

# КАНТВР 4М - ПРОГРАММА РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

А.А. Гусев, Л. Ле Хай, О. Чулуунбаатар, С.И. Виноцкий

Программа написана для системы Maple [1] и протестирована в её версиях 14, 16, 17 и 18. (Intel Core I7 3.20 GHz 8 GB RAM 64bit Windows 8.1; 2 x Xeon 3.2 GHz, 4 GB RAM 64bit Windows 7; PC Inter Pentium CPU 1.50 GHz 4GB 64bit Windows 8)

Файл kantbr4m.pdf содержит описание программы,

файл kantbr4m.mwt содержит код программы

файлы examplexx.txt (xx=01–16) содержат примеры использования программы

Для их запуска можно их содержимое либо скопировать в воркшит через буфер обмена, либо воспользоваться командой << read "examplexx.txt" >>, либо открыть файл с помощью Maple выбирая <<Maple Input >>.

## Содержание

<b>I. Краевые задачи и симметричный квадратичный функционал</b>	<b>3</b>
<b>II. Краткое описание класса решаемых задач</b>	<b>3</b>
<b>III. Вычислительные схемы МКЭ с ИПЭ</b>	<b>6</b>
А. Интерполяционные полиномы Эрмита	6
В. Сведение краевой задачи для ОДУ второго порядка к алгебраической задаче	7
С. Схема решения многоканальной задачи рассеяния	13
D. Алгоритм вычисления комплексных собственных значений и собственных функций связанных и метастабильных состояний	15
<b>Список литературы</b>	<b>17</b>
<b>IV. Входные и выходные данные</b>	<b>18</b>
А. Перечень входных и выходных данных	18
В. Замечания	22
<b>V. Примеры</b>	<b>22</b>
Пример 01. Интерполяция функции по значениям функции и её производных на сетке	23
Пример 02. Решение задачи на собственные значения с граничными условиями первого, второго и третьего рода	24
Пример 03. Решение задачи на собственные значения для уравнения Шредингера с одномерным потенциалом гармонического осциллятора и радиального уравнения для d-мерного гармонического осциллятора	25
Пример 04. Решение задачи на собственные значения для радиального уравнения с кулоновским потенциалом	27
Пример 05. Решение задачи на собственные значения с одномерным потенциалом Пёшля-Теллера	29
Пример 06. Решение задачи на собственные значения с одномерным потенциалом Скарфа (комплексным потенциалом Пёшля-Теллера)	30
Пример 07. Решение задачи рассеяния с одномерным потенциалом Пёшля-Теллера	31
Пример 08. Решение задачи рассеяния с одномерным потенциалом Скарфа	33
Пример 09. Решение задачи на собственные значения с одномерным потенциалом прямоугольной ямы конечной глубины	34
Пример 10. Решение задачи на собственные значения с кусочно-постоянным потенциалом	35
Пример 11. Решение многоканальной задачи рассеяния с кусочно-постоянным потенциалом	37
Пример 12. Решение задачи на собственные значения для системы уравнений, полученных методом Канторовича для уравнения Гельмгольца в прямоугольной области	39
Пример 13. Решение многоканальной задачи рассеяния: туннелирование двух тождественных частиц с осцилляторным взаимодействием через потенциальный барьер	41
Пример 14. Вычисление метастабильных состояний (в качестве начального приближения берётся решение задачи рассеяния при резонансном прохождении)	43
Пример 15. Вычисление метастабильных состояний (в качестве начального приближения берётся решение задачи на связанные состояния)	44
Пример 16. Применение программы для решения краевой задачи для уравнения Шрёдингера с кубической нелинейностью	46

## I. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ И СИММЕТРИЧНЫЙ КВАДРАТИЧНЫЙ ФУНКЦИОНАЛ

Программа предназначена для численного решения методом конечных элементов (МКЭ) [2] краевых задач для системы из  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка относительно неизвестных функций  $\Phi(z) = (\Phi_1(z), \dots, \Phi_N(z))^T$  независимой переменной  $z \in \Omega(z^{\min}, z^{\max})$ :

$$(\mathbf{D} - E\mathbf{I})\Phi^{(i)}(z) \equiv \left( -\frac{1}{f_B(z)}\mathbf{I}\frac{d}{dz}f_A(z)\frac{d}{dz} + \mathbf{V}(z) + \frac{f_A(z)}{f_B(z)}\mathbf{Q}(z)\frac{d}{dz} + \frac{1}{f_B(z)}\frac{df_A(z)\mathbf{Q}(z)}{dz} - E\mathbf{I} \right) \Phi(z) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $f_B(z) > 0$  и  $f_A(z) > 0$  – непрерывные или кусочно-непрерывные положительные функции,  $\mathbf{I}$  – единичная матрица,  $\mathbf{V}(z)$  – симметричная  $V_{ij}(z) = V_{ji}(z)$  и  $\mathbf{Q}(z)$  – антисимметричная  $Q_{ij}(z) = -Q_{ji}(z)$  матрицы эффективных потенциалов размерностью  $N \times N$ , элементы которых непрерывные или кусочно-непрерывные вещественные или комплекснозначные функции из пространства Соболева  $\mathcal{H}_2^{s \geq 1}(\Omega)$ , обеспечивающие существование нетривиальных решений, подчинённых граничным условиям первого (I), второго (II) или третьего (III) рода в граничных точках интервала  $z \in \{z^{\min}, z^{\max}\}$  при заданном значении элементов вещественной или комплексной матрицы  $\mathcal{R}(z^t)$  размерностью  $N \times N$

$$(I): \quad \Phi(z^t) = 0, \quad t = \min \text{ and/or } \max, \quad (2)$$

$$(II): \quad \lim_{z \rightarrow z^t} f_A(z) \left( \mathbf{I}\frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) = 0, \quad t = \min \text{ and/or } \max, \quad (3)$$

$$(III): \quad \left( \mathbf{I}\frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \Big|_{z=z^t} = \mathcal{R}(z^t)\Phi(z^t), \quad t = \min \text{ and/or } \max. \quad (4)$$

Вычисление приближенного решения  $\Phi(z) \in \mathcal{H}_2^{s \geq 1}(\bar{\Omega})$  краевых задач (1)–(4) выполняется МКЭ, с использованием симметричного квадратичного функционала

$$\Xi(\Phi, E, z^{\min}, z^{\max}) \equiv \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} \Phi^\bullet(z) (\mathbf{D} - E\mathbf{I}) \Phi(z) dz = \Pi(\Phi, E, z^{\min}, z^{\max}) - f^A(z^{\max})\Phi^\bullet(z^{\max})\mathbf{G}(z^{\max})\Phi(z^{\max}) + f^A(z^{\min})\Phi^\bullet(z^{\min})\mathbf{G}(z^{\min})\Phi(z^{\min}), \quad (5)$$

$$\Pi(\Phi, E, z^{\min}, z^{\max}) = \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} \left[ f^A(z) \frac{d\Phi^\bullet(z)}{dz} \frac{d\Phi(z)}{dz} + f^B(z)\Phi^\bullet(z)\mathbf{V}(z)\Phi(z) + f^A(z)\Phi^\bullet(z)\mathbf{Q}(z) \frac{d\Phi(z)}{dz} - f^A(z) \frac{d\Phi(z)}{dz} \mathbf{Q}(z)\Phi(z) - f^B(z)E\Phi^\bullet(z)\Phi(z) \right] dz, \quad (6)$$

где  $\mathbf{G}(z) = \mathcal{R}(z) - \mathbf{Q}(z)$  симметричная матрица размерностью  $N \times N$ , а  $\bullet$  обозначает либо транспонирование  $T$ , либо эрмитово сопряжение  $\dagger$ , т.е. транспонирование и комплексное сопряжение, в зависимости от типа решаемой задачи.

## II. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ КЛАССА РЕШАЕМЫХ ЗАДАЧ

Рассматривается три класса краевых задач:

**1. Для многоканальной задачи рассеяния** (примеры: 07, 08, 11, 13, 14) на оси  $z \in (-\infty, +\infty)$  при фиксированном значении энергии  $E \equiv \Re E$  вычисляется искомая матрица решений  $\Phi(z) \equiv \{\Phi_v^{(i)}(z)\}_{i=1}^N$ ,  $\Phi_v^{(i)}(z) = (\Phi_{1v}^{(i)}(z), \dots, \Phi_{Nv}^{(i)}(z))^T$  (индекс  $v$  принимает значения  $\rightarrow$  или  $\leftarrow$  и обозначает начальное направление падающей волны слева направо или справа налево) краевой задачи для системы из  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка (1) на интервале  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ , подчинённых граничным условиям третьего рода (4) в граничных точках интервала  $z \in \{z^{\min}, z^{\max}\}$ , с асимптотикой в виде “падающая волна + уходящие волны” в открытых каналах  $i = 1, \dots, N_o$ :

$$\Phi_v(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \begin{cases} \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{T}_v, & z \in [z^{\max}, +\infty), \\ \mathbf{X}^{(+)}(z) + \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{R}_v, & z \in (-\infty, z^{\min}], \end{cases} & v = \rightarrow, \\ \begin{cases} \mathbf{X}^{(-)}(z) + \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{R}_v, & z \in [z^{\max}, +\infty), \\ \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{T}_v, & z \in (-\infty, z^{\min}], \end{cases} & v = \leftarrow, \end{cases} \quad (7)$$

где  $\mathbf{T}_v$  и  $\mathbf{R}_v$ , соответственно, неизвестные прямоугольные и квадратные матрицы амплитуд прохождения и отражения. При этом вычисляется искомая матрица рассеяния  $\mathbf{S}$  размерностью  $N_o \times N_o$ :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

унитарная и симметричная для вещественных эффективных потенциалов.

Для многоканальной задачи рассеяния на полуоси  $z \in (z^{\min}, +\infty)$  или  $z \in (-\infty, z^{\max})$  вычисляется искомая матрица решений  $\Phi(z)$  краевой задачи для системы из  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка (1) на интервале  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ , подчинённых граничным условиям третьего рода (4) в граничной точке  $z^{\max}$  или  $z^{\min}$  интервала, с асимптотикой в виде “падающая волна + уходящие волны” в открытых каналах  $i = 1, \dots, N_o$ :

$$\begin{aligned} \Phi_{\leftarrow}(z \rightarrow +\infty) &= \mathbf{X}^{(-)}(z) + \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow}, & z \in [z^{\max}, +\infty) \\ \text{или } \Phi_{\rightarrow}(z \rightarrow -\infty) &= \mathbf{X}^{(+)}(z) + \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow}, & z \in (-\infty, z^{\min}] \end{aligned} \quad (9)$$

и подчинённых граничному условию первого, второго, или третьего рода (см. (2)–(4)) в граничной точке  $z^{\min}$  или  $z^{\max}$ . При этом вычисляется искомая матрица рассеяния  $\mathbf{S} = \mathbf{R}_{\leftarrow}$  или  $\mathbf{S} = \mathbf{R}_{\rightarrow}$ .

При решении многоканальной задачи рассеяния учитываются закрытые каналы, в этом случае асимптотические условия (7), (9) имеют вид

$$\Phi_{\rightarrow}^{as} = \begin{cases} \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)\mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)\mathbf{T}_{\rightarrow}^c, & z \geq z^{\max}, \\ \mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow}^c, & z \leq z^{\min}; \end{cases} \quad (10)$$

$$\Phi_{\leftarrow}^{as} = \begin{cases} \mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow}^c, & z \geq z^{\max}, \\ \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)\mathbf{T}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)\mathbf{T}_{\leftarrow}^c, & z \leq z^{\min}; \end{cases} \quad (11)$$

где  $\mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z) = \mathbf{X}^{(+)}(z)$ ,  $z \geq z^{\max}$ ,  $\mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z) = \mathbf{X}^{(+)}(z)$ ,  $z \leq z^{\min}$ ,  $\mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z) = \mathbf{X}^{(-)}(z)$ ,  $z \leq z^{\min}$  в уравнениях (10) и  $\mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z) = \mathbf{X}^{(-)}(z)$ ,  $z \geq z^{\max}$ ,  $\mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z) = \mathbf{X}^{(+)}(z)$ ,  $z \geq z^{\max}$ ,  $\mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z) = \mathbf{X}^{(-)}(z)$ ,  $z \leq z^{\min}$  в уравнениях (11).

Предполагается, что ведущие члены  $\mathbf{X}^{(\pm)}(z)$  асимптотических решений краевой задачи при  $z \leq z^{\min}$  и/или  $z \geq z^{\max}$  имеют вид:

в открытых каналах  $V_{i_o i_o}^t < E$  – осциллирующие решения

$$X_{i_o j}^{(\pm)}(z) \rightarrow \frac{\exp(\pm i p_{i_o}^t z)}{\sqrt{f_A(z) p_i^t}} \delta_{i_o j}, \quad p_{i_o}^t = \sqrt{\frac{f_B(z^t)}{f_A(z^t)}} \sqrt{E - V_{i_o i_o}^t} \quad j = 1, \dots, N, \quad i_o = 1, \dots, N_o, \quad (12)$$

в закрытых каналах  $V_{i_c i_c}^t \geq E$  – экспоненциально падающие решения

$$X_{i_c j}^{(c)}(z) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{f_A(z)}} \exp(-p_{i_c}^t |z|) \delta_{i_c j}, \quad p_{i_c}^t = \sqrt{\frac{f_B(z^t)}{f_A(z^t)}} \sqrt{V_{i_c i_c}^t - E} \quad j = 1, \dots, N, \quad i_c = N_o + 1, \dots, N. \quad (13)$$

Эти соотношения справедливы в случае, если коэффициенты системы уравнений при  $z \leq z^{\min}$  и/или  $z \geq z^{\max}$  подчиняются следующим условиям:

$$\frac{f_A(z)}{f_B(z)} = \frac{f_A(z^t)}{f_B(z^t)} + o(1), \quad t = \min, \max, \quad V_{ii}(z) = V_{ii}^t + o(1), \quad V_{ij}^t(z) = o(1), \quad Q_{ij}^t(z) = o(1), \quad i \neq j. \quad (14)$$

В данной версии программы более общий случай не рассматривается, но если известны асимптотики решений, то программе имеется возможность их включения. Например, для дальнедействующих эффективных потенциалов, убывающих  $\sim z^{-k}$ ,  $k \geq 1$ , применяются асимптотические разложения решений с ведущими членами (12). Примеры вычисления таких разложений с помощью рекуррентных соотношений даны в [4]. При решении краевой задачи используется соответствующий симметричный квадратичный функционал (5), в котором  $\bullet$  означает транспонирование и комплексное сопряжение  $\dagger$  для вещественных потенциалов и транспонирование  $T$  для комплексных потенциалов, необходимый для дискретизации задачи МКЭ.

Подробная информация по решению многоканальной задачи рассеяния дана ниже, см. также примеры 11 и 13.

**2. Для задачи на связанные состояния** (примеры: 02, 03, 04, 05, 06, 10, 12, 15, 16) вычисляется набор  $M$  собственных значений энергии  $E$ :  $\Re E_1 \leq \Re E_2 \leq \dots \leq \Re E_M$  и соответствующий набор собственных функций  $\Phi(z) \equiv \{\Phi^{(m)}(z)\}_{m=1}^M$ ,  $\Phi^{(m)}(z) = (\Phi_1^{(m)}(z), \dots, \Phi_N^{(m)}(z))^T$  в пространстве  $\mathcal{H}_2^2$  для системы из  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка (1), подчинённых граничному условию первого, второго, или третьего рода (см. (2)–(4)), в граничных точках интервала  $z \in \{z^{\min}, z^{\max}\}$  и для вещественных потенциалов условию нормировки и ортогональности

$$\langle \Phi^{(m)} | \Phi^{(m')} \rangle = \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} f_B(z) (\Phi^{(m)}(z))^\dagger \Phi^{(m')}(z) dz = \delta_{mm'}. \quad (15)$$

используется соответствующий симметричный квадратичный функционал (5), в котором  $\bullet$  обозначает транспонирование и комплексное сопряжение  $\dagger$ . Для комплексных потенциалов (примеры 06 и 15) вместо (15) используется следующее условие

$$(\Phi^{(m)} | \Phi^{(m')}) = \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} f_B(z) (\Phi^{(m)}(z))^T \Phi^{(m')}(z) dz = \delta_{mm'}, \quad (16)$$

и соответствующий симметричный квадратичный функционал (5), в котором  $\bullet$  обозначает транспонирование  $T$ .

Для решения задачи на связанные состояния на оси или на полуоси исходная задача аппроксимируется краевой задачей на конечном интервале  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$  с граничными условиями первого, второго или третьего рода с заданными матрицами  $\mathcal{R}(z^t)$ , независимыми от неизвестного собственного значения  $E$ , и вычисляется набор приближенных собственных значений и собственных функций (примеры 02–06, 09, 10, 12, 15–16). Если матрицы  $\mathcal{R}(z^t)$  зависят от неизвестного собственного значения  $E$ , то  $\mathcal{R}(z^t, E)$  определяются известными асимптотическими разложениями искомого решения. В этом случае для вычисления приближённой собственной функции и собственного значения в программе реализована итерационная ньютоновская схема, для которой подходящие начальные приближения выбираются из предварительно вычисленных решений задачи с граничными условиями, независимыми от  $E$  (примеры 04, 14, 15, 16).

**3. Для расчёта метастабильных состояний** (примеры 14 и 15) с неизвестными комплексными собственными значениями энергии  $E$ , решается краевая задача для системы уравнений на конечном интервале с однородными условиями третьего рода, зависящими от неизвестного собственного значения энергии  $E$ , используя соответствующий симметричный квадратичный функционал (5), в котором  $\bullet$  обозначает транспонирование  $T$ . В противоположность задаче рассеяния, асимптотические решения для метастабильных состояний содержат только уходящие волны, которые рассматриваются на достаточно большом, но конечном интервале изменения пространственной переменной [5]. Для метастабильных состояний на оси  $z \in (-\infty, +\infty)$ , собственные функции подчиняются краевым условиям третьего рода (4), где матрицы  $\mathcal{R}(\xi_0^t) = \text{diag}(\mathcal{R}(\xi_0^t))$  зависят от искомого комплексного собственного значения энергии  $E \equiv E_m = \Re E_m + i\Im E_m$ ,  $\Im E_m < 0$  и задаются выражениями

$$\mathcal{R}_{i_o i_o}(z^{\max}, E_m) = \sqrt{\frac{f_B(z^{\max})}{f_A(z^{\max})}} \sqrt{V_{i_o i_o}^{\max} - E_m}, \quad \mathcal{R}_{i_o i_o}(z^{\min}, E_m) = -\sqrt{\frac{f_B(z^{\min})}{f_A(z^{\min})}} \sqrt{V_{i_o i_o}^{\min} - E_m}, \quad (17)$$

поскольку асимптотические решения этой задачи содержат только уходящие волны в открытых каналах, и только экспоненциально убывающие волны в закрытых каналах  $V_{i_c i_c}^t > \Re E$ ,  $i_c = N_o + 1, \dots, N$

$$\mathcal{R}_{i_c i_c}(z^{\max}, E_m) = -\sqrt{\frac{f_B(z^{\max})}{f_A(z^{\max})}} \sqrt{E_m - V_{i_c i_c}^{\max}}, \quad \mathcal{R}_{i_c i_c}(z^{\min}, E_m) = \sqrt{\frac{f_B(z^{\min})}{f_A(z^{\min})}} \sqrt{E_m - V_{i_c i_c}^{\min}}. \quad (18)$$

Для метастабильных состояний на полуоси  $z \in (z^{\min}, +\infty)$  или  $z \in (-\infty, z^{\max})$ , собственная функция подчиняется граничному условию (4), (17) в граничной точке  $z^{\max}$  или  $z^{\min}$  и граничному условию первого, второго, или третьего рода (см. (2), (3) или (4)) в граничной точке  $z^{\min}$  или  $z^{\max}$ .

В этом случае собственные функции подчиняются условиям ортогональности и нормировки

$$\begin{aligned} (\Phi^{(m')} | \Phi^{(m)}) &= (E_m - E_{m'}) \left[ \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} (\Phi^{(m')})^T(z) \Phi^{(m)}(z) f_B(z) dz - \delta_{m'm} \right] + C_{m'm} = 0, \\ C_{m'm} &= -f_A(z^{\max}) (\Phi^{(m')})^T(z^{\max}) [\mathcal{R}_{i_o i_o}(z^{\max}, E_m) - \mathcal{R}_{i_o i_o}(z^{\max}, E_{m'}) - 2\mathbf{Q}(z^{\max})] \Phi^{(m)}(z^{\max}) \\ &\quad + f_A(z^{\min}) (\Phi^{(m')})^T(z^{\min}) [\mathcal{R}_{i_o i_o}(z^{\min}, E_m) - \mathcal{R}_{i_o i_o}(z^{\min}, E_{m'}) - 2\mathbf{Q}(z^{\min})] \Phi^{(m)}(z^{\min}). \end{aligned} \quad (19)$$

Заметим, что условие ортогональности получается вычислением разности вариационных функционалов (5) с подстановкой в них собственных значений  $E_m, E_{m'}$ , собственных функций  $\Phi_m(z), \Phi_{m'}(z)$  и элементов матриц  $\mathcal{R}(z^{\max}), \mathcal{R}(z^{\min})$  из формул (17), (18). Для вычисления приближённых комплексных собственных значений и собственных функций метастабильных состояний в программе реализована итерационная ньютоновская схема, для которой подходящие начальные приближения выбираются из предварительно вычисленных решений задачи с граничными условиями при фиксированном значении  $E$ . В примере 14 в качестве начального приближения выбирается подходящее решение задачи рассеяния при значении энергии  $E \equiv \Re E$ , соответствующее резонансному прохождению. В примере 15 в качестве начального приближения выбирается подходящее решение задачи на связанные состояния.

### III. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СХЕМЫ МКЭ С ИПЭ

Вычислительная схема решения краевых задач (1)–(4) выводится из симметричного квадратичного функционала (5), (6) на основе МКЭ. В методе конечных элементов интервал  $[z^{\min}, z^{\max}]$  разбивается на подынтервалы, которые называются элементами. Размер этих элементов определяется достаточно гибко принимая во внимание физические свойства, качественное поведение и свойства гладкости искомого решения и его производных, которые аппроксимируются с помощью интерполяционных полиномов Эрмита. Интервал  $\Delta = [z^{\min}, z^{\max}]$  покрывается набором  $n$  элементов  $\Delta_j = [z_j^{\min}, z_j^{\max} \equiv z_{j+1}^{\min}]$ , так что  $\Delta = \bigcup_{j=1}^n \Delta_j$ . В результате имеем сетку

$$\Omega^{h_j(z)}[z^{\min}, z^{\max}] = \{z^{\min} = z_1^{\min}, z_j^{\max} = z_j^{\min} + h_j, j = 1, \dots, n-1, z_n^{\max} = z_n^{\min} + h_n = z^{\max}\}, \quad (20)$$

где  $z_j^{\min} \equiv z_{j-1}^{\max}$ ,  $j = 2, \dots, n$  точки сетки, величина шага  $h_j = z_j^{\max} - z_j^{\min}$  задаётся длиной элемента  $\Delta_j$ .

В программе реализована возможность задания квазиравномерной сетки, для которой  $h_1 = h_2 = \dots = h_{n_1}$ ,  $h_{n_1+1} = h_{n_1+2} = \dots = h_{n_1+n_2}$ ,  $h_{n_1+n_2+1} = h_{n_1+n_2+2} = \dots = h_{n_1+n_2+n_3}$ , ... т.е. интервал  $\Delta = [z^{\min}, z^{\max}]$  сначала разбивается на **nmesh** подынтервалов (в общем случае неравной длины), каждый из которых разбивается на **ngrid**( $r_0$ )= $n_{r_0}$  подынтервалов равной длины.

