

ОБ ОДНОМ ЧИСЛЕННОМ АЛГОРИТМЕ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПОТЕНЦИАЛА *

Н.Ш. Гусейнова¹, А.А. Нифтиев¹, М.М. Муталлимов¹

¹Институт Прикладной Математики, Бакинский Государственный Университет,
e-mail: mutallim@mail.ru, nargiz_huseynova@yahoo.com

Резюме. В данной работе было найдено аналитическое решение волнового уравнения в вариационной форме и было получено аналитическое выражение для градиента функционала. А также, решая обратную задачу относительно потенциала, было получено аналитическое выражение для оптимального потенциала и были даны численные алгоритмы для решения поставленных задач.

Ключевые слова: обратная задача, метод вариации, оптимальный потенциал.

AMS Subject Classification: 45Q05, 47A75, 49R05.

1. Введение

Известно, что для физических потенциалов аналитическое решение волновых уравнений является одной из основных задач теоретической физики, а также квантовой механики. Волновая функция, которая находится из аналитического решения волновых уравнений, содержит важную информацию о квантовых объектах. Поэтому, большое значение имеют аналитическое и численные решения уравнений Шредингера и Клейна-Фока-Гордона [2, 3]. С этой точки зрения одной из серьезных задач прикладной физики, а также прикладной математики, является вычисление энергетических спектров и оптимальное управление их зависимости от квантовых чисел, движущихся во внешнем магнитном поле двумерных пионных атомов.

Во внешних полях, особенно во внешних магнитных полях, нахождение аналитических решений волновых уравнений и на основе этого построение оптимальных решений в зависимости от квантовых чисел является важным и интересным [1, 4, 6].

Решение проблемы в исследуемых практических примерах появляется в различных промежуточных точках рассматриваемой области. Основной целью этой задачи является нахождение такого потенциала, относительно которого решение рассматриваемой задачи удовлетворяло бы данным условия [5]. Эта задача является обратной задачей для потенциала. Здесь

* Работа была представлена на семинаре Института Прикладной Математики 23.09.2014

задача решается с помощью приведения поставленной задачи к вариационному виду.

Из найденного решения находятся условия оптимальности, и формула градиента функционала.

2. Постановка задачи

Известно, что движение частицы в центральной области, описывается следующей формулой:

$$-\frac{a}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{bR}{r^2} + q(r)R = ER. \quad (1)$$

Здесь $a > 0$ и b - заданное число, $q(r)$ - энергия взаимодействия. Если мы умножим уравнение (1) на r^2 и

$$Q(r) = b + q(r)r^2$$

введем такую замену, получим следующее уравнение:

$$-a \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + Q(r)R = Er^2 R. \quad (2)$$

Аналитическое решение уравнения (2) для различных потенциалов весьма интересно. Но не всегда можно найти аналитические решения. Кроме того, решение уравнения (2), нахождение потенциала $Q(r)$ относительно собственного значения энергии, то есть решение обратной задачи, также весьма интересно.

Предположим, что

$$R(r_0) = z_0, R(r_1) = z_1, R(r_2) = z_2, \dots, R(r_n) = z_n \quad (3)$$

здесь

$$0 < r_0 < r_1 < \dots < r_n; \quad n \geq 2.$$

Рассмотрим уравнение (2) в интервале $[r_1, r_n]$. В работе основной целью является нахождение потенциала $Q(r)$ в интервале $[r_1, r_n]$. Также мы должны показать, что решение уравнения (2) - функция $R(r)$ - удовлетворяет уравнению (3).

Предположим, что решением уравнения (2) является $R(r)$ и выполняется условие (3). Чтобы решить уравнение (2), напомним его в вариационной форме.

Найдем минимум следующего функционала:

$$J(Q) = \sum_{i=1}^{n-1} [R(r_i) - z_i]^2 \rightarrow \min, \quad (4)$$

из уравнения (2) получаем следующие условия:

$$R(r_0) = z_0, \quad R(r_n) = z_n. \quad (5)$$

Предположим, что

$$U = \{Q = Q(r) \in L_2(r_0, r_n) : Q_0 \leq Q(r) \leq Q_1, \forall r \in [r_0, r_n]\}. \quad (6)$$

Здесь $0 \leq Q_0 < Q_1$ - заданные числа.

