УДК 519.63

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ НА СОБСТВЕННЫЕ ВЕКТОРЫ ПРИ РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

С.И.Сердюкова, М.Павлуш *

По аналогии с одномерным случаем [1] разработан алгоритм численного решения обратной задачи для двумерного уравнения Шредингера. Задача сводится к построению симметричной пятидиагональной матрицы M*N по заданному спектру и первым N компонентам для каждого базисного собственного вектора. В отличие от одномерного случая все N компонент не могут быть произвольными. Установлено, что они должны удовлетворять $(N-1)^2(M-1)$ дополнительным условиям. В этой работе обсуждается также возможность определения недостающих компонент из решения системы дополнительных условий совместно с условиями ортонормальности.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Additional Conditions on Eigenvectors in Solving Inverse Problem for Two-Dimensional Shrödinger Equation

S.I.Serdyukova, M.Pavlush

By analogy with one-dimensional case [1] an algorithm of numerical solution of the inverse problem for two-dimensional Shrödinger equation is worked out. The problem reduces to reconstruction of symmetric five-diagonal M*N matrix with given spectrum and given first N components for each of basic eigenvectors. But in difference with one-dimensional case all N components can't be chosen arbitrary. It is stated that they must satisfy $(N-1)^2(M-1)$ additional conditions. In this work we discuss as well the possibility of determining lacking components by solving the system of additional conditions coupled with the orthonormality conditions.

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

Движение волн на решётках описывается в дискретной квантовой механике разностным уравнением Шредингера

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

*Технический университет, Кошице, Словакия

Рассматривается задача в прямоугольнике $1 \leq i \leq M, \quad 1 \leq j \leq N$, с нулевыми граничными условиями

$$\psi_{0,j}(\lambda) = \psi_{M+1,j}(\lambda) = \psi_{i,0}(\lambda) = \psi_{i,N+1}(\lambda) = 0.$$

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

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

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

$$1 \leq i, m \leq M, \ 1 \leq j, n \leq N, \ l = M \times N.$$

Упорядочим собственные значения в порядке возрастания

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 ... \leq \lambda_l.$$

Вводим в рассмотрение векторы $E_\xi = [e_1(\xi), ..., e_l(\xi)] =$

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

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

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

являются симметричными трёхдиагональными матрицами. А ан боковых диагоналях стоят блоки $D_i = -I$, где $I-$ единичные матрицы порядка N.

Ставится задача восстановления потенциала по заданному спектру и заданным первым компонентам базисных векторов. Что эквивалентно задаче построения пятидиагональной матрицы M с возмущёнными блоками: в блоках D_i на боковых диагоналях

$$D_i(j,j) = -1 + v_{ki+j}, \quad j = 1, ...N, \ ki = (i-1)N,$$

а на главной диагонали

$$A_i = \begin{bmatrix} 4+\theta_{ki+1} & -1+u_{ki+1} & \dots & 0 \\ -1+u_{ki+1} & 4+\theta_{ki+2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & -1+u_{ki+N-1} \\ 0 & \dots & -1+u_{ki+N-1} & 4+\theta_{ki+N} \end{bmatrix}.$$

Заметим, что $-1 + u_j = \sum\limits_{i=1}^{l} \lambda_i e_j(i) e_{j+1}(i), \ 4 + \theta_j = \sum\limits_{i=1}^{l} \lambda_i e_j(i)^2.$

В [1] предложен эффективный алгоритм вычисления трёхдиагональных матриц и базисных векторов по заданному спектру и первым компонентам $e_1(i)$. Такой же алгоритм пригоден для построения пятидиагональных матриц. Разница состоит в том, что для вычисления пятидиагональной матрицы требуются N первых компонент $e_j(i)$, $j = 1, ..., N$, $i = 1, ..., l$. 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: $(e_1, e_j) = 0, ..., (e_{j-1}, e_j) = 0$,
$j = N+1, ..., l$. 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 число компонент этих векторов.

Ниже приведена система 18 дополнительных условий для $N = 4$, $M = 3$. Используются обозначения $-1 + u_i = uui$, $4 + \theta_i = tei$, $e_j(i) = e_j^i$, $\sum = \sum_{i=1}^{l}$.

