ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P11-2000-57

С.И.Сердюкова

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ДВУМЕРНОГО ДИСКРЕТНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Направлено в «Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling»

2000

1. ВВЕДЕНИЕ

Внимание автора к разработке алгоритмов решения обратных задач для дискретного уравнения Шредингера было привлечено Б.Н.Захарьевым [9]. В [4] имеется подробная библиография по многомерным обратным задачам. Первоначально было исследовано одномерное дискретное уравнение Шредингера [5-7]. Решение обратной задачи в этом случае связано с построением по спектральным данным симметричной трехдиагональной матрицы. В [7] был предложен эффективный алгоритм вычисления симметричной трехдиагональной матрицы и базисных собственных векторов по заданному спектру и первым компонентам базисных собственных векторов. В этой работе обсуждается обратная задача для двумерного дискретного уравнения Шредингера. Движение волн на решетках в дискретной квантовой механике описывается [5,6,9] разностным уравнением Шредингера:

$$-\frac{\psi_{i-1,j}-2\psi_{i,j}+\psi_{i+1,j}}{h_x^2}-\frac{\psi_{i,j-1}-2\psi_{i,j}+\psi_{i,j+1}}{h_y^2}+U_{ij}\psi_{ij}=\lambda\psi_{i,j}.$$

Рассматривается задача в прямоугольнике $1\le i\le M, \quad 1\le j\le N$, с нулевыми граничными условиями: $\psi_{0,j}=\psi_{M+1,j}=\psi_{i,0}=\psi_{i,N+1}=0$.

В случае нулевого потенциала ($U_{i,j}=0$) собственные значения и базисные собственные векторы определяются формулами

$$\lambda_{m,n}==\frac{4}{h_x^2}\sin^2\frac{\pi m}{2(M+1)}+\frac{4}{h_y^2}\sin^2\frac{\pi n}{2(N+1)},$$

$$V_{m,n}=||v_{m,n}(i,j)||=2\sqrt{h_x h_y}||\sin\frac{\pi mi}{M+1}\sin\frac{\pi nj}{N+1}||,$$
$$1\le i,m\le M,\ 1\le j,n\le N,\ l=MN.$$

Упорядочим собственные значения в порядке возрастания:

$$\lambda_1\le\lambda_2\le\lambda_3...\le\lambda_l.$$

Вводим в рассмотрение векторы $\quad E_\xi=[e_1^\xi,...,e_l^\xi]=$

$$=[v_{mn}(1,1),...,v_{mn}(1,N),...,v_{mn}(M,1),...,v_{mn}(M,N)].$$

Определенные (для нулевого потенциала и $h_x = h_y = 1$) λ_ξ, E_ξ являются решением спектральной задачи для симметричной пятидиагональной матрицы:

$$C = \begin{bmatrix} A_1 & D_1 & 0 & \dots & 0 \\ D_1 & A_2 & D_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & D_{M-1} \\ 0 & 0 & \dots & D_{M-1} & A_M \end{bmatrix}, \quad A_i = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & -1 \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 4 \end{bmatrix},$$

а на боковых диагоналях стоят блоки $D_i = -I$, где I - единичные матрицы порядка N .

Ставится задача восстановления по спектральным данным возмущенной пятидиагональной матрицы C : на боковых диагоналях C стоят диагональные блоки

$$D_i = \begin{bmatrix} -1 + v_{qi+1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 + v_{qi+2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & -1 + v_{qi+N} \end{bmatrix}, \; i = 1, ..., M-1,$$

$qi = (i-1)N$, а на главной диагонали - $A_i =$

$$= \begin{bmatrix} 4 + \theta_{qi+1} & -1 + u_{qi+1} & \dots & 0 \\ -1 + u_{qi+1} & 4 + \theta_{qi+2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & -1 + u_{qi+N-1} \\ 0 & \dots & -1 + u_{qi+N-1} & 4 + \theta_{qi+N} \end{bmatrix}, \; i = 1, ..., M.$$

Ортонормальность базисных собственных векторов влечет [2] ортонормальность векторов e_j, составленных из j-х компонент базисных собственных векторов: $e_j = [e_j^1, \; e_j^2, ..., e_j^l]$. Отсюда следует простой алгоритм (приведен в параграфе 5) вычисления симметричной пятидиагональной матрицы C по заданному спектру и заданным первым N компонентам для каждого базисного собственного вектора. Матрица C имеет лакуну между второй и $(N+1)$-й диагоналями. В результате не все N компонент могут быть заданы произвольно. Эти компоненты наряду с $N(N+1)/2$ условиями ортонормальности должны удовлетворять $(N-1)^2(M-1)$ дополнительным условиям, обеспечивающим ортогональность вычисляемых при построении матрицы следующих компонент базисных собственных векторов:

$$(e_1, e_j) = 0, ..., (e_{j-1}, e_j) = 0, \; j = N+1, ..., l.$$

Кроме того, должны удовлетворяться условия согласованности, обеспечивающие выполнение N нижних уравнений спектральной системы $CE_j = \lambda_j E_j$ для всех j.

Обратная задача для двумерного дискретного уравнения Шредингера сводится к построению симметричной пятидиагональной матрицы по заданному спектру и заданным $k(M, N)$, $1 \leq k < N$, первым компонентам для каждого базисного собственного вектора.

Элементы матрицы определяются одновременно с "недостающими" $(N-k)$ компонентами из решения системы полиномиальных уравнений, в которую наряду с условиями ортонормальности, дополнительными условиями и условиями согласованности входят соотношения, определяющие элементы матрицы через λ_j и компоненты базисных собственных векторов.