Предположим, что функция $\psi = \psi(r)$ является решением следующего уравнения:

$$-a \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + Q(r)\psi - Er^2\psi = -2 \sum_{i=1}^{n-1} [R(r) - z_i] \delta(r - r_i) \quad (7)$$

$$\psi(r_0) = 0, \quad \psi(r_n) = 0. \quad (8)$$

Применяя традиционную технику [7, 8], можно показать, что функционал (4) дифференцируется и справедлива формула для градиента

$$J'(Q) = \psi R \quad (9)$$

Если $R = R(r)$, $\psi = \psi(r)$, $Q = Q(r)$, тогда формула (9) является решением уравнений (2), (5), (7), (8).

3. Алгоритм решения обратной задачи

Полученное уравнение для градиента позволяет решать рассмотренную обратную задачу. Предложим нижеследующий алгоритм.

Шаг 1. Рассмотрим произвольный начальный потенциал $Q_0 \leq Q(r) \in U$.

Шаг 2. Найдем решение уравнений (2), (5) с потенциалом $Q_0(r)$, обозначим это решение $R_0 = R_0(r)$.

Шаг 3. Подставив решение $R_0 = R_0(r)$ в задачу прогонки (7), (8), решая эту задачу, находим функцию $\psi_0 = \psi_0(r)$.

Шаг 4. Используя решения $R_0 = R_0(r)$ и $\psi_0 = \psi_0(r)$, находим градиент функционала (4).

Шаг 5. Минимизируем линейный функционал

$$I_0(Q) = \int_{r_0}^{r_n} \psi_0(r) R_0(r) Q(r) dr \rightarrow \min \quad (10)$$

во множестве U и находим вспомогательную функцию $\bar{Q}_0 = \bar{Q}_0(r)$.

Шаг 6. Новый потенциал строится в следующем виде:

$$Q_1(r) = \alpha Q_0(r) + (1 - \alpha) \bar{Q}_0(r), \quad 0 \leq \alpha \leq 1.$$

Шаг 7. Проверяется критерий точности. Он может быть либо таким

$$\max_{r_0 \leq r \leq r_n} |Q_1(r) - Q_0(r)| < \varepsilon,$$

либо таким

$$|J(Q_1) - J(Q_0)| < \varepsilon.$$

Если точность условия выполняется, то процесс заканчивается. В противном случае, процесс продолжается со второго шага. Из условия точности можем заранее показать количество итераций.

В шестом шаге параметр α следует выбирать таким образом, чтобы полученные новые оценки функционала с соответствующим α были меньше, чем предыдущие,

$$J(Q_{k+1}) \leq J(Q_k) \text{ или } J(\alpha Q_k + (1-\alpha)\bar{Q}_k) \leq J(Q_k).$$

Эти условия называются условиями монотонности.

Для того, чтобы выбрать параметр α в литературе приведены различные методы. Следует отметить некоторые из них.

Из условия монотонности видно, что нахождение параметра α из условия

$$J(\alpha Q_k + (1-\alpha)\bar{Q}_k) \rightarrow \min, \quad 0 \leq \alpha \leq 1$$

выгодно.

Однако, нахождение α из этих условий создает дополнительную трудность, поэтому важно дать другой метод, который важен с практической точки зрения.

Примем $\alpha = \frac{1}{2}$ и проверим условие монотонности. Если условие монотонности удовлетворяется, продолжается итерация соответствующего α . В противном случае, принимая $\alpha = \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots$, проверяется условие монотонности.

Другой метод заключается в том, что для каждой итерации α даются формулой

$$\alpha_k \geq 0, \quad \alpha_k \rightarrow 0, \quad \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k = \infty.$$

Например, можем показать, что $\alpha_k = \frac{1}{k+1}$.

