

# Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шредингера Т.П. Пузынина, Во Чонг Тхак

(Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, [puzynina@jinr.ru](mailto:puzynina@jinr.ru), [votrongthach@jinr.ru](mailto:votrongthach@jinr.ru))

Руководство к использованию программного комплекса **PIPES**.

(Parametric Inverse Problem for the Equation of Schrödinger)

Данное руководство является продолжением работы [1], текст которой представлен в файле PAPER1.pdf на этом же сайте.

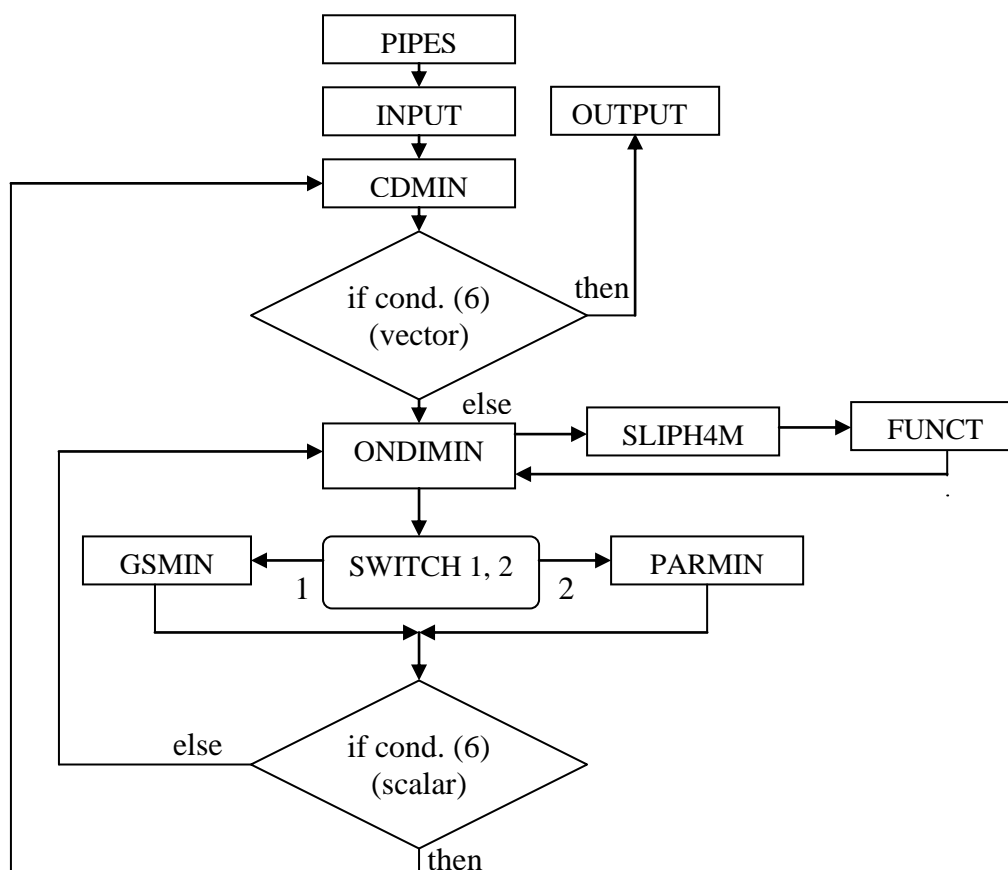


Рис.1

Структура комплекса программы PIPES показана на Рис. 1.

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

## USER-SUPPLIED PROCEDURES.

Процедуры INPUT, PQRX , FUNCT составляются пользователем в соответствии с поставленной проблемой.

## Внутренние процедуры.

Процедуры CDMIN, ONDIMIN, GSMIN, PARMIN являются внутренними стандартными процедурами комплекса PIPES. Ниже даются обращения к ним и описание глобальных параметров в них.

**Процедура INPUT.** Обращение: INPUT(0).

global A,B,N,H,P,Q,R,X,W,NZERO,EV0,Y0,EV,Y,EPS,EPS0,NIT,ITMAX,  
LST0,LST,LDEL,LPR,LX,EV0USER,T0USER,CMIN,CMAX,CEV0,CY0,SHIFTY0,LVISU,L  
MOD,EVANALYT,YANALYT,EV0NEWTON,Y0NEWTON,EV0ARRAY,OXLG,EQNAME,  
MODAL,MHD,NZSTART,NZEND,DATAEIGFUNC,EIGFUNC,WRADATA,COEFTR,VSH  
ARP,UGRAPHIC,IGRAPHIC,DELLAM,  
SWITCH,NCD,NPARMS,PARN,peps,COEPSFMIN,gdn,geps,pepscd,pa1,pb1,pa2,pb2,pa3,pb3:

**где параметры**

A,B,N,H,P,Q,R,X,W,NZERO,EV0,Y0,EV,Y,EPS,EPS0,NIT,ITMAX, LST0,LST,LDEL,  
LPR,LX,EV0USER,T0USER,CMIN,CMAX,CEV0,CY0,SHIFTY0,LVISU,LMOD,  
EVANALYT,YANALYT,EV0NEWTON,Y0NEWTON,EV0ARRAY,OXLG,EQNAME,  
MODAL,MHD,NZSTART,NZEND,DATAEIGFUNC,EIGFUNC,WRADATA,COEFTR,  
VSHARP,UGRAPHIC,IGRAPHIC,DELLAM описаны в работе [2] для комплекса  
SLIPH4M.

