

Державний Університет імені Тараса Шевченка
Фізичний факультет

Міщенко Юрій Григорович

**ЗАСТОСУВАННЯ НОВИХ ОПТИМІЗАЦІЙНИХ
ВАРІАЦІЙНИХ ПІДХОДІВ В ЗАДАЧІ ТРЬОХ
КУЛОНОВИХ ЧАСТИНОК ($dt\mu$)**

(кваліфікаційна робота бакалавра)

Науковий керівник:
доктор фіз.-мат. наук, професор
Сименюк І. В.

Київ, 1999

ЗМІСТ

1.	ВСТУП	3
2.	ГОЛОВНА ЧАСТИНА	7
2.1	Постановка задачі.....	7
2.2	Найпростіші аналітичні наближення для розрахунку системи (dtμ).....	8
2.2.1	Оцінка енергії основного стану знизу методом мінімаксу	8
2.2.2	Оцінка енергії зв'язаного стану методом теорії збурень.....	9
2.3	Використання оптимізаційних схем варіаційного методу Бубнова-Гальоркіна для прецизійного розрахунку системи (dtμ).....	15
2.3.1	Варіаційний принцип і схеми реалізації варіаційних методів.....	15
2.3.2	Постановка варіаційної задачі визначення характеристик основного стану системи (dtμ).....	20
2.3.3	Використання варіаційного методу зі схемою стохастичної оптимізації для визначення характеристик основного стану системи (dtμ).....	25
3.	ВИСНОВКИ.....	35
	ВИКОРИСТАНА ЛІТЕРАТУРА.....	37

1. Вступ

Теоретичне дослідження малонуклонних систем, а також квантових систем декількох частинок іншої природи, з високою і контрольованою точністю залишається однією з найбільш актуальних проблем теоретичної фізики. Це пов'язано як з великим експериментальним матеріалом для ядерних та кулонових систем і можливостями виявлення на основі їх теоретичного аналізу багаточастинкових особливостей, так і загальним інтересом до вивчення нетривіальних задач квантових систем декількох частинок та значними досягненнями в числових методах дослідження багатовимірних задач. Останнім часом широкого поширення набули нові методи дослідження енергетичних спектрів систем ядерних та кулонових частинок на основі різних проекційних схем і зокрема методу Рітца-Бубнова-Гальоркіна. Одним із основних розділів в вивченні багаточастинкових систем є проблема дослідження трьох тіл, що взаємодіють кулоновими та ядерними силами.

Задача трьох тіл, що взаємодіють за кулоновським законом, відноситься до класичних задач квантової механіки. Основні результати методичного характеру, отриманні при її дослідженні, можуть бути використані для розрахунку систем трьох частинок з ядерними потенціалами чи більш складних багаточастинкових систем. Крім чисто теоретичного інтересу, ця задача набуває, зокрема, особливого значення в зв'язку із можливістю вивчення проблеми мюонного каталізу реакцій термоядерного синтезу, що проходять за участю зв'язаних станів реагуючих ядер у складі різних мезосистем [1]. Варто відмітити, що при розрахунках таких процесів особливого значення набуває велика точність отриманих результатів, оскільки, наприклад, для оцінки рівня енергії зв'язаного стану з точністю біля 50°K ($0,005 \text{ eV}$), необхідно провести чисельний розрахунок з відносною точністю 10^{-5} - 10^{-6} . Ці задачі формують нові високі вимоги до чисельних методів, що застосовуються для аналізу таких систем.

В атомній фізиці до найпростіших тричастинкових систем можна віднести атом гелію, негативний іон водню H^- , систему e^-e^+ , позитивні іони водню H_2^+ , HD^+ та різні мезомолекули, яким відповідають системи за участю ізотопів водню $pp\mu$, $dd\mu$, $dt\mu$ та ін.

Розрахунки параметрів таких систем звичайно виконують в рамках адіабатичного чи варіаційного підходів.

Суть адіабатичного методу полягає в розкладі шуканої хвильової функції по повному набору власних функцій руху третьої частинки, коли дві інші компоненти закріплені (адіабатичний базис). Таким чином задачу можна звести до нескінченної системи зв'язаних звичайних диференціальних рівнянь, що насправді формують нескінченний ланцюжок, але звичайно обриваються на певному етапі і надалі розв'язуються чисельно [2]. Використання

цього методу в проблемі трьох кулонових частинок демонструє хороші результати й задовільну збіжність навіть для досить невеликих порядків наближення. В той же час велика аналітична громіздкість, необхідність попереднього знаходження адіабатичних функцій для кожного нового потенціалу та необхідність чисельного розв'язку кінцевого ланцюжку диференційних рівнянь роблять використання цього методу зовсім нетривіальною задачею. При використанні розкладу за адіабатичним базисом в тричастинковій задачі, можна сказати, що значна частина проблеми перекладається на аналітичний її аналіз, в той час як чисельні розрахунки відіграють лише допоміжну роль. Дещо інший характер має варіаційний підхід Гальоркіна, в якому значну частину проблеми можна перекласти на чисельні методи й тим самим спростити аналітичну постановку задачі.

Суть варіаційного методу Гальоркіна полягає в розкладі шуканої хвильової функції за певним наперед обраним базисом, що зводить попередню задачу до багатовимірної лінійної проблеми на власні значення. Такий базис може бути "жорстким" в тому сенсі, що його координатні функції наперед задані, чи "гнучким" в тому сенсі, що наперед визначається лише певний клас функцій, а конкретний базис формується з цього класу пізніше так, аби забезпечити умову найкращої його оптимальності. Як зазначає Кукулін [], перспектива використання гнучкого базису значно розширює можливості варіаційного методу, надаючи змогу покращувати результат наближення не тільки за рахунок простого розширення базису, але й за рахунок додаткової оптимізації координатних функцій, що обираються. До переваг варіаційного підходу відноситься те, що клас координатних функцій може бути обраний досить простим, що забезпечує відповідну простоту аналітичних розрахунків; крім того процес розв'язку в такому підході може бути значно легше автоматизований і застосований для систематичного аналізу значного кола квантово-механічних задач. В той же час проблема оптимізації координатного базису в жодній з схем не є тривіальною. Аналітичні спроби цього, навіть для невеликих порядків наближення, призводять до невиправдано громіздких обчислень, а іноді і зовсім нездійсненні, тому гостро постає проблема розв'язання та аналізу можливих оптимізаційних схем з використанням різних чисельних методів. Існує багато різних шляхів вирішення цієї проблеми. Звичайно для цього використовуються певні методи відшукування мінімуму в багатовимірному просторі, як то градієнтний метод, метод параболічної екстраполяції-інтерполяції чи стохастичний метод. Взагалі, всі такі методи можна поділити на дві великі групи: локальні та глобальні. Перші звичайно визначають точку наступного наближення виходячи з вже отриманої точки та поведінки енергетичної поверхні в її околі (перший чи другий диференціал); другі проводять аналіз поверхні в певній області, після чого визначають нове наближення. Перевагою

перших є велика ефективність при роботі з простими поверхнями чи коли можна досить точно визначити хорошу першу точку наближення. Перевагою других є більша гнучкість у боротьбі з локальними мінімумами, наявність яких на складних поверхнях складає головну проблему у відшуканні абсолютного мінімуму. Всі ці схеми звичайно вимагають значних об'ємів обчислювальної роботи, що, однак, легко може бути вирішеним вже з використанням сучасних персональних комп'ютерів.

В рамках цієї роботи була розглянута задача прецизійного розрахунку кулонової системи трьох частинок ($d\mu$) в основному стані з використанням варіаційного підходу із "гнучким" гаусоїдальним базисом, перевагою якого є простота розрахунків енергетичної матриці, однобічність варіаційних оцінок енергій, явне і просте подання хвильових функцій, що також можуть бути використані в інших дослідженнях. Крім того було проведено порівняльне вивчення застосування різних схем оптимізації в рамках даної задачі. За основу методики розрахунку було обрано запропоновану Кукулінім стохастичну схему оптимізації координатного базису [], як такої, що має автоматичні можливості боротьби із локальними мінімумами. Суть цього методу полягає в утворенні і аналізі певного набору випадково обраних пробних точок з області, в якій проводиться оптимізація нелінійних варіаційних параметрів, і вибір серед них такої, що відповідає найменшій енергії - це і буде наш найкращий знайдений базис.

В ході виконання роботи до цієї схеми були додані певні оригінальні видозміни, що відповідають запровадження адаптивного алгоритму підбору функції розподілу пробних точок. Це дозволило значно підвищити ефективність роботи методу не вимагаючи попереднього аналізу енергетичної поверхні чи заведення у метод якоїсь додаткової інформації про неї, що є суттєвою перевагою, оскільки аналітичний аналіз поведінки поверхні з метою отримання деталізованих відомостей навіть для невеликих порядків наближення практично не може бути виконаний, або вимагає надзвичайно громіздких аналітичних розрахунків. В той же час використання адаптивних модифікацій різних оптимізаційних методів не тільки знімає цю проблему, але й дозволяє отримувати додаткову інформацію про характер енергетичної поверхні виходячи з аналізу процесу оптимізації. В загальному плані, використання адаптивних процесів з метою вивчення складних багатовимірних поверхонь, може виявитися ефективним не тільки в задачах фізики, а й у інших прикладних галузях науки, що вимагають розгляду таких об'єктів; тому побудова та дослідження різних адаптивних схем аналізу складних багатовимірних задач представляється перспективним напрямком у дослідженнях чисельних методів.

Особливості модифікації стохастичного оптимізаційного процесу та отримані за його допомогою результати, а також деякі аналітичні наближення у цій проблемі будуть розглянуті в наступному розділі.

2. Головна частина

2.1 Постановка задачі.

Будемо розглядаємо надалі задачу знаходження енергії та хвильової функції задачі трьох кулонових частинок: дейтрону, тритону та μ -мезону. Гамільтоніан системи \hat{H} має вигляд:

$$\hat{H} = -\hbar^2 \frac{\Delta_d}{2m_d} - \hbar^2 \frac{\Delta_t}{2m_t} - \hbar^2 \frac{\Delta_\mu}{2m_\mu} + e^2 \frac{Z_t Z_d}{r_{dt}} + e^2 \frac{Z_t Z_\mu}{r_{t\mu}} + e^2 \frac{Z_d Z_\mu}{r_{d\mu}} \quad (1)$$

де індекси t, d, μ відповідають тритону, дейтрону та мю-мезону. Маса та заряди такі:

$$\begin{aligned} m_d &= 3670.481 m_e; & Z_d &= +1; \\ m_t &= 5496.918 m_e; & Z_t &= +1; \\ m_\mu &= 206.7686 m_e; & Z_\mu &= -1; \end{aligned}$$

або в одиницях маси μ -мезону:

$$\begin{aligned} m_d &= 17.751632 m_\mu; \\ m_t &= 26.584931 m_\mu; \\ m_\mu &= 1 m_\mu. \end{aligned}$$

Таким чином постає задача розв'язання тричастинкового рівняння Шрödінгера з гамільтоніаном (1):

$$\hat{H}\Psi(r_t, r_d, r_\mu) = E\Psi(r_t, r_d, r_\mu) \quad (2)$$

Будемо розглядати надалі безрозмірену задачу. Введемо характерну довжину a та характерну енергію k задачі. Тоді в рівняння в нових змінних

$$r = a \rho; \quad E = k \varepsilon \quad (3)$$

набирає вигляду

$$k \cdot \varepsilon \cdot \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{a^2} \frac{\Delta_d}{2m_d} - \frac{\hbar^2}{a^2} \frac{\Delta_t}{2m_t} - \frac{\hbar^2}{a^2} \frac{\Delta_\mu}{2m_\mu} + e^2 \frac{Z_t Z_d}{a \rho_{dt}} + e^2 \frac{Z_t Z_\mu}{a \rho_{t\mu}} + e^2 \frac{Z_d Z_\mu}{a \rho_{d\mu}} \right) \Psi \quad (4)$$

звідки видно, що поклавши

$$\begin{aligned} a &= \frac{\hbar^2}{m_\mu \cdot e^2} \\ k &= \frac{m_\mu \cdot e^4}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (5)$$

ми приведемо рівняння до безрозмірного вигляду, з яким і будемо надалі працювати

$$\left(-\frac{\Delta_t}{2 \cdot m_t} - \frac{\Delta_d}{2 \cdot m_d} - \frac{\Delta_\mu}{2 \cdot m_\mu} + \frac{Z_t Z_d}{r_{td}} + \frac{Z_t Z_\mu}{r_{t\mu}} + \frac{Z_d Z_\mu}{r_{d\mu}} \right) \Psi = \varepsilon \cdot \Psi \quad (6)$$

Характерні величини задачі мають такі значення (одиниці "Рідберга"):

$$k = \frac{m_\mu \cdot e^4}{\hbar^2} = 5626.51 \cdot eV$$

$$a = \frac{\hbar^2}{m_\mu \cdot e^2} = 2.559251 \cdot 10^{-13} \cdot m$$
(7)

а маси в (6) визначаються в одиницях маси μ -мезону. Розв'язання цього безрозмірного рівняння для зв'язаних станів і буде нашою подальшою метою.

