

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

95-252

P11-95-252

Р.Г.Айрапетян, Е.П.Жидков, Р.Л.Шахбагян

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ
ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ,
ОСНОВАННЫЙ НА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ
ПО АСИМПТОТИКЕ

Направлено в журнал «Математическое моделирование»

1995

1 Введение

В настоящей работе¹ предложен численный алгоритм решения обратной задачи квантовой теории рассеяния (постановка задачи приведена, например, в книге [1]). Хорошо известны методы Крейна ([2]), Марченко ([3]), Гельфанда и Левитана ([4]), позволяющие свести эту задачу к интегральным уравнениям. В то же время разработка соответствующего численного алгоритма сопряжена с известными трудностями, связанными с некорректностью обратной задачи ([5]). Дело в том, что искомый потенциал определяется посредством численного дифференцирования сеточной функции, что является неустойчивой операцией ([6]). Кроме этого, в процессе решения задачи вычисляются условно сходящиеся интегралы Фурье, что также приводит к неустойчивости вычислительного процесса. Поэтому при построении численного алгоритма решения задачи возникает необходимость в его регуляризации. Широко известен метод А.Н.Тихонова регуляризации некорректных задач ([7]). Как известно, этот метод особенно эффективен при наличии некоторой дополнительной информации о решении задачи. Имеется много работ, в которых метод Тихонова применен к решению обратных задач (см., например, [8]-[14]). Исследованию обратной задачи посвящены также работы [15], [16].

Ниже предложен несколько иной подход. Он основан на том, что для потенциалов, имеющих абсолютно суммируемую производную, асимптотическое поведение фазового сдвига при больших энергиях позволяет выделять из него условно сходящуюся часть, для которой преобразование Фурье точно вычисляется. Далее, при решении линейной системы, получающейся в результате дискретизации интегрального уравнения, использована асимптотика по шагу для обратной матрицы, что дает возможность избежать процедуры численного дифференцирования. Описанные в работе алгоритмы основаны на методах Крейна и Марченко. Они успешно реализованы на компьютере. Результаты их тестирования проиллюстрированы рисунками, приведенными в работе.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 95 - 01 - 01467_а).

2 Постановка задачи и исходные формулы

Рассматривается следующая задача Коши для радиального уравнения Шредингера без углового момента:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right) \phi(k, r) = V(r)\phi(k, r), \quad \phi(k, 0) = 0, \quad \phi'(k, 0) = 1. \quad (1)$$

где $k \in [0, +\infty]$.

Как известно (см. [1]), для потенциалов, удовлетворяющих условию

$$\int_0^\infty r|V(r)|dr < \infty, \quad (2)$$

волновая функция имеет асимптотику

$$\phi(k, r) \sim \frac{|F(k)|}{k} \sin(kr + \delta(k)), \quad r \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Входящая в эту формулу функция $\delta(k)$ называется фазовым сдвигом. Обратная задача квантовой теории рассеяния состоит в восстановлении потенциала $V(r)$ по известному фазовому сдвигу $\delta(k)$. Решение этой задачи однозначно для фазовых сдвигов, удовлетворяющих условию

$$\delta(0) = \delta(+\infty) = 0. \quad (4)$$

Ниже это условие предполагается выполненным.

Как уже говорилось, имеется несколько подходов к решению обратной задачи. Мы начнем с подхода Крейна, а затем вкратце остановимся на методе Марченко. Метод Крейна состоит в том, что сначала, с помощью цепочки преобразований Фурье

$$\gamma(t) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \delta(k) \sin kt dk, \quad (5)$$

$$|F(k)| = \exp \left[\int_0^\infty \gamma(t) \cos(kt) dt \right], \quad (6)$$

$$H(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty [|F(k)|^{-2} - 1] \cos kt dk, \quad (7)$$

находится функция $H(t)$, затем решается однопараметрическое семейство интегральных уравнений Фредгольма второго рода:

$$\Gamma_{2r}(t) + H(t) + \int_0^{2r} \Gamma_{2r}(s) H(s-t) ds = 0, \quad 0 \leq t \leq 2r, \quad (8)$$

и наконец, по найденной из этих уравнений функции $\Gamma_r(t)$, с помощью формулы

$$V(r) = 2 \frac{d}{dr} (\Gamma_{2r}(0) - \Gamma_{2r}(2r)) \quad (9)$$

восстанавливается потенциал. Целью настоящей работы является построение регуляризованного алгоритма, реализующего эту процедуру.

