СХЕМЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ И ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ, ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ПАРАМЕТРОВ

Во Чонг Тхак

Лаборатория Информационных Технологий

Объединенный институт ядерных исследований

Дубна, 22 - 27 августа 2012 года

Международная молодёжная конференция-школа “**MPAMSC2012**”

Содержание доклада

1. **Введение**
2. **Решение задачи Штурма-Лиувилля**
3. **Решение обратной задачи дискретного спектра для радиального уравнения Шредингера с потенциалом, зависящим от параметров**
4. **Численные результаты**
   1) Уточнение среднеквадратичного радиуса ядра ^{6}He
   2) Модель градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод
5. **Заключение**
6. **Список литературы**

1. Введение

- Задача Штурма-Лиувилля (Ш-Л) на конечном и на бесконечном интервалах часто возникает при изучении математических моделей колебательных процессов, устойчивости систем, а также в квантовой механике.

- Для исследуемой модели может возникнуть обратная задача, в которой по заданным значениям характеристик системы требуется восстановить в параметрическом семействе коэффициентов оператора Ш-Л его конкретный вид, с помощью которого можно наилучшим образом воспроизвести эти значения.

2. Решение задачи Штурма-Лиувилля

- **Разработан пакет программ SLIPH4M [1] в системе MAPLE для решения разностной задачи Ш-Л [2] с точностью аппроксимации** $O(h^4)$.
- Для решения задачи используется **непрерывный аналог метода Ньютона (НАМН)** [3]. **Задача Ш-Л представляется в виде функционального уравнения:**

$$\varphi(z)=0,\ z=(\lambda,y),\ \varphi=\{\varphi^{(j)}\},\ j=1,2,3,4 \tag{1}$$

для линейного дифференциального уравнения второго порядка

$$\varphi^{(1)}(\lambda,y)\equiv y''(x)+2p(x)y'(x)+\big(q(x)-\lambda r(x)\big)y(x)=0,\quad a<x<b, \tag{2}$$

краевых условий

$$\varphi^{(2)}(\lambda,y)\equiv d_1(\lambda,a)y'(a)+f_1(\lambda,a)y(a)=0, \tag{3}$$

$$\varphi^{(3)}(\lambda,y)\equiv d_2(\lambda,b)y'(b)+f_2(\lambda,b)y(b)=0, \tag{4}$$

и условия нормировки

$$\varphi^{(4)}(\lambda,y)\equiv\int_a^b y^2(x)dx+c^2\int_b^\infty \psi^2(\lambda,x)dx-1=0. \tag{5}$$

Если задача рассматривается на конечном отрезке , следует положить $c=0.$

SLIPH4M можно использовать для решения радиального уравнения Шредингера.

3. Решение обратной задачи дискретного спектра для радиального уравнения Шредингера с потенциалом, зависящим от параметров

- **Комплекс программ PIPES [5]** предназначен для минимизации по параметрам $\overline{p}=(p_1,p_2,\dots,p_n)$ функционала специального вида

$$\boxed{\Phi(\overline{p})=\sum_{j=1}^{m}[f_j-\Phi_j(\overline{\lambda}(\overline{p}),\overline{y}(\overline{p},x))]^2} \quad (6)$$

Здесь f_j - экспериментальные (или предлагаемые для исследования) значения характеристик моделируемой системы; функционалы $\Phi_j(\overline{\lambda}(\overline{p}),\overline{y}(\overline{p},x))$ соответствуют теоретическим значениям этих характеристик.

