ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р5 - 3895

Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек

МЕТОД РАСЧЕТА ПОТЕНЦИАЛА ПУТЕМ ВВЕДЕНИЯ ПАРАМЕТРА

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ
И АВТОМАТИЗАЦИИ

1968

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

ЛВТА

P5 - 3895

Я.Визнер, Е.П.Жидков, В.Лелек

МЕТОД РАСЧЕТА ПОТЕНЦИАЛА ПУТЕМ ВВЕДЕНИЯ ПАРАМЕТРА

Рассматривается приближенный метод решения обратной задачи в теории рассеяния.

Пусть имеется уравнение Шредингера

$$u'' + [k^2 - V(x)]u = 0 \tag{I}$$

с начальными условиями

$$u(0) = 0 \ , \quad u'(0) = 1 . \tag{2}$$

Если предполагать, что $\int_0^\infty x|V(x)|dx = C < \infty$, то для больших x и вещественных k имеет место асимптотическое поведение

$$u(x,k) \underset{x\to\infty}{\sim} \frac{A(k)}{k} \sin(kx + \delta(k)), \tag{3}$$

где $A(k)$ называется предельной амплитудой и $\delta(k)$ предельной фазой.

Для $k = ib$, где b вещественное, имеем асимптотическое поведение

$$u(x,k) \underset{x\to\infty}{\sim} B_1(k)e^{-bx} + B_2(k)e^{bx}. \tag{4}$$

Если $B_2(k) = 0$, то k^2 называется собственным значением уравнения (I).

В обратной задаче рассматривается восстановление уравнения (I) при заданном значении $\delta(k)$ и некоторых дополнительных условиях. Марченко В.А. и Агроновичем З.С. [4] был исследован вопрос о существовании и единственности потенциала $V(x)$ уравнения (I). Кроме того ими был дан метод решения обратной задачи, в основе которого лежит решение некоторого интегрального уравнения. При практических расчетах [I] , [2] , [3] всюду предполагается, что потенциал имеет заданный вид. Обыкновенно рассматривается так называемый потенциал Юкавы, т.е.

$$V(x) = \sum_{k=1}^{m} A_k \frac{e^{-kx}}{x}$$

и отыскиваются коэффициенты разложения(например, методом наименьших квадратов). В нашей работе вид потенциала заранее не задается, а дается метод нахождения функции $V(x)$ уравнения (I) такой, что фаза $\delta(k)$ в выражении (3) совпадает с заданной. Для приближенного решения обратной задачи применяется непрерывный аналог метода Ньютона. В работах [5] , [6] , [7] этот метод применялся для приближенного решения граничной задачи для нелинейного дифференциального уравнения и для решения нелинейного интегрального уравнения.

В разделе I настоящей работы приведена теорема о применимости непрерывного аналога метода Ньютона для решения нелинейного функционального уравнения и теорема о существовании решения обратной задачи и его единственности.

В разделе II рассмотрен метод приближенного решения обратной задачи и приведены численные результаты этого решения.

I. Теорема I. [5] Пусть ϕ-непрерывная функция, отображающая банахово пространство X в банахово пространство Y . Пусть уравнение

$$\phi(x) = 0$$

имеет единственное решение x^* в открытой области D пространства X. Предположим, что в области D существуют непрерывные производные Фреше $\Phi'(x), \Phi''(x)$. Пусть далее в D существует обратный оператор $\Phi'(x)^{-1}$, для которого выполняется неравенство

$$\| \Phi'(x)^{-1} \| \leqq B .$$

Тогда существует сфера $S : \| x - x^* \| \leq \varepsilon$, принадлежащая области D, такая, что для любого $x_0 \in S$ дифференциальное уравнение

$$x'_t = - \Phi'(x)^{-1} \Phi(x) \quad ,$$

где t – вещественный параметр, с начальным условием

$$x(0) = x_0$$

имеет решение $x(t)$ для $0 \leq t \leq \infty$ и $\lim\limits_{t \to \infty} x(t) = x^*$.

Пусть теперь задана предельная фаза $\delta(k)$ для $k \in (0, +\infty)$. Для $k < 0$ положим $\delta(k) = -\delta(-k)$ и введем $S(k) = e^{+2i\delta(k)}$. $S(k)$ называется функцией рассеяния. Имеет место следующая теорема.

