

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

96-38

P11-96-38

Р.Г. Айрапетян, Я. Буша<sup>1</sup>, Е.П. Жидков

О РЕГУЛЯРИЗОВАННЫХ ЧИСЛЕННЫХ  
АЛГОРИТМАХ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ  
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЙЯНИЯ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Технический университет, Кошице, Словакия

<sup>2</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №95-01-01467а)

1996

## Введение

В работе [1] предложен регуляризованный численный алгоритм решения обратной задачи квантовой теории рассеяния (постановка задачи приведена в книге [2], см., также, [3-15]). Алгоритм основан на процедуре регуляризации, заключающейся в том, что для определенного класса потенциалов асимптотическое поведение фазового сдвига при больших энергиях позволяет выделить 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. Заметим, что, поскольку при дискретизации интегральных уравнений использована квадратурная формула трапеций, дискретизация приводит к семейству "почти теплицевых" систем линейных уравнений.

В настоящей работе при дискретизации интегральных уравнений вместо формулы трапеций использована формула Симпсона, имеющая более высокий порядок точности. Это приводит к линейной системе, которая уже не является теплицевой. Однако после ряда преобразований ее удастся привести к блочно-теплицевому виду и построить соответствующий алгоритм.

Далее, в работе приведены результаты численного тестирования и сравнения описанных выше алгоритмов, а также сравнения регуляризованных алгоритмов с нерегуляризованными. Сравнение показало более высокую точность и устойчивость к возмущениям исходных данных регуляризованных алгоритмов, что проиллюстрировано рисунками, приведенными в работе.

### 1. 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. [2]), 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  $\delta(k)$ . Эта задача однозначно разрешима для фазовых сдвигов, удовлетворяющих условию

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

Ниже это условие предполагается выполненным.

Решение задачи методом 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, тестирование и сравнение регуляризованных алгоритмов, реализующих эту процедуру.

### 2. Дискретизация и решение уравнений Фредгольма

Пусть

$$r_j = t_j = s_j = h \cdot j, \quad H(j) = H(t_j), \quad \Gamma_{2r_k}(j) = \Gamma_{2r_k}(t_j).$$

Далее, для удобства индекс  $2r_k = 2kh$  будем опускать. Дискретным аналогом интегрального уравнения (8), основанным на квадратурной формуле Симпсона, при фиксированном значении  $k$  является следующая алгебраическая система:

$$\Gamma(i) + H(i) + \frac{h}{3} \left( \Gamma(0)H(-i) + \Gamma(2k)H(2k-i) + \right. \\ \left. + 2 \sum_{j=1}^{k-1} \Gamma(2j)H(2j-i) + 4 \sum_{j=1}^k \Gamma(2j-1)H(2j-1-i) \right) = 0, \quad (10)$$

$$i = 0, 1, \dots, 2k.$$

Перепишем ее в более удобном виде

$$\begin{aligned} \Gamma(i) + \frac{h}{3} \left( 2 \sum_{j=0}^k \Gamma(2j) H(2j-i) + 4 \sum_{j=1}^k \Gamma(2j-1) H(2j-1-i) \right) = \\ = -H(i) + \frac{h}{3} \left( \Gamma(0) H(-i) + \Gamma(2k-i) \right), \quad i = 0, 1, \dots, 2k. \end{aligned} \quad (11)$$

Запишем (11) в матричной форме (при фиксированном значении  $k$ ), используя четность функции  $H(t)$ :

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{2h}{3} H(0) & \frac{4h}{3} H(1) & \dots & \frac{2h}{3} H(2k) \\ \frac{2h}{3} H(1) & 1 + \frac{4h}{3} H(0) & \dots & \frac{2h}{3} H(2k-1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{2h}{3} H(2k) & \frac{4h}{3} H(2k-1) & \dots & 1 + \frac{2h}{3} H(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma(0) \\ \Gamma(1) \\ \dots \\ \Gamma(2k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b(0) \\ b(1) \\ \dots \\ b(2k) \end{pmatrix},$$

где

$$b(i) = -H(i) + \frac{h}{3} \left( H(i) \Gamma(0) + H(2k-i) \Gamma(2k) \right). \quad (12)$$

В ситуации, когда при дискретизации использовалась квадратурная формула трапеций, матрица системы (12) была симметричной и теплоцевой. Полученная выше матрица, очевидно, потеряла эти свойства. Она является почти блочно-теплоцевой (с квадратными блоками 2-го порядка), но число ее строк и столбцов нечетно.