- **Процедура покоординатного спуска CDMIN** реализует последовательный перебор параметров в области их изменения

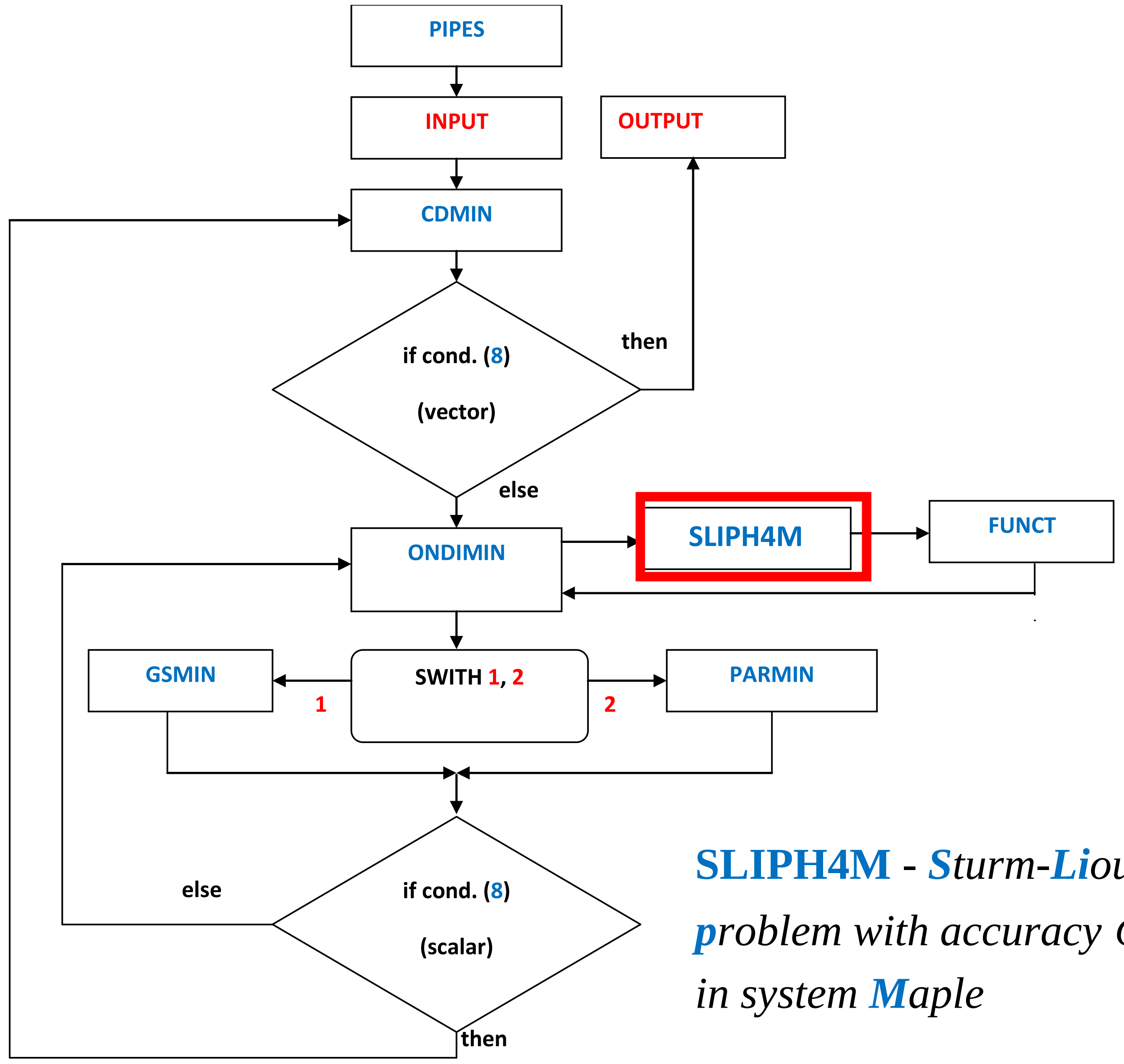
$$\Omega=\{a_k\le p_k\le b_k, k=1,2,\dots,n\} \quad (7)$$

Одномерная минимизация функционала выполняется до выполнения условий

$$\boxed{\left|\Phi(\overline{p}_i)-\Phi(\overline{p}_{i-1})\right|\le\varepsilon_\Phi \quad \text{и} \quad \left\|\overline{p}_i-\overline{p}_{i-1}\right\|\le\varepsilon} \quad (8)$$

где ***i*** - номер повторения цикла спусков, ε_Φ и $\varepsilon\,(0<\varepsilon_\Phi\le\varepsilon)$ - заданные малые числа.