2.2 Найпростіші аналітичні наближення для розрахунку системи ($dt\mu$).

На сьогодні, у зв'язку із швидким розвитком комп'ютерної техніки, велике поширення набувають чисельні розв'язки задач із застосуванням різноманітних чисельних наближених методів. Такі методи повинні бути досить універсальними, мають хорошу точність, не вимагають занадто громіздких аналітичних обчислень. Фактично, головна вага у розв'язанні задачі перекладається з аналітичного аналізу проблеми на чисельну потужність обчислювальної машини. В даній роботі за основу береться обрахунок енергії та хвильової функції основного стану системи за допомогою варіаційного методу Бубнова-Гальоркіна, який забезпечує універсальний і досить зручний метод отримання односторонніх контрольованих наближень до розв'язків задачі практично з довільною точністю.

В той же час для виявлення фізичних особливостей певний інтерес представляють можливості аналітичних методів для оцінки енергії такої підсистеми. В цьому розділі буде проведений короткий аналіз деяких простих аналітичних наближень до задачі $dt\mu$.

2.2.1 Оцінка енергії основного стану знизу методом мінімаксу

Згідно з методом мінімаксу можливо зробити оцінку знизу для енергії основного стану, якщо гамільтоніан системи вдасться розбити у суму ефективних двочастинкових гамільтоніанів.

Нехай маємо гамільтоніан, що записується у вигляді суми

$$H = \sum_{i < j} H_{ij}$$
(8)

тоді згідно до загального принципу Рітца

$$E = \min \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$$
(9)

де мінімум береться на всіх можливих функціях. В той же час можна записати такий ланцюжок нерівностей

$$\min \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \min \langle \Psi | \sum_{i < j} H_{ij} | \Psi \rangle \geq \sum_{i < j} \min \langle \Psi | \hat{H}_{ij} | \Psi \rangle \geq \sum_{i < j} \langle \Psi_{ij} | \hat{H}_{ij} | \Psi_{ij} \rangle$$
(10)

Ψ_{ij} - точні хвильові функції двохчастинкових систем з гамільтоніанами \hat{H}_{ij} . Таким чином, енергія основного стану системи N частинок більша за суму середніх від двохчастинкових гамільтоніанів на точних хвильових функціях двохчастинкових задач.

В нашому випадку потенціальна енергія розбивається на двохчастинкові частини тривіально, а кінетична енергія трьох частинок розбивається у такий спосіб (можливі також інші схеми):

$$\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} = \sum_{i < j} \left(\frac{p_i^2}{4m_i} + \frac{p_j^2}{4m_j} \right) \quad (11)$$

ефективні двохчастинкові гамільтоніани мають вигляд

$$\hat{H}_{ij} = \frac{p_i^2}{4m_i} + \frac{p_j^2}{4m_j} + \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} \quad (12)$$

і відповідають системі двох кулонових частинок із зарядами Z_i, Z_j і масами $m_i^* = 2m_i; m_j^* = 2m_j$. Для підсистеми (dt) зв'язаний стан відсутній і мусимо взяти замість її

внеску нуль, підсистеми (d $\mu, t\mu$) є звичайні воднеподібні підсистеми, для яких мусимо взяти

(в термінах характерних величин задач) $E_0 = -\frac{1}{2} \frac{m_{ij}}{m_\mu}$, де m_{ij} - зведена маса системи i,j, (тут

m_μ - маса мюона і береться рівною одиниці). Легко переконатися, що зведені маси підсистем (d $\mu, t\mu$) виражені в одиницях маси мюона є

$$\begin{aligned} m_{t\mu} &= 0.963748 \\ m_{d\mu} &= 0.946671. \end{aligned} \quad (15)$$

У випадку наших підсистем зведені маси вдвічі більше за наведені значення, отже для оцінки енергії за методом мінімаксу маємо

$$E^{(L)} = -0.963748 - 0.946672 = -1.91042 \quad (16)$$

Тим самим, енергія системи (6) обмежена знизу значенням (16). Як буде видно з подальших розрахунків і впливає з фізичних міркувань, система (dt μ) є слабкозв'язаною і реальна енергія зв'язку мало відрізняється від -0.5, тим більше вона менша за одиницю. Отже, наближення мінімаксу є занадто грубе для оцінки енергії основного зв'язаного стану в системі.

2.2.2 Оцінка енергії зв'язаного стану методом теорії збурень.

Квантово-механічна система трьох частинок (dt μ) складається з двох масивних ядер, що відштовхуються, і однієї більш легкої частинки - мюона, що завдяки протилежному заряду і малій масі відіграє роль зв'язуючої компоненти. Легко бачити, що система має

ненульовий повний електричний заряд й крім того практично еквівалентні (внаслідок однакових електричних властивостей й малої рухомості) важкі ядра. Все це дозволяє припустити слабку зв'язаність системи, її великі розміри та наявність у її складі практично ідентичних підканалів, в одному з яких домінуючу роль відіграє підсистема дейтрон-мюон й тритон знаходиться далеко, а в іншому - тритон-мюон з віддаленим дейтроном. Враховуючи це, логічно є спроба врахувати в аналітичному розгляді кластерну структуру системи. Зокрема, можна провести одно та двоканальне кластерне наближення, в яких враховуються відповідно один та обидва можливі канали. Нажаль, розгляд цих наближень не призводить до яких не-будь позитивних результатів. Так, при розгляді одно та двоканального кластерного наближення можна побачити, що зв'язаний стан в системі з'являється лише внаслідок взаємодії каналів системи між собою, що виражається у відсутності зв'язаного стану взагалі, якщо така взаємодія не враховується. Водночас з тим можна очікувати існування слабого зв'язку в системі, що виражається у взаємодії каналів між собою, що є слабкою. Тому можемо сподіватися, що навіть грубе врахування міжканальної взаємодії призведе до хороших наближень до енергії зв'язаного стану.

Такий розгляд можна провести в рамках теорії збурень, що дає порівняно громіздкий, але досить простий спосіб отримати розумне наближення до розв'язків задачі з урахуванням взаємодії між каналами системи.

Порівнюючи разом з тим нашу задачу із задачею розрахунку іону атому водню H_2^+ [] можна побачити аналогію між ними. Різниця, фактично, полягає в неоднаковості ядер, що беруть участь у створенні системи. В усьому іншому для нашої задачі можна провести аналогічний розгляд. Як буде показано далі, теорія збурень в цьому випадку дає хороше значення для енергії зв'язку, що узгоджується із представленням про слабку міжканальну взаємодію в системі.

Отже, будемо розглядати надалі систему двох позитивно і однієї негативно заряджених частинок. Позначимо через R відстань між позитивно зарядженими ядрами, r - відстань між тритоном і мюоном, а r' - відстань між дейтроном і мюоном. Тоді рівняння Шрьодінгера для нашої системи приймає вигляд

$$\begin{aligned} (E - \hat{H})\Psi &= 0 \\ \hat{H} &= T - \frac{1}{r} - \frac{1}{r'} + \frac{1}{R} \\ \vec{r}' &= \vec{r} - \vec{R} \end{aligned} \quad (17)$$

Нульовому наближенню теорії збурень буде відповідати випадок, коли одна з підсистем (μ) чи ($d\mu$) не відчуває впливу третьої частинки, що відповідає одноканальному кластерному наближенню або двоканальному кластерному наближенню без урахування міжканальної

взаємодії. Рівняння Шрьодінгера, що описують ці два незалежні канали можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \left(E_{t\mu} - T_{t\mu} + \frac{1}{r}\right)\Psi_{t\mu} &= 0 \\ \left(E_{d\mu} - T_{d\mu} + \frac{1}{r'}\right)\Psi_{d\mu} &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

Обидва канали відповідають відомим системам і відображають воднеподібний атом. Їх власні числа **близькі** і мають значення

$$\begin{aligned} E_{t\mu} &= -\frac{m_{t\mu}}{2} \\ E_{d\mu} &= -\frac{m_{d\mu}}{2} \\ E_{t\mu} &\cong E_{d\mu} \end{aligned} \quad (19)$$

а частина хвильової функції за внутрішніми координатами є

$$\begin{aligned} \Psi_{t,d}(r) &= \sqrt{\frac{k_{t,d}^3}{\pi}} e^{-k_{t,d}r} \\ k_{t,d} &= m_{t,d\mu} \end{aligned}$$

Вважаючи, що система як ціле знаходиться у стані спокою, оберемо хвильову функцію нульового наближення у вигляді суперпозиції хвильових функцій підсистем і введемо такі величини (в адіабатичному наближенні):

$$\begin{aligned} \Psi &= C_1\Psi_d + C_2\Psi_t \\ E^0 &= \frac{E_{d\mu} + E_{t\mu}}{2}; \Delta = \frac{E_{d\mu} - E_{t\mu}}{2} \end{aligned} \quad (20)$$

Енергію і хвильову функцію представимо у вигляді ряду за степенями малості оператора міжканальної взаємодії:

$$\begin{aligned} E &= E^0 + E' + \dots \\ \Psi &= \Psi^0 + \Psi' + \dots \end{aligned} \quad (21)$$

Підставляючи цей розклад у вихідне рівняння і обмежуючись величинами першого порядку малості, отримаємо рівняння:

$$(E^0 - \hat{H})\Psi' = -C_1\left(E' - \Delta + \frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right)\Psi_d - C_2\left(E' + \Delta + \frac{1}{r'} - \frac{1}{R}\right)\Psi_t \quad (22)$$

причому для d-каналу взаємодія $\frac{1}{r'}$ є основною, а $\frac{1}{r} - \frac{1}{R}$ є збуренням, так само для t-каналу

$\frac{1}{r}$ є основною, а $\frac{1}{r'} - \frac{1}{R}$ є збурення. З отриманого рівняння можна знайти енергію збурення

