

О численном решении прямой и обратной задачи рассеяния на сферически симметричных потенциалах, зависящих от параметров

Т. П. Пузынина, Во Чонг Тхак

*Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д.6, г.Дубна, Московская область, Россия, 141980*

Задача рассеяния для радиального уравнения Шрёдингера, в отличие от постановки её как задачи Коши, формулируется как граничная задача для волновой функции с нелинейным асимптотическим условием, в котором неизвестная фаза рассеяния исключена. Фаза определяется после вычисления с помощью итераций на основе непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) волновой функции с учётом её асимптотики.

Обратная задача для уравнения с потенциалом, зависящим от параметров, сводится к минимизации по параметрам функционала, представляющего собой сумму квадратов отклонений заданных значений фаз от вычисленных.

Особенности вычислительных схем продемонстрированы решением задачи с потенциалом Морзе, имеющей аналитическое решение, и задачи с потенциалом Вудса–Саксона.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, задача рассеяния, нелинейная граничная задача, итерации НАМН, потенциалы, параметры, обратная задача, функционал, минимизация.

1. Введение

Задача рассеяния на сферически симметричном потенциале, как прямая, так и обратная, является классической в квантовой механике. Ей посвящено большое количество исследований в таких областях, как математическая физика и анализ, физические приложения, а также разработка вычислительных схем решения.

Прямая задача рассеяния для радиального уравнения Шрёдингера

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

где $k^2 = 2ME$, M — приведённая масса, $E > 0$ — энергия столкновения, $L = 0, 1, 2, \dots$ — орбитальный момент, $V(x)$ — потенциал взаимодействия, обеспечивающий существование волновой функции с граничными условиями [1]

$$y(0) = 0, \quad (2)$$

$$y(x) \rightarrow A \sin \left(kx - \frac{L\pi}{2} + \delta_L \right), \quad x \rightarrow \infty \quad (3)$$

формулируется следующим образом. Для заданного значения k требуется найти значение фазы рассеяния $\delta_L = \delta_L(k)$, определяемое асимптотикой (3), где A — амплитуда.

Сама постановка задачи рассеяния определила «традиционный» подход [2, С. 10] к её численному решению. Для уравнения (1) в дополнение к условию (2) ставится условие на производную

$$y'(x)|_{x=0} = a, \quad (4)$$

Статья поступила в редакцию 25 сентября 2012 г.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 10-01-00467-а и 12-01-00396-а. Авторы благодарят И. В. Пузынина за помощь и поддержку.

где a — константа, определяющая значение амплитуды A в выражении (3). Задача Коши (1), (2), (4) решается численно в интервале $0 < x \leq x_{\max}$, где $x_{\max} \gg 1$ принадлежит асимптотической области, а затем искомое значение $\delta_L(k)$ определяется путём сравнения вычисленной волновой функции с асимптотикой (3). Волновые функции непрерывного спектра могут представлять интерес для построения базисов разложения решений задач размерности больше единицы, с целью понижения их размерности (см., например, [3]).

Отход от «традиций» был связан с переходом от радиального уравнения Шрёдингера (1), волновая функция которого при больших значениях энергии E имеет высокую частоту, к преобразованным уравнениям типа фазовых [2, 4], в которых выделялись достаточно плавно изменяющиеся фазовая и амплитудная составляющие. Нелинейное дифференциальное уравнение первого порядка для фазовой функции $\delta_L(x)$ с начальным условием $\delta_L(0)=0$ и заданным значением k даёт в пределе $x \rightarrow \infty$ искомое значение δ_L , согласованное с асимптотикой (3). Для рассматриваемой задачи преимущество такого подхода перед традиционным заключается в численном решении задачи Коши на достаточно протяжённом интервале $0 < x \leq x_{\max}$ для более плавно изменяющейся фазовой функции. Отметим, что идеально подходящий для одного радиального уравнения Шрёдингера метод фазовых функций при реализации в многоканальных задачах рассеяния представляет очень сложную нелинейную проблему [2, С. 173].

Поэтому разработка численного метода решения задачи (1)–(3), устойчивого в широком диапазоне изменения энергии E и естественно распространяемого на многоканальную задачу рассеяния, представляет несомненный интерес.

В отличие от математической постановки обратной задачи квантовой теории рассеяния, для которой решены вопросы существования и единственности решения (см., например, [5, С. 200–223]), предлагается упрощённый вариант, но более приближенный, по нашему мнению, к физической постановке. В этой постановке предполагается, что потенциал $V(x)$ в уравнении (1) дополнительно зависит от параметров квантовой системы. Восстановить потенциал $V(x)$ в рамках выбранного параметрического семейства $V(x, \bar{p})$, где \bar{p} — вектор параметров из заданной области Ω , по заданному набору значений фаз рассеяния $\delta_L^* = \{\delta_L^*(k_i), i = 1, 2, \dots, m\}$ означает найти вектор параметров \bar{p}^* , для которого достигается минимум функционала

$$\Phi(\bar{p}) = \sum_{i=1}^m (\delta_L^*(k_i) - \delta_L(k_i, \bar{p}))^2, \quad (5)$$

где $\delta_L(k_i, \bar{p})$ — значение найденной фазы рассеяния в задаче (1)–(3) с выбранным потенциалом $V(x, \bar{p})$, $\bar{p} \in \Omega$ при $k = k_i$ и заданном значении L . В частности, потенциалом $V(x, \bar{p})$ может быть один из модельных потенциалов, применяемых в различных разделах квантовой механики (например, [6]).

