ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 519.664.5+517.433

11-88-128

ЕГИКЯН
Рубен Сергеевич

ПРИБЛИЖЕННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ ФУРЬЕ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ К РЕШЕНИЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1988

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:
доктор физико-математических наук — Жидков Евгений Петрович, профессор

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук — Денисов Александр Михайлович, доцент

кандидат физико-математических наук — Савелова Татьяна Ивановна, доцент

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Институт прикладной математики Академии наук СССР.

Автореферат разослан "__" ____________ 1988 г.

Защита диссертации состоится "__" __________ 1988 г. в _____ часов на заседании Специализированного совета Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук — Ивс З.М.Иванченко

Актуальность

Аппарат преобразования Фурье имеет широкое применение во многих областях математической и теоретической физики. Решение ряда важных физических задач записывается с использованием интеграла Фурье.

Математическое моделирование реальных физических процессов также включает использование интегралов от быстроосциллирующих функций, в частности интегралов Фурье.

Широкое применение интегралов Фурье делает актуальной задачу их вычисления. Обычные методы интегрирования Ньютона-Котеса являются в этом случае малоэффективными из-за наличия быстроосциллирующего сомножителя. Существующие методы, основанные на вычислении интегралов Фурье от аппроксимирующих полиномов Лагранжа, имеют широкое распространение. Однако они представляют определенные неудобства с точки зрения их реализации, требуя, например, вычисления производных интегрируемой функции. Особенно это неудобно, если исходные данные заданы с погрешностью. Другие формулы, также основанные на полиномах Лагранжа и не требующие применения некорректной операции дифференцирования, имеют низкую точность. Поэтому разработка квадратурных формул, сочетающих высокую точность и не требующих выполнения дифференцирования, актуальна для вычислительной математики и важна для приложений.

Многие реальные явления в настоящее время формируются на языке обратных задач, к которым приводят проблемы обработки и интерпретации наблюдений. Аналитически редко удается довести в этих случаях исследование до конца, поэтому численные методы играют важную роль при решении обратных задач. Как правило, решение обратных задач представляет трудности при численной реализации на ЭВМ ввиду их некорректности. Методы, разработанные для конкретной обратной задачи, могут с успехом применяться и в других областях. Интерес к обратным задачам продолжает оставаться высоким, издается специальный журнал " Inverse Problems ".

Обратная задача рассеяния квантовой механики (ОЗР) после доказательства ее принципиальной разрешимости уже давала возможность посмотреть по-новому на известные факты. Неожиданной явилась ее связь с теорией солитонов. Актуально для нее как качественное, так и численное исследование.

Постановка задачи

Рассматривается интеграл Фурье

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{ikt}\, dt . \qquad (I)$$

Для его нахождения требуется применение различных квадратур в разных частях области определения

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{ikt}\, dt = \int_{-\infty}^{a} f(t) e^{ikt}\, dt + \int_{a}^{b} f(t) e^{ikt}\, dt + \int_{b}^{\infty} f(t) e^{ikt}\, dt .$$

Каждый из трех интегралов вычисляется отдельно. Центральное место занимает вычисление интеграла на конечном отрезке. Квадратурные формулы строятся на основе аппроксимации функции $f(t)$ функцией простой структуры. Задача состоит в разработке квадратурных формул, имеющих высокую точность и не требующих для своей реализации применения некорректных операций, таких как дифференцирование.

Суммирование интегралов Фурье при неточно заданной исходной функции принадлежит к числу некорректно поставленных задач. Поэтому для практического применения квадратурных формул нужно иметь регулярные методы суммирования, устойчивые к погрешности входных данных.

Преобразование Фурье может быть использовано для более полного представления решения ОЗР, чем было известно. В целях качественного исследования свойств потенциала в зависимости от свойств фазы рассеяния ставится задача представления решения ОЗР в замкнутой интегральной форме.

Часто данные рассеяния бывают заданы приближенно в табличном виде. В диссертации ставится задача создания устойчивого численного решения ОЗР, позволяющего восстанавливать потенциал по фазе рассеяния без использования априорной информации о восстанавливаемом потенциале.