В параграфах 2-6 обсуждаются вывод дополнительных условий, условий согласованности, алгоритм решения обратной задачи, включая проверку корректности, и полученные численные результаты для симметричной пятидиагональной матрицы порядка 12. Те же аргументы справедливы в общем случае. В параграфе 7 приводятся дополнительные условия для симметричной пятидиагональной матрицы порядка MN. Там же выводится простой алгоритм для определения $k(M, N)$ числа свободно задаваемых (для каждого базисного собственного вектора) компонент в общем случае.

2. ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Число дополнительных условий равно числу нулевых элементов между верхними второй и $(N+1)$-й диагоналями матрицы C, исключая нулевые элементы нижних N строк. Трехдиагональные матрицы [7] не имеют таких лакун.

Заметим, что при $N \geq M \geq 2$ справедливо неравенство

$$(N-1)(N+2)/2 + (N-1)^2(M-1) < (N-1)NM.$$

Так что компоненты e_1^j могут быть произвольными, только $||e_1|| = 1$. Первое слагаемое в левой части последнего неравенства означает число условий ортонормальности для векторов $e_2, ..., e_N$. В правой части стоит общее число компонент этих векторов.

Ниже приведена система 18 дополнительных условий для $N = 4$,

$M = 3$. Искомая симметричная пятидиагональная 12×12 матрица

$$C = \left[\begin{array}{cccc|cccc|cccc} te_1 & uu_1 & 0 & 0 & vd_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ uu_1 & te_2 & uu_2 & 0 & 0 & vd_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & uu_2 & te_3 & uu_3 & 0 & 0 & vd_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & uu_3 & te_4 & 0 & 0 & 0 & vd_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline vd_1 & 0 & 0 & 0 & te_5 & uu_5 & 0 & 0 & vd_5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & vd_2 & 0 & 0 & uu_5 & te_6 & uu_6 & 0 & 0 & vd_6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & vd_3 & 0 & 0 & uu_6 & te_7 & uu_7 & 0 & 0 & vd_7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & vd_4 & 0 & 0 & uu_7 & te_8 & 0 & 0 & 0 & vd_8 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & vd_5 & 0 & 0 & 0 & te_9 & uu_9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & vd_6 & 0 & 0 & uu_9 & te_{10} & uu_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & vd_7 & 0 & 0 & uu_{10} & te_{11} & uu_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & vd_8 & 0 & 0 & uu_{11} & te_{12} \end{array}\right].$$

Здесь и далее краткости ради используются обозначения

$$-1 + u_i = uu_i, \ 4 + \theta_i = te_i, \ -1 + v_i = vd_i.$$

Из ортонормальности базисных собственных векторов следуют соотношения

$$te_i = \sum_{j=1}^{l} \lambda_j (e_i^j)^2, \quad uu_i = \sum_{j=1}^{l} \lambda_j e_i^j e_{i+1}^j,$$

которые определяют te_i, uu_i соответственно.

Система дополнительных условий:

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_1^i e_3^i = 0, \ e_5 \perp e_3; \quad \sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_1^i e_4^i = 0, \ e_5 \perp e_4;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_2^i e_4^i = 0, \ e_6 \perp e_4; \quad \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_1^i e_2^i = uu_1(te_1 + te_2), \ e_6 \perp e_5,$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_1^i e_3^i = uu_1 \cdot uu_2, \ e_7 \perp e_5; \quad \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_2^i e_3^i = uu_2(te_2 + te_3), \ e_7 \perp e_6;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_1^i e_4^i = 0, \ e_8 \perp e_5; \quad \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_2^i e_4^i = uu_2 \cdot uu_3, \ e_8 \perp e_6;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_3^i e_4^i = uu_3(te_3 + te_4), \ e_8 \perp e_7;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^3 e_1^i e_3^i = uu_1 \cdot uu_2(te_1 + te_2 + te_3), \ e_9 \perp e_7;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^3 e_1^i e_4^i = uu_1 \cdot uu_2 \cdot uu_3, \ e_9 \perp e_8;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^3 e_2^i e_4^i = uu_2 \cdot uu_3(te_2 + te_3 + te_4), \ e_{10} \perp e_8;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_5^i e_6^i = uu_5(te_5 + te_6), \ e_{10} \perp e_9;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_5^i e_7^i = uu_5 \cdot uu_6, \ e_{11} \perp e_9;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^4 e_1^i e_4^i = uu_1 \cdot uu_2 \cdot uu_3 \cdot (te_1 + te_2 + te_3 + te_4), \ e_{12} \perp e_9;$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_6^i e_7^i = uu_6(te_6 + te_7), \ e_{11} \perp e_{10};$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_6^i e_8^i = uu_6 \cdot uu_7, \ e_{12} \perp e_{10};$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_7^i e_8^i = uu_7(te_7 + te_8), \ e_{12} \perp e_{11}.$$

Поясним, как получено первое дополнительное условие $e_5 \perp e_3$, обеспечивающее ортогональность e_5 к e_3. Напомним, что система $CE_i = \lambda_i E_i$ называется спектральной. Умножаем первое уравнение спектральной системы

$$te_1 \cdot e_1^i + uu_1 \cdot e_2^i + vd_1 \cdot e_5^i = \lambda_i e_1^i$$

последовательно на e_1^i, e_2^i, e_3^i и каждый раз суммируем по i. Так как векторы e_1, e_2, e_3 ортонормальны, а $te_1 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i (e_1^i)^2$, $uu_1 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_1^i e_2^i$, получаем соотношения

$$vd_1 \sum_{i=1}^{l} e_5^i e_1^i = 0, \quad vd_1 \sum_{i=1}^{l} e_5^i e_2^i = 0, \quad vd_1 \sum_{i=1}^{l} e_5^i e_3^i = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_1^i e_3^i$$

в первом, втором и третьем случаях соответственно. Отсюда следует, что для ортогональности e_5, e_3 необходимо, чтобы выполнялось первое дополнительное условие: $\sum_{i=1}^{l} \lambda_i e_1^i e_3^i = 0$, в то время как ортогональность e_5 к e_1, e_2 следует автоматически из определения te_1, uu_1.

