

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



3-383

15/1-79

P4 - 11841

138/2-79

Б.Н.Захарьев, В.Н.Мельников

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ
В КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

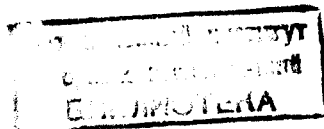
1978

P4 - 11841

Б.Н.Захарьев, В.Н.Мельников

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ
В КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Направлено в Lett. in Math.Phys.



Захарьев Б.Н., Мельников В.Н.

P4 - 11841

Решение обратной задачи рассеяния в конечно-разностном приближении

Впервые удалось восстановить потенциал в конечно-разностном приближении методом собственно обратной задачи, а не путем процедуры "проб и ошибок" (использующей многократное решение прямой задачи и итерационную подгонку потенциала под данные рассеяния). До сих пор этому препятствовала принципиальная разница спектральных свойств оператора Шредингера и его дискретного аналога. Новый метод основывается на чисто алгебраической модели обратной задачи, предложенной ранее^{/1/}, и правилах пересчета исходных параметров рассеяния.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1978

Zakhariev B.N., Melnikov V.N.

P4 - 11841

Finite-Difference Approximation for Inverse Scattering Problem

For the first time potentials are reconstructed in a finite-difference approximation using a genuine inverse scattering method instead of multiple repeated solutions of a direct problem with iterative fitting of scattering data. Up to now a fundamental difference between spectral properties of the Schroedinger operator and its discrete analog hindered to do this.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research.

Dubna 1978

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время существует глубокая асимметрия в развитии теорий прямой и обратной задач /ОЗ/ квантовой механики. Многочисленным эффективным алгоритмам решения уравнения Шредингера можно противопоставить лишь редкие примеры восстановления потенциалов по данным рассеяния^{/2/}. До сих пор, как правило, ОЗ решается не непосредственно, а с помощью прямой. Примером последних таких расчетов могут служить работы^{/3/}.

Наиболее универсальные и широко распространенные способы решения прямой задачи основываются на конечно-разностном /к-р/ приближении дифференциальных уравнений движения. Но пока не был предложен к-р метод построения взаимодействия по спектральным характеристикам уравнения с непрерывной зависимостью от координаты.

Правда, недавно был предложен к-р аналог классической теории ОЗ в постановке Гельфанда-Левитана^{/4/}, Марченко^{/5/}, а также в рамках R-матричного формализма^{/1/}. В работах^{/1/} были развиты к-р модели /одномерные, многоканальные и многомерные/ ОЗ, в которых с помощью конечного числа чисто алгебраических операций устанавливалась точная связь параметров рассеяния - положений резонансов E_p и их приведенных ширины - с взаимодействием /в к-р подходе, кстати, снимается проблема учета состояний с бесконечной энергией, и решение ОЗ становится устойчивым, хотя ОЗ с непрерывной координатой некорректно поставлена/.

Однако все эти работы не давали рецепта приближенного решения ОЗ с непрерывной координатной зависимостью. Дело в том, что решения уравнения Шредингера

$$-\frac{1}{2}\Psi''(r) + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r), \quad /1/$$

и его к-р аналога

$$-\frac{1}{2\Delta^2} [\Psi(n+1) - 2\Psi(n) + \Psi(n-1)] + V(n)\Psi(n) = E\Psi(n) \quad /2/$$

близки лишь при сравнительно низких энергиях. В формализме же ОЗ в игру вовлекается весь спектр /ключевую роль при выводе уравнений ОЗ играет соотношение полноты собственных функций оператора Шредингера/. Причем указанное противоречие не устраняется при уменьшении шага Δ к-р дифференцирования. Хотя при этом увеличивается размер энергетической области, где близки свойства решений /1/ и /2/, но ее относительный вес в пределах всего спектра не возрастает /вместе с Δ^{-1} растет и верхняя граница всего спектра к-р задачи/.