Отметим, что разработан численный метод решения обратной задачи рассеяния в постановке, близкой [5], основанный на формулировке задачи в виде нелинейного операторного уравнения и его решении на основе НАМН [7]. Результатом восстановления потенциала этим методом является его представление в виде таблицы значений. Для дальнейшего использования этого представления в конкретной модели физики желательно его приближение соответствующим модельным потенциалом, то есть подбором его параметров.

Вычислительная схема, основанная на минимизации функционала (5), является дальнейшим развитием подхода к численному исследованию спектральных задач, зависящих от параметров, который представлен в [8, 9]. Численная реализация решения обратной задачи в предлагаемой постановке не приводит, по сравнению с методом [7], к решению некорректной задачи. Относительный минимум функционала (5) всегда существует в заданной области Ω изменения параметров

\bar{p} . По его величине и близости к абсолютному значению можно судить как о соответствии выбранного потенциала и назначенной области Ω изучаемой квантовой модели, так и о точности восстановления параметров потенциала.

В работе дана ньютоновская итерационная схема решения прямой задачи рассеяния в постановке нелинейной граничной задачи и численно исследована её точность. Рассмотрены особенности численного решения обратной задачи для потенциала, зависящего от параметров, которая приводится к минимизации функционала (5). На примерах задач с потенциалами Морзе и Вудса–Саксона [6] проверена точность решения в зависимости от числа m заданных фаз рассеяния и от их ошибок.

2. Задача рассеяния как нелинейная граничная задача

При приближенном решении задачи рассеяния (1)–(3) ограничиваются конечным интервалом $0 \leq x \leq x_{\max}$, где $x_{\max} \gg 1$ — точка в асимптотической области волновой функции $y(x)$. В этой точке асимптотическое условие (3) приближённо заменяется условием

$$y(x_{\max}) = A \sin \left(kx_{\max} - \frac{L\pi}{2} + \delta_L \right). \quad (6)$$

Условие (6) можно преобразовать к нелинейному условию на волновую функцию $y(x)$, не зависящему явно от неизвестных величин $\delta_L = \delta_L(k)$ и $A = A(k)$, которые являются объектом изучения в задаче рассеяния. Для этого воспользуемся идеей работы [10]. Из условия (6) следует, что

$$y'(x_{\max}) = kA \cos \left(kx_{\max} - \frac{L\pi}{2} + \delta_L \right). \quad (7)$$

Умножив условие (6) на k , возведя оба условия (6) и (7) в квадрат, сложив их и воспользовавшись тригонометрическим тождеством, получим

$$[k^2 y(x)^2 + y'(x)^2]_{x=x_{\max}} = A^2 k^2.$$

Введём нормировку волновой функции $y(x)$ таким образом, чтобы $A^2 = 1$. Тогда получаем для $y(x)$ граничное условие

$$[k^2 y(x)^2 + y'(x)^2 - k^2]_{x=x_{\max}} = 0. \quad (8)$$

Уравнение (1) на интервале $0 < x < x_{\max}$ с граничными условиями (2) и (8) представляет собой нелинейное функциональное уравнение при заданных значениях k и L

$$\varphi(y) = 0. \quad (9)$$

Здесь $\varphi(y)$ — нелинейная функция, состоящая из трёх компонент: $\varphi^{(1)}(y)$ — левая часть уравнения (1); $\varphi^{(2)}(y)$ — левая часть условия (2), которое, для общности, может быть поставлено в любой заданной точке $x = x_{\min} < x_{\max}$; $\varphi^{(3)}(y)$ — левая часть условия (8). Функция $\varphi(y)$ переводит элементы $y(x) \in C^2[x_{\min}, x_{\max}]$ в элементы пространства $C[x_{\min}, x_{\max}] \times R^2$. Для решения уравнения (9) применяется итерационная ньютоновская схема, полученная на основе НАМН [11].

Один шаг с номером j итерационной схемы с известным приближением $y_j(x)$ состоит в следующем.

1) Решить линейную граничную задачу относительно итерационной поправки $v_j(x)$

$$\frac{d^2}{dx^2}v_j(x) + \left[k^2 - \frac{L(L+1)}{x^2} - V(x) \right] v_j(x) = w_j(x), \quad (10)$$

$$v_j(x_{\min}) = -y_j(x_{\min}), \quad (11)$$

$$[2k^2 y_j(x)v_j(x) + 2y'_j(x)v'_j(x)]_{x=x_{\max}} = g_j(x_{\max}), \quad (12)$$

где

$$w_j(x) = - \left\{ \frac{d^2}{dx^2}y_j(x) + \left[k^2 - \frac{L(L+1)}{x^2} - V(x) \right] y_j(x) \right\},$$

$$g_j(x_{\max}) = -[k^2 y_j(x)^2 + y'_j(x)^2 - k^2]_{x=x_{\max}}.$$

2) Найти новое приближение $y_{j+1}(x)$ по формуле

$$y_{j+1}(x) = y_j(x) + \tau_j v_j(x). \quad (13)$$

Варианты алгоритмов вычисления итерационного параметра τ_j в зависимости от невязки

$$\varepsilon_j = \|w_j(x)\| \quad (14)$$

рассмотрены в работе [12].

3) Проверить условие окончания итераций

$$\varepsilon_{j+1} < \varepsilon, \quad (15)$$

где $\varepsilon > 0$ — заданное малое число, и в зависимости от результата продолжить или завершить итерации.

После вычисления волновой функции $y(x)$, удовлетворяющей условию (15), можно различными способами определить значение δ_L . Рассмотрим один из них.

