КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Факультет комп’ютерних наук та кібернетики
Кафедра обчислювальної математики

Кваліфікаційна робота

на здобуття ступеня бакалавра

за спеціальністю 113 Прикладна математика

на тему:
Двокроковий симетризований різницевий алгоритм для однієї оберненої задачі для рівняння Шредінгера

Студента 4-го курсу

кафедри обчислювальної математики

Подвіянюка Антона Руслановича

____

Науковий керівник:

Кандидат фізико-математичних наук

Асистент кафедри обчислювальної математики

Оноцький В'ячеслав Валерійович

____

Роботу розглянуто й допущено до захисту на засіданні кафедри обчислювальної математики

«29» травня 2023 р., протокол № 8

Завідувач кафедри Ляшко С. І.

____

Київ – 2023

Зміст

Вступ

Математична модель досліджуваного об'єкта дозволяє встановити зв'язок між вхідними та вихідними даними про цей об'єкт і прогнозувати його поведінку при зміні зовнішніх факторів. З точки зору залежності причина - наслідок, задачі можна розподілити на дві категорії: прямі задачі і обернені задачі.

У прямих задачах необхідно знайти наслідки на основі відомих факторів.

Факторами можуть бути:

- Початкові та крайові умови моделі.
- Коефіцієнти диференціальних операторів, пов'язані зі структурою об'єкта.
- Зовнішній вплив.

Наслідками можуть бути компоненти фізичних полів(деформація, електричний та магнітний потенціали тощо).

У обернених задачах необхіно, використовуючи відомі наслідки, визначити одну або декілька причин. За допомогою них можна.

- Ідентифікувати полімерні і композитні матеріали, біоматеріали.
- Визначати розташування покладів корисних копалин за відбитими від родовища звуковими сигналами.
- Розв'язувати задачі рентгенівської фотографії.

Дана робота присвячена застосуванню двокрокового симетризованого різнецевого алгоритму для розв'язання оберненої задачі для рівняння Шрьодінгера з кінцевим функціоналом. Такі типи задач виникають в різних галузях квантової механіки, ядерної фізики та сучасної фізики.

Простори Соболєва

Узагальнена похідна.

Нехай Ω область в $\mathbb{R}^n$, а $\varphi : \ \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$.

Носій функції φ визначається як

$$\operatorname{supp} \varphi = \{x \in \Omega : \varphi(x) \neq 0\}.$$

Нехай $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$, $u \in C^1 (\Omega)$, а $\Omega' \subset \Omega$ – обмежена область з гладкою межею і $\operatorname{supp} \varphi \subset \Omega'$, . Використовуючи формулу Остроградського маємо

$$\int_\Omega u \cdot \partial_{x_i} \varphi \, dx = \int_{\Omega'} u \cdot \partial_{x_i} \varphi dx = -\int_{\Omega'} \partial_{x_i} u \cdot \varphi \, dx = -\int_\Omega \partial_{x_i} u \cdot \varphi \, dx$$

Аналогічно, якщо $u \in C^\infty(\Omega)$ і $\alpha = (\alpha 1 , \alpha 2 , \dots , \alpha n)$ – мультиіндекс, компоненти якого є цілими невід'ємними числами, то

$$\int_\Omega u \cdot D^\alpha \varphi \, dx = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega D^\alpha u \cdot \varphi \, dx \qquad \forall \ \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$$

де $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$ – довжина мультиіндексу

Означення.

Нехай $u \in L_{loc}^1(\Omega)$ і α – мультиіндекс. Функція $v_\alpha \in L_{loc}^1(\Omega)$ називається α-ою узагальненою частинною похідною порядку $|\alpha|$ функції u, якщо

$$\int_\Omega u \cdot D^\alpha \varphi \, dx = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega v_\alpha \cdot \varphi \, dx \qquad \forall \ \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$$

Узагальнена похідна позначається як

$$v_\alpha = D^\alpha u$$

Лема про єдиність узагальненої похідної.

Якщо існує узагальнена похідна функції u, то вона однозначно визначається з точністю до множини міри нуль.

Доведення. Нехай $v_\alpha, v_0 \in L^1_{loc}(\Omega)$ і

$\int_\Omega u \cdot D^\alpha \varphi = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega v_\alpha \cdot \varphi \, dx = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega v_0 \cdot \varphi \qquad \forall \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$

Згідно з лемою дю Буа-Реймона так як $\int_\Omega (v_\alpha - v_0) \cdot \varphi \, dx = 0$, то $v_\alpha = v_0$ майже скрізь у Ω.

Якщо функція має звичайну похідну, то вона збігається з узагальненою похідною.

Означення просторів Соболєва

Простором Соболєва називається множина функцій:

$$W^{k,p}(\Omega) = \{u \in L_p(\Omega) : \ \forall \alpha, |\alpha| \leq k \ \exists \text{ узагальнена похідна } D^\alpha u \in L_p(\Omega)\}$$

Якщо p = 2, позначають:

$$H^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega)$$

Також

$$W^{0,p}(\Omega) = L^p(\Omega)$$

$$H^0(\Omega) = L^2(\Omega)$$

Лема

Нехай $u, v \in W^{k,p}(\Omega)$, $/\alpha /\leq k$. Тоді

- Нехай H – відкрита множина в Ω, то $u \in W^{k,p}(H)$

- $\forall\, a, b$ таких що $|a| + |b| \leq k$ справедливо

  $D^a u \in W^{k-|a|,p}(\Omega)$

  $D^b(D^a u) = D^a(D^b u) = D^{a+b}\mathrm{u}$

- $\forall\, a, b \in \mathbb{R}$ виконується

  $D^\alpha(au + bv) = a\, D^\alpha u + b\, D^\alpha v$

  $au+bv \in W^{k,p}(\Omega)$

- Нехай $\mathrm{y} \in C_0^\infty(\Omega)$, тоді

  $\mathrm{y} \cdot \mathrm{u} \in W^{k,p}(\Omega)$

  $D^a(\mathrm{yu}) = \sum_{\beta\leq\alpha} \binom{\alpha}{\beta} D^\beta y \cdot D^{\alpha-\beta} y$

