

На правах рукописи

Во Чонг Тхак

**Численное исследование моделей волновой и
квантовой физики в постановке обратной
параметрической спектральной задачи**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий
Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Пузынина Таисия Петровна

Официальные оппоненты: **Цирулёв Александр Николаевич**
доктор физико-математических наук, профессор,
зав. кафедрой математических методов современного естествознания
Тверского государственного университета

Мухартова Юлия Вячеславовна
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
кафедры математики
Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова


Ведущая организация:
Московский государственный технологический университет "СТАНКИН"

Защита состоится 28 февраля 2014 г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.203.28 при Российском университете дружбы народов по адресу: г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, ауд. 110.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Российского университета дружбы народов по адресу: 117918, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6. (Отзывы на автореферат просьба направлять по указанному адресу.)

Автореферат разослан декабря 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



М.Б.Фомин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В диссертации предложен и численно реализован подход к исследованию математических моделей волновой и квантовой физики, которые могут быть сведены к частичной задаче Штурма–Лиувилля на конечном интервале или полуоси ^{1), 2)}. В последнем случае это задачи дискретного или непрерывного спектра для радиального уравнения Шредингера ³⁾.

В частичной задаче Штурма–Лиувилля для линейного дифференциального уравнения

$$\varphi^{(1)}(\lambda, y) \equiv \left[\frac{d^2}{dx^2} + 2p(x) \frac{d}{dx} + q(x) - \lambda r(x) \right] y(x) = 0, \quad a \leq x \leq b, \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\varphi^{(1+i)}(\lambda, y) \equiv \left[d_i(\lambda, x) \frac{d}{dx} + f_i(\lambda, x) \right] y(x) \Big|_{x=x^{(i)}} = 0, \quad (2)$$

$i = 1, 2$; $x^{(1)} = a$, $x^{(2)} = b$ и условием нормировки

$$\varphi^{(4)}(\lambda, y) \equiv \int_a^b [y(x)]^2 dx - 1 = 0, \quad (3)$$

где λ – числовой параметр, $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$, $d_i(\lambda, x)$, $f_i(\lambda, x)$ – заданные функции, ($d_i(\lambda, x)^2 + f_i(\lambda, x)^2 > 0$), требуется вычислить собственное значение $\lambda = \lambda^*$ и соответствующее ему решение $y(x) = y^*(x)$ задачи (1)–(3) или конечную последовательность $\{\lambda_m^*, y_m^*(x)\}$, $m = 0, 1, \dots, m_{\max}$ собственных значений $\lambda = \lambda_m^*$ и соответствующих решений $y(x) = y_m^*(x)$.

Для радиального уравнения Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2ME - \frac{L(L+1)}{x^2} - V(x) \right] y(x) = 0, \quad 0 \leq x < \infty, \quad (4)$$

где $M > 0$ – приведенная масса квантовой системы, E – энергия, $L = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальный момент, $V(x)$ – потенциал взаимодействия, ограниченные нетривиальные решения $y(x)$ – волновые функции, удовлетворяющие условию регулярности

$$y(0) = 0, \quad (5)$$

в дискретном спектре $E = E^{(v)}$ ($E < 0$, $v = 0, 1, 2, \dots$ – вибрационное число) имеют экспоненциально убывающую асимптотику

$$y(x) \rightarrow c\psi(x) = c \exp(-\sqrt{-2ME}x), \quad x \rightarrow \infty, \quad (6)$$

где c – постоянная.

¹ Шилов Г. Е. Математический анализ. – М.: Физматгиз. 1961. 437 с.

² Глазман И. М. Прямые методы качественного спектрального анализа сингулярных дифференциальных операторов. – М.: Физматгиз. 1963. 338 с.

³ Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. – М.: Наука. 1974. 752 с.

Частичная задача дискретного спектра состоит в вычислении конечной последовательности значений энергии $E = E^{(v)}$ и соответствующих волновых функций $y(x) = y^{(v)}(x)$, $v = 0, 1, 2, \dots, v_{\max}$.

В непрерывном спектре ($E > 0$) нетривиальные волновые функции $y(x)$ задачи (4)–(5) существуют для всех значений E и имеют осциллирующую асимптотику

$$y(x) \rightarrow A \sin(kx - \frac{L\pi}{2} + \delta_L), \quad x \rightarrow \infty, \quad (7)$$

где $k = \sqrt{2ME}$ – импульс, A – амплитуда, $\delta_L = \delta_L(k)$ – фаза рассеяния.

Частичная задача непрерывного спектра заключается в вычислении для заданной конечной последовательности значений импульса $k = k_i$ волновых функций $y(x) = y(k_i, x)$ и соответствующих значений фаз рассеяния $\delta_L = \delta_L(k_i)$, $i = 1, 2, \dots, i_{\max}$.

Рассматриваются такие математические модели, зависимость которых от дополнительных параметров $\bar{p} = (p_1, \dots, p_n)$ приводит к зависимости от этих параметров спектральных задач (1)–(3), (4)–(6) и (4), (5), (7) и их решений.

Предполагается, что решения этих задач существуют.

В рамках рассматриваемых моделей теоретические значения изучаемых характеристик физических систем являются функционалами от спектральных характеристик, то есть решений указанных спектральных задач

$$z(\bar{p}) = \begin{cases} \{\lambda_m^*(\bar{p}), y_m^*(x, \bar{p})\}, & m = 0, 1, \dots, m_{\max}; \text{ задача (1) – (3)}, \\ \{E^{(v)}(\bar{p}), y^{(v)}(x, \bar{p})\}, & v = 0, 1, \dots, v_{\max}; \text{ задача (4) – (6)}, \\ \{\delta_L(k_i, \bar{p}), y(k_i, x, \bar{p})\}, & i = 1, 2, \dots, i_{\max}; \text{ задача (4), (5), (7)}. \end{cases} \quad (8)$$

Таким образом, для каждой исследуемой модели возникает обратная параметрическая спектральная задача: по заданным (экспериментальным или тестируемым) значениям характеристик физической системы требуется в допустимой области Ω параметров модели $\bar{p} \in \Omega$ восстановить спектральную задачу (то есть найти $\bar{p} = \bar{p}^*$), с помощью которой обеспечивается минимальное отклонение заданных значений характеристик от теоретических.