Из условий (6) и (7) получим соотношение

$$y(x_{\max})/y'(x_{\max}) = \frac{1}{k} \operatorname{tg} \left(kx_{\max} - \frac{L\pi}{2} + \delta_L \right), \quad (16)$$

которое является уравнением для определения δ_L . Из него следует выражение для δ_L

$$\delta_L = \operatorname{arctg}(ky(x_{\max})/y'(x_{\max})) - kx_{\max} + \frac{L\pi}{2}. \quad (17)$$

Как отмечено в [2, С. 16], соотношение (3) для определения фазы неоднозначно с точностью до $\operatorname{mod} \pi$. Поэтому значение δ_L (17) должно быть приведено к интервалу $-\frac{\pi}{2} < \delta_L < \frac{\pi}{2}$.

Для численного решения граничной задачи (10)–(12) используются процедуры, реализованные в программе SLIPH4M [12] и базирующиеся на разностной аппроксимации этой задачи на равномерной сетке узлов с шагом h отрезка $[x_{\min}, x_{\max}]$ с точностью $O(h^4)$. Для решения разностной задачи используется схема прогонки [12]. При реализации итерационного процесса 1)–3) в условиях (14), (15) используются соответствующие нормы для сеточных функций. В дальнейшем, если не будет специально оговорено, рассматриваются дискретные аппроксимации уравнений и их решений.

Разработана отдельная процедура SCAPES (**s**cattering **p**roblem for the **e**quation of **S**chrödinger) в системе MAPLE для численного решения задачи (1), (2), (8), (16), (17), аппроксимирующей задачу рассеяния (1)–(3). Отметим, что в системе MAPLE для решения уравнения (16) можно использовать процедуру `fsolve`, автоматически вычисляющую δ_L в нужном интервале.

3. Численные примеры (задача рассеяния)

3.1. Рассеяние на потенциале Морзе

Уравнение (1) при $L = 0$ с потенциалом Морзе [6]

$$V(x) = 2MD \left(e^{-2\alpha(x-x_\alpha)} - 2e^{-\alpha(x-x_\alpha)} \right) \quad (18)$$

имеет на оси $-\infty < x < \infty$ аналитическое решение непрерывного спектра ($k > 0$) [13] с асимптотикой

$$y(x) \rightarrow 0, x \rightarrow -\infty, \quad (19)$$

$$y(x) \rightarrow \sin(kx + \delta), x \rightarrow \infty, \quad (20)$$

$$\delta = -kx_\alpha - s \ln(2d) + \omega, \quad (21)$$

где $d = \sqrt{2MD}/\alpha$, $s = k/\alpha$, $\omega = \arg \Gamma(1 + 2is) + \arg(-d + 1/2 - is)$, $\Gamma(Z)$ — гамма-функция.

В работе [14] при значениях параметров потенциала (18)

$$M = 8,876, D = 0,104, \alpha = 0,67, x_\alpha = 2,09 \quad (22)$$

выполнен анализ точности предложенной там многопараметрической ньютоновской схемы в зависимости от параметров дискретной аппроксимации x_{\min} , x_{\max} и h .

Здесь приводятся результаты аналогичных тестов для подтверждения точности обсуждаемой вычислительной программы SCAPES. По сравнению с работой [14] для аппроксимации задачи (1), (18)–(20) выбран более широкий интервал с границами $x_{\min} = -5$, $x_{\max} = 45$. При шаге равномерной разностной сетки $h = 0,1$ для сравнительно большого значения $k = 3, 5$, дающего высокую осцилляцию волновой функции (см. рис. 2), относительная ошибка вычисления δ фазы рассеяния (17) по сравнению с аналитическим значением (21) составляет 0,3. В дальнейшем параметр h уточняется с целью уменьшения ошибки.

Для заданного значения k из интервала $10^{-4} \leq k \leq 3,5$, более широкого, чем в работе [14], волновая функция $y(x)$ вычисляется с помощью итераций 1)–3). При начальном приближении $y_0(x) = \sin kx$, для которого начальная невязка (14) в равномерной сеточной норме лежит в интервале $10 \leq \varepsilon_0 \leq 21 * 10^3$, и при вычислении итерационного параметра τ_j ($j = 1, 2, \dots$) по формуле [12]

$$\tau_0 \leq \tau_j = (\varepsilon_{j-1}/\varepsilon_j)\tau_{j-1} \leq 1, \tau_0 = \frac{\varepsilon_0}{2\varepsilon_1(\tau = 1)} \leq 1$$

за ~ 4 итерации достигался уровень окончательной невязки $\sim (10^{-17} - 10^{-11})$, если $\varepsilon = 10^{-10}$ в условии (15). Характер сходимости приближений $y_j(x)$ при $k = 0, 1$ изображён на рис. 1. На рис. 2 показана сильно осциллирующая функция $y(x)$ при $k = 3, 5$.

Численное исследование сходимости фаз рассеяния $\delta(k)$ для различных k , вычисленных по формулам (16), (17) на последовательности вдвое сгущающихся сеток узлов, подтверждает точность их вычисления $O(h^4)$ и сходимость к аналитическим значениям $\delta_{an}(k)$ (21). Результаты приведены в табл. 1.

Отметим, что даже для $k = 3, 5$ отношение Рунге

$$\sigma = (\delta(h) - \delta(h/2))/(\delta(h/2) - \delta(h/4)) \approx 16,$$

что соответствует точности $O(h^4)$ и позволяет выполнить, если необходимо, уточнение результата [15].

