сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р5-85-858

Р.С.Егикян*, Е.П.Жидков

О КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОМ ПОДХОДЕ В ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ РАССЕЯНИЯ

*Ереванский физический институт

1985

Конечно-разностный подход заключается в замене исходного дифференциального уравнения конечно-разностным и последующем его решении. Будучи аналитически более простыми, конечно-разностные варианты обладают тем преимуществом перед непрерывным случаем, что изложение становится более прозрачным и наглядным. Полученные результаты в пределе переходят в результаты непрерывной задачи. Конечно-разностному варианту обратной задачи посвящен ряд работ, в которых представлены различные подходы к решению /1,2,3/.

Целью настоящей работы является исследование разностного аналога метода Крейна /4,5/. В /6/ было показано: что имеют место явные формулы, позволяющие выразить потенциал через фазу рассеяния. При аппроксимации непрерывной задачи разностной картина сохраняется. Уравнение Крейна, занимавшее центральную роль в /4,5/, заменяется конечно-разностным уравнением, ему аналогичным. Преобразование Фурье, игравшее основную роль в /6/, заменяется дискретным преобразованием Фурье.

Исходное уравнение Шредингера

$$-y'' + V(x)y = k^2 y \qquad (1)$$

заменяется разностным уравнением

$$y(k^2,(n+1)\Delta) + y(k^2,(n-1)\Delta) = (2-k^2\Delta^2)\times \exp\left(\tfrac{1}{2}\Delta^2 V(n\Delta)\right) y(k^2,n\Delta). \qquad (2)$$

В пределе при $\Delta \to 0$ (2) переходит в (1).

Обозначим

$$\lambda = 2 - k^2\Delta^2, \quad v(n) = \tfrac{1}{2}\Delta^2 V(n\Delta),$$

$$\varphi(\lambda,n) = \exp\left[\tfrac{1}{2}v(n)\right] y(k^2,n\Delta),$$

$$\vartheta = \arccos\frac{\lambda}{2}.$$

Запишем (2) в виде

$$\exp\left\{-\tfrac{1}{2}\left[v(n)+v(n+1)\right]\right\}\varphi(\lambda,n+1) + \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\left[v(n-1)+v(n)\right]\right\}\varphi(\lambda,n-1) = \lambda\varphi(\lambda,n)$$

В матричной форме

$$A\varphi = \lambda\varphi \quad .$$

Здесь A – бесконечная симметрическая трехдиагональная матрица с элементами

$$a_{m,n} = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[v(m) + v(n)\right]\right\}\left(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}\right) \; ,$$

а φ – вектор $\{\varphi(\lambda, n)\}$, $m, n \geqslant 1$.
Граничное условие $\varphi(\lambda, 0)=0$ выполняется автоматически. В качестве второго граничного условия вместо $\varphi(\lambda, 1) = \Delta$ удобнее положить $\varphi(\lambda, 1) = 1$.

Обозначим спектральную плотность матрицы A через $\rho(\lambda)$, так что

$$\int \varphi(\lambda, m)\, \varphi(\lambda, n)\, d\rho(\lambda) = \delta_{m,n} \; , \tag{3}$$

$$\int \lambda\, \varphi(\lambda, m)\, \varphi(\lambda, n)\, d\rho(\lambda) = a_{m,n} \; . \tag{4}$$

Поскольку функции $\varphi(\lambda, n)$ – полиномы, они представляют собой ортогональные полиномы с весом $\rho(\lambda)$.

Пусть $\mathring{A}$ будет матрица, соответствующая случаю $v(n) \equiv 0$, т.е.

$$\mathring{a}_{m,n} = \delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1} \; .$$

В этом случае

$$\mathring{\varphi}(\lambda, n) = \frac{\left[\frac{\lambda}{2} + \left(\frac{\lambda^2}{4} - 1\right)^{1/2}\right]^n - \left[\frac{\lambda}{2} - \left(\frac{\lambda^2}{4} - 1\right)^{1/2}\right]^n}{2\left(\frac{\lambda^2}{4} - 1\right)^{1/2}} = U_n\left(\frac{\lambda}{2}\right) \; .$$

Здесь $U_n(\lambda)$ – многочлен Чебышева второго рода.