При поиске выхода из создавшегося положения обратил на себя внимание тот факт, что верхние состояния "хорошей" части спектра /где близки решения дискретной к-р и непрерывной задач/ с ростом Δ^{-1} поднимаются в область, где применима теория возмущений. Это обещало упрощения при оперировании с высшими состояниями. Конечно, в теории возмущений фигурируют различные матричные элементы от потенциала, который в ОЗ неизвестен. Но замечательно, что первые поправки к собственным значениям оказываются нечувствительными к деталям формы потенциала и зависят лишь от его среднего значения \bar{V} . Это открывает возможность, зная из спектра непрерывной задачи значение \bar{V} , вычислить довольно точно спектр к-р модели /положения R-метричных резонансов/ при тех значениях E, где потенциал можно считать малым возмущением. Расчеты проводятся аналитически с потенциалом $V(n)$ в /2/, имеющим форму прямоугольной ямы с глубиной \bar{V} .

Новое препятствие на пути решения ОЗ в к-р приближении обнаружилось, когда выяснилось, что, в отличие от непрерывного случая, где с ростом E улучшаются условия применимости теории возмущений, в к-р модели самая верхняя часть спектра оказывается столь же подверженной влиянию формы потенциала, как и при малых E /наиболее благоприятна для к-р теории возмущений средняя часть спектра/*. Указанную трудность удалось преодолеть, используя слабо нарушенную симметрию спектральных свойств к-р оператора Шредингера относительно середины $E = \frac{1}{\Delta^2}$ спектрального

интервала. В результате можно вывести правила - как по данным рассеяния, отвечающим уравнению /1/, строить спектр к-р задачи. Необходимые же значения приведенных ширин γ_ν^2 , служащие, вместе с E_ν , исходными параметрами в к-р модели ОЗ, вычисляются по двум наборам $\{E_\nu\}$, $\{E'_\mu\}$ /для двух способов задания граничных условий в R-матричном формализме/ с помощью теоремы о двух спектрах /6/.

В разделе II дается краткое описание одномерной к-р модели ОЗ. В разделе III обсуждается процедура вычисления параметров E_ν , γ_ν к-р модели ОЗ по данным рассеяния исходного уравнения /1/ и даются примеры численного восстановления $V(r)$ в к-р приближении.

II. ТОЧНАЯ МОДЕЛЬ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Для потенциалов конечного радиуса действия $V(r>a) = 0$ задачи рассеяния удобно решать в рамках формализма R-матричной теории, так как при этом свойства системы определяются дискретным набором параметров E_ν , γ_ν . Сочетание же такого подхода с

* Экзотика высокоэнергетических свойств к-р задачи проявляется еще, например, в том, что дискретные связанные состояния возможны не только ниже непрерывного спектра, отвечающего рассеянию, но и выше его /непрерывный спектр ограничен сверху $E < \frac{1}{\Delta^2}$ /.

к-р приближением делает конечным общее число пар $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$ $\nu = 1, 2 \dots N \approx a/\Lambda$.

Величины E_ν являются собственными значениями для уравнения /2/ с граничными условиями

$$\Psi_\nu(0) = 0; \Psi_\nu(N+1) - \Psi_\nu(N-1) = B\Psi_\nu(N), \quad /3/$$

где $\Psi_\nu(n) = \Psi(E = E_\nu, n)$,

а B - произвольная константа, R - матрица имеет простой вид:

$$R(E) = \sum_{\nu} \frac{\gamma_\nu^2}{E_\nu - E} \quad /4/$$

и взаимно-однозначно связана с матрицей рассеяния $S(E)$, так что E_ν и γ_ν определяются по заданной фазе рассеяния. Под решением к-р ОЗ будет подразумеваться восстановление значений $V(n)$ ($n=1, \dots, N$) по набору $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$; $\nu = 1, 2, \dots, N$.