а також коефіцієнти входження різних підканалів у систему. Для цього врахуємо, що

$$\langle \Psi_{d,t} | (E^0 - \hat{H}) \Psi' \rangle = \langle (E^0 - \hat{H}) \Psi_{d,t} | \Psi' \rangle \cong \langle E' \cdot \Psi_{d,t} | \Psi' \rangle \quad (23)$$

тобто є величиною другого порядку малості, тому, помноживши рівняння (22) на одну з хвильових функцій $\Psi_{d,t}$ і провівши інтегрування за координатою r нехтуючи другим порядком малості ми отримуємо систему однорідних лінійних рівнянь для C_1 і C_2 :

$$\begin{aligned} C_1(\Delta - E' + K_{dd}) + C_2(-(E' + \Delta)S + K_{dt}) &= 0 \\ C_1(S(\Delta - E') + K_{td}) + C_2(-(E' + \Delta) + K_{tt}) &= 0 \end{aligned} \quad (24)$$

де введені такі позначення

$$\begin{aligned} S &= \int \Psi_t(r) \Psi_d(R-r) dr \\ K_{dd} &= \int \Psi_d(R-r) \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{r} \right] \Psi_d(R-r) dr; \quad K_{dt} = \int \Psi_d(R-r) \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{|R-r|} \right] \Psi_t(r) dr \\ K_{td} &= \int \Psi_t(r) \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{r} \right] \Psi_d(R-r) dr; \quad K_{tt} = \int \Psi_t(r) \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{|R-r|} \right] \Psi_t(r) dr \end{aligned} \quad (25)$$

і враховано, що хвильові функції каналів нормовані на одиницю. Величини K_{tt} , K_{dd} є аналогами кулонової енергії взаємодії атома водню з іоном атома водню - K задачі для H_2^+ , а K_{td} , K_{dt} є аналогом обмінної енергії, що звичайно позначається через A в задачі H_2^+ . На відміну від вищезгаданої задачі, тут ці величини не тотожні і підлягають окремому обрахунку. Всі коефіцієнти системи рівнянь можуть бути точно обраховані і мають такі значення:

$$S = 8 \frac{\sqrt{k_t^5 k_d^5}}{(k_t^2 - k_d^2)^2} \left\{ \left(\frac{e^{-k_d R}}{k_d} + \frac{e^{-k_t R}}{k_t} \right) R + (e^{-k_t R} - e^{-k_d R}) \frac{4}{k_t^2 - k_d^2} \right\} \frac{1}{R} \quad (26)$$

$$K_{dd} = \frac{1 + Rk_d}{R} e^{-2k_d R} \quad (27)$$

$$K_{tt} = \frac{1 + Rk_t}{R} e^{-2k_t R}$$

$$K_{td} = \frac{1}{R} S - 8 \frac{\sqrt{k_t^3 k_d^3}}{(k_t^2 - k_d^2)^2} \frac{1}{R} \left\{ k_d e^{-k_t R} + \frac{1}{2} (R[\bar{k}_t^2 - k_d^2] - 2k_d) \right\} \quad (28)$$

$$K_{dt} = \frac{1}{R} S - 8 \frac{\sqrt{k_t^3 k_d^3}}{(k_t^2 - k_d^2)^2} \frac{1}{R} \left\{ k_t e^{-k_d R} + \frac{1}{2} (R[\bar{k}_d^2 - k_t^2] - 2k_t) \right\}$$

Беручи до уваги, що існування розв'язків системи (24) еквівалентне рівності нулю детермінанта, отримаємо рівняння для енергії E' :

$$(1 - S^2)E'^2 - (K_{tt} + K_{dd} - S(K_{dt} + K_{td}))E' + (K_{dd}K_{tt} - K_{td}K_{dt} + (K_{tt} - K_{dd} - S(K_{dt} - K_{td}))\Delta - (1 - S^2)\Delta^2) = 0 \quad (29)$$

Враховуючи складний вигляд самих коефіцієнтів K та S від R (26)-(28), подальший аналітичний аналіз задачі призводить до складного виразу, що мало пристосований до роботи, тому вже з цього етапу доцільно проводити чисельний розрахунок. Обрахувавши чисельно залежність $E'(R)$ (терми в залежності від відстані між центрами), отримаємо такі графіки для енергії поправки першого наближення теорії збурень, що можна розглядати як вигляд ефективного потенціалу взаємодії ядер системи між собою (терми):

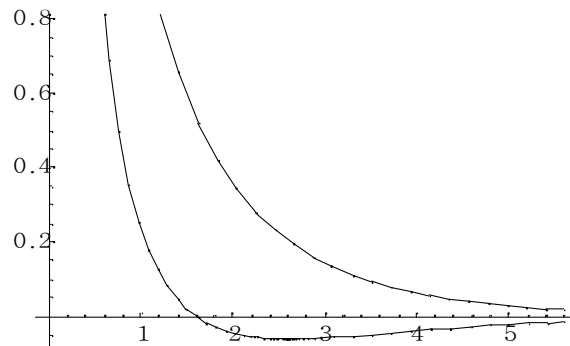


Рис. 1

звідки можна бачити, що в розглядуваному наближенні в першому порядку з'являється слабкий притягальний потенціал. Поблизу мінімуму притягального потенціалу, як і слід було очікувати, відношення вкладів підканалів $\frac{C_d}{C_t}$ близьке до одиниці, що свідчить про майже рівноправне входження каналів до системи.

Взагалі кажучи, при аналізі поведінки системи, необхідно також врахувати те, що система має поріг відносно нуля наближення теорії збурень, що в даному випадку є Δ , тоді відносно порогу більш детальний графік залежності ефективного потенціалу (терм) від відстані між ядрами буде:

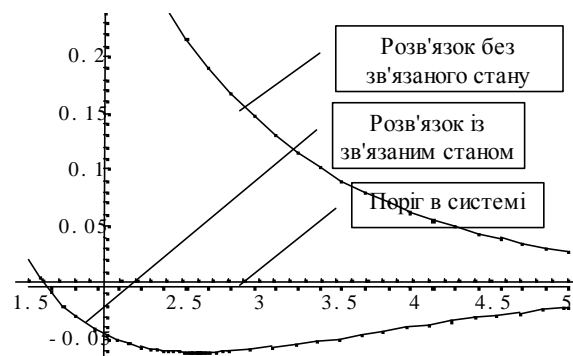


Рис. 2

Поряд з цим цікаво розглянути залежність внесків в загальну хвильову функцію від тритонного та дейтронного каналів, що має такий вигляд:

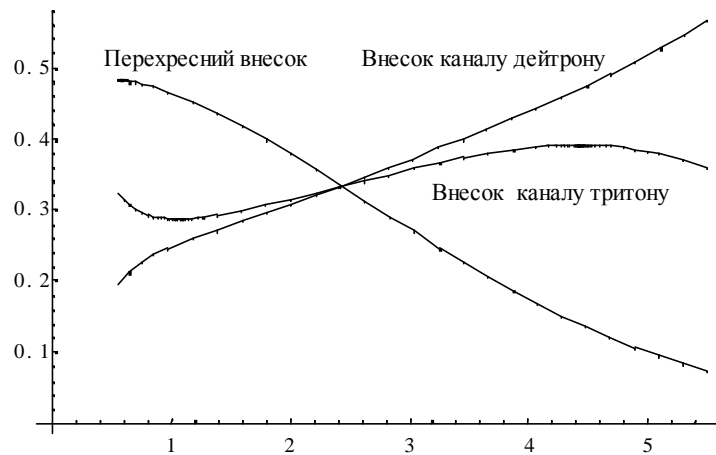


Рис. 3

З рис. 3 залежності внесків каналів у хвильову функцію та енергії від відстані між ядрами, можна сформувати певну картину динаміки системи. Коли відстань між ядрами сильно зменшується в цілому ядра відчують дію сильного відштовхувального потенціалу, що пояснюється тим, що ядра заглиблюються в хмару мюону, в результаті чого сильно спадає його екрануюча дія. З останнього графіка видно, що в цьому випадку вклад каналу тритону дещо більший за вклад дейтронної підсистеми, але внаслідок великого значення перехресного вкладу, навряд чи має сенс казати в цьому випадку про розподіл мюону поміж цими двома каналами. Вже на відстанях $R < 0.3 \div 0.5$ одиниць, система фактично представляє собою єдиний воднеподібний атом з ядром типу td і мюоном, що обертається довкола, про що свідчать особливості, що їх можна побачити на графіку біля нуля і які пов'язані з виродженням двох каналів у один спільний.

При збільшенні відстані між ядрами зростає екрануюча дія мюону, і вже для $R=1.62$ в системі з'являється слабке притягання. Коли відстань між ядрами досягає значення $R=2.352$, відбувається перерозподіл вкладів між дейтронною та тритонною підсистемою і більшу долю бере на себе дейтронна підсистема. При цьому потенціал притягання продовжує поглиблюватися. З подальшим ростом відстані між ядрами вклад дейтронної підсистеми продовжує переважати і на великих відстанях ($R \approx 5 \div 6$ одиниць) канал дейтрону майже повністю описує систему, при цьому підсистеми розходяться, про що свідчить спадання перехресного внеску, внеску каналу тритону і відповідно притягального потенціалу. Цю ж відстань ($R \approx 5$ одиниць) можна взяти за грубу оцінку геометричних розмірів системи. Використовуючи далі звичайну процедуру, можемо відшукати мінімум для ефективного притягального потенціалу і сказати, що він відповідає стійкому стану системи, який і береться для подальших обчислень.

Визначивши таким чином відстань між ядрами R , можна явно обрахувати коефіцієнти K , S і визначити енергію зв'язку системи відносно порогу та ефективний внесок каналів ($t\mu$) та ($d\mu$) у повну хвильову функцію. В результаті отримуються такі значення величин для системи ($dt\mu$):

для **ефективної відстані** між ядрами - $R = 2.61115$;
 для **енергії зв'язку над порогом** - $E' = -0.0619402$;
 для **енергії зв'язку повної** - $E = -0.539545$;
 що відповідає такій енергії зв'язку - $E' = -324.486$ eV.

Отримані значення добре збігаються із значеннями, отриманими з використанням методу Бубнова-Гальоркіна. Отже, наближення теорії збурень дає хороші результати для енергії основного зв'язаного стану. Виявляється, що це узгоджується із фізичними уявленнями про слабкість зв'язку між каналами. Внаслідок цього врахування взаємодії між каналами вже в першому наближення теорії збурень призводить до дуже хороших результатів для основних характеристик системи трьох кулонових частинок.

З попередньої викладки можна також побачити, що вона може бути проведена практично для будь-якої двокластерної системи трьох кулонових частинок незалежно від тотожності частинок. Отож схема, побудована на основі теорії збурень є перспективною для розрахунку енергії слабкозв'язаних кластерних систем трьох кулонових частинок.

2.3 Використання оптимізаційних схем варіаційного методу Бубнова-Гальоркіна для прецизійного розрахунку системи ($dt\mu$).

2.3.1 Варіаційний принцип і схеми реалізації варіаційних методів

Попри всі переваги використання для розв'язку та аналізу квантово-механічних систем різних аналітичних наближень та схем (теорія збурень, квазікласичне наближення і т.ін.), для теоретичного дослідження великої кількості подібних малонуклонних систем, а також квантових систем декількох частинок іншої природи, великий інтерес представляє розвинення аналітично відносно простих методів, здатних отримувати наближення до шуканих розв'язків з високою і контрольованою точністю. Останнім часом широкого поширення набули нові методи дослідження енергетичних спектрів квантово-механічних систем декількох частинок на основі різних варіаційних схем, що представляють доволі зручні і аналітично прості засоби для отримання таких наближень. При цьому часто можна досягти вищої, ніж в інших методах, точності розрахунків в задачах трьох та чотирьох частинок, а також проводити реальні дослідження і для систем з більшою кількістю частинок.