Решение этой задачи можно свести к задаче минимизации по параметрам $\bar{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n) \in \Omega$ функционала квадратичного типа

$$\min_{\bar{p} \in \Omega} \Phi(\bar{p}) = \sum_{j=1}^s \omega_j [f_j - \Phi_j(z(\bar{p}))]^2, \quad (9)$$

где f_j – заданные (экспериментальные или предлагаемые для исследования) значения характеристик моделируемой физической системы, $\Phi_j(z(\bar{p}))$ – функционалы, соответствующие теоретическим значениям этих характеристик и зависящие от решений $z(\bar{p})$ (8) параметризованной спектральной задачи математической модели, ω_j – весовые коэффициенты ($\omega_j > 0$), s – количество заданных данных. Относительный минимум в задаче (9) всегда существует в выбранной области Ω . По его величине и близости к абсолютному значению

”0” можно судить как о соответствии параметризации спектральной задачи и выбранной области Ω в математической модели изучаемой физической системы, так и о точности определения параметров модели.

Актуальность работы.

Проверка применимости математической модели, формализованной в виде уравнений, зависящих от параметров, для описания наблюдаемых характеристик изучаемой физической системы является важным шагом при обосновании этой модели. В диссертации численно исследованы характеристики физических систем в рамках следующих математических моделей, которые приведены к обратной параметрической спектральной задаче (9):

1. Модель градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод ^{4), 5)}.

Задача конструирования оптического волновода с эквидистантным спектром является актуальной, поскольку для регистрации выходного сигнала такого волновода проще изготовить разрешающую оптическую линейку. Технологически эта задача решается методом имплантации ионного пучка в волноводный слой, расположенный на подложке. В результате образуется волноводный слой с экспоненциально изменяющимся показателем преломления.

Задача определения спектра волноводной моды (E_y) является задачей Штурма–Лиувилля (1)–(3), где $\lambda = \beta^2$ – спектральный параметр, $p(x) = 0$, $r(x) = 1$, $q(x) = n^2(x, \bar{p})$ – асимметричный экспоненциальный профиль показателя преломления волновода. Вектор параметров модели $\bar{p} = (d, \Delta)$ состоит из двух компонент: d – высота имплантированного слоя, Δ – высота экспоненциального роста показателя преломления.

Для эквидистантности спектра собственных значений $\beta_j^2(\bar{p})$ ($\beta_0^2(\bar{p}) > \beta_1^2(\bar{p}) > \beta_2^2(\bar{p}) > \dots > \beta_N^2(\bar{p}) > 0$) требуется выполнение системы равенств

$$\rho_1(\bar{p}) = \rho_2(\bar{p}) = \dots = \rho_N(\bar{p}), \quad (10)$$

где $\rho_j(\bar{p}) = \beta_{j-1}^2(\bar{p}) - \beta_j^2(\bar{p})$, $j = 1, 2, \dots, N = N(\bar{p})$. Задача о приближенном выполнении системы равенств (10) сведена к обратной параметрической спектральной задаче (9).

2. Коррекция потенциала для расчета спектра молекулы водорода.

Задача вычисления спектра (уровней энергии и соответствующих волновых функций) молекулы водорода (H_2) служит хорошим тестом для компьютерных программ решения уравнения Шредингера в дискретном спектре (4)–(6). Точность численных результатов определяется их сравнением с высокоточными данными спектроскопических измерений уровней энергии H_2 ⁶⁾. По этим же данным в работе ⁶⁾ восстановлена потенциальная кривая (то есть приближенно решена обратная спектральная задача), представляющая таблично заданную функцию на отрезке $0.4 \leq x \leq 10$ с неравномерным шагом. Метод преобразования этой таблицы для задания потенциала $V(x)$ в конкретной программе зависит от реализованного в ней алгоритма решения задачи

⁴ Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов. — М.: Мир, 1984. 512 с.

⁵ Маркузе Д. Оптические волноводы. — М.: Мир, 1974. 574 с.

⁶ Sharp T.E. Potential-energy curves for molecular hydrogen and its ions// Atomic Data and Nuclear Data Tables. — 1971. — Vol. 2. — Pp. 119–169.

(4)–(6), точность воспроизведения спектроскопических уровней энергии H_2 также зависит от этого метода.

Возникает задача о повышении точности воспроизведения экспериментальных значений уровней энергии при заданных параметрах алгоритма решения задачи (4)–(6) за счет коррекции построенного по таблице потенциальной кривой потенциала $V(x)$. Один из подходов к решению этой задачи заключается в параметризации потенциала $V(x) = V(x, \bar{p})$ и сведении ее к обратной параметрической спектральной задаче (9).

Отметим, что при решении стационарного трехмерного уравнения Шредингера методом Л.В. Канторовича оно приводится к бесконечной системе радиальных уравнений. Актуальной является задача построения эффективных приближений этой системы с помощью систем небольшого числа (одно, два) уравнений при условии сохранения асимптотик потенциалов, определяющих непрерывный спектр, и воспроизведения с необходимой точностью заданных точек дискретного спектра⁷⁾. В цитируемой работе для решения этой задачи применяется метод продолжения по параметру, которым служит эффективная масса M квантовой системы. Предложенный в диссертации подход является развитием этого метода.

3. Уточнение среднеквадратичного радиуса ядра гелия–6.

В моделях ядерной физики широко используется потенциал Вудса–Саксона, который имеет вид⁸⁾

$$U(x) = V_0(1 + \exp(\frac{x - R}{a}))^{-1}, \quad (11)$$

где V_0 , R , a – параметры.

Для изучения рассеяния нейтроноизбыточных ядер гелия–6 (6He) высокой энергии на ядрах углерода–12 (${}^{12}C$) в работе⁹⁾ использовалась $h\alpha$ -модель, в которой ядра 6He рассматривались как кластер, составленный из двух фрагментов: ядра 4He и dineйтрона ($2n$). Характеристики взаимодействия фрагментов описываются в терминах задачи дискретного спектра (4)–(6). Для перехода в систему единиц $h\alpha$ -модели в уравнении (4) необходимо выполнить следующие подстановки: $E = -\lambda$, $2M = 0.06380480686$ – константа, выражающаяся через приведенную массу фрагментов,

$$V(x) = V(x, \bar{p}) = -2MU(x), \quad (12)$$

где $U(x)$ – потенциал Вудса–Саксона (11), $\bar{p} = (V_0, R, a)$ – вектор параметров. Безузловая волновая функция преобразованного уравнения Шредингера (4) $y^{(0)}(x)$ ($L = 0$), нормированная условием

⁷ Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Простое эффективное адиабатическое представление в задаче трех тел и моделирование перехода квазистационарного состояния в слабосвязанное для $dt\mu$ -мезомолекулы// Ядерная физика. — 1992. — Т. 55, Вып. 12. — С. 3271–3277.