3 Дискретизация и решение уравнений Фредгольма

Введем следующие обозначения

$$r_j = t_j = s_j = hj, \quad H(j) = H(t_j), \quad \Gamma(i, j) = \Gamma_r(t_j).$$

Дискретным аналогом интегрального уравнения (8) является следующая алгебраическая система:

$$\begin{aligned} \Gamma(2i, j) + H(j) + \frac{h}{2} (\Gamma(2i, 0)H(j) + \Gamma(2i, 2i)H(2i - j)) + \\ + h \sum_{m=1}^{2i-1} \Gamma(2i, m)H(m - j) = 0, \quad j \leq 2i. \end{aligned} \quad (10)$$

Перепишем ее в более удобном для дальнейшего виде

$$\begin{aligned} \Gamma(i, j) + h \sum_{m=0}^i \Gamma(i, m)H(m - j) = \\ = -H(j) + \frac{h}{2} (\Gamma(i, 0)H(j) + \Gamma(i, i)H(i - j)), \quad j \leq i. \end{aligned} \quad (11)$$

или в матричной форме

$$\begin{pmatrix} 1 + hH(0) & hH(1) & \dots & hH(i) \\ hH(1) & 1 + hH(0) & \dots & hH(i-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ hH(i) & hH(i-1) & \dots & 1 + hH(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma(i, 0) \\ \Gamma(i, 1) \\ \vdots \\ \Gamma(i, i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b(0) \\ b(1) \\ \vdots \\ b(i) \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где

$$b(j) = -H(j) + \frac{h}{2} (H(j)\Gamma(i, 0) + H(i - j)\Gamma(i, i)). \quad (13)$$

Решим эту систему с помощью несложной модификации метода окаймления (см.[17]). С этой целью введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} p(0) &= (1 + hH(0))^{-1}, \quad F(1) = H(1), \quad s(1) = hF(1)p(0), \\ p(1) &= p(0)/(1 - s^2(1)), \quad x(1,1) = -F(1)p(0), \end{aligned} \quad (14)$$

и далее по индукции для $m = 2, \dots, i$

$$\begin{aligned} F(m) &= H(m) + h \sum_{l=1}^{m-1} H(m-l)x(m-l, l), \\ s(m) &= hF(m)p(m-1), \quad p(m) = \frac{p(m-1)}{1-s^2(m)}, \\ x(m, l) &= x(m-1, l) - s(m)x(m-1, m-l), \\ l &= 1, \dots, m-1, \quad x(m, m) = -F(m)p(m-1). \end{aligned} \quad (15)$$

И, наконец, обозначим

$$x(m) = x(i, m), \quad m = 1, \dots, i. \quad (16)$$

Отсюда (см.[17])

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Gamma(i, 0) \\ \Gamma(i, 1) \\ \vdots \\ \Gamma(i, i) \end{pmatrix} &= p(i) \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ hx(1) & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ hx(i) & hx(i-1) & \dots & 1 \end{pmatrix} \times \right. \\ &\times \begin{pmatrix} 1 & hx(1) & \dots & hx(i) \\ 0 & 1 & \dots & hx(i-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ hx(i) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots \\ hx(1) & hx(2) & \dots & 0 \end{pmatrix} \times \\ &\left. \times \begin{pmatrix} 0 & hx(i) & \dots & hx(1) \\ 0 & 0 & \dots & hx(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} b(0) \\ b(1) \\ \vdots \\ b(i) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \Gamma(i, 0) &= p(i) \left(b(0) + h \sum_{m=1}^i b(m)x(m) \right), \\ \Gamma(i, i) &= p(i) \left(b(i) + h \sum_{m=1}^i b(i-m)x(m) \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Обозначив

$$A(i) = p(i) \sum_{m=1}^i H(m)x(m),$$

$$B(i) = p(i) \sum_{m=0}^{i-1} H(m)x(i-m), \quad (19)$$

получаем систему

$$\begin{pmatrix} 1 - \frac{h}{2}\alpha(i) & -\frac{h}{2}\beta(i) \\ -\frac{h}{2}\beta(i) & 1 - \frac{h}{2}\alpha(i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma(i, 0) \\ \Gamma(i, i) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \alpha(i) \\ \beta(i) \end{pmatrix}, \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha(i) &= p(i)H(0) + hA(i), \\ \beta(i) &= p(i)H(i) + hB(i). \end{aligned} \quad (21)$$