Теперь посмотрим реализацию других шагов алгоритма. Из второго и третьего шагов видно, что в каждой итерации основная задача (2), (3) и задача сопряжения (7), (8) должны быть решены. Это не всегда возможно решить аналитическим методом, поэтому применяются численные методы. Поэтому решение задачи (2), (5) не создает трудности. Так как в задаче (7), (8), входит дельта функция, то их решение требует особого подхода. При решении задач (2), (5), (7), (8) можно использовать готовые современные пакеты программ.

Из алгоритма видно, что на каждом пятом шаге итерации линейный функционал минимизируется во множестве U . Множество U имеет простую структуру и его решение не создает проблему. Поэтому функционал (10) дискретизируется и приводится в пределах ограничений к линейной

функции минимизации, другими словами приводится к задаче линейного программирования.

4. Численное решение

Теперь, на простом примере продемонстрируем предлагаемый алгоритм. Предположим, что задано следующее уравнение

$$-\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + Q(r)R = r^2 R, \quad 1 \leq r \leq 3 \quad (11)$$

и граничные условия

$$R(1) = 2, \quad R(3) = 10. \quad (12)$$

В этом случае, $a = 1$, $E = 1$. Наша цель состоит в том, чтобы из множества $U = \{Q = Q(r) \in L_2(1;3) : 2 \leq Q(r) \leq 16\}$ найти такой потенциал $Q^* = Q^*(r)$, что соответствующее ему решение уравнений (11), (12) в виде функции $R = R(r)$ удовлетворяло бы условию

$$R(2) = 5. \quad (13)$$

Как видно, дополнительные условия состоят из одного условия. В вариационной постановке условие можем записать в следующем виде:

$$J(Q) = |R(2) - 5| \rightarrow \min. \quad (14)$$

На следующем шаге, подставив функцию $Q_0(r)$ в уравнение (11), получим

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + Q_0(r)R = r^2 R, \quad 1 < r < 3. \quad (15)$$

Используя аппроксимацию, приводим уравнение к конечно-разностному уравнению. Возьмем в качестве конечного числа $N > 2$ и найдем шаг $u = (r_u - r_0)/(N - 1) = 2/(N - 1)$. Затем на отрезке $[1;3]$ выберем узловые точки следующим образом:

$$r_i = r_0 + (i - 1)h, \quad i = \overline{0, N}. \quad (16)$$

Ясно, что равенство $r_N = r_0 + (N - 1)\frac{r_n - r_0}{N - 1} = r_n$ верно. Аппроксимируя производную функции $R(r)$ относительно r , для $i = \overline{0, N - 1}$ получим

$$\left. \frac{dR}{dr} \right|_{r=r_i} \approx \frac{R(r_{i+1}) - R(r_i)}{h} = \frac{R_{i+1} - R_i}{h}. \quad (17)$$

Аппроксимируя выражение $\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right)$ из уравнения (15) ($i = \overline{0, N - 1}$), получим

$$\left. \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right|_{r=r_i} \approx \frac{\left(r_i^2 \frac{dR}{dr} \Big|_{r=r_i} - r_i^2 \frac{dR}{dr} \Big|_{r=r_{i-1}} \right)}{h}. \quad (18)$$

Учитывая (17) в (18), имеем

$$\left. \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right|_{r=r_i} \approx \frac{\left(r_i^2 \frac{R_{i+1} - R_i}{h} - r_{i-1}^2 \frac{R_i - R_{i-1}}{h} \right)}{h} = \frac{1}{h^2} [r_i^2 R_{i+1} - (r_i^2 + r_{i-1}^2) R_i + r_{i-1}^2 R_{i-1}].$$

Учитывая это выражение в (15), получим следующее конечно-разностное уравнение

$$\frac{r_{i-1}^2}{h^2} R_{i-1} + \frac{1}{h^2} [Q_0(r_i) - (2r_i^2 + r_{i-1}^2)] R_i + \frac{r_i^2}{h^2} R_{i+1} = 0. \quad (19)$$