Чтобы получить блочно-теплоцевую матрицу, введем еще одну дополнительную переменную  $\Gamma(2k+1)$ , расширим матрицу системы и прибавим к ней еще одно дополнительное уравнение. При этом необходимо соблюдать следующие условия:

- решение системы должно остаться тем же;
- матрицу системы следует расширять таким образом, чтобы ее можно было использовать при постепенном увеличении значения  $k$ .

Второе условие однозначно определяет вид расширенной матрицы (см. ниже). Коэффициент  $b(2k+1) = x$  следует выбирать таким образом, чтобы значение  $\Gamma(2k+1)$  обратилось в ноль. При этом будет выполнено первое требование. Выбор значения  $x$  возможен благодаря тому, что будет использован явный вид первой и последней блочной строки обратной матрицы, так как в силу (9) при каждом фиксированном значении  $k$  требуется определять лишь  $\Gamma(0)$  и  $\Gamma(2k)$ .

Расширенная матрица системы (блочно-теплоцева) примет вид

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{2h}{3} H(0) & \frac{4h}{3} H(1) & \dots & \frac{2h}{3} H(2k) & \frac{4h}{3} H(2k+1) \\ \frac{2h}{3} H(1) & 1 + \frac{4h}{3} H(0) & \dots & \frac{2h}{3} H(2k-1) & \frac{4h}{3} H(2k) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{2h}{3} H(2k) & \frac{4h}{3} H(2k-1) & \dots & 1 + \frac{2h}{3} H(0) & \frac{4h}{3} H(1) \\ \frac{2h}{3} H(2k+1) & \frac{4h}{3} H(2k) & \dots & \frac{2h}{3} H(1) & 1 + \frac{4h}{3} H(0) \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Необходимые нам значения  $\Gamma(0)$  и  $\Gamma(2k)$  найдем с помощью несложной модификации блочного метода определения первой и последней блочной строки обратной матрицы (см. [18], стр. 219-220).

С этой целью введем следующие обозначения:

$$\tilde{h} = \frac{h}{3}, \quad A_0 = \begin{pmatrix} 2H(0) & 4H(1) \\ 2H(1) & 4H(0) \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$A_{-i} = \begin{pmatrix} 2H(2i) & 4H(2i+1) \\ 2H(2i-1) & 4H(2i) \end{pmatrix}, \quad A_i = \begin{pmatrix} 2H(2i) & 4H(2i-1) \\ 2H(2i+1) & 4H(2i) \end{pmatrix}.$$

Матрица системы примет следующий блочно-теплоцев вид

$$A = \begin{pmatrix} I + \tilde{h}A_0 & \tilde{h}A_{-1} & \tilde{h}A_{-2} & \dots & \tilde{h}A_{-(k-1)} & \tilde{h}A_{-k} \\ \tilde{h}A_1 & I + \tilde{h}A_0 & \tilde{h}A_{-1} & \dots & \tilde{h}A_{-(k-2)} & \tilde{h}A_{-(k-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{h}A_{k-1} & \tilde{h}A_{k-2} & \dots & \tilde{h}A_1 & I + \tilde{h}A_0 & \tilde{h}A_{-1} \\ \tilde{h}A_k & \tilde{h}A_{k-1} & \dots & \tilde{h}A_2 & \tilde{h}A_1 & I + \tilde{h}A_0 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где  $I = I_2$  - единичная матрица 2-го порядка.