Функции $\mathring{\varphi}(\lambda, n)$ удовлетворяют разностному уравнению

$$\mathring{\varphi}(\lambda, n+1) + \mathring{\varphi}(\lambda, n-1) = \lambda\, \mathring{\varphi}(\lambda, n) \; ,$$

а спектральная плотность $\sigma(\lambda)$ дается известной формулой /2/ :

$$\sigma(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{при} \quad \lambda < -2 \; , \\ \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-2}^{\lambda} (4 - \mu^2)^{1/2}\, d\mu & \text{при} \quad -2 < \lambda < 2 \; , \\ 1 & \text{при} \quad \lambda > 2 \; . \end{cases}$$

Если потенциал $\{v(n)\}_{n=1}^{\infty}$ достаточно быстро убывает (например, $\sum\limits_{n=1}^{\infty} v(n) < \infty$), то решение $\varphi(\lambda, n)$ имеет асимптотику при $|\lambda| < 2$

$$\varphi(\lambda, n) \approx A(\lambda) \sin\left(n\vartheta + \eta(\lambda)\right) \; .$$

Здесь $A(\lambda)$ и $\eta(\lambda)$ – амплитуда и фаза рассеяния непрерывной задачи. Зависимость от энергии имеет вид $\eta(\lambda) = \eta(2 - k^2\Delta^2)$, чем и объясняется конечность области определения.

Связанные состояния характеризуются конечным числом значений λ_m , $|\lambda_m| > 2$ и нормировочными константами

$$C_m = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi^2(\lambda_m, n) \; .$$

Данными рассеяния называется совокупность

$$S(v) = \left\{\eta(\lambda),\ -2 < \lambda < 2 ;\ \lambda_m ;\ C_m\ ,\ m = 1, 2, \ldots, N\right\} \; . \tag{5}$$

Обратная задача рассеяния для уравнения (2) состоит в определении потенциала $v(n)$ по данным рассеяния (5).

Первый шаг обратной задачи состоит в определении спектральной плотности $\rho(\lambda)$ по $S(v)$. Вопрос этот разобран в работе /2/. Не вдаваясь в подробности, приведем лишь формулу, выражающую спектральную плотность $\rho(\lambda)$ через фазу $\eta(\lambda)$ в случае отсутствия связанных состояний

$$\rho(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{при} \quad \lambda < -2 \; , \\ A^2 \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-2}^{\lambda} (1 - \mu^2)^{1/2} \exp\left(\frac{2}{\pi}\int\limits_{-2}^{2} \frac{\eta(\mu')\, d\mu'}{\mu' - \mu}\right) d\mu & \text{при} \quad -2 < \lambda < 2 \; , \\ 1 & \text{при} \quad \lambda > 2 \; . \end{cases} \tag{6}$$

Внутренний интеграл в (6) понимается в смысле главного значения, а A^2 – нормировочная константа

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} v(n) \; .$$

Процедура определения потенциала $v(n)$ через спектральную плотность $\rho(\lambda)$ значительно упрощается по сравнению с непрерывным случаем. Функции $\varphi(\lambda, n)$ выражаются через $\mathring{\varphi}(\lambda, n)$ как

$$\varphi(\lambda, n) = K(n, n)\, \mathring{\varphi}(\lambda, n) + \sum_{m=1}^{n-1} K(n, m)\, \mathring{\varphi}(\lambda, m) \; . \tag{7}$$

Ядро $K(n,m)$ преобразования (7) удовлетворяет уравнению[1,2]

$$K(n,n)\, q(n,m) + K(n,m) + \sum_{\ell=1}^{n-1} K(n,\ell)\, q(\ell,m) = 0 . \tag{8}$$

Уравнение (8) аналогично уравнению Гельфанда-Левитана[5]. Выведем из (8) разностное уравнение, аналогичное уравнению Крейна. Имеет место соотношение

$$\overset{\circ}{\varphi}(\lambda,m)\,\overset{\circ}{\varphi}(\lambda,\ell) = \frac{2}{(4-\ell^2)}\left[T_{m-\ell}\left(\tfrac{\lambda}{2}\right) - T_{m+\ell}\left(\tfrac{\lambda}{2}\right)\right] . \tag{9}$$

Здесь $T_m(\lambda)$ - многочлен Чебышева первого рода.