⁸ Флогге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974. Т. 1, 2.

⁹ Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Lukyanov K.V. Estimation of the breakup cross sections in ${}^6He+{}^{12}C$ reaction within high-energy approximation and microscopic optical potential// International Journal of Modern Physics E. — 2011. — Vol. 20, No. 9. — Pp. 2039–2047.

$$\int_0^{\infty} y^{(0)}(x)^2 dx = 1, \quad (13)$$

представляет функцию связи фрагментов. Соответствующее ей собственное значение λ связано с энергией разделения фрагментов Σ соотношением $\lambda = 2.25\Sigma$, а среднеквадратичный радиус ядра ${}^6\text{He}$ вычисляется по формуле

$$R_{rms} = \left(\int_0^{\infty} y^{(0)}(x)^2 x^2 dx \right)^{1/2}. \quad (14)$$

При значениях параметров потенциала (11)

$$V_0 = 28.3, \quad R = 1.45, \quad a = 0.3 \quad (15)$$

в цитируемой работе ⁹⁾ вычислены значение $\Sigma = 0.975$, хорошо воспроизводящее экспериментальное значение энергии развала ядра ${}^6\text{He}$, и значение $R_{rms} = 2.62$. Там же отмечено, что ранее было получено значение $R_{rms} = 2.586$ другими авторами в рамках крупномасштабной оболочечной (LSSM) модели ядра.

Сравнение и уточнение теоретических значений среднеквадратичного радиуса R_{rms} ядра ${}^6\text{He}$ представляет интерес для развития моделей ядра. Эта задача может быть рассмотрена в постановке обратной параметрической спектральной задачи (9) в физически допустимой окрестности Ω значений параметров (15) потенциала Вудса–Саксона (11) с учетом экспериментального значения энергии развала Σ ядра ${}^6\text{He}$ и проверяемых значений R_{rms} . В рамках $h\alpha$ -модели по величине минимума (9) можно судить о точности каждого значения R_{rms} .

4. Обратная задача рассеяния на сферически симметричных потенциалах, зависящих от параметров.

Обратная задача рассеяния – фундаментальная задача теоретической физики, решение которой позволяет установить взаимодействие фрагментов физической системы по экспериментально наблюдаемым характеристикам их рассеяния.

В рамках уравнения Шредингера (4) эта задача о восстановлении потенциала $V(x)$ по известным асимптотическим свойствам (7) его решений является некорректной, а условия полноты наблюдаемой информации, необходимые для разрешимости задачи, практически не выполняются.

В отличие от математической постановки обратной задачи квантовой теории рассеяния, для которой решены вопросы существования и единственности решения (см., например, ¹⁰⁾, стр. 200–223), предлагается упрощенный вариант, но более приближенный к физической постановке. В этой постановке предполагается, что потенциал $V(x)$ в уравнении (4) дополнительно зависит от параметров квантовой системы. Восстановить потенциал $V(x)$ в рамках выбранного параметрического семейства $V(x, \vec{p})$, где \vec{p} – вектор параметров из заданной области Ω , по заданному набору значений фаз рассеяния

¹⁰⁾ Марченко В.А. Операторы Штурма–Лиувилля и их приложения. — Киев: Наукова Думка, 1977. 330 с.

$\bar{\delta}_L^* = \{\delta_L^*(k_i), i = 1, 2, \dots, m\}$ означает найти вектор параметров \bar{p}^* , для которого достигается минимум функционала

$$\Phi(\bar{p}) = \sum_{i=1}^m (\delta_L^*(k_i) - \delta_L(k_i, \bar{p}))^2, \quad (16)$$

где $\delta_L(k_i, \bar{p})$ – значение найденной фазы рассеяния в задаче (4), (5), (7) с выбранным потенциалом $V(x, \bar{p})$, $\bar{p} \in \Omega$ при $k = k_i$ и заданным значением L . В частности, потенциалом $V(x, \bar{p})$ может быть один из модельных потенциалов, применяемых в различных разделах квантовой механики (например,⁸⁾). Задача минимизация функционала (16) представляет частный случай задачи (9). Такой подход к решению обратной задачи рассеяния не является строгим, однако, дает возможность преодолеть трудности, обусловленные некорректностью задачи и ограниченностью экспериментальных данных.

Рассмотренные модели, описываемые прямыми спектральными задачами, решения которых определяют теоретические характеристики физических систем, объединены единым подходом к их исследованию в рамках обратной параметрической спектральной задачи. Параметризация прямой задачи зависит от изучаемой модели. Она может быть выполнена как введением дополнительных параметров для сдвига части дискретного спектра (например,¹¹⁾), так и естественным образом, когда потенциалы (коэффициенты) прямой задачи зависят от параметров модели. Однако, аналитическое решение спектральных задач для этих моделей практически невозможно. Поэтому важную роль в таком подходе играет эффективный вычислительный аппарат для расчета теоретических характеристик физических систем, включая численное решение прямых спектральных задач, и вычисления параметров модели, обеспечивающих минимальное отклонение теоретических характеристик от заданных.

В диссертации для решения спектральных задач (1)–(3), (4)–(6) и (4), (5), (7) используются итерационные схемы на основе обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН)¹²⁾ с выбором итерационного параметра, обеспечивающего оптимальную сходимость итераций в зависимости от невязки приближенного решения. Сингулярные задачи (4)–(6) и (4), (5), (7) аппроксимируются регулярными на конечном интервале $0 \leq x \leq b$ путем переноса асимптотических условий (6) и (7) в достаточно удаленную точку $x = b \gg 1$. Приближенная задача дискретного спектра доопределяется условием нормировки (3), скорректированным для учета асимптотики на полуоси, а граничное условие при $x = b$ имеет вид (2). Приближенная задача рассеяния формулируется как граничная задача с нелинейным граничным условием при $x = b$, в котором неизвестная фаза рассеяния исключена. Фаза определяется после вычисления с помощью итераций волновой функции с учетом ее асимптотики. Для дискретной аппроксимации задач применяется

¹¹ Захарьев Б.Н., Костов Н.А, Плеханов Е.Б. Точно решаемые одно- и многоканальные модели (уроки квантовой интуиции I). ЭЧАЯ. 1990. Т. 21, Вып. 4. С. 914–962.

