

О существовании решения обратных задач восстановления строения вещества по дифракционным данным.

Введение

Дифракционные методы исследования строения вещества (структурный анализ моно- и поликристаллов, малоугловое рассеяние, газовая электронография и т.п.) существуют уже давно. С помощью этих методов изучено строение тысяч объектов. Однако до сих пор никому не удалось решить задачу обоснования возможности получения структурной информации по данным эксперимента.

Первым перед автором вопрос о доказательстве возможности решения задачи восстановления структуры по интенсивностям от монокристаллов поставил в 60-х годах Н.В. Белов. Ему же принадлежит идея попытаться найти решение с помощью обоснования возможности отыскания полной совокупности межатомных расстояний, т.к. задача отыскания атомного мотива по их полному набору решила еще Д.Ринч [1]. Он же предложил для упрощения поиска доказательства снять ограничение на область эксперимента, отказаться от погрешностей в структурных амплитудах и ввести гипотезу о пропорциональности атомных кривых (как это делается в прямых методах).

В конце 80-х годов при обсуждении состояния дел в области решения обратных задач структурного анализа А.Н. Тихонов также настоятельно рекомендовал автору заняться решением этой задачи.

Первая часть настоящей статьи посвящена обоснованию возможности восстановления структуры монокристаллов по экспериментальным данным.

Следует отметить, что первый результат по обоснованию возможности решения обратных задач в дифракционных методах исследования строения вещества был получен в работе [2], где было показано, что для сферически симметричных частиц справедливо соотношение (2.4) (см. вторую часть настоящей статьи), связывающее электронную плотность $\rho(r)$ со сферически усредненной функцией Патерсона [3]. Практически только Б.К. Вайнштейн обратил внимание на то, что на основе этого соотношения можно доказать существование решения задачи восстановления $\rho(r)$ по интенсивности рассеяния, чему и посвящен второй раздел данной работы. После этого он поставил перед автором аналогичную. Задачу для монокристаллов.

Всем этим замечательным ученым автор выражает глубокую признательность.

1. Существование решения задачи определения полного набора межатомных расстояний.

Как известно [4], дифракционный эксперимент по изучению строения монокристаллов дает набор интенсивностей I_{hkl} , по которым могут быть получены квадраты модулей структурных амплитуд F_{hkl} , где h, k, l - целочисленные координаты в обратном пространстве. Учитывая постулаты, предложенные Н.В. Беловым:

$\Delta |F_{hkl}|^2 \equiv 0$, $f_j(hkl) = Z_j f(hkl)$ и h, k, l - любые (набор не ограничен), получаем

$$|F_{hkl}|^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f^2(hkl) Z_i Z_j \cos 2\pi(hu_{ij} + kv_{ij} + lw_{ij}), \quad (1.1)$$

где Z_i , Z_j - порядковые номера, а (u_{ij}, v_{ij}, w_{ij}) - координаты соответствующего межатомного вектор-расстояния между i -м и j -м атомами (рассеивающими центрами). Выражение (1.1) может быть упрощено с учетом перехода к φ_{hk}

$$\varphi_{hk} = \frac{|F_{hk}|^2 - f^2 \cdot \sum_{i=1}^N Z_i^2}{2f^2},$$

переименования набора $\{Z_i, Z_j\}$ в q_r и учета $\frac{N(N-1)}{2} = M$, тогда $1 \leq r \leq M$.

Первое утверждение. Набор φ_{hk} может быть приведен к

$$b_{hk} = \sum_{p=1}^M q_p \cos 2\pi n u_p \cos 2\pi k v_p \cos 2\pi l w_p \quad (1.2)$$

Доказательство проводится вычислением сумм $\varphi_{hk} + \varphi_{h\bar{k}} + \varphi_{\bar{h}k} + \varphi_{\bar{h}\bar{k}}$.