В основу роботи всіх варіаційних методів можна покласти такий факт. Нехай маємо заданий оператор гамільтона \hat{H} для певної квантово-механічної задачі, який є ермітовий і має дискретний спектр $|\alpha_n\rangle$, що відповідає повному наборові власних функцій оператора ψ_n . Розглянемо можливі середні від цього оператора на всіх можливих функціях $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ з деякого простору, який охоплює набір власних функцій цього оператора. Враховуючи, що ермітів оператор має повну систему власних функцій, розкладемо нашу пробну функцію за цим базисом і запишемо середнє від оператора гамільтона в такому вигляді:

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n |C_n|^2 \langle\psi_n|\hat{H}|\psi_n\rangle = \sum_n |C_n|^2 \alpha_n \langle\psi_n|\psi_n\rangle \geq \alpha_0 \sum_n |C_n|^2 \langle\psi_n|\psi_n\rangle = \alpha_0 \|\psi\|^2, \quad (30)$$

що виражає той факт, який називають принципом Рітца, що найнижче власне значення ермітового оператора співпадає із абсолютним мінімумом вказаного вище функціонала.

Таким чином, проблема відшукування власних чисел, при певних обмеженнях, може бути зведена до деякої варіаційної задачі. Для цього достатньо, аби оператор \hat{H} був симетричний та обмежений знизу, що означає, що $\langle\hat{H}\psi|\psi\rangle \geq d \langle\psi|\psi\rangle$ для всіх функцій з простору визначення оператора. Аби показати, що це так, припустимо, що d - є точна нижня

межа функціоналу $\frac{\langle\hat{H}\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ на всіх функціях простору визначення оператора \hat{H} , ψ -

елемент цього простору, на якому ця межа досягається й η - довільний вектор з цього

простору. Утворимо функцію $\varphi(\tau) = \frac{\langle\hat{H}(\psi + \tau \cdot \eta)|(\psi + \tau \cdot \eta)\rangle}{\langle(\psi + \tau \cdot \eta)|(\psi + \tau \cdot \eta)\rangle}$, ця функція проходить

через d коли $\tau=0$ і має бути більша, або рівна за це значення у всіх інших точках. Отже, в точці $\tau=0$ ця функція має мінімум, тоді $\varphi'(0) = 0$. Обрахувавши похідну по τ в цій точці можна прийти до рівняння:

$$\langle\hat{H}\psi|\eta\rangle\langle\psi|\psi\rangle - \langle\hat{H}\psi|\psi\rangle\langle\psi|\eta\rangle = 0 \quad (31)$$

з якого врахувавши, що $\frac{\langle\hat{H}\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = d$ отримаємо рівність $\langle\hat{H}\psi - d\psi|\eta\rangle = 0$, з якої випливає,

що d - є власне значення нашого оператора. Оскільки d - є точна нижня межа середніх значень оператора гамільтона, то він не може мати інших власних значень, менших за d ,

оскільки тоді $d' = \frac{\langle\hat{H}\psi'|\psi'\rangle}{\langle\psi'|\psi'\rangle} \leq d$, що знаходиться у протиріччі із нашим припущенням [].

Варіаційній задачі можна також дати інше формулювання, яке часто може бути більш зручне для використання. Для цього врахуємо, що оператор \hat{H} є лінійним і поділимо вектор, на якому досягається мінімум середнього значення оператора, на його норму, тоді

$$u = \frac{\psi}{\|\psi\|}; \quad \frac{\langle \hat{H}\psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \langle \hat{H}u | u \rangle$$

звідки приходимо до такого формулювання: необхідно знайти мінімум функціоналу $\langle \hat{H}u | u \rangle$ за додаткової умови $\|u\| = 1$.

Можна показати, що коли відшукувати мінімум на класі функцій, що ортогональні до всіх попередньо знайдених власних функцій, що відповідають зростаючій послідовності власних значень від d_0 до d_{n-1} , то можна відшукати нове власне значення d_n . Таким чином варіаційний принцип дає змогу чисельно відшукувати повні набори всіх власних функцій та власних значень майже довільного оператора, реалізуючи пошук мінімуму вказаних вище функціоналів за вказаних вище умов.

Отже, оцінивши мінімум такого функціоналу на певному класі функцій, можемо отримати оцінку для найменшого власного значення нашого оператора. В той же час сама проблема відшукування такого мінімуму є зовсім нетривіальною задачею і вимагає окремих математичних підходів. Одним із найбільш прозорих і простих методів побудови оцінок для мінімальних значень таких функціоналів є так звані проєкційні методи, суть яких полягає ось в чому.

Нехай ми маємо лінійний оператор \hat{H} , що діє з певного простору A в деякий простір B , і нехай ми можемо ввести в цих просторах набори лінійно незалежних базисних функцій для A та B відповідно $\{a_n\}$, $\{b_n\}$. Тоді головна ідея проєкційних методів для розв'язку рівняння виду $\hat{H}\psi = f$ полягає в наближеному представленні розв'язку рівняння ψ у вигляді лінійної комбінації перших N базисних елементів простору A - a_n , та проєктуванні отриманого значення $\hat{H}\psi_N \rightarrow B_N$ у підпростір B , натягнутий на певну кількість базисних елементів b_n . Задача в такому наближенні стає фактично задачею лінійної алгебри, ψ та f стають векторами певної розмірності, \hat{H} , відповідно, матрицею певного лінійного перетворення. В результаті отримання нових наближень ми можемо, в більшості випадків, як завгодно наблизитися до шуканого розв'язку рівняння.

Проєкційні методи можуть бути ефективно застосовані для розв'язку задач на власні значення ермітових операторів. Нехай, справді, розв'язуємо задачу на власні значення деякого оператора $\hat{H}u - \lambda u = 0$, де оператор \hat{H} є обмежений знизу. Згідно з розглянутими раніше відомостями про варіаційний принцип, найменше власне число оператора

визначається як мінімум усереднення цього оператора на різних функціях. Аби розв'язати цю задачу оберемо послідовність координатних елементів з функцій ϕ_n $n = 1, 2, \dots$ таких, що належать області визначення оператора \hat{H} ; є лінійно незалежні; утворюють повну систему функцій в просторі визначення оператора. Будемо шукати наближення до мінімального елементу у вигляді:

$$u_n = \sum_{k=1}^n a_k \phi_k \quad (32)$$

де a_k - постійні коефіцієнти. Оберемо ці коефіцієнти так, аби отримана функція була нормована на одиницю і так, аби величина $\langle \hat{H}u_n | u_n \rangle$ була мінімальна. Отже, задача зводиться до того, аби знайти мінімум функції n змінних

$$\langle \hat{H}u_n | u_n \rangle = \sum_{k,m=1}^n \langle \hat{H}\phi_k | \phi_m \rangle a_k a_m \quad (33)$$

що пов'язані додатковим рівнянням

$$\langle u_n | u_n \rangle = \sum_{k,m=1}^n \langle \phi_k | \phi_m \rangle a_k a_m \quad (34)$$

Для розв'язку цієї задачі можна скористатися методом невизначених множників Лагранжа. Побудуємо функцію $\langle \hat{H}u_n | u_n \rangle - \lambda \langle u_n | u_n \rangle$, де λ - поки що невизначений числовий множник, й прирівняємо нулю її часткові похідні за коефіцієнтами a_m . Це приведе нас до системи рівнянь:

$$\sum_k a_k (\langle \hat{H}\phi_k | \phi_m \rangle - \lambda \langle \phi_k | \phi_m \rangle) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (35)$$

Система (35) є лінійною й однорідною відносно невідомих, які не можуть одночасно обертатися в нуль - інакше це було б у протиріччі із нормуванням пробної функції. Звідси випливає, що визначник системи (35) має обернутись в нуль, що дає рівняння для λ :

$$\begin{vmatrix} \langle \hat{H}\phi_1 | \phi_1 \rangle - \lambda \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle & \langle \hat{H}\phi_2 | \phi_1 \rangle - \lambda \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle & \dots & \langle \hat{H}\phi_n | \phi_1 \rangle - \lambda \langle \phi_n | \phi_1 \rangle \\ \langle \hat{H}\phi_1 | \phi_2 \rangle - \lambda \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle & \langle \hat{H}\phi_2 | \phi_2 \rangle - \lambda \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle & \dots & \langle \hat{H}\phi_n | \phi_2 \rangle - \lambda \langle \phi_n | \phi_2 \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle \hat{H}\phi_n | \phi_1 \rangle - \lambda \langle \phi_n | \phi_1 \rangle & \langle \hat{H}\phi_n | \phi_2 \rangle - \lambda \langle \phi_n | \phi_2 \rangle & \dots & \langle \hat{H}\phi_n | \phi_n \rangle - \lambda \langle \phi_n | \phi_n \rangle \end{vmatrix} = 0 \quad (36)$$

Знайшовши з цього рівняння λ , підставимо його до рівняння (35), помножимо його на a_m й просумуємо по m , де a_m, a_k - компоненти векторів-розв'язків лінійної однорідної системи (35). Тоді отримаємо:

$$\sum_{k,m} \langle \hat{H}\phi_k | \phi_m \rangle a_k a_m = \lambda \sum_{k,m} \langle \phi_k | \phi_m \rangle a_k a_m \quad (37)$$

яке показує, що всі корені рівняння (35) - (36) задовольняють вихідному рівнянню на власні значення. Серед них лежить й шуканий мінімум нашої функції від $\{a_n\}$, який, згідно останньої формули, відповідає найменшому з коренів рівняння (36). З ростом n вказаний мінімум не зростає і в той же час не менше за величину точної нижньої границі усереднення оператора \hat{H} . Звідси випливає, що коли $n \rightarrow \infty$ величина $\lambda_n \rightarrow d' \geq d$. Коли послідовність координатних функцій повна, то ця границя є рівною d - мінімуму усереднення оператора \hat{H} на всіх функціях [1].

Така схема розв'язку задачі на власні значення має назву процесу Рітца і в принципі дозволяє отримати яке завгодно точне наближення до розв'язку задачі шляхом збільшення базису. Цей метод може бути узагальнена для рівнянь вигляду $\hat{H}u = f$, така схема має назву процесу Бубнова-Гальоркіна. Розглянемо головну ідею цієї схеми.