#### A. Интерполяционные полиномы Эрмита

На каждом элементе  $\Delta_j$  задаём равномерную подсетку  $\Omega_j^{h_j(z)}[z_j^{\min}, z_j^{\max}] = \{z_{(j-1)p} = z_j^{\min}, z_{(j-1)p+r}, r = 1, \dots, p-1, z_{jp} = z_j^{\max}\}$  с узловыми точками,  $z_r \equiv z_{(j-1)p+r}$ , определёнными по формуле

$$z_{(j-1)p+r} = ((p-r)z_j^{\min} + rz_j^{\max})/p, \quad r = 0, \dots, p. \quad (21)$$

В качестве набора локальных функций  $\{N_l(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})\}_{l=0}^{l^{\max}}$ ,  $l^{\max} = \sum_{r=0}^p \kappa_r^{\max}$  на каждом элементе  $z \in [z_j^{\min}, z_j^{\max}]$  используем интерполяционные полиномы Эрмита (ИПЭ)  $\{\{\varphi_r^\kappa(z)\}_{r=0}^p\}_{\kappa=0}^{\kappa_r^{\max}-1}$ , заданные в узлах  $z_r$ ,  $r = 0, \dots, p$  сетки (21). Для каждого из узлов  $z_r$ , значения функций  $\varphi_r^\kappa(z)$  и их производных до порядка  $(\kappa_r^{\max} - 1)$ , т.е.  $\kappa = 0, \dots, \kappa_r^{\max} - 1$ , где  $\kappa_r^{\max}$  кратность узла  $z_r$ , определяются по формулам [6]

$$\varphi_r^\kappa(z_{r'}) = \delta_{rr'} \delta_{\kappa 0}, \quad \left. \frac{d^{\kappa'} \varphi_r^\kappa(z)}{dz^{\kappa'}} \right|_{z=z_{r'}} = \delta_{rr'} \delta_{\kappa \kappa'}. \quad (22)$$

Для вычисления ИПЭ введём вспомогательную весовую функцию

$$w_r(z) = \prod_{r'=0, r' \neq r}^p \left( \frac{z - z_{r'}}{z_r - z_{r'}} \right)^{\kappa_{r'}^{\max}}, \quad w_r(z_r) = 1. \quad (23)$$

Производные весовой функции представимы в виде произведения

$$\frac{d^\kappa w_r(z)}{dz^\kappa} = w_r(z) g_r^\kappa(z),$$

где множитель  $g_r^\kappa(z)$  вычисляется с помощью рекуррентных соотношений

$$g_r^\kappa(z) = \frac{d g_r^{\kappa-1}(z)}{dz} + g_r^1(z) g_r^{\kappa-1}(z), \quad (24)$$

с начальными условиями

$$g_r^0(z) = 1, \quad g_r^1(z) \equiv \frac{1}{w_r(z)} \frac{dw_r(z)}{dz} = \sum_{r'=0, r' \neq r}^p \frac{\kappa_{r'}^{\max}}{z - z_{r'}}.$$

ИПЭ  $\varphi_r^\kappa(z)$  ищем в следующем виде

$$\varphi_r^\kappa(z) = w_r(z) \sum_{\kappa'=0}^{\kappa_r^{\max}-1} a_r^{\kappa, \kappa'} (z - z_r)^{\kappa'}. \quad (25)$$

Продифференцировав (25) по  $z$  в точке  $z_r$  и воспользовавшись (23), получаем

$$\left. \frac{d^{\kappa'} \varphi_r^\kappa(z)}{dz^{\kappa'}} \right|_{z=z_r} = \sum_{\kappa''=0}^{\kappa'} \frac{\kappa'!}{\kappa''!(\kappa' - \kappa'')!} g_r^{\kappa' - \kappa''}(z_r) a_r^{\kappa, \kappa''} \kappa''!. \quad (26)$$

Из (26) для коэффициентов  $a_r^{\kappa, \kappa'}$  получаем следующие выражения

$$a_r^{\kappa, \kappa'} = \left( \left. \frac{d^{\kappa'} \varphi_r^\kappa(z)}{dz^{\kappa'}} \right|_{z=z_r} - \sum_{\kappa''=0}^{\kappa'-1} \frac{\kappa'!}{\kappa''!(\kappa' - \kappa'')!} g_r^{\kappa' - \kappa''}(z_r) a_r^{\kappa, \kappa''} \kappa''! \right) / \kappa'!. \quad (27)$$

С учётом (22) из (27), получаем искомые коэффициенты разложения  $a_r^{\kappa, \kappa'}$  интерполяционных полиномов Эрмита (25)

$$a_r^{\kappa, \kappa'} = \begin{cases} 0, & \kappa' < \kappa, \\ 1/\kappa'!, & \kappa' = \kappa, \\ - \sum_{\kappa''=\kappa}^{\kappa'-1} \frac{1}{(\kappa' - \kappa'')!} g_r^{\kappa' - \kappa''}(z_r) a_r^{\kappa, \kappa''}, & \kappa' > \kappa. \end{cases}$$

Отметим, что степень всех интерполяционных полиномов Эрмита  $\varphi_r^\kappa(z)$  не зависит от  $\kappa$  и равна  $p' = \sum_{r'=0}^p \kappa_{r'}^{\max} - 1$ . Далее будем рассматривать только полиномы Эрмита с узлами одинаковой кратности  $\kappa_r^{\max} = \kappa^{\max}$ ,  $r = 0, \dots, p$ . В этом случае степень полиномов равна  $p' = \kappa^{\max}(p + 1) - 1$ . Для таких полиномов введём следующее обозначение

$$N_{\kappa^{\max} r + \kappa}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) = \varphi_r^\kappa(z), \quad r = 0, \dots, p, \quad \kappa = 0, \dots, \kappa^{\max} - 1. \quad (28)$$

Такие ИПЭ образуют базис в пространстве полиномов степени  $p' = \kappa^{\max}(p + 1) - 1$  на элементе  $z \in [z_j^{\min}, z_j^{\max}]$  с непрерывными производными до порядка  $\kappa^{\max} - 1$  в граничных точках элемента.

При  $\kappa^{\max} = 1$  интерполяционный многочлен Эрмита совпадает с интерполяционным многочленом Лагранжа, который не имеет производных в граничных точках интервала  $z \in [z^{\min}, z^{\max}]$ .

Интерполяционные многочлены Лагранжа и интерполяционные многочлены Эрмита с кратностью узлов  $\kappa^{\max} = 2, 3$  (и их первые и вторые производные по  $z$ ) показаны на Рис. 1 – 3.

Видно, что значения ИПЭ  $N_{\kappa^{\max} p + \kappa}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})$  и  $N_\kappa(z, z_{j+1}^{\min}, z_{j+1}^{\max})$  (при  $r = p$  и  $r = 0$ ) их производных до порядка  $\kappa^{\max} - 1$  в точке  $z_j^{\max} = z_{j+1}^{\min}$  совпадают. Кроме того, граничные точки являются нулями кратностью  $\kappa^{\max}$  остальных ИПЭ независимо от длины элементов  $[z_j^{\min}, z_j^{\max}]$  и  $[z_{j+1}^{\min}, z_{j+1}^{\max}]$ . Это обстоятельство позволяет построить базис кусочно-полиномиальных функций с непрерывными производными до порядка  $\kappa^{\max} - 1$  на любом наборе  $\Delta = \bigcup_{j=1}^n \Delta_j = [z^{\min}, z^{\max}]$  элементов  $\Delta_j = [z_j^{\min}, z_j^{\max} \equiv z_{j+1}^{\min}]$ .

## В. Сведение краевой задачи для ОДУ второго порядка к алгебраической задаче

Построим дискретное представление решения  $\Phi(z)$  задачи (1)–(4), редуцированной к вариационному функционалу (5), (6) на конечноэлементной сетке,

$$\Omega_{h_j(z)}^p [z^{\min}, z^{\max}] = [z_0 = z^{\min}, z_l, l = 1, \dots, np - 1, z_{np} = z^{\max}], \quad (29)$$

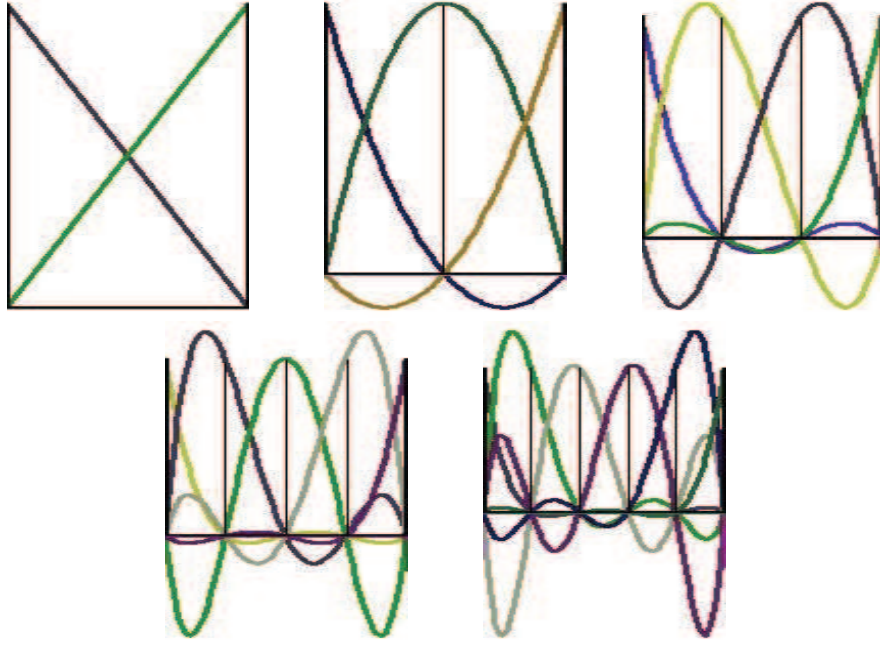


Рис. 1: Интерполяционные полиномы Лагранжа до пятого порядка  $p' = p = 1, 2, 3, 4, 5$ ,  $\kappa^{\max} = 1$ , узлы полиномов отмечены вертикальными линиями.

с узлами  $z_l = z_{jp} = z_j^{\max} \equiv z_{j+1}^{\min}$  на сетке  $\Omega^{h_j(z)}[z^{\min}, z^{\max}]$ , определённой в (20), и узловыми точками  $z_l = z_{(j-1)p+r}$ ,  $r = 0, \dots, p$  подсеток  $\Omega_j^{h_j(z)}[z_j^{\min}, z_j^{\max}]$ ,  $j = 1, \dots, n$ , из уравнения (21). Решение  $\Phi^h(z) \approx \Phi(z)$  ищем в виде разложения по базисным функциям  $N_\mu^g(z)$  на интервале  $z \in \Delta = [z^{\min}, z^{\max}]$ :

$$\Phi_m^h(z) = \sum_{\mu=0}^{L-1} \Phi_{m;\mu}^h N_\mu^g(z), \quad \Phi_m^h(z_l) = \Phi_{m;l\kappa^{\max}}^h, \quad \left. \frac{d^\kappa \Phi_m^h(z)}{dz^\kappa} \right|_{z=z_l} = \Phi_{m;l\kappa^{\max}+\kappa}^h, \quad (30)$$

где  $L = (pm + 1)\kappa^{\max}$  число базисных функций  $N_\mu^g(z)$  и искоемых коэффициентов  $\Phi_\mu^h$  (матрицы-столбцы размерностью  $N \times 1$ ), которые при  $\mu = l\kappa^{\max} + \kappa$  есть значения производных  $\kappa$ -го порядка функции  $\Phi^h(z)$  в каждом узле  $z = z_k$  сетки  $\Omega_{h_j}^p(z)[z^{\min}, z^{\max}]$ , включая значение самой функции  $\Phi_m^h(z)$  при  $\kappa = 0$ .

Базисные функции  $N_\mu^g(z)$  это кусочно-непрерывные полиномы порядка  $p'$  на интервале  $z \in \Delta = [z^{\min}, z^{\max}]$ . Значения функции  $N_\mu^g(z) \equiv N_{l\kappa^{\max}+\kappa}^g(z)$  и её производных до порядка  $\kappa^{\max} - 1$  равны нулю во всех узлах сетки  $\Omega_{h_j}^p(z)$ , за исключением значения производной  $\kappa$ -го порядка в узле  $z_l$  равного единице, т.е.  $\left. \frac{d^\kappa N_{l\kappa^{\max}+\kappa}^g(z)}{dz^\kappa} \right|_{z=z_l} = \delta_{l\kappa^{\max}+\kappa}$ ,  $l = 0, \dots, np$ ,  $\kappa = 0, \dots, \kappa^{\max} - 1$ .

Для узлов  $z_l$  сетки (29), которые не совпадают с точками  $z_j^{\max}$  сетки (20), т.е. при  $l \neq jp$ ,  $j = 1, \dots, n - 1$ , полином  $N_\mu^g(z)$  при  $\mu = (p(j-1) + r)\kappa^{\max} + \kappa$  имеет вид:

$$N_{(p(j-1)+r)\kappa^{\max}+\kappa}^g(z) = \begin{cases} N_{\kappa^{\max}r+\kappa}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}), & z \in \Delta_j; \\ 0, & z \notin \Delta_j, \end{cases} \quad (31)$$

т.е. определяется как интерполяционный полином Эрмита  $N_{\kappa^{\max}r+\kappa}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})$  на элементе  $z \in \Delta_j$  и равен нулю вне его. Поскольку точки  $z_j^{\min}$  и  $z_j^{\max}$  есть нули кратности  $\kappa^{\max}$ , то такие кусочно-полиномиальные функции и их производные до порядка  $\kappa^{\max} - 1$  являются непрерывными на всём интервале  $\Delta$ .

Для узлов  $z_l$  сетки (29), совпадающих с одной из точек  $z_j^{\max}$  сетки (20), принадлежащей двум элементам  $\Delta_j$  и  $\Delta_{j+1}$ ,  $j = 1, \dots, n - 1$ , т.е. при  $l = jp$ , кусочно-полиномиальная функция  $N_{p\kappa^{\max}j+\kappa}^g(z)$ , производная которой порядка  $\kappa$  в узле  $z_l = z_j^{\max}$  равна единице, имеет вид:

$$N_{p\kappa^{\max}j+\kappa}^g(z) = \begin{cases} N_{\kappa^{\max}p+\kappa}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}), & z \in \Delta_j; \\ N_\kappa(z, z_{j+1}^{\min}, z_{j+1}^{\max}), & z \in \Delta_{j+1}; \\ 0, & z \notin \Delta_j \cup \Delta_{j+1}. \end{cases} \quad (32)$$



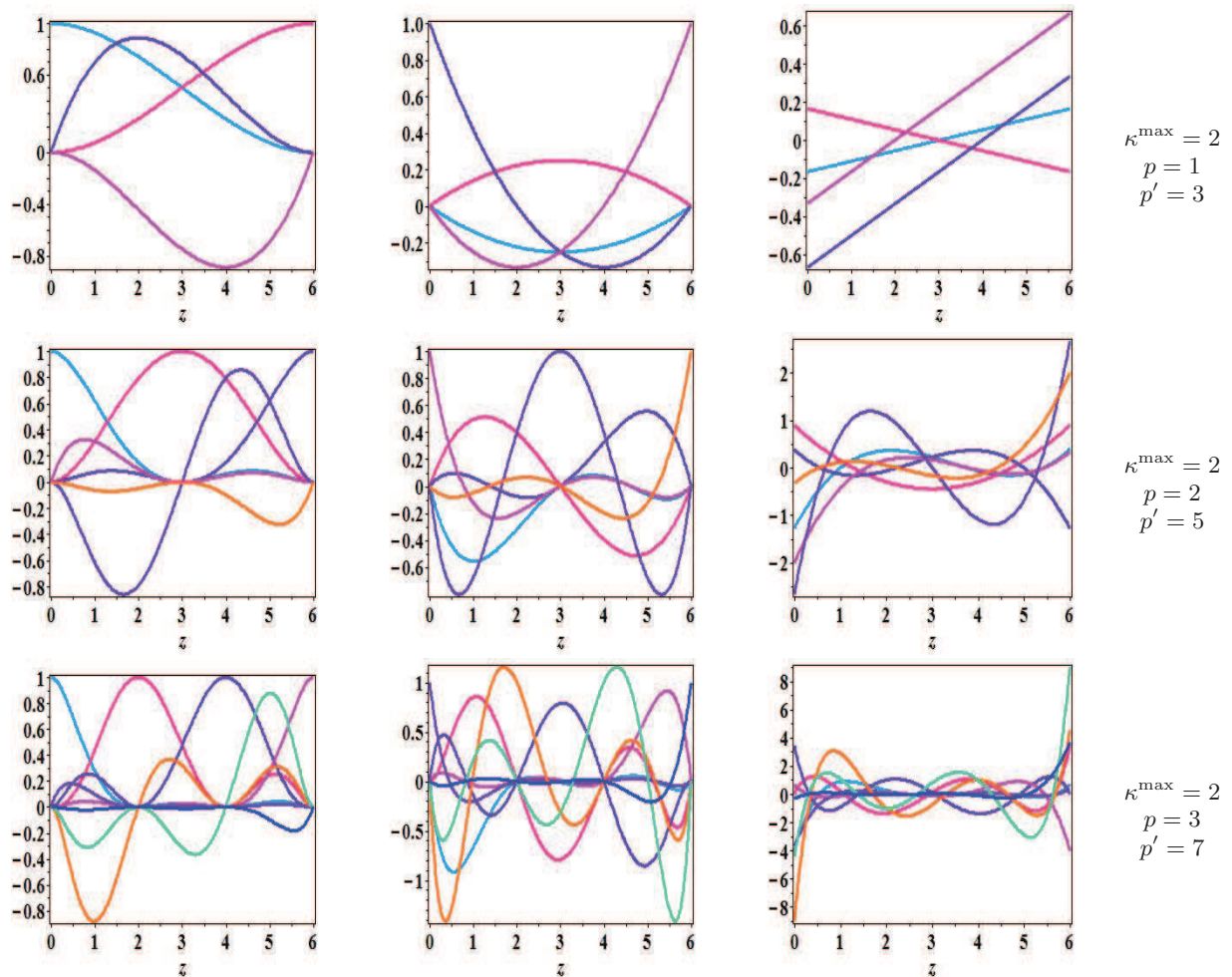


Рис. 2: Интерполяционные полиномы Эрмита с узлами кратности  $\kappa^{\max} = 2$  (слева), их первые (в центре) и вторые (справа) производные при  $z_j^{\min} = 0$   $z_j^{\max} = 6$ .

Другими словами, кусочно-полиномиальные функции строятся как сшивка двух полиномов, первый из которых  $N_{\kappa^{\max} p + \kappa}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})$ , определён в области  $\Delta_j$  и значение его производной порядка  $\kappa$  в узле  $z_l = z_j^{\max}$  равно единице, а второй  $N_{\kappa}(z, z_{j+1}^{\min}, z_{j+1}^{\max})$  – определён в области  $\Delta_{j+1}$  и значение его производной порядка  $\kappa$  в узле  $z_l = z_j^{\max}$  также равно единице. Эти кусочно-полиномиальные функции со всеми их производными до порядка  $\kappa^{\max} - 1$  также непрерывны на интервале  $z \in \Delta$ .

В качестве примера на рис. 4, 5 и 6 представлены базисные функции  $N_{\mu}^g(z)$  – кусочно-непрерывные полиномы порядка  $p'$  с ИПЭ при различных  $\kappa^{\max}$  и  $p$  на сетке (29) из трёх конечных элементов  $n = 3$ .

На рис. 4 показаны базисные функции с лагранжевскими элементами первого  $p' = 1$ , второго  $p' = 2$  и четвёртого  $p' = 4$  порядка:  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 1)$ ,  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 2)$ ,  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 4)$ . Видно, что в граничных точках конечных элементов, отмеченных вертикальными линиями, базисные функции непрерывны, а изломы показывают, что их первые производные терпят разрывы.

На рис. 5 показаны базисные функции третьего порядка  $p' = 3$  с лагранжевскими элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 3)$ , и с эрмитовыми элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (2, 1)$ . На рис. 6 показаны базисные функции пятого порядка  $p' = 5$  с лагранжевскими элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 5)$ , и с эрмитовыми элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (2, 2)$  и  $(\kappa^{\max}, p) = (3, 1)$ . Видно, что эрмитовы элементы, в отличие лагранжевых, в граничных точках конечных элементов не имеют изломов, т.е. базисные функции и их первые производные непрерывны.

Остаток от деления номера базисной функции  $\mu$  на  $\kappa^{\max}$  показывает, функция (если  $\mu$  кратно  $\kappa^{\max}$ ) или производная порядка  $\kappa$  (если остаток равен  $\kappa$ ) в одном из узлов принимают значение равное единице: для базисных функций с эрмитовыми элементами с  $\kappa^{\max} = 2$ , первые производные которых в одном из узлов принимают значение равное единице, отмечены нечётными числами, а для базисных функций с эрмитовыми элементами с  $\kappa^{\max} = 3$ , первые и вторые производные которых в одном из узлов принимают значение равное единице,

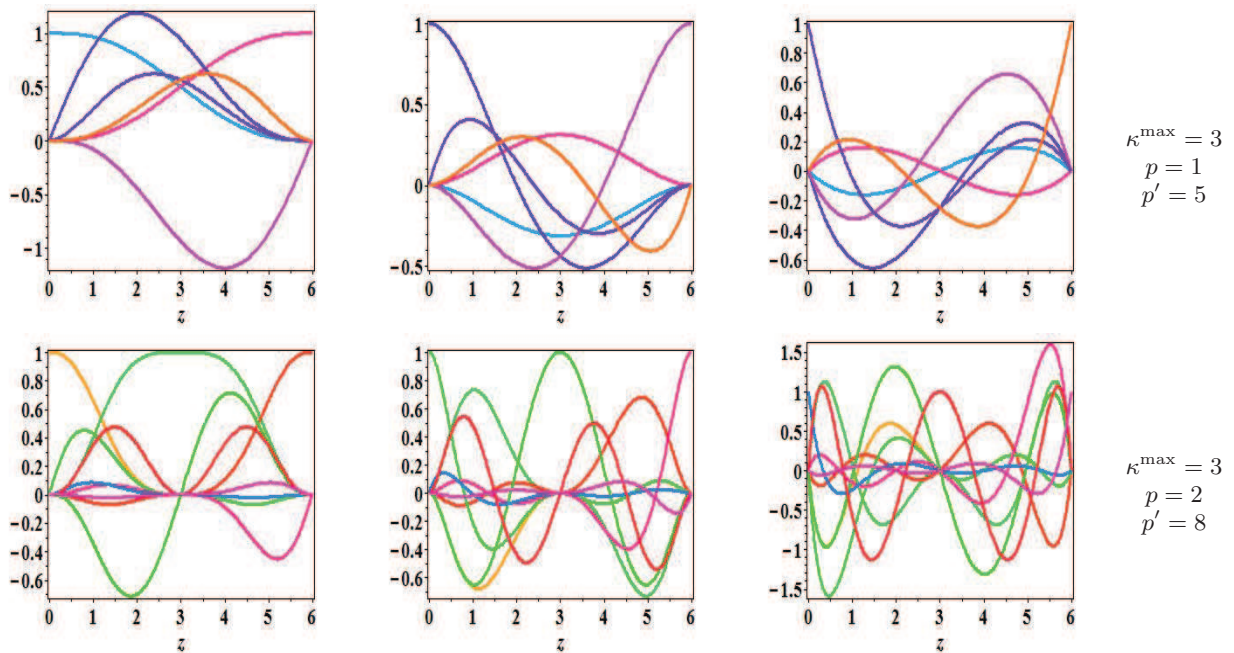


Рис. 3: Интерполяционные полиномы Эрмита с узлами кратности  $\kappa^{\max} = 3$  (слева), их первые (в центре) и вторые (справа) производные при  $z_j^{\min} = 0$   $z_j^{\max} = 6$ .