Система дополнительных условий:

$$\sum \lambda_i e_1^i e_3^i = 0, \ 5 \perp 3; \quad \sum \lambda_i e_1^i e_4^i = 0, \ 5 \perp 4;$$

$$\sum \lambda_i e_2^i e_4^i = 0, \ 6 \perp 4; \quad \sum \lambda_i^2 e_1^i e_2^i = uu1(te1 + te2), \ 6 \perp 5,$$

$$\sum \lambda_i^2 e_1^i e_3^i = uu1 * uu2, \ 7 \perp 5; \quad \sum \lambda_i^2 e_2^i e_3^i = uu2(te2 + te3), \ 7 \perp 6;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_1^i e_4^i = 0, \ 8 \perp 5; \quad \sum \lambda_i^2 e_2^i e_4^i = uu2 * uu3, \ 8 \perp 6;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_3^i e_4^i = uu3(te3 + te4), \ 8 \perp 7;$$

$$\sum \lambda_i^3 e_1^i e_3^i = uu1 * uu2(te1 + te2 + te3), \ 9 \perp 7;$$

$$\sum \lambda_i^3 e_1^i e_4^i = uu1 * uu2 * uu3, \ 9 \perp 8;$$

$$\sum \lambda_i^3 e_2^i e_4^i = uu2 * uu3(te2 + te3 + te4), \ 10 \perp 8;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_5^i e_6^i = uu5(te5 + te6), \ 10 \perp 9;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_5^i e_7^i = uu5 * uu6, \ 11 \perp 9;$$

$$\sum \lambda_i^4 e_1^i e_4^i = uu1 * uu2 * uu3 * (te1 + te2 + te3 + te4), \ 12 \perp 9;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_6^i e_7^i = uu6(te6 + te7), \ 11 \perp 10;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_6^i e_8^i = uu6 * uu7, \ 12 \perp 10;$$

$$\sum \lambda_i^2 e_7^i e_8^i = uu7(te7 + te8), \ 12 \perp 11.$$

Начальное значение $\lambda_1 = 0.96775...$ было возмущено, в расчётах $\lambda_1 = 0.96$. Ставилась цель 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.

Расчёты проводились на SPP с использованием системы REDUCE [2]. В качестве $e_1(i)$ были взяты первые компоненты базисных векторов невозмущённой задачи. Вектор e_2 находится из решения системы $(e_1, e_2) = 0, ||e_2|| = 1, 6 \perp 5$. Попытки решить оставшуюся систему 24 уравнений с 24 переменными в лоб с применением пакета NUMERIC не дали результата. Удалось решить систему 21 уравнения. Остались неудовлетворёнными 3 условия, обеспечивающие ортогональность векторов e_{10}, e_{11}, e_{12}. Предварительно условия $10 \perp 9$ и $11 \perp 9$ были преобразованы к виду:

$$f_1 = c_1 c_3 (c_4 - uu2^2) - c_2[c_5(c_4 - uu2^2) + c_3 c_6 - c_3 uu2^2 te3] = 0,$$

$$f_2 = (c_4 - uu2^2)[d_1 uu2 - ss5] - c_2[d_2 uu2 + uu2^3 - te2 \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_2(i) e_3(i) +$$

$$+ \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^3 e_2(i) e_3(i) - uu2 \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^2 e_3(i)^2] = 0.$$

Дадим необходимые определения. Положим

$$y_1(i) = (te1 - \lambda_i) e_1(i) + uu1 * e_2(i), \quad y_2(i) = uu1 * e_1(i) + (te2 - \lambda_i) e_2(i),$$

$$c_1 = \sum \lambda_i^2 y_1(i) y_2(i), \quad c2 = \sum \lambda_i y_1(i) y_2(i), \quad c_3 = \sum y_1(i)^2,$$

$$c_4 = \sum y_2(i)^2, \quad c_5 = \sum \lambda_i y_1(i)^2, \quad c_6 = \sum \lambda_i y_2(i)^2,$$

$$ss5 = \sum \lambda_i^3 y_1(i) e_3(i),$$

$$d_1 = \sum \lambda_i^2 y_1(i) e_2(i), \quad d_2 = \sum \lambda_i y_2(i) e_2(i) - uu1^2.$$

Заметим, что y_1, y_2, c_i, d_i не зависят от $e_3(i)$, $e_4(i)$. Напомним, что

$$uu1 = \sum \lambda_i e_1(i) e_2(i), \quad uu2 = \sum \lambda_i e_2(i) e_3(i).$$

После того как $e_1(i)$, $e_2(i)$ определены, f_1, f_2 являются функциями $e_3(i)$.