В этом случае граничные условия (12) будут в виде:

$$R_0 = 2, \quad R_N = 10. \quad (20)$$

Произведя замену переменных

$$a_i = \frac{r_{i-1}^2}{h^2}, \quad c_i = -\frac{1}{h^2} [Q_0(2_i) - (2r_i^2 + 2_{i-1}^2)],$$

$$b_i = \frac{r_i^2}{h^2}, \quad \psi_i = 0, \quad \chi_1 = \chi_2 = 0, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = 0,$$

в (19), (20) конечно-разностные системы будут в виде трехдиагональной линейной системы алгебраических уравнений:

$$a_i R_{i-1} - c_i R_i + b_i R_{i+1} = -\psi_i, \quad i = \overline{1, N-1}$$

$$y_0 = \chi_1 y_1 + \gamma_0 \quad (21)$$

$$y_N = \chi_{-1} y_{N-1} + \gamma_N.$$

Эту систему уравнений можно решить с помощью метода прогонки.

Рассмотрим сопряженную задачу

$$-\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + Q(r)\psi - r^2\psi = -2[R(r) - r^1] \delta(r - r_2^1), \quad (22)$$

$$\psi(1) = 0, \quad \psi(3) = 0, \quad r_2^1 = 2.$$

Вначале аппроксимируем $\delta(r - r_1)$ delta функцию в следующем виде:

$$\delta(r - r^1) = \frac{\theta(r_i - r^1) - \theta(r_{i-1} - r^1)}{h}.$$

После этого можно реализовать третий шаг алгоритма. В этом случае уравнение (22) можем аппроксимировать как уравнение (15). При этом получаем трехдиагональную линейную систему уравнений, решив которую

находим значения $\psi(r_i)$. Затем, на четвертом шаге находим градиент $J'(Q)$. На пятом шаге находится минимум функции

$$I_0(Q) = \int_{r_0}^{r_2} \psi_0(r) R_0(r) Q(r) dr$$

на множестве U относительно $Q(r)$ и определяется доставляющая этот минимум вспомогательная функция $\bar{Q}_0 = \bar{Q}_0(r)$. Далее находится новый потенциал

$$Q_1(r) = \alpha Q_0(r) + (1 - \alpha) \bar{Q}_0(r), \quad 0 < \alpha < 1$$

и проверяется критерий

$$|J(Q_1) - J(Q_0)| < \varepsilon.$$

Здесь выбирается параметр α . На основе вышеописанного алгоритма создано программное обеспечение [9, 10] в системе MATLAB. Проводится вычислительный эксперимент для различных значений параметров N и k на примере модели.

Нужно отметить, что параметр N показывает число разбиений разностной схемы, а k - количество итераций. Результаты компьютерных расчетов приведены в виде сравнительных графиков.

Решение задачи (11)-(13) примем за модельную задачу. Мы можем легко проверить, что решение этой задачи следующее

$$R(r) = r^2 + 1,$$

а соответствующий потенциал имеет следующий вид:

$$Q^*(r) = \frac{Gr^2}{r^2 + 1} + r^2.$$

В эксперименте были рассмотрены три случая, сравнивались решения и приближенные значения потенциала с точными значениями. Результаты значений параметров $N = 6$, $k = 7$ были даны на рис. 1 (R решение) и рис. 2 (Q -потенциал) соответственно. Из графиков видно, что приближенные решения достаточно много отличаются от точных решений, и поэтому их нельзя принимать в качестве решения задач.

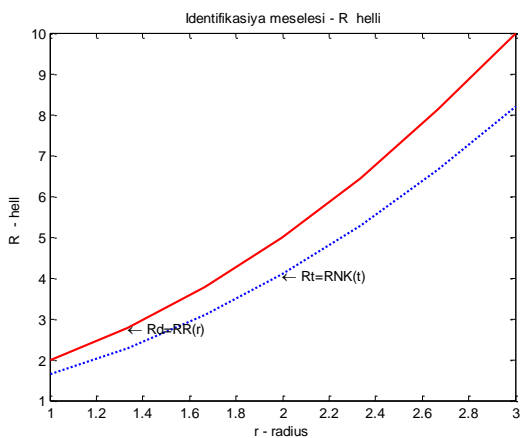


Рис. 1.