Структура комплекса программы PIPES
(*Parametric inverse problem for the equation of Schrödinger*)



SLIPH4M - *Sturm-Liouville problem with accuracy O(**h**^{4}) in system Maple*

Рисунок 1.

- **Программа одномерной минимизации ONDIMIN.**
- **Процедура GSMIN** использует известный метод золотого сечения [4].
- **Процедура PARMIN** являющуюся модификацией метода парабол [4].
- **Программа SLIPH4M [1] по заданным значениям параметров $\bar{p}$ вычисляет ту часть множества (7) собственных значений и соответствующих им собственных функций задачи Ш-Л (1)-(4), которая необходима для нахождения значения функционала (6).**
- **Процедура FUNCT** реализует вычисление значения функционала (6).

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1) Уточнение среднеквадратичного радиуса ядра [5]. ^{6}He

- **Здесь, мы рассмотрим потенциал Вудса-Саксона**

$$U(x)=U_0\left(1+\exp\left(\frac{x-R}{a}\right)\right)^{-1} \quad , \quad 0\le x<\infty \qquad (9)$$

где U_0, R, a - параметры.

В задачи Ш-Л (1)-(4): $C*U(x)=q(x)$, $p(x)=0$, $r(x)=1$, $C=0.06380480686$ - константа, которая выражается через приведенную массу двух фрагментов.

- **Среднеквадратичный радиус ядра** ^{6}He **вычисляется по формуле**

$$R_{rms}=\left(\int_0^\infty y_0(x)^2 x^2 dx\right)^{1/2} \qquad (10)$$

- **В работе [5] выбраны значения параметров**:

$$U_0=28{,}3,\ R=1{,}45,\ a=0{,}3 \ .$$

- Для $h\alpha$ - модели получены $\lambda = 2{,}19375$ и $R_{rms} = 2{,}62$. Там же отмечено, что ранее другими авторами было получено значение $R_{rms} = 2{,}586$ в рамках LSSM модели (**L**arge-**S**cale **S**hell **M**odel) ядра.

- **Для решения задачи уточнения составим функционал:**

$$\boxed{\Phi(\overline{p}) = (\lambda^* - \lambda(\overline{p}))^2 + (R^*_{rms} - R_{rms}(\overline{p}))^2} \qquad (11)$$

где $\overline{p} = (U_0, R, a)$ - вектор параметров потенциала (9), λ^*, R^*_{rms} - проверяемые значения физических величин, $\lambda(\overline{p})$ - вычисляемое для заданного вектора параметров $\overline{p}$ **при помощи программы SLIPH4M [1] решение задачи для уравнения Шредингера** $\left\{\lambda(\overline{p}), y(\overline{p}, x)\right\}$, а также соответствующее ему значение $R_{rms}(\overline{p})$ (10).

- **Область изменения параметров (7) выбрана следующим образом**:

$$\Omega = \{27{,}5 \le U_0 \le 28{,}5;\ 1{,}40 \le R \le 1{,}60;\ 0{,}20 \le a \le 0{,}40\} \qquad (12)$$