Теорема 2 [8]. Пусть задана функция рассеяния $S(k)$, обладающая свойствами:

I) $| S(k) | = S(0) = S(\infty) = 1$

2) $S(-k) = \overline{S(k)} = S^{-1}(k)$

3) $S(k) = 1 + \int_{-\infty}^{+\infty} F(t) e^{-ikt} dt$, где $\int_{-\infty}^{+\infty} |F(t)| dt < \infty$

4) $\arg S(k) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = -4\pi m$, m – целое.

Тогда существует функция $V(x)$ для $0 \leq x < +\infty$ такая, что предельная фаза для уравнения (I) есть $\delta(k) = 1/2 \arg S(k)$. При этом $V(x)$ ведет себя аналогично производной $F'(t)$ при $t > 0$.

В частности, для того чтобы выполнялось условие $\int\limits_0^\infty x|V(x)|dx<\infty$ необходимо и достаточно, чтобы $\int\limits_0^\infty t|F'(t)|\,dt<\infty$.

Если $m=0$, то потенциал $V(x)$ определяется однозначно.

Если $m>0$, то потенциал $V(x)$ не определяется однозначно, а существует целое m – параметрическое семейство потенциалов таких, что уравнение (I) имеет $\delta(k)$ в качестве предельной фазы и данные числа $\lambda_n=-x_n^2\,(n=1,\dots m)$ в качестве собственных значений.

П. Перейдем к численному решению нашей задачи. Уравнение (I) можно преобразовать к виду

$$y'(x)=-\frac{V(x)}{K}\sin^2(kx+y) \qquad (5)$$

с начальным условием

$$y(0)=0, \qquad (6)$$

для которого $\lim\limits_{x\to\infty} y(x,k)=\delta(k)$. [9]

Уравнением (5) с начальным условием (6) задано некоторое преобразование Ψ, где каждому потенциалу $V(x)$ соответствует фаза $\delta(k)$.

Ищем решение функционального уравнения

$$\Psi(V)=\delta \qquad \text{т.е.}\quad \Phi(V)\equiv\Psi(V)-\delta=0.$$

Предположим, что для исходной фазы выполнены условия I) ÷ 4) теоремы 2, где $m=0$. Тогда наше функциональное уравнение имеет единственное решение V^*, которое будем (при предположении, что $\delta(k)$ задано для всех k) искать путем введения параметра.

Приведем алгоритм расчета.

$$\begin{cases} \Phi'(V)h=-\dfrac{1}{K}\displaystyle\int_0^\infty h(x)\sin^2(hx+y)\,e^{-\frac{1}{K}\int_x^\infty V(\xi)\sin 2(K\xi+y)d\xi}dx \\ V_t'(x)=h(x) \end{cases} \qquad (7)$$

Разобьем полуось $0 \le t < +\infty$ прямыми параллельными оси x $t = t_i \ (i = 0, 1, \dots)$, отстоящими одна от другой на расстоянии Δt_i. Второе уравнение системы (7) заменим приближенным разностным соотношением

$$V(x, t_{i+1}) - V(x, t_i) = h(x, t_i)\, \Delta t_i \quad (i = 0, 1 \dots). \tag{8}$$

На слое $t = t_0$ решаем интегральное уравнение

$$\Phi'(V) h = - \Phi(V) \tag{9}$$

относительно $h(x)$, ядро которого задается посредством решения дифференциального уравнения (5) при заданном начальном значении $V(x)$. Из уравнения (8) найдем $V(x)$, соответствующее новому значению параметра t, и процесс повторяется. Интегральное уравнение (9) есть уравнение первого рода. Задача о его решении - некорректная задача. Ее решаем по методу Тихонова [10]. В качестве начального значения потенциала брали потенциал из [1].

Ниже приводим графики потенциала при разных значениях предельной фазы.

На первом рисунке даны значения потенциала, вычисленные в [1], а также вычисленные нами при том же значении фазы $\delta(k)$.

На втором рисунке находятся два потенциала, которые посчитаны при двух разных продолжениях экспериментальной фазы. Видно, что потенциал сильно зависит от продолжения.

Значение фазы находится на третьем рисунке.