отмечены числами 1,4,7,10 и 2,5,8,11, соответственно.

Подстановка разложения (30) в вариационный функционал (5), (6) сводит краевую задачу (1)–(4) к обобщённой алгебраической задаче относительно набора собственных значений  $E$  собственных векторов  $\Phi^h = \{\{\Phi_{\nu\mu}^h\}_{\nu=0}^N\}_{\mu=0}^{L-1}$ :

$$(\tilde{\mathbf{A}} - E^h \mathbf{B}) \Phi^h = 0. \quad (33)$$

Здесь  $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}^{(2)} + \mathbf{A}^{(1)} + \mathbf{V} + \mathbf{M}^{\min} - \mathbf{M}^{\max}$  и положительно определённая  $\mathbf{B}$  симметричные матрицы жёсткости и масс размерностью  $NL \times LN$ , где  $L = \kappa^{\max}(np + 1)$ :

$$\begin{aligned}
A_{\nu_1, \nu_2; \mu_1+1, \mu_2+1}^{(2)} &= \sum_{(j, l_1, l_2) \in D} A_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^{(2)j}, & A_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^{(2)j} &= \int_{z_j^{\min}}^{z_j^{\max}} \delta_{\nu_1 \nu_2} f_A(z) \frac{dN_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} \frac{dN_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} dz, \\
A_{\nu_1, \nu_2; \mu_1+1, \mu_2+1}^{(1)} &= \sum_{(j, l_1, l_2) \in D} A_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^{(1)j}, & A_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^{(1)j} &= \int_{z_j^{\min}}^{z_j^{\max}} f_A(z) N_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) Q_{\nu_1 \nu_2}(z) \frac{dN_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} dz \\
&\quad - \int_{z_j^{\min}}^{z_j^{\max}} f_A(z) \frac{dN_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} Q_{\nu_1 \nu_2}(z) N_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) dz, \\
V_{\nu_1, \nu_2; \mu_1+1, \mu_2+1} &= \sum_{(j, l_1, l_2) \in D} V_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^j, & V_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^j &= \int_{z_j^{\min}}^{z_j^{\max}} f_B(z) dz N_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) V_{\nu_1 \nu_2}(z) N_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}), \\
B_{\nu_1, \nu_2; \mu_1+1, \mu_2+1} &= \sum_{(j, l_1, l_2) \in D} B_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^j, & B_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^j &= \int_{z_j^{\min}}^{z_j^{\max}} \delta_{\nu_1 \nu_2} f_B(z) N_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) N_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) dz, \quad (34)
\end{aligned}$$

где  $D = \{j \in \{1, \dots, n\}, l_1 \in \{0, \dots, p'\}, l_2 \in \{0, \dots, p'\} | \mu_1 = p\kappa^{\max}(j-1) + l_1, \mu_2 = p\kappa^{\max}(j-1) + l_2\}$ .

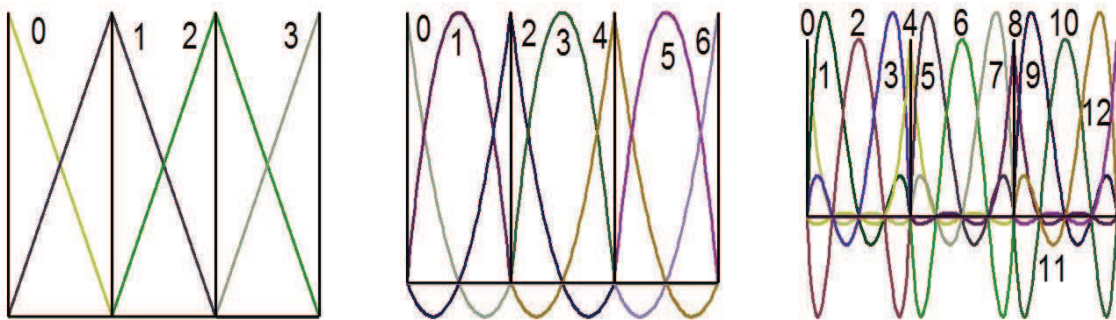


Рис. 4: Базисные функции  $N_{\mu}^g(z)$  с лагранжевыми элементами  $p' = 1, 2, 4$  первого ( $p' = 1, \mu = 0, 1, 2, 3$ ), второго ( $p' = 2, \mu = 0, 1, \dots, 6$ ) и четвёртого ( $p' = 4, \mu = 0, 1, \dots, 12$ ) порядка:  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 1)$ ,  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 2)$ ,  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 4)$ , для  $n = 3$  конечных элементов, разделённых на рисунке вертикальными линиями.

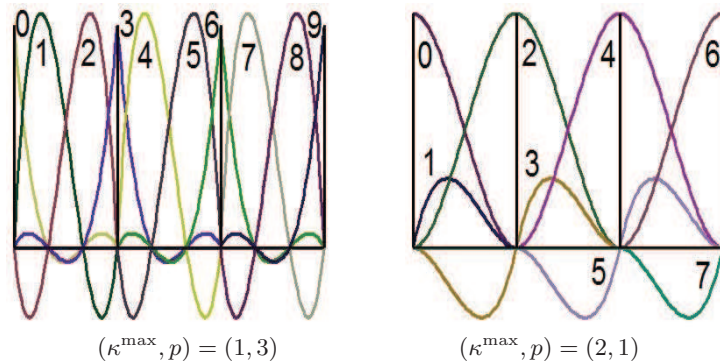


Рис. 5: Базисные функции  $N_{\mu}^g(z)$  — кусочно-непрерывные полиномы третьего порядка  $p' = 3$ : с лагранжевыми элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 3)$ , и с эрмитовыми элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (2, 1)$ , для  $n = 3$  конечных элементов, разделённых на рисунке вертикальными линиями.

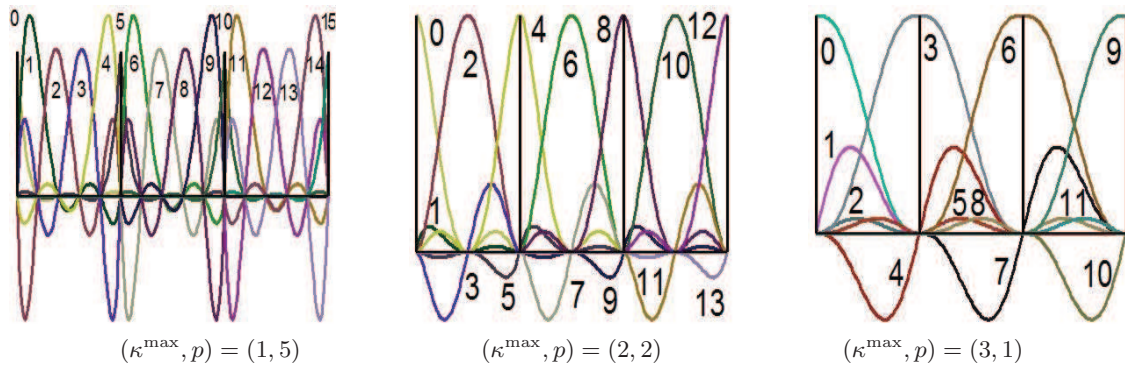


Рис. 6: Базисные функции  $N_{\mu}^g(z)$  — кусочно-непрерывные полиномы пятого порядка  $p' = 5$ : с лагранжевыми элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 5)$ , и с эрмитовыми элементами  $(\kappa^{\max}, p) = (2, 2)$  и  $(\kappa^{\max}, p) = (3, 1)$ , для  $n = 3$  конечных элементов, разделённых на рисунке вертикальными линиями.

Матрицы  $\mathbf{M}^{\max}$  и  $\mathbf{M}^{\min}$  размерностью  $NL \times NL$  имеют только по одной ненулевой подматрице размерностью  $N \times N$ :  $M_{\nu_1, \nu_2; 11}^{\min} = f_A(z^{\min})R_{\nu_1, \nu_2}(z^{\min})$  и  $M_{\nu_1, \nu_2; L+1-\kappa^{\max}, L+1-\kappa^{\max}}^{\max} = f_A(z^{\max})R_{\nu_1, \nu_2}(z^{\max})$ , соответственно.

1. Если коэффициенты  $f_B(z)$ ,  $f_A(z)$  и/или потенциальная  $V(z)$  функции уравнения (1) заданы в табличной форме, то используя подходящую интерполяцию по ИПЭ, применяем интерполяционную квадратурную формулу, например, для матричных элементов  $V_{l_1; l_2}(z^{\min}, z^{\max})$  из (34):

$$V_{l_1; l_2}^j = \sum_{r=0}^p \sum_{\kappa=0}^{\kappa^{\max}-1} W_{l_1; l_2; \kappa^{\max}r+\kappa}^j(z_j^{\min}, z_j^{\max}) V^{(\kappa)}(z_{(j-1)p+r}),$$

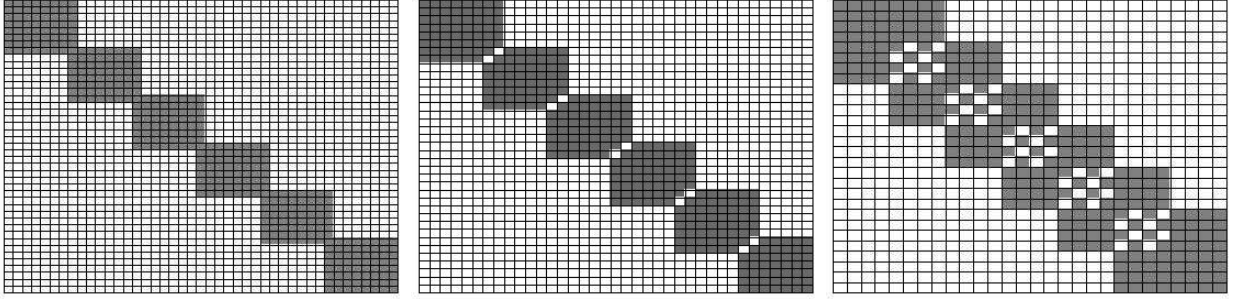


Рис. 7: Структуры матриц  $B_{L_1 L_2}$  и  $A_{L_1 L_2}$  при  $V(z) = 0$  и  $Q(z) = 0$  для шести ( $n = 6$ ) элементов на всём интервале  $(z_j^{\min}, z_j^{\max})$  в зависимости от кратности узлов  $\kappa^{\max}$  и числа подынтервалов  $p$  для схем седьмого порядка точности  $p' = 7$ . Слева направо:  $(\kappa^{\max}, p) = (1, 7)$ ,  $(\kappa^{\max}, p) = (2, 3)$ ,  $(\kappa^{\max}, p) = (4, 1)$ , матрицы размерностью  $L \times L$ ,  $L = \kappa^{\max}(np + 1)$ , соответственно, равной  $43 \times 43$ ,  $38 \times 38$ ,  $28 \times 28$ , с общим числом элементов внутри блоков  $(n(p^2 + 2p) + 1)(\kappa^{\max})^2 = 379, 364, 304$  и шириной ленты  $2(p' + 1) - \kappa^{\max} = 15, 14, 12$ . При  $N > 1$  каждый блок представляет собой матрицу размерностью  $N \times N$ , т.е.  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{A}$  есть матрицы размерностью  $NL \times NL$  с общим числом элементов внутри блоков  $(n(p^2 + 2p) + 1)(\kappa^{\max})^2 N^2$  и шириной ленты  $(2(p' + 1) - \kappa^{\max})N$ .

где весовая функция  $W_{l_1; l_2; l_3}^j(z_j^{\min}, z_j^{\max})$  даётся интегралом от произведения трёх ИПЭ:

$$W_{l_1; l_2; l_3}^j(z_j^{\min}, z_j^{\max}) = \int_{z_j^{\min}}^{z_j^{\max}} f_B(z) N_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) N_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) N_{l_3}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) dz.$$

Полученное выражение является точным для потенциальной функции  $V(z)$  в виде полинома степени меньшей, чем  $p'$ . Иначе, это разложение обеспечивает точность вычисления собственных функций и собственных значений до порядка  $p' + 1$ .

2. Если интегралы (34) не вычисляются аналитически, то применяются квадратуры Гаусса [7] с  $p' + 1$  узлами на элементе, обеспечивающие теоретические оценки точности (35) достижимые в МКЭ,

$$\begin{aligned} A_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^{(2)j} &= \sum_{g=0}^{p'} \delta_{\nu_1 \nu_2} w_g f_A(z_g) \left. \frac{dN_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} \right|_{z=z_g} \left. \frac{dN_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} \right|_{z=z_g} \\ A_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^{(1)j} &= \sum_{g=0}^{p'} w_g f_A(z_g) N_{l_1}(z_g, z_j^{\min}, z_j^{\max}) Q_{\nu_1 \nu_2}(z_g) \left. \frac{dN_{l_2}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} \right|_{z=z_g} \\ &\quad - \sum_{g=0}^{p'} w_g f_A(z_g) \left. \frac{dN_{l_1}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})}{dz} \right|_{z=z_g} Q_{\nu_1 \nu_2}(z_g) N_{l_2}(z_g, z_j^{\min}, z_j^{\max}) \\ V_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^j &= \sum_{g=0}^{p'} w_g f_B(z_g) N_{l_1}(z_g, z_j^{\min}, z_j^{\max}) V(z_g) N_{l_2}(z_g, z_j^{\min}, z_j^{\max}), \\ B_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}^j &= \sum_{g=0}^{p'} \delta_{\nu_1 \nu_2} w_g f_B(z_g) N_{l_1}(z_g, z_j^{\min}, z_j^{\max}) N_{l_2}(z_g, z_j^{\min}, z_j^{\max}) \end{aligned}$$

где  $z_g = (p' - g)z_j^{\min} + gz_j^{\max}$  и  $w_g$ ,  $g = \overline{0, p'}$  – гауссовы узлы и веса ортогонального полинома порядка  $p' + 1$ , определённого на элементе  $z \in (z_j^{\min}, z_j^{\max})$ .

Заметим, что при использовании локальных координат  $\eta \in [-1, 1]$  связанных с абсолютными координатами  $z$  как  $z = z_j^{\min} + h_j(1 + \eta)/2$ ,  $\frac{dz}{d\eta} = h_j/2$ , обычно применяют следующее разложения функции и первой производной

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(z) &= \sum_{r=0}^p \sum_{\kappa=0}^{\kappa^{\max}-1} \hat{\Phi}_{\kappa^{\max} r + \kappa} N_{\kappa^{\max} r + \kappa}(\eta, -1, 1) \left( \frac{dz}{d\eta} \right)^\kappa, \\ \frac{d\hat{\Phi}(z)}{dz} &= \sum_{r=0}^p \sum_{\kappa=0}^{\kappa^{\max}-1} \hat{\Phi}_{\kappa^{\max} r + \kappa} \frac{dN_{\kappa^{\max} r + \kappa}(\eta, -1, 1)}{d\eta} \left( \frac{dz}{d\eta} \right)^{\kappa-1}. \end{aligned}$$

3. Матрицы  $\tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}$ ,  $B_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}$  и  $V_{\nu_1, \nu_2; l_1, l_2}$  – симметричные, размерностью  $NL \times NL$ , где  $L = \kappa^{\max}(np + 1)$ . Они состоят из  $n$  подматриц размерностью  $\kappa^{\max}(p + 1) \times \kappa^{\max}(p + 1)$ . Пересечения этих подматриц – блоки размерностью  $\kappa^{\max} \times \kappa^{\max}$ . В матрицах  $B_{L_1 L_2}$  и  $A_{L_1 L_2}$  внутри этих блоков есть нулевые элементы, их наличие связано с симметриями ИПЭ. В матрице  $V_{L_1 L_2}$  в общем случае внутри этих блоков нулевых элементов нет. Количество элементов во всех этих блоках матрицы равно  $(n(p^2 + 2p) + 1)(\kappa^{\max})^2$  и ширина ленты равна  $2(p' + 1) - \kappa^{\max}$ . Примеры ленточной структуры матриц приведены на рисунке 7.

4. Матричные элементы (34) при учёте граничных условий второго рода (II) не изменяются. Для учёта граничных условий первого рода (I) в граничной точке  $z^{\min}$  из матрицы  $\mathbf{A}$  вычёркивают первую строку и столбец, а для учёта граничных условий первого рода (I) в граничной точке  $z^{\max}$  из матрицы  $\mathbf{A}$  вычёркивают строку и столбец с номером  $L + 1 - \kappa^{\max}$ . Для учёта граничных условий третьего рода (III) в граничной точке  $z^{\min}$  матричный элемент  $\tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; 1, 1}$  даётся формулой:  $\tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; 1, 1} \rightarrow \tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; 1, 1} + f_A(z^{\min})R(z^{\min})$ , а для учёта граничных условий третьего рода в граничной точке  $z^{\max}$  матричный элемент  $\tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; L+1-\kappa^{\max}, L+1-\kappa^{\max}}$  даётся формулой:  $\tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; L+1-\kappa^{\max}, L+1-\kappa^{\max}} \rightarrow \tilde{A}_{\nu_1, \nu_2; L+1-\kappa^{\max}, L+1-\kappa^{\max}} - f_A(z^{\max})R(z^{\max})$ .

5. Решение обобщённой алгебраической задачи на собственные значения (33) для небольших размерностей до  $\sim 1000$  выполняется с помощью процедур Eigenvectors и Eigenvalues, встроенных в пакет LinearAlgebra системы Maple. Для больших размерностей  $\sim 1000 \div 1000000$  для решения задачи (33) используется метод итераций в подпространстве, реализованный на языке Fortran программой SSPACE [7], который эффективен для задач на собственные значения с симметричными ленточными матрицами большой размерности [9].

Теоретические оценки разности точного  $\Phi_m(z) \in \mathcal{H}_2^2$  и численного  $\Phi_m^h(z) \in \mathbf{H}^{\kappa^{\max}}$  решений по норме  $\mathbf{H}^0$  дают сходимость собственных значений и собственных функций порядка  $2p'$  и  $p' + 1$ , соответственно [2]:

$$|E_m^h - E_m| \leq c_1 h^{2p'}, \quad \|\Phi_m^h(z) - \Phi_m(z)\|_0 \leq c_2 h^{p'+1}, \quad (35)$$

где  $h = \max_{1 < j < n} h_j$  наибольший шаг сетки.

Схема вычисления детально представлена в работах [4, 5]

### С. Схема решения многоканальной задачи рассеяния

Рассмотрим решение алгебраической задачи относительно матричного решения  $\Phi^h \equiv ((\chi^{(1)})^h, \dots, (\chi^{(N_o)})^h)$

$$\mathbf{G}^p \Phi^h \equiv (\mathbf{A}^p - E \mathbf{B}^p) \Phi^h = \mathbf{M} \Phi^h, \quad (36)$$

получаемой дискретизацией методом конечных элементов высокого порядка точности  $p'$  вариационного функционала (5), (6), соответствующего краевой задаче (1), (4), аппроксимирующей многоканальную задачу рассеяния при фиксированном значении  $E$ . Здесь матрицы  $\mathbf{A}^p = \mathbf{A}^{(2)} + \mathbf{A}^{(1)} + \mathbf{V}$  и  $\mathbf{M} = \mathbf{M}^{\max} - \mathbf{M}^{\min}$  размерностью  $NL \times NL$  даны в (34). Матрицы  $\mathbf{M}^{\max}$  и  $\mathbf{M}^{\min}$  возникают из-за аппроксимации граничного условия третьего рода на левой и правой границах интервала  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$

$$\frac{d\Phi^h(z)}{dz} = (\mathbf{G}(z) + \mathbf{Q}(z))\Phi^h(z), \quad z = z^{\min}, \quad z = z^{\max}. \quad (37)$$

при этом элементы матрицы  $\mathbf{M} = \{M_{l'_1, l'_2}\}_{l'_1, l'_2=1}^{NL}$  размерностью  $NL \times NL$  равны нулю за исключением элементов, оба индекса  $l'_1 = (l_1 - 1)N + \nu_1$ ,  $l'_2 = (l_2 - 1)N + \nu_2$  которых принадлежат либо интервалу  $1, \dots, N$  либо интервалу  $(L - \kappa_{\max}N) + 1, \dots, (L - \kappa_{\max}N) + N$ , где  $N$  – число уравнений в системе (1) и  $L$  – число базисных функций  $N_{\mu}^g(z)$  в разложении искомого решения (30) на интервале  $z \in \Delta = [z^{\min}, z^{\max}]$ .

Задачу (36) перепишем в следующем виде

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_{aa}^p & \mathbf{G}_{ab}^p & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}_{ba}^p & \mathbf{G}_{bb}^p & \mathbf{G}_{bc}^p \\ \mathbf{0} & \mathbf{G}_{cb}^p & \mathbf{G}_{cc}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_a \\ \Phi_b \\ \Phi_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{G}_{\min}^p & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{G}_{\max}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_a \\ \Phi_b \\ \Phi_c \end{pmatrix}. \quad (38)$$

Матрицы  $\mathbf{G}_{bb}^p$  размерностью  $(L - 2N) \times (L - 2N)$ ,  $\mathbf{G}_{ba}^p$  и  $\mathbf{G}_{bc}^p$  размерностью  $(L - 2N) \times N$ ,  $\mathbf{G}_{ab}^p$  и  $\mathbf{G}_{cb}^p$  размерностью  $N \times (L - 2N)$ ,  $\mathbf{G}_{aa}^p$ ,  $\mathbf{G}_{cc}^p$  размерностью  $N \times N$  определяются из конечноэлементной аппроксимации и считаются известными. Наличие нулевых подматриц связано с ленточной структурой матрицы  $\mathbf{G}^p$  из (38).

Матрицы  $\mathbf{G}_{\min}$  и  $\mathbf{G}_{\max}$  размерностью  $N \times N$ , а также  $\Phi_a$  и  $\Phi_c$  размерностью  $N \times 1$ , задаются асимптотически разложениями и будут рассмотрены далее, матрица  $\Phi_b$  размерностью  $(L - 2N) \times 1$  получается вычёркиванием из матрицы решений подматриц  $\Phi_a$  и  $\Phi_c$ .