  $\binom{\alpha}{\beta} = \frac{\alpha!}{\beta!\,(\alpha-\beta)!}$

  $\alpha! = \alpha_1!\,\alpha_2!\ldots\alpha_n!$

Двокроковий симетризований алгоритм

Опис.

Нехай дана задача на Ω, $t > t^0$,

$$\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{t}} = Lu$$

де:

$$\mathrm{u}:\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

L - диференціальний оператор за просторовими змінними першого або другого порядку без мішаних похідних.

$\Omega \ \subseteq \mathbb{R}^p$ і Ω – p-мірний паралелепіпед

Нехай множина $\Omega^t = \Omega \times \{t \in \mathbb{R} \mid t > t^0\}$, тоді покриємо Ω^t сіткою $\Omega^t_{h\tau}$:

$$\Omega^t_{h\tau} = \left\{ x_{i_s}, t_n \,\middle|\, x_{i_s} = \ i_s \cdot \ h_s\ , i_s = \overline{1, M_s};\ h_s = \frac{1}{M_s}; s = \overline{1, p}; t_n = n * \tau, \tau > 0, n = 0{,}1 \dots \right\}$$

В свою чергу область $\Omega^t_{h\tau}$ розбиваємо на дві підобласті

$$\Omega^{(1)}_n = \left\{ \left(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots; t_n \right) \middle| \ (i_1 + i_2 + \ldots + i_n + n)\ \%\ 2 = 0 \right\}$$

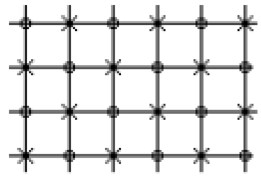
$$\Omega^{(2)}_n = \left\{ \left(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots; t_n \right) \middle| \ (i_1 + i_2 + \ldots + i_n + n)\ \%\ 2 = 1 \right\}$$

Тобто

$\Omega^{(1)}_n$ – множина до якої відносимо точки сума індексів яких є парною

$\Omega^{(2)}_n$ – множина до якої відносимо точки сума індексів яких є непарною

Рисунок для $\Omega_{h\tau}^{(1)}$ та $\Omega_{h\tau}^{(2)}$, де $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$



Алгоритм

Спочатку для множини $\Omega_{h\tau}^{(1)}$ на (2m + 1) – му кроці часовому кроці обчислюємо значення розв'язку у всіх вузлах за явною схемою

$$\mathrm{u}_{ij}^{2m+1} = \mathrm{u}_{ij}^{2m} + \tau L_h \mathrm{u}_{ij}^{2m}$$

Далі для множини $\Omega_{h\tau}^{(2)}$ на (2m + 1) – часовому кроці обчислюємо значення за формально неявною схемою використовуючи отримані значення

$$\mathrm{u}_{ij}^{2m+1} = \mathrm{u}_{ij}^{2m} + \tau(-\sigma L_h \mathrm{u}_{ij}^{2m} + (1+\sigma) L_h^* u_{ij}^{2m+1})$$

Де τ- часовий крок, h – крок просторової сітки, L_h і L_h^* - різницеві аналоги оператора L,

σ- ваговий коєфіцієнт, $\sigma \geq 0$.

Якщо оператор L – лінійний немає проблем для розв'язання систем різницевих рівнянь.

Якщо L – нелінійний, то у випадку $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ потрібно розв'язати $N/2$ не пов'язаних між собою нелінійних рівнянь замість системи з N^2 рівнянь, де N – кількість вузлів за просторовою змінною

Постановка задачі

Формулювання проблеми

Нехай дана множина $\Omega = (0,\, l) \times (0,T)$, $i = \sqrt{-1}$, a_0, b_0, l, T – позитивні константи, функції $f(x,t)$, $\varphi(x)$, $a(x)$ визначені наступним чином:

$$f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}, \quad f \in W_2^2(\Omega), \quad \frac{\partial f}{\partial t} \in W_2^1(\Omega), \qquad \frac{\partial f(0,t)}{\partial t} = \frac{\partial f(l,t)}{\partial t} = 0$$

$$\varphi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \quad \varphi \in W_2^3(0,l), \qquad \frac{\partial \varphi(0)}{\partial x} = \frac{\partial \varphi(l)}{\partial x};$$

$$\Psi\colon R \to C, \quad \Psi \in W_2^1$$

$a\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, вимірна і обмежена, $0 < \mu_1 \le |a(x)| \le \mu_2$, $\left|\frac{da(x)}{dx}\right| \le \mu_3$, $\mu_1, \mu_2, \mu_3 = const > 0$.

Нас цікавить пошук мінімуму наступного функціоналу

$$J_\alpha(v) = \int_0^l |\Psi(x,T;v) - y(x)|^2\, dx + \alpha||v||^2 \to \inf$$

У множині

$$V = \{v\colon v = v(t),\, v \in L_2(0,T),\, |v(t)| \le b_0\}$$

За умов

$$i\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} + a_0\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - a(x)\Psi - v(t)\Psi = f(x,t), \qquad (x,t) \in \Omega \qquad (1)$$

$$\Psi(x,0) = g_1(x),$$

$$\Psi(x,T) = g_2(x),$$

$$\frac{\partial \Psi(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi(l,t)}{\partial x} = 0, \qquad t \in (0,T)$$

Умови оптимальності.