Нехай ми шукаємо певну функцію $u(p)$, що задовольняє деякому лінійному неоднорідному рівнянню і, можливо, деяким однорідним крайовим умовам:

$$Lu(p) - f(p) = 0 \quad (38)$$

Знову, оберемо нескінчену послідовність координатних функцій, таких, що є лінійно незалежними, задовольняють крайовим умовам і належать області визначення оператора L і запишемо n наближення до розв'язку задачі у вигляді

$$u_n(p) = \sum_{k=1}^n a_k \phi_k(p) \quad (39)$$

де a_k - довільні сталі, що обираються пізніше. За методом Бубнова-Гальоркіна коефіцієнти a_k визначаються із вимоги, аби ліва частина рівняння (38) стала після підстановки до неї $u_n(p)$ ортогональна до функцій $\phi_1(p), \phi_2(p), \dots, \phi_n(p)$. Таким чином ми прийдемо до такої системи лінійних неоднорідних алгебраїчних рівнянь:

$$\sum_{k,m} a_k \langle L\phi_k | \phi_m \rangle = \langle f | \phi_m \rangle, \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (40)$$

Так само у задачі на власні значення рівняння буде мати вигляд $Lu - \lambda Bu = 0$, а процес Бубнова-Гальоркіна приводить до системи рівнянь

$$\sum_k a_k (\langle L\phi_k | \phi_m \rangle - \lambda \langle B\phi_k | \phi_m \rangle) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (41)$$

умова нетривіальності розв'язків якої призводить до рівняння на власні значення

$$\begin{vmatrix} \langle \hat{H}\phi_1 | \phi_1 \rangle - \lambda \langle B\phi_1 | \phi_1 \rangle & \langle \hat{H}\phi_2 | \phi_1 \rangle - \lambda \langle B\phi_2 | \phi_1 \rangle & \dots & \langle \hat{H}\phi_n | B\phi_1 \rangle - \lambda \langle \phi_n | B\phi_1 \rangle \\ \langle \hat{H}\phi_1 | \phi_2 \rangle - \lambda \langle B\phi_1 | \phi_2 \rangle & \langle \hat{H}\phi_2 | \phi_2 \rangle - \lambda \langle B\phi_2 | \phi_2 \rangle & \dots & \langle \hat{H}\phi_n | B\phi_2 \rangle - \lambda \langle \phi_n | B\phi_2 \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle \hat{H}\phi_n | \phi_1 \rangle - \lambda \langle B\phi_n | \phi_1 \rangle & \langle \hat{H}\phi_n | \phi_2 \rangle - \lambda \langle B\phi_n | \phi_2 \rangle & \dots & \langle \hat{H}\phi_n | B\phi_n \rangle - \lambda \langle \phi_n | B\phi_n \rangle \end{vmatrix} = 0 \quad (42)$$

Якщо взяти за $V=E$, то отримане рівняння по формі співпадає із рівнянням, отриманим для процесу Рітца, отже реалізує спосіб відшукування власних значень оператора \hat{H} [1].

Важливо підкреслити, що розв'язок задач на власні значення зовсім не єдина сфера застосування методу Бубнова-Гальоркіна. Фактично, він може бути застосований для наближеного розв'язку будь-якого рівняння (38). В основі схеми, очевидно, лежить принцип проєкційного методу, що забезпечує велику універсальність. Можна показати, що для більшості розумних випадків метод Бубнова-Гальоркіна дозволяє як завгодно близько наблизитися до реального розв'язку і реального власного значення оператора задачі. В подальшому метод Бубнова-Гальоркіна взято за основу для прецизійного варіаційного розрахунку характеристик основного стану системи трьох взаємодіючих кулоновських частинок ($dt\mu$).

2.3.2 Постановка варіаційної задачі визначення характеристик основного стану системи ($dt\mu$).

Нас цікавитиме розгляд системи трьох частинок, що взаємодіють кулоновими силами, мають різні маси і знаходяться в S-стані (повний орбітальний момент $L=0$). В такому випадку безрозмірний гамільтоніан системи буде мати простий вигляд:

$$\mathcal{H} = - \left(\sum_{k=1}^3 \frac{1}{2m_k} \Delta_k \right) + \sum_{\substack{k,j=1 \\ k < j}}^3 \frac{Z_k Z_j}{r_{kj}} \quad (43)$$

Зручним виявляється взяти за координатний базис функції, що будуються як суперпозиції гаусоїд, які залежать від відносних координат r_{ij} . У випадку задач тотожних частинок, це можуть бути гаусоїди, симетризовані по координатам трьох частинок $\hat{\mathbf{S}} \cdot e^{-\left(a_k r_{12}^2 + b_k r_{13}^2 + c_k r_{23}^2\right)}$, де оператор симетризації \mathbf{S} проводить перестановку частинок між собою з подальшим підсумовуванням всіх отриманих доданків, а $r_{ij} = \left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|$ - відносна відстань між двома частинками. В цьому випадку, фактично, кожна координатна функція є насправді лінійною комбінацією 6 гаусоїд, які мали б бути присутні в базисі і структуру яких ми *вгадали* виходячи з фізичних міркувань, що значно покращує збіжність наближення. В нашому випадку таку *априорну* структуру координатного базису побудувати проблематично, тому ми будемо використовувати прості гаусоїди вигляду

$|a_k, b_k, c_k\rangle = |k\rangle = e^{-(a_k r_{12}^2 + b_k r_{13}^2 + c_k r_{23}^2)}$, де a_k, b_k, c_k - нелінійні параметри, що задають протяжність компонент гаусоїдального базису; частинці 1 буде надалі відповідати дейтрон, 2 - тритон і 3 - мюон.

Як ми бачили раніше, при розгляді загальної схеми проекційного варіаційного методу Бубнова-Гальоркіна, вирішальну роль для чисельного розрахунку надалі будуть грати матричні коефіцієнти $\langle \phi_k | \hat{H} | \phi_m \rangle$, $\langle \phi_k | \phi_m \rangle$. Певною перевагою гаусоїдального базису є можливість аналітичного обрахування цих матричних коефіцієнтів та їх відносно нескладний вигляд, що суттєво спрощує подальший розрахунок з використанням комп'ютерів. Задача обрахунку матричних коефіцієнтів зводиться до обрахунку таких виразів:

$$\langle i | T_1 | j \rangle = \langle i | \frac{\Delta_1}{m_1} | j \rangle; \quad \langle i | V_{12} | j \rangle = \langle i | \frac{1}{r_{12}} | j \rangle; \quad \langle i | j \rangle. \quad (44)$$

В цьому випадку зручно розраховувати ці матричні елементи в координатах Якобі:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \vec{q}$$

Найпростішим є обрахунок останнього матричного коефіцієнту перекриття між координатними гаусоїдами. Дійсно

$$\langle i | j \rangle = \int dq_1 dq_2 e^{-(a r_{12}^2 + b r_{13}^2 + c r_{23}^2)} \quad (45)$$

де введено позначення $a = a_i + a_j$; $b = b_i + b_j$; $c = c_i + c_j$. В координатах Якобі цей вираз переписується

$$\iint dq_1 dq_2 e^{-\alpha \sum q_{1,i}^2 - \beta \sum q_{2,i}^2 - 2\gamma \sum q_{1,i} q_{2,i}} = \left(\iint dq_{11} dq_{21} e^{-\alpha q_{11}^2 - \beta q_{21}^2 - 2\gamma q_{11} q_{21}} \right)^3 = J^{[0,0]}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (46)$$

де $\alpha = 2a + \frac{b+c}{2}$; $\beta = \frac{3}{2}(b+c)$; $\gamma = \frac{\sqrt{3}}{2}(b-c)$ і введено функцію (47)

$$J^{[0,0]}(a, b, c) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \cdot e^{-a \cdot x^2 - b \cdot y^2 - 2c \cdot xy}. \quad (48)$$

Таку функцію неважко явно обрахувати, оскільки вона легко розбивається на множники

типу $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$. Отже, маємо такі співвідношення:

$$J^{[0,0]}(a,b,c) = \frac{\pi}{\sqrt{a \cdot b - c^2}}$$

$$\langle i | j \rangle = \left(\frac{\pi}{\sqrt{3(ab + bc + ac)}} \right)^3 \quad (49)$$

Для обрахунку матричного коефіцієнта від потенціальної енергії необхідно переписати інтеграл в сферичній системі координат, тоді

$$\int d\bar{q}_1 \frac{e^{-\alpha q_1^2}}{q_1} \int dq_2 e^{-\beta q_2^2 - 2\gamma \bar{q}_1 q_2} =$$

$$= \left(\frac{\pi}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi \int_0^\infty dq_1 \cdot q_1 \cdot e^{-\left(\alpha - \frac{\gamma^2}{\beta}\right) q_1^2} = \left(\frac{\pi}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2\pi\beta}{\alpha \cdot \beta - \gamma^2} = \frac{2 \cdot \pi^3}{\sqrt{3\pi}} \frac{1}{\sqrt{b+c}} \frac{1}{3(ab+ac+bc)} \quad (50)$$

Перестановки коефіцієнтів (a_i , b_i , c_i) дають можливість отримати значення всіх інших інтегралів для частин потенціалу $\frac{1}{r_{13}}$, $\frac{1}{r_{23}}$. Матричний елемент від кінетичної енергії також

можна розрахувати аналітично. Він дорівнює:

$$J = 3 \left[4\bar{\alpha}^2 J^{[10]}(a,b,c) + 4\bar{\gamma}^2 J^{[01]}(a,b,c) + \right.$$

$$\left. + 8\bar{\alpha}\bar{\gamma} J^{\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]}(a,b,c) - 2\bar{\alpha} J^{[00]}(a,b,c) \right] \left[J^{[00]}(a,b,c) \right]^2 \quad (51)$$

де введено позначення

$$J^{[nm]}(a,b,c) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \cdot x^{2n} y^{2m} e^{-ax^2 - by^2 - 2c \cdot xy} \quad (52)$$

такі інтеграли рахуються і виявляються рівними

$$J^{[01]}(a,b,c) = J^{[10]}(b,a,c) = \frac{\pi}{2} \frac{b}{(a \cdot b - c^2)^{\frac{3}{2}}}$$

$$J^{\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]}(a,b,c) = -\frac{\pi}{2} \frac{c}{(a \cdot b - c^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (53)$$

Функції $J^{[nm]}$, що з'являються при обрахунку матричних коефіцієнтів на гаусоїдах, можуть бути обраховані в загальному випадку і виражаються через гіпергеометричні функції ${}_2F_1$ таким чином:

$$\begin{aligned}
J^{[nm]}(\alpha, \beta, \gamma) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \cdot x^{2m} y^{2n} e^{-\alpha x^2 - \beta y^2 - 2\gamma xy} = \\
&= \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{1+m} \left(\frac{1}{\beta}\right)^{1+n} \frac{1}{4} \times \\
&\times \left\{ \left(1 + (-1)^{2m}\right) \left(1 + (-1)^{2n}\right) \sqrt{\alpha\beta} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2} + n\right) {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + m, \frac{1}{2} + n; \frac{1}{2}, \frac{\gamma^2}{\alpha\beta}\right) - \right. \\
&\left. - \left(1 + (-1)^{2m+1}\right) \left(1 + (-1)^{2n+1}\right) 2\gamma \cdot \Gamma(1+n) {}_2F_1\left(1 + m, 1 + n; \frac{3}{2}, \frac{\gamma^2}{\alpha\beta}\right) \right\}
\end{aligned} \tag{54}$$

Можна перевірити, що таким чином визначені $J^{[00]}$, $J^{[10]}$, $J^{[0.5,0.5]}$ призводять до тих самих значень, що були отримані прямим розрахунком.

Подальший обрахунок полягає в доволі громіздких алгебраїчних перетвореннях виразів і їх спрощеннях. Як їх результат, для матричного коефіцієнту від кінетичної енергії отримується вираз:

$$\langle i | -\frac{1}{2m_1} \Delta_1 | j \rangle = \frac{\pi^3}{\sqrt{3}m_1} \frac{(a+c)b_i b_j + (b+c)a_i a_j + (a_i b_j + a_j b_i)c}{(ab+ac+bc)^{\frac{5}{2}}} \tag{55}$$

в якому явно виділені симетрійні властивості і з якого легко отримати всі інші матричні елементи шляхом перестановок коефіцієнтів (a_i , b_i , c_i).