¹² Пузынин И.В., Амирханов И.В., Земляная Е.В., Первушин В.Н., Пузынина Т.П., Стриж Т.А., Лахно В.Д. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых квантово-полевых моделей // Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ). – 1999. – Т. 30, Вып. 1. – С. 210–265.

разностная схема с точностью аппроксимации $O(h^4)$, где h – шаг равномерной сетки.

Выбранный численный метод обеспечивает устойчивое решение прямых спектральных задач для линейных дифференциальных уравнений второго порядка с контролируемой точностью в достаточно широких областях дискретного и непрерывного спектра. Он легко обобщается на многоканальные задачи для систем дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений ¹²⁾.

Для решения обратной параметрической спектральной задачи используются проверенные алгоритмы минимизации: классический метод покоординатного спуска ¹³⁾ и современный метод Нелдера–Мида (например, ¹⁴⁾), не требующие вычисления производных функционала.

Разработка комплексов программ, реализующих алгоритмы решения поставленных спектральных задач, в программной среде MAPLE является актуальной, поскольку восполняет их отсутствие в этой среде и позволяет дополнить пользовательский интерфейс современными средствами компьютерной аналитики и графики.

Работы по теме диссертации выполнены в соответствии с научно-тематическими планами научно-исследовательских работ ОИЯИ при поддержке РФФИ (гранты 09-01-00770-а, 10-01-00467-а, 12-01-00396-а, 13-01-00595-а).

Цели и задачи исследований.

Цель диссертации: разработка комплексов программ на основе эффективных вычислительных схем и исследование с их помощью моделей оптического волновода и квантовых систем, описываемых спектральными регулярными и сингулярными задачами Штурма–Лиувилля, зависящими от параметров моделей, в рамках обратной задачи определения параметров, обеспечивающих минимальные отклонения заданных характеристик физических систем от теоретических.

Для достижения этой цели было необходимо решить следующие задачи:

1. Развитие имеющейся программы ¹⁵⁾ численного решения задачи Штурма–Лиувилля (1)–(3). Включение в программу процедур уточнения разностного решения на последовательности сгущающихся сеток ¹⁶⁾, а также вычисления начального значения итерационного параметра для уменьшения числа итераций. Разработка программы SLIPN4M на языке системы аналитических вычислений и компьютерной алгебры MAPLE. Выполнение тестовых расчетов примеров задачи (1)–(3) и задачи дискретного спектра уравнения Шредингера (4)–(6). Численное исследование влияния параметров вычислительной схемы на сходимость и точность результатов.

¹³⁾ Калиткин Н.Н. Численные методы. — М.: Наука, 1978. 512 с.

¹⁴⁾ Математический синтез оптических наноструктур. Учеб. пособие/ Ловецкий К.П., Севастьянов Л.А., Паукшто М.В., Бикеев О.Н. — М.: РУДН, 2008. 213 с.

¹⁵⁾ Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. SLIPN4 – Программа для численного решения задачи Штурма–Лиувилля// — Сообщения ОИЯИ, P11-87-332, Дубна. — 1987. <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/slip/>

¹⁶⁾ Марчук Г. И., Шайдулов В. В. Повышение точности решений разностных схем. — М.: Наука. 1979. 320 с.

2. Разработка алгоритма численного решения задачи рассеяния (4), (5), (7) в постановке граничной задачи с нелинейным граничным условием для волновой функции в достаточно удаленной точке, в котором фаза рассеяния исключена¹⁷⁾, с помощью итерационной схемы Ньютона с параметром. Разработка программы SCAPES на языке MAPLE. Выполнение тестовых расчетов для численного исследования сходимости и точности вычислительной процедуры.

Отметим, что для решения регулярных и сингулярных задач Штурма–Лиувилля существуют процедуры устойчивого вычисления спектральных параметров, основанные на фазовом методе¹³⁾ (стр. 282–284),¹⁸⁾,¹⁹⁾.

Обоснованием выбора в диссертации вычислительной схемы решения спектральных задач на основе НАМН служит устойчивость и точность, обеспечиваемые назначением ее параметров, а также возможность непосредственного использования вычисленных волновых функций, например, для построения специальных базисов разложения решений задач большой размерности²⁰⁾. Схему без принципиальных сложностей можно развить для систем уравнений, используя в программах матричные операции, тогда как фазовый метод для систем представляет сложность¹⁹⁾ (стр. 166–173).

3. Разработка на языке системы MAPLE процедур минимизации функционала (9) квадратичного типа, не использующих вычисления производных, в заданной области изменения параметров. Процедуры реализуют: а) метод покоординатного спуска¹³⁾ (стр. 203–207), методы одномерной минимизации – метод золотого сечения¹³⁾ (стр. 196–198) и модификацию метода парабол¹³⁾ (стр. 198–200); б) метод деформированного многогранника Нелдера–Мида¹⁴⁾ (стр. 9–18).

4. Разработка на языке MAPLE комплекса программ PIPES для вычисления параметров модельных потенциалов регулярной и сингулярной задачи Штурма–Лиувилля, минимизирующих отклонения экспериментальных данных от соответствующих теоретических величин, зависящих от собственных значений и собственных функций параметризованных уравнений.

5. Разработка на языке MAPLE комплекса программ DISCAPESM с включением в него программы SCAPES для решения прямой и обратной задачи рассеяния на сферически симметричных потенциалах, зависящих от параметров.

6. Численное исследование моделей оптического волновода и квантовой физики, включая построение функционалов в задаче (9), численное исследование сходимости и точности результатов. В обратной параметрической задаче рассеяния численное исследование точности восстановления парамет-

¹⁷ Huss R., Kalaba R., Vasudevan R. On a boundary value problem for integro-differential equations// J. Math. Phys. — 1974. — Vol. 15, No 8. — Pp. 1285–1287.