Используя специальный вид матрицы системы, все элементы которой, за исключением расположенных на главной диагонали, имеют множитель  $\tilde{h}$ , первую и последнюю блочные строки обратной матрицы будем искать в следующем модифицированном виде:

$$Z^{(k)} = P^{(k)} \cdot \tilde{Z}^{(k)}, \quad W^{(k)} = Q^{(k)} \cdot \tilde{W}^{(k)},$$

где

$$\tilde{Z}^{(k)} = [I; \tilde{h}\tilde{Z}_1^{(k)}; \dots; \tilde{h}\tilde{Z}_k^{(k)}] \quad \text{и} \quad \tilde{W}^{(k)} = [\tilde{h}\tilde{W}_0^{(k)}; \dots; \tilde{h}\tilde{W}_{k-1}^{(k)}; I]. \quad (16)$$

Условимся здесь и далее прописными буквами  $A_j, I, P, Q, S, T, Z$  и  $W$  обозначать квадратные матрицы 2-го порядка.

Аналогично, будем искать матрицы  $P^{(k)}$  и  $Q^{(k)}$  в следующем виде, выделяя убывающие по  $\tilde{h}$  слагаемые:

$$P^{(k)} = c^{(k)} I + \tilde{h}\tilde{P}^{(k)} \quad \text{и} \quad Q^{(k)} = d^{(k)} I + \tilde{h}\tilde{Q}^{(k)}.$$

При  $k = 0$  положим

$$P^{(0)} = Q^{(0)} = (I + \tilde{h}\tilde{A}_0^T) / \det(I + \tilde{h}A_0), \quad (17)$$

где  $\tilde{A}_0$  обозначает матрицу, составленную из алгебраических дополнений матрицы  $A_0$ . При этом получим начальные значения

$$c^{(0)} = d^{(0)} = 1 / \det(I + \tilde{h}A_0), \quad \tilde{P}^{(0)} = \tilde{Q}^{(0)} = c^{(0)} \tilde{A}_0^T. \quad (18)$$

Далее, выведем рекуррентные формулы для определения матриц  $\tilde{P}^{(l)}, \tilde{Q}^{(l)}, \tilde{Z}_i^{(l)}, \tilde{W}_i^{(l)}$  и коэффициентов  $c^{(l)}$  и  $d^{(l)}$ , используя формулы (9.16) работы [18].

Переход от индекса  $l-1$  к индексу  $l$  осуществляется для  $l = 1, 2, \dots, k$  следующим образом.

Вычисляются матрицы  $S^{(l)}$  и  $T^{(l)}$  по формулам:

$$S^{(l)} = \left( A_{-l} + \tilde{h} \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{Z}_i^{(l-1)} A_{-l+i} \right) \cdot Q^{(l-1)}, \quad (19)$$

$$T^{(l)} = \left( A_l + \tilde{h} \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{W}_{i-1}^{(l-1)} A_i \right) \cdot P^{(l-1)} \quad (20)$$

(для  $l=1$  суммы не вычисляются).

Далее, вычисляются матрицы  $ST^{(l)} = S^{(l)} \cdot T^{(l)}$  и  $TS^{(l)} = T^{(l)} \cdot S^{(l)}$ . В силу того, что

$$\det(I - \tilde{h}^2 ST^{(l)}) = 1 - \tilde{h}^2 \text{tr}(ST^{(l)}) + \tilde{h}^4 \det(ST^{(l)}) = \rho^{(l)},$$

получаем  $\det(I - \tilde{h}^2 ST^{(l)}) = \det(I - \tilde{h}^2 TS^{(l)})$ . Отсюда следует равенство коэффициентов

$$c^{(l)} = d^{(l)} = \frac{c^{(l-1)}}{\rho^{(l)}}. \quad (21)$$

Пусть

$$\omega^{(l)} = \frac{1 - \rho^{(l)}}{\tilde{h}} = \frac{\tilde{h}}{3} \left( \text{tr}(ST^{(l)}) - \tilde{h}^2 \det(ST^{(l)}) \right). \quad (22)$$