Запишем задачу (38) в явном виде

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{aa}^p \Phi_a + \mathbf{G}_{ab}^p \Phi_b &= -\mathbf{G}_{\min}^p \Phi_a, \\ \mathbf{G}_{ba}^p \Phi_a + \mathbf{G}_{bb}^p \Phi_b + \mathbf{G}_{bc}^p \Phi_c &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{G}_{cb}^p \Phi_b + \mathbf{G}_{cc}^p \Phi_c &= \mathbf{G}_{\max}^p \Phi_c. \end{aligned} \quad (39)$$

Исключим  $\Phi_b$ . Из второго уравнения (38) следует явное выражение

$$\Phi_b = -(\mathbf{G}_{bb}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ba}^p \Phi_a - (\mathbf{G}_{bb}^p)^{-1} \mathbf{G}_{bc}^p \Phi_c, \quad (40)$$

однако оно требует обращения матрицы большой размерности  $\mathbf{G}_{bb}^p$ . Чтобы его избежать, рассмотрим вспомогательные задачи

$$\mathbf{G}_{bb}^p \mathbf{F}_{ba} = \mathbf{G}_{ba}^p, \quad \mathbf{G}_{bb}^p \mathbf{F}_{bc} = \mathbf{G}_{bc}^p. \quad (41)$$

Поскольку  $\mathbf{G}_{bb}^p$  – невырожденная матрица, каждая из систем уравнений (41) имеет единственное решение

$$\mathbf{F}_{ba} = (\mathbf{G}_{bb}^p)^{-1} \mathbf{G}_{ba}^p, \quad \mathbf{F}_{bc} = (\mathbf{G}_{bb}^p)^{-1} \mathbf{G}_{bc}^p. \quad (42)$$

Тогда, для функции  $\Phi_b$  получаем выражение

$$\Phi_b = -\mathbf{F}_{ba} \Phi_a - \mathbf{F}_{bc} \Phi_c, \quad (43)$$

и задача (39) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{aa}^p \Phi_a - \mathbf{G}_{ab}^p \mathbf{F}_{ba} \Phi_a - \mathbf{G}_{ab}^p \mathbf{F}_{bc} \Phi_c &= -\mathbf{G}_{\min}^p \Phi_a, \\ -\mathbf{G}_{cb}^p \mathbf{F}_{ba} \Phi_a - \mathbf{G}_{cb}^p \mathbf{F}_{bc} \Phi_c + \mathbf{G}_{cc}^p \Phi_c &= \mathbf{G}_{\max}^p \Phi_c. \end{aligned}$$

Таким образом алгебраическая задача (38) с матрицей размерностью  $L \times L$  сведена к двум алгебраическим задачам с матрицами размерностью  $N \times N$

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{aa}^p \Phi_a + \mathbf{Y}_{ac}^p \Phi_c &= -\mathbf{G}_{\min}^p \Phi_a, \\ \mathbf{Y}_{ca}^p \Phi_a + \mathbf{Y}_{cc}^p \Phi_c &= \mathbf{G}_{\max}^p \Phi_c. \end{aligned} \quad (44)$$

где  $\mathbf{Y}_{**}^p$  определяются через решения  $\mathbf{F}_{ba}$  и  $\mathbf{F}_{bc}$  задач (41)

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{aa}^p &= \mathbf{G}_{aa}^p - \mathbf{G}_{ab}^p \mathbf{F}_{ba}, & \mathbf{Y}_{ac}^p &= -\mathbf{G}_{ab}^p \mathbf{F}_{bc}, \\ \mathbf{Y}_{ca}^p &= -\mathbf{G}_{cb}^p \mathbf{F}_{ba}, & \mathbf{Y}_{cc}^p &= \mathbf{G}_{cc}^p - \mathbf{G}_{cb}^p \mathbf{F}_{bc}. \end{aligned} \quad (45)$$

Рассмотрим решение (10) для волны падающей слева направо

$$\Phi_{\rightarrow}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z) \mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z) \mathbf{T}_{\rightarrow}^c, & z > 0, \\ \mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z) \mathbf{R}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z) \mathbf{R}_{\rightarrow}^c, & z < 0 \end{cases} \quad (46)$$

и решение (11) для волны падающей справа налево

$$\Phi_{\leftarrow}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z) \mathbf{R}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z) \mathbf{R}_{\leftarrow}^c, & z > 0, \\ \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z) \mathbf{T}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z) \mathbf{T}_{\leftarrow}^c, & z < 0. \end{cases} \quad (47)$$

Здесь  $\Phi_{\rightarrow}(z \rightarrow \pm\infty)$  и  $\Phi_{\leftarrow}(z \rightarrow \pm\infty)$  матрицы-решения размерностью  $1 \times N_o^L$  и  $1 \times N_o^R$ , иными словами, соответственно, имеется  $N_o^L$  линейно-независимых решений, описывающих волну, падающую слева направо и  $N_o^R$  линейно-независимых решений, описывающих волну, падающую справа налево. Матрицы  $\mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z)$ ,  $\mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)$  размерностью  $1 \times N_o^L$  и матрицы  $\mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)$ ,  $\mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z)$  размерностью  $1 \times N_o^R$  – фундаментальные асимптотические решения на левой и правой границах интервала, описывающие движение волны в направлении указанном стрелкой. Матрицы  $\mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)$  размерностью  $1 \times (N - N_o^L)$  и  $\mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)$  размерностью  $1 \times (N - N_o^R)$  фундаментальные асимптотически убывающие решения на левой и правой границах интервала. Элементы этих матриц есть матрицы-столбцы размерностью  $N \times 1$ .

Отсюда следует, что матрицы амплитуд отражения  $\mathbf{R}_{\rightarrow}$  и  $\mathbf{R}_{\leftarrow}$  – квадратные матрицы размерностью  $N_o^L \times N_o^L$  и  $N_o^R \times N_o^R$ , а матрицы амплитуд прохождения  $\mathbf{T}_{\rightarrow}$ ,  $\mathbf{T}_{\leftarrow}$  – прямоугольные матрицы размерностью  $N_o^R \times N_o^L$  и

$N_o^L \times N_o^R$ . Вспомогательные матрицы  $\mathbf{R}_{\rightarrow}^c$ ,  $\mathbf{T}_{\rightarrow}^c$ ,  $\mathbf{R}_{\leftarrow}^c$  и  $\mathbf{T}_{\leftarrow}^c$  – прямоугольные матрицы размерностью  $(N - N_o^L) \times N_o^L$ ,  $(N - N_o^R) \times N_o^L$ ,  $(N - N_o^R) \times N_o^R$  и  $(N - N_o^L) \times N_o^R$ .

Тогда компоненты решения в граничных точках интервала принимают вид

$$\begin{aligned}
(\Phi_a)_{i_o i_o^L} &= X_{i_o i_o^L}^{(\rightarrow)}(z^{\min}) + \sum_{i'_o=1}^{N_o^L} X_{i_o i'_o}^{(\leftarrow)}(z^{\min}) R_{i'_o i_o^L}^{(\rightarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^L} X_{i_o i'_c}^{(c)}(z^{\min}) R_{i'_c i_o^L}^{(c \rightarrow)}, \\
(\Phi_c)_{i_o i_o^L} &= \sum_{i'_o=1}^{N_o^R} X_{i_o i'_o}^{(\leftarrow)}(z^{\max}) T_{i'_o i_o^L}^{(\rightarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^R} X_{i_o i'_c}^{(c)}(z^{\max}) T_{i'_c i_o^L}^{(c \rightarrow)}, \\
(\Phi_a)_{i_o i_o^R} &= \sum_{i'_o=1}^{N_o^L} X_{i_o i'_o}^{(\rightarrow)}(z^{\min}) T_{i'_o i_o^R}^{(\leftarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^L} X_{i_o i'_c}^{(c)}(z^{\min}) T_{i'_c i_o^R}^{(c \leftarrow)}, \\
(\Phi_c)_{i_o i_o^R} &= X_{i_o i_o^R}^{(\leftarrow)}(z^{\max}) + \sum_{i'_o=1}^{N_o^R} X_{i_o i'_o}^{(\rightarrow)}(z^{\max}) R_{i'_o i_o^R}^{(\leftarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^R} X_{i_o i'_c}^{(c)}(z^{\max}) R_{i'_c i_o^R}^{(c \leftarrow)},
\end{aligned} \tag{48}$$

где  $\mathbf{X}^{(\rightarrow)}(z) \equiv \mathbf{X}^{(+)}(z)$ ,  $\mathbf{X}^{(\leftarrow)}(z) \equiv \mathbf{X}^{(-)}(z)$  матрицы асимптотических решений краевой задачи при  $z \leq z^{\min}$  и/или  $z \geq z^{\max}$  заданы соотношениями (12)–(13). Для правых частей системы уравнений (44) имеем

$$\begin{aligned}
(\mathbf{G}_{\min}^p \Phi_a)_{i_o i_o^L} &= X_{i_o i_o^L}^{\prime(\rightarrow)}(z^{\min}) + \sum_{i'_o=1}^{N_o^L} X_{i_o i'_o}^{\prime(\leftarrow)}(z^{\min}) R_{i'_o i_o^L}^{(\rightarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^L} X_{i_o i'_c}^{\prime(c)}(z^{\min}) R_{i'_c i_o^L}^{(c \rightarrow)}, \\
(\mathbf{G}_{\max}^p \Phi_c)_{i_o i_o^L} &= \sum_{i'_o=1}^{N_o^R} X_{i_o i'_o}^{\prime(\leftarrow)}(z^{\max}) T_{i'_o i_o^L}^{(\rightarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^R} X_{i_o i'_c}^{\prime(c)}(z^{\max}) T_{i'_c i_o^L}^{(c \rightarrow)}, \\
(\mathbf{G}_{\min}^p \Phi_a)_{i_o i_o^R} &= \sum_{i'_o=1}^{N_o^L} X_{i_o i'_o}^{\prime(\rightarrow)}(z^{\min}) T_{i'_o i_o^R}^{(\leftarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^L} X_{i_o i'_c}^{\prime(c)}(z^{\min}) T_{i'_c i_o^R}^{(c \leftarrow)}, \\
(\mathbf{G}_{\max}^p \Phi_c)_{i_o i_o^R} &= X_{i_o i_o^R}^{\prime(\leftarrow)}(z^{\max}) + \sum_{i'_o=1}^{N_o^R} X_{i_o i'_o}^{\prime(\rightarrow)}(z^{\max}) R_{i'_o i_o^R}^{(\leftarrow)} + \sum_{i'_c=1}^{N-N_o^R} X_{i_o i'_c}^{\prime(c)}(z^{\max}) R_{i'_c i_o^R}^{(c \leftarrow)}.
\end{aligned} \tag{49}$$

Подставляя равенства из (48) и (49) в (44) получим систему неоднородных уравнений относительно  $R_{i'_o i_o^L}^{(\rightarrow)}$ ,  $T_{i'_o i_o^L}^{(\leftarrow)}$ ,  $R_{i'_o i_o^R}^{(\leftarrow)}$ ,  $T_{i'_o i_o^R}^{(\rightarrow)}$ ,  $R_{i'_c i_o^L}^{(c \rightarrow)}$ ,  $T_{i'_c i_o^L}^{(c \leftarrow)}$ ,  $R_{i'_c i_o^R}^{(c \leftarrow)}$ ,  $T_{i'_c i_o^R}^{(c \rightarrow)}$ , которая имеет единственное решение.

При решении задачи на полуоси с условиями второго или третьего рода на одной из границ полуоси  $z^{\min}$  или  $z^{\max}$ , независимыми переменными вместо  $R$  и  $T$  будут матрицы  $\Phi_a$  или  $\Phi_c$ , а с условиями первого рода считается, что  $\Phi_a = 0$  или  $\Phi_c = 0$ , в этом случае соответствующее уравнение не учитывается.

#### Д. Алгоритм вычисления комплексных собственных значений и собственных функций связанных и метастабильных состояний

Для расчёта комплексного собственного значения и соответствующей собственной функции метастабильного состояния решается алгебраическая задача (33) для уравнения относительно пары неизвестных  $u = \{\lambda^h, \Phi^h\}$ :

$$\begin{cases} (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda^h \mathbf{B}) \Phi^h = 0, & \lambda = 2E^h, \\ (\Phi^h, \mathbf{B} \Phi^h) - 1 = 0. \end{cases} \tag{50}$$

Уравнение непрерывного аналога метода Ньютона в окрестности решения  $u = \{\lambda_*^h, \Phi_*^h\}$  относительно неизвестных  $u(t) = \{\Phi(t), \lambda(t)\}$ ,  $0 \leq t < \infty$  имеет вид

$$\begin{cases} (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda \mathbf{B}) \frac{d\Phi}{dt} - \frac{d\lambda}{dt} \mathbf{B} \Phi = -(\tilde{\mathbf{A}} - \lambda \mathbf{B}) \Phi, \\ 2 \left( \frac{d\Phi}{dt}, \mathbf{B} \Phi \right) = 1 - (\Phi, \mathbf{B} \Phi), \end{cases} \tag{51}$$

где  $\lambda(0)$  и  $\Phi(0)$  известные начальные приближения к собственному значению и собственной функции. Используя дискретное представление для производных

$$\left. \frac{d\Phi}{dt} \right|_{t_k} \approx \frac{\Phi_{k+1} - \Phi_k}{\tau_k} = \mathbf{v}_k, \quad \left. \frac{d\lambda}{dt} \right|_{t_k} \approx \frac{\lambda_{k+1} - \lambda_k}{\tau_k} = \mu_k, \quad (52)$$

дискретный аналог уравнения (51) на сетке  $t_{k+1} = t_k + \tau_k$  относительно пары неизвестных  $\mu_k$   $\mathbf{v}_k$  принимает вид

$$\begin{cases} (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_k \mathbf{B}) \mathbf{v}_k - \mu_k \mathbf{B} \Phi_k = -\mathbf{r}_k, \\ 2(\mathbf{v}_k, \mathbf{B} \Phi_k) = 1 - (\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k), \end{cases} \quad (53)$$

где  $\lambda_0 = \lambda(0)$  и  $\Phi_0 = \Phi(0)$  известные начальные приближения к собственному значению и собственного вектора, а величина  $\mathbf{r}_k$  и итерационная поправка  $\mathbf{v}_k$  даются формулами

$$\mathbf{r}_k = (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_k \mathbf{B}) \Phi_k, \quad \mathbf{v}_k = -\Phi_k + \mu_k \Theta_k. \quad (54)$$

Итерационные поправки  $\Theta_k$  и  $\mu_k$  к собственному вектору  $\Phi_k$  и к собственному значению  $\lambda_k$  вычисляются решением алгебраической задачи

$$\begin{cases} (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_k \mathbf{B}) \Theta_k = \mathbf{B} \Phi_k, \\ 2\mu_k (\Theta_k, \mathbf{B} \Phi_k) = 1 + (\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k), \end{cases} \quad (55)$$

при этом итерационная поправка  $\mu_k$  вычисляется по формуле

$$\mu_k = \frac{1 + (\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k)}{2(\Theta_k, \mathbf{B} \Phi_k)}. \quad (56)$$

Эта опция в программе реализуется по умолчанию при значении ключа **mukc**=1. Переход от  $\Phi_k$ ,  $\lambda_k$  на  $k$ -том шаге к  $\Phi_{k+1}$ ,  $\lambda_{k+1}$  на  $k+1$ -вом шаге выполняется по формулам

$$\begin{cases} \Phi_{k+1} = \Phi_k + \tau_k \mathbf{v}_k = (1 - \tau_k) \Phi_k + \tau_k \mu_k \Theta_k, \\ \lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k \mu_k. \end{cases} \quad (57)$$

**Вычисление оптимального итерационного шага  $\tau_k$ .** Для вычисления итерационного параметра  $\tau_k$  используем следующее представление величины  $\mathbf{r}_{k+1}$  для на  $k+1$ -вом шаге

$$\mathbf{r}_{k+1} = (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_{k+1} \mathbf{B}) \Phi_{k+1} = (\tilde{\mathbf{A}} - (\lambda_k + \tau_k \mu_k) \mathbf{B}) ((1 - \tau_k) \Phi_k + \tau_k \mu_k \Theta_k) = (1 - \tau_k) \mathbf{r}_k - \tau_k^2 \mu_k \mathbf{B} \mathbf{v}_k. \quad (58)$$

Тогда выражение для невязки  $\|\mathbf{r}_{k+1}\|^2$  принимает вид

$$\|\mathbf{r}_{k+1}\|^2 = (1 - \tau_k)^2 \|\mathbf{r}_k\|^2 - 2(1 - \tau_k) \tau_k^2 \mu_k (\mathbf{r}_k, \mathbf{B} \mathbf{v}_k) + \tau_k^4 \mu_k^2 \|\mathbf{B} \mathbf{v}_k\|^2. \quad (59)$$

Обозначаем  $f(\tau_k) = \|\mathbf{r}_{k+1}\|^2$ , и рассмотрим ее производную

$$\begin{aligned} f'(\tau_k) &= 2(\tau_k - 1) \|\mathbf{r}_k\|^2 - 2(2\tau_k - 3\tau_k^2) \mu_k (\mathbf{r}_k, \mathbf{B} \mathbf{v}_k) + 4\tau_k^3 \mu_k^2 \|\mathbf{B} \mathbf{v}_k\|^2 \\ &= 4\mu_k^2 \|\mathbf{B} \mathbf{v}_k\|^2 \tau_k^3 + 6\mu_k (\mathbf{r}_k, \mathbf{B} \mathbf{v}_k) \tau_k^2 + 2 [\|\mathbf{r}_k\|^2 - 2\mu_k (\mathbf{r}_k, \mathbf{B} \mathbf{v}_k)] \tau_k - 2\|\mathbf{r}_k\|^2. \end{aligned} \quad (60)$$

Видно, что  $f'(0) = -2\|\mathbf{r}_k\|^2 < 0$  и  $f'(2) = 2f(2) > 0$ . Отсюда следует, что функция  $f(\tau_k)$  имеет хотя бы один минимум на интервале  $(0, 2)$ , т.е., можно найти оптимальное значение итерационного параметра  $\tau_k = \tau_k^*$ , вычисляя корни кубического уравнения  $f'(\tau_k^*) = 0$ . Если это уравнение имеет 3 вещественных корня, то следует выбрать корень близкий к 1. Опция выбора оптимального шага  $\tau_k$  в программе реализуется при значении ключа **mukopt**=1. По умолчанию в программе принято значение  $\tau_k = 1$  при значении ключа **mukopt**=0.

Итерационный процесс (55)–(57) завершается при условии  $\|\mathbf{r}_{k+1}\|^2 \leq \epsilon$ , где  $0 < \epsilon \ll 1$  заданная точность приближенного решения.

**Замечание.** Пусть  $\tilde{\mathbf{A}}$ ,  $\lambda$ ,  $\Phi$  комплексные числа. Тогда  $\mu_k$ ,  $\mathbf{v}_k$ ,  $\mathbf{r}_k$  будут комплексные и невязка определяется выражением

$$\begin{aligned} \|\mathbf{r}_{k+1}\|^2 &= ((1 - \tau_k) \mathbf{r}_k^* - \tau_k^2 \mu_k^* \mathbf{B} \mathbf{v}_k^*) ((1 - \tau_k) \mathbf{r}_k - \tau_k^2 \mu_k \mathbf{B} \mathbf{v}_k) \\ &= (1 - \tau_k)^2 \|\mathbf{r}_k\|^2 - 2(1 - \tau_k) \tau_k^2 \Re(\mathbf{r}_k^*, \mu_k \mathbf{B} \mathbf{v}_k)_1 + \tau_k^4 \|\mu_k \mathbf{B} \mathbf{v}_k\|^2, \end{aligned} \quad (61)$$



где  $\|\mathbf{a}\|^2 = (\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a})_1$ , и  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})_1 = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b}$ .

Итерационные поправки  $\Theta_k$  и  $\mu_k$  к собственному вектору  $\Phi_k$  и к собственному значению  $\lambda_k$  также могут вычисляться решением вместо (53) следующей алгебраической задачи:

$$\begin{cases} (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_k \mathbf{B}) \Theta_k = \mathbf{B} \Phi_k, \\ (\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k) \mu_k = (\Phi_k, (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_k \mathbf{B}) \Phi_k), \end{cases} \quad (62)$$

при этом итерационная поправка  $\mu_k$  вычисляется по формуле

$$(\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k) = 1, \quad \mu_k = \frac{(\Phi_k, (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_k \mathbf{B}) \Phi_k)}{(\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k)} = \frac{(\Phi_k, \mathbf{r}_k)}{(\Phi_k, \mathbf{B} \Phi_k)} = (\Phi_k, \mathbf{r}_k). \quad (63)$$

Эта опция в программе реализуется при значении ключа **mukc**=0. Переход от  $\Phi_k$ ,  $\lambda_k$  на  $k$ -том шаге к  $\Phi_{k+1}$ ,  $\lambda_{k+1}$  на  $k+1$ -вом шаге выполняется по формулам

$$\begin{cases} \tilde{\Phi}_{k+1} = \Phi_k + \tau_k \mathbf{v}_k = (1 - \tau_k) \Phi_k + \tau_k \mu_k \Theta_k, & \Phi_{k+1} = \frac{\tilde{\Phi}_{k+1}}{\sqrt{(\tilde{\Phi}_{k+1}, \mathbf{B} \tilde{\Phi}_{k+1})}}, \\ \lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k \mu_k, \end{cases} \quad (64)$$

а итерационный шаг  $\tau_k$  вычисляется по формуле [8]

$$\tau_k = \frac{\|\mathbf{r}_k\|^2}{\|\mathbf{r}_k\|^2 + \|\tilde{\mathbf{r}}_{k+1}\|^2} \leq 1, \quad (65)$$

где

$$\tilde{\mathbf{r}}_{k+1} = (\tilde{\mathbf{A}} - \lambda_{k+1} \mathbf{B}) \Phi_{k+1}, \quad (66)$$

и  $\Phi_{k+1}$ ,  $\lambda_{k+1}$  вычисляются по формуле (64) при  $\tau_k = 1$ . Опция выбора оптимального шага  $\tau_k$  в программе реализуется при значении ключа **mukopt**=1. По умолчанию в программе принято значение  $\tau_k = 1$  при значении ключа **mukopt**=0.

Итерационный процесс (62)–(65), в котором  $\mu_k$  вычисляется по формуле (63), завершается, используя (66) при условии  $\|\mathbf{r}_{k+1}\|^2 \leq \epsilon$ , где  $0 < \epsilon \ll 1$  заданная точность приближенного решения.

- [1] [www.maplesoft.com](http://www.maplesoft.com)
- [2] Г. Стренг, Г. Фикс, *Теория метода конечных элементов*. Мир М. (1977).
- [3] A.A. Gusev, S.I. Vinitisky, O. Chuluunbaatar, V.P. Gerdt, V.A. Rostovtsev, *Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions*, Lecture Notes in Computer Science **6885**, pp. 175-191 (2011).
- [4] A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitisky, V.L. Derbov, A. Gozdz, L.L. Hai, V.A. Rostovtsev, *Symbolic-numerical solution of boundary-value problems with self-adjoint second-order differential equation using the finite element method with interpolation Hermite polynomials*, Lecture Notes in Computer Science **8660**, pp. 138-154 (2014).
- [5] A.A. Gusev, L.L. Hai, O. Chuluunbaatar, V. Ulziibayar, S.I. Vinitisky, V.L. Derbov, A. Gozdz, and V.A. Rostovtsev, *Symbolic-numeric solution of boundary-value problems for the Schrodinger equation using the finite element method: scattering problem and resonance states*, Lecture Notes in Computer Science **9301**, pp. 182-197 (2015).
- [6] И.С. Березин, Н.П. Жидков, *Методы вычислений, Том 1*, М. ФМЛ (1962).
- [7] Bathe, K.J.: *Finite Element Procedures in Engineering Analysis*, Englewood Cliffs, Prentice Hall, New York (1982).
- [8] Ермаков В. В., Калиткин Н. Н. Оптимальный шаг и регуляризация метода Ньютона. Журнал Вычислительной Математики И Математической Физики Том 21, Март 1981 Апрель № 2 (1981), 491-497.
- [9] <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/index.html>

#### IV. ВХОДНЫЕ И ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Архив с программой содержит

файл “kantbp4m.mwt” с процедурой `hermites()` для решения краевых задач из параграфа I, файлы с примерами “examplexx.txt”.