Для функціоналу J_α надамо конкретний зміст рівнянню Ейлера.

$$\text{grad } J_\alpha(v) = 0 \qquad (*)$$

Розглянемо приріст функціоналу $J_\alpha(v)$.

$$\delta J_\alpha(v) = J_\alpha(v + \delta v) - J_\alpha(v)$$

$$\delta J_\alpha(v) = 2 \cdot \int_0^l |\Psi(x,T;v) - y(x)| \delta\Psi \, dx + 2\alpha \int_0^T v \; \delta v \, dt \qquad (2)$$

Щоб з рівності (2) отримати вираз для градієнту функціоналу необхідно визначити залежність між приростами керування та приростом δu. Для цього необхідно знайти спряжену задачу. З цією метою введемо нову функцію $\varsigma(t) \in L_2(\Omega)$ і використовуючи (1) розглянемо наступний вираз.

$$i\,(\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \varsigma) + a_0(\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \varsigma) - ((a+v)\Psi, \varsigma) = i\int_0^T \frac{\partial \Psi}{\partial t} \cdot \varsigma dt + a_0 \int_0^T \frac{\partial \Psi}{\partial x^2} \cdot \varsigma \, dt - a\int_0^T \Psi \cdot \varsigma \, dt - \int_0^T v\Psi\varsigma \, dt \qquad (3)$$

Застосовуючи інтегрування частинами з (3) отримуємо

$$i\Psi\varsigma|_0^T - i \cdot \int_0^T \Psi \cdot \frac{\partial \varsigma}{\partial t} dt + a_0 \int_0^T (\frac{\partial \Psi}{\partial x} \cdot \varsigma)'_x dt - a_0 \int_0^T \frac{\partial \Psi}{\partial x}\frac{\partial \varsigma}{\partial x} dt - a\int_0^T \Psi\,\varsigma\, dt - \int_0^T v\;\Psi\,\varsigma\, dt$$

Якщо $\Psi|_{t=T} = 0$

$$- i \cdot \int_0^T \Psi \cdot \frac{\partial \varsigma}{\partial t} dt + a_0 \int_0^T (\frac{\partial \Psi}{\partial x} \cdot \varsigma)'_x dt - a_0 \left(\int_0^T (\frac{\partial \varsigma}{\partial x} \cdot \Psi)'_x dt - \int_0^T (\frac{\partial \varsigma}{\partial x})'_x \cdot \Psi dt\right) - a\int_0^T \Psi\,\varsigma\, dt - \int_0^T v\,\Psi\varsigma\, dt$$

Запишемо рівняння (1) у вигляді

$$i\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} + D\Psi + (a-v)\,\Psi = f$$

Враховуючи, що

$$D = D^*$$

$$(D\delta u, \varsigma) + ((a-v)\delta u, \varsigma) = (\delta u, D\varsigma) + (\delta u, (a-v)\varsigma)$$

Спряжена задача має вигляд

$$\begin{cases} -i\frac{\partial \varsigma}{\partial t} + a_0\frac{\partial^2 \varsigma}{\partial x^2} - a(\mathrm{x})\varsigma - \mathrm{v(t)}\varsigma = 2\int_0^l \Psi(x,T;v) \; - \; y(x)\,dx \\ \varsigma|_{t=T} = 0 \\ \varsigma|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \tag{4}$$

Отже використовуючи (4), (2) знаходимо рівняння Ейлера для градієнту функціоналу (*)

$$\mathrm{grad}\, J_\alpha(v) = \varsigma(t) + 2\alpha \mathrm{v} = 0$$

Отже випливає наступний ітераційний алгоритм для пошуку v^k.

Алгоритм

1. Розв'язується пряма задача для визначення стану системи

$$i\,\frac{\partial \Psi^k}{\partial t} + a_0\frac{\partial^2 \Psi^k}{\partial x^2} - a(\mathrm{x})\Psi^k - \mathrm{v(t)}\Psi^k = f(x,t) \tag{5}$$

2. Знаходиться спряжений стан системи

$$-i\frac{\partial \varsigma^k}{\partial t} + a_0\frac{\partial^2 \varsigma^k}{\partial x^2} - a(\mathrm{x})\varsigma^k - \mathrm{v(t)}\varsigma^k = 2\int_0^l \Psi(x,T;v) \; - \; y(x)\,d\mathrm{x} \tag{6}$$

3. Знаходяться нові наближення v^k за явною схемою.

$$\frac{v^{k+1} - v^k}{s_{k+1}} + \varsigma^k + 2\alpha v^k = 0$$

s_{k+1} – крокові множники , на які накладаються наступні умов

$$\sum_{k=1}^{\infty} s_k = +\infty,\; s_k \to 0, k \to \infty$$

Застосування ДС-алгоритму

Пряма задача.