Матрицы  $\tilde{P}^{(l)}$  и  $\tilde{Q}^{(l)}$  удовлетворяют соотношениям:

$$\begin{aligned} \tilde{P}^{(l)} &= \frac{1}{\rho^{(l)}} \left( \tilde{P}^{(l-1)} - \tilde{h} P^{(l-1)} \tilde{S}^{(l)} \right), \\ \tilde{Q}^{(l)} &= \frac{1}{\rho^{(l)}} \left( \tilde{Q}^{(l-1)} - \tilde{h} Q^{(l-1)} \tilde{T}^{(l)} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

И наконец, для блочных строк обратной матрицы

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_0^{(l)} &= I, \quad \tilde{Z}_l^{(l)} = -S^{(l)}, \quad \tilde{Z}_i^{(l)} = \tilde{Z}_i^{(l-1)} - \tilde{h} S^{(l)} \tilde{W}_{i-1}^{(l-1)}, \\ \tilde{W}_0^{(l)} &= -T^{(l)}, \quad \tilde{W}_l^{(l)} = I, \quad \tilde{W}_i^{(l)} = \tilde{W}_i^{(l-1)} - \tilde{h} T^{(l)} \tilde{Z}_i^{(l-1)}, \\ i &= 1, 2, \dots, l-1. \end{aligned} \quad (24)$$

Заметим, что блочные вектора  $Z^{(l)}$  и  $W^{(l)}$ , для любого  $l = 1, \dots, k$ , определяют первую и последнюю блочные строки тех обратных матриц, которые возникают по ходу решения цепочки задач для разных значений  $k$ . Это связано

с тем обстоятельством, что увеличение размера матриц производится окаймлением матриц более низкого порядка. Таким образом, решая задачу при новом значении  $k$ , нет необходимости производить все вычисления для  $l = 0, 1, \dots, k$ , а достаточно лишь произвести один рекурсивный шаг, используя значения матриц, вычисленных для предыдущего значения  $k$ . Поэтому индекс  $l$  можно, по существу, отождествить с индексом  $k$ .

Предположим, далее, что для некоторого  $k$  вычислены все значения  $c^{(k)}$ ,  $\tilde{P}^{(k)}$ ,  $\tilde{Q}^{(k)}$ ,  $\tilde{Z}^{(k)}$  и  $\tilde{W}^{(k)}$ . Тогда мы можем вычислить элементы двух первых и двух последних строк обратной матрицы  $A^{-1}$  с выделением множителя  $\tilde{h}$ . Если значения при множителе  $\tilde{h}$  в этих строках обозначить соответственно через  $\sigma_{0,i}$ ,  $\sigma_{1,i}$ ,  $\sigma_{2k,i}$  и  $\sigma_{2k+1,i}$ ,  $i = 0, \dots, 2k+1$ , то получим

$$\begin{pmatrix} \Gamma(0) \\ \dots \\ \Gamma(2k) \\ \Gamma(2k+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{0,0} & \dots & \tilde{h}\sigma_{0,2k+1} \\ \dots & \dots & \dots \\ \tilde{h}\sigma_{2k,0} & \dots & \tilde{h}\sigma_{2k,2k+1} \\ \tilde{h}\sigma_{2k+1,0} & \dots & c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b(0) \\ \dots \\ b(2k) \\ x \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Приравняв  $\Gamma(2k+1)$  к нулю, определим неизвестное значение  $x$ :

$$\begin{aligned} x &= -\frac{\tilde{h}}{c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1}} \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k+1,i} b(i) = \\ &= \frac{\tilde{h}}{c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1}} \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k+1,i} \left( H(i) - \tilde{h} [\Gamma(0)H(i) + \Gamma(2k)H(2k-i)] \right). \end{aligned} \quad (26)$$