При всех вычислениях шаг по t брался $\Delta t_i = 1$ и верхняя грань в интегральном уравнении (9) $x_1 = 2.5$, а процесс стабилизации продолжался до установления 4 десятичных знаков. Дифференциальное уравнение (5) считалось с точностью до 5 дес.зн.

Мы не обсуждали здесь вопросы единственности нашего решения при фазе, заданной на конечном промежутке (или точнее, в конечном числе отдельных точек этого промежутка), а также зависимость решения от начального приближения, считая их предметом дальнейшего рассмотрения.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Úlehla, Lehar, Bystrický: PREPRINT E-2440, Dubna, 1965.
2. Úlehla, Bystrický, Humhal, Lehár, Lelek, Wiesner: Rev. Mod. Phys. 39(1967), 574.
3. P. Swan, W.A. Pearse. Nucl. Phys. 79, 77 (1966).
4. Агронович, Марченко. Обратная задача теории рассеяния, Харьков, 1960.
5. Е.П.Жидков, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ, 5-2959, Дубна, 1966.
6. Е.П.Жидков, И.В.Пузынин. ЖВММФ, 7, 1967, № 5, 1086-1095.
7. Е.П.Жидков, Г.А.Ососков. Препринт ОИЯИ 5-3433, Дубна, 1967.
8. Л.Д.Фаддеев. Успехи мат. наук, 1959, 4 (88), 57-119.
9. Г.Ф.Друкарев. ЖЭТФ, 19, 3, 1949, 247-250.
10. А.Н.Тихонов. ДАН СССР, 151, 3, 501-504.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 мая 1968 года.

Таблицы значения потенциала при основном (экспериментальном) значении и разных продолжениях предельной фазы

А. При основном значении фазы:

Таблица I

(При экспериментальном значении фазы)

Значение $\varkappa$	Потенциал, посчитанный в [I]	Посчитанный нами
0.I	333.90	334.50
0.3	22.77	20.89
0.6	- 3.30	- 2.48
0.8	- 2.68	- 2.63
I.0	- I.50	- I.I9
I.3	- 0.5I	- 0.73
I.6	- 0.I5	- 0.036
2.0	- 0.035	- 0.I08
2.5	- 0.0I8	- 0.228

Таблица 2

(При разных продолжениях фазы)

Значение $\varkappa$	Потенциал при первом продолжении фазы	При втором продолжении фазы
0.I	324.92	I I75
0.3	I7.70	308.90
0.6	- 3.95	I37.80
0.8	- 3.09	52.85
I.0	- I.06	2.09
I.3	- 0.593	- 5.22
I.6	- 0.I65	8.90
2.0	0.003	- I8.09
2.5	- 0.0259	- 2I.I2