Достоинством описываемого ниже метода нахождения $V(n)$ является его простота и наглядность /почти как в прямой задаче/ по сравнению с подходом на основе уравнений типа Гельфанда-Левитана.

Воспользуемся тем, что состояния $\Psi_\nu(n)$ образуют ортонормированный и полный набор:

$$\sum_{n=1}^N a_n \Psi_\nu(n) \Psi_{\nu'}(n) = \delta_{\nu\nu'} / \Lambda; \quad a_N = 1/2, \quad a_{n < N} = 1 \quad /5/$$

$$\sum_{\nu} \Psi_\nu(n) \Psi_\nu(m) = \delta_{mn} / \Lambda \cdot a_n. \quad /6/$$

Если в /2/ положить $n=N$, то мы получим одно алгебраическое уравнение для двух неизвестных $V(N)$ и $\Psi_\nu(N-1)$, т.к. $\Psi_\nu(N) = \gamma_\nu \sqrt{2} a$, а $\Psi_\nu(N+1)$ определяется из /3/.

Применим равенство Парсеваля /6/ как условие ортогональности функций Ψ_ν от энергетической переменной ν при разных значениях координаты, чтобы избавиться от одной из неизвестных $\Psi_\nu(N-1)$. Умножим

для этого обе стороны /2/ при $n=N$ на $\Psi_\nu(N)$ и просуммируем по ν , после чего находим

$$V(N) = \Lambda \sum_{\nu=1}^N E_\nu \Psi_\nu^2(N) - 1/\Lambda^2. \quad /7/$$

Зная $V(N)$, находим $\Psi_\nu(N-1)$ из /2/ при $n=N$

$$\Psi_\nu(N-1) = 2\Lambda^2 [V(N) - E_\nu + 1/\Lambda^2] \Psi_\nu(N) - \Psi_\nu(N+1). \quad /8/$$

Таким образом выполнен первый шаг решения к-р ОЗ. Повторяя тот же цикл при $n=N-1$ и т.д., определим значения потенциала и функций во всех остальных точках области взаимодействия, пользуясь рекуррентными соотношениями типа /7/, /8/

$$V(n) = \Lambda \sum_{\nu=1}^N E_\nu \Psi_\nu^2(n) - 1/\Lambda^2; \quad /9/$$

$$\Psi_\nu(n) = 2\Lambda^2 [V(n+1) - E_\nu + 1/\Lambda^2] \Psi_\nu(n+1) - \Psi_\nu(n+2). \quad /10/$$

Формулы /9/, /10/ устанавливают строгое соответствие между набором $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$ и $V(n)$ без уравнений типа Гельфанда-Левитана.

Контрольные расчеты на ЭВМ^{/1/} подтвердили, что $V(n)$ устойчиво восстанавливается по $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$ и точность решения ОЗ может быть произвольно повышена.

Как стало недавно известно авторам, элементарный способ решения ОЗ, близкий к изложенному выше, был предложен также в работе^{/7/}.

III. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

К-р модель ОЗ может послужить основой приближенного метода восстановления $V(n) \approx V(r)$, по данным рассеяния для уравнения /1/, если дать алгоритм построения набора $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$ для к-р задачи /2/, /3/ по соответствующим параметрам для уравнения /1/. Это оказалось нетривиальным ввиду существенного разли-

чия спектральных свойств к-р и непрерывного операторов Шредингера *, о чем можно судить, сравнивая уровни для бесконечных прямоугольных ям / $V = V_0$ на интервале $0 < r < a$; $\psi(0) = \psi(N+1) = 0$ /:

$$E_m^{k-p} = \frac{1}{\Delta^2} \left(1 - \cos \frac{m\pi}{N+1}\right) + V_0; E_m^{непр} = \frac{m^2 \pi^2}{2a^2} + V_0 \quad /11/$$

Так, уровень E_N в потенциале $V(r)$ оказывается в ~2,5 /!/ раза выше, чем верхний уровень E_N для уравнения /2/ /см. рис. 1а/. А ведь к исходным величинам даже в относительно устойчивой к-р модели ОЗ предъявляются жесткие требования.