Теперь, умножая вектор правой части на 1-ю и  $2k$ -ю строки, после подстановки значения  $x$  из (26) получаем

$$\begin{pmatrix} 1 - \tilde{h}\alpha^{(k)} & -\tilde{h}\beta^{(k)} \\ -\tilde{h}\gamma^{(k)} & 1 - \tilde{h}\delta^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_{2k}(0) \\ \Gamma_{2k}(2k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha^{(k)} \\ -\gamma^{(k)} \end{pmatrix}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \alpha^{(k)} &= c^{(k)} H(0) + \tilde{h} A^{(k)}, \\ \beta^{(k)} &= c^{(k)} H(2k) + \tilde{h} B^{(k)}, \\ \gamma^{(k)} &= c^{(k)} H(2k) + \tilde{h} C^{(k)}, \\ \delta^{(k)} &= c^{(k)} H(0) + \tilde{h} D^{(k)}. \end{aligned} \quad (28)$$

Соответственно, для коэффициентов  $A^{(k)}$ ,  $B^{(k)}$ ,  $C^{(k)}$  и  $D^{(k)}$  имеем

$$\begin{aligned} A^{(k)} &= \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{0,i} H(i) - \frac{\tilde{h}\sigma_{0,2k+1}}{c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1}} \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k+1,i} H(i), \\ B^{(k)} &= \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{0,i} H(2k-i) - \frac{\tilde{h}\sigma_{0,2k+1}}{c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1}} \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k+1,i} H(2k-i), \\ C^{(k)} &= \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k,i} H(i) - \frac{\tilde{h}\sigma_{2k,2k+1}}{c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1}} \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k+1,i} H(i), \\ D^{(k)} &= \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k,i} H(2k-i) - \frac{\tilde{h}\sigma_{2k,2k+1}}{c^{(k)} + \tilde{h}\sigma_{2k+1,2k+1}} \sum_{i=0}^{2k} \sigma_{2k+1,i} H(2k-i). \end{aligned} \quad (29)$$

Определитель матрицы системы (27)

$$\Delta^{(k)} = 1 - \tilde{h}(\alpha^{(k)} + \delta^{(k)}) + \tilde{h}^2(\alpha^{(k)}\delta^{(k)} - \beta^{(k)}\gamma^{(k)}).$$

Следовательно, для разности  $J(2k) = \Gamma_{2k}(0) - \Gamma_{2k}(2k)$  имеют место формулы

$$J(2k) = \left( -\alpha^{(k)} + \gamma^{(k)} + \tilde{h}(\alpha^{(k)}\delta^{(k)} - \beta^{(k)}\gamma^{(k)}) \right) / \Delta^{(k)}, \quad (30)$$

или

$$J(2k) = \gamma^{(k)} - \alpha^{(k)} + \tilde{h}R^{(k)}, \quad (31)$$

где (опуская индексы у значений  $\alpha^{(k)}$ ,  $\beta^{(k)}$ ,  $\gamma^{(k)}$  и  $\delta^{(k)}$ )

$$R^{(k)} = \frac{(\alpha + \delta - \tilde{h}(\alpha\delta - \beta\gamma))(\gamma - \alpha) + (\alpha\delta - \beta\gamma)}{\Delta^{(k)}}. \quad (32)$$

Для потенциала получаем следующую дискретную аппроксимацию:

$$\begin{aligned} V(k) &= 2 \cdot \frac{J(2k) - J(2(k-1))}{h} = \\ &= \frac{2}{h} \left( (\gamma^{(k)} - \alpha^{(k)} + \tilde{h}R^{(k)}) - (\gamma^{(k-1)} - \alpha^{(k-1)} + \tilde{h}R^{(k-1)}) \right) = \\ &= 2 \left( \frac{\gamma^{(k)} - \gamma^{(k-1)}}{h} - \frac{\alpha^{(k)} - \alpha^{(k-1)}}{h} + \frac{1}{3}(R^{(k)} - R^{(k-1)}) \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Используя (21-22) и аппроксимируя  $H'(t)$  отношением с центральной разностью, получаем окончательное выражение для потенциала

$$\begin{aligned} V(k) &= 2 \left( c^{(k)}\omega^{(k)}(H(2k) - H(0)) + 2\rho^{(k)}c^{(k)}H'(2k-1) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{3}(R^{(k)} - R^{(k-1)} + C^{(k)} - C^{(k-1)} + A^{(k-1)} - A^{(k)}) \right). \end{aligned} \quad (34)$$

Таким образом нам удалось обойти деление на шаг  $h$ .