Розглянемо задачу

$$\begin{cases} i\,\dfrac{\partial \Psi}{\partial t} + a_0 \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - a(\mathrm{x})\Psi - \mathrm{v}(\mathrm{t})\Psi = f(x,t) \\ \Psi(x,0) = \varphi(x) \\ \dfrac{\partial \Psi(0,t)}{\partial x} = \dfrac{\partial \Psi(l,t)}{\partial x} = 0 \end{cases}$$

Так як функції Ψ, f :

$$\varphi: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$

$$\Psi: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$

$$f: \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{C}$$

Розпишемо Ψ, f, φ:

$$\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2$$

$$f = f_0 + if_1$$

$$\varphi = \varphi_0 + i\varphi_1$$

Тоді

$$i\,\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + i^2 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial t^2} + a_0 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + a_0 i \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} - a(x)\Psi_1 - a(x)i\Psi_2 - v(t)\Psi_1 - i\Psi_2 v(t) = f_0 + if_1$$

Отримуємо систему

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Psi_1}{\partial t} = f_1 - a_0 \dfrac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + a(x)\Psi_2 + \Psi_2 v(t) \\ \dfrac{\partial \Psi_2}{\partial t} = a_0 \dfrac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} - a(x)\Psi_1 - v(t)\Psi_1 - f_0 \end{cases} \quad (7)$$

Для даної задачі область Ω розбиваємо рівномірною сіткою

$$\Omega_{h\tau}^t = \{(x_i, t_n) | x_k = kh, t_n = \tau n, k = \overline{1, M},\ h = \frac{1}{M}; \tau = \frac{1}{T}, n = 0,1 \ldots\ N\}$$

$$\Omega_n^{(1)} = \{(x_i, t_n) | \ (i+n) \ \% \ 2 = 0\}$$

$$\Omega_n^{(2)} = \{(x_i, t_n) | \ (i+n) \ \% \ 2 = 1\}$$

Нехай

$$L_1(\Psi_2) = f_1 - a_0 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + a(x)\Psi_2 + \Psi_2 v(t)$$

$$L_2(\Psi_1) = a_0 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} - a(x)\Psi_1 - v(t)\Psi_1 - f_0$$

Введемо різницеві аналоги

$$L_1^h(\Psi_{2\,i}^{2n}) = f_{1i}^{2n} - a_0 \frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n} - 2\Psi_{2\,i}^{2n} + \Psi_{2\,i-1}^{2n}}{h^2} + a_i \Psi_{2\,i}^{2n} + \Psi_{2\,i}^{2n}\, v^{2n} \qquad (8)$$

$$L_2^h(\Psi_{1\,i}^{2n}) = a_0 \frac{\Psi_{1\,i+1}^{2n} - 2\Psi_{1\,i}^{2n} + \Psi_{1\,i-1}^{2n}}{h^2} - (a_i \Psi_{1\,i}^{2n} + \Psi_{1\,i}^{2n}\, v^{2n}) - f_{0i}^{2n} \qquad (9)$$

$$L_1^h(\Psi_{2\,i}^{2n+1}) = f_{1i}^{2n+1} - a_0 \frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+1} - 2\Psi_{2\,i}^{2n+1} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2} + a_i \Psi_{2\,i}^{2n+1} + \Psi_{2\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1} \qquad (8)$$

$$L_2^h(\Psi_{1\,i}^{2n+1}) = a_0 \frac{\Psi_{1\,i+1}^{2n+1} - 2\Psi_{1\,i}^{2n+1} + \Psi_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - (a_i \Psi_{1\,i}^{2n+1} + \Psi_{1\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}) - f_{0i}^{2n+1}$$

Опишемо явну схему для $\Omega_{2n+1}^{(1)}$

$$\begin{cases} {\Psi_1}^{2n+1} = {\Psi_1}^{2n} + \tau L_1^h(\Psi_2^{2n}) \\ {\Psi_2}^{2n+1} = {\Psi_2}^{2n} + \tau L_2^h(\Psi_1^{2n}) \end{cases} \qquad (10)$$

Опишемо формально неявну схему для $\Omega_{2n+1}^{(2)}$

$$\begin{cases} {\Psi_1}^{2n+1} = {\Psi_1}^{2n} + \tau L_1^h(\Psi_2^{2n+1}) \\ {\Psi_2}^{2n+1} = {\Psi_2}^{2n} + \tau L_2^h(\Psi_1^{2n+1}) \end{cases} \qquad (\ 11)$$

Значення ${\Psi_1}^{2n+1}$та ${\Psi_2}^{2n+1}$ вважаємо допоміжними, за розв'язок вважаємо ${\Psi_1}^{2n+2}$та ${\Psi_2}^{2n+2}$ для множин $\Omega_{2n+2}^{(1)}$, $\Omega_{2n+2}^{(2)}$.

Запишемо (11) у розгорнутому вигляді

$$\begin{cases} {\Psi_{1i}}^{2n+1} = {\Psi_{1i}}^{2n} + \tau(f_{1i}^{2n+1} - a_0 \dfrac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+1} - 2\Psi_{2\,i}^{2n+1} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2} + a_i \Psi_{2\,i}^{2n+1} + \Psi_{2\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}) \\ {\Psi_2}^{2n+1} = {\Psi_2}^{2n} + \tau(a_0 \dfrac{\Psi_{1\,i+1}^{2n+1} - 2\Psi_{1\,i}^{2n+1} + \Psi_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - (a_i \Psi_{1\,i}^{2n+1} + \Psi_{1\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}) - f_{0i}^{2n+1}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} {\Psi_{1i}}^{2n+1} - \tau(\dfrac{2a_0}{h^2} + a_i + v^{2n+1})\Psi_{2\,i}^{2n+1} = {\Psi_{1i}}^{2n} + \tau(f_{1i}^{2n+1} - a_0 \dfrac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+1} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2}) \\ \tau\left(\dfrac{2a_0}{h^2} + a_i + v^{2n+1}\right){\Psi_{1i}}^{2n+1} + {\Psi_{2i}}^{2n+1} = {\Psi_{2i}}^{2n} + \tau(a_0 \dfrac{\Psi_{1\,i+1}^{2n+1} + \Psi_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - f_{0i}^{2n+1}) \end{cases}$$