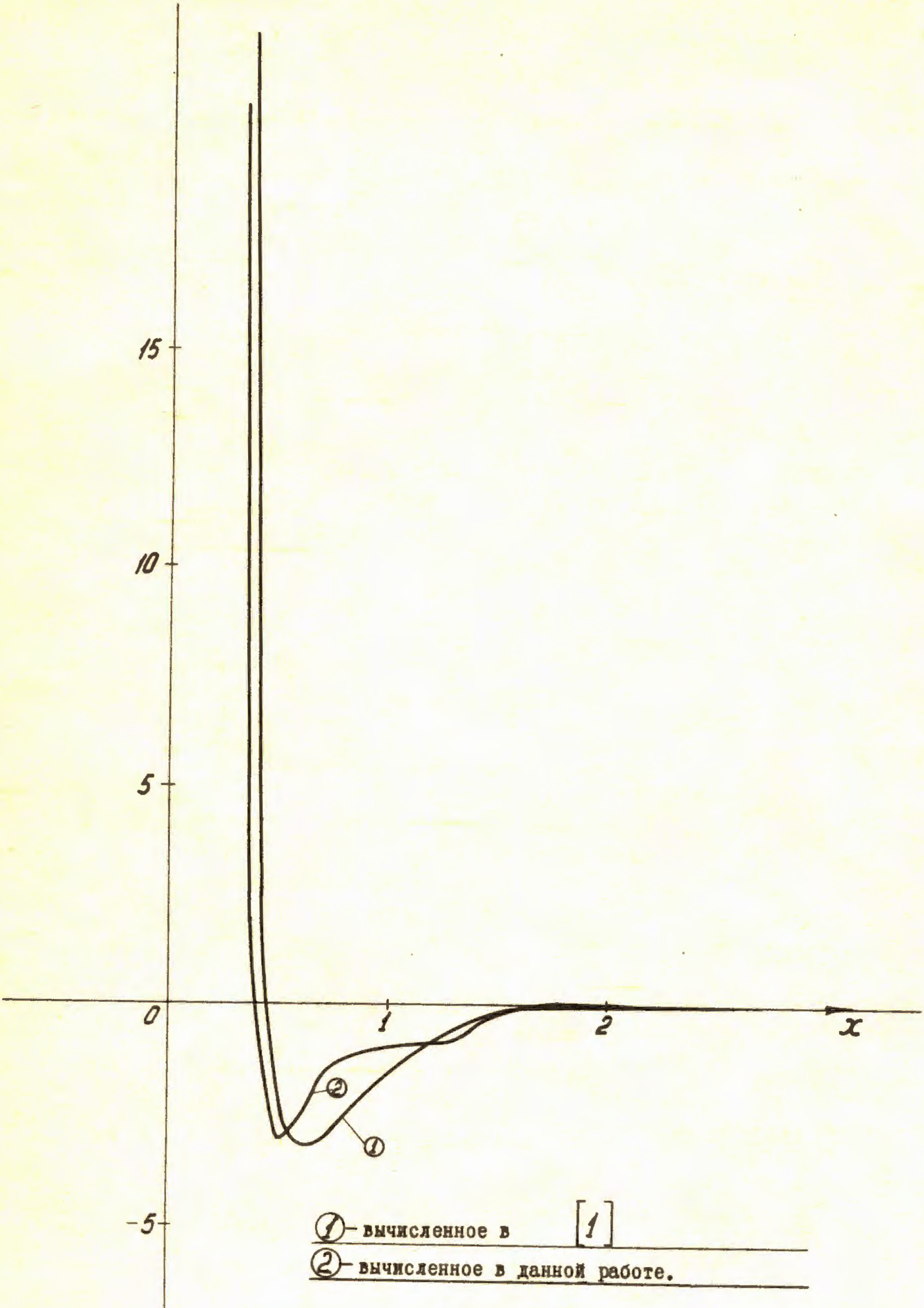

15
10
5
0
-5
1
2
x
2
1
1 - вычисленное в [1]
2 - вычисленное в данной работе.

Рис.I.