Решив эту систему и обозначив

$$\Gamma(i) = \Gamma(i, 0) - \Gamma(i, i), \quad (22)$$

получаем

$$\Gamma(i) = \beta(i) - \alpha(i) - hC(i), \quad (23)$$

где

$$C(i) = \frac{1}{2}(\alpha(i) - \beta(i))^2 \frac{1 - \frac{h}{2}(\alpha(i) + \beta(i))}{1 - h\alpha(i) + \frac{h^2}{4}(\alpha^2(i) - \beta^2(i))}. \quad (24)$$

Из (9) получаем

$$V(i) = 4 \frac{\Gamma(2i) - \Gamma(2i-1)}{h}. \quad (25)$$

Имеем

$$\frac{\alpha(i) - \alpha(i-1)}{h} = H(0) \frac{p(i) - p(i-1)}{h} + A(i) - A(i-1), \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\beta(i) - \beta(i-1)}{h} &= p(i-1) \frac{H(i) - H(i-1)}{h} + H(i) \frac{p(i) - p(i-1)}{h} + \\ &+ B(i) - B(i-1). \end{aligned} \quad (27)$$

Из (15)

$$p(i) - p(i-1) = \frac{h^2 F^2(i) p^3(i-1)}{1 - s^2(i)}. \quad (28)$$

Теперь, учитывая разностное отношение

$$H'(i-1) = \frac{H(i) - H(i-1)}{h}, \quad (29)$$

окончательно получаем

$$\begin{aligned} V(i) &= 4 \left(p(2i-1)H'(2i-1) + h \frac{F^2(i)p^3(2i-1)}{1-s^2(2i)} (H(2i) - H(0)) - \right. \\ &\left. - A(2i) + A(2i-1) + B(2i) - B(2i-1) - C(2i) + C(2i-1) \right). \end{aligned} \quad (30)$$

4 Асимптотика фазового сдвига

Обозначим через $L_m^1(R_+)$, $m \geq 1$, множество функций из $L^1([0, +\infty))$, производные которых до порядка m также принадлежат $L^1([0, +\infty))$.

Лемма.1. Если $V(r) \in L_1^1(R_+)$, то фазовый сдвиг имеет следующую асимптотику

$$\delta(k) = v_0 k^{-1} + O(k^{-2}) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (31)$$

2. Если же $V(r) \in C^1([0, +\infty)) \cap L_2^1(R_+)$, то фазовый сдвиг имеет асимптотику

$$\delta(k) = v_0 k^{-1} + O(k^{-3}) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (32)$$

а модуль функции Йоста - асимптотику

$$|F(k)|^{-2} = 1 + v_1 k^{-2} + O(k^{-3}) \quad \text{при } k \rightarrow \infty, \quad (33)$$

где

$$v_0 = -\frac{1}{2} \int_0^\infty V(r) dr, \quad v_1 = -\frac{V(0)}{2}. \quad (34)$$

Доказательство. Как известно,

$$\delta(k) = -\arg F(k). \quad (35)$$

$$F(k) = 1 + \int_0^\infty e^{ikr} V(r) \phi(k, r) dr, \quad (36)$$

причем функция $\phi(k, r)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\phi(k, r) = \frac{\sin kr}{k} + \int_0^r \frac{\sin k(r-r')}{k} V(r') \phi(k, r') dr'. \quad (37)$$

Покажем, что функция $\phi(k, r)$ представляется в виде асимптотического ряда

$$\sum_{j=0}^{\infty} \phi^{(j)}(k, r), \quad (38)$$

где

$$\phi^{(j)}(k, r) = O(k^{-j-1}) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (39)$$

Действительно,

$$\phi^{(0)}(k, r) = \frac{\sin kr}{k} = O(k^{-1}) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (40)$$

Соответственно,

$$\phi^{(1)}(k, r) = \int_0^r \frac{\sin k(r-r')}{k} V(r') \phi^{(0)}(k, r') dr'. \quad (41)$$

Отсюда

$$\begin{aligned}\phi^{(1)}(k, r) &= k^{-2} \int_0^r V(r') \sin k(r-r') \sin kr' dr' = \\ &= -\frac{W(r) \cos kr}{2k^2} + I(k, r) k^{-3},\end{aligned}\quad (42)$$

