(6). А, в свою очередь, конструктивную сторону замыкающей системы (6) удобно характеризовать матрицей Якоби. Свойства матрицы Якоби создают необходимые условия для качественного численного моделирования траектории искомого решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. – М: Наука, 1974. – 712 с.

УДК 51-7+517. 925

В.А. Савва, проф., д-р физ.-мат.наук; С. Банжак, асп.
(БГТУ, г. Минск)

ДИНАМИКА ЛАЗЕРНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ МОЛЕКУЛ: ДИСКРЕТНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ С НЕОДНОРОДНЫМ ПРОСТРАНСТВОМ ФУРЬЕ

Этот когерентный процесс описывается системой уравнений

$$-i\frac{da_n(t)}{dt} = f_{n+1}e^{-i\varepsilon_{n+1}t}a_{n+1}(t) + f_n e^{+i\varepsilon_n t}a_{n-1}(t); \quad a_n(t=0)=\delta_{n,0}; \quad n=\overline{0,N}; \tag{1}$$

в безразмерных величинах. Пусть излучение взаимодействует с двумя соседними переходами $E_0 \leftrightarrow E_1 \leftrightarrow E_2$ между энергетическими уровнями. Искомые функции $a_n(t)$ – амплитуды вероятности возбуждаемых квантовых систем обладают дискретным пространством Фурье. Для некоторых систем оно может быть неоднородным. Этот случай рассмотрен ниже. Для решения уравнений предлагается метод, использующий средства дискретной математики.

Для рассматриваемых здесь трехуровневых квантовых систем неоднородное спектральное пространство описываем величиной $x=\{0,1,c\}$; $c \neq 2$ и задаваемой на этой сетке дискретной функцией $\sigma\,(x)$, используемой в качестве весовой для построения ортогональных полиномов дискретного аргумента x. При этом можно ввести дополнительные свободные параметры, например,

$$\sigma\,(x;a,k,c)=\{1-a-kc,\ a,\ kc\};\quad \sum_x \sigma\,(x)=1;\quad 0<a<1-kc. \tag{2}$$

Ради упрощения расчетов зафиксируем два параметра, положив $c=3$ (расходящаяся сетка) и $k=1/8$. Получаем

$$\sigma\,(x;a)=\left\{\frac{5}{8}-a,\ a,\ \frac{3}{8}\right\};\quad x=\{0,1,3\};\quad 0<a<\frac{5}{8}. \tag{3}$$

Строим систему ортогональных полиномов и вычисляем квадраты норм дискретных ортогональных полиномов

$$p_0 = 1, \qquad p_1 = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = x - \left(\frac{9}{8} + a \right), \qquad p_2 = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & c_2 \\ c_1 & c_2 & c_3 \\ 1 & x & x^2 \end{vmatrix} = \tag{4}$$

$$= x^2 \frac{1}{64} \ 135 - 16a(5+4a) \ - x \frac{1}{64} \ 405 - 32a(7+2a) \ + \frac{9}{2} a.$$

$$d_0^2 = 1, \quad d_1^2 = \frac{1}{64}[135 - 16a(5+4a)], \quad d_2^2 = d_1^2 \frac{27}{16} a(5 - 8a). \tag{5}$$

Ортонормированные дискретные полиномы, построенные в Фурье пространстве имеют вид

$$\{\hat{p}_n(x)\}_{n=0}^{N=2} = \frac{p_n(x)}{d_n}; \quad n = 0,1,2. \tag{6}$$

Известно, что полиномы удовлетворяют рекуррентным соотношениям. Для нормированных полиномов они имеют вид

$$\bar{f}_{n+1} \hat{p}_{n+1}(x) + \bar{f}_n \hat{p}_{n-1}(x) = [rx + s_n] \hat{p}_n(x); \ n = 0,1,2;$$
$$\bar{f}_0 = 0, \ \bar{f}_1 = 1, \ \bar{f}_3 = 0. \tag{7}$$

Находим коэффициенты этих рекуррентных соотношений

$$r = \frac{1}{d_1}; \qquad \bar{f}_2 = \frac{d_2}{d_1^4} = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{3a \ 5 - 8a}}{d_1^3}; \qquad \bar{f}_1 = 1; \tag{8}$$

$$s_0 = -\frac{(\frac{9}{8} + a)}{d_1}; \quad s_1 = \frac{\frac{1}{8} + a}{d_1} - \frac{18(15 - 8a)}{64 d_1^3}; \quad s_2 = -\frac{3(5 - 8a)(9 + 8a)}{64 d_1^3}. \tag{9}$$

Решение уравнений (1) ищем в виде дискретного Фурье преобразования

$$a_n(t) = e^{i s_n t} \sum_{x=0}^{2} F_n(x)\, e^{irxt}; \tag{10}$$

где $F_n(x)$ Фурье спектры функций $a_n(t)$. Спектры выражаются через построенные полиномы следующим образом

$$F_n(x) = \sigma(x) \hat{p}_0 \hat{p}_n(x); \quad n = 0,1,2; \quad x = 0,1,3; \tag{11}$$

что доказывается подстановкой (10) и (11) в уравнения (1), которые удовлетворяются при следующих условиях

$$f_n = \bar{f}_n \ , \quad \varepsilon_n = s_n - s_{n-1}, \quad n = 1,2 \tag{12}$$

Это взаимно однозначное соответствие между коэффициентами уравнений и коэффициентами рекуррентных соотношений (7), т. е. связи между характеристиками квантовых систем и спектральными свойствами их амплитуд вероятности $a_n(t)$. Построив ранее пространство Фурье, теперь мы узнали, каким квантовым системам оно соответствует. Это однопараметрическое $(a, \mathrm{k} = 1/8, \mathrm{c} = 3)$ семейство систем, куда входят трехуровневые системы с различными дипольными моментами $f_2(a)$ второго перехода. Квантовые системы a-семейства имеют неэквидистантно расположенные энергетические уровни. Это более реалистичные модели молекул и атомов. Аналитическое решение для неэквидистантных возбуждаемых моделей не удавалось ранее получить, используя методы высшей, непрерывной математики (методы дифференциальных уравнений) с использованием известных полиномов непрерывной переменной.