В процессе работы программа генерирует рабочие и выходные файлы, например,

“hermites.dat” содержит интерполяционные полиномы Эрмита,

“inta.dat” содержит интегралы между интерполяционными полиномами Эрмита и/или их производными, из которых формируются матрицы жесткости и масс,

“wfuncts\*\*.dat” содержит собственные значения и собственные функции решаемой задачи.

Обращение к программе осуществляется следующим образом:

1. `read “kantbp4m.mwt”`; инициализация процедуры;
2. ... (перечень входных данных); входные данные;
3. `hermites()`; запуск процедуры;
4. (выходные данные); выходные данные  
при повторном запуске повторяются шаги 2–4.

##### А. Перечень входных и выходных данных

**keypot** (по умолчанию 1)

0 – аппроксимация некоторой функции по интерполяционным полиномам Эрмита,

1 – решение задачи на собственные значения (вычисление набора первых собственных значений и соответствующих собственных функций),

2 – решение многоканальной задачи рассеяния,

3 – решение задачи на собственные значения методом Ньютона,

4 – вычисляются и записываются в файлы “afem.dat” и “bfem.dat” матрицы **A** и **B** из (33)–(34).

**z** независимая переменная.

**INPUT:**

**filenameh, filenamew, filenameea, filenameei** (по умолчанию “hermites.dat”, “wfuncts\*.dat”, “abfem.dat” и “inta.dat”, соответственно) файлы, в которые записываются промежуточные и финальные результаты (см. ниже), где \* означает значение счётчика запусков `пехес`.

**пехес** счётчик запусков (по умолчанию при первом запуске 1, далее увеличивается на 1) \* в названии файла “wfuncts\*.dat” принимает значений равное `пехес`.

**zpoints** (при `keypot=0`)

содержит список узлов в которых задаются значения аппроксимируемой функции и её производных, и задаётся в виде: `zpoints=[z1,z2,...,zn]`.

**fpoints** (при `keypot=0`)

список содержащий значения аппроксимируемой функции и производных в точках из списка `zpoints` задаётся в виде: `fpoints=[[f(z1),f'(z1),...,f(κ1)(z1)],[f(z2),...,f(κ2)(z2)],...,[f(zn),...,f(κn)(zn)]]`.

**psubint** (по умолчанию 3)

количество подынтервалов  $p$  на конечном элементе (21), т.е. число узлов равно `psubint+1`.

**kappa\_max** (по умолчанию 2)

кратность узлов.

**intprep** (по умолчанию 1)

0 – интегралы  $A$ ,  $B$  и  $V$ , из которых формируются матрицы жесткости и масс читаются из файла `filenameei`. Используется, если предыдущие вычисления выполнялись с теми же `psubint` and `kappa_max`.

1 – интегралы  $A$ ,  $B$  и  $V$  вычисляются и пишутся в файл `filenameei`.

**femmatcal** (по умолчанию 0)

-1 – матрицы жесткости (AFEM) и масс (BFEM) без учёта граничных условий читаются из файла filenamea.

0 – матрицы жесткости и масс вычисляются, но не записываются в файл filenamea.

1 – матрицы жесткости и масс вычисляются и пишутся в файл filenamea, после чего femmatcal принимает значение -1.

**grid11**(r0), r0=0,1,...,psubint, grid11(0):=-1, grid11(psubint):=1

распределение узлов на интервале [-1,1] (по умолчанию распределение узлов равномерное).

**eqs** (по умолчанию 0)

1,2,3,..., количество уравнений  $N$  в системе уравнений (1)

0 случай одного уравнения  $N = 1$ , при этом индексы у vpot, RBoundL, RBoundR опускаются.

**nmesh** (по умолчанию 0)

1,2,3,..., количество подынтервалов на всей области  $z \in [z^{\min}, z^{\max}]$ , которые делятся на конечные элементы одной длины

0 используется равномерная сетка на всей области  $z \in [z^{\min}, z^{\max}]$ .

**zmin, zmax** (при nmesh=0)

границы  $z^{\min}$  и  $z^{\max}$  интервала интегрирования.

**zmesh**(r0), r0=0,1,...,nmesh, (при nmesh=1,2,3,...)

граничные точки nmesh подынтервалов

**ngrid** количество конечных элементов на интервале [zmin, zmax]. При nmesh=1,2,... задаётся в виде массива ngrid(1), ..., ngrid(nmesh) элементы которого означают количество конечных элементов на каждом из подынтервалов [zmesh(r0-1), zmesh(r0)], r0=1,...,nmesh,

**vpot** элементы матрицы эффективных потенциалов задачи  $V_{ij}$  из уравнения (1). Задаются в виде:

vpot=... при nmesh=0 и eq=0

vpot(i0)=...; i0=1..nmesh; при nmesh=1,2,... и eq=0

vpot(i1,i2)=...; i1,i2=1...eq; при nmesh=0 и eq=1,2,...

vpot(i1,i2,i0)=...; i1,i2=1...eq; i0=1...nmesh; при nmesh=1,2,... и eq=1,2,...

**Qap** (при eqs=1,2,3,..., по умолчанию 0)

Наличие матрицы эффективных потенциалов  $Q_{ij}$  (1-да, 0 - нет).

**qpot** (при Qap=1)

элементы матрицы эффективных потенциалов задачи  $Q_{ij}$  из уравнения (1). Задаются в виде:

qpot(i1,i2)=...; i1,i2=1...eq; при nmesh=0 и eq=1,2,...

qpot(i1,i2,i0)=...; i1,i2=1...eq; i0=1...nmesh; при nmesh=1,2,... и eq=1,2,...

**FFA** (по умолчанию 1)

функция  $f_A(z)$  из уравнения (1). При nmesh=1,2,... и FFAD=-1 задаётся в виде массива FFA(1),...,FFA(nmesh).

**FFB** (по умолчанию 1)

функция  $f_B(z)$  из уравнения (1). При nmesh=1,2,... и FFBD=-1 задаётся в виде массива FFB(1),...,FFB(nmesh).

**FFAD** (по умолчанию 0, если  $f_A(z)$  – одночлен от переменной  $z$ , иначе 1)

0 – интегралы  $A$  вычисляются, используя явные выражения для FFA,

$\pm 1$  – интегралы  $A$  из (33)–(34) вычисляются, используя разложения FFA по интерполяционным полиномам Эрмита, FFAD< 0 предполагает кусочную непрерывность  $f_A(z)$ .

**FFBD** (по умолчанию 0, если  $f_B(z)$  – одночлен от переменной  $z$ , иначе 1)

0 – интегралы  $B$ ,  $V$  и  $Q$  из (33)–(34) вычисляются, используя явные выражения для FFB

$\pm 1$  – интегралы  $B$ ,  $V$  и  $Q$  вычисляются, используя разложения FFB и FFB\*vpot по интерполяционным полиномам Эрмита, FFBD< 0 предполагает кусочную непрерывность  $f_B(z)$ .

**DirL, DirR** (по умолчанию 2 при  $\text{keypot}=1$  или 3 и 0 при  $\text{keypot}=2$ )

граничное условие в левой и правой граничных точках интервала:

1 – условие Дирихле (2),

2 – условие Неймана (3),

3 – условие третьего рода (4),

0 – условие третьего рода (4), которые определяются из асимптотического решения (10), (11) многоканальной задачи рассеяния.

**RBoundL, RBoundR** (задаётся пользователем при  $\text{DirL}=3$  и  $\text{DirR}=3$ , соответственно, по умолчанию 0) отношение  $\mathcal{R}(z)$  производной решения к решению см. формулу (4). При  $\text{keypot}=3$  могут явно зависеть от формального параметра  $\text{EEh}$ , которому соответствуют значения  $\text{Eh}$ . При  $\text{eqs}=1,2,\dots$ , задаются в виде матриц размерностью  $\text{eqs} \times \text{eqs}$ :  $\text{RBoundL}(1,1,2)$ ,  $\text{RBoundR}(1,1,2)$ .

**asymexp** (при  $\text{keypot}=2$ , по умолчанию 0)

0 – асимптотические решения многоканальной задачи рассеяния даются формулами (12) и (13),

1 – асимптотические решения многоканальной задачи рассеяния задаются пользователем.

**Lp2OC(l1)** (при  $\text{keypot}=2$ ,  $\text{DirL}=0$ , одномерный массив длиной  $\max(1,\text{eqs})$ , задаётся пользователем при  $\text{asymexp}=1$ )

квадрат волнового числа  $p_{l1}^t$  при  $z \leq z^{\min}$  (см. формулу (12)), если  $> 0$ , то канал  $l1$  открыт, если  $\leq 0$ , то канал  $l1$  закрыт.

**Rp2OC(l1)** (при  $\text{keypot}=2$ ,  $\text{DirR}=0$ , одномерный массив длиной  $\max(1,\text{eqs})$ , задаётся пользователем при  $\text{asymexp}=1$ )

квадрат волнового числа ( $p_{l1}^t$ ) при  $z \geq z^{\max}$  (см. формулу (12)), если  $> 0$ , то канал  $l1$  открыт, если  $\leq 0$ , то канал  $l1$  закрыт.

**LBoundLR(l1,l2), LBoundRL(l1,l2), LBoundC(l1,l2)** (при  $\text{keypot}=2$ ,  $\text{DirL}=0$ , матрицы размерностью  $\max(1,\text{eqs}) \times \max(1,\text{eqs})$ , в которой первый индекс обозначает номер канала, а второй – номер компоненты решения, задаются пользователем при  $\text{asymexp}=1$ )

асимптотические решения при  $z \leq z^{\min}$ , описывающие волны, падающие слева направо, падающие справа налево и убывающие решения для закрытого канала, соответственно (см. формулы (12) и (13)).

**DLBoundLR(l1,l2), DLBoundRL(l1,l2), DLBoundC(l1,l2)** (при  $\text{keypot}=2$ ,  $\text{DirL}=0$ , матрицы размерностью  $\max(1,\text{eqs}) \times \max(1,\text{eqs})$ , задаются пользователем при  $\text{asymexp}=1$ )

производные асимптотических решений  $\text{LBoundLR}(1,1,2)$ ,  $\text{LBoundRL}(1,1,2)$ ,  $\text{LBoundC}(1,1,2)$  (см. формулы (12) и (13)).

**RBoundLR(l1,l2), RBoundRL(l1,l2), RBoundC(l1,l2), DRBoundLR(l1,l2), DRBoundRL(l1,l2), DRBoundC(l1,l2)** (при  $\text{keypot}=2$ ,  $\text{DirR}=0$ , задаются пользователем при  $\text{asymexp}=1$ )

то же, что и  $\text{LBoundLR}(1,1,2)$ ,  $\text{LBoundRL}(1,1,2)$ ,  $\text{LBoundC}(1,1,2)$ ,  $\text{DLBoundLR}(1,1,2)$ ,  $\text{DLBoundRL}(1,1,2)$ ,  $\text{DLBoundC}(1,1,2)$  только при  $z \geq z^{\max}$  (см. формулы (12) и (13)).

**numberf** (при  $\text{keypot}=1$  по умолчанию 5)

количество собственных функций.

**grprint** (по умолчанию 1)

вывод на экран графиков собственных функций (1-да, 0-нет, -1 (при  $\text{keypot}=1$  или 2) вычисляются только собственные значения или  $S$  - матрица, 2 (при  $\text{keypot}=3$ ) вывод на экран графики функций на каждой итерации).

**Eh** (при  $\text{keypot}=2$  или 3)

фиксированное значение энергии для задачи рассеяния (при  $\text{keypot}=2$ ) или начальное приближение к собственному значению для задачи дискретного спектра (при  $\text{keypot}=3$ ).

**Phink** (при  $\text{keypot}=3$ )

начальное приближение к собственной функции, при  $\text{eqs}=1,2,\dots$  задаётся в виде массива  $\text{Phink}(1), \dots, \text{Phink}(\text{eqs})$ .

**itermax** (при  $\text{keypot}=3$ , по умолчанию 20)

количество итераций, вычисления также прекращаются при достижении точности  $\epsilon = 10^{3-\text{Digits}}$ .

**mukc** (при `keupot=3`, по умолчанию 1)  
вычисление итерационной поправки  $\mu_k$  (1 – по формуле (56), 0 – по формуле (63)).

**mukopt** (по умолчанию 0)  
расчет оптимального итерационного шага (1-да, 0 - нет).

**gropts**  
набор опций для вывода графиков на экран компьютера, по умолчанию вещественные и мнимые части решений даны сплошными и пунктирными линиями, а цвет графиков меняется от красного для первой компоненты до фиолетового для последней компоненты.

**infopr** (по умолчанию при первом запуске 1, при последующих 0)  
печать вспомогательной информации (1-да, 0 - нет).

**infoerr** (при `keupot=3`, по умолчанию 1)  
печать промежуточных собственных значений, невязки и итерационного шага (1 - да, 0 - нет).

**normtp** (при `keupot 1` или `3`, по умолчанию 1)  
условие нормировки (1 – даётся по формуле (15), 0 – даётся по формуле (16) )

## OUTPUT:

**INP** (записываются в файл `filenameh`)  
интерполяционные полиномы Эрмита (25).

**fun** (при `keupot=0`, глобальная переменная)  
функция, восстановленная по значениям аппроксимируемой функции и её производных `fpoints` в точках из списка `zpoints`.

**eigvxx**, `xx=1, ..., numberf` (при `keupot=1`, записываются в файл `filenamew`)  
собственные значения.

**eigfxx**, `xx=1, ..., numberf` (при `keupot=1`, записываются в файл `filenamew`)  
собственные функции в виде кусочно-непрерывного полинома. При `eqs=1,2,...` записываются в виде массива `eigfxx(1), ..., eigfxx(eqs)`.

**eigfLRr**, **eigfLRi**, **eigfRLr**, **eigfRLi** (при `keupot=2` и `grprint>-1`, записываются в файл `filenamew`)  
вещественные и мнимые части собственных функций  $\Phi_{\leftarrow}^h$  и  $\Phi_{\rightarrow}^h$ .

**NOpenL**, **NOpenR**, **NCloseL**, **NCloseR** (при `keupot=2`, глобальные переменные)  
число открытых и число закрытых каналов.

**RLRscat**, **RRLscat**, **TLRscat**, **TRLscat**, **RLRscatc**, **RRLscatc**, **TLRscatc**, **TRLscatc** (при `keupot=2`, глобальные переменные, записываются в файл `filenamew`)  
амплитуды отражения и прохождения (если имеются), и коэффициенты асимптотических решений для закрытых каналов (см. формулы (10)–(11)):  $R_{\rightarrow}(E)$ ,  $R_{\leftarrow}(E)$ ,  $T_{\rightarrow}(E)$ ,  $T_{\leftarrow}(E)$ ,  $R_{\leftarrow}^c(E)$ ,  $R_{\rightarrow}^c(E)$ ,  $T_{\leftarrow}^c(E)$ ,  $T_{\rightarrow}^c(E)$ , соответственно.

**Smatr** (при `keupot=2`, глобальная переменная)  
S - матрица (8).

**eigv** (при `keupot=3`, записываются в файл `filenamew`)  
собственные значения.

**eigf**, (при `keupot=3`, записываются в файл `filenamew`)  
собственные функции в виде кусочно-непрерывного полинома. Записываются в виде массива `eigf(1), ..., eigf(max(1,eqs))`.

**Eh** (при `keupot=3`, глобальная переменная)  
собственное значение задачи дискретного спектра.

## В. Замечания

Для тех переменных, у которых не указан `keupot`, предполагается, что `keupot > 0`.

За достаточно короткое время можно получить результаты с точностью порядка 8 значащих цифр. Если необходимо получить результаты с большей точностью или количество уравнений в системе большое, например, такое, что количество элементов собственного вектора при решении алгебраической задачи превышает  $NL > 10^3$ , то вычисления следует проводить на Фортране с помощью пакета программ KANTBP [9].

Время “молчания” программы при её выполнении для рассматриваемых примеров не превышает 1-3 минут, длительное “молчание” или зависание может быть вызвано либо слишком большими значениями порядка схемы МКЭ  $p' = \kappa^{\max}(p + 1) - 1$  ( $p'$  выводится на экран с названием “Order of Finite Element Scheme”), переменной Digits или размерностью алгебраической задачи  $NL \times NL$  ( $NL$  выводится на экран с названием “Dimension of algebraic eigenvalue problem”), либо элементы матриц алгебраической задачи не вычислены в виде чисел, например, представлены формальными выражениями. В последнем случае рекомендуется запустить программу при `keupot=4` и просмотреть элементы матриц в файлах “afem.dat” и “bfem.dat”.

## В. ПРИМЕРЫ

Файлы с примерами расположены в этом же архиве и называются `examplexx.txt` (`xx=01-16`). Для их запуска можно их содержимое либо скопировать в воркшит через буфер обмена, либо воспользоваться командой `<< read “examplexx.txt” >>`, либо открыть файл с помощью Maple выбирая `<< Maple Input >>`.

Приведены примеры численного решения краевых задач для систем ОДУ на конечном интервале с краевыми условиями первого, второго и третьего рода, которые аппроксимируют тестовые квантомеханические задачи на собственные значения и задачи рассеяния на бесконечном интервале и задачи вычисления метастабильных состояний на достаточно большом, но конечном интервале. Для контроля точности численного решения вычисляется погрешность, полученная при его подстановке в ОДУ,  $\bar{\varepsilon}_m(z) = |(\mathbf{D}(z) - E_m^h)\Phi_m^h(z)|$ ,  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ . Если тестовая задача имеет аналитическое решение, то вычисляется также абсолютное значение разности численного и известного аналитического решения  $\varepsilon_m(z) = |\Phi_m^h(z) - \Phi_m^{\text{exact}}(z)|$ ,  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ ,  $m = 1, 2, \dots, \text{numberf}$ . Графики вычисленных погрешностей собственных функций  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  и  $\varepsilon_m(z)$  выводятся на экран компьютера.

Поскольку собственные функции дискретного спектра экспоненциально убывают  $\Phi_m^{as}(z) \sim \exp(-\sqrt{-E_m}|z|)$  при  $z \rightarrow \infty$ , то исходная задача редуцируется к краевой задаче на связанные состояния на конечном интервале с условиями Неймана в граничных точках  $z^{\min}$  и  $z^{\max}$  интервала и условием нормировки (15). Решения редуцированной краевой задачи отличаются от решений исходной задачи на величину порядка  $\epsilon_m^{(1)} = \int_{-\infty}^{z^{\min}} \Phi_m^{as}(z)\Phi_m^{as}(z)dz + \int_{z^{\max}}^{+\infty} \Phi_m^{as}(z)\Phi_m^{as}(z)dz$  и, фактически, определяется суммой экспонент  $\epsilon_m^{(1)} \approx (|\Phi_m^{as}(z^{\min})| + |\Phi_m^{as}(z^{\max})|)/(-2\sqrt{-E_m})$  в граничных точках интервала. При заданном значении погрешности  $\epsilon_m^{(1)}$  имеем оценку требуемых значений граничных точек  $z^{\min}$  и  $z^{\max}$  конечного интервала.

Пример 01. Интерполяция функции по значениям функции и её производных на сетке

```

restart;read "kantbp4m.mwt";keypot:=0; 1
vv:=-99/8/cosh(z)^2; 2
zpoints:=[0, 5/4, 5/2, 3]; 3
fpoints:=[subs(z=zpoints[1],vv) 4
, [subs(z=zpoints[2],vv),seq(subs(z=zpoints[2],diff(vv,z$i)),i=1..4)] 5
, [subs(z=zpoints[3],vv),subs(z=zpoints[3],diff(vv,z))] 6
, [subs(z=zpoints[4],vv),subs(z=zpoints[4],diff(vv,z)),subs(z=zpoints[4],diff(vv,z,z))] 7
]; 8
hermites(); 9
fun1:=fun; 10
plot([fun1,vv],z=0..3);plot([fun1-vv],z=0..3); 11
12

```

Строка 1: Инициализация процедуры.

Строка 3: Аппроксимируемая функция.

Строки 4-9: Предполагается, что имеется набор значений функций и её производных на сетке 'zpoints', причем в первой точке задано значение функции, и в следующих, значения функции с производными до четвёртого, первого и второго порядка, соответственно.

Строки 10-12: Аппроксимация функции и проверка: вывод на экран графиков вычисленной функции и разности вычисленной и аппроксимируемой функции.

**Пример 02. Решение задачи на собственные значения с граничными условиями первого, второго и третьего рода**

Решаются задачи на собственные значения для уравнения (1) при  $N = 1$ ,  $f_B(z) = f_A(z) = 1$ , с потенциалом  $V_{11}(z) = 0$  при различных граничных условиях: Дирихле, Неймана и третьего рода (2)-(4) и условия нормировки (15), для которых известны в аналитическом виде собственные значения  $E_m^{exact}$  и собственные функции  $\Phi_m^{exact}(z)$ , например:  $E_m^{exact} = 1, 4, 9, 16, \dots$  для граничных условий Дирихле, и  $E_m^{exact} = 0, 1, 4, 9, \dots$  для граничных условий Неймана.

```

restart;read "kantbp4m.mwt";          1
psubint:=3; kappa_max:=2;           2
vpot:=0;                             3
ngrid:=4;zmin:=-Pi/2;zmax:=Pi/2;     4
numberf:=5;                           5
                                      6
DirL:=1;DirR:=1;                     7
hermites();                          8
                                      9
DirL:=2;DirR:=2;                    10
hermites();                          11
                                      12
DirL:=3;DirR:=3;RBoundL:=5;RBoundR:=5; 13
hermites();                          14
                                      15
                                      16
read "wfunctsl.dat":                 17
for ii from 1 to numberf do          18
plots[logplot]([abs(abs(eigf||ii)-abs(sin(ii*z+Pi*ii/2)/sqrt(Pi/2)))] ,z=zmin..zmax 19
 ,title=cat("test by comparison with ",convert(ii,string),"-th exact w.f.")); 20
plots[logplot]([abs(-diff(eigf||ii,z,z)-eigv||ii*eigf||ii)] ,z=zmin..zmax 21
 ,title=cat("test by substitution of ",convert(ii,string),"-th solution to ODE")); 22
od;                                   23
                                      24
read "wfunct2.dat":                 25
for ii from 1 to numberf do          26
plots[logplot]([abs(abs(eigf||ii)-abs(cos((ii-1)*z+Pi*(ii-1)/2)/sqrt(Pi/'if'(ii=1,1,2))))] 27
 ,z=zmin..zmax 28
 ,title=cat("test by comparison with ",convert(ii,string),"-th exact w.f.")); 29
plots[logplot]([abs(-diff(eigf||ii,z,z)-eigv||ii*eigf||ii)] ,z=zmin..zmax 30
 ,title=cat("test by substitution of ",convert(ii,string),"-th solution to ODE")); 31
od;                                   32

```

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строка 3: Эффективный потенциал задачи.

Строка 4: Выбор интервала интегрирования задачи и разбиение его на 4 равных подинтервала.

Строка 5: Задание числа искоемых собственных функций.

Строки 7-8: Решение задачи с граничными условиями Дирихле. Собственные функции и собственные значения пишутся в файл 'wfunctsl.dat' (см. filenameew).

Строки 10-11: Решение той же задачи, но с граничными условиями Неймана. Собственные функции и собственные значения пишутся в файл 'wfunct2.dat'.

Строки 13-14: Решение той же задачи, но с граничными условиями третьего рода  $\Phi'(z) = 5\Phi(z)$  при  $z = z^{\min}$  и  $z = z^{\max}$ . Собственные функции и собственные значения пишутся в файл 'wfunct3.dat'.