Последовательно корректировались e_3, e_4. Коррекция $e_3(i)$, $i = 1, ..., 9$, сводится к решению системы 3 полиномиальных уравнений относительно переменных $x_8 = e_3(8)$, $x_9 = e_3(9)$, $u = uu2$. Компоненты $e_3(10)$, $e_3(11)$, $e_3(12)$ оставлены невозмущёнными. Компоненты $e_3(i)$, $i = 1, ..., 7$, определяются как функции x_8, x_9, u, v из решения системы линейных уравнений

$$(e_3, e_1) = 0, \quad (e_3, e_2) = 0, \quad \sum \lambda_i e_2(i) e_3(i) = u, \quad \sum \lambda_i^2 e_2(i) e_3(i) = v,$$

$5 \perp 3$, $7 \perp 5$ и $9 \perp 7$, в котором $uu2 * (te2 + te3)$ заменено на v. После подстановки $uu2 * te3 = v - uu2 * te2$ в уравнение $f1 = 0$ получаем линейное соотношение относительно v, из которого находим $v = v(u)$. В результате определены первые 7 компонент $e_3(i)$, $i = 1, ..., 7$, как функции x_8, x_9, u. Последние находятся из решения системы трёх полиномиальных уравнений

$$(e_3, e_3) = 1, \quad f2 = 0, \quad v = u * (te2 + te3),$$

в которые сделаны соответствующие подстановки. Используется пакет NUMERIC [2]:

`<rw:=num_solve(sys,{u=-1,x8=eg(3,8),x9=eg(3,9)},accuracy=23);>.`

Здесь $eg(3,8)$, $eg(3,9)$ — соответственно восьмая и девятая компоненты третьего базисного вектора невозмущённой задачи. В результате выбирается подходящее решение.

После того как e_2, e_3 найдены, коррекция $e_4(i)$, $i = 1, ..., 12$ производится через решение оставшихся 12 уравнений. Аналогично предыдущему задача сводится к решению 2 полиномиальных уравнений относительно переменных $y11 = e_4(11)$, $w = uu3$. Это уравнения $(e_4, e_4) = 1$ и $\sum \lambda_i^2 e_3(i) e_4(i) = w * (te3 + te4)$, в которые подставлены $e_4(i)$, $i = 1, ..., 10, 12$, как функции $y11, w$, найденные из решения 11 линейных уравнений. В число последних входит соотношение $w = \sum \lambda_i e_3(i) e_4(i)$.

По заданным λ_i, $e_1(i)$, $i = 1, ..., 12$, и найденным $e_2(i)$, $e_3(i)$, $e_4(i)$ были вычислены матрица M и недостающие компоненты "базисных" векторов. С использованием системы REDUCE реализован алгоритм, аналогичный алгоритму вычисления трёхдиагональных матриц по заданному спектру и заданным первым компонентам базисных векторов [1]. В программе, следующей ниже, искомой пятидиагональной матрицей является $mt(12,12)$. А базисные векторы являются столбцами матрицы $eg(12,12)$.

```
for i:=1:4 do<< st:=0; su:=0;
for j:=1:l do<< st:=st+g(j,1)*eg(i,j)^2;
if i<4 then su:=su+g(j,1)*eg(i,j)*eg(i+1,j)>>;
mt(i,i):=st; mt(i+1,i):=su; mt(i,i+1):=su>>;
for i:=1:4  do<<sv:=0;  st:=mt(i,i);
for j:=1:l do<<ss:=(st-g(j,1))*eg(i,j);
if i<4 then <<su:=mt(i,i+1); ss:=ss+su*eg(i+1,j)>>;
if i>1 then <<sf:=mt(i,i-1); ss:=ss+sf*eg(i-1,j)>>;
sv:=sv+ss^2; eg(i+4,j):=ss>>;
sv:=-sqrt(sv); mt(i,i+4):=sv; mt(i+4,i):=sv;
for j:=1:l do<<eg(i+4,j):=-eg(i+4,j)/sv>>>>;
for i:=1:4 do<< st:=0; su:=0;
for j:=1:l do<< st:=st+g(j,1)*eg(i+4,j)^2;
if i<4 then su:=su+g(j,1)*eg(i+4,j)*eg(i+5,j)>>;
mt(i+4,i+4):=st; mt(i+5,i+4):=su; mt(i+4,i+5):=su>>;
for i:=1:4  do<<sv:=0;  st:=mt(i+4,i+4);
for j:=1:l do<<ss:=(st-g(j,1))*eg(i+4,j);
if i<4 then <<su:=mt(i+4,i+5); ss:=ss+su*eg(i+5,j)>>;
if i>1 then <<sf:=mt(i+4,i+3); ss:=ss+sf*eg(i+3,j)>>;
ss:=ss+mt(i+4,i)*eg(i,j); sv:=sv+ss^2; eg(i+8,j):=ss>>;
sv:=-sqrt(sv); mt(i+4,i+8):=sv; mt(i+8,i+4):=sv;
for j:=1:l do<<eg(i+8,j):=-eg(i+8,j)/sv>>>>;
```

```
for i:=1:4 do<< st:=0; su:=0;
for j:=1:l do<< st:=st+g(j,1)*eg(i+8,j)^2;
if i<4 then su:=su+g(j,1)*eg(i+8,j)*eg(i+9,j)>>;
mt(i+8,i+8):=st; if i<4 then<<mt(i+9,i+8):=su;
mt(i+8,i+9):=su>>>>;
```