Остальные дополнительные условия получаются аналогично. В случае трехдиагональной матрицы [7] ортогональность всех вычисляемых e_j следует из определения te_i, uu_i.

Была поставлена цель на конкретном примере ($M = 3$, $N = 4$) проверить необходимость выполнения дополнительных условий и возможность определения недостающих компонент e_j^i, $j = 2, ..., N$, $i = 1, ..., l$, через решение системы дополнительных условий совместно с условиями ортонормальности. Начальное значение $\lambda_1 = 0.96775...$ было возмущено, в расчетах $\lambda_1 = 0.96$.

В работе [8] описаны попытки сведения решения системы дополнительных условий совместно с условиями ортонормальности к решению трех систем для последовательной коррекции e_2^i, e_3^i, e_4^i. На таком пути удалось решить систему 24 из 27 уравнений. Остались неудовлетворенными 3 дополнительных условия, обеспечивающие ортогональность векторов e_{10}, e_{11}, e_{12}. В этих соотношениях e_3^i, e_4^i присутствуют одновременно. Попытки решать попеременно системы относительно e_3^i, e_4^i при замороженных e_4^i, e_3^i соответственно не дали результата. Итерации метода Ньютона расходились, включая модификации с переменными шагами. Коррекция e_2 была произведена предварительно: e_2^i, $i = 1, 2, 3$, были определены из решения системы

$$(e_1, e_2) = 0, \quad (e_2, e_2) = 1; \quad \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_1^i e_2^i = uu_1(te_1 + te_2), \ e6 \perp e5.$$

При этом e_1 и e_2^i, $i = 4, ..., l$, оставались равными исходным значениям. Задачу удалось решить до конца на другом пути. e_3, e_4 корректировались одновременно из решения системы 45 уравнений с 45 переменными:

$$e_3^i, \ e_4^i, \ i = 1, ..., 12, \ uu_2, \ uu_3, \ uu_6, \ uu_7, \ te_3, \ te_4, \ te_6, \ te_7, \ te_8,$$

$$vd_2, \ vd_3, \ vd_4, \ u2, \ v2, \ u3, \ v3, \ su3, \ su4, \ s67, \ s68, \ s78.$$

Первые 36 переменных являются компонентами базисных собственных векторов и элементами искомой пятидиагональной матрицы. Остальные 9 переменных определяются соотношениями: $u2 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_2^i e_3^i$,

$$v2 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_3^i e_4^i, \ u3 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^3 e_2^i e_3^i, \ v3 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^3 e_3^i e_4^i, \ su3 = \sum_{i=1}^{l} (\lambda_i e_3^i)^2,$$

$$su4 = \sum_{i=1}^{l} (\lambda_i e_4^i)^2, \ s67 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_6^i e_7^i, \ s68 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_6^i e_8^i, \ s78 = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_7^i e_8^i.$$

Из 45 уравнений системы 24 являются условиями ортонормальности и дополнительными условиями (напомним, что всего их 27, 3 были использованы при коррекции e_2). Остальные 21 уравнение являются соотношениями, определяющими элементы матрицы:

$$uu_2,\ uu_3,\ uu_6,\ uu_7,\ te_3,\ te_4,\ te_6,\ te_7,\ te_8,\ vd_2,\ vd_3,\ vd_4$$

и переменные $u2$, $v2$, $u3$, $v3$, $su3$, $su4$, $s67$, $s68$, $s78$. Система 45 полиномиальных уравнений была решена на SPP (здесь и далее имеется в виду HP Exemplar S-Class SPP-2000) с помощью пакета NUMERIC, REDUCE 3.6 [3]. В результате была обеспечена идеальная ортонормальность вычисляемых "базисных" векторов, но возникло новое препятствие, о котором пойдет речь в параграфе 3.

3. УСЛОВИЯ СОГЛАСОВАННОСТИ

Если при вычислении элементов трехдиагональной матрицы и ее базисных собственных векторов участвуют все уравнения спектральной системы [7], то при вычислении элементов рассматриваемой пятидиагональной матрицы и ее базисных собственных векторов (по заданному спектру и первым N компонентам для каждого базисного собственного вектора) нижние N уравнений спектральной системы не используются. Соответственно, вычисленные "базисные" векторы не удовлетворяют нижним N уравнениям спектральной системы автоматически и значит не являются базисными. Это выяснилось в процессе численных экспериментов. Чтобы вычисляемые "базисные" векторы действительно были базисными, пришлось добавить условия "согласованности". Сначала в качестве таковых были взяты соотношения

$$vd_5^2 + te_9^2 + uu_9^2 = \sum_{i=1}^{l}(\lambda_i e_9^i)^2,$$

$$vd_6^2 + uu_9^2 + te_{10}^2 + uu_{10}^2 = \sum_{i=1}^{l}(\lambda_i e_{10}^i)^2,$$