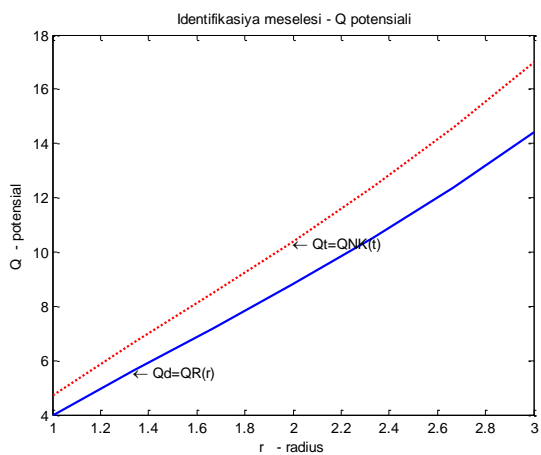


Рис. 2. ($N = 6, k = 7$)

Вычислительные эксперименты проводились для значения $N = 30, k = 40$
 Как видно из рис. 3 и рис.4 приближенные решения ближе к точному решению.

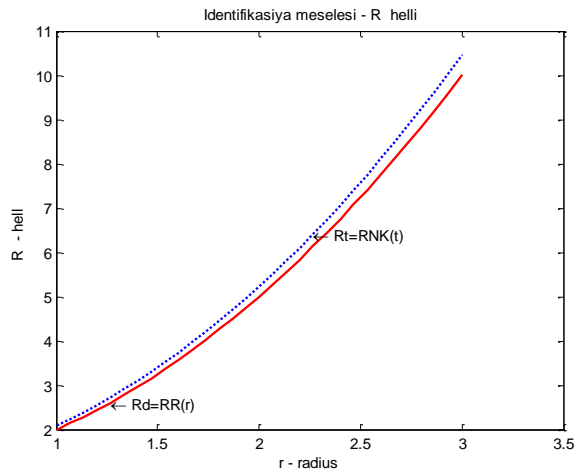


Рис.3. ($N = 30, k = 40$)

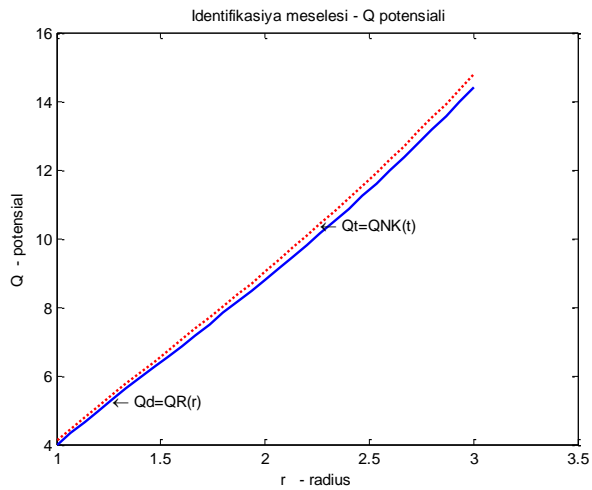


Рис. 4. ($N = 30, k = 40$)

Наконец, если $N = 60, k = 70$ расчет реализации эксперимента, результаты демонстрируют достаточную точность (рис.5, рис.6).