Строки 17-23: Вывод на экран графиков погрешностей  $\varepsilon_m(z)$  и  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  собственных функций для задачи с граничными условиями Дирихле.

Строки 25-32: Вывод на экран графиков погрешностей собственных функций  $\varepsilon_m(z)$  и  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  для задачи с граничными условиями Неймана.



**Пример 03. Решение задачи на собственные значения для уравнения Шредингера с одномерным потенциалом гармонического осциллятора и радиального уравнения для d-мерного гармонического осциллятора**

Исходная задача на связанные состояния формулируется для уравнения Шредингера d-мерного гармонического осциллятора

$$(\mathbf{D} - E_m) \Phi_m(z) = \left( -\frac{1}{z^{d-1}} \frac{d}{dz} z^{d-1} \frac{d}{dz} + z^2 - E_m \right) \Phi_m(z) = 0,$$

которая имеет аналитическое решение – собственные значения  $E_m^{exact}$  и собственные функции  $\Phi_m^{exact}(z)$ , нормированные условием (15) на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  при  $d = 1$  ( $E_m^{exact} = 1, 3, 5, 7, \dots$ ), или на полубесконечном интервале  $z \in (0, +\infty)$  при  $d \geq 2$  ( $E_m^{exact} = d, d + 4, d + 8, \dots$ ).

Решается задача на собственные значения для уравнения (1) с краевыми условиями (2) и условием нормировки (15) (если  $d \geq 2$ , то при  $z = z^{\min}$  используется краевое условие (3)), при  $f_B(z) = f_A(z) = z^{d-1}$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11}(z) = z^2$ .

```

restart;read "kantbp4m.mwt"; 1
psubint:=3;kappamax:=2; 2
vpot:=(z)^2; 3
ngrid:=14;zmin:=-7;zmax:=7; 4
numberf1:=10;numberf:=numberf1;filenamew:="1dosc.dat"; 5
hermites(); 6
7
intprep:=1;ddim:=5;filenamew:"5dosc.dat"; 8
vpot:=(z)^2; ngrid:=7; 9
FFA:=z^(ddim-1);FFB:=z^(ddim-1); 10
zmin:=0;zmax:=7;numberf2:=5;numberf:=numberf2; 11
hermites(); 12
13
read "1dosc.dat": 14
oscfun1(0):=0; 15
for ii from 1 to numberf1 do 16
oscfun1(ii):='if'(ii=1 17
,exp(-z^2/2)/sqrt(sqrt(Pi)) 18
,sqrt(2)*z/sqrt(ii-1)*oscfun1(ii-1)-sqrt(ii-2)/sqrt(ii-1)*oscfun1(ii-2)); 19
plots[logplot]([abs(abs(eigf||ii)-abs(oscfun1(ii))))],z=zmin..zmax 20
,title=cat("1d osc: test by comparison with ",convert(ii,string),"-th exact w.f.")); 21
print(%); 22
plots[logplot]([abs(-diff(eigf||ii,z,z)+z^2*eigf||ii-Re(eigv||ii)*eigf||ii)],z=zmin..zmax 23
,title=cat("1d osc: test by substitution of ",convert(ii,string),"-th solution to ODE")); 24
print(%); 25
od: 26
27
28
read "5dosc.dat": 29
for ii from 1 to numberf2 do 30
oscfun(ii):=sqrt(2*GAMMA(ii-1+(ddim)/2)/GAMMA((ii-1) +1)) 31
/GAMMA(ddim/2) 32
*exp(-z^2/2)*hypergeom([-ii+1],[ddim/2],z^2); 33
plots[logplot]([abs(abs(eigf||ii)-abs(oscfun(ii))))],z=zmin..zmax 34
,title=cat(convert(ddim,string),"d osc: test by comparison with " 35
,convert(ii,string),"-th exact w.f.")); 36
print(%); 37
plots[logplot]([abs(-1/FFB*diff(FFA*diff(eigf||ii,z),z)+z^2*eigf||ii-Re(eigv||ii)*eigf||ii)] 38
,z=zmin..zmax,title=cat(convert(ddim,string),"d osc: test by substitution of " 39
,convert(ii,string),"-th solution to ODE")); 40
print(%); 41

```

od:

42

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строка 3: Эффективный потенциал задачи.

Строка 4: Выбор интервала интегрирования задачи и разбиение его на 14 равных интервалов.

Строки 5-6: Вычисление первых 10 собственных функций и собственных значений одномерного гармонического осциллятора.

Строки 8-12: Вычисление первых 10 собственных функций и собственных значений задачи для d-мерного гармонического осциллятора. Матричные элементы пересчитываются заново. Это важно, если FFAD=0 или FFBD=0.

Строки 14-26: Вывод на экран графиков погрешностей  $\varepsilon_m(z)$  и  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  собственных функций для одномерного гармонического осциллятора.

Строки 29-42: Вывод на экран графиков погрешностей собственных функций  $\varepsilon_m(z)$  и  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  для d-мерного гармонического осциллятора.

**Пример 04. Решение задачи на собственные значения для радиального уравнения с кулоновским потенциалом**

Исходная задача на связанные состояния формулируется для уравнения Шрёдингера с кулоновским потенциалом

$$(\mathbf{D} - E_n) \Phi_n(z) = \left( -\frac{1}{z^{d-1}} \frac{d}{dz} z^{d-1} \frac{d}{dz} - \frac{2}{z} - E_n \right) \Phi_n(z) = 0,$$

которая имеет аналитическое решение – собственные значения  $E_n^{exact}$  и собственные функции  $\Phi_n^{exact}(z)$ , нормированные условием (15) на полубесконечном интервале  $z \in (0, +\infty)$  при  $d \geq 2$ , в частности, собственные значения  $E_n^{exact} = -1/n^2$ ,  $n = 1, 2, \dots$  при  $d = 3$ .

Решается задача на собственные значения для уравнения (1) с краевыми условиями (3) и условием нормировки (15) при  $f_B(z) = f_A(z) = z^2$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11}(z) = -2/z$ , затем краевые условия (3) заменяются краевыми условиями (4), зависящими от собственного значения, и полученные решения уточняются методом Ньютона.

```

restart; read "kantbp4m.mwt";
psubint:=3; kappa_max:=2;
FFA:=z^2;FFB:=FFA;
FFAD:=0; FFBD:=0; #choose 1 or 0;
nmesh:=12; for i from 1 to nmesh do vpot(i):=-2/(z);ngrid(i):=1;od;
zmesh(0):=1/32;for i from 1 to nmesh do zmesh(i):=zmesh(i-1)+2^i/64;od;
numberf:=5; hermites();
read "wfuncts1.dat";
for i from 1 to nmesh do ngrid(i):=4;od;
DirL:=3;DirR:=3;keypot:=3;
RBoundL := (-1-(1/3*(EEh-2))*zmesh(0)
            +(1/6*(2*EEh-1))*zmesh(0)^2
            +(1/90*(-10*EEh+2+3*EEh^2))*zmesh(0)^3)
            / (1-zmesh(0)-(1/6*(EEh-2))*zmesh(0)^2+(1/18*(2*EEh-1))*zmesh(0)^3
            +(1/360*(-10*EEh+2+3*EEh^2))*zmesh(0)^4);
RBoundR:=-sqrt(-EEh+subs(z=zmesh(nmesh),vpot(nmesh)));
Digits:=16;
for ii from 1 to numberf do
  Phink:=eigf||ii;
  Eh:=eigv||ii;
  hermites();
od;
for ii from 1 to numberf do
  read cat("wfuncts",convert(ii+1,string),".dat");
  plots[logplot]([abs(abs(eigf(1))-abs(2/ii^(3/2)*exp(-z/ii)*hypergeom([-ii+1],[2],2*z/ii)))]
    ,z=zmesh(0)..zmesh(nmesh)
    ,title=cat("test by comparison with ",convert(ii,string),"-th exact w.f."));
  print(%);
  plots[logplot]([abs(-1/z^2*diff(z^2*diff(eigf(1),z),z)-2/z*eigf(1)-eigv*eigf(1))]
    ,z=zmesh(0)..zmesh(nmesh)
    ,title=cat("test by comparison with ",convert(ii,string),"-th exact w.f."));
  print(%);

```

od:

43

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строка 4: Определение  $f_A(z)$  и  $f_B(z)$

Строка 5: Выбор способа вычисления интегралов для генерации алгебраической задачи.

Строки 7 и 9: Сначала задача с краевыми условиями Неймана решается на неравномерной сетке  $\Omega_z = \{1/32, 1/16, 1/8, \dots, 64, 128\}$ , причём на каждом из подынтервалов должен быть задан эффективный потенциал.

Строка 11: Вычисление и запись в файл 'wfunctsl.dat' (см. filenamew) пяти собственных функций и собственных значений.

Строка 13: Чтение из файла 'wfunctsl.dat' пяти собственных функций и собственных значений.

Строка 14: Задание более густой неравномерной сетки  $\Omega'_z = \{1/32, 5/128, 3/64, 7/128, 1/16, 5/64, 3/32, 7/64, 1/8, \dots, 64, 80, 96, 112, 128\}$ , где между узлами сетки  $\Omega_z$  добавлено по 3 узла.

Строка 16: Выбор опций для решения задачи методом Ньютона с граничными условиями третьего рода.

Строки 19-25: Задание асимптотических условий из асимптотических разложений решения при  $z \rightarrow 0$  и  $z \rightarrow +\infty$ .

Строки 26-31: Уточнение первых пяти собственных функций и собственных значений методом Ньютона.

Строки 33-43: вывод на экран графиков погрешностей  $\varepsilon_m(z)$  и  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  собственных функций при решении задачи методом Ньютона.

**Пример 05. Решение задачи на собственные значения с одномерным потенциалом Пёшля-Теллера**

Исходная задача на связанные состояния формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для уравнения Шрёдингера с потенциалом Пёшля-Теллера

$$(\mathbf{D} - E_m) \Phi_m(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{-\lambda(\lambda-1)}{\cosh(z)^2} - E_m \right) \Phi_m(z) = 0, \quad (67)$$

решения которого известны в аналитическом виде – собственные значения  $E_m^{exact}$  и собственные функции  $\Phi_m^{exact}(z)$  нормированы условием (15) при  $z^{\min} \rightarrow -\infty$  и  $z^{\max} \rightarrow +\infty$ . Для выбранного  $\lambda = 11/2$ , имеется пять собственных значений  $E_m^{exact} = [-20.25, -12.25, -6.25, -2.25, -0.25]$ .

Решается задача на собственные значения для уравнения (1) с краевыми условиями (3) и условием нормировки (15) при  $f_B(z) = f_A(z) = 1$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11}(z) = \frac{-\lambda(\lambda-1)}{\cosh(z)^2}$ . Программа вычисляет пять приближенных собственных функций и собственных значений.

A. A. Gusev, et al, Lecture Notes in Computer Science 8660, pp. 138–154 (2014)

```

restart;read "kantbp4m.mwt";
psubint:=3;kappamax:=2;

nmesh:=5;
for i from 1 to nmesh do ngrid(i):=4;vpot(i):=-99/4/cosh(z)^2;od;
zmesh(0):=-20;zmesh(1):=-5;zmesh(2):=-1;
zmesh(3):=1;zmesh(4):=5;zmesh(5):=20;

numberf:=5;hermites();

read "wfuncts1.dat":
ptfun(1) := (8/35)*sqrt(70)/(cosh(z)^(9/2)*sqrt(Pi));
ptfun(2) := (8/5)*sqrt(10)*sinh(z)/(cosh(z)^(9/2)*sqrt(Pi));
ptfun(3) := -(2/7)*sqrt(14)*(-8+7*cosh(z)^2)/(cosh(z)^(9/2)*sqrt(Pi));
ptfun(4) := -(2/5)*sqrt(10)*sinh(z)*(-8+5*cosh(z)^2)/(cosh(z)^(9/2)*sqrt(Pi));
ptfun(5) := (1/5)*sqrt(5)*(16-20*cosh(z)^2+5*cosh(z)^4)/(cosh(z)^(9/2)*sqrt(Pi));

for ii from 1 to 5 do
plots[logplot]([abs(abs(eigf||ii)-abs(ptfun(ii)))],z=zmesh(0)..zmesh(nmesh)
,title=cat("PT: test by comparison with ",convert(ii,string),"-th exact w.f."));
print(%);
plots[logplot]([abs(-diff(eigf||ii,z,z)+vpot(1)*eigf||ii-Re(eigv||ii)*eigf||ii)]
,z=zmesh(0)..zmesh(nmesh)
,title=cat("PT: test by substitution of ",convert(ii,string),"-th solution to ODE"));
print(%);
od:

```

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-7: Задача решается на квазиравномерной сетке  $\Omega_z = \{-20(4) - 5(4) - 1(4)1(4)5(4)20\}$ , где число в скобках означает количество конечных элементов на подынтервале, на каждом из  $nmesh:=5$  подынтервалов должен быть задан эффективный потенциал.

Строка 9: Решение задачи с граничными условиями Неймана. Вычисление первых пяти собственных функций и собственных значений.

Строки 11-26: Вывод на экран графиков погрешностей собственных функций  $\varepsilon_m(z)$  и  $\bar{\varepsilon}_m(z)$ .

**Пример 06. Решение задачи на собственные значения с одномерным потенциалом Скарфа  
(комплексным потенциалом Пёшля-Теллера)**

Исходная задача на связанные состояния формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для уравнения Шрёдингера с потенциалом Скарфа

$$(\mathbf{D} - E_m) \Phi_m(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{V_1}{\cosh(z)^2} + i \frac{V_2 \sinh(z)}{\cosh(z)^2} - E_m \right) \Phi_m(z) = 0, \quad (68)$$

решения которого известны в аналитическом виде – собственные значения  $E_m^{exact}$  и собственные функции  $\Phi_m^{exact}(z)$  нормированы условием (16) при  $z^{\min} \rightarrow -\infty$  и  $z^{\max} \rightarrow +\infty$ .

Решается задача на собственные значения для уравнения (1) с краевыми условиями (3) и условием нормировки (16) при  $f_B(z) = f_A(z) = z^2$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11}(z) = \frac{V_1}{\cosh(z)^2} + i \frac{V_2 \sinh(z)}{\cosh(z)^2}$ .

A.A. Gusev, et al, Lecture Notes in Computer Science 9301, pp. 182–197 (2015);

```

restart;Digits:=12; read  "kantbp4m.mwt";           1
keypot:=1;psubint:=3;kappa_max:=2;                2
                                                    3
nmesh:=3;                                          4
ngrid(1):=4;ngrid(2):=ngrid(1);ngrid(3):=ngrid(1); 5
zmesh(0):=-12;zmesh(1):=-2;zmesh(2):=2;zmesh(3):=12; 6
V1:=2;V2:=3;                                       7
vpot(1):=-V1/cosh(z)^2-V2*I*sinh(z)/cosh(z)^2;    8
vpot(2):=vpot(1);vpot(3):=vpot(1);                9
                                                    10
numberf:=2;hermites();                             11
                                                    12
for n from 0 to numberf-1 do                         13
En:=evalf(-(n+1/2-1/2*(sqrt(1/4+V1+V2)+sqrt(1/4+V1-V2)))^2); 14
od;                                                  15
                                                    16
read "wfunctsl.dat":                                 17
for ii from 1 to numberf do                           18
  plots[logplot]([abs(-diff(eigf||ii+I*eigfi||ii,z,z) 19
    +(vpot(1)-eigv||ii)*(eigf||ii+I*eigfi||ii))],z=zmesh(0)..zmesh(nmesh) 20
  ,title=cat("Scarf: test by substitution of ",convert(ii,string),"-th solution to ODE")); 21
od;                                                  22

```

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-9: Задача решается на квазиравномерной сетке  $\Omega_z = \{-12(4) - 2(4)2(4)12\}$ , где число в скобках означает количество конечных элементов на подынтервале, на каждом из  $n_{\text{mesh}}:=3$  подынтервалов должен быть задан эффективный потенциал.

Строка 11: Вычисление и запись в файл 'wfunctsl.dat' (см. filename\_w) двух собственных функций и собственных значений.

Строки 13-15: Аналитические выражения для собственных значений  $E_m$  приведены для проверки точности приближённых собственных значений  $E_m^h$ .

Строки 17-22: Вывод на экран графиков погрешностей численного решения  $\bar{\epsilon}_m(z)$ .

**Пример 07. Решение задачи рассеяния с одномерным потенциалом Пёшля-Теллера**

Исходная задача рассеяния формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для уравнения Шрёдингера с потенциалом Пёшля-Теллера

$$(\mathbf{D} - E)\Phi(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{-\lambda(\lambda-1)}{\cosh(z)^2} - E \right)\Phi(z) = 0, \quad (69)$$

и имеет известные в аналитическом виде решения— собственные функции  $\Phi_m^{exact}(z)$  и коэффициенты прохождения  $|T_{\leftarrow}|^2$  и отражения  $|R_{\leftarrow}|^2$ . Поскольку потенциал симметричный относительно  $z = 0$  можно сконструировать чётные и нечётные решения задачи рассеяния, из решений исходной задачи рассеяния, но на полуоси  $z \in (0, +\infty)$ , с граничными условиями Неймана или Дирихле при  $z = 0$ , соответственно.

Решается краевая задача для уравнения (1) с краевыми условиями (4), которые определяются из асимптотического решения (10), (11), (12) задачи рассеяния при  $f_B(z) = f_A(z) = 1$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11} = \frac{-\lambda(\lambda-1)}{\cosh(z)^2}$ .

```
restart;Digits:=16; read "kantbp4m.mwt"; 1
keypot:=2;psubint:=2;kappa_max:=3; 2
3
lambda:=11/2; 4
#lambda:=1/2+7/sqrt(2)*I; 5
vpot:=-expand(lambda*(lambda-1))/cosh(z)^2; 6
7
Eh:=7.0; 8
zmin:=0;zmax:=8;ngrid:=12;DirL:=1; 9
hermites();Rr1:=RRLscat; 10
11
DirL:=2; hermites();Rr12:=RRLscat; 12
13
zmin:=-8;zmax:=8;DirL:=0;ngrid:=24; hermites(); 14
15
"tests"; 16
"|R<-|^2+|T<-|^2-1"=abs(TRLscat[1,1])^2+abs(RRLscat[1,1])^2-1; 17
"|R->|^2+|T->|^2-1"=abs(TLRscat[1,1])^2+abs(RLRscat[1,1])^2-1; 18
"|Reven|^2-1"=abs(Rr11[1,1])^2-1; "|Rodd|^2-1"=abs(Rr12[1,1])^2-1; 19
"(Reven+Rodd)/2-R<-"=(Rr11[1,1]+Rr12[1,1])/2-RRLscat[1,1]; 20
"(-Reven+Rodd)/2-T<-"=(-Rr11[1,1]+Rr12[1,1])/2-TRLscat[1,1]; 21
"(Reven+Rodd)/2-T->"=(Rr11[1,1]+Rr12[1,1])/2-RLRscat[1,1]; 22
"(-Reven+Rodd)/2-T->"=(-Rr11[1,1]+Rr12[1,1])/2-TLRscat[1,1]; 23
24
k:=sqrt(Eh):p:=evalf(sinh(Pi*k)/sin(Pi*lambda)): 25
"|Rexact|^2-|R<-|^2"=1/(1+p^2)-abs(RRLscat[1,1])^2; 26
"|Texact|^2-|T<-|^2"=p^2/(1+p^2)-abs(TRLscat[1,1])^2; 27
28
read "wfuncts1.dat": 29
plots[logplot]([abs(-diff(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1),z,z) 30
+(vpot-Eh)*(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1))),z=0..zmax 31
,title=cat("PT: test by substitution of odd solution to ODE")); 32
33
read "wfuncts2.dat": 34
plots[logplot]([abs(-diff(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1),z,z) 35
+(vpot-Eh)*(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1))),z=0..zmax 36
,title=cat("PT: test by substitution of even solution to ODE")); 37
38
read "wfuncts3.dat": 39
plots[logplot]([abs(-diff(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1),z,z) 40
+(vpot-Eh)*(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1))),z=zmin..zmax 41
,title=cat("PT: test by substitution of RL solution to ODE")); 42
plots[logplot]([abs(-diff(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1),z,z) 43
```

```

+(vpot-Eh)*(eigfLRr(1,1)+I*eigfLRi(1,1))] ,z=zmin..zmax 44
,title=cat("PT: test by substitution of LR solution to ODE")); 45

```

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-6: Эффективный потенциал задачи.

Строка 8: Задание фиксированного значения энергии для задачи рассеяния

Строки 9-10: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными условиями Дирихле (2) при  $z = 0$  и третьего рода (4) при  $z = z^{max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на полуоси (9),(12).

Строка 12: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными условиями Неймана (3) при  $z = 0$  и третьего рода (4) при  $z = z^{max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на полуоси (9),(12).

Строка 14: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными условиями третьего рода (4) при  $z^{min}$  и  $z = z^{max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на оси (7),(12).

Строки 16-27: Проверка погрешностей ( $\simeq 0$ ) выполнения соотношений для амплитуд отражения и прохождения  $|R_{\leftarrow}|^2 + |T_{\leftarrow}|^2 - 1 = 0$ ,  $|R_{\rightarrow}|^2 + |T_{\rightarrow}|^2 - 1 = 0$ ,  $|R_{\text{even}}|^2 - 1 = 0$ ,  $|R_{\text{odd}}|^2 - 1 = 0$ , связи между амплитудами отражения на полуоси и амплитудами отражения и прохождения на оси  $(R_{\text{even}} + R_{\text{odd}})/2 - R_{\leftarrow} = 0$ ,  $(-R_{\text{even}} + R_{\text{odd}})/2 - T_{\leftarrow} = 0$ ,  $(R_{\text{even}} + R_{\text{odd}})/2 - R_{\rightarrow} = 0$ ,  $(-R_{\text{even}} + R_{\text{odd}})/2 - T_{\rightarrow} = 0$ , и сравнение коэффициентов отражения и прохождения с известными аналитическими значениями  $|R_{\rightarrow}^{\text{exact}}|^2 = |R_{\leftarrow}^{\text{exact}}|^2 = 1/(1 + p^2)$ ,  $|T_{\rightarrow}^{\text{exact}}|^2 = |T_{\leftarrow}^{\text{exact}}|^2 = p^2/(1 + p^2)$ ,  $p = \sinh(\pi\sqrt{E})/\sin(\pi\lambda)$ .

Строки 29-45: вывод на экран графиков погрешностей численного решения  $\bar{\varepsilon}_m(z)$ .



### Пример 08. Решение задачи рассеяния с одномерным потенциалом Скарфа

Исходная задача рассеяния формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для уравнения Шрёдингера с потенциалом Скарфа

$$(\mathbf{D} - E)\Phi(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{V_1}{\cosh(z)^2} + i\frac{V_2 \sinh(z)}{\cosh(z)^2} - E \right) \Phi(z) = 0, \quad (70)$$

и имеет известные в аналитическом виде решения— собственные функции  $\Phi_m^{exact}(z)$  и коэффициенты прохождения  $|T_{\leftarrow}|^2$  и отражения  $|R_{\leftarrow}|^2$ .