Введемо позначення

$$\eta_{2i} = \frac{{\Psi_{2i}}^{2n}}{\tau} + a_0 \frac{\Psi_{1\,i+1}^{2n+1} + \Psi_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - f_{0i}^{2n+1}$$

$$\eta_{1i} = \frac{{\Psi_{1i}}^{2n}}{\tau} + f_{1i}^{2n+1} - a_0 \frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+1} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2}$$

$$\theta_{1i} = -\left(\frac{2a_0}{h^2} + a_i + v^{2n+1}\right)$$

$$\theta_{2i} = \left(\frac{2a_0}{h^2} + a_i + v^{2n+1}\right)$$

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{\tau}$$

Подамо останню систему у вигляді

$$\begin{cases} \omega_1 {\Psi_{1i}}^{2n+1} + \theta_{1i} \Psi_{2\,i}^{2n+1} = \eta_{1i} \\ \theta_{2i} {\Psi_{1i}}^{2n+1} + \omega_2 {\Psi_{2i}}^{2n+1} = \eta_{2i} \end{cases} \qquad (12)$$

Отримуємо, що замість розв'язування систем алгебраїчних рівнянь, розв'язок можна отримувати за допомогою явних формул

$$\Psi_{1i}{}^{2n+1} = \frac{\begin{vmatrix} \eta_{1i} & \theta_{1i} \\ \eta_{2i} & \omega_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \omega_1 & \theta_{1i} \\ \theta_{2i} & \omega_2 \end{vmatrix}}$$

$$\Psi_{2i}{}^{2n+1} = \frac{\begin{vmatrix} \omega_1 & \eta_{1i} \\ \theta_{2i} & \eta_{2i} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \omega_1 & \theta_{1i} \\ \theta_{2i} & \omega_2 \end{vmatrix}}$$

Доведемо, що на кожному кроці по часу система (12) має 1 розв'зок.

Для цього достатньо показати, що визначник $D = \begin{vmatrix} \omega_1 & \theta_{1i} \\ \theta_{2i} & \omega_2 \end{vmatrix}$ не дорівнює нулю.

$$\begin{vmatrix} \omega_1 & \theta_{1i} \\ \theta_{2i} & \omega_2 \end{vmatrix} = \omega_1 \, \omega_2 - \theta_{1i}\theta_{2i}$$

$$\begin{vmatrix} \omega_1 & \theta_{1i} \\ \theta_{2i} & \omega_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{\tau^2} + (\frac{2a_0}{h^2} + a_i + v^{2n+1})^2$$

Отже ми отримали, що визначник D більший за нуль, з цього випливає, що система має єдиний розв'язок.

Порядок апроксимації.

Визначимо порядок апроксимації алгоритму для прямої задачі v (t) = v = const, f = 0.

Розглянемо рівняння

$$\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = -a_0 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + a(x)\Psi_2 + \Psi_2 v \qquad (**)$$

Апроксимація цього рівняння в момент часу *2n+1* в точці x_i має вигляд (явна схема)

$$\frac{{\Psi_{1\,i}}^{2n+1} - {\Psi_{1\,i}}^{2n}}{\tau} = -a_0 \frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n} - 2\Psi_{2\,i}^{2n} + \Psi_{2\,i-1}^{2n}}{h^2} + a_i \Psi_{2\,i}^{2n} + v\Psi_{2\,i}^{2n}$$

Апроксимація цього рівняння в момент часу *2n+2* в точці x_i має вигляд (неявна схема)

$$\frac{{\Psi_{1\,i}}^{2n+2} - {\Psi_{1\,i}}^{2n+1}}{\tau} = -a_0 \frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+2} - 2\Psi_{2\,i}^{2n+2} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+2}}{h^2} + a_i \Psi_{2\,i}^{2n+2} + v\Psi_{2\,i}^{2n+2}$$

Додаючи ці два рівняння отримуємо

$$\left(\frac{{\Psi_{1\,i}}^{2n+1} - {\Psi_{1\,i}}^{2n}}{\tau} + \frac{{\Psi_{1\,i}}^{2n+2} - {\Psi_{1\,i}}^{2n+1}}{\tau}\right) =$$

$$-a_0 \left(\frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n} - 2\Psi_{2\,i}^{2n} + \Psi_{2\,i-1}^{2n}}{h^2} + \frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+2} - 2\Psi_{2\,i}^{2n+2} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+2}}{h^2}\right) + a_i(\Psi_{2\,i}^{2n} + \Psi_{2\,i}^{2n+2}) + \qquad (13)$$

$$+ v(\Psi_{2\,i}^{2n+2} + \Psi_{2\,i}^{2n}))$$

Розкладемо кожен доданок у ряд Тейлора за формулами

$$u_{i+1} = u_i + hu_i' + \frac{h^2}{2} u_i'' + \frac{h^3}{3!} u_i''' + O(h^4)$$

$$u_{i-1} = u_i - hu_i' + \frac{h^2}{2} u_i'' - \frac{h^3}{3!} u_i''' + O(h^4)$$

Отримуємо

$$\frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n} - 2\Psi_{2\,i}^{2n} + \Psi_{2\,i-1}^{2n}}{h^2} = ((\Psi_2)_x'')^{2n} + O(h^2) \qquad (14)$$