где

$$W(r) = \int_0^r V(r') dr', \quad (43)$$

$$I(k, r) = \frac{k}{2} \int_0^r V(r') \cos k(r-2r') dr'. \quad (44)$$

Заметим, что

$$\begin{aligned}I(k, r) &= -\frac{1}{4} \int_0^r V(r') \frac{d}{dr'} \sin k(r-2r') dr' = \\ &= \frac{\sin kr}{1} (V(r) + V(0)) + \frac{1}{1} \int_0^r V'(r') \sin k(r-2r') dr' = O(1).\end{aligned}\quad (45)$$

Далее, по индукции из $\phi^{(j)}(k, r) = O(k^{-j-1})$ следует

$$\phi^{(j+1)}(k, r) = \int_0^r \frac{\sin k(r-r')}{k} V'(r') \phi^{(j)}(k, r') dr' = O(k^{-j-2}). \quad (46)$$

Поэтому

$$\phi(k, r) = \frac{\sin kr}{k} - \frac{\cos kr}{2k^2} W(r) + O(k^{-3}) \quad (47)$$

равномерно по r .

Из (36) $F(k) = 1 + F_1(k) + iF_2(k)$, где

$$F_1(k) = \operatorname{Re} \int_0^\infty e^{ikr} V(r) \phi(k, r) dr,$$

$$F_2(k) = \operatorname{Im} \int_0^\infty e^{ikr} V(r) \phi(k, r) dr. \quad (48)$$

Отсюда

$$\begin{aligned}F_1(k) &= k^{-1} \int_0^\infty \sin(kr) \cos(kr) V(r) dr - \frac{1}{2k^2} \int_0^\infty \cos^2(kr) V(r) W(r) dr + \\ &+ O(k^{-3}) = \int_0^\infty \frac{\sin 2kr}{2k} V(r) dr - \int_0^\infty \frac{V(r) W(r)}{4k^2} dr - \\ &- \frac{1}{4k^2} \int_0^\infty V(r) W(r) \cos 2kr dr + O(k^{-3}) = -\frac{1}{4k^2} \int_0^\infty [\cos 2kr]' V(r) dr -\end{aligned}$$

$$-\frac{v_0^2}{2k^2} - \frac{1}{4k^2} \int_0^\infty V(r)W(r)\cos 2kr dr + O(k^{-3}).$$

Следовательно,

$$f_1(k) = \frac{V(0)}{4k^2} + \frac{1}{4k^2} \int_0^\infty V'(r)\cos 2kr dr - \frac{v_0^2}{2k^2} - \\ - \frac{1}{8k^3} \int_0^\infty [\sin 2kr]' V(r)W(r) dr + O(k^{-3}).$$

Из условий леммы получаем оценки

$$\int_0^\infty V'(r)\cos 2kr dr = \frac{1}{2k} \int_0^\infty V'(r) \frac{d}{dr} \sin 2kr dr = \\ = -\frac{1}{2k} \int_0^\infty V''(r)\sin 2kr dr = O(k^{-1}), \quad (49)$$

$$\int_0^\infty [\sin 2kr]' V(r)W(r) dr = \int_0^\infty \sin 2kr V'(r)W(r) dr + \\ + \int_0^\infty \sin 2kr [V'(r)]^2 dr = O(k^{-3}). \quad (50)$$

Таким образом,

$$F_1(k) = \frac{V(0)}{4k^2} - \frac{v_0^2}{2k^2} + O(k^{-3}). \quad (51)$$

Аналогично

$$F_2(k) = k^{-1} \int_0^\infty \sin^2(kr)V(r) dr - \frac{1}{4k^2} \int_0^\infty \sin 2kr V(r)W(r) dr + \\ + O(k^{-3}) = -\frac{v_0}{k} - \frac{1}{4k^2} \int_0^\infty [\sin 2kr]' V(r) dr + \\ + \frac{1}{8k^3} \int_0^\infty [\cos 2kr]' V(r)W(r) dr + O(k^{-3}) = -\frac{v_0}{k} + \frac{1}{4k^2} \int_0^\infty \sin 2kr V'(r) dr - \\ - \frac{1}{8k^3} \int_0^\infty \cos 2kr [V'(r)W(r) + V^2(r)] dr + O(k^{-3}).$$