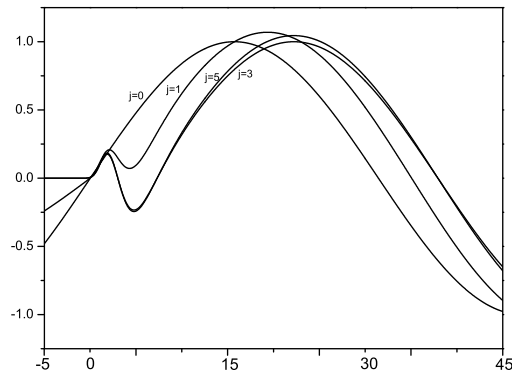


Рис. 1. Сходимость приближений $y_j(x)$ ($j = 0, 1, 3, 5$) к волновой функции $y(x)$ при $k = 0, 1$ для потенциала Морзе

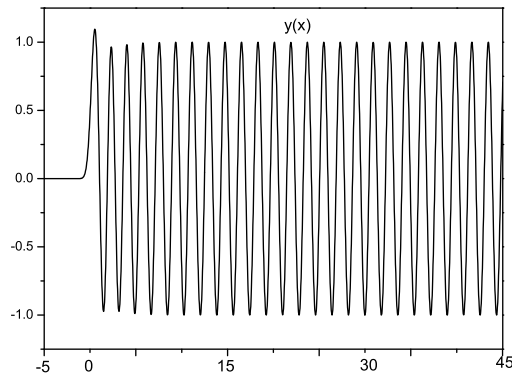


Рис. 2. Волновая функция $y(x)$ при $k = 3, 5$ для потенциала Морзе

3.2. Рассеяние на потенциале Вудса-Саксона

В работе [16] потенциал Вудса-Саксона [6]

$$V(x) = -\frac{V_0}{1 + \exp(x - R/a)} \quad (23)$$

при значениях параметров

$$V_0 = 1, 0, \quad R = 0, 5, \quad a = 0, 11 \quad (24)$$

рассматривается как пример решения обратной задачи рассеяния, которая сводится к задаче Коши для нелинейных уравнений типа уравнений Милна относительно промежуточных характеристик, по которым восстанавливается потенциал. В примере с $L = 0$ при $0 \leq x \leq 1, 5$ данные рассеяния, представленные специальными функциями, заданы для k в интервале $0 < k \leq 40$ с шагом $h_k = 0, 5$.

Для этого примера в прямой задаче рассеяния (1)–(3), не имеющей аналитического решения, с помощью процедуры SCAPES выполнен численный анализ зависимости фазы рассеяния δ от параметров разностной аппроксимации x_{\max}

Таблица 1

Фазы рассеяния $\delta(k)$ в зависимости от шага h разностной сетки и их сравнение с $\delta_{an}(k)$

k	$h = 0,1$	$h/2$	$h/4$	δ_{an}
10^{-4}	$-6,5593289 \cdot 10^{-4}$	$-6,5593447 \cdot 10^{-4}$	$-6,5593457 \cdot 10^{-4}$	$-6,5593453 \cdot 10^{-4}$
0,08	-0,5209887	-0,5209899	-0,5209900	-0,5209900
0,10	-0,6486693	-0,6486708	-0,6486709	-0,6486709
0,14	-0,8989070	-0,8989089	-0,8989090	-0,8989090
0,2	-1,2583225	-1,2583250	-1,2583252	-1,2583252
0,5	0,4214643	0,4214592	0,4214588	0,4214588
0,7	-0,2908879	-0,2908941	-0,2908945	-0,2908945
1,0	-1,0955871	-1,0956028	-1,0956038	-1,0956038
2,0	0,6494352	0,6492372	0,6492250	0,6492242
3,0	0,3038261	0,3013071	0,3011498	0,3011392
3,5	0,3722243	0,3656246	0,3652295	0,3652037

и h с целью определения их значений, необходимых для достижения требуемой точности.

Результаты исследования зависимости значений δ от x_{\max} представлены в табл. 2. Интервал изменения k , $0 < k \leq 40$ разделен на три подынтервала, в каждом из которых назначено своё значение шага h разностной сетки, поскольку при увеличении k шаг h должен уменьшаться, чтобы обеспечить точность результата.

Таблица 2

Зависимость фазы рассеяния $\delta(k)$ для потенциала Вудса-Саксона от значения x_{\max} ($h = 0,005$ для $k \in [0, 01; 10]$; $h = 0,0025$ для $k \in [12, 20]$; $h = 0,00125$ для $k \in [25, 40]$)

k	$x_{\max}=1,3$	$x_{\max}=1,4$	$x_{\max}=1,5$	k	$x_{\max}=1,3$	$x_{\max}=1,4$	$x_{\max}=1,5$
0,01	0,000688	0,000689	0,000689	12	0,020848	0,020849	0,020850
0,5	0,033303	0,033342	0,033359	15	0,016684	0,016686	0,016687
1	0,060681	0,060725	0,060743	20	0,012520	0,012521	0,012521
2	0,086726	0,086729	0,086729	25	0,010018	0,010019	0,010019
4	0,066107	0,066113	0,066114	30	0,008349	0,008350	0,008351
6	0,041650	0,041657	0,041658	35	0,007157	0,007158	0,007158
8	0,031039	0,031044	0,031045	40	0,006263	0,006263	0,006265
10	0,025015	0,025018	0,025018				

Табл. 3 демонстрирует сходимость значений δ , вычисленных на трёх вдвое сгущающихся сетках.

На рис. 3 изображена зависимость вычисленной фазы рассеяния $\delta(k)$ от $k \in [0, 40]$. Отмечены значения фазы, которые будут использованы при решении обратной задачи рассеяния.

Анализ данных табл. 2 и 3 позволяет сделать вывод, что выбор граничной точки $x_{\max} = 1,5$ и шага разностной сетки $h = 0,00125$ даёт ошибку вычисления фазы $\delta(k)$ порядка 10^{-7} почти на всем интервале изменения k , за исключением окрестности $k = 40$, где оценка ошибки $\delta(k)$ порядка 10^{-6} . Значения отношения Рунге $\sigma \approx 16$ (табл. 3) подтверждают порядок сходимости разностного решения $O(h^4)$.