Значение  $V(0)$  определим по асимптотике функции Йоста (38) и для значения  $V(1)$  имеем

$$V(1) = \frac{4H'(1)}{1 + \tilde{h}(H(0) - H(2))}. \quad (35)$$

Поэтому формула (34) используется для вычисления значений потенциала, начиная с  $k = 2$ . В качестве значений  $\gamma^{(0)}$ ,  $\alpha^{(0)}$  и  $R^{(0)}$  можно взять любые значения.

### 3. Алгоритм численного решения задачи

Как известно, (см. [1]), для непрерывно дифференцируемых потенциалов, удовлетворяющих условиям (2) и имеющих интегрируемую на полуоси производную, фазовый сдвиг имеет асимптотику

$$\delta(k) = v_0 k^{-1} + O(k^{-3}), \quad \text{при } k \rightarrow \infty, \quad (36)$$

а модуль функции Йоста - асимптотику

$$|F(k)|^{-2} = 1 + v_1 k^{-2} + O(k^{-3}), \quad \text{при } k \rightarrow \infty, \quad (37)$$

где

$$v_0 = -\frac{1}{2} \int_0^\infty V(r) dr, \quad v_1 = -\frac{V(0)}{2}. \quad (38)$$

Поскольку интеграл (5) - условие сходящийся, при его вычисления нужна определенная аккуратность. Предлагаемый алгоритм организован следующим образом:

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

$$v_0 = k\delta(k) + O(k^{-2}), \quad k \rightarrow \infty, \quad (39)$$

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

II. Из функции  $\delta(k)$  вычитается "условно сходящаяся" часть:

$$\delta_1(k) = \delta(k) - v_0 \frac{k}{1+k^2}. \quad (40)$$

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 считаемых аналогичных преобразований функции  $v_0 k/(1+k^2)$ . 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 предположениям 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:

$$H'(t) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty k[|F(k)|^{-2} - 1] \text{sinkt} dk. \quad (41)$$

Согласно предположениям

$$k[|F(k)|^{-2} - 1] = \frac{v_1}{k} + O(k^{-2}). \quad (42)$$

Далее, с помощью формулы

$$v_1 = k^2[|F(k)|^{-2} - 1] + O(k^{-1}), \quad k \rightarrow \infty, \quad (43)$$

определяется постоянная  $v_1$ , а затем вычисляется  $H'(t)$ .

V. Вычисление потенциала  $V(r)$ . По формулам (19)–(24), (21), (22), рекуррентно находятся величины  $c^{(k)}$ ,  $\rho^{(k)}$ ,  $\omega^{(k)}$ ,  $P^{(k)}$ ,  $Q^{(k)}$ ,  $Z^{(k)}$  и  $W^{(k)}$ , далее по формулам (29) и (33) определяются значения  $A^{(k)}$ ,  $C^{(k)}$ ,  $R^{(k)}$  и, наконец, по формуле (34) - потенциал  $V(k)$ . Процесс ведется до тех пор пока возможно деление на  $\rho^{(k)}$  в (21) и (23).

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.[19]) 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 рисунке 1 слева показан исходный потенциал, в центре - соответствующий ему фазовый сдвиг, а справа - потенциал, полученный при решении обратной задачи.

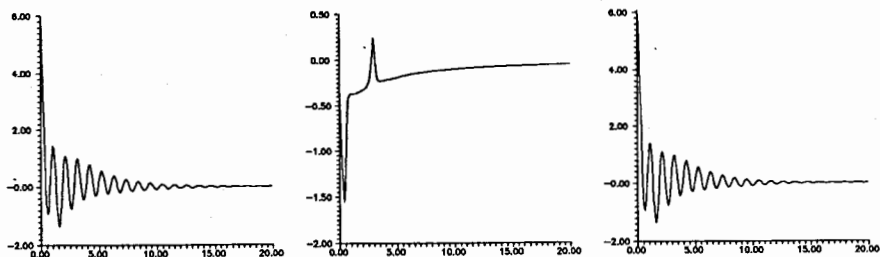


Рис. 1

На рисунке 2 приводим сравнение ошибок, получившихся в результате применения квадратурных формул Симпсона и трапеций для определения потенциала, показанного на рис. 1. Ошибка по методу Симпсона выведена более тонкой линией.