$$vd_7^2 + uu_{10}^2 + te_{11}^2 + uu_{11}^2 = \sum_{i=1}^{l}(\lambda_i e_{11}^i)^2,$$

$$vd_8^2 + uu_{11}^2 + te_{12}^2 = \sum_{i=1}^{l}(\lambda_i e_{12}^i)^2.$$

Они получаются простым возведением в квадрат нижних N уравнений спектральной системы с последующим суммированием по i и учетом ортонормальности. Заметим, что элементы нижних N строк матрицы определяются без использования нижних N уравнений спектральной системы. Вообще говоря, они не обязаны удовлетворять выписанным соотношениям. Попытки решить "полную" систему вместе с последними четырьмя уравнениями не дали результата. После этого была сделана еще одна попытка: в качестве условий "согласованности" были взяты просто 4 последних уравнения спектральной системы при $\lambda_i = \lambda_1$:

$$vd_5 \cdot e_5^1 + (te_9 - \lambda_1)e_9^1 + uu_9 \cdot e_{10}^1 = 0,$$

$$vd_6 \cdot e_6^1 + uu_9 \cdot e_9^1 + (te_{10} - \lambda_1)e_{10}^1 + uu_{10} \cdot e_{11}^1 = 0,$$

$$vd_7 \cdot e_7^1 + uu_{10} \cdot e_{10}^1 + (te_{11} - \lambda_1)e_{11}^1 + uu_{11} \cdot e_{12}^1 = 0,$$

$$vd_8 \cdot e_8^1 + uu_{11} \cdot e_{11}^1 + (te_{12} - \lambda_1)e_{12}^1 = 0.$$

Эта попытка оказалась успешной: для остальных λ_i нижние N уравнений удовлетворялись автоматически. Итак, чтобы вычисляемые базисные векторы удовлетворяли нижним N уравнениям при всех λ_i, $i = 1, ..., l$, достаточно потребовать, чтобы эти уравнения выполнялись при каком-то одном λ_i. В качестве условий "согласованности" могут быть взяты последние N уравнений спектральной системы при $\lambda_i = \lambda_1$.

Итак, компоненты векторов $e_2, ..., e_N$ должны удовлетворять системе

$$L = (N-1)(N+2)/2 + (N-1)^2(M-1) + N$$

уравнений. Покажем, что $L \le (N-1)NM$. Последнее соотношение эквивалентно неравенству $2N - 1 + (N-1)N/2 \le (N-1)^2 + (N-1)M$. После деления на $(N-1)$ и примитивных арифметических преобразований получаем $3 + 1/(N-1) \le N/2 + M$. Последнее неравенство справедливо при $N \ge 2$, $M \ge 3$. Равенство достигается лишь при $N = 2, M = 3$. Следовательно, первые компоненты базисных собственных векторов e_1^i могут быть выбраны произвольными, только $||e_1|| = 1$.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЦЫ

Обсуждается задача восстановления симметричной пятидиагональной матрицы 12×12 по заданному спектру и первым компонентам базисных собственных векторов. $\lambda_1 = 0.96$, остальные $\lambda_i, i = 2, ..., 12$, остаются невозмущенными. В качестве e_1^i были взяты первые компоненты базисных собственных векторов невозмущенной задачи. В рассматриваемом случае компоненты векторов e_2, e_3, e_4 должны удовлетворять 31 условию. Компоненты e_2^i, $i = 8, ..., 12$, принимаются равными соответствующим невозмущенным значениям. Первые 7 компонент вектора e_2 и все компоненты векторов e_3, e_4 находятся из решения системы 64 полиномиальных уравнений одновременно с элементами искомой возмущенной матрицы и переменными $su1$, $su2$, $su3$, $su4$. Система решается с помощью пакета NUMERIC, REDUCE 3.6 [3]:

```
load_package numeric;
rt:=num_solve(sys,var,accuracy=na,iterations=ni);
var:={x1=eg(2,1),x2=eg(2,2),x3=eg(2,3),x4=eg(2,4),
x5=eg(2,5),x6=eg(2,6),x7=eg(2,7),y1=eg(3,1),y2=eg(3,2),
y3=eg(3,3),y4=eg(3,4),y5=eg(3,5),y6=eg(3,6),y7=eg(3,7),
y8=eg(3,8),y9=eg(3,9),y10=eg(3,10),y11=eg(3,11),
y12=eg(3,12),z1=eg(4,1),z2=eg(4,2),z3=eg(4,3),z4=eg(4,4),
z5=eg(4,5),z6=eg(4,6),z7=eg(4,7),z8=eg(4,8),z9=eg(4,9),
z10=eg(4,10),z11=eg(4,11),z12=eg(4,12),uu1=-1,uu2=-1,
uu3=-1,uu5=-1,uu6=-1,uu7=-1,uu9=-1,uu10=-1,uu11=-1,te2=4,
te3=4,te4=4,te5=4,te6=4,te7=4,te8=4,te9=4,te10=4,te11=4,
te12=4,vd1=1,vd2=1,vd3=1,vd4=1,vd5=1,vd6=1,vd7=1,
vd8=1,su2=du2,su3=du3,su4=du4};
```

Базисные векторы являются столбцами матрицы $eg(12, 12)$. В число 64 уравнений системы sys входят 9 условий ортонормальности, 18 дополнительных условий, 4 условия совместности, 29 соотношений, определяющих элементы матрицы, и 4 соотношения, определяющих sui:

$$sui = \sum_{j=1}^{l} (\lambda_j e_i^j)^2, \ i = 1, 2, 3, 4.$$

В пакете NUMERIC реализован алгоритм метода Ньютона для решения систем нелинейных уравнений $F(x) = 0$, $x = (x_1, ..., x_n)^T$, $F = (f_1, ..., f_n)^T$. В качестве компонент x^0 , начальных данных для итераций метода Ньютона $x^{n+1} = x^n - (F'(x^n))^{-1} F(x^n)$ [1], были взяты значения переменных, отвечающие невозмущенной задаче.