У ході подальшого розрахунку варіаційних наближень була помічена закономірність у зміні ефективності методу пошуку: кожні чотири-вісім функції ефективність зростала різко, після чого різко падала і потім повільно наростала до іншого скачку. Це дозволяє припустити, що базис координатних функцій має певну структуру, що може бути наближена за допомогою 4 або 8 гаусоїд. На жаль, встановити більш глибоко структуру такого блоку не вдалося.

Отже, задача обчислення власних коефіцієнтів матриць для методу Бубнова-Гальоркіна стає чисто обчислювальною і із застосуванням сучасних персональних комп'ютерів досить простою навіть для значних розмірностей базису. Слід зауважити, що проблема досягнення великої точності наближення до розв'язку задачі на власні значення в проекційних методах фактично розв'язується за рахунок розширення базису, в той же час значний інтерес для практичних розрахунків представляє отримання якнайкращого наближення до розв'язків задачі для мінімальних розмірів базису. Для цього слід перекласти головну частину проблеми мінімізації функціоналу середнього від гамільтоніану з розширення базису на побудову оптимальних координатних функцій, тобто, на їх оптимізацію за нелінійними параметрами a_i , b_i , c_i . В такій постановці проблема перетворюється на постійний пошук оптимального набору функцій з певного класу

(гаусоїди) для всіх розмірностей базису, тому є сенс спробувати перекласти й цю частину роботи на комп'ютер. Це тим більше природно, бо аналітично задача оптимізації великих базисів за нелінійними параметрами, фактично, не може бути розв'язана.

Відносно до цієї проблеми можна користуватися різними чисельними методами оптимізації. Поширеним способом її розв'язання є стохастична процедура Кукуліна [], крім того можна використовувати різні, так би мовити, детерміновані підходи, які полягають в отриманні нового наближення на основі вже отриманого старого, до яких можна віднести градієнтний метод та метод параболічної екстраполяції-інтерполяції. В даній роботі за основу розрахунків було взято стохастичний метод з певними модифікаціями, але також було розглянуто можливості регулярних методів стосовно задачі (dtp). Проблема оптимізації ускладнюється внаслідок складної форми енергетичної поверхні, що, як правило, має багато локальних мінімумів і складну форму поміж ними навіть для двох-трьох вимірів [], в той час як вже одна функція з нашого гаусоїдального базису має три виміри за нелінійними параметрами. В основному це проявляється в різкому погіршенні ефективності роботи для великих розмірностей базису, що можна пояснити розташуванням знайденої мінімальної точки в локальному мінімумі, який практично не покращується, але вийти з якого внаслідок складності поверхні метод не в змозі. По відношенню до такої ситуації всі процедури оптимізації можна умовно поділити на локальні та глобальні. Перші отримують інформацію про знаходження ймовірного мінімуму з однієї точки чи її невеликого околу. Для локальних методів характерні більша кінцева точність отриманого результату, менші обчислювальні затрати, більша регулярність в роботі порівняно з глобальними; в той же час вони мають погані можливості боротьби із локальними мінімумами та погані можливості роботи на складних поверхнях, для них дуже актуальною є проблема вибору початкової точки, яка не може бути розв'язана універсально для довільної енергетичної поверхні і потребує індивідуального підходу для кожного окремого випадку. В глобальних методах намагаються отримати інформацію про поведінку енергетичної поверхні з аналізу її значної області, прикладом глобального методу є стохастичний метод. З цим пов'язані такі їх характерні властивості: глобальні процедури можуть перестрибувати з одного локального мінімуму до іншого, якщо ті є досить великими і знаходяться недалеко один від одного, отже, мають кращі, ніж локальні процедури, можливості боротьби з локальними мінімумами, не мають проблем з вибором початкової точки - в цьому їх головна перевага. В той же час глобальні методи мають нижню границю розмірів, нижче якої мінімум просто не буде помічений, не мають регулярності в роботі; звичайно вимагають більшого об'єму обчислювальної роботи та забезпечують гіршу кінцеву точність, ніж регулярні процедури.

Певного вибору в бік того чи іншого методу зробити не можна, гарантувати стовідсотково знаходження глобального мінімуму із застосуванням будь-якого з методів не можна також. Цікавою є перспектива об'єднання глобальних та локальних методів у єдину структуру.

2.3.3 Використання варіаційного методу зі схемою стохастичної оптимізації для визначення характеристик основного стану системи ($dt\mu$).

У даній роботі за основу чисельної оптимізації координатного базису було взято стохастичний метод, як такий, що має просту реалізацію і автоматичні засоби боротьби із локальними мінімумами. Стохастичний метод є типово глобальним методом, а тому має всі вказані переваги та недоліки, серед яких стійкість до перешкод з боку локальних мінімумів, відсутність неоднозначності у виборі початкової точки, підвищені вимоги до об'єму розрахунків за меншої кінцевої точності результату. Суть процесу оптимізації полягає в "скануванні" деякої області фазового простору шляхом перевірки випадкових пробних точок і відбору серед них мінімальної. В такій постановці метод має той недолік, що ефективність його роботи прямо залежить від густини пробних точок у області сканування, що накладає суттєві обмеження на її розміри та розмірність.

Дійсно, додавши до переліку оптимізаційних параметрів ще одну функцію (3 параметри), якщо область оптимізації за кожним параметром має діаметр порядку 10, то густина точок в такому випадку впаде, очевидно, в 10^3 разів, що відповідно позначиться на ефективності роботи процедури. В ході дослідження були проведені різноманітні спроби з'ясувати ефективність методу для різної кількості оптимізаційних параметрів, що виявили той факт, що стохастичний метод спроможний ефективно працювати лише для відносно невеликої кількості параметрів, що оптимізуються. Звичайно, це значний недолік порівняно з регулярними методами, які спроможні оптимізувати набагато більші набори параметрів, в той же час було виявлено, що неповна оптимізація не впливає суттєво на якість кінцевого результату. Неповна оптимізація підіймає проблему найбільш ефективного вибору параметрів серед тих, що оптимізуються. В роботі використовувався метод випадкового відбору параметрів для оптимізації з повтором декілька разів процедури та метод відбору оптимальних параметрів за іншими критеріями.

У ході роботи із стохастичним методом нами були введені деякі його модифікації, що дозволили наблизити метод до локальних за ефективністю використання машинного часу, водночас залишаючи й типово глобальні його характеристики. До однієї з найбільш суттєвих модифікацій відноситься постійна редукція області сканування, що ґрунтується на такому принципі: будемо проводити стохастичну оптимізацію деякого набору параметрів у

кілька етапів. В ході кожного етапу нами буде проведена звичайна процедура пошуку мінімального значення серед деякої кількості пробних точок, що мають певну густину і кількість. Після закінчення такого етапу ми можемо сподіватися з деякою ймовірністю на те, що знайдена мінімальна точка лежить не далі певної відстані від реального (деякого локального) мінімуму. Насправді, якщо точки кидаються рівномірно, то ймовірність знайти кінцеву точку в ізоглибинному ($h(r) \leq h_{\max}$) об'ємі v біля дійсного мінімуму можна оцінити як

$$P_N(v) = \int_v^{V_0} N \left(1 - \frac{v}{V_0}\right)^{N-1} \frac{dv}{V_0} = \left(1 - \frac{v}{V_0}\right)^N \quad (56)$$

що виражає той простий факт, що жодна інша точка не попаде в область з меншою глибиною, ніж наша виділена. Таким чином, прийнявши певний ризик втратити реальний мінімум з області пошуку, ми можемо оцінити наскільки можна зменшити об'єм, аби із певною ймовірністю залишити реальний мінімум в новій області сканування. Легко оцінити, що коли $N \approx 1000$, а $P_N \approx 0.99$, об'єм можна зменшити, а густину точок відповідно збільшити, в 10^5 разів. При розмірності фазового простору параметрів, що оптимізуються $D=6$, це відповідає зменшенню діаметру області пошуку приблизно в 7 разів. Отже, така модифікація суттєво покращує точнісні можливості стохастичного методу. На рис. 4 наведені порівняльні серії застосування стохастичного методу без редукції об'єму пошуку і з редукцією об'єму:

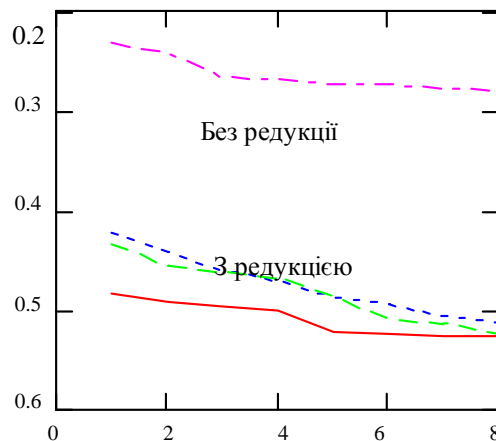


Рис. 4

З графіку видно, що стохастичний метод без редукції об'єму пошуку має значно гірші характеристики, аніж з редукцією. Нижня з серій взята з одного із останніх тестів методу, отриманих із застосуванням інших модифікацій, в тому числі з модифікацією плаваючого центру, яка буде розглянута далі.

В зв'язку з модифікацією редукції об'єму, в принципі, необхідно розв'язувати проблему оцінки форми ізоглибинного об'єму, та прийнявши досить низьку норму ризику за неї можна брати таку, що є найзручнішою для обчислень, оскільки з великою ймовірністю вона покриє і реальний об'єм. Фактично, такий підхід був би еквівалентний роботі з дещо більшим ефективним ризиком, що може бути зроблено несуттєвим. Із використанням редукції пробного об'єму стохастичний метод набуває частково властивостей локальних методів за рахунок суттєвого зменшення об'єму пошуку на фінальних стадіях роботи, в той же час за рахунок значних розмірів цієї області на початку, він також залишає за собою і властивості глобальних методів, як то перестрибування з одного локального мінімуму до іншого.

Іншою модифікацією процедури пошуку, що ще більше споріднює її із регулярними методами, стало застосування плаваючої області пошуку. Головна ідея модифікації полягає в постійному зміщенні центру області сканування слідом за знайденою мінімальною точкою. Застосування плаваючої області дозволяє суттєво розширити ефективні розміри об'єму сканування за рахунок його зміщення у відповідності до стану оптимізаційної процедури. Як і в попередній модифікації, існує загроза втратити реальний мінімум внаслідок його виходу за межі області пошуку. Просто оцінити цю ймовірність внаслідок складної поведінки методу не можна. Можливість суттєвого розширення ефективної області сканування дозволяє одночасно з цим зменшити розміри реальної області сканування і відповідно підвищити густину пробних точок, що знову ж призведе до підвищення ефективності роботи методу. Це дійсно спостерігається при розрахунках. Цікаво, що в такій постановці процедура оптимізації набуває яскраво виражених локальних ознак. Так, для неї спостерігався ефект "зависання" методу для великих розмірностей базису у деякому локальному мінімумі, коли була взята занадто мала область сканування. При більш уважному розгляді, можна помітити, що стохастичний метод із плаваючою областю, насправді, є дуже подібним до градієнтного методу з тою різницею, що область, в якій аналізується поведінка поверхні, хоч і мала, але не точкова. Це зберігає певні можливості перескакувати із одного локального мінімуму до іншого, водночас позичаючи певні риси градієнтного методу. Можна сказати, що в цьому формулюванні стохастичний метод стає квазілокальним. Попри це та підвищену можливість втратити мінімум, стохастичний метод з редукцією об'єму та плаваючою областю пошуку проявляє найкращі точнісні характеристики. Тому ці дві модифікації дають найсуттєвіший вклад в підвищення ефективності роботи методу.