Второе утверждение. Набор b_{hk} может быть приведен к системе моментов

$$m_{hk} = \sum_{i=1}^M q_i \alpha_i^h \beta_i^k \gamma_i^l, \text{ где } \alpha_i = \cos 2\pi u_i, \beta_i = \cos 2\pi v_i, \gamma_i = \cos 2\pi w_i. \quad (1.3)$$

Доказательство основано на использовании соотношения

$$\cos(n+1)\lambda = 2 \cos \lambda \cos n\lambda - \cos(n-1)\lambda.$$

Заметим, что среди вектор-расстояний могут встретиться такие, что $\alpha_i = \alpha_j, \beta_i = \beta_j$ и $\gamma_i = \gamma_j$. Все такие слагаемые следует объединить, тогда

$$a_k = \sum q_j \text{ и } m_{hk} = \sum_{i=1}^{M-K} a_i \alpha_i^h \beta_i^k \gamma_i^l.$$

Соответственно, если рассматриваются моменты m_{hko} , то объединяются все равные α_i и β_i , а в случае m_{hoo} - все равные α_i .

Отметим также, что можно получить и смешанные моменты для любых серий специально отобранных индексов:

$$h=k=l=d, m_{add} = \sum_{i=1}^M q_i \cos^d(u_i + v_i + w_i),$$

$$h=-k=d, l=0, m_{d\bar{a}o} = \sum_{i=1}^M q_i \cos^d(u_i - v_i),$$

и т.д. Вывод соответствующих соотношений аналогичен вышеизложенному с той разницей, что преобразование от φ_{hk} к b_{hk} проводить не следует.

С целью упрощения доказательства сначала остановимся на одномерном варианте,

например для набора $h, 0, 0: m_h = \sum_{i=1}^{M-K} a_i \alpha_i^h. \quad (1.4)$

Тогда справедливо третье утверждение: следуя методу Отто-Авраами [4], можно показать, что α_i - решения уравнения.

$$\begin{vmatrix} \alpha^{M-K} & \alpha^{M-K-1} & \dots & \alpha & 1 \\ m_{M-K} & m_{M-K-1} & \dots & m & m_0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ m_{M-2K-1} & m_{M-2K-2} & \dots & m_{M-K} & m_{M-K-1} \end{vmatrix} = 0. \quad (1.5)$$

Утверждение четвертое: если все α_i не равны друг-другу, то решение существует т.к.

$$\Delta = \begin{vmatrix} m_{M-K-1} & m_{M-K-2} & \dots & m_0 \\ m_{M-K} & m_{M-K-1} & \dots & m_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ m_{2M-2K-2} & m_{2M-2K-3} & \dots & m_{M-K-1} \end{vmatrix} \neq 0.$$

Схема доказательства может быть следующей. Последовательно исключаем из всех моментов 2-ой и т.д. строк член с α_1 , для чего предыдущую строку умножаем на α_1 и вычитаем, а затем проводим исключение во всех столбцах, начиная с первого элементов с α_2 , умножая последний столбец на α_2 и вычитая из предыдущего. Аналогично исключаем элементы с α_3 из всех строк, начиная с третьей, а затем элементы с α_4 из всех столбцов, начиная с первого. И т.д. В итоге утверждение становится очевидным. Мы получаем также справедливость пятого утверждения: все определители размерности выше чем М-К тождественно равны нулю. Этот факт полезно использовать при построении определителя (1.5), т.к. мы не знаем заранее сколько равных α_i .

Отыскав полный набор различных α_i можно провести частичную идентификацию полученных значений, т.е. установить какие α_i соответствуют каким q_i . Действительно, найдя α_i мы можем рассмотреть систему моментов (1.4), но уже относительно неизвестных α_i . Данная задача разрешима, т.к. определитель системы - определитель Вандермонда.

Теперь можно приступить к интерпретации значений α_i с точки зрения возможных комбинаций целочисленных, заданных значений Z_i (состав известен). Тем более, что α_i есть сумма некоторого числа Z_i^2 или $Z_i Z_j$.