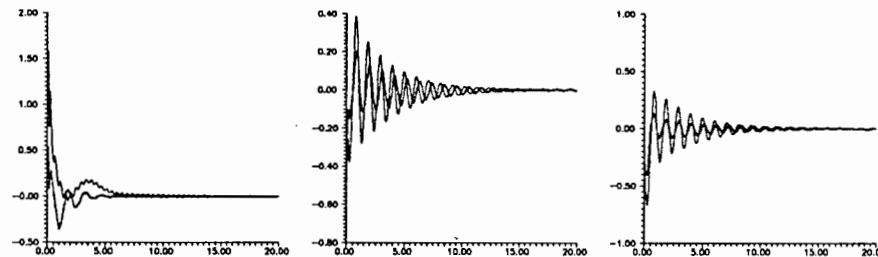


Рис. 2

Можно также рассмотреть влияние регуляризации на точность решения. Ниже приводим сравнение результатов в случаях, когда регуляризация вообще не проводилась, когда проводилась только первая (на шаге II) или только вторая (на шаге IV) регуляризация и когда проводились обе регуляризации. Сравним результаты для случая потенциала, показанного на рисунке 1.

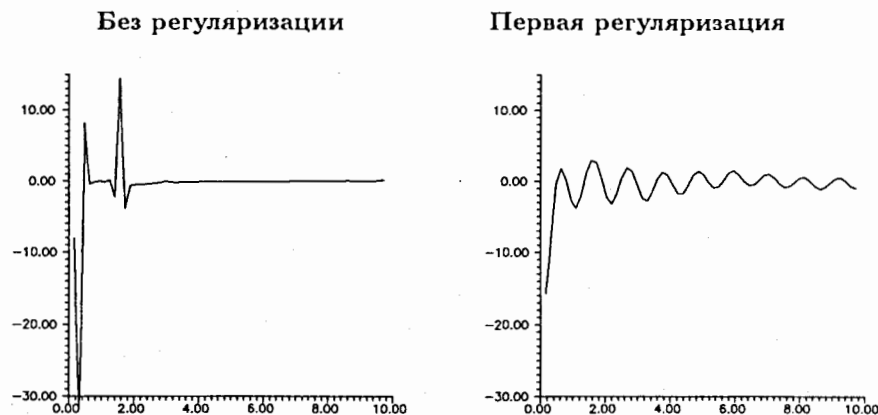


Рис. 3

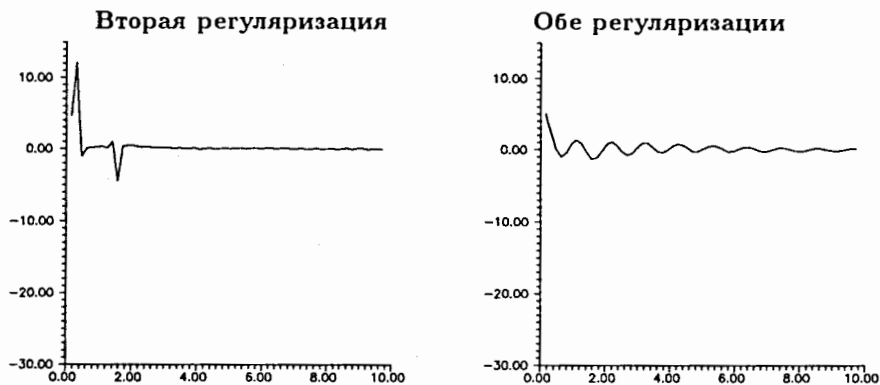


Рис. 4

#### 4. 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) (см. [16,17]).

С целью построения эффективного алгоритма для решения задачи в настоящей работе

а) на первом этапе вычисляется не только функция  $H(t)$ , но и ее производная  $H'(t)$ ;

б) на втором этапе модифицируя системы уравнений, возникающие дискретизацией однопараметрического семейства интегральных уравнений Фредгольма второго рода с использованием квадратурной формулы Симпсона, удается получить в явном виде значения первой и последней блочных строк обратных матриц, а также избежать процедуры численного дифференцирования благодаря выделению из потенциала функции  $H'(t)$ , найденной на первом этапе.