- При минимизации функционала (11) задаем два варианта проверяемых значений:

  a) $\lambda^* = 2{,}19375;\quad R^*_{rms} = 2{,}62$ b) $\lambda^* = 2{,}19375;\quad R^*_{rms} = 2{,}586$
- Значение λ^* считается правильным, поскольку хорошо воспроизводит экспериментальное значение энергии развала ядра ^6He.
- **Результаты вычислений: а)** $\lambda = 2{,}1937\ ;\quad R_{rms} = 2{,}6202$ **b)** $\lambda = 2{,}1937\ ;\ R_{rms} = 2{,}5860$
- **Таблица 1** демонстрирует сходимость процесса минимизации функционала (11), **проверка для b)**

i	U_0	R	a	λ	R_{rms}	$\Phi(p_i)$
0	28,3000	1,4537	0,3000	2,2198	2,6199	0,001828
1	28,2704	1,4537	0,3000	2,2097	2,6241	0,001710
	28,2704	1,4537	0,3000	2,2098	2,6241	0,001710
	28,2704	1,4537	0,2700	2,1879	2,6078	0,000510
2	28,2698	1,4537	0,2700	2,1878	2,6079	5,105E-4
	28,2698	1,4549	0,2700	2,2003	2,6030	3,327E-4
	28,2698	1,4549	0,2450	2,1923	2,5863	2,104E-4
3	28,2698	1,4549	0,2450	2,1922	2,5863	2,104E-4
	28,2698	1,4550	0,2450	2,1937	2,5857	8,139E-5
	28,2698	**1,4550**	**0,2438**	**2,1937**	**2,5860**	**2,437E-9**

- **Замечание!** Сравнивая результаты а) и b), можно сделать следующий вывод. Значение $R_{rms} = 2{,}586$ вычисленное в рамках LSSM модели, является более точным, чем значение $R_{rms} = 2{,}62$ полученное для $h\alpha$ модели, поскольку $\min\Phi(p_i) = 3.3*E-8$

2) Модель градиентного оптического волновода [6] с эквидистантным спектром волноводных мод

- **Уравнение, определяющее спектр для компоненты E_y волноводной моды , в безразмерных переменных имеет вид**

$$\frac{d^2E_y(x)}{dx^2}+(n^2(x)-\beta^2)E_y(x)=0 \qquad (13)$$

Профиль показателя преломления $n^2(x)$ (потенциал) имеет вид

$$n^2(x)=\begin{cases} n_s^2,\ x<0, \\ n_f^2(1-\Delta(1-\exp(\frac{x}{d})^{\alpha})), 0\le x\le d, \\ n_c^2, x>d. \end{cases} \qquad (14)$$

где $(\alpha(0<\alpha<1))$- параметр. (**При $\alpha=1$ получаем экспоненциальный профиль [8]**).

- **Граничные условия**

$$[\frac{d}{dx}E_y(x)-\sqrt{\beta^2-n_s^2}E_y(x)]_{x=0}=0 \qquad (15)$$

$$[\frac{d}{dx}E_y(x)+\sqrt{\beta^2-n_c^2}E_y(x)]_{x=d}=0 \qquad (16)$$

- **Таким образом, граничная задача (13)-(16) является задачей Ш–Л на отрезке** $0\le x\le d.$

- **Значения показателей преломления заданы [7]:**

$$n_s^2=(1.47)^2,\ n_f^2=(1.565)^2,\ n_c^2=(1.0)^2 \qquad (17)$$

- Величины d и Δ определяют вектор параметров модели

$$\bar{p}=(d,\Delta),\ d>0,\ \Delta>0 \qquad (18)$$

от которого зависит спектр решений задачи Ш-Л (13)-(16)

$$\{\beta_j^2(\bar{p}), E_y^{(j)}(\bar{p},x)\}, j=0,1,2,\dots,N(\bar{p}) \qquad (19)$$

где $\beta_j^2(\bar{p})$- собственное значение, $E_y^{(j)}(\bar{p},x)$- соответствующая собственная функция. Собственные значения упорядочены

$$\beta_0^2(\bar{p})>\beta_1^2(\bar{p})>\beta_2^2(\bar{p})>\dots>\beta_N^2(\bar{p})>0$$

- **Введем обозначение**

$$\boxed{\rho_j(\bar{p})=\beta_{j-1}^2(\bar{p})-\beta_j^2(\bar{p}),\ j=1,2,\dots,N(\bar{p})} \qquad (20)$$