Пример 1. Пусть мы имеем одномерную модель с тремя атомами с $Z=1;2;4$ в элементарной ячейке такую, как на рис. 1а.

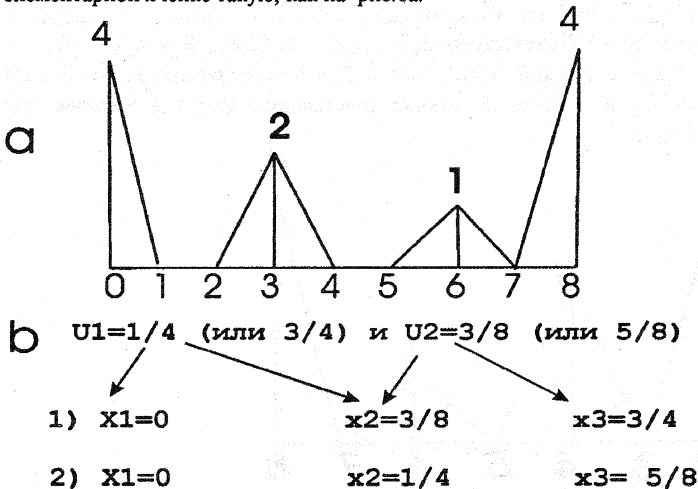


Рис.1. Пример простейшей одномерной модели. В элементарной ячейке: 3 псевдоатома, шаг разбиения периода 1/8. Ниже приведена схема интерпретации двух вариантов получаемого решения.

Тогда $|F_0|^2 = 49$, $|F_1|^2 = 21 - 10\sqrt{2}$, $|F_2|^2 = 13$, $|F_3|^2 = 21 + 10\sqrt{2}$, $|F_4|^2 = 9$, $|F_5|^2 = 21 + 10\sqrt{2}$
и соответственно $m_0 = 28$, $m_1 = -10\sqrt{2}$, $m_2 = -10$, $m_3 = -5\sqrt{2}$, $m_4 = 5$ и $m_5 = -\frac{5\sqrt{2}}{2}$.

$$\begin{vmatrix} \alpha^3 & \alpha^2 & \alpha & 1 \\ -5\sqrt{2} & 10 & -10\sqrt{2} & 28 \\ 5 & -5\sqrt{2} & 10 & -10\sqrt{2} \\ -\frac{5\sqrt{2}}{2} & 5 & -5\sqrt{2} & 10 \end{vmatrix} = 0$$

Получаем, что все определители третьего порядка (строки 2-4) тождественно равны нулю. Отсюда уравнение для отыскания набора α : $-80\alpha^2 - 40\sqrt{2}\alpha = 0$ (вычеркиваем 1-ый столбец и последнюю строку)

Отсюда $\alpha = 0$ и $\alpha = \sqrt{2}/2$, т.е. $\cos 2m = 0$ или $\cos 2m = -\frac{\sqrt{2}}{2}$, т.е. $m_1 = \frac{1}{4}$ или $m_1 = \frac{3}{4}$

и $m_2 = \frac{3}{8}$ или $m_2 = \frac{5}{8}$. Возможные варианты показаны на рис. 1 б.

Идентификация: $Z=4, 2, 1$ из $|F_1|^2$ получаем, что $3/8$ соответствуют $2 \times (4 \cdot 2 + 2 \cdot 1)$, т.е. расстоянию от $Z=2$ до $Z=1$ и $Z=4$. Выбираем начало в $Z=4$ ($x=0$), тогда $Z=2$ в $3/8$ и $Z=1$ в $3/4$. Второй вариант соответствует смене направлений, т.е. ничего нового не дает.