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. Причем при решении тестовых задач в некоторых случаях дал лучший результат метод Симпсона, а в других – наоборот, метод трапеций. Поэтому следует более подробно изучить свойства обоих методов. В связи с этим заметим, что авторы [20] также отмечают возможное ухудшение некоторых численных результатов при решении их задач, связанное с использованием более точной формулы Симпсона.

Как показано на рисунках 3,4, применение регуляризации может дать хорошие результаты и для случаев, когда расчеты без регуляризации не дают даже качественно правильные результаты.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Р.Г.Айрапетян, Е.П.Жидков, Р.Л.Шахбагян. Численный метод решения обратной задачи теории рассеяния, основанный на регуляризации по асимптотике. – Препринт, 1995, Дубна, ОИЯИ, P11-95-252.
2. К.Шадан, П.Сабатье. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. – Мир, Москва, 1980.
3. М.Г.Крейн. Об определении потенциала частицы по ее  $S$ -функции. – ДАН СССР, 105 (1955), N 3, 433–436.
4. З.С.Агранович, В.А.Марченко. Обратная задача рассеяния. – Харьков, 1960.
5. 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.
6. А.М.Денисов. О численном решении обратной задачи рассеяния. – Ж.вычисл. матем.и матем.физ., 17 (1977), N 3, 753–756.
7. А.М.Денисов, А.С.Крылов, К.В.Шитикова. О восстановлении нуклон нуклонного потенциала по данным рассеяния. – В сб. "Обработка и интерпретации результатов наблюдений", МГУ, Москва, 1981.
8. Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек, Р.В.Малышев, Б.Н.Хоромский, Е.Х.Христов, И.Улегла. – Итерационные методы решения обратной задачи теории рассеяния. – ЭЧАЯ, 9 (1978), N 3, 710–768.
9. Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек. – Метод расчета потенциала путем введения параметра. – 1968, Дубна, ОИЯИ, P5-3895.
10. 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.
11. Е.П.Жидков, Р.В.Малышев, Е.Х.Христов. О расчете на ЭВМ обратной задачи рассеяния. – Препринт, 1976, Дубна, ОИЯИ, P5-9923.
12. Р.С.Егикян, Е.П.Жидков. Алгоритм численного решения обратной задачи рассеяния. – 1987, Дубна, ОИЯИ, P5-87-284.
13. Е.П.Жидков, Е.Х.Христов. Устойчивые методы суммирования интеграла Фурье. – Препринт, 1977, Дубна, ОИЯИ, P5-10369.
14. Б.Н.Захарьев, В.П.Мельников, Б.В.Рудик, А.А.Сувько. Обратная задача рассеяния (конечно-разностный подход). – ЭЧАЯ, 8 (1977), N 2, 290–329.

15. Б.Н.Захарьев, А.А.Сузько. Потенциалы и квантовое рассеяние: Прямая и обратная задачи. – Москва, Энергоатомиздат, 1985.
16. А.А. Самарский. Введение в численные методы. – Наука, Москва, 1982.
17. А.Н. Тихонов, В.Я.Арсенин. Методы решения некорректных задач. – Наука, Москва, 1979.
18. В.В.Воеводин, Е.Е.Тыртышников. Вычислительные процессы с теплицевыми матрицами. – Москва, Наука, 1987.
19. В.В.Бабинов. Метод фазовых функций в квантовой механике. – Москва, Наука, 1976.
20. В.А.Морозов, А.И.Гребенников. Методы решения некорректно поставленных задач. Алгоритмический аспект. – Москва, Изд-во МГУ, 1992.

Рукопись поступила в издательский отдел  
8 февраля 1996 года.