Цель работы:

- построение квадратурных формул высокой точности приближенного вычисления интегралов Фурье, не содержащих некорректных операций, как дифференцирование, и позволяющих находить сразу серию значений интегралов (I) для различных k ;
- построение устойчивых методов суммирования интегралов Фурье при неточно заданной интегрируемой функции;
- получение представления решения ОЗР в замкнутой интегральной форме;
- построение приближенного метода решения ОЗР для численного восстановления потенциала.

Научная новизна работы

I. Построена новая приближенная формула для вычисления интегралов Фурье, использующая аппроксимацию сплайном интегрируемой функции на конечном отрезке, не использующая производных и учитывающая асимптотическое поведение функции на бесконечности.

2. Предложена процедура устойчивого суммирования интегралов Фурье при помощи семейства регулярных методов суммирования при неточно заданной исходной функции. Указано правило выбора параметра регуляризации. Показано, что известные методы обобщенного суммирования Абеля, Гаусса-Вейерштрасса и Рисса принадлежат к этому семейству.

3. С использованием аппарата преобразования Фурье решение ОЗР на полуоси дано в замкнутой интегральной форме.

4. Предложен и программно реализован новый прямой экономичный алгоритм решения ОЗР.

Практическая ценность

Метод преобразования Фурье используется во многих областях теоретической и математической физики. Решение ряда важных физических задач можно выразить с помощью интегралов Фурье. Для их вычисления можно воспользоваться полученными в диссертации приближенными формулами, особенно в тех случаях, когда интегрируемая функция задана приближенно.

Потенциал взаимодействия в уравнении Шредингера часто определяется исходя из данных рассеяния. Полученный в диссертации результат о представлении решения ОЗР в замкнутой интегральной форме дает возможность качественно исследовать задачу. В случае, когда фаза рассеяния задана с погрешностью, применим разработанный экономичный метод решения ОЗР, не использующий априорной информации о восстанавливаемом потенциале.

Апробация работы

Работы, положенные в основу диссертации, докладывались на семинарах по автоматизации научных исследований и вычислительной техники ЕрФИ, вычислительной и прикладной математики ЛВТА ОИЯИ, а также IУ Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1987 г.).

Публикации

Диссертация основана на результатах 5 печатных работ, опубликованных в виде сообщений ОИЯИ, в сборнике аннотаций IУ Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1987 г).

Объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Общий объем составляет 137 страниц. Диссертация содержит 2 рисунка, 14 таблиц и список литературы (116 наименований).

Содержание диссертации

Во введении отражено развитие теории приближенного вычисления интегралов от быстроосциллирующих функций. Указано на связь между аппроксимацией интегрируемой функции функциями простой структуры и свойствами квадратурных формул, полученных путем такой аппроксимации. Сформулированы некоторые из основных результатов, полученных в этой области. Поскольку сплайны обладают лучшими аппроксимационными свойствами, чем полиномы Лагранжа, то целесообразно строить квадратуры, основываясь на сплайн-интерполяции.

Первая глава посвящена разработке эффективных квадратурных формул для приближенного вычисления интегралов Фурье. В § 1-1 рассматривается построение квадратурных формул на конечном отрезке, получающихся, когда интегрируемая функция заменяется аппроксимантом, а множитель e^{ikt} рассматривается в качестве весового. Взяв в качестве аппроксиманта $f(t)$ кубический сплайн $S(t)$, получаем квадратуру, имеющую тот же порядок приближения, что и формула Филона. Используется разбиение отрезка интегрирования $[a,b]$ с шагом h на n подотрезков. Значения функции $f(t)$ в узлах сетки будем обозначать f_j, $j=1,2,\dots,n$. Сплайн-квадратура имеет вид

$$\int_a^b f(t)e^{ikt}dt \approx \int_a^b S(t)e^{ikt}dt = \sum_{j=0}^{n} \ell s_j(k) f_j = J(k). \qquad (2)$$