Пример 2. Пример второй модели представлен на рис.2 ($N=4$, $M=6$, $K=4$). Уравнение для отыскания α : $22\alpha^2 + 22\alpha = 0$, т.е. получаем $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. Если Z_i именовать в порядке следования, то -1 соответствует $Z_1Z_3 + Z_2Z_4 = 11$ ($Z_1Z_3 = 8$ и $Z_2Z_4 = 3$), 0 соответствует $Z_1Z_2 + Z_2Z_3 + Z_3Z_4 + Z_1Z_4 = 24$ и $Z_2 = 3$ имеет равные расстояния $1/4$ и $3/4$, $Z_3 = 2$ от Z_2 и Z_4 тоже на равных расстояниях. Этого достаточно для восстановления модели.

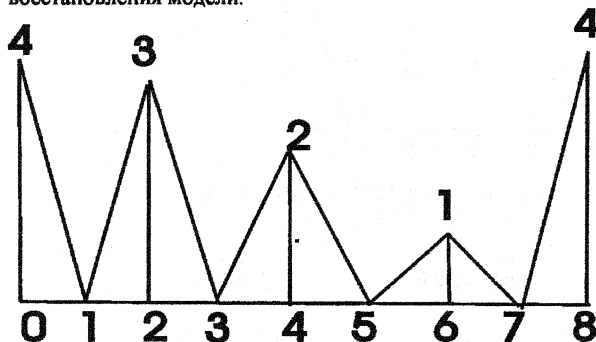


Рис.2. Пример второй одномерной модели. В элементарной ячейке 4 псевдоатома, шаг разбиения периода $1/8$. Схема интерпретации аналогична примеру 1.

Пример 3. Рассмотрим более сложную модель (известная пара гометричных структур А.Патерсона). На рис.3 представлена как сама модель, так и ее периодическая иллюстрация над кольцом (откуда видно, что одна модель отличается от другой).

$N=4$, $M=6$, $K=2$, все Z одинаковы. Уравнения для отыскания α : $\alpha^4 + \alpha^3 - \alpha^2/2 - \alpha/2 = 0$. Тогда $\alpha = \sqrt{2}/2$; $-\sqrt{2}/2$; -1 ; 0 , а $u=1/8$ (7/8), $3/8$ (5/8); $1/2$, $1/4$ (3/4). Однозначно закрепляется $u=1/2$. Шагая из нуля с $1/8$, получаем первую из пары, а с $3/8$ - вторую. Замкнутость системы расстояний приводит к 2-м вариантам решения.

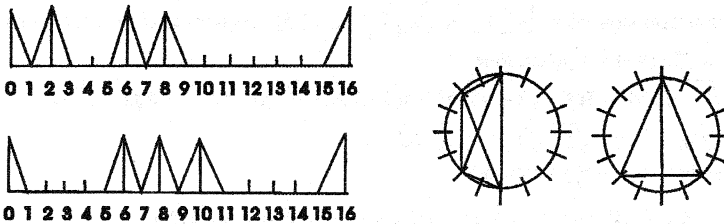


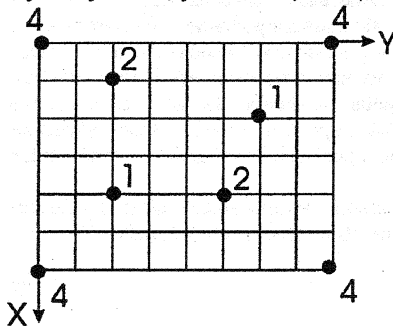
Рис.3. Пример одномерной модели, полная система расстояний которой дает два возможных расположения рассеивающих центров в элементарной ячейке (см. иллюстрацию над кольцом). модель предложена А.Патерсоном.

Например вариант $1/8$ и $1/8$ невозможны, т.к. тогда полный набор расстояний включает $1/4$, $3/8$, $1/4$, $3/8$, $1/8$, $1/8$, и $1/2$, т.е. 7 расстояний. И т.д.