Таблица 3

Зависимость фазы рассеяния $\delta(k)$ для потенциала Вудса-Саксона от шага h разностной сетки при $x \in [0; 1, 5]$. (Отношение Рунге $\sigma = (\delta(h) - \delta(h/2))/(\delta(h/2) - \delta(h/4))$)

k	$h = 0,0025$	$h/2$	$h/4$	σ
0,01	0,0006891	0,0006891	0,0006891	15,7
5	0,0515811	0,0515811	0,0515811	16,2
10	0,0250188	0,0250188	0,0250188	15,8
15	0,0166870	0,0166867	0,0166867	16,1
20	0,0125214	0,0125212	0,0125212	17,9
25	0,0100198	0,0100192	0,0100191	16,0
30	0,0083562	0,0083506	0,0083502	16,4
35	0,0071591	0,0071579	0,0071579	17,7
40	0,0062819	0,0062646	0,0062635	16,1

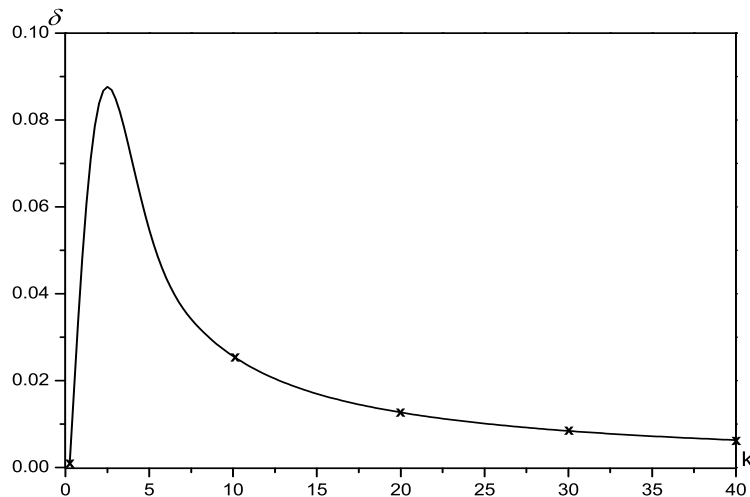


Рис. 3. Зависимость фазы рассеяния δ от $k \in [0, 01; 40]$ для потенциала Вудса-Саксона (отмечены значения фазы, которые будут использоваться для решения обратной задачи)

4. Обратная задача рассеяния для потенциала, зависящего от параметров

Рассмотрим схему вычисления параметров \bar{p}^* потенциала $V(x, \bar{p})$ в задаче (1)–(3), обеспечивающих минимум функционала (5) в заданной области $\bar{p} \in \Omega$.

Для вычисления значений $\delta_L(k_i, \bar{p})$ при заданных L , k_i и \bar{p} используется процедура SCAPES.

Ранее [8,9] для минимизации квадратичных функционалов, подобных (5), применялись простые процедуры, последовательно реализующие в системе MAPLE алгоритмы покоординатного спуска и одномерной минимизации на основе аналога метода парабол. Однако, предварительные расчёты рассматриваемой задачи показали, что область применимости этих процедур ограничена как малыми размерами области Ω , включающей априорную оценку \bar{p}^* , так и заданием порядка спуска по координатам, который требует ранжирования компонент вектора \bar{p} по

их значимости. Поэтому здесь для минимизации функционала (5) был выбран метод Нелдера–Мида [17], для реализации которого в системе MAPLE разработана соответствующая процедура.

Отметим, что выбранный метод не использует гладкость функционала (5) и поэтому может быть применён в случаях, когда данные $\bar{\delta}_L^*$ зашумлены, что важно в задачах, связанных с обработкой экспериментальных сечений рассеяния. Кроме того, можно предположить, что в задаче (1)–(3) область изменения параметров $\bar{p} \in \Omega$ достаточно широка и содержит все \bar{p} , требуемые для реализации метода.

Численное исследование предложенной схемы выполняется на примерах с модельными потенциалами Морзе (18) и Вудса–Саксона (23) при $L = 0$. Для однообразия будем считать, что эти потенциалы зависят от трёх параметров и введём следующие обозначения.

Для потенциала Морзе: $p_1 = 2MD$, $p_2 = \alpha$, $p_3 = x_\alpha$, а для потенциала Вудса–Саксона $p_1 = V_0$, $p_2 = R$, $p_3 = a$. Учитывая значения параметров (22) и (24) в примерах прямой задачи рассеяния (1)–(3), назовём следующие области изменения параметров в примерах решения обратной задачи рассеяния.

Для потенциала Морзе: значения параметров (22)

$$p_1^* = 1,846208, p_2^* = 0,67, p_3^* = 2,09, \quad (25)$$

область $\Omega = \{1,5 \leq p_1 \leq 2,5, 0,4 \leq p_2 \leq 0,9, 1,8 \leq p_3 \leq 2,5\}$.

Для потенциала Вудса–Саксона: значения параметров (24)

$$p_1^* = 1,0, p_2^* = 0,5, p_3^* = 0,11, \quad (26)$$

область $\Omega = \{0,3 \leq p_1 \leq 1,7, 0,1 \leq p_2 \leq 1,0, 0,04 \leq p_3 \leq 0,4\}$.

При использовании процедуры, реализующей метод Нелдера–Мида, начальный симплекс строился на основе случайной выборки из области Ω , что для рассматриваемых примеров обеспечивало успешную минимизацию функционала (5).

Для каждого из примеров численное исследование состоит из следующих шагов.