¹⁸ Bailey P.B., Everitt W.N. and Zettl A. The SLEIGN2 Sturm–Liouville Code// ACM Trans. Math. Software. — 2001. — Vol. 21. — Pp. 143–192.

¹⁹ Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. — М.: Мир, 1972. 296 с.

²⁰ Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. Non-adiabatic Matrix Elements Connecting the Discrete and Continuous Spectra of Two-Centre Problem in Quantum Mechanics// J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. — 1977. — Vol. 10, No 4. — Pp. 1335–1345.

ров потенциала в зависимости от числа заданных значений фаз рассеяния и от величины шума, накладываемого на заданные значения фаз. Численное исследование влияния ошибок в заданных фазах рассеяния на собственные значения дискретного спектра.

Научная новизна работы.

1. Развитие оригинального подхода к исследованию математических моделей волновой и квантовой физики, зависящих от параметров, основанного на постановке обратной задачи для вычисления параметров моделей, обеспечивающих минимальные отклонения теоретических характеристик физических систем от заданных.

2. В обратной задаче рассеяния на сферически симметричных потенциалах, зависящих от параметров, для прямой задачи адаптирована ее постановка как граничной задачи с нелинейным граничным условием, решение которой осуществляется итерационной схемой на основе НАМН.

3. Реализация на единой основе НАМН численного решения задач дискретного и непрерывного спектра для решения обратной параметрической спектральной задачи.

4. Новые комплексы программ решения обратной параметрической спектральной задачи на языке системы MAPLE.

5. Новые результаты численного исследования моделей конкретных физических систем.

Практическая значимость.

Комплексы программ SLIPM [B1], [B6]–[B9], SLIPH4M [B2], PIPES [B3, B4, B10] и DISCAPESM [B5] с подробным описанием и тестовыми задачами сданы в библиотеку стандартных программ ОИЯИ JINRLIB. Адреса их размещений на сайтах:

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/slipm/index.html>

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/slip4m/index.html>

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/pipes/index.html>

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/discapesm/index.html>

Комплексы программ можно использовать для численного анализа математических моделей, приводящих к задачам Штурма–Лиувилля на конечном отрезке или полуоси, как для решения прямых спектральных задач, так и задачи о соответствии модели, зависящей от параметров, наблюдаемым характеристикам изучаемой физической системы.

Положения, выносимые на защиту.

1. Постановка обратной параметрической спектральной задачи для математической модели, описываемой задачей Штурма–Лиувилля на отрезке или полуоси, зависящей от параметров модели.

2. Итерационная схема на основе НАМН решения задачи рассеяния для радиального уравнения Шредингера, основанная на ее постановке как граничной задачи с нелинейным граничным условием в точке из асимптотической области для волновой функции.

3. Комплекс программ на языке системы MAPLE для решения обратной параметрической спектральной задачи, в котором решение задач дискретного и непрерывного спектра единообразно реализовано с помощью итерационных схем на основе НАМН.

4. Численное исследование параметров моделей оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод, спектра молекулы водорода, нейтроноизбыточного ядра гелия-6 и обратной задачи рассеяния на сферически симметричных потенциалах.

Достоверность результатов основана на всестороннем тестировании разработанных комплексов программ, включая сравнения результатов расчетов с известными аналитическими и численными результатами, а также численные проверки сходимости и точности дискретных решений в зависимости от параметров дискретизации и их согласованности с теоретическими оценками²¹). При исследовании конкретных моделей также выполнен численный анализ, дающий достоверные оценки точности результатов.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались и обсуждались на международных и российских конференциях:

1. "Mathematical Modeling and Computational Physics. MMCP'2009" (July 7 – 11 2009, LIT JINR, Dubna, Russia). <http://mmcp2009.jinr.ru>;
2. "XLVI Всероссийская конференция по проблемам математики, информатики, физики и химии" (19 – 23 апреля 2010, РУДН, г. Москва). <http://www.conference.sci.pfu.edu.ru/node/47>;
3. "Международная молодёжная конференция-школа. Современные проблемы прикладной математики и информатики. МРАМCS'2012" (22 – 27 августа 2012, ОИЯИ, г. Дубна). <http://mramcs2012.jinr.ru>

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в 10 печатных работах, из них 5 статей ([B1]–[B5]) – в изданиях из списка ВАК.

Личный вклад автора. Автор диссертации самостоятельно адаптировал и расширил возможности базовых программ решения задач Штурма–Лиувилля на языке системы аналитических вычислений и компьютерной алгебры MAPLE. Он самостоятельно разработал вычислительные схемы и комплексы программ решения обратной параметрической спектральной задачи, выполнил комплексное тестирование программ. Он провел все расчеты, относящиеся к численному исследованию представленных в диссертации моделей и оценке точности результатов. Автор участвовал в постановке задач и анализе полученных результатов совместно с научным руководителем.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Список цитированной литературы содержит 50 наименований. Отдельным списком представлены работы автора по теме диссертации. Полный объем диссертации 137 страниц машинописного текста, включая 20 рисунков и 23 таблицы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Введение содержит описание класса исследуемых математических моделей. Даны постановки частичных спектральных задач Штурма–Лиувилля и задач дискретного и непрерывного спектра для радиального уравнения Шредингера. Сформулирована обратная параметрическая спектральная задача для прямых спектральных задач, зависящих от параметров, описывающих

²¹ Самарский А. А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1983. 616 с.

модели волновой и квантовой физики. Она сводится к минимизации по параметрам в заданной области функционала, характеризующего отклонения экспериментальных данных от их теоретических значений в изучаемых математических моделях физики. Приведены конкретные модели, представляющие предмет исследований. Рассмотрены методы численного решения поставленных задач и вопросы разработки необходимых комплексов программ. Обсуждаются актуальность и новизна исследований, их практическая применимость. Сформулированы положения, выносимые на защиту, дано обоснование достоверности полученных результатов.

Глава 1 представляет описание вычислительных схем и комплексов программ для решения обратной параметрической спектральной задачи, ориентированных на исследование конкретных моделей. Рассмотрен общий подход к построению итерационных схем на основе НАМН, алгоритмы вычисления итерационного параметра в зависимости от изменения невязки приближенного решения. Обсуждается методика оценки точности численного решения нелинейного функционального уравнения, полученного с помощью итерационной схемы. На основе общего подхода рассмотрены итерационные схемы для численного решения задачи Штурма–Лиувилля и задачи дискретного спектра для уравнения Шредингера, приведенного к задаче Штурма–Лиувилля путем переноса асимптотики волновой функции из бесконечности в достаточно удаленную конечную точку. Дано описание комплекса программ SLIPN4M на языке MAPLE для численного решения задачи Штурма–Лиувилля. Комплекс SLIPM имеет аналогичную структуру.