Во введении уже отмечалось, что пересчету от E_V непрерывной задачи к E_V^{k-p} может помочь теория возмущений. Условием ее применимости может служить /8/: $1 < d / \|V\|$, где d - расстояние между уровнями невозмущенной задачи, а $\|V\|$ - норма возмущения. Для /1/ d линейно возрастает с номером собственного значения /см., например, /11/, а первая поправка к E_V по теории возмущений пропорциональна среднему значению потенциала \bar{V} :

$$E_V^{(1)} = \langle \bar{\Psi}_V | V | \bar{\Psi}_V \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a V(r) \sin^2 k_V r dr = \bar{V}. \quad /12/$$

Это означает, что верхние E_V с возрастающей точностью совпадают с собственными значениями для потенциала прямоугольной формы ($V = \text{const} = \bar{V}$). Если бы то же было справедливо для к-р уравнения, этого было бы достаточно для определения E_V к-р задачи. Но, как видно из /11/, d растет в к-р случае лишь с ростом V до середины спектрального интервала, а на самом верху оказывается таким же малым, как и внизу спектра /см. рис. 1а/.

* Подобной трудности не возникает в приближенном методе решения ОЗ /Мельников и др. /2/ /, в котором $V(r)$ заменялся кусочно-постоянной /ступенчатой/ функцией. Правда, в отличие от к-р метода, этот метод не распространяется на многомерный случай.

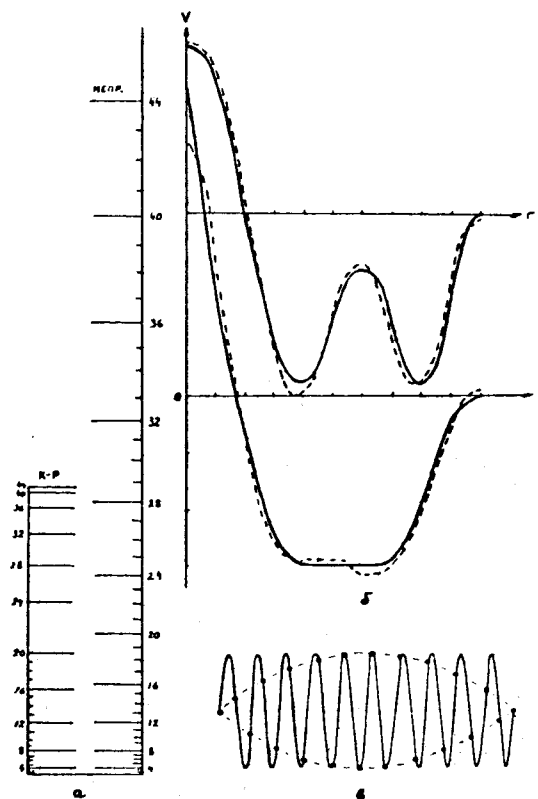


Рис. 1. а/Сравнение спектров к-р и непрерывной прямоугольных ям / $N = 44$ /; б/ - сравнение исходных потенциалов $V(r)$ уравнения /1/, обозначенных сплошными линиями, с $V(n)$, восстановленными в к-р приближении /пунктир/. Потенциалы имеют по одному связанному состоянию; $N = 50$, три нижних состояния E_V^{k-p} брались равными $E_V^{непр}$, остальные пересчитывались/. Время решения ОЗ /на ЭВМ CDC-6500 / ~2 с; в/ - волновые функции N -го состояния в к-р задаче с точной симметрией спектра относительно его середины. Точки - к-р решение; сплошная линия - функция N -го уровня непрерывной задачи. Видно, что значения функции N -го состояния в к-р случае совпадают по модулю с функцией основного состояния /тонкие пунктирные линии/. Это обеспечивает симметрию поправок первого приближения теории возмущений к E_V задачи /2/, /3/, когда в качестве невозмущенного уравнения рассматривается /13/.