**Для комплекса PIPES дополнительно введены параметры**

global SWITCH,NCD,NPARMS,PARN,peps,COEPSFMIN,gdn,geps,pepscd,pa1,pb1,pa2,pb2,pa3,pb3:

**Ключ для решения обратной задачи**

SWITCH выбирает алгоритм одномерной минимизация функционала (1) [1] для решения обратной задачи.

Если SWITCH = 1, то будет использоваться процедура GSMIN, если SWITCH = 2, будет использоваться процедура PARMIN.

NPARMS – число параметров в векторе  $\bar{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$  (1) [1]. (В представленных комплексах реализовано значение NPARMS 1-5, что было достаточно для решения исследуемых в диссертации Во Чонг Тхака [3] задач).

PARN – максимальное количество итераций в методе PARMIN.

pepscd – малые числа, характеризующие точность для CDMIN (6) [1].

peps – малые числа, характеризующие точность для PARMIN (6) [1].

COEPSFMIN – малые числа, характеризующие точность для CDMIN (6) [1].

gdn – максимальное количество итераций в методе GSMIN (6) [1].

geps – малые числа, характеризующие точность для GSMIN (6) [1].

Границы параметров  $\bar{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$  (5) [1]:

pa1– левая граница параметра  $p_1$ ,

pb1– правая граница параметра  $p_1$ ,

pa2, pb2, pa3, pb3 – аналогично для  $p_2$  и  $p_3$ .

**Процедура PQRX** (используемая в SLIPH4M [2]).

Обращение: PQRX(0).

Global A,B,N,H,P,Q,R,X,W, icd,iparam,PARMP1,PARMP2,PARMP3,  
PCURRENT,C,pa1,pb1,pa2,pb2,pa3,pb3, alpha:  
где A,B,N,H,P,Q,R,X,W как SLIPH4M [1].

pa1,pb1,pa2,pb2,pa3,pb3 даны при описании процедуры INPUT.

icd – текущее значение номера итерации в методе покоординатного спуска CDMIN.

iparam – текущее значение номера параметра  $p_k$  (5) [1].

PARMP1, PARMP2, PARMP3 – в параметре-векторе  $\bar{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$  соответствуют значениям  $p_1, p_2, p_3$  (1) [1].

PCURRENT – текущее значение параметра одномерной минимизации  $p_k$  на отрезке  $[a_k, p_k]$  в программе ONDIMIN.

### Процедура FUNCT.

Обращение FUNCT (A,B,N,P,Q,R,W,AN,BN,V,EPS,NIT,LST,LPR,LX,X,LDEL,S),

где global CMIN,CMAX,KEPS,SY1,SV2,TK,TK1,AK,BK,YANALYT,EV0,Y0,YRS,EVRS,  
DELK1,DELTA0,DELTA,MODAL,YNZR,EVAK,FNI,RET,DELTOAK,TAUAK,DELK,  
RDEL,DELT,AMJU,T0,LST0,LVISU,KGRAPHIC,EVID,NZERO,EVANALYT,EV0ANALYT,  
NZSTART,NZEND,INZ, SA1 описаны в комплексе SLIPH4M [2].

Для комплекса PIPES введены дополнительные параметры

global VFUNCTIONAL, PCURRENT:

VFUNCTIONAL – значение функционала (1) [1].

PCURRENT – текущее значение параметра одномерной минимизации  $p_k$  в программе ONDIMIN.

EVIV – значение  $\lambda(\bar{p})$ .

**Процедура CDMIN [1]** реализует цикл от 1 до NCD, где NCD – максимально допустимое (заданное пользователем) количество итераций в методе покоординатного спуска CDMIN.

### Процедуры ONDIMIN, GSMIN, PARMIN [1].

Обращение ONDIMIN(iparam) .

Обращение: GSMIN (A,B,N,P,Q,R,W,AN,BN,V,EPS,NIT,LST,LPR,LX,X,LDEL,S,phi).

Обращение: PARMIN (x1,x2,x3,y1,y2,y3).

**Процедура OUTPUT** осуществляет запись результатов на файл .txt, название которого задано в комплексе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 10-01-00467-а,  
12-01-00396-а, 13-01-00595-а.

### Литература

1. Пузынина Т.П., Во Чонг Тхак. Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шредингера// Информационные технологии и вычислительные системы. 2012. № 2. С. 46-53. ([www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/paper1.pdf](http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/paper1.pdf))
2. Во Чонг Тхак, Пузынина Т.П. SLIPH4M - программа для численного решения частичной проблемы Штурма—Лиувилля // Программные продукты и системы. 2011. № 3. С. 75-80. ([www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/sliph4m/](http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/sliph4m/))