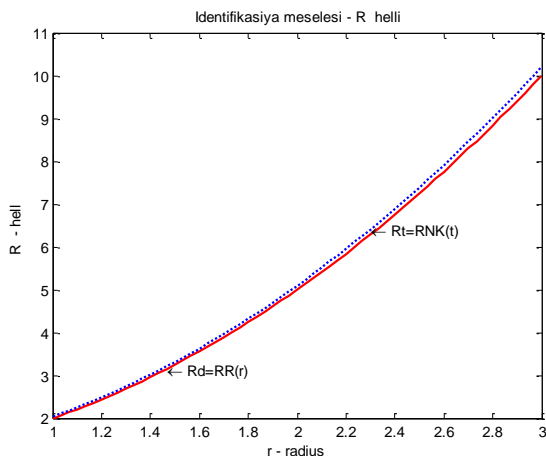


Рис.5. ($N = 60, k = 70$)

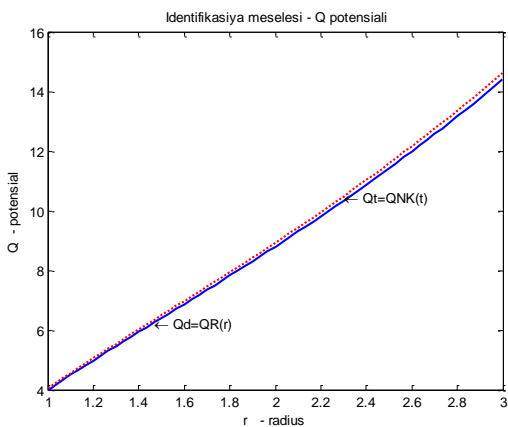


Рис.6. ($N = 60, k = 70$)

Литература

1. Ahmadov H.I., Aydin C., Huseynova N.Sh., Uzun O., Analytical solutions of the Schrodinger equation with the Manning-Rosen potential plus a Ring-Shaped like potential, International Journal of Modern Physics E, Vol.22, No.10, 2013, pp.1-16.
2. Bagrov V.G., Gitman D.M., Exact solutions of relativistic Wave Equations, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1990, 323 p.
3. Greiner W., Quantum Mechanics, Edition Berlin, Springer, 2001, 512 p.

4. Huseynova N.Sh., Niftiyev A.A., On dependence of energy eigen-value on the ends of the interval, Transactions, Issue Mathematics and Mechanics Series of Physical-Technical and Mathematical Science, Vol.31, No.4, 2001, pp.159-166.
5. Niftiyev A.A., Hüseynova N.Ş., Potensiala nəzərən bir tərs məsələ və onun analitik həlli, Bakı Universitetinin Xəbərləri, Fizika-Riyaziyyat elmləri seriyası, No.1, 2014, s.92-97.
6. Ахмедов Х.И., Гусейнова Н.Ш., Аналитическое решения уравнения Клейна-Фока-Гордона для двумерного пионного атома, движущегося в постоянном однородном магнитном поле, Известия ВУЗ Россия, No.3, 2009, с.321-327.
7. Васильев Ф.П., Методы оптимизации, М.: Факториал, 2002, 823 с.
8. Васильев Ф.П., Методы решения экстремальных задач, М.:Наука, 1981, 400 с.
9. Мэтьюз Дж.Г., Финк К.Д., Численные методы, Использование системы MATLAB, М.: Вильямс, 2001, 720 с.
10. Потомкин В.Г., Вычисления в среде MATLAB, М.:Диалог-МИФИ, 2004, 720 с.

Potensiala nəzərən bir tərs məsələnin ədədi həll algoritmi

N.Ş. Hüseynova, A.A. Niftiyev, M.M. Mütəllimov

XÜLASƏ

İşdə dalğa tənliyi variasiya formasına gətirilərək analitik həll olunmuş və funksionalın qradienti üçün analitik ifadə alınmışdır. Həmçinin potensiala nəzərən tərs məsələ həll edilərək optimal potensial üçün analitik ifadə tapılmış və uyğun olarag ədədi həll algoritmi verilmişdir.

Açar sözlər: tərs məsələ, variasiya metodu, optimal potensial.

Numerical algorithm for an inverse problem with respect to the potential

N.Sh. Huseynova, A.A. Niftiyev, M.M. Mutallimov

ABSTRACT

In this work the wave equation in the variation form is analytically solved and the functional expression for the gradient is found. Also inverse problem for potential is solved, the analytical expression for the optimal potential is obtained and numerically algorithm is given.

Keywords: inverse problem, method of variation, optimum potential.