5. ПРОВЕРКА КОРРЕКТНОСТИ

Для проверки корректности полученных результатов по заданным λ_i, e_1 и скорректированным $e_2, ..., e_N$ вычисляем элементы пятидиагональной матрицы C и остальные компоненты базисных собственных векторов $e_{N+1},...,e_l$. С использованием системы REDUCE был реализован алгоритм, аналогичный алгоритму реконструкции трехдиагональных матриц [7].

АЛГОРИТМ. По заданному спектру и заданным первым N компонентам для каждого базисного собственного вектора последовательно по $i=1,...,N$ вычисляются $te_i=\sum_{j=1}^{l}\lambda_j(e_i^j)^2$;

$$uu_i=\sum_{j=1}^{l}\lambda_j e_i^j e_{i+1}^j,\ i\neq N;$$

$$x_i^j=uu_{i-1}e_{i-1}^j+(te_i-\lambda_j)e_i^j+uu_ie_{i+1}^j,\ j=1,...,l.$$

Здесь и далее $uu_0=0, uu_N=0, uu_{2N=0}=0,...,uu_{MN}=0$: имеется в виду, что слагаемые, содержащие uu_i с i кратным N, отсутствуют.

$$vd_i=-\sqrt{\sum_{j=1}^{l}(x_i^j)^2},\ e_{N+i}^j=-x_i^j/vd_i,\ j=1,...,l.$$

Далее рекуррентно по $q=1,...,M-1$ и последовательно по $i=1,...,N$ вычисляются

$$te_{qi}=\sum_{j=1}^{l}\lambda_j(e_{qi}^j)^2,\ qi=q\times N+i;$$

$$uu_{qi}=\sum_{j=1}^{l}\lambda_j e_{qi}^j e_{qi+1}^j,\ i\neq N;\ uu_{q0}=uu_{qN}=0.$$

И для $q=1,...,M-2$ вычисляются

$$x_{qi}^j=vd_{qi-N}e_{qi-N}^j+uu_{qi-1}e_{qi-1}^j+(te_{qi}-\lambda_j)e_{qi}^j+uu_{qi}e_{qi+1}^j,\ j=1,...l;$$

$$vd_{qi}=-\sqrt{\sum_{j=1}^{l}(x_{qi}^j)^2},\ e_{qi+N}^j=-x_{qi}^j/vd_{qi},\ j=1,...l.$$

Затем вычисляется (с применением пакета ROOTS [3]) спектр sp полученной матрицы mt . Проверяется также ортонормальность вычисленных векторов $e_j,\ j=5,...,12.$ Так, при решении системы 24 уравнений - системы, обеспечивающей ортонормальность $e_1,...,e_4$ и выполнение дополнительных условий, кроме трех последних,- были получены такие результаты. В скобках с номером i стоят величины

$$((e_1,e_i),...,(e_i,e_i),0,...,0).$$

```
er := mat((1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0),
(0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0),
(1.148...e-27, - 1.454...e-26,1.0,0,0,0,0,0,0,0,0,0),
.........................................................
2.800...e-25, - 2.869...e-25,6.621...e-24,0.00408...,1,0),
(3.566...e-26, 9.102...e-26, -5.177...e-26, - 5.092...e-27,
7.934...e-26, 3.662...e-25, -1.325...e-25, 3.102...e-26,
-6.333...e-25, 0.305..., 0.0103..., 1)).
```

Как и ожидалось, векторы e_{10}, e_{11}, e_{12} не ортогональны, так как не удовлетворены соответствующие 3 последних дополнительных условия. В то время как остальные условия ортонормальности выполняются с высокой точностью.

6. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Обсуждаются результаты решения задачи восстановления симметричной пятидиагональной матрицы 12×12 по заданному спектру и первым компонентам базисных собственных векторов: $\lambda_1 = 0.96$, остальные точки спектра и первые компоненты базисных собственных векторов совпадают с исходными значениями, отвечающими невозмущенной матрице.

Расчеты выполнены на SPP с применением REDUCE 3.6 [3]. В процессе счета определяется время счета, включая аналитические вычисления, связанные с построением полиномиальной системы 64 уравнений.

Time: 3077050 ms plus GC time: 2371770 ms;

Второе время "GS time" - время сборки мусора. Расчеты проводились с точностью PRECISION 15, было сделано 10 итераций по методу Ньютона. Получены следующие результаты. Ниже приводится решение системы 64 полиномиальных уравнения - *rt*. Для краткости оставлены лишь 3 первые компоненты возмущенного вектора e_2, компоненты найденных e_3, e_4 не приводятся, вместо них стоят многоточия, далее следуют элементы возмущенной матрицы.