Для двумерных и трехмерных распределений все сводится к построению соответствующих определителей (1.5), но для нескольких систем моментов: $\{m_{000}\}$, $\{m_{0k0}\}$, $\{m_{00k}\}$, $\{m_{hkk}\}_{h=k}$, и т.д. В итоге схема рассуждения сохраняется, а возможность получить решения относительно практически любой целочисленной комбинации индексов дает возможность соотнесения компонент векторов с соответствующими вектор-расстояниями. Продемонстрируем соответствующие действия на примере восстановления модельной структуры от двух переменных.

Пример 4. На рис. 4 приведена элементарная ячейка соответствующая распределению с 5-ю атомами: $Z_1 = 4, x_1 = 0, y_1 = 0$; $Z_2 = 2, x_2 = 6, y_2 = 1/4$,

$Z_3 = 1, x_3 = 2/3, y_3 = 1/4$; $Z_4 = 2, x_4 = 2/3, y_4 = 5/8$ и $Z_5 = 1, x_5 = 1/3, y_5 = 3/4$.



Соответствующий набор $M=10$ межплоскостных расстояний: $q_{12}=8, u_{12}=1/6, v_{12}=1/4$; $q_{13}=4, u_{13}=2/3, v_{13}=1/4$; $q_{14}=8, u_{14}=2/3, v_{14}=5/8$; $q_{15}=4, u_{15}=1/3, v_{15}=3/4$; $q_{23}=2, u_{23}=1/2, v_{23}=0$; $q_{24}=4, u_{24}=1/2, v_{24}=3/4$; $q_{25}=2, u_{25}=1/6, v_{25}=1/2$; $q_{34}=2, u_{34}=0, v_{34}=3/8$; $q_{35}=1, u_{35}=1/3, v_{35}=1/2$; $q_{45}=2, u_{45}=2/3, v_{45}=1/8$.

α из системы $\{m_{h00}\}$ получает значения $-1, -1/2, 1/2, 1$, т.к. уравнение (1.5) имеет вид $4\alpha^4 - 5\alpha^2 + 1 = 0$.

Рис.4. Пример двумерной модели с пятью атомами в элементарной ячейке: шаг по $X=1/6$, а по $Y=1/8$; $Z=4, 2, 2, 1, 1$.

При этом набор значений u с соответствующими q : $u=1/2$ с $q=6$, $u=1/3$ или $2/3$ с $q=19$, $u=1/6$ или $5/6$ с $q=10$ и $u=0$ с $q=2$. β из системы $\{m_{0k}\} -1, -\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2, 1$ из уравнения $2\beta^5 - 3\beta^3 + \beta = 0$ и соответственно, v с q : $v=1/2$ с $q=3$, $v=3/8$ или $5/8$ с $q=14$, $v=1/4$ или $3/4$ с $q=16$, $v=1/8$ или $7/8$ с $q=2$ и $v=0$ с $q=2$.

Легко видеть, что из $u=0$ при $q=2$ и $v=0$ при $q=2$ следует, что есть пары с $Z=1$ и 2 при одном и том же x , а также другая такая же пара по y . Из $1/2$ по v с $q=3$ следует, что пара с $Z=1$ и $Z=2$ и 1 расположены на расстоянии $y=1/2$, а $1/2$ по u с $q=6$ дает два варианта: либо пара $Z=2$ и $Z=2$ и 1 на этом расстоянии, либо пары с $Z=4$ и 1 и $Z=2$ и 1 . И т.д. Однозначной интерпретации получить не удается.