- **Тогда для эквидистантности спектра собственных значений требуется выполнение системы равенств**

$$\boxed{\rho_1(\bar{p})=\rho_2(\bar{p})=\dots=\rho_N(\bar{p})} \qquad (21)$$

- **Приближенное решение этой задачи можно свести к минимизации функционала**

$$\boxed{\Phi(\bar{p})=\sum_{j=2}^{N(p)}(\rho_1(\bar{p})-\rho_j(\bar{p}))^2} \qquad (22)$$

- Для вычисления значения функционала (22) при заданном векторе параметров $\bar{p}$ используется программа SLIPH4M [1], решающая разностную задачу Ш–Л (13)-(16).

- **Для определения предварительного значения** Δ, поставим значение показателя преломления n_f^2 (17), и максимум значения $n_0^2=n^2(x)$ (14) при $x=d, \alpha=1$, тогда получим $\Delta\approx 0.46$. При $d=3\pi$, $\Delta=0.46$ вычисляются три решения (19) задачи Ш-Л (13)-(16).

Таблица 2. Результаты минимизации функционала $\Phi(\overline{p})$ (22) для профиля показателя преломления (14). $\{d=3\pi, \Delta\in[\Delta_l,\Delta_r]\}$, (i - число итераций поиска $\min\Phi(\Delta)$).

	I, $\alpha=1/4$	II, $\alpha=1/3$	III, $\alpha=1/2$	IV, $\alpha=2/3$	V, $\alpha=5/6$
	$\Delta\in[0.4, 0.7]$	$\Delta\in[0.4, 0.5]$	$\Delta\in[0.25, 0.50]$	$\Delta\in[0.15, 0.46]$	$\Delta\in[0.16, 0.46]$
i	3	**3**	3	6	6
$\Delta_{\min}$	0.625	**0.4773**	0.2607	0.15777	0.16656
Φ	1.42E-4	**9.4E-12**	3.9E-11	6.86E-6	7.44E-4
β_0^2	4.65283	**3.95201**	3.12569	2.76587	2.75393
β_1^2	4.05394	**3.46839**	2.74424	2.46658	2.44513
β_2^2	3.53314	**2.98477**	2.36279	2.16991	2.16360
ρ_1	0.50889	**0.483617**	0.381454	0.29929	0.30880
ρ_2	0.52080	**0.483620**	0.381448	0.29667	0.28153
D_ρ	0.01191	**0.000003**	0.000006	0.00262	0.02727

Из таблицы видно, что наилучшие результаты получены при $\alpha=1/3$. **Вычисленное значение** $\Delta_{\min}=0.4773$ **довольно близко к прогнозируемому значению** $\Delta\approx 0.46$ **.**

Точность вычисления характеристик эквидистантности ρ_1 и ρ_2 составляет 5 десятичных знаков после десятичной точки $D_\rho=3.10^{-6}$.

На рисунке 2 представлены **графики 3 собственных функций** $E_y^{(j)} (j=1,2,3)$ **и профиля показателя преломления** $n^2(x)$ (14), $0 \le x \le 3\pi$ для $\alpha = 1/3, \Delta = 0.4773$