Аналитическое решение уравнений (1) определяется выражениями (10), (11). Приведем сразу экспериментально измеряемую величину $\rho_n(t;a) = a_n(t)a_n^*(t)$ – вероятностное дискретное распределение частиц по энергетическим уровням:

$$\rho_0(t) = 1 - \frac{1}{32}\left\{\begin{matrix} 8a(5-8a)(1-\cos(rt)) + 15(1-\cos(3rt)) \\ \qquad\qquad -3\cdot 8a(\cos(rt) - \cos(3rt)) \end{matrix}\right\},$$

$$\rho_1(t) = \frac{r^2}{32\cdot 64}\left\{\begin{matrix} (25\cdot 81 - 5\cdot 63\cdot 8a - 32(8a)^2)(1-\cos(3rt) \\ \qquad +8a(45+41\cdot 8a)(\cos(rt)-\cos(2rt)) \\ \qquad\qquad -(8a)^2(1-3\cdot 8a)(\cos(2rt)-\cos(3rt)) \\ \qquad\qquad\qquad +(8a)^3(5+8a)(1-\cos(rt)) \end{matrix}\right\}, \quad (16)$$

$$\rho_2(t) = \frac{r^2 8a}{32}\cdot\frac{3(5-8a)}{8}\left\{\begin{matrix} 7 - 6\cos(rt) - 3\cos(2rt) \\ \qquad\qquad + 2\cos(3rt) \end{matrix}\right\}.$$

Предложен и реализован полностью дискретный алгоритм построения аналитических решений дифференциальных уравнений, описывающих когерентное возбуждение многоуровневых квантовых систем (моделей молекул) лазерным излучением – обобщенная полуклассическая задача Раби. Метод прост и физически содержателен.

Метод использует дискретное Фурье преобразование искомых функций, и для построения их Фурье спектров строятся в пространстве Фурье дискретные ортогональные полиномы с простой процедурой введения свободных параметров. Это приводит к решению для семейства квантовых систем с разнообразными свойствами и возбуждаемых в разных условиях. Получены решения для систем с неэквидистантными уровнями как более реалистичных молекулярных моделей.

Алгоритм естественно разделяет квантовые системы на два класса – с однородным и неоднородным пространством Фурье и позволяет строить решение в обоих случаях.

Метод реализован с использованием системы компьютерной алгебры “*Mathematica*”.

УДК 517.977

С.И. Сиротко, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГУИР, г. Минск)

К ЗАДАЧЕ ДВУХУРОВНЕВОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Задачи двухуровневого программирования возникают при моделировании иерархических систем. Каждый уровень иерархии принимает свое решение, преследуя свои цели и использует имеющиеся у него возможности и ресурсы. Задача заключается в том, чтобы найти общее решение, которое приводит всю систему к достижению некоторой глобальной цели.

Пусть $x \in R^n$, $y \in R^m$, функции $G(x,y)$, $f(x,y)$ и $h_i(x,y)$ при $i \in I = \{1,\dots p\}$ непрерывны вместе со своими производными по y. Рассмотрим задачу двухуровневого программирования (ЗДП):

$$G(x,y) \to \min, \quad x \in X \subset R^n, \quad y \in S(x) \;\; Arg\min\{f(x,y) \,|\, y \in F(x)\}$$

где $F(x) = \{y \in R^m \,|\, h_i(x,y) \le 0 \;\; i \in I\}$.

Отметим, что, несмотря на внешнюю простоту постановки, решение ЗДП является весьма трудной задачей. Сформулируем задачу ЗДП в равносильной форме

$$G(x,y) \to \min_{x,y}, \quad x \in X, \quad y \in S(x) = \{y \in F(x) \,|\, f(x,y) \le \varphi(x)\},$$

где $\varphi(x)$ – функция оптимального значения задачи нижнего уровня, то есть $\varphi(x) = \min\{f(x,y) \,|\, y \in F(x)\}$.

Пусть (x^0,y^0) – локальное решение задачи ЗДП. Задача ЗДП называется частично устойчивой (partial calm) в точке (x^0,y^0) [1,2], если существует число $\mu_0 > 0$ такое, что при всех $\mu \ge \mu_0$ точка (x^0,y^0) будет также локальным решением задачи

$$G(x,y) + \mu(f(x,y)) - \varphi(x)) \to \min, \quad x \in X, \quad y \in F(x).$$

Таким образом, частично устойчивая задача ЗДП сводится к одноуровневой задаче с негладкой целевой функцией и может решаться эффективными методами. Условия, гарантирующие частичную устойчивость, представляют значительный интерес [3]. Известно [2], что двухуровневые задачи с линейной по x, y задачей нижнего