Добавляя смешанные моменты $\{m_{nk}\}_{n=k}$ и $\{m_{\bar{n}\bar{k}}\}_{n=k}$ по (1.5) получаем соответственно относительно $\cos 2\pi(u_i + v_i)$ уравнение

$$32\delta^7 + 16(1 + \sqrt{2 - \sqrt{3}})\delta^6 - 8(7 - \sqrt{2 - \sqrt{3}})\delta^5 - 4(5 + 7\sqrt{2 - \sqrt{3}})\delta^4 + 2(16 - 5\sqrt{2 - \sqrt{3}})\delta^3 + 2(3 + 8\sqrt{2 - \sqrt{3}})\delta^2 - 3(2 - \sqrt{2 - \sqrt{3}})\delta - 3\sqrt{2 - \sqrt{3}} = 0$$

и относительно $\cos 2\pi(u_i - v_i)$ уравнение

$$64\lambda^8 + 96\lambda^7 - 16(5 + \sqrt{3})\lambda^6 - 24(7 + \sqrt{3})\lambda^5 + 4(2 + 3\sqrt{3})\lambda^4 + 6(16 + 5\sqrt{3})\lambda^3 + 4(5 + \sqrt{3})\lambda^2 - 9(2 + \sqrt{3})\lambda - 3(2 + \sqrt{3}) = 0.$$

Откуда получаем соответствующий набор межатомных расстояний (другие моменты не потребовались).

Естественно, что в трехмерном случае требуется к решению для полной идентификации найденных координатных векторов и отысканию вектор-расстояний привлекать большее количество различных систем моментов.

Несмотря на то, что все примеры дают единственный набор вектор-расстояний, в данной работе не ставится вопрос обоснования единственности решения, но замкнутость системы векторов (как это видно из примеров 1-4) накладывает сильное ограничение на число решений. По замкнутой векторной системе строится атомная модель структуры (одна или конечное число). Впервые этот результат был получен Д.Ринч в 1939 г [1].

2. Существование решения задачи восстановления плотности сферически - симметричной частицы по данным малоуглового рассеяния.

Изучение связи между структурой и свойствами макромолекул - одна из важных задач молекулярной биологии. Функционирование биологических макромолекул происходит в водно-солевых растворах, поэтому особое значение имеет исследование их структуры в растворах. Одним их наиболее информативных методов изучения структуры биополимеров в растворе является метод малоуглового рентгеновского и нейронного рассеяния, который широко применяется для изучения строения вещества с разрешением, существенно превышающим длины межатомных расстояний [3].

Известно, что для сферически - симметричной частицы аналог функции Патерсона $\gamma(u)$ может быть рассчитан непосредственно по данным эксперимента $I(S)$

$$\gamma(u) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} I(S) S^2 \frac{\sin Su}{Su} dS, \quad (2.1)$$

где

$S = 4\pi \frac{\sin \theta}{\lambda}$ (2θ - угол рассеяния, λ - длина волны), $I(S)$ - измеряемая интенсивность

$$I(S) = F^2(S). \quad (2.2)$$

Распределение электронной плотности $\rho(r)$ определяется по $F(S)$.

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} S^2 F(S) \frac{\sin Sr}{Sr} dS \quad (2.3)$$

при $0 \leq r \leq R$, где R - радиус частицы и $\rho(r) \equiv 0$ при $r \geq R$.

В работе [2] показано, что $\rho(r)$ непосредственно связана с $\gamma(u)$ следующим соотношением

$$u\gamma(u) = 2\pi \int_{\max(0, u-R)}^R \xi \rho(\xi) \left(\int_{|u-\xi|}^{\min(R, u+\xi)} \eta \rho(\eta) d\eta \right) d\xi. \quad (2.4)$$

Обозначим для упрощения записи $\frac{u\gamma(u)}{2\pi} = \varphi(u)$ и $r\rho(r) = f(r)$, тогда по (2.4)

$$\varphi(u) = 2\pi \int_{\max(0, u-R)}^R f(\xi) \left(\int_{|u-\xi|}^{\min(R, u+\xi)} \varphi(\eta) d\eta \right) d\xi. \quad (2.5)$$