Заметив, что

$$k \int_0^\infty \sin 2kr V'(r) dr = -\frac{1}{2} \int_0^\infty [\cos 2kr]' V'(r) dr =$$

$$= \frac{V'(0)}{2} + \int_0^\infty V''(r) \cos 2kr dr = O(1), \quad (52)$$

получаем

$$F(k) = 1 + v_2 k^{-2} - i v_0 k^{-1}, \quad (53)$$

где $v_2 = \frac{V(0)}{4} - \frac{v_0^2}{2}$. Отсюда

$$\begin{aligned} \delta(k) &= -\operatorname{arctg} \left(-\frac{v_0}{k(1 + \frac{v_2}{k^2})} + O(k^{-3}) \right) = \\ &= \operatorname{arctg} \left(\frac{v_0}{k} + O(k^{-3}) \right) = v_0 k^{-1} + O(k^{-3}). \end{aligned} \quad (54)$$

Соответственно

$$\begin{aligned} |F(k)|^2 &= (1 + v_2 k^{-2})^2 + v_0^2 k^{-2} + O(k^{-3}) = \\ &= 1 + 2v_2 k^{-2} + v_0^2 k^{-2} + O(k^{-3}) = 1 + \frac{V(0)}{2k^2} + O(k^{-3}), \end{aligned} \quad (55)$$

и, следовательно, имеет место (33).

5 Алгоритм численного решения задачи

Будем предполагать, что искомый потенциал удовлетворяет условиям, налагаемым во второй части леммы.

Поскольку интеграл (5) - условно сходящийся, для его вычисления необходима регуляризация. Предлагаемый алгоритм основан на процедуре асимптотической регуляризации и организован следующим образом:

I. Вычисляется постоянная v_0 . С этой целью используется асимптотическая формула

$$v_0 = k\delta(k) + O(k^{-2}), \quad k \rightarrow \infty, \quad (56)$$

благодаря чему нахождение v_0 сводится к определению среднего значения величины $k\delta(k)$ для достаточно больших k .

II. Проводится асимптотическая регуляризация. Для этого из функции $\delta(k)$ вычитается "условно сходящаяся" часть:

$$\delta_1(k) = \delta(k) - v_0 \frac{k}{1 + k^2}. \quad (57)$$

После этого, в соответствии с формулами (5),(6), к функции $\delta_1(k)$ применяются быстрые синус-преобразование, а затем косинус-преобразование Фурье.

И, наконец, к полученной функции прибавляется функция $v_0/(1+k^2)$, являющаяся результатом точно считааемых аналогичных преобразований функции $v_0k/(1+k^2)$. Согласно (6) функция $|F(k)|$ равна экспоненте этой суммы, что дает возможность вычислить функцию $|F(k)|^{-2} - 1$.

III. Вычисляются значения функции $H(t)$. Это можно сделать с помощью быстрого косинус-преобразования, поскольку, согласно лемме, функция $|F(k)|^{-2} - 1$ имеет асимптотику $O(k^{-2})$.

IV. Вычисляются значения функции $H'(t)$. Функция $H'(t)$ находится с помощью следующего синус-преобразования:

$$H'(t) = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} k[|F(k)|^{-2} - 1] \sin kt dk. \quad (58)$$

Согласно лемме

$$k[|F(k)|^{-2} - 1] = \frac{v_1}{k} + O(k^{-2}). \quad (59)$$

Поэтому интеграл (58) также является условно сходящимся и нуждается в регуляризации. Для этого с помощью формулы

$$v_1 = k^2[|F(k)|^{-2} - 1] + O(k^{-1}), \quad k \rightarrow \infty, \quad (60)$$

определяется постоянная v_1 , а затем $H'(t)$ вычисляется с помощью асимптотической регуляризации, описанной выше.

V. Вычисление потенциала $V(r)$. По формулам (14)-(16), (19), (21) и (24) рекуррентно находятся величины $p(i)$, $F(i)$, $A(i)$, $B(i)$, $C(i)$, $s(i)$ и по формуле (25) потенциал $V(i)$. Процесс ведется до тех пор, пока выполнено условие

$$|s(i)| < 1, \quad (61)$$

обеспечивающее возможность деления на $1 - s^2(i)$ в (15). Заметим, что малости $s(i) = hF(i)p(i)$ можно достигнуть за счет выбора достаточно малого шага.

В заключение этого пункта приведем несколько рисунков, иллюстрирующих тестирование программы, основанной на описанном выше алгоритме. Тестирование проводилось следующим образом: брался потенциал, с помощью метода фазовых функций (см. [18]) решалась прямая задача, затем фазовый сдвиг, полученный при решении прямой задачи, брался за исходный, решалась обратная задача, и, наконец, полученный потенциал сравнивался с исходным. Ниже приведены несколько примеров. На рисунках слева (с индексом а) показан исходный потенциал, на рисунках в центре (с индексом б) - соответствующий ему фазовый сдвиг, а на рисунках справа (с индексом в) - потенциал, полученный при решении обратной задачи.