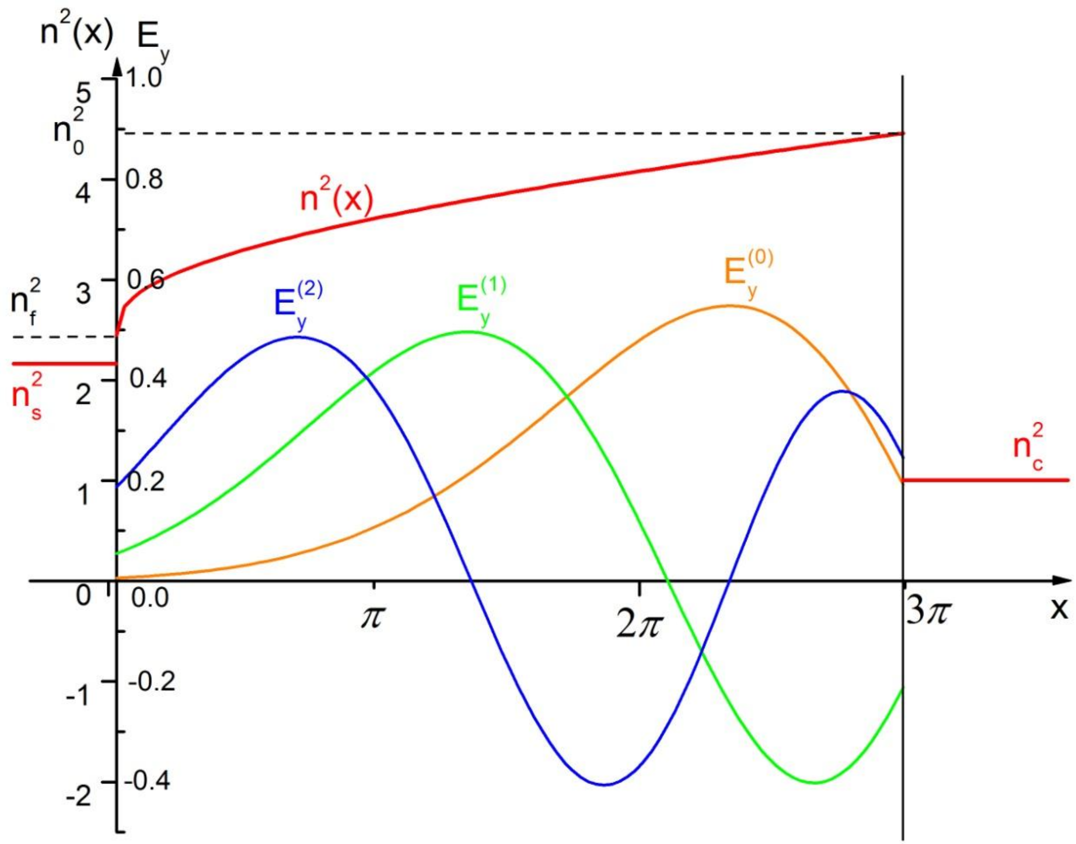


Рис.2. Профиль показателя преломления (14) $\alpha = 1/3$ **и собственные функции** $E_y^{(j)}$

задачи Ш-Л (13)-(16).

5. Заключение

- Разработанные схемы и комплексы программ успешно применялись к численному анализу моделей молекулярной и ядерной физики [5], а также модели градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод [8].
- Благодарю Таисию Петровну Пузынину за помощь и поддержку.
- Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 10-01-00467-а и 12-01-00396-а.

6. Список литературы

1. **Во Чонг Тхак, Т.П. Пузынина. SLIPH4M - программа для численного решения частичной проблемы Штурма-Лиувилля.** // Программные продукты и системы, 2011, №3, с. 75-80. http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sliph4m/index.html
2. А.А. Самарский. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983.
3. И.В. Пузынин, И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, В.Н. Первушин, Т.П. Пузынина, Т.А. Стриж, В.Д. Лахно. 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.
4. Н.Н. Калиткин. Численные методы. М.: Наука, 1978.
5. **Т.П. Пузынина, Во Чонг Тхак. Комплекс программ для решения обратной параметрической задачи уравнения Шредингера.** // Информационные технологии и вычислительные системы, 2012, №2, с. 46-53.
6. Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов. – М.: Мир, 1984.
7. Refractive Index Database. — http://refractiveindex.info/
8. **Т. П. Пузынина, Во Чонг Тхак. Численное исследование параметров модели градиентного оптического волновода с эквидистантным спектром волноводных мод.** // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. № 3. 2012. с. 79–86.

Спасибо за внимание!