К счастью, такое симметричное поведение к-р невозмущенного /или для $V = \text{const}$ / спектра по отношению к средней точке ($E = 1/\Lambda^2$) имеет не только отрицательные последствия для ОЗ. Хотя для произвольных $V(n)$ эта симметрия нарушается, можно показать, что для крайних $\nu, \nu' = N+1-\nu: 1/\Lambda^2 - E_\nu = E_{\nu'} - 1/\Lambda^2$. Действительно, рассмотрим к-р уравнение /4/:

$$\frac{1}{2}[\phi(n+1) + \phi(n-1)] = (1 - \Lambda^2 E) e^{-\Lambda^2 V(n)} \phi(n), \quad /13/$$

имеющее строго симметричный спектр: если ϕ - собственная функция для некоторого E , то, заменяя $(1 - \Lambda^2 E)$ на $-(1 - \Lambda^2 E)$, можно удовлетворить /13/ с $\phi_-(n) = (-1)^n \phi(n)$ /см. рис. 1а/. Уравнение же /2/ отличается от /13/ лишь членами порядка $\Lambda^2 V(n)$, которые малы для достаточно короткого шага Λ , даже если потенциал не является малым. К тому же, в первом приближении разница собственных значений с одним ν для /2/ и /13/ оказывается симметричной относительно $1/\Lambda^2$ /если рассматривать /2/ как возмущенное уравнение по отношению к /13//. Итак, мы можем вычислить E_ν к-р задачи. Проводя такие расчеты для двух разных значений константы V в условиях /3/, получаем два спектра, из которых могут быть определены приведенные ширины:

$$\gamma_\nu^2 \cdot \Delta = \frac{E_\nu - E'_\nu}{E_\nu - E_N} \prod_{\mu=1}^{N-1} \frac{(E_\nu - E'_\mu)}{(E_\nu - E_\mu)}. \quad /14/$$

В результате построены исходные данные рассеяния к-р модели ОЗ, и $V(n)$ может быть восстановлен.

На рис. 1б представлены расчеты для различных форм потенциала $V(r)$. Сплошные линии соответствуют потенциалам $V(r)$ уравнения /1/, а пунктирные обозначают $V(n)$, восстановленный по $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$, вычисленным согласно процедуре, описанной в разделе III.

Авторы выражают благодарность В.П.Жигунову, Б.В.Рудяку, Я.А.Смородинскому, А.А.Сузько за многочисленные полезные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Захарьев Б.Н., Ниязгулов С.А., Сузько А.А. ЯФ, 1974, 20, с.1273; Захарьев Б.Н. и др. ЯФ, 1977, 25, с.295; Захарьев Б.Н. и др. Обзор. ЭЧАЯ, 1977, 8, с.290.
2. Chadan K., Sabatier P. *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*, Springer, 1977. Маляров В.В. и др. ЯФ, 1978, 27, вып. 4, с.1128. Melnikov V.N., Rudyak B.V., Zakhariev B.N. JINR, E4-10429, Dubna, 1977.
3. Денисов А.М. ЖВМ и МФ, 1977, №3, с.753. Жигунов В.П. Препринт ИФВЭ, ОМВТ 77-123, Серпухов, 1977; Визнер Я. и др. Обзор. ЭЧАЯ, 1968, 9, №3, с.710.
4. Case K.M., Kac M. J.Math.Phys., 1973, 14, No.5, p.594.
5. Case K.M. J.Math.Phys., 1974, 14, p.916; 1974, 16, p.2166.
6. Левитан Б.М., Гасымов М.Г. УМН, 1964, 19, вып.2,3.
7. Case K.M. Phys. Fluids, 1977, 20, No. 12, p.2031.
8. Капо Т. Теория возмущений линейных операторов. "Мир", М., 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел
22 августа 1978 года.