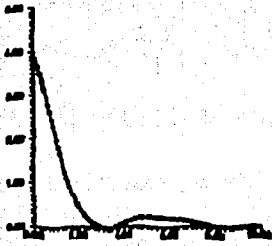


Рис. 1а

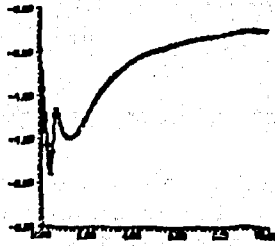


Рис. 1б

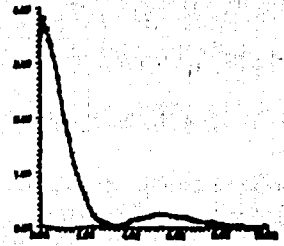


Рис. 1в

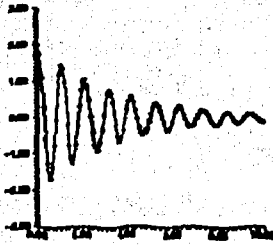


Рис. 2а

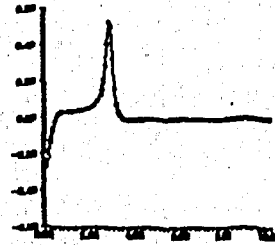


Рис. 2б

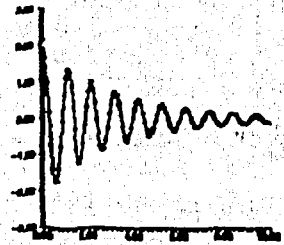


Рис. 2в

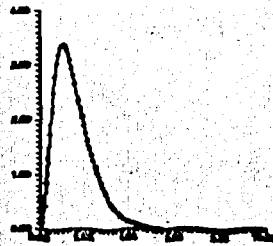


Рис. 3а

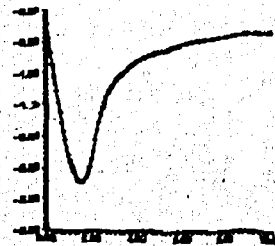


Рис. 3б

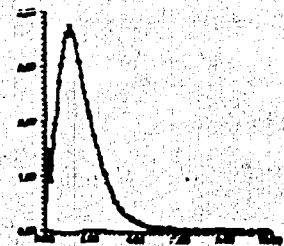


Рис. 3в

6 Краткое описание алгоритма решения задачи методом Марченко

Как известно (см.[3]), при решении задачи методом Марченко сперва определяют функцию

$$A_0(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (\exp\{2i\delta(k)\} - 1) e^{ikt} dk, \quad (62)$$

потом решают интегральное уравнение Марченко

$$A(r, t) = A_0(r + t) + \int_r^{+\infty} A(r, s) A_0(s + t) ds, \quad l \geq r. \quad (63)$$

и затем находят потенциал по формуле

$$V(r) = -2 \frac{dA(r, r)}{dr}. \quad (64)$$

Во избежание неприятностей, связанных с численным дифференцированием, на первом этапе необходимо определить функции $A_0(t)$ и $A'_0(t)$. В силу нечетности функции $\delta(k)$ это можно сделать после асимптотической регуляризации с помощью быстрых синус- и косинус-преобразований:

$$A_0(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} (\cos 2\delta(k) - 1) \cos kt dk - \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \sin 2\delta(k) \sin kt dk, \quad (65)$$

$$A'_0(t) = -\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} k (\cos 2\delta(k) - 1) \sin kt dk - \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} k \sin 2\delta(k) \cos kt dk. \quad (66)$$

Введем обозначения: $r_j = hj$, $A(r_i, r_j) = A(i, j)$, $A_0(r_j) = F(j)$, $j = 1, \dots, N$. Дискретным аналогом интегрального уравнения (63) является следующая алгебраическая система:

$$A(i, j) = F(i + j) + \frac{h}{2} F(i + j) A(i, i) + h \sum_{k=i+1}^N F(k + j) A(i, k),$$

$$i \leq j \leq m, \quad A(N, N) = F(2N - 1). \quad (67)$$

По правилу Крамера $A(i, i) = \Delta(i, i) / \Delta(i)$, $i = 1, \dots, N - 1$, где

$$\Delta(i) = \det \begin{pmatrix} 1 - \frac{h}{2} F(2i - 1) & -hF(2i) & \dots & -hF(N + i - 1) \\ -\frac{h}{2} F(2i) & 1 - hF(2i + 1) & \dots & -hF(N + i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{h}{2} F(N + i - 1) & -hF(N + i) & \dots & 1 - hF(2N - 1) \end{pmatrix},$$