Обозначим

$$p(m) = 2\int \frac{T_m\left(\frac{\lambda}{2}\right)}{4-\lambda^2}\, d\left[\rho(\lambda) - \sigma(\lambda)\right]$$

для $m \geqslant 0$ и доопределим функцию p для отрицательных значений четным образом

$$p(-m) = p(m) .$$

Тогда, с учетом (7), имеет место представление

$$q(n,m) = p(n-m) - p(n+m) , \qquad n,m \geqslant 1 .$$

Введем функцию $b(K)$ как решение уравнения

$$b(K) + \sum_{\ell=0}^{2n-1} b(\ell)\, p(K-\ell) = b(2n)\, p(K) , \qquad K = 0,1,\dots,2n-1 . \tag{10}$$

Непосредственной подстановкой легко убедиться, что функция $K(n,m)$ из (8) выражается через $b(K)$ следующим образом:

$$K(n,m) = b(n-m) - b(n+m) . \tag{11}$$

Уравнение (10), как будет показано, имеет единственное решение и поэтому эквивалентно уравнению (5). Разностным аналогом уравнения Крейна и является (10).

Для решения (10) применим дискретное преобразование Фурье (ДПФ). Пусть задана периодическая функция $a(\ell)$ целочисленной переменной ℓ с периодом n. ДПФ определяется следующим образом[7]:

$$\hat{a}(m) = \sum_{\ell=0}^{n-1} a(\ell)\, e^{\frac{2\pi i \ell m}{n}} .$$

Введем функцию

$$B(k) = \frac{b(k)}{b(2n)} , \qquad k = 0,1,\dots,2n-1 .$$

Тогда (10) приобретает вид

$$B(k) + \sum_{\ell=0}^{2n-1} B(\ell)\, p(k-\ell) = p(k) . \tag{12}$$

Сумма в (11) является сверткой функций $B(\ell)$ и $p(\ell)$. Применив ДПФ к (12) и учитывая, что ДПФ свертки двух функций равно произведению ДПФ обеих функций, получим

$$\hat{B}(m) + \hat{B}(m)\,\hat{p}(m) = \hat{p}(m) . \tag{13}$$

Отсюда

$$\hat{B}(m) = \frac{\hat{p}(m)}{1 + \hat{p}(m)} , \qquad m = 0,1,\dots,2n-1 .$$

Осталось вычислить $b(2n)$. Из условия нормировки

$$\int \varphi^2(\lambda,n)\, d\rho(\lambda) = 1$$

следует

$$b(2n)^{-2} = \left[B(0)-1\right]\left[B(0) + p(2n) - \sum_{K=0}^{2n-1} B(k)\, p(2n-K)\right] + \left[B(0)-1\right]^2 . \tag{14}$$

Теперь определим потенциал $v(n)$. Из соотношений (4), (7) и (I')

имеем

$$a_{n,n+1} = \int \lambda\, \varphi(\lambda,n)\, \varphi(\lambda,n+1)\, d\rho(\lambda) =$$
$$= \left[b(0) - b(2n)\right] \int \overset{\circ}{\varphi}(\lambda,n+1)\, \varphi(\lambda,n+1)\, d\rho(\lambda) =$$
$$= \left[b(0) - b(2n)\right]\left[b(0) - b(2n+2)\right]^{-1} .$$

Отсюда

$$\frac{1}{2}\left[v(n) + v(n+1)\right] = \ln\left[b(0) - b(2n+2)\right] - \ln\left[b(0) - b(2n)\right] .$$

Определяем величины $v(n)$:

$$\frac{1}{2}\left[v(1) + (-1)^{n+1} v(n+1)\right] = \sum_{z=1}^{n} (-1)^{z+1} \ln \frac{b(0) - b(2n+2)}{b(0) - b(2n)} ,$$