Решается краевая задача для уравнения (1) с краевыми условиями (4), которые определяются из асимптотического решения (10), (11), (12) задачи рассеяния при  $f_B(z) = f_A(z) = 1$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11} = \frac{V_1}{\cosh(z)^2} + i\frac{V_2 \sinh(z)}{\cosh(z)^2}$ .

```

restart;Digits:=12;read "kantbp4m.mwt";          1
keypot:=2; psubint:=2; kappa_max:=3;           2
                                                    3
V1:=2;V2:=3;                                    4
vpot:=V1/cosh(z)^2+V2*I*sinh(z)/cosh(z)^2;     5
                                                    6
Eh:=2.0;                                         7
zmin:=-12;zmax:=12;ngrid:=60;                  8
hermites();                                     9
                                                    10
"tests";                                        11
k:=sqrt(Eh);                                    12
gp:=sqrt(V1+V2-1/4);                            13
gm:=sqrt(V1-V2-1/4);                            14
TK:=evalf((sinh(2*Pi*k))^2                      15
  /((sinh(2*Pi*k))^2+2*cosh(2*Pi*k)*cosh(Pi*gp)*cosh(Pi*gm)+cosh(Pi*gp)^2+cosh(Pi*gm)^2)); 16
RL:=evalf((2*cosh(Pi*gp)*cosh(Pi*gm)+cosh(Pi*gp)^2*exp(-2*Pi*k)+cosh(Pi*gm)^2*exp(2*Pi*k)) 17
  /((sinh(2*Pi*k))^2+2*cosh(2*Pi*k)*cosh(Pi*gp)*cosh(Pi*gm)+cosh(Pi*gp)^2+cosh(Pi*gm)^2)); 18
RR:=evalf((2*cosh(Pi*gp)*cosh(Pi*gm)+cosh(Pi*gp)^2*exp(2*Pi*k)+cosh(Pi*gm)^2*exp(-2*Pi*k)) 19
  /((sinh(2*Pi*k))^2+2*cosh(2*Pi*k)*cosh(Pi*gp)*cosh(Pi*gm)+cosh(Pi*gp)^2+cosh(Pi*gm)^2)); 20
"|Texact|^2-|T->|^2"=TK-abs(TRLscat[1,1])^2;    21
"|Texact|^2-|T<-|^2"=TK-abs(TRLscat[1,1])^2;    22
"|Rexact|^2-|R->|^2"=RL-abs(RLRscat[1,1])^2;    23
"|Rexact|^2-|R<-|^2"=RR-abs(RRLscat[1,1])^2;    24
                                                    25
read "wfunctsl.dat";                            26
plots[logplot]([abs(-diff(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1),z,z) 27
  +(vpot-Eh)*(eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1)))],z=zmin..zmax 28
  ,title=cat("Scarf: test by substitution of RL solution to ODE")); 29
plots[logplot]([abs(-diff(eigfLRr(1,1)+I*eigfLRi(1,1),z,z) 30
  +(vpot-Eh)*(eigfLRr(1,1)+I*eigfLRi(1,1)))],z=zmin..zmax 31
  ,title=cat("Scarf: test by substitution of LR solution to ODE")); 32

```

Строки 1-2: – Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-5: Эффективный потенциал задачи.

Строка 7: Задание фиксированного значения энергии для задачи рассеяния

Строки 8-9: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными третьего рода (4) при  $z^{\min}$  и  $z = z^{\max}$ , которые определяются из асимптотического решения задачи рассеяния на оси (7),(12).

Строки 11-24: сравнение коэффициентов отражения и прохождения с известными аналитическими значениями  $|R_{\rightarrow}^{exact}|^2$ ,  $|R_{\leftarrow}^{exact}|^2$ ,  $|T_{\rightarrow}^{exact}|^2 = |T_{\leftarrow}^{exact}|^2$ .

Строки 26-32: вывод на экран графиков погрешностей численного решения  $\bar{\varepsilon}_m(z)$ .

**Пример 09. Решение задачи на собственные значения с одномерным потенциалом прямоугольной ямы конечной глубины**

Исходная задача на связанные состояния формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для уравнения Шрёдингера с кусочно-постоянным потенциалом

$$(\mathbf{D} - E_m) \Phi_m(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E_m \right) \Phi(z) = 0, \quad V(z) = \{V_0, |z| \leq a; 0, \text{otherwise}\},$$

решения которого известны в аналитическом виде и нормированы условием (15) при  $z^{\min} \rightarrow -\infty$  и  $z^{\max} \rightarrow +\infty$ .

Решается задача на собственные значения для уравнения (1) с краевыми условиями (3) и условием нормировки (15) при  $f_B(z) = f_A(z) = 1$ ,  $N = 1$ ,  $V(z) \equiv V_{11}(z) = \{V_0, |z| \leq a; 0, \text{otherwise}\}$ .

```
restart;read "kantbp4m.mwt";                                     1
psubint:=6; kappa_max:=1;                                       2
                                                                    3
V:=-50;a:=1;                                                       4
nmesh:=3; vpot(1):=0;vpot(2):=V;vpot(3):=0;                     5
ngrid(1):=10;ngrid(2):=20;ngrid(3):=10;                           6
zmesh(0):=-5;zmesh(1):=-a;zmesh(2):=a;zmesh(3):=5;              7
                                                                    8
numberf:=5;hermites();                                           9
                                                                    10
"test";                                                            11
eq3:=tan(sqrt(E-V)*a)=sqrt(-E)/sqrt(E-V);                        12
eq3a:=tan(sqrt(E-V)*a)=-sqrt(E-V)/sqrt(-E);                     13
ExactEigenvalues=sort({seq(fsolve(eq3,E=V+n^2/a^2),n=1..ceil(evalf(a*sqrt(-V))))
,seq(fsolve(eq3a,E=V+n^2/a^2),n=1..ceil(evalf(a*sqrt(-V))))});    14
                                                                    15
```

Строки 1-2: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-7: Задача решается на квазиравномерной сетке  $\Omega_z = \{-5(10) - a(20)a(10)5\}$ , где число в скобках означает количество конечных элементов на каждом из  $\text{nmesh}:=3$  подынтервалов. Важно, чтобы точки разрывов потенциала совпадали с узлами  $\text{zmesh}^*$ .

Строка 9: Вычисление и запись в файл 'wfunct1.dat' (см. filename) пяти собственных функций и собственных значений.

Строки 11-15: точные собственные значения задачи это решения алгебраических уравнений eq3 и eq3a для потенциальной ямы глубиной  $V$  и шириной  $2a$ .

**Пример 10. Решение задачи на собственные значения с кусочно-постоянным потенциалом**

Исходная задача на связанные состояния формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для системы уравнений

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\Phi_1(z)}{dz^2} + V_{11}(z)\Phi_1(z) + V_{12}(z)\Phi_2(z) + \dots + V_{1N}(z)\Phi_N(z) - E\Phi_1(z) &= 0, \\ -\frac{d^2\Phi_2(z)}{dz^2} + V_{21}(z)\Phi_1(z) + V_{22}(z)\Phi_2(z) + \dots + V_{2N}(z)\Phi_N(z) - E\Phi_2(z) &= 0, \\ \vdots \\ -\frac{d^2\Phi_N(z)}{dz^2} + V_{N1}(z)\Phi_1(z) + V_{N2}(z)\Phi_2(z) + \dots + V_{NN}(z)\Phi_N(z) - E\Phi_N(z) &= 0, \end{aligned} \quad (71)$$

с матрицей кусочно-постоянных потенциалов

$$V_{ij}(z) = V_{ji}(z) = \{V_{ij;1}, z \leq z_1; V_{ij;2}, z \leq z_2; \dots; V_{ij;k-1}, z \leq z_{k-1}; V_{ij;k}, z > z_{k-1}\}. \quad (72)$$

Набор собственных значений  $E_1^{ex} < E_2^{ex} < \dots < E_m^{ex}$  и собственных функций  $\Phi_1^{ex}(z), \Phi_2^{ex}(z), \dots, \Phi_m^{ex}(z)$  нормированных условием (15) при  $z^{\min} \rightarrow -\infty$  и  $z^{\max} \rightarrow +\infty$ , можно вычислить используя представления собственных функций в виде линейных комбинаций тригонометрических и экспоненциальных функций, зависящих от спектрального параметра  $E$ , с неизвестными коэффициентами. Однако при этом потребуются найти корни нелинейной системы уравнений, которые есть искомые 'точные' собственные значения исходной задачи.

Поскольку собственные функции дискретного спектра экспоненциально убывают при  $z \rightarrow \infty$ , то исходная задача (71) редуцируется к задаче на собственные значения для системы уравнений (1) при  $f_A(z) = f_B(z) = 1$ ,  $Q_{ij}(z) = 0$ ,  $V_{ij}(z)$  определяется из (72) на конечном интервале с условиями Дирихле (2) в граничных точках  $z^{\min} < z_1$  и  $z^{\max} > z_{k-1}$  интервала и условием нормировки (15), которая численно решается при  $N = 3$  с помощью программы KANTBP 4M методом конечных элементов.

```
restart;read "kantbp4m.mwt";Digits:=12; 1
eqs:=3;psubint:=8;kappamax:=1; 2
keypot:=1;DirL:=1;DirR:=1; 3
4
nmesh:=3; ngrid(1):=10;ngrid(2):=10;ngrid(3):=10; 5
zmesh(0):=-12;zmesh(1):=-2;zmesh(2):=2;zmesh(3):=12; 6
7
vpot(1,1,1):=0;vpot(2,2,1):=5;vpot(3,3,1):=10; 8
vpot(1,2,1):=0;vpot(1,3,1):=0;vpot(2,3,1):=0; 9
vpot(2,1,1):=0;vpot(3,1,1):=0;vpot(3,2,1):=0; 10
11
vpot(1,1,2):=-5;vpot(2,2,2):=0;vpot(3,3,2):=10; 12
vpot(1,2,2):=4;vpot(1,3,2):=4;vpot(2,3,2):=4; 13
vpot(2,1,2):=4;vpot(3,1,2):=4;vpot(3,2,2):=4; 14
15
vpot(1,1,3):=0;vpot(2,2,3):=0;vpot(3,3,3):=0; 16
vpot(1,2,3):=0;vpot(1,3,3):=0;vpot(2,3,3):=0; 17
vpot(2,1,3):=0;vpot(3,1,3):=0;vpot(3,2,3):=0; 18
19
numberf:=5; hermites(); 20
21
read "example10test.txt"; 22
```

Строки 1-3: Инициализация процедуры, выбор опции решения задачи на собственные значения для трёх уравнений с граничными условиями Дирихле и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-5: Задача решается на квазиравномерной сетке  $\Omega_z = \{-6(10) - 2(10)2(10)6\}$ , где число в скобках означает количество конечных элементов на подынтервале, на каждом из  $nmesh:=3$  подынтервалов должны быть заданы эффективные потенциалы. Важно, чтобы точки разрывов потенциалов совпадали с узлами  $zmesh(*)$ .

Строки 8-18: Задание эффективных потенциалов.

Строка 20: Вычисление, вывод на экран и запись в файл 'wfunctsl.dat' (см. filenamew) пяти собственных функций  $\Phi_1^h(z), \dots, \Phi_5^h(z)$  и собственных значений  $E_1^h < E_2^h < \dots < E_5^h$ .

Строка 22: Файл "example10test.txt" содержит вспомогательную программу example10test для вывода системы тринадцати нелинейных уравнений с тригонометрическими и экспоненциальными функциями, зависящими от искомого спектрального параметра и линейной относительно 12 неизвестных параметров коэффициентов разложения искомого собственного вектора-функции исходной задачи на собственные значения на оси. Эта программа предназначена для вычисления спектра только в специальном случае при eqs=3 и pmesh=3, и  $\text{vpot}(i,j,1)=\text{vpot}(i,j,3)=0$  при  $i \neq j$  и может быть при необходимости доработана пользователем.

На первом шаге с помощью с помощью встроенной процедуры dsolve ищется общее решение системы ОДУ с постоянными коэффициентами  $\text{vpot}(i,j,2)$ , которое справедливо на интервале  $z \in [z\text{mesh}(1), z\text{mesh}(2)]$ , также вычисляется производная полученного решения.

На втором шаге используются асимптотические решения, пропорциональные  $A\|(i) \cdot \exp(\sqrt{-Eh + \text{vpot}(i,i,1)} \cdot x\text{min})$  и  $A\|(i+3) \cdot \exp(-\sqrt{-Eh + \text{vpot}(i,i,3)} \cdot x\text{max})$ , справедливые при  $z \leq z\text{mesh}(1)$  и  $z \geq z\text{mesh}(2)$ , и их производные по  $z$ .

На третьем шаге вычисляются разности между решениями, полученными на первом шаге и асимптотическими решениями на третьем шаге, и разности между их производными, после чего эти разности с подстановкой значений  $z = z\text{mesh}(1)$  или  $z = z\text{mesh}(2)$ , приравниваются к нулю.

После выполнения третьего шага имеем систему тринадцати нелинейных уравнений с тригонометрическими и экспоненциальными функциями, зависящими от искомого спектрального параметра  $E$ , и линейной относительно 12 неизвестных параметров ( $A\|(1), \dots, A\|(6)$  из асимптотических решений и  $\_C\|(1), \dots, \_C\|(6)$  из общего решение системы ОДУ). Для того, чтобы вычислять нетривиальные решения, в систему уравнений добавляем уравнение  $A\|(1)^2 + \dots + A\|(6)^2 - 1 = 0$ . В результат получена система достаточно сложных нелинейных уравнений.

На четвертом шаге эта система тринадцати нелинейных уравнений относительно 13 неизвестных (спектрального параметра  $E$ , и 12 параметров ( $A\|(1), \dots, A\|(6)$ ,  $\_C\|(1), \dots, \_C\|(6)$ ) решается численно с помощью встроенной процедуры fsolve. Поскольку сравниваются значения искомого спектрального параметра  $E$ , на экран выводится только значение искомого спектрального параметра  $E$ . Что бы итерационный процесс решения нелинейной задачи сходился к различным значениям спектрального параметра  $E$ , начальные условия для неизвестных коэффициентов в системе нелинейных уравнений генерируются случайным образом с помощью встроенной процедуры rand, при этом процедура решения fsolve запускается  $2 \cdot \text{numberf}$  раз.

В процессе тестирования выяснилось, что для вычисления собственных значений  $E_1^{ex} < E_2^{ex} < \dots < E_m^{ex}$ , которые выводятся на экран для сравнения с собственными значениям  $E_1^h < E_2^h < \dots < E_5^h$ , вычисленными методом конечных элементов, количества повторений  $2 \cdot \text{numberf}$  недостаточно, т.е. решение слишком часто сходится к одному из собственных значений. В этом случае команду «read "example10test.txt";» следует повторить ещё раз. В качестве напоминания об этом выводится на экран следующее предупреждение:

"Eigenvalues given by solution of set of exact equations:"; "if not all, please repeat command «read example10test.txt»;»";

Попытки следует прекратить, если пользователь увидит все собственные значения, вычисленных методом конечных элементов, или пользователю надоест запускать эту команду.

**Пример 11. Решение многоканальной задачи рассеяния с кусочно-постоянным потенциалом**

Исходная задача рассеяния при фиксированном значении спектрального параметра  $E$  формулируется на бесконечном интервале  $z \in (-\infty, +\infty)$  для системы уравнений

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\Phi_1(z)}{dz^2} + V_{11}(z)\Phi_1(z) + V_{12}(z)\Phi_2(z) + \dots + V_{1N}(z)\Phi_N(z) - E\Phi_1(z) &= 0, \\ -\frac{d^2\Phi_2(z)}{dz^2} + V_{21}(z)\Phi_1(z) + V_{22}(z)\Phi_2(z) + \dots + V_{2N}(z)\Phi_N(z) - E\Phi_2(z) &= 0, \\ &\vdots \\ -\frac{d^2\Phi_N(z)}{dz^2} + V_{N1}(z)\Phi_1(z) + V_{N2}(z)\Phi_2(z) + \dots + V_{NN}(z)\Phi_N(z) - E\Phi_N(z) &= 0, \end{aligned} \quad (73)$$

с матрицей кусочно-постоянных потенциалов

$$V_{ij}(z) = V_{ji}(z) = \{V_{ij;1}, z \leq z_1; V_{ij;2}, z \leq z_2; \dots; V_{ij;k-1}, z \leq z_{k-1}; V_{ij;k}, z > z_{k-1}\}, \quad (74)$$

решения которой вычисляются используя представления собственных функций в виде линейных комбинаций тригонометрических и экспоненциальных функций с неизвестными коэффициентами.

Решается краевая задача для системы уравнений (1) при  $Q_{ij}(z) = 0$ ,  $V_{ij}(z)$  определяется из (74) с условиями третьего рода (4), которые определяются из асимптотических решений (10), (11), (12), (13) многоканальной задачи рассеяния при  $f_B(z) = f_A(z) = 1$ ,  $N = 3$ .

```
restart;read "kantbp4m.mwt";Digits:=12;          1
eqs:=3;psubint:=8;kappamax:=1;                 2
keypot:=2;DirL:=0;DirR:=0;                     3
                                                4
nmesh:=3;                                       5
ngrid(1):=10;ngrid(2):=10;ngrid(3):=10;        6
zmesh(0):=-6;zmesh(1):=-2;zmesh(2):=2;zmesh(3):=6; 7
                                                8
vpot(1,1,1):=0;vpot(2,2,1):=5;vpot(3,3,1):=10; 9
vpot(1,2,1):=0;vpot(1,3,1):=0;vpot(2,3,1):=0; 10
vpot(2,1,1):=0;vpot(3,1,1):=0;vpot(3,2,1):=0; 11
                                                12
vpot(1,1,2):=-5;vpot(2,2,2):=0;vpot(3,3,2):=10; 13
vpot(1,2,2):=4;vpot(1,3,2):=4;vpot(2,3,2):=4; 14
vpot(2,1,2):=4;vpot(3,1,2):=4;vpot(3,2,2):=4; 15
                                                16
vpot(1,1,3):=0;vpot(2,2,3):=0;vpot(3,3,3):=0; 17
vpot(1,2,3):=0;vpot(1,3,3):=0;vpot(2,3,3):=0; 18
vpot(2,1,3):=0;vpot(3,1,3):=0;vpot(3,2,3):=0; 19
                                                20
Eh:=3.8;                                       21
hermites();                                   22
                                                23
"tests:";                                     24
"S-S^T"=Smatr-Transpose(Smatr);              25
"S.S^\dag-I"=Smatr.HermitianTranspose(Smatr)-Matrix(NOpenR+NOpenL,shape=identity); 26
                                                27
read "example11test.txt";                     28
```

Строки 1-3: Инициализация процедуры, выбор опции решения задачи рассеяния для 3 уравнений на оси и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 4-5: Задача решается на квазиравномерной сетке  $\Omega_z = \{-6(10) - 2(10)2(10)6\}$ , где число в скобках означает количество конечных элементов на подынтервале, на каждом из  $nmesh:=3$  подынтервалов должен быть заданы эффективные потенциалы. Важно, чтобы точки разрывов потенциала совпадали с узлами  $zmesh(*)$ .

Строки 9-19: Задание эффективных потенциалов.

Строка 21: Задание фиксированного значения энергии для задачи рассеяния

Строка 22: Решение краевой задачи (1) на квазиравномерной сетке с граничными третьего рода (4) при  $z^{\min}$  и  $z = z^{\max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на оси (7),(12). Вывод на экран S-матрицы и собственных функций.

Строки 24-26: Проверка унитарности и симметричности S-матрицы.

Строка 28: Вычисление элементов S-матрицы, используя представления собственных функций в виде линейных комбинаций тригонометрических и экспоненциальных функций, и их сравнение при выводе на экран с посчитанными ранее с помощью программы KANTBP 4M, вычисленные МКЭ.

**Пример 12. Решение задачи на собственные значения для системы уравнений, полученных методом Канторовича для уравнения Гельмгольца в прямоугольной области**

Рассмотрим приближенное решение краевой задачи для уравнения Гельмгольца в квадрате со стороной равной  $\pi$ , записанного в новых координатах  $z = (x + y)/\sqrt{2}$ ,  $z' = (x - y)/\sqrt{2}$  – диагонали квадрата, с условиями Дирихле на границе области. Решение задачи  $\Psi(z, z')$  ищем в виде разложения Канторовича  $\Psi^{(m)}(z, z') = \sum_{j=1}^N \Phi_j(z; z') \Psi_j^{(m)}(z)$  по базисным функциям  $\Phi_i(z'; z)$ ,  $z'^{\max}(z) = \pi/\sqrt{2} - |z|$ ,  $z'^{\min}(z) = -\pi/\sqrt{2} + |z|$ , соответствующих собственным значениям  $\epsilon_i(z)$  при каждом значении параметра  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ :

$$\epsilon_i(z) = \frac{\pi^2 i^2}{(z'^{\max}(z) - z'^{\min}(z))^2}, \quad \Phi_i(z'; z) = \frac{\sqrt{2} \sin\left(\frac{\pi i(z' - z'^{\min}(z))}{z'^{\max}(z) - z'^{\min}(z)}\right)}{\sqrt{z'^{\max}(z) - z'^{\min}(z)}}, \quad (75)$$

Подстановка разложения в уравнение Гельмгольца и усреднение по базису  $\Phi_i(z'; z)$  приводит к системе ОДУ по переменной  $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ :

$$\begin{aligned} -\frac{d^2 \Phi_1^{(m)}(z)}{dz^2} + V_{11}(z) \Phi_1^{(m)}(z) + V_{12}(z) \Phi_2^{(m)}(z) + Q_{12}(z) \frac{d\Phi_2^{(m)}(z)}{dz} + \frac{dQ_{12}(z) \Phi_2^{(m)}(z)}{dz} + \dots - E_m \Phi_1^{(m)}(z) &= 0, \\ -\frac{d^2 \Phi_2^{(m)}(z)}{dz^2} + V_{21}(z) \Phi_1^{(m)}(z) + Q_{21}(z) \frac{d\Phi_1^{(m)}(z)}{dz} + \frac{dQ_{21}(z) \Phi_1^{(m)}(z)}{dz} + V_{22}(z) \Phi_2^{(m)}(z) + \dots - E_m \Phi_2^{(m)}(z) &= 0, \\ &\vdots \\ -\frac{d^2 \Phi_N^{(m)}(z)}{dz^2} + V_{N1}(z) \Phi_1^{(m)}(z) + Q_{N1}(z) \frac{d\Phi_1^{(m)}(z)}{dz} + \frac{dQ_{N1}(z) \Phi_1^{(m)}(z)}{dz} \\ &+ V_{N2}(z) \Phi_2^{(m)}(z) + Q_{N2}(z) \frac{d\Phi_2^{(m)}(z)}{dz} + \frac{dQ_{N2}(z) \Phi_2^{(m)}(z)}{dz} + \dots - E_m \Phi_N^{(m)}(z) = 0, \end{aligned} \quad (76)$$

где эффективные потенциалы  $Q_{ij}(z)$  и  $V_{ij}(z)$  заданы аналитическими выражениями

$$\begin{aligned} Q_{ij}(z) &= -\frac{4ij}{i^2 - j^2} \frac{1}{\pi\sqrt{2} - 2|z|} \frac{|z|}{z}, \quad V_{ij}(z) = -\frac{16ij(i^2 + j^2)}{(i^2 - j^2)^2} \frac{1}{(\pi\sqrt{2} - 2|z|)^2}, \\ V_{ii}(z) &= \frac{4\pi^2 i^2 + 3}{3} \frac{1}{(\pi\sqrt{2} - 2|z|)^2}, \quad j \neq i, \quad j - i \bmod 2 = 0. \end{aligned}$$

Эта система разделяется на две подсистемы из которых определяются чётные (с нечётными индексами  $j$  и  $i$ ) и нечётные решения (с чётными индексами  $j$  и  $i$ ). Программа вычисляет приближённые чётные и нечётные собственные значения  $E_m$ , которые можно сравнивать с известными  $E_m^{exact} = 2, 5, 5, 8, 10, 10, \dots$  – суммы квадратов натуральных чисел, при этом можно проверить, что  $E_m - E_m^{exact} \sim N^{-3}$ .