Задача рассеяния на сферически симметричном потенциале сведена к граничной задаче для уравнения Шредингера с нелинейным граничным условием в конечной достаточно удаленной точке. Для ее численного решения разработана итерационная схема. Фаза рассеяния при заданном значении импульса определяется после вычисления волновой функции. Разработанный алгоритм реализован на языке MAPLE в виде программы SCAPES.

Для комплексов программ, предназначенных для решения прямых задач, приведены тестовые примеры, имеющие аналитические решения, подтверждающие заявленные сходимости, точность и эффективность вычислительных схем.

Рассмотрены комплексы программ для решения обратных параметрических задач, построенных на основе известных алгоритмов минимизации функционалов, не использующих производные (метод покоординатного спуска, метод Нелдера–Мида), и представленных выше комплексов для решения прямых задач. Представлены тестовые расчеты обратной задачи дискретного спектра (комплекс PIPES) и обратной задачи рассеяния (комплекс DISCAPESM) для радиального уравнения Шредингера с потенциалом Морзе, также имеющих аналитические решения.

Выполненные тестовые исследования комплексов программ подтверждают теоретические положения о реализованных в них вычислительных схемах и алгоритмах. Это позволяет сделать вывод о разработке вычислительного инструментария для исследования конкретных моделей волновой физики и квантовой механики в рамках обратной параметрической спектральной задачи.

В Главе 2 приведено численное исследование трех моделей, относящихся к теории оптических волноводов, молекулярной физике и теории ядра. Исследование этих моделей выполнено в постановке обратной параметрической задачи дискретного спектра.

Рассмотрена **модель градиентного оптического волновода** с асимметричным экспоненциальным профилем показателя преломления, для которой требуется определить параметры, обеспечивающие эквидистантный спектр волноводных мод. Для модели волноводных мод, описываемой задачей Штурма–Лиувилля, профиль показателя преломления $n^2(x)$ имеет вид

$$n^2(x) = n_f^2(1 - \Delta(1 - \exp(\frac{x}{d}))), \quad 0 \leq x \leq d, \quad (17)$$

где d и Δ — положительные параметры, $\bar{p} = (d, \Delta)$.

Граничные условия (2) имеет вид

$$\left[\frac{d}{dx}E_y(x) - \sqrt{\beta^2 - n_s^2}E_y(x)\right]_{x=0} = 0; \quad \left[\frac{d}{dx}E_y(x) + \sqrt{\beta^2 - n_c^2}E_y(x)\right]_{x=d} = 0$$

и являются следствием условий равенства логарифмических производных при $x = 0$ и $x = d$ для $E_y(x)$ и экспоненциально убывающих асимптотик ($x < 0$, $x > d$).

Значения показателей преломления заданы ²²⁾:

$$n_s^2 = (1.47)^2, \quad n_f^2 = (1.565)^2, \quad n_c^2 = (1.0)^2.$$

Приближенное решение системы (10) можно свести к минимизации функционала

$$\Phi(\bar{p}) = \sum_{j=2}^{N(\bar{p})} (\rho_1(\bar{p}) - \rho_j(\bar{p}))^2. \quad (18)$$

Для вычисления значения функционала (18) при заданном векторе параметров \bar{p} используется программа SLIP4M, решающая разностную задачу Штурма–Лиувилля (1)–(3), где $\lambda = \beta^2$, $q(x) = n^2(x)$ (17), $p(x) = 0$, $r(x) = 1$. В результате численных расчетов было выбрано значение $d = 3\pi$, при котором имеются три точки спектра.

Минимум функционала (18) $\Phi(\Delta) = 0.0025$ (дефект эквидистантности $D_\rho = \sqrt{\Phi(\Delta)} = 0.05$) получен с помощью комплекса PIPES при $\Delta = 0.181$ вблизи точки бифуркации по параметру Δ . На рис. 1 изображены графики профиля показателя преломления (17) и собственных функций $E_y^{(j)}(x)$.

Рассмотрена модификация экспоненциальной зависимости профиля (17) в виде

$$n^2(x) = n_f^2 \left(1 - \Delta \left(1 - \exp\left(\frac{x}{d}\right)^\alpha \right) \right), \quad 0 \leq x \leq d, \quad (19)$$

где α ($0 < \alpha < 1$) — параметр. Отметим, что в отличие от профиля (17) профиль (19) имеет вторую производную $\frac{d^2}{dx^2}(n^2(x)) < 0$, $0 \leq x \leq d$.

²²⁾ Refractive Index Database. — <http://refractiveindex.infor/>.

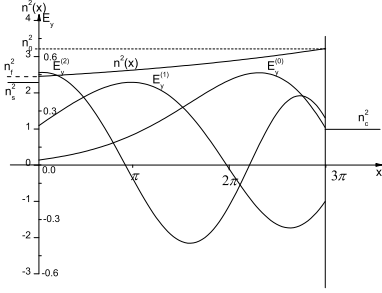


Рис. 1. Профиль показателя преломления (17) и собственные функции $E_y^{(j)}(x)$ ($j = 0, 1, 2$), $d = 3\pi$, $\Delta = 0.181$.

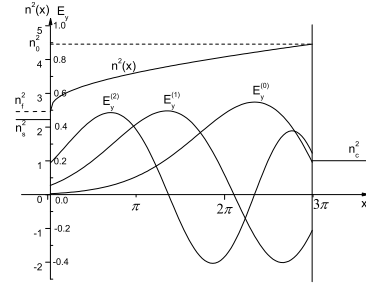


Рис. 2. Профиль показателя преломления с модификацией (19) ($\alpha = 1/3$) и собственные функции $E_y^{(j)}$, $d = 3\pi$, $\Delta = 0.4773$.