Путем сравнения остаточных членов обеих квадратур показывается, что для квадратуры (2) точность в общем случае выше, чем для формулы Филона. В § 1-2 разрабатывается квадратурная формула (2). Коэффициенты $\ell s_j(k)$ записываются в виде, пригодном для использования при помощи ЭВМ. Изучаются также квадратурные формулы для нахождения остатка интеграла Фурье по полубесконечному интервалу произвольной степени точности. Такие квадратуры основаны на априорной информации об асимптотическом поведении функции $f(t)$ в окрестности бесконечности. Взятые вместе, эти квадратуры позволяют находить интеграл Фурье на всей оси. Окончательный вид квадратуры (2) следующий:

$$J(k) = \frac{6(\lambda(k)-2)^2}{k^4h^3(\lambda(k)+4)} \sum_{j=0}^{n} f_j e^{ikt_j} + \frac{\lambda(k)-2}{k^4h(\lambda(k)+4)} (E(k)+iI(k)) +$$

$$+ \frac{1}{k^4h}(m_o(1-e^{-ikh})+m_n(e^{inkh}-e^{i(n+1)kh})) +$$

$$+ e^{ika}(C_1+iC_2) + e^{ikb}(D_1+iD_2) .$$

Здесь $\lambda(k)=2\cos kh$, а $E(k), J(k), C_1, C_2, D_1, D_2, m_o, m_n$ представляют собой комбинацию значений функции $f(t)$ вблизи концов отрезка $[a,b]$ и определены в /4/. В § 1-3 рассматривается вопрос о точности квадратурной формулы (2) на конечном отрезке. Показывается, что квадратурная формула точна для полиномов четвертой степени. Приводится оценка погрешности квадратуры, являющаяся равномерной по k. На основе явного вида остаточного члена квадратуры устанавливается правило повышения точности. Путем комбинации приближенных значений, полученных на сетках с различными шагами, получается значение интеграла Фурье на порядок более точное, чем на каждой из исходных сеток. В § 1-4 предложен класс устойчивых методов суммирования интегралов Фурье при неточно заданной функции. Показывается, что методы обобщенного суммирования интегралов Фурье являются регулярными методами суммирования в смысле теории А.Н.Тихонова. К этому классу принадлежат методы Абеля, Гаусса-Вейерштрасса, Рисса. Условия регуляризации являются общими и могут служить основой для получения других конкретных способов устойчивого суммирования. Для практического определения параметра регуляризации может служить метод определения по невязке*.

Во второй главе решается обратная задача рассеяния на полуоси (ОЗР). Основным средством исследования служит преобразование Фурье. В § 2-1 формулируется ОЗР. Для уравнения Шредингера на полуоси

$$-y'' + V(x)y = k^2y$$

решение $\varphi(x,k)$ с краевыми условиями $\varphi(0,k)=0$, $\varphi'_x(0,k)=1$ имеет асимптотику при $x\to\infty$ и вещественных k

$$\varphi(x,k) \approx \frac{A(k)}{k}\sin(kx-\eta(k)) .$$

Функция $\eta(k)$ носит название фазы рассеяния. ОЗР заключается в восстановлении потенциала $V(x)$ по $\eta(k)$. Используется метод решения М.Г.Крейна. Пусть $\Gamma_{2x}(t)$ – решение интегрального уравнения

$$\Gamma_{2x}(t) + \int_0^{2x} H(t-s)\,\Gamma_{2x}(s)ds = H(t) , \quad 0 \le t \le 2x , \qquad (3)$$

* Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., Наука, 1985.

где ядро $h(t)$ определяется по $\eta(k)$. Потенциал $v(k)$ находится как

$$v(k) = 2\,\frac{d}{dx}\left[\Gamma_{2x}(0) - \Gamma_{2x}(2x)\right]. \tag{4}$$

Уравнение (3) является уравнением типа свертки, что дает возможность применить преобразование Фурье и представить его решение в замкнутом виде. В § 2-2 на основе решения уравнения (3) дается представление решения ОЗР в замкнутой интегральной форме:

$$\widehat{\Gamma_{2x}}(k)=(g_{2x}^{-1}(k)P_-(e^{-2ikx}g_{2x+}^{-1}(k)P_+(g_{0-}^{-1}(k)(1-\exp(-\frac{2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\eta(k')dk'}{k-k'}))))).$$

Входящие в правую часть функции g_{2x}, g_{2x+1}, g_0 получаются из фазы рассеяния $\eta(k)$ с помощью преобразования Фурье /2,5/. Потенциал $v(k)$ находится с помощью дифференцирования (4).