1. Проверка правильности работы схемы и определение минимального числа m задаваемых данных $\delta^*(k_i)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) в функционале (5), необходимых для восстановления параметров с приемлемой точностью.

В качестве задаваемых данных $\bar{\delta}^*$ используются данные, полученные при решении прямой задачи (1)–(3) с параметрами \bar{p}^* . Близость восстановленных параметров \bar{p}_r к \bar{p}^* позволяет судить о правильности работы схемы. Как показали численные эксперименты, необходимо не менее $m = 5$ данных $\delta^*(k_i)$, равномерно выбранных из интервала $k_{\min} \leq k \leq k_{\max}$.

2. Моделирование различных уровней зашумлённости задаваемых данных $\delta^*(k_i)$ ($i = 1, 2, \dots, 5$) и оценка влияния шума на ошибки при восстановлении параметров потенциала.

Зашумленные данные $\tilde{\delta}^*(k_i)$ вычисляются по формуле

$$\tilde{\delta}^*(k_i) = \delta^*(k_i) + \xi_i(P), \quad (27)$$

где $\xi_i(P) = \frac{\delta^*(k_i)}{P} * \eta$, η — случайное число, равномерно распределённое на отрезке $[-1, 1]$. Рассматриваются значения $P = 100, 50, 20, 10$.

3. Численное исследование для примера с потенциалом Морзе, имеющего аналитическое решение как в непрерывном, так и в дискретном спектре, влияния ошибок восстановления параметров потенциала по зашумленным данным $\delta^*(k_i)$ ($i = 1, 2, \dots, 5$) на решение в дискретном спектре.

Для потенциала Морзе с параметрами [18] $p_1^* = 0,989590$, $p_2^* = 0,67$, $p_3^* = 2,15$ и с областью $\Omega = \{0,7 \leq p_1 \leq 1,2, 0,4 \leq p_2 \leq 1,0, 1,9 \leq p_3 \leq 2,4\}$ в дискретном спектре имеется собственное значение $-k^2 = \lambda = 0,4353115$ для безузловой собственной функции.

5. Численные примеры (задача восстановления параметров потенциала по заданному набору фаз рассеяния)

Основные результаты численного исследования обратной задачи рассеяния приведены в табл. 4–6.

Таблица 4
Зависимость восстановленных параметров потенциала Морзе от уровня шума, накладываемого на заданный набор фаз рассеяния

1	p^* 2	\bar{p}_r 3	\bar{p}_r 4	\bar{p}_r 5	\bar{p}_r 6	\bar{p}_r 7
p_1	1,846208	1,846207	1,845170	1,866087	1,867242	1,926622
p_2	0,67	0,669999	0,669372	0,682651	0,670356	0,677000
p_3	2,09	2,090002	2,091792	2,052741	2,086494	2,069503
	k	δ^*	$\delta^* + \xi(100)$	$\delta^* + \xi(50)$	$\delta^* + \xi(20)$	$\delta^* + \xi(10)$
k_1	0,01	-0,065586	-0,066110	-0,064724	-0,064873	-0,064805
k_2	0,875	-0,792180	-0,790953	-0,805576	-0,771712	-0,726868
k_3	1,75	0,869797	0,867547	0,882323	0,896610	0,912000
k_4	2,625	0,347130	0,349594	0,343504	0,340885	0,349504
k_5	3,5	0,365625	0,365282	0,364212	0,372549	0,341743
Φ		8,04E-13	1,23E-05	1,54E-04	3,79E-04	5,27E-05
j		106	107	117	117	126
t		20,12	20,49	22,97	22,94	21,18

Таблица 5
Зависимость восстановленных параметров потенциала Вудса–Саксона от уровня шума, накладываемого на заданный набор фаз рассеяния

1	p^* 2	\bar{p}_r 3	\bar{p}_r 4	\bar{p}_r 5	\bar{p}_r 6	\bar{p}_r 7
p_1	1,0	1,0001	1,0110	0,8815	1,1292	0,8855
p_2	0,5	0,4999	0,4930	0,5687	0,4441	0,5709
p_3	0,11	0,1100	0,1148	0,0599	0,0206	3,19E-6
	k	δ^*	$\delta^* + \xi(100)$	$\delta^* + \xi(50)$	$\delta^* + \xi(20)$	$\delta^* + \xi(10)$
k_1	0,01	0,000689	0,000693	0,000687	0,000685	0,000644
k_2	10	0,025019	0,024951	0,025365	0,023988	0,027134
k_3	20	0,012521	0,012486	0,012441	0,012825	0,013423
k_4	30	0,008351	0,008281	0,008482	0,008380	0,007914
k_5	40	0,006265	0,006325	0,006259	0,006060	0,006144
Φ		1,75E-15	8,10E-09	2,45E-08	1,55E-07	3,33E-07
j		142	123	145	149	134
t		21,85	20,29	23,83	23,66	21,81

В табл. 4 для потенциала Морзе (18) представлена зависимость восстановленных значений параметров от уровня шума (27), накладываемого на заданные значения фаз рассеяния. В столбце 2 приведены исходные значения параметров p^* (25), по которым для набора $k = \{k_i\}$, $i = \overline{1,5}$ вычислены фазы рассеяния $\delta^* = \{\delta^*(k_i)\}$ в задаче (1)–(3) (имеется аналитическое выражение (21)). В столбце 3 даны значения этих фаз и результаты восстановления параметров \bar{p}_r потенциала путём минимизации функционала (5). В столбцах 4–7 представлены результаты восстановления параметров потенциала по зашумленному набору фаз рассеяния (27) при возрастающем уровне шума $\xi(P)$, $P = 100, 50, 20, 10$. В последней строке