Учитывая, что $\varphi'(u)$ в соответствии с (2.1) может быть также рассчитана по данным эксперимента $I(S)$

$$\varphi'(u) = \int_0^{\infty} S^2 I(S) \cos Su dS, \quad (2.6)$$

выражение (2.6) можно упростить. В соответствии с правилами дифференцирования, если

$$\psi(u) = \int_0^{g(u)} a(x) \left(\int_0^{h(u,x)} f(y) dy \right) dx,$$

то

$$\psi'(u) = a(g(u))g'(u) \int_0^{h(u,g(u))} f(y) dy + \int_0^{g(u)} a(x) f(h(u,x)) h'_u(u,x) dx.$$

Тогда получаем:

$$1) \text{ при } 0 \leq u \leq R, \quad \varphi'(u) = 2 \int_0^{R-u} f(x) f(u+x) dx - \int_0^u f(x) f(u-x) dx \quad (2.7)$$

$$2) \text{ при } R \leq u < 2R, \quad \varphi'(u) = - \int_{u-R}^R f(x) f(u-x) dx$$

$$\text{Так как } \varphi'(u) = \gamma(u) + u\gamma'(u), \quad \text{то } \gamma(0) = 4\pi \int_0^R r^2 \rho^2(r) dr \quad (2.8)$$

Зададим $f(x)$ в точках kh , где $k = 0, 1, \dots, n$, причем $nh = R$. Тогда функция $\varphi'(u)$ будет определена в точках $u = ph$, где $p = 0, 1, \dots, 2n$. Заметим, что имея n чисел $f_k = f(kh)$,

мы получаем $2n$ чисел $a_k = \frac{\varphi'(ph)}{n}$

$$1) a'_k = 2 \sum_{i=1}^{n-k-1} f_i f_{k+i} - \sum_{i=1}^{k-1} f_i f_{k-i} \quad \text{для } 1 \leq k \leq n \quad (2.9)$$

$$2) a_k = - \sum_{i=k-n+1}^{n-1} f_i f_{k-i} \quad \text{для } n \leq k \leq 2n-2$$

Имеет место утверждение:

Система нелинейных уравнений (2.9) сводится к системе (2n-3) линейных однородных уравнений относительно (n-1) -го неизвестного f_j , с матрицей, представленной на рис.5.

f_{n-1}	f_{n-2}	f_{n-3}	f_{n-4}	f_{n-5}	f_{n-6}	f_{n-7}	f_{n-8}	f_{n-9}	
a_{2n-3}	$-2a_{2n-2}$	0	0	0	0	0	0	0	
$2a_{2n-4}$	$-a_{2n-3}$	$-4a_{n-2}$	0	0	0	0	0	0	
$3a_{2n-5}$	0	$-3a_{2n-3}$	$-6a_{2n-2}$	0	0	0	0	0	
$4a_{2n-6}$	a_{2n-5}	$-2a_{2n-4}$	$-5a_{2n-3}$	$-8a_{2n-2}$	0	0	0	0	
$5a_{2n-7}$	$2a_{2n-6}$	$-a_{2n-5}$	$-4a_{2n-4}$	$-7a_{2n-3}$	$-10a_{2n-2}$	0	0		
$6a_{2n-8}$	$3a_{2n-7}$	0	$-3a_{2n-5}$	$-6a_{2n-4}$	$-9a_{2n-3}$	$-12a_{2n-2}$	0	0	
$7a_{2n-9}$	$4a_{2n-8}$	a_{2n-7}	$-2a_{2n-6}$	$-5a_{2n-5}$	$-8a_{2n-4}$	$-11a_{2n-3}$	$-14a_{2n-2}$	0	
$8a_{2n-10}$	$5a_{2n-9}$	$2a_{2n-8}$	$-a_{2n-7}$	$-4a_{2n-6}$	$-7a_{2n-5}$	$-10a_{2n-4}$	$-13a_{2n-3}$	$-16a_{2n-2}$	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	

Рис.5. Структура матрицы линейной системы уравнений. Над каждым столбцом матрицы указано соответствующее неизвестное f_k .