Программа решает задачу на собственные значения для системы уравнений (76) с условиями Дирихле(2) при  $z^{\min} = -\pi/\sqrt{2}$  и  $z^{\max} = \pi/\sqrt{2}$  и условиями нормировки (15).

```

restart;read "kantbp4m.mwt";          1
eqs:=6;                               2
psubint:=7; kappa_max:=1;           3
nmesh2:=2;nmesh:=2*nmesh2;          4
Qap:=1;                               5
                                       6
DirL:=1;DirR:=1;                     7
                                       8
for i0 from 1 to nmesh do ngrid(i0):=4;od;  9
zmesh(0):=-Pi/sqrt(2)+1/20;          10
zmesh(1):=zmesh(0)*7/8;              11
zmesh(2):=0;                          12
zmesh(3):=-zmesh(1);                 13
zmesh(4):=-zmesh(0);                 14
                                       15

```

```

for par from 0 to 1 do 16
  for nn1 from 1 to eqs do 17
    for nn2 from 1 to eqs do 18
      n1:=2*nn1-1+par; 19
      n2:=2*nn2-1+par; 20
      if (n1=n2) 21
        then 22
          for i0 from 1 to nmesh2 do 23
            vpot(nn1,nn1,nmesh2+i0):=(1/3)*(4*n1^2*Pi^2+3)/(Pi*sqrt(2)-2*z)^2; 24
            vpot(nn1,nn1,i0):=(1/3)*(4*n1^2*Pi^2+3)/(Pi*sqrt(2)+2*z)^2; 25
            qpote(nn1,nn1,i0):=0;qpote(nn1,nn1,nmesh2+i0):=0; 26
          od; 27
        else 28
          for i0 from 1 to nmesh2 do 29
            vpot(nn1,nn2,nmesh2+i0):=(16*(n1^2+n2^2))*n1*n2/((n1-n2)^2*(n1+n2)^2*(Pi*sqrt(2)-2*z)^2);30
            vpot(nn1,nn2,i0):=(16*(n1^2+n2^2))*n1*n2/((n1-n2)^2*(n1+n2)^2*(Pi*sqrt(2)+2*z)^2);31
            qpote(nn1,nn2,nmesh2+i0):= 4*n1*n2/((n1+n2)*(n1-n2)*(Pi*sqrt(2)-2*z)); 32
            qpote(nn1,nn2,i0):=-4*n1*n2/((n1+n2)*(n1-n2)*(Pi*sqrt(2)+2*z)) ; 33
          od; 34
        fi; 35
      od;od: 36
      numberf:=5; 37
      hermites(); 38
    od; 39

```

Строки 1-4: Инициализация процедуры и выбор числа уравнений в системе и параметров метода конечных элементов.

Строка 5: Выбор опции наличия эффективных потенциалов  $Q_{ij}$  в системе ОДУ.

Строка 7: Задание граничных условий Дирихле.

Строки 9-14: Задание квазиравномерной сетки с четырьмя конечными элементами на каждом из подынтервалов. Поскольку эффективные потенциалы имеют разрывы при  $z = 0$ , важно, чтобы один из  $zmesh(*)$  был равен нулю.

Строки 16-39: Решение задачи сначала для чётной, а затем для нечётной подсистем, которые пишутся в файлы 'wfunctsl.dat' и 'wfunct2.dat'(см. filenamew). Включает задание эффективных потенциалов (строки 17-36) и вычисление пяти собственных функций и собственных значений (строки 37-38).



**Пример 13. Решение многоканальной задачи рассеяния: туннелирование двух тождественных частиц с осцилляторным взаимодействием через потенциальный барьер**

Решается многоканальная задача рассеяния заданная на оси для системы уравнений (1) при  $Q_{ij}(z) = 0$ ,  $f_A(z) = f_B(z) = 1$  и  $V_{ij}(z)$ , заданными в аналитическом виде, с асимптотическими граничными условиями (10)–(13), которая получена методом Галёркина для задачи туннелирования двух тождественных частиц с координатами  $x_1$  и  $x_2$ , с осцилляторным взаимодействием  $V_{osc}(x_1 - x_2) = (x_1 - x_2)^2/2$  через гауссовский потенциальный барьер  $V_g(x_s) = \alpha/(\sigma\sqrt{2\pi}) \exp(-x_s^2/\sigma^2)$ ,  $s = 1, 2$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $\alpha = \text{alpha}$  (в приведенном примере  $\text{alpha}=5$ ). Поскольку эффективные потенциалы  $V_{ij}(z)$  симметричны относительно  $z = 0$ :  $V_{ij}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Phi_i^{osc}(x) (V_g((z-x)/\sqrt{2}) + V_g((z+x)/\sqrt{2})) \Phi_j^{osc}(x)$ , где  $\Phi_j^{osc}(x)$  чётные собственные функции гармонического осциллятора с потенциалом  $V_{osc}(x) = x^2$  и собственными значениями  $E_i^{osc} = 1, 5, 9, 13, 17, \dots$  (которые задают пороговые энергии  $E$ ), то в примере вычисляются решения  $\Phi_{\text{even}}$  и  $\Phi_{\text{odd}}$  многоканальной задачи рассеяния на полуоси  $z \in (0, +\infty)$ , соответственно, с граничными условиями Неймана и Дирихле при  $z = 0$ . В примере выполняется проверка унитарности и симметричности S-матриц и соотношений между амплитудами отражения на полуоси и амплитудами отражения и прохождения на оси:  $(\mathbf{R}_{\text{even}} + \mathbf{R}_{\text{odd}})/2 - \mathbf{R}_{\leftarrow} = 0$ ,  $(-\mathbf{R}_{\text{even}} + \mathbf{R}_{\text{odd}})/2 - \mathbf{T}_{\leftarrow} = 0$ .

Формулировка задачи дана в работе A.A. Gusev et al, Resonant tunneling of the few bound particles through repulsive barriers, Physics of Atomic Nuclei 77, pp. 389–413 (2014); Ядерная физика 77, сс. 414–438 (2014).

```

restart;read "kantbp4m.mwt";Digits:=8;                                     1
eqs:=5;psubint:=3;kappamax:=2;keypot:=2;                                  2
                                                                              3
alpha:=5;                                                                    4
vpot(1, 1) := (10/51)*2^(1/2)*51^(1/2)*exp(-(50/51)*z^2)/Pi^(1/2);      5
vpot(2, 1) :=                                                                    6
...                                                                              7
vpot(5, 5) := ...;                                                            8
                                                                              9
for i from 1 to eqs do                                                         10
  for i1 from i+1 to eqs do                                                    11
    vpot(i1,i):=alpha*vpot(i1,i);vpot(i,i1):=vpot(i1,i);                    12
  od;                                                                            13
  vpot(i,i):=alpha*vpot(i,i)+[1,5,9,13,17][i];                                14
od;                                                                              15
                                                                              16
Eh:=5.45;                                                                        17
zmin:=-6;zmax:=6;ngrid:=40;                                                    18
DirL:=0;DirR:=0;                                                                19
hermites();NOpen:=NOpenL+NOpenR;                                              20
RLRscat0:=RLRscat;TLRscat0:=TLRscat;RRLscat0:=RRLscat;TRLscat0:=TRLscat;Smatr0:=Smatr;  21
                                                                              22
DirL:=1;zmin:=0;ngrid:=20;                                                     23
hermites();RRLscat1:=RRLscat;Smatr1:=Smatr;                                    24
                                                                              25
DirL:=2;                                                                         26
hermites();RRLscat2:=RRLscat;Smatr2:=Smatr;                                    27
                                                                              28
"tests";                                                                          29
"S.S^\dag-I"=HermitianTranspose(Smatr0).Smatr0-Matrix(NOpen,shape=identity);  30
"even: S.S^\dag-I"=HermitianTranspose(Smatr1).Smatr1-Matrix(NOpenR,shape=identity);  31
"odd: S.S^\dag-I"=HermitianTranspose(Smatr2).Smatr2-Matrix(NOpenR,shape=identity);  32
"S-S^T"=Transpose(Smatr0)-Smatr0;                                              33
"even: S-S^T"=Transpose(Smatr1)-Smatr1;                                        34
"odd: S-S^T"=Transpose(Smatr2)-Smatr2;                                        35
"(-Reven+Rodd)/2-R<-"=(RRLscat1+RRLscat2)/2-RRLscat0;                       36
"(-Reven+Rodd)/2-T<-"=(-RRLscat1+RRLscat2)/2-TRLscat0;                       37

```

Строки 1-2: – Инициализация процедуры, выбор опций решения задачи рассеяния для 5 уравнений и параметров метода конечных элементов.

Строки 4-15: Задание эффективных потенциалов  $V_{ij}(z)$  (полностью заданы в файле 'example13.txt')

Строка 17: Задание фиксированного значения энергии для задачи рассеяния

Строки 18-21: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными третьего рода (4) при  $z^{\min}$  и  $z = z^{\max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на оси (7),(12). Присвоение переменным RLRscat0, TLRscat0, RRLscat0, TRLscat0, Smatr0, значений матриц амплитуд отражения и прохождения и S - матрицы.

Строки 23-24: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными условиями Дирихле (2) при  $z = 0$  и третьего рода (4) при  $z = z^{\max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на полуоси (9),(12). Присвоение переменным RRLscat1, Smatr1, значений матрицы амплитуд отражения и S - матрицы.

Строки 26-27: Решение краевой задачи (1) на равномерной сетке с граничными условиями Неймана при  $z = 0$  и третьего рода (4) при  $z = z^{\max}$  с асимптотическими решениями задачи рассеяния на полуоси (9),(12). Присвоение переменным RRLscat2, Smatr2, значений матрицы амплитуд отражения и S - матрицы.

Строки 29-37: Проверка унитарности и симметричности S-матриц и соотношений между амплитудами отражения на полуоси и амплитудами отражения и прохождения на оси:  $(\mathbf{R}_{\text{even}} + \mathbf{R}_{\text{odd}})/2 - \mathbf{R}_{\leftarrow} = 0$ ,  $(-\mathbf{R}_{\text{even}} + \mathbf{R}_{\text{odd}})/2 - \mathbf{T}_{\leftarrow} = 0$ .

**Пример 14. Вычисление метастабильных состояний (в качестве начального приближения берётся решение задачи рассеяния при резонансном прохождении)**

Представлен пример вычисления метастабильных состояний для двух барьеров (потенциалов Пёшля Теллера или Скарфа), расположенных на расстоянии  $2d$

$$(\mathbf{D} - E_m) \Phi_m(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{V_1}{\cosh(z-d)^2} + i \frac{V_2 \sinh(z-d)}{\cosh(z-d)^2} + \frac{V_1}{\cosh(z+d)^2} + i \frac{V_2 \sinh(z+d)}{\cosh(z+d)^2} - E_m \right) \Phi_m(z) = 0. \quad (77)$$

В качестве начального приближения для ньютоновской схемы выбирается подходящее решение задачи рассеяния при значении энергии  $E \equiv \Re E$ , соответствующее резонансному прохождению, локализованное между барьерами.

Детали решения этой задачи обсуждались в работе:

A.A. Gusev, et al, Lecture Notes in Computer Science 9301, pp. 182–197 (2015)

```

restart;Digits:=12;read "kantbp4m.mwt";
keypot:=2;psubint:=6;kapmax:=1;
zmin:=-20;zmax:=20;ngrid:=80;DirL:=0;DirR:=0;

#choose one of four
#V1:=2;V2:=1;d12:=7/2;Eh:=0.360240;
V1:=2;V2:=1;d12:=7/2;Eh:=1.036324;
#V1:=2;V2:=0;d12:=7/2;Eh:=0.310918;
#V1:=2;V2:=0;d12:=7/2;Eh:=1.025359;
vpot:=V1/cosh(z-d12)^2+V2*I*sinh(z-d12)/cosh(z-d12)^2
      +V1/cosh(z+d12)^2+V2*I*sinh(z+d12)/cosh(z+d12)^2;

hermites();
abs(TLRscat[1,1])^2;

read "wfunctsl.dat":
keypot:=3;
Phink:=eigfRLr(1,1)+I*eigfRLi(1,1):
DirL:=3;DirR:=3;
RBoundL:=-sqrt(-EEh);RBoundR:=sqrt(-EEh);
normtp:=0;
itermax:=20;
hermites();

```

Строки 1–14 Вычисление начального приближения.

Строки 16–23 Вычисление метастабильных состояний.

Строки 1-3: – Инициализация процедуры, выбор опций для решения задачи рассеяния на оси с граничными условиями третьего рода и выбор параметров метода конечных элементов и равномерной сетки.

Строки 5-11: Задание эффективного потенциала и собственного значения (оно же является начальное приближение для собственного значения в ньютоновской схеме). Собственные значения соответствующие резонансному прохождению подобраны заранее. Предлагается выбор из 4 наборов значений параметров.

Строки 13-14: Решение задачи рассеяния на оси и проверка того, что имеет место полное прохождение (резонансная прозрачность).

Строка 16: Чтение файла с решением задачи рассеяния.

Строка 17: Выбор опций для уточнения решения методом Ньютона.

Строки 18: Начальное приближение для собственной функции.

Строки 19-20: Задание граничных условий третьего рода.

Строки 21-23: Выбор типа условия нормировки, максимального числа итераций и решение краевой задачи методом Ньютона.

**Пример 15. Вычисление метастабильных состояний (в качестве начального приближения берётся решение задачи на связанные состояния)**

Представлен пример вычисления метастабильных состояний для двух барьеров (потенциалов Пёшля Теллера или Скарфа), расположенных на расстоянии  $2d$

$$(\mathbf{D} - E_m) \Phi_m(z) = \left( -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{V_1}{\cosh(z-d)^2} + i \frac{V_2 \sinh(z-d)}{\cosh(z-d)^2} + \frac{V_1}{\cosh(z+d)^2} + i \frac{V_2 \sinh(z+d)}{\cosh(z+d)^2} - E_m \right) \Phi_m(z) = 0. \quad (78)$$

В качестве начального приближения для ньютоновской схемы выбирается подходящее решение задачи на связанные состояния, локализованное между барьерами.

Детали решения этой задачи обсуждались в работе:

A.A. Gusev, et al, Lecture Notes in Computer Science 9301, pp. 182–197 (2015)

```

restart;Digits:=12;
read "kantbp4m.mwt";
keypot:=1;psubint:=6;kappamax:=1;

zmin:=-20;zmax:=20;ngrid:=20;numberf:=13;
DirL:=3;DirR:=3;
RBoundL:=-0.04-0.4*I;RBoundR:=0.04+0.4*I;
#V1:=2;V2:=1;d12:=7/2;sts:=7,12;
V1:=2;V2:=0;d12:=7/2;sts:=7,12;
vpot:=V1/cosh(z-d12)^2+V2*I*sinh(z-d12)/cosh(z-d12)^2
      +V1/cosh(z+d12)^2+V2*I*sinh(z+d12)/cosh(z+d12)^2;

hermites();

read "wfuncts1.dat":
keypot:=3;
zmin:=-20;zmax:=20;ngrid:=80;
normtp:=0;
itermax:=20;
RBoundL:=-sqrt(-EEh);RBoundR:=sqrt(-EEh);
for ii in sts do
  Eh:=eigv(ii);
  Phink:=eigf(1,ii)+I*eigfi(1,ii);
  hermites();
od;
```

Строки 1–13 Вычисление начального приближения.

Строки 15–25 Вычисление комплексных собственных значений и собственных функций метастабильных состояний.

Строки 1-3: – Инициализация процедуры, задание ключа `keypot:=1`; для решения краевой задачи с граничными условиями третьего рода: вычисления набора комплексных собственных значений и соответствующих собственных функций, и выбор параметров метода конечных элементов.

Строки 5-7: Задание равномерной сетки, количества вычисляемых функций дискретного спектра и граничных условий третьего рода, которые, в отличие от граничных условий третьего рода, заданных в строке 20, не зависят от искомого собственного значения. Замечание. В данном примере для экспоненциально убывающего эффективного потенциала начальное приближение к искомому решению вычисляется при заданном краевом условии третьего рода с коэффициентами  $\mathcal{R}(z^{\max}) = -\mathcal{R}(z^{\min}) = \sqrt{-E_0}$ , где значение  $E_0$  выбрано из окрестности искомых собственных значений  $E_1$  и  $E_2$ .

Строки 8-11: Задание эффективного потенциала. Предлагается выбор из 2 наборов значений параметров. Список номеров собственных функций, локализованных между барьерами (они же начальные приближения для собственных функций), подобран заранее, есть значение локальной переменной `sts`.

Строки 13: Решение задачи дискретного спектра.

Строка 15: Чтение файла с решениями задачи дискретного спектра.

Строка 16: Выбор опций для уточнения решения методом Ньютона.

Строки 17: Задание новой равномерной сетки.

Строки 18-19: Выбор условия нормировки и максимального числа итераций.

Строка 20: Задание новых граничных условий третьего рода, которые, в отличие от граничных условий третьего рода, заданных в строке 7, зависят от искомого собственного значения.

Строки 21-25: Решение краевой задачи методом Ньютона, где в качестве начальных приближений использовались собственные функции, из списка *sts*, локализованные в начале координат и соответствующие собственные значения.

**Пример 16. Применение программы для решения краевой задачи для уравнения Шрёдингера с кубической нелинейностью**

Программа может использоваться для получения решений краевой задачи на интервале  $z \in (0, 8)$  для нелинейного уравнения Шрёдингера

$$\left(-\frac{1}{2z} \frac{d}{dz} z \frac{d}{dz} + \frac{z^2}{2} - E_m\right) \Phi_m(z) + \lambda(\Phi_m(z))^3 = 0, \quad \lim_{z \rightarrow 0} z \frac{d\Phi_m(z)}{dz} = 0, \quad \Phi_m(8) = 0, \quad \int_0^8 z dz |\Phi_m(z)|^2 = 1. \quad (79)$$

Для этого уравнение (79) переписываем в следующем виде

$$\left(-\frac{1}{2z} \frac{d}{dz} z \frac{d}{dz} + \frac{z^2}{2} + \lambda(\Phi_m(z))^2 - E\right) \Phi_m(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow 0} z \frac{d\Phi_m(z)}{dz} = 0, \quad \Phi_m(8) = 0, \quad \int_0^8 z dz |\Phi_m(z)|^2 = 1 \quad (80)$$

и решаем его методом последовательных приближений.

В качестве начального приближения  $\Phi_m^{(0)}(z)$  берётся набор решений задачи (79) при  $\lambda = 0$

$$\left(-\frac{1}{2z} \frac{d}{dz} z \frac{d}{dz} + \frac{z^2}{2} - E_m^{(0)}\right) \Phi_m^{(0)}(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow 0} z \frac{d\Phi_m^{(0)}(z)}{dz} = 0, \quad \Phi_m^{(0)}(8) = 0, \quad \int_0^8 z dz |\Phi_m^{(0)}(z)|^2 = 1,$$

каждое последующее решение  $\Phi_m^{(k)}(z)$ ,  $E_m^{(k)}$  получается из предыдущего  $\Phi_m^{(k-1)}(z)$ ,  $E_m^{(k-1)}$  с помощью решения итерационным методом Ньютона краевой задачи:

$$\left(-\frac{1}{2z} \frac{d}{dz} z \frac{d}{dz} + \frac{z^2}{2} + \lambda(\Phi_m^{(k-1)}(z))^2 - E_m^{(k)}\right) \Phi_m^{(k)}(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow 0} z \frac{d\Phi_m^{(k)}(z)}{dz} = 0, \quad \Phi_m^{(k)}(8) = 0, \quad \int_0^8 z dz |\Phi_m^{(k)}(z)|^2 = 1.$$

```

restart;Digits:=16; 1
read "kantbp4m.mwt"; 2
psubint:=10;kappamax:=1; 3
4
zmin:=0;zmax:=8;ngrid:=4; 5
FFA:=z;FFB:=2*z; 6
DirL:=2;DirR:=1; 7
lambdaa:=2;eps:=10^(-6); 8
filenamew:="init.dat"; 9
eqs:=1; 10
vpot(1,1):=z^2/2; 11
numberf:=4; 12
keypote:=1; 13
hermites(); 14
15
keypote:=3; 16
grprint:=0; 17
for ii from 1 to numberf do 18
  filenamew:=cat("fun",convert(ii,string),".dat"); 19
  itermax:=5; iters:=0; 20
  read "init.dat"; 21
  vpot(1,1):=z^2/2+(eigf||ii(1))^2*lambdaa; 22
  Eh:=eigv||ii; 23
  Phink(1):=(eigf||ii(1)); 24
  hermites(); 25
  Ehs:=Eh;ii1:=0;itermax:=2; 26
  while ii1=0 do 27
    iters:=iters+1; 28
    print("iteration=", iters); 29
    read filenamew; 30
    vpot(1,1):=z^2/2+eigf(1)^2*lambdaa; 31
    Eh:=eigv; 32

```

```

    Phink(1):=eigf(1):                               33
    hermites();                                     34
    if(abs(Ehs-Eh)<eps) then ii1:=1; fi;             35
    Ehs:=Eh;                                         36
od:od:                                              37
                                                    38
for ii from 1 to numberf do                          39
    read cat("fun",convert(ii,string)," .dat");      40
    plot(eigf(1),z=zmin..zmax);                     41
    plots[logplot](abs(-1/2/z*diff(z*diff(eigf(1),z),z)  42
    +(z^2/2-eigv)*eigf(1)+eigf(1)^3*lambdaa),z=zmin..zmax); 43
od;                                                  44

```

Строки 1-3: Инициализация процедуры и выбор параметров метода конечных элементов.

Строка 5: Задание равномерной сетки.

Строка 6: Определение  $f_A(z)$  и  $f_B(z)$

Строка 7: Задание граничных условий Нейман-Дирихле.

Строка 8: Задание параметров задачи.

Строка 9: Задание имени файла в который будут записаны первые приближения для искомых решений.

Строки 10-11: Выбор опции eqs=1 решения одного уравнения, при этом, в отличие от eqs=0, vpot есть массив размерностью 1x1.

Строки 12-13: Выбор опции вычисления набора четырёх собственных функции и собственных значения.

Строка 14: Решение задачи на собственные значения.

Строки 16-17: Выбор опций уточнения решения методом Ньютона, без вывода графиков результатов расчёта на экран.

Строки 18 и 37: Начало и конец цикла в котором вычисляются решения краевой задачи для нелинейного уравнения Шрёдингера

Строка 19: Для каждого из numberf решений задание имени файла в который будут записаны последующие приближения (файл каждый раз будет переписываться).

Строки 20 и 26: Задание числа итераций для выполнения метода Ньютона.

Строки 20 и 28-29: Счетчик количества итераций.

Строки 21 и 30: Чтение файла с первым и  $(k - 1)$ -ым приближениями.

Строки 22 и 31: Переопределение эффективного потенциала задачи для вычисления последующего приближения.

Строки 23 и 32: Начальное приближение для собственного значения для последующего уточнения решения краевой задачи методом Ньютона.

Строки 24 и 33: Начальное приближение для собственной функции для последующего уточнения решения краевой задачи методом Ньютона.

Строки 25 и 34: Уточнение решения краевой задачи методом Ньютона.

Строки 35 и 36: Проверка выполнения условия завершения всего итерационного процесса.

Строки 39-44: Вывод на экран графиков четырёх вычисленных собственных функций и погрешностей  $\bar{\varepsilon}_m(z)$  численного решения.