Таблица 6

**Зависимость восстановленных параметров потенциала Морзе и
собственного значения уравнения Шрёдингера (1) от уровня шума,
накладываемого на заданный набор фаз рассеяния**

1	p^*	2	\bar{p}_r	3	\bar{p}_r	4	\bar{p}_r	5	\bar{p}_r	6	\bar{p}_r	7	\bar{p}_r
p_1	0,989590	0,989592	0,993318	0,983266	0,971327	1,066240							
p_2	0,67	0,670001	0,671261	0,667902	0,663955	0,695897							
p_3	2,15	2,149997	2,144901	2,159800	2,171563	2,056954							
	k	δ^*	$\delta^* + \xi(100)$	$\delta^* + \xi(50)$	$\delta^* + \xi(20)$	$\delta^* + \xi(10)$							
k_1	0,01	0,712710	0,711760	0,711014	0,704960	0,665870							
k_2	0,875	1,341699	1,350987	1,319576	1,307034	1,455148							
k_3	1,75	0,402778	0,401485	0,406687	0,415194	0,43180							
k_4	2,625	0,328317	0,330897	0,328766	0,322411	0,311172							
k_5	3,5	0,754568	0,754250	0,744711	0,768859	0,739988							
Φ		2,08E-11	5,09E-05	4,31E-04	8,97E-04	4,04E-03							
j		143	77	144	146	199							
t		28,59	16,79	30,58	30,98	42,53							
λ	0,435312	0,435312	0,436951	0,432499	0,427169	0,468733							
ρ		0,000006	0,003318	0,006001	0,015355	0,065045							

таблицы для столбцов 3–7 указаны значения достигнутого минимума функционала Φ (5), j, t — количество итераций в процедуре метода Нелдера-Мида и счётное время (в минутах).

Аналогичную структуру имеют данные, приведённые в табл. 5 для примера с потенциалом Вудса–Саксона (23) с исходным набором параметров p^* (26).

Представляет интерес изучение влияния ошибок при задании фаз рассеяния не только на восстановленные параметры потенциала, но и на собственные значения дискретного спектра уравнения Шрёдингера (1).

Уравнение (1) с потенциалом (18) и набором параметров (27) имеет собственное значение $-k^2 = \lambda_0^* = 0,4353115$ (которое имеет аналитическое выражение [18]), соответствующее безузловой собственной функции $y_0^*(x)$. Это значение и собственная функция воспроизведены с помощью программы SLIP4M [12] на сетке $\{x_{\min} = -5, x_{\max} = 45, h = 0,05\}$. На этой же сетке вычислялись собственные значения $\lambda_0(\bar{p}_r)$ и соответствующие собственные функции $\bar{y}_0(x)$. В последней строке табл. 6 в столбце 2 приведено значение $\lambda_0^*(p^*)$, и в столбцах 3–7 даны вычисленные значения $\lambda_0(\bar{p}_r)$. Кроме того, приведена величина

$$\rho = |\lambda_0^* - \lambda_0(\bar{p}_r)| + \max|y_0^*(x) - \bar{y}_0(x)|. \quad (28)$$

Структура представления других данных аналогична табл. 4, 5.

Анализ данных, представленных в таблицах, позволяет сделать вывод о правильности работы предложенной схемы восстановления параметров потенциала по заданному набору фаз рассеяния. Это следует из сравнения значений параметров p^* и \bar{p}_r , приведённых в столбцах 2 и 3 всех трёх таблиц. Относительная ошибка восстановленных значений параметров потенциала по данным рассеяния с наложенным шумом соответствует уровню шума (27). Аналогично зависит от уровня шума, наложенного на фазы рассеяния, относительная погрешность собственного значения для безузловой собственной функции.

6. Заключение

Предложенная схема численного решения задачи рассеяния (1)–(3) как нелинейной граничной задачи может успешно применяться в широком диапазоне изменения значений энергии k^2 за счёт выбора параметров дискретной аппроксимации и оптимизации итерационного процесса. Схему без принципиальных трудностей можно развить для решения задачи многоканального рассеяния с разделяющимися каналами. Непосредственное вычисление волновых функций непрерывного спектра представляет дополнительный интерес для построения специальных базисов разложения решений задач большой размерности.

Обратная задача рассеяния в классе потенциалов, зависящих от параметров, имеет применение в различных разделах физики, таких как квантовая хромодинамика, молекулярная физика, теория ядра, где широко используются модельные потенциалы. Исследования задачи восстановления параметров потенциала по данным рассеяния с ошибками могут быть использованы в моделях обработки экспериментальных сечений реакций рассеяния.