$$\frac{\Psi_{2\,i+1}^{2n+2} - 2\Psi_{2\,i}^{2n+2} + \Psi_{2\,i-1}^{2n+2}}{h^2} = ((\Psi_2)_x'')^{2n+2} + O(h^2) \qquad (15)$$

$$\Psi_2^{2n} + \Psi_2^{2n+2} = 2\Psi_2^{2n+1} + O(\tau^2) \qquad (16)$$

$$\left(\frac{{\Psi_1}_i^{2n+1} - {\Psi_1}_i^{2n}}{\tau} + \frac{{\Psi_1}_i^{2n+2} - {\Psi_1}_i^{2n+1}}{\tau}\right) = \frac{{\Psi_1}_i^{2n+2} - {\Psi_1}_i^{2n}}{\tau}$$

$$= \left((2{\Psi_1}_t{}' + \frac{\tau^2}{3}{\Psi_1}_t{}''')^{2n+1} + O(\tau^3)\right) \qquad (17)$$

Підставивши (14), (15), (16),(17) у (13) маємо

$$(2{\Psi_1}_t{}' + \frac{\tau^2}{3}{\Psi_1}_t{}''')^{2n+1}$$
$$= -a_0((\Psi_2)''_x)^{2n} - a_0((\Psi_2)''_x)^{2n+2} + 2\,(a_i + v)\Psi_2^{2n+1} + O(h^2) + O(\tau^2)$$

$$(2{\Psi_1}_t{}' + \frac{\tau^2}{3}{\Psi_1}_t{}''')^{2n+1} = -2a_0((\Psi_2)''_x)^{2n+1} + 2\,(a_i + v)\Psi_2^{2n+1} + O(h^2) + O(\tau^2) \quad (18)$$

Помножимо (**) на 2 і віднімимо від (18) (**) на $2n + 1 -$ кроці отримаємо залишковий член похибки

$$Z = (\frac{\tau^2}{3}{\Psi_1}_t{}''')^{2n+1} + O(h^2) + O(\tau^2).$$

Можна бачити, що похибка апроксимації буде $O(\tau^2 + h^2)$.

Аналогічно визначаємо для другого рівняння похибку апроксимації для другого рівняння вона буде $O(\tau^2 + h^2)$.

Спряжена задача.

Розглянемо задачу.

$$\begin{cases} i\,\dfrac{\partial\varsigma}{\partial t} + a_0\dfrac{\partial^2\varsigma}{\partial x^2} - a(\mathrm{x})\varsigma - \mathrm{v(t)}\varsigma = 2\displaystyle\int_0^l \Psi(x,T;v) - y(x)\,d\mathrm{x} \\ \varsigma|_{t=T} = 0 \\ \varsigma|_{x=0} = 0 \\ \varsigma|_{x=l} = 0 \end{cases}$$

Так як функції ς, y :

$$y: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$

$$\varsigma: \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$$

Запишемо

$$y = y_1 + iy_2$$

$$\varsigma = \varsigma_1 + i\varsigma_2$$

$$\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2$$

$$i\,\frac{\partial\varsigma_1}{\partial t} + i^2\frac{\partial^2\varsigma_2}{\partial t^2} + a_0\frac{\partial^2\varsigma_1}{\partial x^2} + a_0 i\frac{\partial^2\varsigma_2}{\partial x^2} - a(x)\varsigma_1 - a(x)i\varsigma_2 - v(t)\varsigma_1 - i\varsigma_2 v(t) =$$

$$= 2\int_0^l \Psi_1 + i\Psi_2 - (y_1 + iy_2)\,d\mathrm{x}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\varsigma_1}{\partial t} + a_0\dfrac{\partial^2\varsigma_2}{\partial x^2} - a(x)\varsigma_2 - \varsigma_2 v(t) = 2\displaystyle\int_0^l \Psi_2 - y_2\,d\mathrm{x} \\ -\dfrac{\partial^2\varsigma_2}{\partial t^2} + a_0\dfrac{\partial^2\varsigma_1}{\partial x^2} - a(x)\varsigma_1 - v(t)\varsigma_1 = 2\displaystyle\int_0^l \Psi_1 - y_1\,d\mathrm{x} \end{cases}$$

Розбиваємо область Ω рівномірною сіткою

$$\Omega_{h\tau}^t = \{(x_i, t_n) | x_k = kh, t_n = \tau n, k = \overline{1, M},\ h = \frac{1}{M}; \tau = \frac{1}{T}, n = 0,1 \ldots\ N\}$$

$$\Omega_n^{(1)} = \{(x_i, t_n) |\ (i + n)\ \%\ 2 = 0\}$$

$$\Omega_n^{(2)} = \{(x_i, t_n) |\ (i + n)\ \%\ 2 = 1\}$$

Запишемо

$$L_1(\varsigma_2) = 2\int_0^l \Psi_2 - y_2\,d\mathrm{x} - a_0\frac{\partial^2\varsigma_2}{\partial x^2} + a(x)\varsigma_2 + \varsigma_2 v(t)$$

$$L_2(\varsigma_1) = a_0\frac{\partial^2\varsigma_1}{\partial x^2} - a(x)\varsigma_1 - v(t)\varsigma_1 - 2\int_0^l \Psi_1 - y_1\,d\mathrm{x}$$