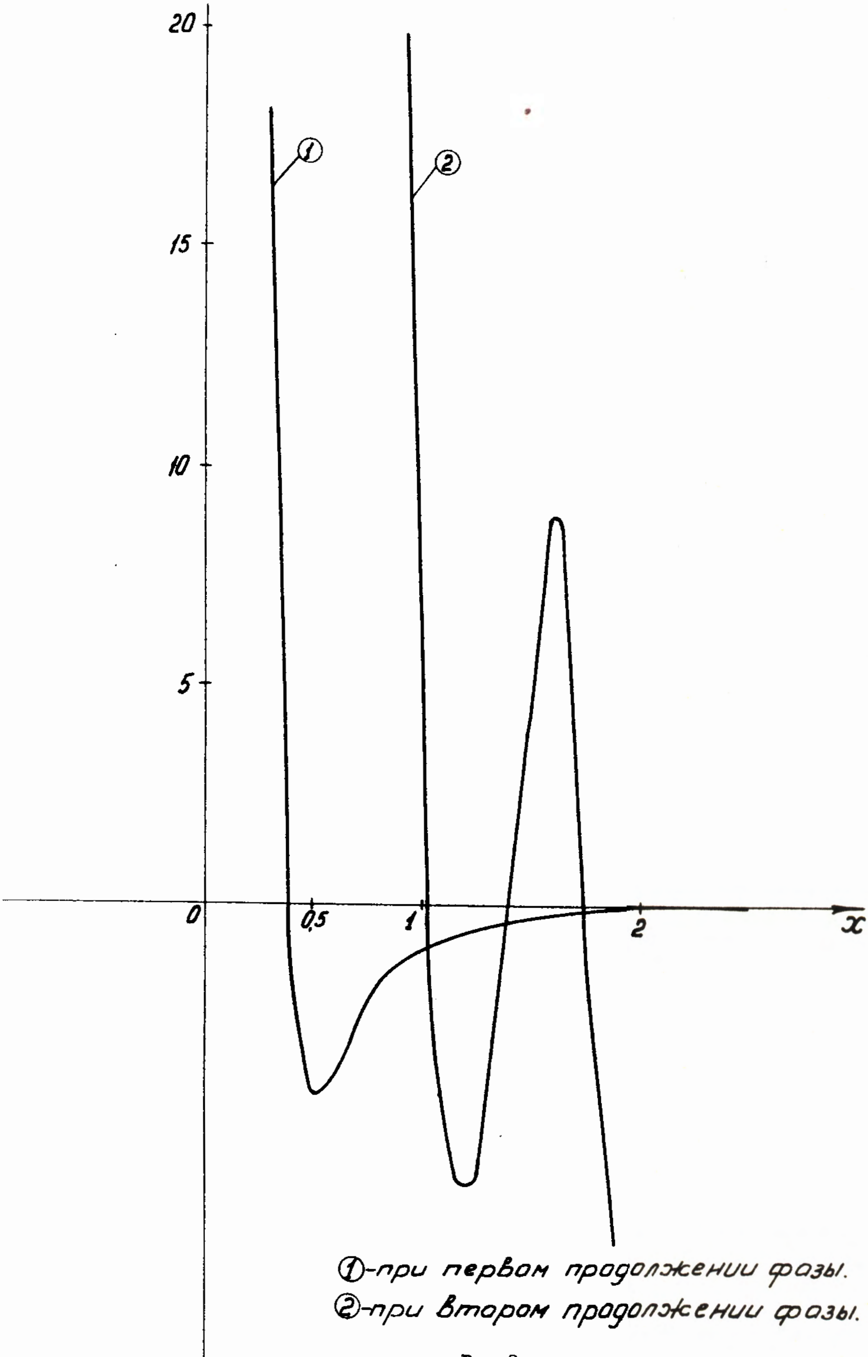
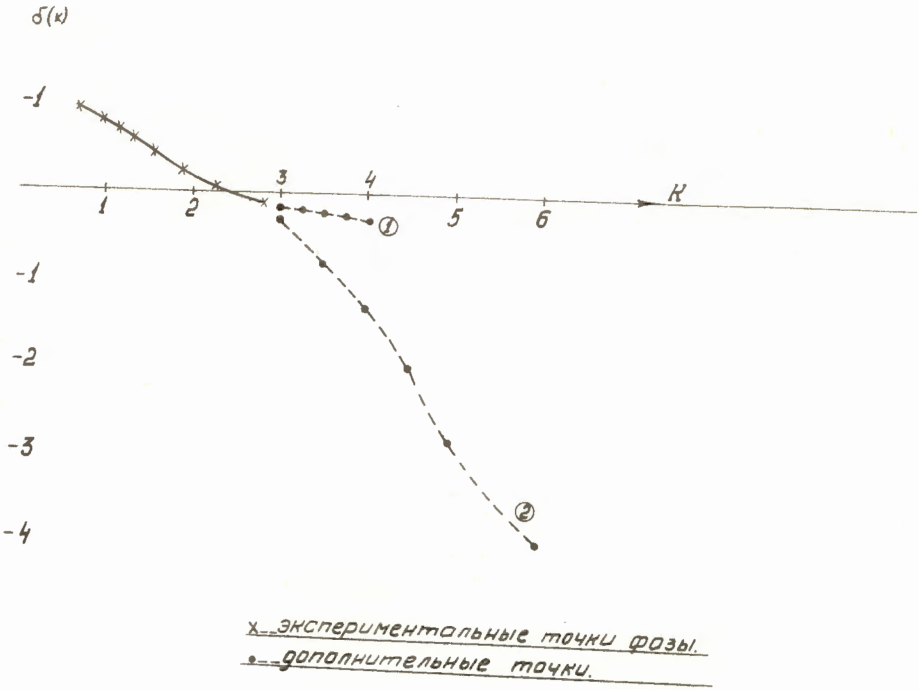

20
15
10
5
0
0,5
1
2
x
1
2
①-при первом продолжении фазы.
②-при втором продолжении фазы.

Рис.2.



δ(к)
-1
-1
-2
-3
-4
1
2
3
4
5
6
К
①
②
х – экспериментальные точки фазы.
• – дополнительные точки.

Рис.3.