Наилучшие результаты получены при $\alpha = 1/3$. Вычисленное значение $\Delta_{\min} = 0.4773$ (минимальное значение функционала (18) $\Phi(\Delta) = 9.4 * 10^{-12}$, $D_\rho = 3.10^{-6}$) довольно близко к прогнозируемому значению $\Delta \approx 0.46$. На рис. 2 представлены графики профиля показателя преломления (19) и собственных функций $E_y^{(j)}(x)$.

Задача об уточнении потенциала, описывающего в рамках радиального уравнения Шредингера **спектр уровней энергии молекулы водорода**, представляет интерес, поскольку потенциальная кривая является результатом обработки спектроскопической информации, то есть задана численно. В качестве тестовой задачи для комплекса SLIP4M [B2] в Главе 1 была рассмотрена задача о вычислении уровней энергии и волновых функций молекулы водорода с использованием численно заданной потенциальной кривой, для которой решалась задача ее проецирования на разностную сетку с помощью интерполяции и экстраполяции. Возникает проблема коррекции полученного численно потенциала с целью уменьшения разности между вычисленными уровнями энергии и экспериментальными. Реализован один из возможных подходов к решению этой проблемы путем простейшей параметризации численного потенциала и решения обратной параметрической задачи [B3, п. 2.1].

Задача **об уточнении теоретического значения среднеквадратичного радиуса ядра гелия-6**, исследованная в [B3, п. 2.2], возникла в результате сравнения двух значений, полученных в рамках различных моделей этого ядра. В качестве опорной была выбрана кластерная модель ядра, и в рамках этой модели выполнялось сравнение двух значений среднеквадратичного радиуса. Была сформулирована обратная задача о вычислении параметров потенциала Вудса-Саксона, обеспечивающих минимальное отклонение сравниваемых теоретических значений среднеквадратичного радиуса от вычисленных, причем параметр, характеризующий энергию развала ядра, считался точным и задавался одинаковым в обоих случаях. По величине достигнутого минимума функционала делался вывод о точности теоретического значения среднеквадратичного радиуса ядра гелия-6.

Успешное численное исследование рассмотренных моделей физики и полученные результаты свидетельствуют об эффективности предложенного подхода.

В Главе 3 на примере задачи рассеяния на потенциале Вудса–Саксона, прямой и обратной, исследована методика решения прямой и, особенно, обратной задачи рассеяния на потенциалах, зависящих от параметров. Выбор потенциала Вудса–Саксона объясняется тем, что, во-первых, решение этих задач можно получить только численно, и, во-вторых, этот потенциал широко применяется в моделях теории ядра.

Для решения задачи рассеяния, то есть вычисления фазы рассеяния при заданных значениях импульса и параметров потенциала, используется программа SCAPES, вошедшая в комплекс DISCAPESM [B5]. Выполнены численные эксперименты для исследования зависимости фазы от параметров численной схемы, которые подтвердили теоретические оценки точности численных результатов.

Существующая математическая теория обратной задачи рассеяния для радиального уравнения Шредингера имеет ограниченную практическую применимость из-за требования полноты асимптотических данных волновых функций, а также из-за некорректности задачи. Распространение результатов этой теории на так называемые многоканальные задачи затруднительно. Предлагаемый в диссертации подход к решению обратной задачи в классе потенциалов, зависящих от параметров, позволяет ослабить эти ограничения. Идея подхода восходит к методам фазового анализа, развитого на основе теории квазипотенциалов, для обработки экспериментальных данных в физике частиц.

Отметим, что в задачах, рассмотренных выше, для минимизации функционалов, описывающих отклонение заданных характеристик модели от вычисленных, использовались простые процедуры, реализующие на языке системы аналитических вычислений и компьютерной алгебры MAPLE алгоритмы покоординатного спуска и одномерной минимизации. Однако, предварительные расчеты поиска минимума функционала в обратной параметрической задаче показали, что область применимости этих процедур ограничена как малыми размерами области изменения параметров потенциала, так и заданием порядка спуска по координатам, который требует ранжирования параметров по значимости. Поэтому для минимизации функционала был выбран метод Нелдера–Мида. Процедура на языке MAPLE, реализующая этот метод, была разработана и включена в комплекс программ DISCAPESM для численного решения обратной параметрической задачи рассеяния.

В главе представлены численные исследования влияния шума (вероятностных ошибок), наложенного на заданные фазы рассеяния, на точность восстановления параметров потенциала. Этот же вопрос рассматривается относительно влияния на уровни энергии потенциала. Выполнены численные исследования точности восстановления параметров потенциала в зависимости от числа заданных фаз рассеяния.

Исследования подтвердили эффективность разработанных алгоритмов и программ, возможность обобщения предложенного подхода на многоканальные задачи и применения полученных результатов в моделях обработки экспериментальных сечений реакций рассеяния.

В Заключении сформулированы основные результаты диссертации.

Основные результаты работы:

1. Дана постановка обратной параметрической спектральной задачи для математической модели, описываемой задачей Штурма–Лиувилля на отрезке или полуоси, зависящей от параметров модели. Задача состоит в минимизации функционала в заданной области изменения параметров, который представляет сумму квадратов отклонений заданных характеристик моделируемой физической системы от их теоретических значений, являющихся функционалами от решений соответствующей задачи Штурма–Лиувилля. Для каждой исследуемой в диссертации модели составлен конкретный вид функционала.

2. На основе НАМН разработана итерационная схема решения задачи рассеяния для радиального уравнения Шредингера. Задача ставится как граничная задача для волновой функции в достаточно удаленной точке с нелинейным условием, в котором неизвестная фаза рассеяния исключена. Фаза определяется после вычисления волновой функции с учётом её асимптотики.

3. Разработаны комплексы программ на языке системы аналитических вычислений и компьютерной алгебры MAPLE для решения обратной параметрической спектральной задачи. Прямые спектральные задачи решаются с помощью ньютоновских итерационных схем. Для минимизации функционала используются процедуры покоординатного спуска и Нелдера–Мида.

4. С помощью разработанных вычислительных схем и комплексов программ проведено численное исследование параметров моделей следующих физических систем:

4.1 Вычислены параметры градиентного оптического волновода с асимметричным экспоненциальным профилем показателя преломления, обеспечивающие приближенную эквидистантность спектра волноводных мод. Выполнена модификация профиля, обеспечивающая более высокую точность эквидистантности спектра.

4.2 Выполнена коррекция потенциала молекулы водорода для получения более высокой точности воспроизведения экспериментальных значений уровней энергии.