Введемо різницеві аналоги

$$L_1^h(\varsigma_{2\,i}^{2n}) = h\sum_{k=1}^{N} (\Psi_2^{2n}(k) - y_2(k)) - a_0\frac{\varsigma_{2\,i+1}^{2n} - 2\varsigma_{2\,i}^{2n} + \varsigma_{2\,i-1}^{2n}}{h^2} + a_i\varsigma_{2\,i}^{2n} + \varsigma_{2\,i}^{2n}\, v^{2n}$$

$$L_2^h(\varsigma_{1\,i}^{2n}) = a_0\frac{\varsigma_{1\,i+1}^{2n} - 2\varsigma_{1\,i}^{2n} + \varsigma_{1\,i-1}^{2n}}{h^2} - (a_i\varsigma_{1\,i}^{2n} + \varsigma_{1\,i}^{2n}\, v^{2n}) - h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_1^{2n}(k) - y_1(k))$$

$$L_1^h(\varsigma_{2\,i}^{2n+1}) = h\sum_{k=1}^{N} \Psi_2^{2n+1}(k) - y_2(k)) - a_0\frac{\varsigma_{2\,i+1}^{2n+1} - 2\varsigma_{2\,i}^{2n+1} + \varsigma_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2} + a_i\varsigma_{2\,i}^{2n+1} + \varsigma_{2\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}$$

$$L_2^h(\varsigma_{1\,i}^{2n+1}) = a_0\frac{\varsigma_{1\,i+1}^{2n+1} - 2\varsigma_{1\,i}^{2n+1} + \varsigma_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - (a_i\varsigma_{1\,i}^{2n+1} + \varsigma_{1\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}) - h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_1^{2n+1}(k) - y_1(k))$$

Опишемо явну схему для $\Omega_{2n+1}^{(1)}$

$$\begin{cases} {\varsigma_1}^{2n+1} = {\varsigma_1}^{2n} - \tau L_1^h(\varsigma_2^{2n}) \\ {\varsigma_2}^{2n+1} = {\varsigma_2}^{2n} - \tau L_2^h(\varsigma_1^{2n}) \end{cases}$$

Опишемо формально неявну схему для $\Omega_{2n+1}^{(2)}$

$$\begin{cases} {\varsigma_1}^{2n+1} = {\varsigma_1}^{2n} - \tau L_1^h(\varsigma_2^{2n+1}) \\ {\varsigma_2}^{2n+1} = {\varsigma_2}^{2n} - \tau L_2^h(\varsigma_1^{2n+1}) \end{cases} \qquad (18)$$

Розпишемо (18) у розгорнутому вигляді

$$\begin{cases} {\varsigma_{1i}}^{2n+1} = {\varsigma_{1i}}^{2n} - \tau(h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_2^{2n+1} - y_2(k)) - a_0\frac{\varsigma_{2\,i+1}^{2n+1} - 2\varsigma_{2\,i}^{2n+1} + \varsigma_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2} + a_i\varsigma_{2\,i}^{2n+1} + \varsigma_{2\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}) \\ {\varsigma_{2i}}^{2n+1} = {\varsigma_2}^{2n} - \tau(a_0\frac{\varsigma_{1\,i+1}^{2n+1} - 2\varsigma_{1\,i}^{2n+1} + \varsigma_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - (a_i\varsigma_{1\,i}^{2n+1} + \varsigma_{1\,i}^{2n+1}\, v^{2n+1}) - h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_1^{2n+1}(k) - y_1(k))) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \varsigma_{1i}{}^{2n+1} + \tau\varsigma_{2\,i}^{2n+1}(a_0\dfrac{2}{h^2} + a_i + \ v^{2n+1}) = \varsigma_{1i}{}^{2n} - \tau(h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_2^{2n+1}\ - y_2(k)) - a_0\dfrac{\varsigma_{2\,i+1}^{2n+1} + \varsigma_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2}) \\ \varsigma_{2i}{}^{2n+1} - \tau\varsigma_{1\,i}^{2n+1}\left(\dfrac{2a_0}{h^2} + a_i + \ v^{2n+1}\right) = \varsigma_{2i}{}^{2n} - \tau(a_0\dfrac{\varsigma_{1\,i+1}^{2n+1} + \varsigma_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_1^{2n+1}(k)\ - y_1(k))) \end{cases}$$

Аналогічно до (12) вводимо позначення

$$E = F = \frac{1}{\tau}$$

$$A_i\ = (a_0\tfrac{2}{h^2} + a_i + \ v^{2n+1}), D_i = -(\tfrac{2a_0}{h^2} + a_i + \ v^{2n+1})$$

$$B_i = \frac{\varsigma_{1i}{}^{2n}}{\tau} - (h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_2^{2n+1}\ - y_2(k)) - a_0\frac{\varsigma_{2\,i+1}^{2n+1} + \varsigma_{2\,i-1}^{2n+1}}{h^2})$$

$$C_i = \frac{\varsigma_{2i}{}^{2n}}{\tau} - (a_0\frac{\varsigma_{1\,i+1}^{2n+1} + \varsigma_{1\,i-1}^{2n+1}}{h^2} - h\sum_{k=1}^{N}(\Psi_1^{2n+1}(k)\ - y_1(k)))$$

Тоді

$$\varsigma_{1i}{}^{2n+1} = \frac{\begin{vmatrix} B_i & A_i \\ C_i & F \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} E & A_i \\ D_i & F \end{vmatrix}}$$

$$\varsigma_{2i}{}^{2n+1} = \frac{\begin{vmatrix} E & B_i \\ D_i & C_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} E & A_i \\ D_i & F \end{vmatrix}}$$

Аналогічно до (12):

$$\begin{vmatrix} E & A_i \\ D_i & F \end{vmatrix} > 0$$

Список літератури

- Оноцький В.В. Чисельне та комп’ютерне моделювання процесів переносу з використанням двокрокових симетризованих алгоритмів / Оноцький В.В. // − 2013 – 145с.
- Corentin Audiard On the non-homogeneous boundary value problem for Schrödinger equations / Corentin Audiard // − 2017– 24с.
- J.L.Lions Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équalions aux dérivées partielles / J.L.Lions // −1968 – 416с.
- B.Yildiz On an Optimal Control problem / B.Yildiz, G.Yagubov // −1997– 13с.
- Оноцький В.В. Двокроковий різницевий алгоритм знаходження періодичних розв’язків рівнянь типу Шредінгера алгоритмів / Оноцький В.В. О.Ю. Грищенко, В.Г. Слюсаренко. −2004– 482с.