Был вычислен также (с применением пакета ROOTS [3]) спектр полученной матрицы M :

```
{0.9859537736356722366983456,    1.907376030520981883978945,
 2.31765548093159302794011,      3.146733378063040376153958,
 3.38757942996627047645461,      3.722642774592947458205838,
 4.263451589715127586438277,     4.616615226779369730324073,
 4.8532598855406128840557,        5.669428385059097038396862,
 6.096674382523600678084031,     7.003158151728631308073902}.
```

Исходный спектр:

```
{0.96,                            1.967752448877010102993724,
 2.381966011250105151795413,     3.203820426376799799402898,
 3.381966011250105151795413,     3.796179573623200200597102,
 4.203820426376799799402898,     4.618033988749894848204587,
 4.796179573623200200597102,     5.618033988749894848204587,
 6.032247551122989897006276,     7.032247551122989897006276}.
```

Проверялась ортонормальность найденных e_j ', $j = 5, ..., 12$. 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),
(1.14858...e-27, - 1.454028...e-26,1.0,0,0,0,0,0,0,0,0,0),
.........................................................
2.80001...e-25, - 2.86981...e-25,6.62121...e-24,0.0040849...,1,0),

(3.56691...e-26, 9.10282...e-26, -5.17745...e-26, - 5.09288...e-27,
7.93404...e-26, 3.66296...e-25, -1.32528...e-25, 3.10243...e-26,
-6.33366...e-25, 0.30514..., 0.01033..., 1)).
```

Как и ожидалось, условия ортогональности векторов e_{10}, e_{11}, e_{12} не выполняются, так как не удовлетворены соответствующие 3 последних дополнительных условия, в то время как остальные условия ортонормальности выполняются с высокой точностью. Соответственно вычисленные "базисные" векторы удовлетворяют уравнению $ME_j = \lambda_j E_j$ с невысокой точностью.

Реализованный численный алгоритм неустойчив. Аналогичный расчёт с другим возмущением спектра, $\lambda_1 = 0.97$ не дал результата. Итерации метода Ньютона $x_{i+1} = x_i - (F'(x_i))^{-1}F(x_i)$ [3] при коррекции e_4 в этом случае не сходятся. В фигурных скобках приводятся номер, погрешность $eri = |y11(i+1) - y11(i)| + |w(i+1) - w(i)|$ и определитель $dti = det(F'(y11(i), w(i)))$.

```
        {i,    eri,        dti}
lw4 := {{21,0.08116...,-0.11121...}, {20,0.12335...,0.03415...},
        {19,0.10430...,-0.07188...}, {18,0.29378..., -0.30576...},
        {17,0.75748...,- 1.46348...},
         .........................................
        {5,0.08072...,0.08429...},   {4,0.10641..., -0.041142...},
        {3,0.08728...,0.06165...},   {2,0.09639...,0.17750...},
        {1,0.17147..., -0.02365...}}.
```

В то время как при $\lambda_1 = 0.96$ налицо прекрасная сходимость:

```
lw4 := {{8,0, - 0.29073...},          {7,8.058...e-22,- 0.29073...},
{6,0.0000000000125...,-0.290...}, {5,0.00000161...,-0.290...},
{4,0.000531...,-0.292...},           {3,0.0119...,-0.317...},
{2,0.0385...,-0.397...},             {1,0.212..., -0.086...}}.
```

Результаты расчётов подтвердили гипотезу о необходимости удовлетворять системе дополнительных условий. Однако решение таких систем сопряжено с большими трудностями.

Литература

1. Serdyukova S.I. — Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling 1993. v.8, No.3, p. 245-263.

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

3. Бахвалов Н.С.— Численные методы. М.: Наука, 1978.

Рукопись поступила 2 июня 1999 года.