а определитель $\Delta(i, i)$ получается из определителя $\Delta(i)$ заменой первого столбца на вектор $(F(2i-1), F(2i), \dots, F(N+i-1))^{\text{tr}}$. Пусть F_i - матрица $\|F(k+l-1)\|_{k,l=i,\dots,N}$ и $d(i) = \det(E - hF_i)$, где E - единичная матрица размером $(N-i+1) \times (N-i+1)$. После несложных преобразований получаем

$$\Delta(i) = \frac{1}{2}(d(i) + d(i+1)), \quad \Delta(i, i) = h^{-1}(d(i+1) - d(i)). \quad (68)$$

Поэтому

$$A(i, i) = 2h^{-1} \frac{d(i+1) - d(i)}{d(i+1) + d(i)}, \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (69)$$

Обозначив $\lambda(i) = d(i)/d(i+1)$, $i = 1, \dots, N-1$, $\lambda(N) = 1 - hF(2N-1)$, получаем

$$A(i, i) = 2h^{-1} \frac{1 - \lambda(i)}{1 + \lambda(i)}. \quad (70)$$

Отсюда и из (64)

$$\begin{aligned} V(i) &= -2h^{-1}(A(i+1, i+1) - A(i, i)) = \\ &= 8h^{-2} \frac{\lambda(i+1) - \lambda(i)}{(1 + \lambda(i+1))(1 + \lambda(i))}. \end{aligned} \quad (71)$$

С целью нахождения последовательности значений $\lambda(i)$ разложим матрицу $E - hF_i$ в произведение верхнетреугольной, диагональной и нижнетреугольной матриц. Поскольку матрица F_i - симметрическая, получаем

$$E - hF_i = (E + hW)\Lambda(E + hW)^{\text{tr}}, \quad (72)$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i, \lambda_{i+1}, \dots, \lambda_N)$, $W = \|w_{k,l}\|_{k,l=i,\dots,N}$, $w_{k,l} = 0$ при $k \geq l$. Из матричного равенства (72) получаем рекуррентные соотношения:

$$\lambda_i = 1 - hF(2i-1) - h^2 \sum_{j=i+1}^N \lambda_j w_{i,j}^2, \quad (73)$$

$$w_{i,j} = -\lambda_j^{-1} \left(F(i+j-1) + h \sum_{k=j+1}^N \lambda_k w_{i,k} w_{j,k} \right), \quad (74)$$

где $i = N, N-1, \dots, 1$. Из (72), (74) и (75) находим

$$\begin{aligned} V(i) &= \frac{8}{(1 + \lambda(i+1))(1 + \lambda(i))} \left(-h^{-1}(F(2i+1) - F(2i-1)) - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=i+2}^N \lambda_j w_{i+1,j}^2 + \sum_{j=i+1}^N \lambda_j w_{i,j}^2 \right). \end{aligned} \quad (75)$$

Теперь из разностного отношения

$$h^{-1}(F(2i+1) - F(2i-1)) = 2F'(2i) = 2A'_0(2r_i) \quad (76)$$

получаем

$$V(i) = -8(1 + \lambda(i+1))^{-1}(1 + \lambda(i))^{-1} \times \\ \times \left(2A'_0(2r_i) - \lambda_{i+1} w_{i,i+1}^2 + \sum_{j=i+2}^N \lambda_j (w_{i,j}^2 - w_{i+1,j}^2) \right). \quad (77)$$

Реализация алгоритма, основанного на формуле (77), требует "запоминания" всех промежуточных значений $w_{k,l}$, что сопряжено с большими затратами машинной памяти. В остальном он даже эффективнее алгоритма, описанного в пунктах 2 и 4, поскольку требует меньше преобразований Фурье.

7 Выводы

Процесс восстановления потенциала по фазовому сдвигу условно можно разбить на два этапа: 1) нахождение функции $H(t)$ по формулам (5)-(7). 2) решение уравнения Крейна и вычисление потенциала. На обоих этапах вычисления неустойчивы по отношению к малым возмущениям исходных данных. На первом этапе это связано с неустойчивостью вычисления интегралов Фурье и с процедурой их обрезания, причем ситуация усугубляется тем, что эти интегралы - условно сходящиеся; на втором - с операцией численного дифференцирования в (9).