Литература

1. Глазман И. М. Прямые методы качественного спектрального анализа сингулярных дифференциальных операторов. — М.: Физматгиз, 1963. [Glazman I. M. Pryamie metodih kachestvennogo spektral'nogo analiza singulyarnykh differentsialnykh operatorov. — М.: Fizmatgiz, 1963.]
2. Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. — М.: Мир, 1972. [Kalodzhero F. Metod fazovykh funktsiy v teorii potentsial'nogo rasseyaniya. — М.: Mir, 1972.]
3. Попотарев Л. И., Пузынина Т. П., Сомов Л. Н. 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.
4. Бабиков В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. — М.: Наука, 1976. [Babikov V. V. Metod fazovykh funktsiy v kvantovoy mekhanike. — М.: Nauka, 1976.]
5. Марченко В. А. Операторы Штурма–Лиувилля и их приложения. — Киев: Наукова Думка, 1977. [Marchenko V. A. Operatorih Shturma–Liuvillya i ikh prilozheniya. — Kiev: Naukova Dumka, 1977.]
6. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974. — Т. 1, 2. [Flyugge Z. Zadachi po kvantovoy mekhanike. — М.: Mir, 1974. — Т. 1, 2.]
7. Жидков Е. П., Козлова О. В. Непрерывный аналог метода Ньютона в обратной задаче теории рассеяния при наличии собственных функций и значений // Математическое моделирование. — 2006. — Т. 18, № 2. — С. 120–128. [Zhidkov E. P., Kozlova O. V. Neprerivnyj analog metoda Newton v obratnoj zadache teorii rasseyaniya pri nalichii sobstvennykh funktsij i znachenij // Matematicheskoe modelirovanie. — 2006. — Т. 18. — No 2. — S. 120–128.]
8. Пузынина Т. П., Тхак В. Ч. Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шрёдингера // Информационные технологии и вычислительные системы. — 2012. — № 2. — С. 46–53. [Puzynina T. P., Vo Trong Thach. Kompleks programm dlya resheniya obratnoy parametricheskoy zadachi uravneniya Schrödinger // Informacionniye tekhnologii i vychislitelniye sistemih. — 2012. — No 2. — S. 46–53.]
9. Пузынина Т. П., Тхак В. Ч. Численное исследование параметров модели градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. — 2012. — № 3. — С. 79–86. [Puzynina T. P., Vo Trong Thach. Chislennoe issledovanie parametrov modeli gradientnogo opticheskogo volnovoda s ekvidistantnyhm

- spektrum volhovodnihkh mod // Vestnik RUDN. Seria Matematika. Informatika. Fizika. — 2012. — No 3. — S. 79–86]
10. 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.
 11. Жидков Е. П., Пузынин И. В. Применение непрерывного аналога метода Ньютона для приближенного решения одной нелинейной граничной задачи // Доклады АН СССР. — 1968. — Т. 180, № 1. — С. 18–21. [Zhidkov E. P., Puzynin I. V. Primenenie neprerihvnogo analoga metoda Newton dlya priblizhennogo resheniya odnoj nelinejnoj granichnoj zadachi // Dokladih AN SSSR. — 1968. — Т. 180. — No 1. — S. 18–21]
 12. Тхак В. Ч., Пузынина Т. П. SLIPH4M – программа для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля // Программные продукты и системы. — 2011. — № 3. — С. 75–80. [Vo Trong Thach, Puzynina T. P. SLIPH4M – программа для chislenного resheniya chastichnoj problemih Sturm–Liouville // Programmnihe produktih i sistemih. — 2011. — No 3. — S. 75–80]
 13. Alhassid Y., Gursev F., Iachello F. Group Theory Approach to Scattering // Annals of Physics. — 1983. — Vol. 148. — Pp. 346–380.
 14. Виницкий С. И., Пузынин И. В., Смирнов Ю. С. Решение задачи рассеяния на основе многопараметрических ньютоновских схем. Одноканальное рассеяние // Ядерная Физика. — 1990. — Т. 52, № 4(10). — С. 1176–1189. [Vinitsky S. I., Puzynin I. V., Smirnov Yu. S. Reshenie zadachi rasseyaniya na osnove mnogoparametricheskikh Newton skhem. Odnokanaljnoe rasseyanie // Yadernaya Phizika. — 1990. — Т. 52. — V. 4(10). — S. 1176–1189]
 15. Марчук Г. И., Шайдунов В. В. Повышение точности решений разностных схем. — М.: Наука, 1979. [Marchuk G. I., Shayjdurov V. V. Povichshenie tochnosti resheniyj raznostnihkh skhem. — M.: Nauka, 1979.]
 16. Abramov D. I. Quantum Inverse Scattering Problem as a Cauchy Problem // Journal of Computational Physics. — 1991. — Vol. 97. — Pp. 516–534.
 17. Математический синтез оптических наноструктур. Учеб. пособие / К. П. Ловецкий, Л. А. Севастьянов, М. В. Паукшто, О. Н. Бикеев. — М.: РУДН, 2008. [Matematicheskijj sintez opticheskikh nanostruktur. Ucheb. posobie / K. P. Loveckijj, L. A. Sevastjyanov, M. V. Paukshto, O. N. Bikeev. — M.: RUDN, 2008.]
 18. 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 РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2010. — № 2(2). — С. 90–98. [Puzynin I. V., Puzynina T. P., Vo Trong Thach. SLIPM – программа na yazihke MAPLE dlya chislenного resheniya chastichnoj problemih Sturm–Liouville na osnove neprerihvnogo analoga metoda Newton // Vestnik RUDN. Seria Matematika. Informatika. Phizika. — 2010. — No 2(2). — S. 90–98]

UDC 519.6 517.984.54

On Numerical Solution of Direct and Inverse Scattering Problems for Spherically Symmetric Potentials Depending on Parameters

Т. П. Пузынина, Во Trong Thach

*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie, Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

The scattering problem for the radial Schrödinger equation, in contrast to a statement of Cauchy's problem, is formulated as a boundary value problem for a wave function with a

non-linear asymptotic condition with exclusion of an unknown phase shift. The phase shift is determined after calculation of the wave function by taking into account its asymptotic behavior and applying the iteration schemes of a continuous analog of Newton's method (CANM).

The inverse problem for an equation with a potential depending on the parameters is reduced to minimization problem with respect to the parameters for the functional that describes the sum of squares of deviations of the specified values of phase shifts from the corresponding calculated values.

Basic features of the computational schemes are demonstrated by solution of the problem with Morse's potential which admits analytical solution and also by solving the problem with Woods–Saxon's potential.

Key words and phrases: Schrödinger equation, scattering problem, non-linear boundary value problem, iterations of CANM, potentials, parameters, inverse problem, functional, minimization.