Доказательство легко выполняется методом неопределенных коэффициентов с применением метода математической индукции. Поясним структуру матрицы и ее практическое использование на примере $n=5$.

$$a_7 f_4 - 2a_8 f_3 = 0$$

Первые три строки дают: $2a_6 f_4 - a_7 f_3 - 4a_8 f_2 = 0$ (2.10)

$$a_5 f_4 - a_7 f_2 - 2a_8 f_1 = 0$$

Пятый столбец матрицы соответствует при $n=5$ f_0 , но $f_0 = 0$, а поэтому четвертая строка дает $4a_4 f_4 + a_5 f_3 - 2a_6 f_2 - 5a_7 f_1 = 0$. Шестой, седьмой, восьмой столбцы матрицы соответствуют f_{-1}, f_{-2}, f_{-3} и f_{-4} , а следовательно $-f_1, -f_2, -f_3, f_4$.

$$5a_3 f_4 + 2a_4 f_3 - a_5 f_2 - (4a_6 - 10a_8) f_1 = 0$$

С учетом этого получаем $2a_2 f_4 + a_3 f_3 + 4a_8 f_2 - (a_5 - 3a_7) f_1 = 0$

$$7a_1 f_4 + (14a_8 + 4a_2) f_3 + (a_3 + 11a_7) f_2 + (8a_6 - 2a_4) f_1 = 0$$

Решение системы дает восстановление плотности сферически-симметричной частицы. Если считать R известным, то на решении будет сказываться лишь погрешность замены интегралов (2.7) соответствующими квадратурными формулам (2.9). Приведенные расчеты показывают, что даже в случае определения R по функции $\gamma(u)$ $\rho(u)$ восстанавливается надежно. Даже при $n=5$, при грубом определении f_4 из уравнения $a_8 = -f_4^2$, вычисления f_3, f_2 и f_1 по (2.10), т.е. по трем первым из семи уравнений и без учета гладкости решения по методу регуляризации А.Н. Тихонова [5], решение получается достаточно хорошим (рис.6).

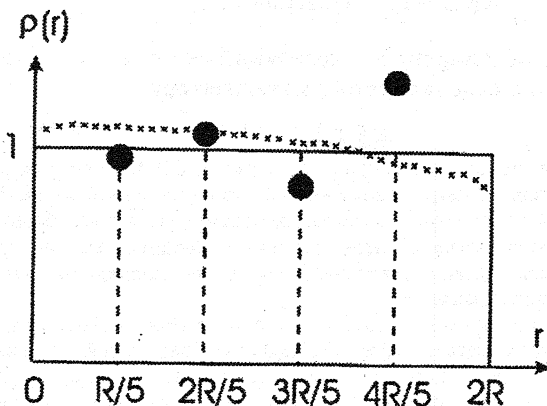


Рис.6. Модельное распределение электронной плотности для однородного шара: $\rho(r) = 1$ при $r \leq R$ представлено сплошной линией. Результат восстановления распределения электронной плотности при шаге $R/5$ дан точками: $\rho(r/5) \approx 0.96$; $\rho(2r/5) \approx 1.10$; $\rho(3r/5) \approx 0.82$; $\rho(4r/5) \approx 1.38$. Результат восстановления распределения электронной плотности при шаге $R/50$, полученный по полной системе линейных уравнений с регуляризацией по А.Н.Тихонову дан крестиками (данные зашумлены с $\sigma = 10\%$).

Литература

1. Wrinch D. M. Vector maps of finite and periodic point sets// Phil. Mag. , 1939, v.27, N183. P490-507.
2. Фейгин Л.А., Шмидт П.В., Щедрин Б.М Восстановление плотности сферически-симметричной частицы по ее самосвертке//Крист, 1981, т.26, №5.С.920-924.
3. Свєргун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейронное малоугловое рассеяние.-М: Наука, 1986. 278 стр.
4. Порай-Кошиц М.А. Практический курс рентгеноструктурного анализа. - М: Изд. Моск.ун-та,1960.632 стр.
5. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач.-М: Наука,1979.288 стр.