У ході розрахунків характеристик основного стану системи була помічена аномальна поведінка ефективності методу, а саме регулярні (4, 8 функцій) коливання у прирості енергії в ході обчислень. Треба зауважити, що коли для кожного більшого набору координатних функцій оптимізацію проводити стохастичним методом безвідносно до попередніх результатів, то часто не вдається отримати навіть вже досягнутий раніше мінімум. Ця проблема автоматично розв'язується для регулярних методів, які починають роботу з попередньо отриманої точки; для подолання цієї проблеми в стохастичному методі необхідно враховувати вже отриманий на попередньому етапі результат. На наступному графіку наводиться приклад одної з перших серій, в якій кожен новий набір мінімізувався незалежно:

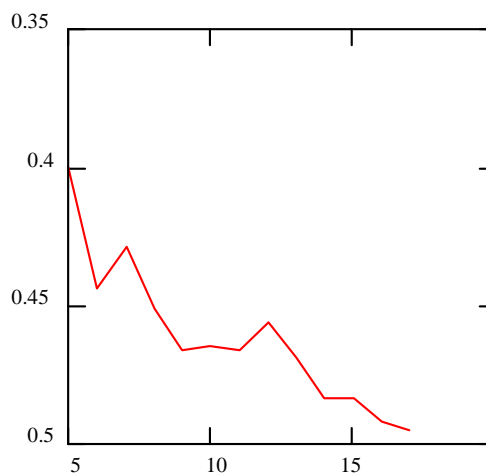


Рис. 5

За відсутності згладжування, притаманного подальшим розрахункам через врахування попередніх результатів, на цьому графіку яскраво проявляється періодична структура процесу. Значні стрибки ефективності мають місце на 6-7 кроку, 9-11 кроку, 14-16 та 19-20 кроку, тобто, приблизно через кожні 4-8 кроків. З подальшим підвищенням ефективності методу ця регулярність не зникає, а перетворюється на періодичні стрибки ефективності з періодом приблизно в 4 (або 8) функції. Можна висловити припущення, що така регулярність пов'язана із кластерним характером задачі, а періодичні покращення і погіршення ефективності є наслідками закінчення і початку апроксимації кластеру в новому наблизенні. Якщо це так, то оптимальний базис повинен мати певну структуру, яка може бути наближено описана за допомогою блоку з 4-8 гаусоїд. Визначення цієї структури могло б суттєво полегшити чисельні розрахунки, оскільки дозволило б зменшити базис в 4-8 разів для тієї самої точності і брати замість 100 функцій 25-15. Нажаль, встановити цю структуру поки що не вдалося. Слід

відзначити крім того, що регулярна періодична структура може також бути пов'язана з регулярними змінами у вигляді енергетичної поверхні (періодичне згладжування чи розширення мінімумів) і не мати ніякого відношення до фізичної сторони справи.

Іншою стороною цього графіка є необхідність врахування попередньо досягнутих результатів для досягнення монотонного спадання енергії, досягнутої на кожному етапі. При застосуванні такого обмеження, динаміка роботи процедури з розширенням базису набула приблизно такого вигляду - певний час (4-8 функцій) суттєвого покращання не відбувалося, що можна розглядати як ознаку того, що метод незначним чином покращував результат залишаючись поблизу одного й того самого мінімуму, після чого відбувався найбільший скачок і цикл починався заново. На наступному графіку приведена поведінка приростів в отриманій енергії на фінальному етапі розрахунку, з якої ясно видна періодична структура в ефективності методу, графік охоплює інтервал від 60 до 90 функцій (180-270 параметрів):

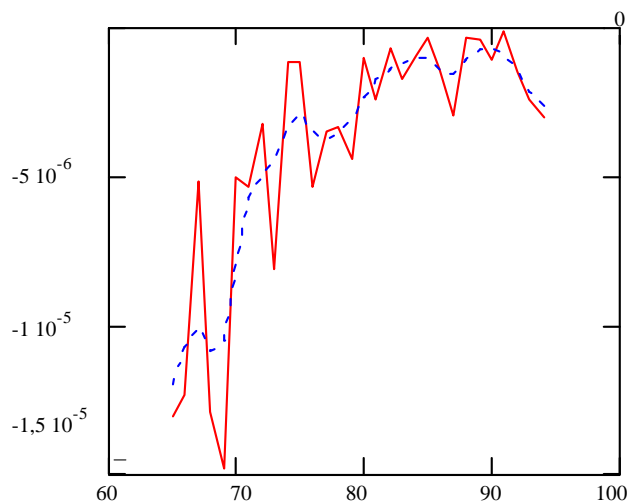


рис. 6

У фінальному розрахунку параметрів основного стану кількість функцій була доведена до більше ніж 100 з використанням різних прийомів для покращення роботи методу, в тому числі редукції об'єму та плаваючої області пошуку, але аналіз характеру спадання знайденої енергії не дозволяє говорити про те, що досягнута якась збіжність. Можна очікувати подальшого покращення результату із збільшенням базису, але можливості персональних комп'ютерів вже не дозволяють як-небудь суттєво підвищити точність в ході цієї серії. На рис. 7 наведена динаміка покращання енергії в ході головної розрахункової серії:

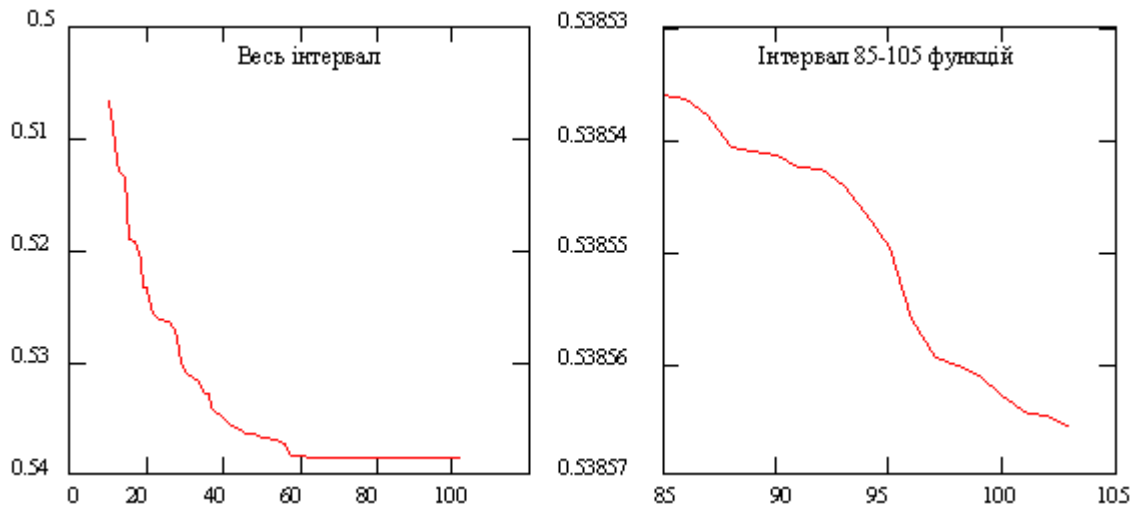


рис. 7

звідки видно, що мінімум фактично був "вичерпаний" приблизно за 60 функцій. Фактично ж, мінімум може бути "вичерпаний" в 30-40 гаусоїд. З графіків також видно збереження регулярної структури з періодом приблизно 4 функції і відсутність збіжності: поглиблення мінімуму хоч і мале (у 6-7 розряді), але стійке; видно також, що біля 101 функції розпочався новий цикл регулярної структури, що змушує очікувати кращого поглиблення результату близько 105 й 109 функцій. Екстраполяція наведених кривих для більших n дозволяє очікувати покращання результату до енергії близько $E = -(319.1 \div 319.2) \text{ eV}$ в ході наступних 50-70 функцій.

В ході роботи було випробувано декілька різних підходів до забезпечення хорошої ефективності стохастичного методу. Було обраховано три серії довжиною 30 функцій і більше. Кожна з серій відрізнялася подальшим поліпшенням ефективності. Зокрема, було зроблено висновок, що хорошої точності в наближенні можна досягти вже для 20-30 окремих гаусоїд, що дозволяє працювати в ході інших досліджень із відносно невеликими гарними представленнями для хвильової функції. Для таких наборів були отримані хороші наближення і до інших величин системи, що засвідчує їх придатність до застосування у розрахунках. Графічно порівняльні характеристики серій наведені нижче:

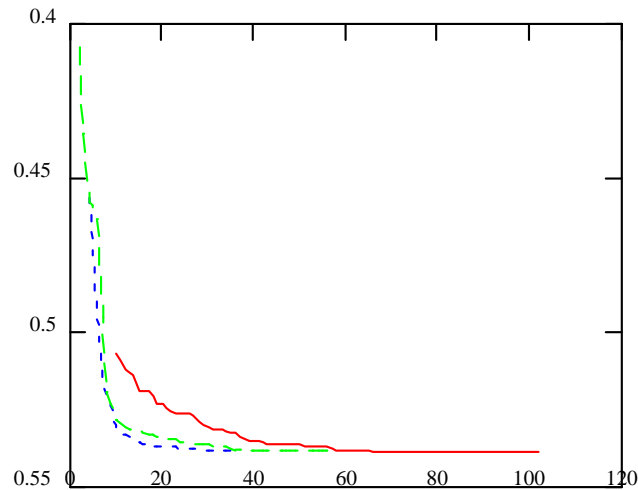


рис. 8

З порівняння графіків видно, що покращання ефективності роботи методу призводить до більш різкого поглиблення мінімуму на початку роботи, що дає вигоду порівняно із першою серією в 10-20 функцій і підтверджує думки про те, що хороших наближень можна досягти і для невеликих розмірностей базисів за хорошої оптимізації координатних функцій, проте потім швидкість збіжності різко спадає для всіх серій, що має бути пов'язане із близьким наближенням до реального значення енергії. Це призводить до того, що розміри областей, в яких ще може спостерігатися покращання енергії швидко спадають, а оскільки ефективність стохастичного методу прямо залежить від цих розмірів, то швидко падає й його ефективність.

Як вже зазначалося раніше, в ході головної серії було досягнуто розмірність базису 102 функції, що відповідає 306 параметрам. Крім, власне, значення енергії, метод також дозволяє отримати всі коефіцієнти при гаусоїдах, а отже побудувати з високою точністю хвильову функцію основного стану і розрахувати будь-які параметри системи. Далі буде приведений короткий аналіз хвильової функції та оцінені лінійні розміри системи на основі розрахунку середньоквадратичних дистанцій між частинками.

Після проведення чисельної мінімізації по 102 функціям для характерних величин системи були отримані такі значення:

- для **ефективної відстані** між ядрами - $R = 2.6$;
- для **енергії зв'язку над порогом** - $E' = -0.056692$;
- для **енергії зв'язку повної** - $E = -0.53856577$;
- що відповідає такій енергії зв'язку - $E' = -318.973 \text{ eV}$,
- та такій відстані між ядрами - $R = 6.654 \cdot 10^{-11} \text{ см}$.

значення енергії добре узгоджуються з відомими з літератури: $E = -319.14 \text{ eV}$ та отриманими з використанням методів теорії збурень.