4.3 Проведено сравнение и уточнение теоретических значений среднеквадратичного радиуса ядра гелия–6, вычисленных другими авторами в двух различных моделях ядра.

4.4 Проведено численное исследование обратной задачи рассеяния на потенциале Вудса–Саксона. Исследование включает оценку точности восстановления параметров в зависимости от числа заданных фаз рассеяния и величины моделируемого шума, наложенного на них. Выполнено численное исследование влияния ошибок в заданных фазах рассеяния на собственные значения дискретного спектра.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- В1. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., **Тхак В.Ч.** *SLIPM — программа на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона* // Вестник Российского университета дружбы народов, Серия "Математика. Информатика. Физика". ISSN 0869-8732. – 2010. – № 2(2). – С. 90–98.

- В2. **Во Чонг Тхак**, Пузынина Т.П. *SLIP4M – программа для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля* // Программные продукты и системы. ISSN 0236-235X. – 2011. – № 3. – С. 75–80.
- В3. Пузынина Т.П., **Во Чонг Тхак**. *Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шредингера* // Информационные технологии и вычислительные системы. ISSN 2071-8632. – 2012. – № 2. – С. 46–53.
- В4. Пузынина Т.П., **Во Чонг Тхак**. *Численное исследование параметров модели градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод* // Вестник Российского университета дружбы народов, Серия "Математика. Информатика. Физика". ISSN 0869-8732. – 2012. – № 3. – С. 79–86.
- В5. Пузынина Т.П., **Во Чонг Тхак**. *О численном решении прямой и обратной задачи рассеяния на сферически симметричных потенциалах, зависящих от параметров* // Вестник Российского университета дружбы народов, Серия "Математика. Информатика. Физика". ISSN 0869-8732. – 2012. – № 4. – С. 73–86 .
- В6. Puzynin I.V., Puzynina T.P., **Thach V.T.** *SLIPM – a MAPLE Code for the Numerical Solving of Sturm–Liouville Partial Problem Basing on the Continuous Analog of Newton’s Method* // Mathematical Modeling and Computational Physics (MMCP‘2009). Book of Abstracts of the International Conference (Dubna, July 7–11, 2009). – Dubna: JINR, 2009. – 228 p. ISBN 978-5-9530-0215-8. – Pp. 128. <http://mmcp2009.jinr.ru>
- В7. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., **Тхак В.Ч.** *SLIPM – программа на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона. I. Алгоритм* // – Препринт ОИЯИ, P11-2010-2, Дубна, – 2010, С. 9. [http://www1.jinr.ru/Preprints/2010/002\(P11-2010-2\).pdf](http://www1.jinr.ru/Preprints/2010/002(P11-2010-2).pdf)
- В8. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., **Тхак В.Ч.** *SLIPM – программа на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона. II. Программная реализация* // Тезисы докладов. XLVI Всероссийская конференция по проблемам математики, информатики, физики и химии. 19–23 апреля 2010. РУДН. – М.: РУДН, 2010. – 155 с. ISBN 978-5-209-03449-0. – С. 98–100.
- В9. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., **Тхак В.Ч.** *SLIPM – программа на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона. II. Программная реализация* // – Препринт ОИЯИ, P11-2010-95, Дубна, – 2010, С. 8. [http://www1.jinr.ru/Preprints/2010/095\(P11-2010-95\).pdf](http://www1.jinr.ru/Preprints/2010/095(P11-2010-95).pdf)
- В10. **Во Чонг Тхак**. *Схемы численного решения прямой и обратной задачи Штурма–Лиувилля, зависящей от параметров* // Тезисы докладов. Современные проблемы прикладной математики и информатики, 22–27 августа 2012. Дубна, Россия. – Изд-во Дубна: ОИЯИ, 2012. – 230 с. ISBN 978-5-9530-0337-7. – С. 70–73. <http://mpamcs2012.jinr.ru>

Во Чонг Тхак (Вьетнам)

Численное исследование моделей волновой и квантовой физики в постановке обратной параметрической спектральной задачи

В диссертации предложен и численно реализован подход к исследованию математических моделей волновой и квантовой физики, которые могут быть сведены к частичной задаче Штурма–Лиувилля на конечном интервале или к задаче дискретного или непрерывного спектра для радиального уравнения Шредингера. Численно исследованы характеристики физических систем в рамках следующих математических моделей, которые приведены к обратной параметрической спектральной задаче: 1. Модель градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод. 2. Коррекция потенциала для расчета спектра молекулы водорода. 3. Уточнение среднеквадратичного радиуса ядра гелия-6. 4. Обратная задача рассеяния на сферически симметричных потенциалах, зависящих от параметров.

Обратная спектральная задача сводится к задаче минимизации по параметрам функционала, представляющего собой сумму квадратов отклонений заданных характеристик моделируемой физической системы от их теоретических значений. Для каждой исследуемой в диссертации модели составлен конкретный вид функционала. Для минимизации функционала используются процедуры покоординатного спуска и Нелдера–Мида. Для решения прямых спектральных задач используются итерационные схемы на основе обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН).

Vo Trong Thach (Vietnam)

Numerical investigation of models of wave and quantum physics in the formulation of inverse parametric spectral problem

In the thesis we have proposed and numerically realized an approach to investigate mathematical models of wave and quantum physics, which can be reduced to a partial Sturm–Liouville problem on a finite interval or to a problem of discrete or continuous spectrum of the radial Schrödinger equation. We have investigated numerically the characteristics of physical systems of the following mathematical models, which are conducted to inverse parametric spectral problem: 1. Model of gradient optical waveguide with equidistant spectrum of waveguide modes. 2. Correction of potential for computing the spectrum of molecular hydrogen. 3. Adjustment of the root mean square radius of the nucleus ${}^6\text{He}$. 4. Inverse scattering problem on parameter-dependent spherically symmetric potentials.

The inverse spectral problem is reduced to the minimization problem with respect to the parameters of the functional, which is formulated by the sum of square of deviations between the given values of the characteristics of physical systems and the corresponding theoretical ones. Each of the investigated models in the thesis was formulated by a specific type of the functional. The functional is minimized by methods of the coordinate descent and Nealder–Mead. The direct spectral problems have been solved by iterative schemes, which are based on the generalized continuous analog of Newton’s method (CANM).