| \leq Ch^2.$$

Второе слагаемое в [3] оценивается как

$$\|z_h - z_h^K\| \leq B\delta_K.$$

Здесь B, C — константы.

Когда $B\delta_K \ll Ch^2$, что выполняется при задании малого ε , точность полученного решения близка к теоретической оценке:

$$\|z^* - z_h^K\| \approx Ch^2. \quad (2.2)$$

Ее можно детально исследовать путем расчетов на последовательности сгущающихся сеток. При этом возможно уточнение разностного решения [2, 3].

В случае, если исходная задача является сингулярной, в оценку (2.1) добавляется слагаемое, характеризующее ошибку аппроксимации сингулярных граничных условий условиями на конечных интервалах $[a, b]$. Как правило, оценить эту погрешность можно путем проведения последовательных расчетов на расширяющихся интервалах $[a, b]$.

Все эти факторы следует иметь в виду при задании параметров вычислительной схемы и при оценке точности полученных результатов.

Процедура RICHARDSON.

Процедура RICHARDSON использует метод экстраполяции Ричардсона, который улучшает решение задачи (1.1)–(1.4) работы [1] до порядка $O(h^4)$. Обращаться к этой процедуре необходимо при выборе значения параметра LRICH = 1 и при наличии трех файлов с входными данными с названиями RICHARDSON1.dat, RICHARDSON2.dat, RICHARDSON4.dat соответственно. Для получения этих файлов пользователь должен использовать комплекс SLIPM три раза со значением параметра LRICH = 0 и записать результаты в файлы с названиями RICHARDSON*.dat, где «*» обозначает 1, 2, 4 для вычислений с шагом $h, h/2, h/4$ соответственно. Имя файла RICHARDSON*.dat пользователь может менять в командной строке в MAPLE: `filetext:= fopen("RICHARDSON*.dat",WRITE).`

Обращение: `RICHARDSON()`.
`global EVANALYT, YANALYT, EVR, YR,`
где EVANALYT, YANALYT — аналитический собственный элемент и массив, содержащий значения аналитической собственной функции, соответственно, EVR, YR — собственное значение λ и массив, содержащий значения собственной функции y , для результатов с точностью решения порядка $O(h^4)$ задачи [1, (1.1)–(1.4)]. Вся указанная информация записывается в файл SLIPMON4.txt.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- На базе НАМН создан программный комплекс SLIPM на языке MAPLE, предназначенный для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля для линейного дифференциального оператора второго порядка с однородными граничными условиями общего вида.

- Предложены и программно реализованы два новых алгоритма вычисления начального значения итерационного параметра τ_0 . На приведенных примерах продемонстрировано сокращение количества итераций с их использованием.

- На ряде тестов продемонстрирована заданная точность порядка $O(h^2)$ итерационных ньютоновских схем (h — шаг дискретной сетки по x).

- Использование экстраполяции по Ричардсону для результатов на последовательности трех ступающихся сеток позволяет повысить точность до порядка $O(h^4)$.

- Большие возможности графических пакетов СКА MAPLE позволяют организовать наглядную визуализацию итерационного процесса в SLIPM.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 09-01-00770-а, 10-01-00467-а.

Благодарности. Авторы благодарны А. В. Гусеву и О. Чулуунбаатару за помощь при изучении системы MAPLE и Т. Ф. Сапожниковой и Л. В. Попковой за помощь при оформлении комплекса в библиотеку программ JINRLIB.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Тхак В. Ч. SLIPM — программа на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона. I. Алгоритм. Препринт ОИЯИ P11-2010-2. Дубна, 2000.
2. Марчук Г. И., Шайдунов В. В. Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979.
3. Гавурин М. К. Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итеративных методов // Известия вузов. Сер. «Математика». 1958. Т. 5(6). С. 18–31.

Получено 10 августа 2010 г.

Редактор *А. И. Петровская*

Подписано в печать 22.11.2010.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,75. Уч.-изд. л. 0,88. Тираж 310 экз. Заказ № 57170.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/