Відгук на кваліфікаційну роботу бакалавра на тему:
«Двокроковий симетризований різницевий алгоритм для оберненої задачі для рівняння Шредінгера»
студента 4-го курсу факультету комп'ютерних наук та кібернетики Київського національного університету імені Тараса Шевченка
Подвіянюка Антона Руслановича

Рецензована робота присвячена опису роботи двокрокового симетризованого різнецевого алгоритму на прикладі розв'язання оберненої задачі для рівняння Шредінгера з кінцевим функціоналом.

Даний тип задач виникає у різних галузях квантової механіки, ядерної фізики, сучасної фізики, а двокроковий симетризований алгоритм – це ефективний інструмент для проведення чисельного моделювання.

У роботі студент розглянув алгоритм розв'язку оберненої задачі до рівняння Шредінгера та застосував двокроковий симетризований різницевий алгоритм для вирішення прямої та спряженої задачі.

В процесі роботи Подвіянюк А. Р. проявив гідні знання в галузі приладної математики і довів професійність. Вважаю, що кваліфікаційна робота студента відповідає вимогам, які висуваються до бакалаврських робіт, і заслуговує на оцінку «відмінно», а її автор заслуговує на присвоєння кваліфікації бакалавра.

Асистент кафедри обчислювальної математики
факультету комп'ютерних наук та кібернетики
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка,
кандидат фізико-математичних наук, ассистент В. В. Оноцький

Рецензія

на кваліфікаційну роботу бакалавра на тему:

«Двокроковий симетризований різницевий алгоритм для оберненої задачі для рівняння Шредінгера»

студента 4-го курсу факультету комп'ютерних наук та кібернетики

Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Подвіянюка Антона Руслановича

Темою випускної кваліфікаційної роботи бакалавра Подвіянюка А.Р. є опис роботи двокрокового симетризованого алноритму для оберненої задачі для рівняння Шредінгера.

Робота складається з чотирьох розділів. Перший розділ коротко описує загальні уявлення про простори з якими ми маємо справу(простори Соболєва). В другому розкривається робота двокрокового симетризованого алгоритму. В третьому розділі формулюється постановка задачі та алгоритм її розв'язку. В останньому розділі описано застосування двокрокового симетризованого різнецевого алгоритму.

У роботі матеріал викладено чітко, лаконічно, зрозуміло та логічно послідовно, вміст структуровано. Розібраний алгоритм розв'язку оберненої задачі та застосування ДС – алгоритму до цього розв'язку.

Вважаю, що випускна кваліфікаційна робота **Подвіянюка Антона Руслановича** є завершеним дослідженням, яке повністю розібрано і подано простою мовою, а також повністю відповідає вимогам, які ставляться до кваліфікаційних робіт бакалавра, й тому її автор заслуговує на присвоєння кваліфікаційного рівня бакалавра, а дипломну роботу рекомендую оцінити на "відмінно".

Доцент кафедри дослідження операцій

факультету комп'ютерних наук та кібернетики

Київського національного університету імені Тараса Шевченка,

кандидат фізико-математичних наук, доцент Роман ЯКИМІВ

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

СИСТЕМА ЗАПОБІГАННЯ ТА ВИЯВЛЕННЯ АКАДЕМІЧНОГО ПЛАГІАТУ

Довідка про оригінальність кваліфікаційної роботи за освітнім рівнем бакалавр

UNICHECK

Ім'я користувача: **Оноцький В'ячеслав ФКомпНаук**	ID перевірки: **1015310639**
Дата перевірки: **30.05.2023 08:49:44 EEST**	Тип перевірки: **Doc vs Internet + Library**
Дата звіту: **30.05.2023 08:52:32 EEST**	ID користувача: **100002816**

Назва документа: **ПодвіянюкАнтонРусланович**

Кількість сторінок: 22 Кількість слів: 3959 Кількість символів: 16678 Розмір файлу: 64.89 KB ID файлу: 1014981783

Виявлено модифікації тексту (можуть впливати на відсоток схожості)

1.52%
Схожість

Найбільша схожість: 0.56% з джерелом з Бібліотеки (ID файлу: 1008260288)

0.93% Джерела з Інтернету 4 .... Сторінка 24

0.78% Джерела з Бібліотеки 2 .... Сторінка 24

0% Цитат

Вилучення цитат вимкнене

Вилучення списку бібліографічних посилань вимкнене

0%
Вилучень

Немає вилучених джерел

Модифікації

Виявлено модифікації тексту. Детальна інформація доступна в онлайн-звіті.

Замінені символи 196

Підозріле форматування 19 сторінок

Експертна оцінка роботи науковим керівником :

Робота виконана студентом Подвіянюком самостійно і не містить суттєвих запозичень без відповідних посилань

Науковий керівник: ____________ Оноцький В.В.
(підпис) (ПІБ)

Оператор: ____________ Оноцький В.В.
(підпис) (ПІБ)