Третья глава посвящена реализации полученных результатов. В § 3-I рассматривается реализация квадратурных формул для нахождения интегралов Фурье. Поскольку часто бывает нужно находить значения интегралов Фурье для целой серии значений k, то квадратура (2) записывается в виде, позволяющем находить интеграл Фурье сразу для всех k. Вычисления оформляются в виде вычислительного алгоритма, основанного на алгоритме быстрого преобразования Фурье. Рассматривается также вопрос о распараллеливании операций и показывается, что процесс вычислений целиком распараллеливается. В § 3-2 изучено приближенное решение интегрального уравнения (3). Строится экономичный численный алгоритм его решения на основе того, что ядро зависит от разности аргументов. Дискретизованная система решается с помощью метода окаймления, который позволяет в ходе работы получать также решения усеченных систем, соответствующих меньшим значениям параметра. Далее излагается процесс уточнения решения с помощью метода Ричардсона*. В § 3-3 приводится разработанный алгоритм приближенного решения ОЗР, основанный на полученных результатах /4/. В нем используются квадратурные формулы для интеграла Фурье и метод приближенного решения уравнения (3). Для получения окончательного потенциала производится дифференцирование функции, заданной с погрешностью. Предложенная методика проиллюстрирована расчетами для потенциалов, принадлежащих семейству потенциалов Баргмана. При задании фазы рассеяния с погрешностью используется регуляризация при вычислении интегралов Фурье и дифференцировании. Путем численных расчетов проиллюстрирована зависимость степени точности восстановления потенциала от точности задания исходных данных. Численные эксперименты показывают, что при соответствующем выборе параметра регуляризации потенциал восстанавливается практически с такой же точностью, с какой заданы данные рассеяния.

В заключении сформулированы основные результаты.

<u>Основные результаты диссертации</u>

I. Построены квадратурные формулы для нахождения интеграла Фурье, основанные на аппроксимации исходной функции на конечном отрезке кубическим сплайном и учете остаточной части с помощью информации об асимптотическом поведении функции на бесконечности. Дана равномерная оценка скорости сходимости для этих формул.

Численные расчеты иллюстрируют эффективность полученных формул для нахождения значений интегралов Фурье.

2. Предложена процедура устойчивого суммирования интегралов Фурье при помощи семейства регулярных методов суммирования относительно неточно заданной исходной функции. Указано правило выбора параметра регуляризации.

Показано, что известные методы обобщенного суммирования Абеля, Гаусса-Вейерштрасса и Рисса принадлежат к этому семейству.

Условия, характеризующие семейство регулярных методов, являются общими и могут использоваться для получения других конкретных способов устойчивого суммирования.

Для практического вычисления интегралов Фурье используются полученные квадратурные формулы.

3. С использованием аппарата преобразования Фурье решение обратной задачи рассеяния квантовой механики на полуоси дано в замкнутой интегральной форме.

4. Предложен и программно реализован алгоритм численного решения обратной задачи рассеяния. Проведены модельные расчеты для потенциалов, принадлежащих к семейству потенциалов Баргмана.

<u>Результаты диссертации опубликованы в следующих работах:</u>

I. Егикян Р.С., Жидков Е.П. Об устойчивом суммировании интегралов Фурье некоторыми регулярными методами. ОИЯИ,РII-84-360,Дубна,1984.

2. Егикян Р.С., Жидков Е.П. Об одном методе решения обратной задачи рассеяния. ОИЯИ, 5-85-366, Дубна, 1985.

---

* Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М., Наука, 1980.

3. Егикян Р.С., Жидков Е.П. Алгоритм численного решения обратной задачи рассеяния. ОИЯИ, Р5-87-284, Дубна, 1987.
4. Егикян Р.С., Жидков Е.П. Квадратурные формулы для интеграла Фурье, основанные на сплайн-интерполяции. ОИЯИ, Р5-87-285, Дубна, 1987.
5. Егикян Р.С., Жидков Е.П. О решении обратной задачи рассеяния на полуоси. В кн.: IУ Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. Сборник аннотаций. ОИЯИ, Д17-87-477, Дубна, 1987, с.34.

Рукопись поступила в издательский отдел
22 февраля 1988 года.