где

$$v(1) = 2\sum_{z=1}^{\infty} (-1)^{z+1} \ln \frac{b(0)-b(2n+2)}{b(0)-b(2n)} .$$

Приведем вид решения $\varphi(\lambda_m)$. Подставив (II) в (7) и учитывая, что $\mathring{\varphi}(\lambda,n) = U_n(\frac{\lambda}{2})$, получаем разложение решения по полиномам Чебышева

$$\varphi(\lambda,n) = b(2n)\left\{[B(0)-1]\,U_n(\tfrac{\lambda}{2}) + \sum_{m=1}^{2n-1} B(m)\, U_{n-m}(\tfrac{\lambda}{2})\right\}$$

$$(U_{-n}(\lambda) = -U_n(\lambda)) .$$

Теперь рассмотрим предельную форму полученных соотношений при $\Delta\to 0$. Во первых, вспоминая нормировку $\varphi(\lambda,1)=1$, заменим функции $\varphi, \mathring{\varphi}$ функциями

$$\varphi' = \Delta\varphi ,$$

$$\mathring{\varphi}' = \Delta\mathring{\varphi}$$

и потребуем, чтобы выполнялись условия

$$\int \varphi'(\lambda,n)\,\varphi'(\lambda,m)\,d\rho'(\lambda) =$$

$$\int \mathring{\varphi}'(\lambda,n)\,\mathring{\varphi}'(\lambda,m)\,d\sigma'(\lambda) = \frac{\delta_{mn}}{\Delta} ,$$

т.е. $\rho' = \frac{\rho}{\Delta^3}$, $\sigma' = \frac{\sigma}{\Delta^3}$.
В пределе при $\Delta\to 0$, $n\Delta = x$ получаем

$$\mathring{\varphi}'(\lambda,n) \longrightarrow \frac{\sin kx}{k} ,$$

$$d\sigma' \longrightarrow \frac{2}{\pi}k^2\,dK , \quad k>0 .$$

$$d\rho' \longrightarrow \frac{2}{\pi}\exp\left(-\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\eta(k')\,k'}{k'^2-k^2}\,dk'\right)k^2\,dk , \quad k>0$$

- собственные функции и спектральные плотности, которые будем обозначать в непрерывном случае теми же буквами, что и в дискретном.

Уравнение (I3) перейдет в уравнение Крейна /4,5/

$$\Gamma_{2x}(t) + \int_0^{2x} H(t-s)\,\Gamma_{2x}(s)\,ds = H(t) ,$$

где ядро имеет вид

$$H(t) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\cos kt}{k}\,d[\rho'(k)-\sigma'(k)] . \tag{I6}$$

Соотношение (I4) при малых Δ имеет вид

$$b(2n)^{-2} \simeq 1+\Delta[\Gamma_{2x}(2x)-\Gamma_{2x}(0)] . \tag{I7}$$

Подставляя в выражение

$$V(x) = \lim_{\Delta\to 0}\frac{1}{\Delta^2}\ln\frac{b(0)-b(2n)}{b(0)-b(2n+2)}$$

значение $b(2n)$ из (I7), получаем

$$V(x) = 2\frac{d}{dx}[\Gamma_{2x}(2x)-\Gamma_{2x}(0)] . \tag{I8}$$

Формулы (I6) и (I8) получены в теории обратной задачи /4,5/. Суммируем сказанное. Изложенное дает еще один путь решения обратной задачи. Дискретизируя с самого начала уравнение Шредингера, по данным рассеяния определяем спектральную плотность $\rho(\lambda)$, а по ней дискретный потенциал $v(n)$, дающий приближенное значение искомого потенциала $V(x)$,

$$v(n) = \frac{1}{2}\Delta^2\, V(n\Delta) .$$

Литература

1. Шадан К., Сабатье П. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. М., Мир, 1980.
2. Case K.M., Kac M. "J. Math. Phys. ", 1973, v.14, P.594.
3. Захарьев Б.Н. и др. ЭЧАЯ, т.8, вып.2, с.290.
4. Крейн М.Г. ДАН СССР, 1955, т.105, №4, с.57.
5. Фаддеев Л.Д. УМН, 1959, т.14, № 4, с.57.
6. Егикян Р.С., Жидков Е.П. ОИЯИ, 5-85-366, Дубна, 1985.
7. Бахвалов Н.С. Численные методы. М., Наука, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 ноября 1985 года.