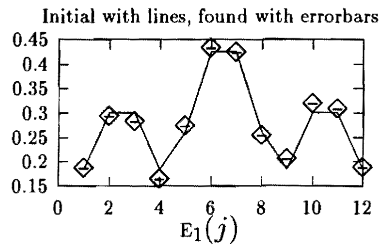
```
rt := {x1=0.29199744810, x2=0.17892815399,  x3=-0.1860226459,
   .......             ......              .......
uu1=-0.99857616882, uu2=-0.93278096115,    uu3=-0.92501588,
te2=4.0243560284,   te3=4.0497279369,      te4=4.025782195,
```

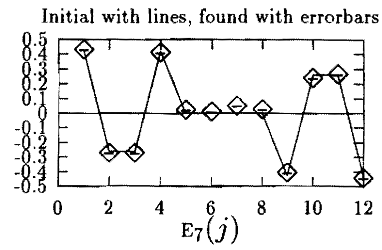
```
te5=3.9695149371,     te6=3.9827897090,      te7=3.9924048391,
te8=4.040954776,      te9=3.9898643965,      te10=3.973428471,
te11=3.9635271034,    te12=3.9801649979,     vd1=1.0022334844,
vd2=1.0358524379,     vd3=1.0554057399,      vd4=0.9513142332,
vd5=1.0607333883,     vd6=0.97310263007,     vd7=0.9340274450,
vd8=0.98235300221,    uu5= - 0.96948708247,  uu6=-1.010745346,
uu7= - 1.0396662704,  uu9= - 1.0376083614,   uu10=-1.06095785,
uu11= - 1.022499574,  su2=19.135666402999,   su3=19.239912353,
su4=17.9675754512291}.
```

Для проверки корректности счета по заданным λ_i, e_1^i и найденным возмущенным e_2, e_3, e_4 была вычислена (по алгоритму, аналогичному алгоритму вычисления симметричных трехдиагональных матриц, см. параграф 5) симметричная пятидиагональная матрица mt. Ее элементы идеально (практически с расчетной точностью) совпали с соответствующими компонентами решения полиномиальной системы rt. Одновременно с элементами матрицы вычисляются все компоненты базисных собственных векторов. Матрица $er = I + O(10^{-11})$ демонстрирует прекрасную ортонормальность вычисленных собственных векторов E_j (сравните с er в конце параграфа 5). Был найден характеристический многочлен $det(mt - \lambda I)$, и с применением пакета ROOTS [3] вычислены его корни. Ниже, в левом столбце, приведены исходные заданные собственные значения. В правом столбце стоят решения характеристического многочлена вычисленной пятидиагональной матрицы mt.

```
Given spectrum                   Found spectrum
g:={0.96,                     sp:={0.959999999999521,
1.96775244887701,                1.96775244887522,
2.38196601125011,                2.38196601125278,
3.2038204263768,                 3.20382042653208,
3.38196601125011,                3.38196601088368,
3.7961795736232,                 3.79617957432827,
4.2038204263768,                 4.20382042508211,
4.61803398874989,                4.61803399114552,
4.7961795736232,                 4.79617957192296,
5.61803398874989,                5.6180339889683,
6.03224755112299,                6.03224755104145,
7.03224755112299}.               7.03224755112361}.
```

Элементы g, sp совпадают с восьмью знаками после точки, здесь точность PRECISION 15. При увеличении точности до PRECISION 25 элементы g, sp совпадают с семнадцатью знаками после точки. Например, $\lambda_1 = 0.9600000000000000000000001$. Интересно, что при этом время счета не возросло. Видно, что найдено решение обратной задачи.





На рисунках выше представлены первый и седьмой базисные собственные векторы исходной и возмущенной симметричных пятидиагональных матриц.

Проведенный расчет имеет принципиальное значение. Предварительные теоретические прикидки приводили к ложным заключениям. Казалось, что достаточно удовлетворить лишь часть дополнительных условий. В процессе вычислений выяснилась необходимость выполнения всех дополнительных условий. Но этого оказалось недостаточно. После того как была решена "полная" система, стало видно, что построенные "базисные" векторы не удовлетворяют последним N уравнениям спектральной системы. Расчеты показали необходимость постановки условий согласованности.

Для подтверждения сказанного приведем значения первого и последнего собственных значений вычисляемой пятидиагональной матрицы mt в промежуточных расчетах, когда в качестве исходных значений компонент e_2, e_3, e_4 выбирались соответственно:

а) компоненты невозмущенных базисных собственных векторов -
$\lambda_1 = 0.9665730234841419237367531, \lambda_{12} = 7.0284116856553993961233375;$

б) решение "полной системы" без трех последних условий, обеспечивающих ортогональность e_{10}, e_{11}, e_{12}, –
$\lambda_1 = 0.9859537736356722366983022, \lambda_{12} = 7.0031581517286313080746 87;$

в) решение "полной системы" без учета условий согласованности -
$\lambda_1 = 1.0076364404044405430264 14, \lambda_{12} = 6.9750470494088662682105 9.$

Реализованный численный алгоритм неустойчив. Аналогичный расчет с $\lambda_1 = 0.973$ дал столь же хорошие результаты, как и для $\lambda_1 = 0.96$.

В то время как при $\lambda_1 = 0.97$ и $\lambda_1 = 0.975$ итерации метода Ньютона расходятся.

7. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ: ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ, $k(M,N)$

Ортогональность векторов $e_{N+i},\ i = 1, ..., N,$ к векторам $e_1, ..., e_{N+i-1}$ следует из ортонормальности векторов $e_1, ..., e_N$ и определения $te_i,\ uu_i$. Кроме того, должны выполняться дополнительные условия:

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j e_i^j e_q^j = 0,\ i = 1, ..., N-2,\ q = i+2, ..., N,\ e_{N+i} \perp e_q;$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^2 e_i^j e_{i-1}^j = uu_{i-1}(te_i + te_{i-1}),\ i = 2, ..., N,\ e_{N+i} \perp e_{N+i-1};$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^2 e_i^j e_{i-2}^j = uu_{i-1}uu_{i-2},\ i = 3, ..., N,\ e_{N+i} \perp e_{N+i-2};$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^2 e_i^j e_q^j = 0,\ i = 4, ..., N,\ q = 1, ..., i-3,\ e_{N+i} \perp e_{N+q}.$$

Пусть обеспечена ортогональность векторов $e_{Np+i},\ i = 1, ..., N,$ к векторам $e_1, ..., e_{Np+i-1}$. Тогда для ортогональности $e_{N(p+1)+i},\ i = 1, ..., N,$ к векторам $e_1, ..., e_{N(p+1)+i-1}$ должны выполняться следующие дополнительные соотношения:

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j e_{Np+i}^j e_{Np+q}^j = 0,\ i = 1, ..., N-2,\ q = i+2, ..., N,\ e_{N(p+1)+i} \perp e_{Np+q};$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^2 e_{Np+i}^j e_{Np+i-1}^j = uu_{Np+i-1}(te_{Np+i} + te_{Np+i-1}),\ i = 2, ..., N,$$
$$e_{N(p+1)+i} \perp e_{N(p+1)+i-1};$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^2 e_{Np+i}^j e_{Np+i-2}^j = uu_{Np+i-1}uu_{Np+i-2},\ i = 3, ..., N,$$
$$e_{N(p+1)+i} \perp e_{N(p+1)+i-2};$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j e_{Np+i}^j e_{Np+q}^j = 0,\ i = 4, ..., N,\ q = 1, .., i-3,\ e_{N(p+1)+i} \perp e_{N(p+1)+q}.$$

Здесь $1 \le p \le M-2$. Когда система дополнительных условий используется для определения недостающих компонент, в нее подставляются

e^j_{Np+i} как явные функции первых N компонент базисных собственных векторов. Эти функции легко вычисляются из простых рекуррентных соотношений:

$$A_1 G_0^j + D_1 G_1^j = \lambda_j G_0^j, \; G_p^j = [e^j_{Np+1}, ..., e^j_{Np+N}]^T,$$

$$D_{p-1} G_{p-2}^j + A_p G_{p-1}^j + D_p G_p^j = \lambda_j G_{p-1}^j, \; 2 \le p \le M-1.$$

В результате подстановок получаются громоздкие выражения. Их можно упростить, используя определения te_i, uu_i , соотношения ортонормальности и предшествующие группы дополнительных преобразованных условий. Так были получены простые дополнительные условия (см. параграф 2).

Для $M = 3$, $N = 4$ первые компоненты базисных собственных векторов e_1^j, $j = 1, ..., l$, задаются произвольно, а $e_2^j, ..., e_l^j$ определяются из решения системы. В общем случае k первых компонент базисных собственных векторов $e_1^j, ..., e_k^j$, $j = 1, ..., l$, задаются произвольно, а $e^j_{N-k}, ..., e^j_N$ определяются из решения системы. Естественно предполагается, что векторы $e_1, ..., e_k$ ортонормальны. Число k должно удовлетворять соотношению

$$N + (N-1)^2(M-1) + (N-k) + \frac{(N-k)(k+N-1)}{2} \le (N-k)NM.$$

Лемма. Пусть x_1 - меньший из двух положительных корней многочлена

$$P(x) = x^2 - (2MN-1)x + N(N-3) + 2(2N-1)(M-1).$$

Тогда k есть целая часть x_1, $k = [x_1]$.

Так, для $M = 3$, $N = 4$ меньший корень $x_1 = 1,48...$, $k = 1$. А для $M = 4$, $N = 7$ меньший корень $x_1 = 2$ и $k = 2$.

В общем случае имеем $x_{1,2} = MN - 1/2 \mp \sqrt{d}$, где

$$d = (MN - \frac{1}{2})^2 - N(N-3) - 2(2N-1)(M-1).$$

Для $N \ge M \ge 3$ справедливо соотношение $(MN - \frac{1}{2})^2 > d > 3N^2$. Так что оба корня положительные и $x_2 > 3N$.

Производя элементарные преобразования, получаем, что для $N \ge M \ge 3$ справедливы соотношения:

$$P(1) = 2(N-1)(M-2) + N(N-3) \ge 4,$$

$$P(N) = -2N - 2(N-1)^2(M-1) < 0.$$

Отсюда следует, что $1 < x_1 < N$, $1 \le k < N$.

В случае $M = N = 2$ имеем $x_1 = 0.62...$, $x_2 = 6.37..., k = 0$. Наконец, для $M = 2$, $N = 3$ полином P имеет корни $x_1 = 1$, $x_2 = 10$ и значит $k = 1$.

Следовательно, для $N \ge M \ge 2$, за исключением $M = N = 2$, число произвольно задаваемых компонент не меньше 1 (для каждого базисного собственного вектора). Но все N компонент не могут быть заданы произвольно $k < N$. Так что всегда приходится решать систему для определения $N - k$ недостающих компонент.