С целью построения эффективного алгоритма для решения задачи в настоящей работе:

а) выделен класс потенциалов, для которых имеют место асимптотические формулы (32) и (33) для фазового сдвига и модуля функции Йоста;

б) предложена процедура асимптотической регуляризации, позволяющая выделить из интеграла Фурье "условно сходящуюся" часть, суть которой заключается в том, что при вычислении "хвостов" интегралов подынтегральная функция заменяется на асимптотически эквивалентную ей функцию, для которой известно точное значение соответствующего интеграла Фурье;

в) на первом этапе вычисляется не только функция $H(t)$, но и ее производная $H'(t)$, что удается сделать благодаря асимптотической регуляризации;

г) на втором этапе удастся избежать процедуры численного дифференцирования благодаря выделению из потенциала функции $H'(t)$, найденной на первом этапе;

д) аналогичный алгоритм предложен для решения задачи методом Марченко: этот алгоритм даже более эффективен, поскольку для его реализации требуется только одно преобразование Фурье, однако он требует больших затрат машинной памяти, в отличие от алгоритма, описанного в пункте 4.

Во время численных экспериментов, при тестировании программ, основанных на предложенных алгоритмах, для фазовых сдвигов, соответствующих известным потенциалам, получены достаточно хорошие точность и устойчивость по отношению к возмущениям исходных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. К.Шадап, П.Сабатье. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. - Мир, Москва, 1980.
2. М.Г.Крейн. Об определении потенциала частицы по ее S -функции. - ДАН СССР, 105 (1955), N 3, 433-436.
3. З.С.Аграинович, В.А.Марченко. Обратная задача рассеяния. - Харьков, 1960.
4. И.М.Гельфанд, Б.М.Левитан. Об определении дифференциального уравнения по его спектральной функции. - Изв.АН СССР.Сер.мат., 15 (1951), N 2, 309-360.
5. А.М.Денисов. О численном решении обратной задачи рассеяния. - Ж.вычисл. матем.и матем.физ., 17 (1977), N 3, 753-756.
6. А.А. Самарский. Введение в численные методы. - Наука, Москва, 1982.
7. А.П. Тихонов, Г.Я.Арсенин. Методы решения некорректных задач. - Наука, Москва, 1979.
8. А.М.Денисов, А.С.Крылов, К.В.Шитикова. О восстановлении нуклон-нуклонного потенциала по данным рассеяния. - В сб. "Обработка и интерпретация результатов наблюдений". МГУ, Москва, 1981.
9. Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек, Р.В.Малышев, Б.П.Хоромский, Е.Х.Христов, И.Улегла. - Итерационные методы решения обратной задачи теории рассеяния. - ЭЧАЯ, 9 (1978), N 3, 710-768.
10. Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек. - Метод расчета потенциала путем введения параметра. - 1968, Дубна, ОИЯИ, P5-3895.
11. Е.П.Жидков, Ю.М.Казаринов, Г.И.Макаренко, А.В.Ракитский. Решение обратной задачи теории рассеяния методом введения непрерывного параметра. - Препринт, 1970, Дубна, ОИЯИ, P1-5306.

12. Е.П.Жидков, Р.В.Малышев, Е.Х.Христов. О расчете на ЭВМ обратной задачи рассеяния. – Препринт, 1976, Дубна. ОИЯИ. Р5-0923.
13. Р.С.Египин, Е.П.Жидков. Алгоритм численного решения обратной задачи рассеяния. – 1987, Дубна. ОИЯИ. Р5-87-284.
14. Е.П.Жидков, Е.Х.Христов. Устойчивые методы суммирования интеграла Фурье. – Препринт, 1977, Дубна. ОИЯИ. Р5-10369.
15. Б.Н.Захарьев, В.Н.Мельников, Б.В.Рудик, А.А.Сузько. Обратная задача рассеяния (конечно-разностный подход). – УЧАЯ, 8 (1977), № 2, 290-329.
16. Б.Н.Захарьев, А.А.Сузько. Потенциалы и квантовое рассеяние: Прямая и обратная задачи. – Москва, Энергоатомиздат, 1985.
17. В.В.Воеводин, Е.Е.Тыртышников. Вычислительные процессы с теплыми матрицами. – Москва, Наука, 1987.
18. В.В.Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике. – Москва, Наука, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 июня 1995 года.