Розглянемо надалі різні підсистеми у складі ($dt\mu$). Дейтрон та тритон утворюють позитивно заряджену відштовхувальну підсистему. Маючи хвильову функцію легко провести розрахунок для розмірів цієї системи скориставшись обчисленням середньоквадратичного радіуса цієї підсистеми. Ця величина виявляється рівною $R=2.877$ безрозмірних одиниць або $R=7.363 \cdot 10^{-11}$ см. Розподіл ймовірності для відносної відстані між дейтроном та тритоном з урахуванням множника типу $4\pi r_{dt}^2$ має вигляд:

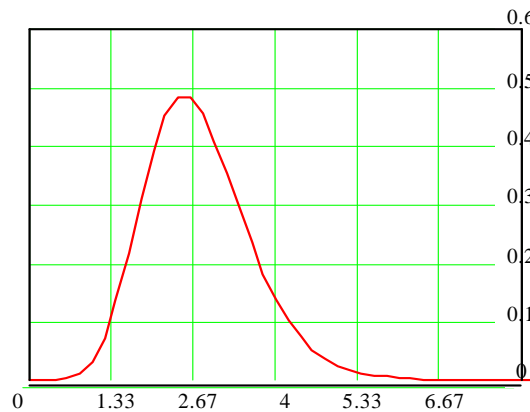


рис. 9

Найбільш ймовірна відстань між ядрами складає $R \approx 2.6$ безрозмірних одиниць, що знаходиться у доброму узгодженні із значенням, отриманим за теорією збурень ($R=2.61$). Після цієї відстані густина ймовірності швидко спадає і вже на відносних відстанях $R \approx 5$ одиниць знайти тритон та дейтрон практично неможливо.

Так само можна розглядати й тритон-мюону підсистему. Аналогічно до попереднього неважко обрахувати її середньоквадратичний радіус та оцінити лінійні розміри цієї підсистеми. Обрахунок дає для середньоквадратичних розмірів системи $R \approx 2.322$ безрозмірних одиниць або $R \approx 5.944 \cdot 10^{-11}$ см. Це дещо менше, ніж у випадку ядерної підсистеми, що логічно вказує на те, що мюон в системі в середньому знаходиться поміж дейтроном та тритоном. Розподіл ймовірності в залежності від відстані між тритоном та мюоном має такий вигляд:

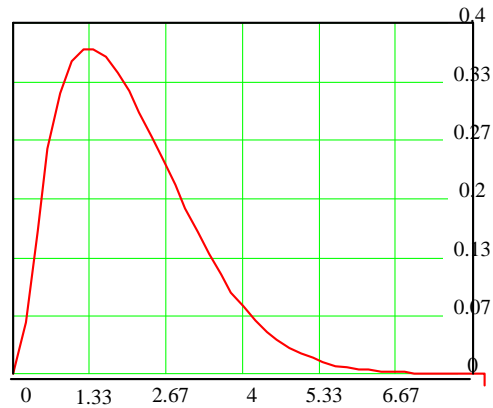


рис. 10

З графіка видно, що цей розподіл значно більш притиснутий до нуля, ніж розподіл між ядрами, що свідчить про зв'язуючу роль мюона, який весь час знаходиться між тритоном та мюоном, і з іншого боку є наслідком протилежності його заряду до заряду тритону. Функція розподілу досягає максимуму на відстані приблизно 1.3 одиниці. Велика відмінність між лінійними та середньоквадратичними розмірами обумовлена "повільним" спаданням розподілу на більших відстанях: фактично хмара ймовірності мюону простягається майже на таку саму відстань, як і хмара ядерної підсистеми - $R \approx 5$ одиниць.

Аналогічно до попередніх, може бути розглянута підсистема дейтрона та мюона. Середньоквадратична відстань між цими двома частинками складає значення $R \approx 2.423$ одиниць, або $R \approx 6.2 \cdot 10^{-11}$ см. Це дещо більше за відстань між тритоном та мюоном. Розподіл ймовірності для цієї підсистеми має вигляд, подібний до попереднього, він значно крутіший за ядерний і має довгий "хвіст", що простягається до відстаней $R \approx 5$ одиниць і є дещо більш потужний, ніж в попередній підсистемі.

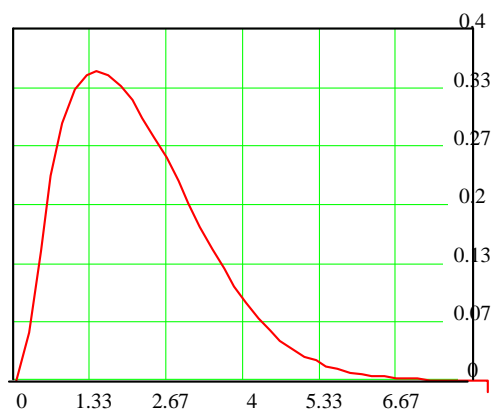


рис. 11

Така поведінка двочастинкових кореляційних хвильових функцій дозволяє оцінити ефективні розміри системи приблизно в $R \approx 5$ безрозмірних одиниць або $R \approx 1.28 \cdot 10^{-10}$ см.

Великі і потужні хвости розподілів підтверджують висновок, що можна було зробити на основі слабкого зв'язку у системі про порівняно великі розміри і "рихлість" системи.

3. Висновки

В даній роботі була розглянута задача отримання з високою точністю наближеного розв'язку для рівняння Шрьодінгера для системи трьох частинок на прикладі мезомолекули ($d\mu$), що взаємодіють за законом Кулона, із використанням варіаційного методу Рітца-Бубнова-Гальоркіна. Були розглянуті також деякі аналітичні наближення: наближення мінімаксу для оцінки енергії знизу, наближення теорії збурень. Крім того були проведені оцінки можливості використання інших методів оптимізації координатного базису в даній задачі.

В ході аналітичних наближень було зроблено висновки про недостатність мінімаксного наближення, що дає нижню границю для енергії зв'язку в $E \approx -1.91$ характерних одиниць ($E \approx -7$ KeV), навіть для грубої оцінки енергії основного стану.

Виходячи з двоканального наближення можна зробити висновок про слабкий зв'язок в системі і суттєвість взаємодії між каналами системи. В наближення теорії збурень за оператором зв'язку каналів було отримані такі значення для енергії зв'язку та розмірів системи:

енергія зв'язку - $E' = -324.486$ eV.

відстань між ядрами - $R = 6.66 \cdot 10^{-11}$ см,

що добре узгоджується із отриманими далі оцінками за варіаційним методом і уявленнями про слабку міжканальну взаємодію.

За основний метод розрахунку було обрано варіаційний метод Рітца-Бубнова-Гальоркіна із стохастичною процедурою оптимізації координатного базису. До цієї процедури були внесені певні зміни, що дозволило покращити її ефективність та наблизити за точностними характеристиками до детермінованих методів. В той же час були зроблені такі висновки щодо застосування цього методу до розв'язку складних задач:

* стохастичний метод не спроможний забезпечити стовідсотково гарантоване виявлення абсолютного мінімуму, як не спроможні і інші методи оптимізації, в той же час можливе отримання хороших наближень з порівняно невеликою кількістю базисних елементів;

* стохастичний метод є типово глобальним методом, що має автоматичні можливості боротьби із локальними мінімумами, простий в реалізації і невимогливий до попереднього аналізу поверхні, що є суттєвою перевагою порівняно з локальними методами при роботі на поверхнях складного вигляду;

* стохастичний метод вимагає значних об'ємів обчислювальної роботи, більших за об'єми детермінованих методів для невеликих розмірів базису, і менших для

значних розмірів базису, що обумовлює його переваги для роботи із базисами значних розмірностей;

* стохастичний метод не спроможний ефективно оптимізувати координатний базис за великим набором параметрів без попереднього аналізу поверхні і в цьому відношенні значно поступається детермінованим методам, в той же час застосування оптимізації за всіма параметрами не виявляє помітного виграшу порівняно із повторною повною оптимізацією;

* різні модифікації, що мають характер адаптивного регулювання параметрів методу в ході процесу оптимізації, суттєво покращують ефективність методу і, ймовірно, можуть бути використані для отримання інформації про характер складних поверхонь базуючись на аналізі ходу роботи методу, що може бути корисне і при вирішенні інших задач;

* порівняльні використання різних оптимізаційних методів, таких як градієнтний та метод параболічної екстраполяції-інтерполяції, по відношенню до цієї задачі не виявили суттєвої переваги в жодного з методів для малих і середніх розмірів базису, в той же час комбінація попередньої стохастичної оптимізації з наступним застосуванням градієнтного методу постійно показує найкращі результати в роботі.

По відношенню до роботи з варіаційним методом в конкретних умовах на основі базису з одиночних гаусоїд, були виявлені такі закономірності:

* варіаційний метод з базисом з одиночних гаусоїд виявляє в цій задачі порівняно слабку збіжність, для отримання гарного наближення було необхідно задіяти 20-30 функцій, в той час як навіть для 100 функцій (300 параметрів) метод все ще не виявляє ознак збіжності;

* було помічено характерну періодичну структуру з періодом в чотири або вісім базисних функцій, що може бути розцінене як прояв кластерної структури системи і вказівкою на присутню в оптимальному базисі блочну структуру з 4-8 функцій, що апроксимує кластерний блок; встановити структуру такого блоку не вдалося.

В ході роботи з варіаційним методом було отримано такі значення для характерних параметрів системи:

$$\begin{array}{ll} \text{енергії зв'язку} & - E' = -318.973 \text{ eV}, \\ \text{відстані між ядрами} & - R = 6.654 \cdot 10^{-11} \text{ см}, \end{array}$$

що добре узгоджується з відомими з літератури ($E = -319.14 \text{ eV}$) значеннями енергії. При аналізі поведінки розподілу ймовірності в залежності від відносної відстані в двочастинкових системах можна зробити висновки про рихлість системи і ефективний розмір $R \approx 1.3 \cdot 10^{-10} \text{ см}$.

Використана література

1. Alexander S. A., Monkhorst H. J. // Phys. Rev.-A38, 26 (1988)
2. Bhatia A. K., Orachman R. J. // Phys. Rev.-A30, 2138 (1984)
3. Gusev V. V., Puzenin V. I. // Few body systems.-1990.-v.9.-№2-3.-p.137-153.
4. Винницкий В. В., Пономарев Л. И. // Физика Элементарных частиц и Атомных Ядер.- М., 1982, т.13, в. 6, с.1338-1418.
5. Гринюк Б. Є., Сименюк І. В. Варіаційні розрахунки енергій і розмірів ядер D, T, ^3He та ^4He з високою точністю... // (УФЖ, 1999, очікується)
6. Краснопольский В. М., Кукулин В. И. // Известия АН СССР, Серия физ.-М., 1975.- т.39, №3.-С.543-549.
7. Кукулин В. И. // Известия АН СССР, Серия физ.-М., 1975.-т.39, №3.-С.535-542
8. Михлин С. Г. Вариационные методы в математической физике / Наука.-М., 1970.- 510с.
9. Овчаренко В. И., Сименюк І. В., Филиппов Г. Ф. Энергетические уровни системы трех частиц // Препринт АН УССР, ИТФ, Киев.-1970.- № 100.- 72 с.
10. Ребане Т. К. Простой метод оценки энергий кулоновских мезомолекул...// Ядерная физика.-1998.-т. 61, №8.-С.1443-1450
- 11.Сименюк І. В., Стешенко А. Й. // УФЖ.-1993.-38, №4.-С.505-513.
- 12.Соколов А. А. Квантовая механика / Просвещение.-М, 1965.-639с.
- 13.А. Marbin, J.-M. Richard, T.T.Wu // Phys. Rev.-A46, №7.-p.3697-3703 (1992).