ЗАМЕЧАНИЕ. Построенная возмущенная симметричная пятидиагональная матрица C соответствует дискретному уравнению Шредингера с нелокальным потенциалом [6]:

$$-\frac{\psi_{i-1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i+1,j}}{h_x^2} - \frac{\psi_{i,j-1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j+1}}{h_y^2} + U_{ij}\psi_{ij} +$$

$$+\xi_{ij}\psi_{i+1,j} + \xi_{i-1,j}\psi_{i-1,j} + \eta_{ij}\psi_{i,j+1} + \eta_{i,j-1}\psi_{i,j-1} = \lambda\psi_{i,j}.$$

Элементы матрицы C (см. стр. 3) содержат θ_i, u_i, v_i, которые определяют элементы нелокального потенциала

$$U_{ij} = \theta_{(i-1)N+j}, \quad \xi_{ij} = v_{(i-1)N+j}, \quad \eta_{ij} = u_{(i-1)N+j}.$$

ВЫВОДЫ. Конкретный расчет позволил до конца прояснить постановку обратной задачи для двумерного дискретного уравнения Шредингера. Симметричная пятидиагональная матрица может быть восстановлена по заданному спектру и первым $k(M,N)$ компонентам для каждого базисного собственного вектора. Элементы матрицы вместе с недостающими компонентами e_i^j, $i = N-k, ..., N$, $j = 1, ..., MN$, могут быть определены из решения системы полиномиальных уравнений. В систему входят условия ортогональности e_i, $i = N-k, ..., N$ к предшествующим векторам $e_1, ..., e_{i-1}$, условия нормировки $||e_i|| = 1$, дополнительные условия, обеспечивающие ортогональность векторов e_ξ, $\xi = N+1, ..., l$ к предшествующим $e_1, ..., e_{\xi-1}$, условия совместности, обеспечивающие выполнение N нижних уравнений спектральной задачи, и, наконец, соотношения, определяющие элементы матрицы через собственные значения и компоненты базисных собственных векторов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ. Приношу благодарность Б.Н.Захарьеву за постановку задачи. Приношу благодарность Н.С.Бахвалову и Е.П.Жидкову за полезные обсуждения и поддержку. Приношу благодарность М.Павлушу за сотрудничество в начальной стадии исследований. Приношу благодарность А.А.Боголюбской, Н.С.Заикину, В.И.Коробову, Г.В.Коробовой, В.А.Ростовцеву, А.М.Рапортиренко, В.А.Степаненко, Т.А.Стриж, Е.П.Юкаловой за консультации и помощь на длинном пути в поиске решения задачи.

Список литературы

1. Н.С.Бахвалов - Численные методы. М.:"НАУКА", 1978.

2. Ф.Р.Гантмахер - Теория матриц. М.:"НАУКА", 1967.

3. Hearn A.C. - REDUCE User's Manual. Version 3.6. Rand, Santa Monica, 1995. CA 90407-2138.

4. А.Г.Рамм - Многомерные обратные задачи рассеивания. М.:"МИР", 1994.

5. S.I.Serdyukova, B.N.Zakhariev - Phys.Rev. A 1992, V.46, No.1, P. 58-62.

6. S.I.Serdyukova, B.N.Zakhariev - Phys.Rev.A 1993, V.47, No.5, P. 3518-3522.

7. S.I.Serdyukova - Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling 1993, V.8, No.3, P. 245-263.

8. С.И.Сердюкова, М.Павлуш - Краткие сообщения ОИЯИ,1999, N3[95], с.5-11.

9. B.N.Zakhariev, A.A.Suzko - Direct and Inverse Problems. Potentials in Quantum Scattering (Springer, Heidelberg,1990), Sec.2.4.

Рукопись поступила в издательский отдел
15 марта 2000 года.

Сердюкова С.И. P11-2000-57
Обратная задача для двумерного дискретного уравнения Шредингера

Для двумерного дискретного уравнения Шредингера решается краевая задача в прямоугольнике $M \times N, M \leq N$, с нулевыми граничными условиями. В этой работе установлено, что обратная задача сводится к построению симметричной пятидиагональной матрицы C по заданному спектру и первым $k(M,N)$, $1 \leq k < N$, компонентам для каждого базисного собственного вектора. Матрица C имеет лакуну между второй и $(N+1)$-й диагоналями. В результате первые N компонент базисных собственных векторов должны удовлетворять системе $(N-1)^2\ (M-1)$ дополнительных условий и N условий согласованности. Элементы C определяются совместно с «недостающими» $(N-k)$ компонентами из решения системы полиномиальных уравнений, в которую наряду с условиями ортонормальности, дополнительными условиями и условиями согласованности входят соотношения, определяющие элементы матрицы C через собственные значения и компоненты базисных собственных векторов. Постановку задачи удалось прояснить до конца в процессе конкретных расчетов. Вывод и решение громоздких полиномиальных систем проводились на SPP с применением CAS REDUCE 3.6.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2000

Перевод автора

Serdyukova S.I. P11-2000-57
Inverse Problem for Two-Dimensional Discrete Schrödinger Equation

For two-dimensional discrete Schrödinger equation the boundary-value problem in rectangle $M \times N$ with zero boundary conditions is solved. It's stated in this work, that inverse problem reduces to reconstruction of C symmetric five-diagonal matrix with given spectrum and given first $k(M,N)$, $1 \leq k < N$, components for each of basic eigenvectors. C matrix has lacuna between the second and $(N+1)$-th diagonals. As a result the first N components of basic eigenvectors must satisfy $(N-1)^2\ (M-1)$ additional conditions and N conditions of compatibility. The elements of C together with «lacking» $(N-k)$ components can be determined by solving the system of the additional conditions, the compatibility conditions and the orthonormality conditions coupled with relations determining elements of C matrix by eigenvalues and components of basic eigenvectors. We succeeded to clear the statement of the problem to the end in the process of concrete calculations. Deriving and solving the huge polynomial systems had been performed on SPP by using CAS REDUCE 3.6.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2000