

18. Татиколов А.С., Джулибеков Х.С., Красная Ж.А. // Там же. 1993. № 4. С. 718.

19. Tatikolov A.S., Shvedova L.A., Derevyanko N.A. et al. // Chem. Phys. Lett. 1992. Vol. 190, № 3-4. P. 291.

20. Кузьмин В.А. // Успехи науч. фотографии. 1984. Т. 22. С. 90.

Поступила в редакцию 28.10.2002.

Евгений Семенович Воропай – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии.

Михаил Петрович Самцов – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории спектроскопии НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ.

Кирилл Николаевич Каплевский – ассистент кафедры лазерной физики и спектроскопии.

Александр Анатольевич Луговский – аспирант кафедры лазерной физики и спектроскопии. Научный руководитель – Е.С. Воропай.

УДК 517.392

Н.Г. ЯКУТОВИЧ, В.М. АНИЩИК

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ШРЕДИНГЕРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

There method of the numerical solution of the one dimensional reverse Shrodinger task with the use of genetic algorithm was proposed.

В микроэлектронике при переходе к наноразмерным структурам (т. е. когда размеры проводников составляют несколько десятков атомов) энергетический спектр вдоль некоторых направлений становится дискретным. Для получения заданной совокупности энергетических уровней необходимо решить обратную задачу Шредингера. Нами приводится метод численного нахождения некоторого потенциала для заданного набора всех связанных состояний с использованием так называемого генетического алгоритма (ГА). Известно, что обратная задача Шредингера решается неоднозначно в связи с произвольностью выбора модельного потенциала $V(x)$. Поскольку форма совершенно не влияет на принципиальную разрешимость обратной задачи, был выбран потенциал в виде ряда:

$$V(x) = \sum_{k=0}^N a_k \cos\left(\frac{2\pi kx}{L}\right),$$

где N ограничено 30, L – период потенциала, a_k – коэффициенты разложения потенциала.

Процедура решения заключалась в итеративном сопоставлении пробных решений E_i^j прямой задачи Шредингера с некоторым заданным спектром значений энергий E_i^0 , который соответствует искомому потенциалу. Это позволяет получить оценку качества каждого решения, которую можно записать как:

$$\Delta e_j = \frac{\sum_{i=1}^M (E_i^j - E_i^0)^2}{M},$$

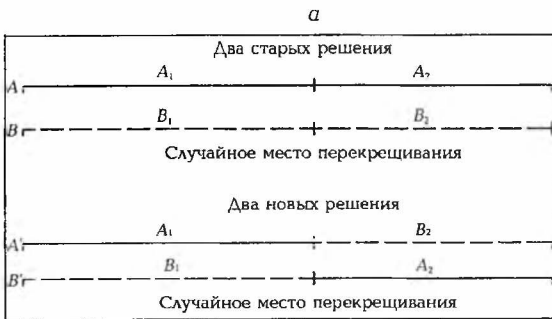
где M – число всех связанных уровней энергии в спектре для искомого потенциала. Пробный потенциал для решения прямой задачи Шредингера, соответствующий спектру E_i^j , записывается следующим образом:

$$V^j(x) = \sum_{k=0}^N a_k^j \cos\left(\frac{2\pi kx}{L}\right) \quad (1)$$

Качество пробного решения тем выше, чем ближе $\Delta\epsilon$ будет к нулю. Это достигается варьированием коэффициентов a_k^j в (1). Задавая ту или иную величину $\Delta\epsilon$, можно тем самым определить точность численного решения обратной задачи. В этом случае подразумевается, что существует взаимно однозначное соответствие между a_i^j и E_i^j . Основная идея использования ГА в данном итеративном процессе заключается в возможности получить новый набор коэффициентов a_k на новой итерации с меньшей величиной $\Delta\epsilon$. Оказывается, что среди новых решений на следующей итерации может получиться решение, лучшее по качеству, а значит, и более точное по сравнению с решениями предыдущей итерации.

1. Метод генерации нового решения с помощью генетического алгоритма на базе старого

Допустим, мы имеем определенный набор коэффициентов a_i^j разложения потенциала $V(x)$ на j -й итерации. Ограничиваясь некоторой точностью задания этих коэффициентов, представим их в виде длинного двоичного числа. Если один коэффициент будет представлен в виде двоичного числа длиной 64 бита с точностью 2^{-64} , то 30 коэффициентов будут занимать 1920 бит при той же точности. Назовем такое двоичное представление одного набора коэффициентов **хромосомой**. С генетической точки зрения это не совсем верное название, однако это лишь условное обозначение, необходимое для удобства описания основных идей генетического алгоритма.



а

Два старых решения

А₁ А₂

В₁ В₂

Случайное место перекрещивания

Два новых решения

А₁ В₂

В₁ А₂

Случайное место перекрещивания

б

А 10111100010101.....101100010.....1000111010010101001011

Место мутации

А' 10111100010101.....10110010.....1000111010010101001011

Рис. 1. Генерация двух новых двоичных чисел A' и B' : а – перекрещивание двоичных чисел A и B в случайном разряде, б – мутация новых дочерних чисел

Опишем последовательность формирования нового решения, происходящую на одной итерации. Для того чтобы его получить, необходимо иметь ряд таких хромосом, которые мы назовем родительскими. Механизм ГА генерации нового решения состоит из двух стадий. Первая заключается в выборе двух произвольных родительских хромосом и в их перекрещивании в произвольной точке (рис. 1 а). Перекрещивание – это формирование двух новых двоичных чисел, одно из которых образовано старшими разрядами первого числа вплоть до некоторого случайного разряда и младшими разрядами второго числа. Другая хромосома формируется из оставшихся старших разрядов второго числа и младших разрядов первого. Две полученные хромосомы принято называть дочерними. Вторая стадия генерации решения заключается в мутации некоторых бит дочерних решений (см. рис. 1 б). Процедура мутации состоит из выбора случайного разряда дочерней хромосомы и последующего изменения данного бита на противоположный. Это необходимо

для формирования локальных отклонений в параметрах потенциала с целью увеличения скорости сходимости итеративного процесса. Обычно вероятность мутаций выбирается малой с тем, чтобы не разрушать потенциально хорошие решения. В наших расчетах вероятность мутаций любого бита составляла 0,03 %. Этот параметр влияет только на скорость сходимости численного решения и не влияет на его точность. После проведения данных стадий генерации новых решений можно получить для K родителей $K(K-1)$ детей. Вообще говоря, количество детей может быть и большим, но в своих расчетах мы ограничивались двумя дочерними хромосомами на две родительские.

После получения нового набора хромосом для каждой из них была проделана оценка качества по описанному критерию и выделена лучшая. Так как мы знаем качество K родительских и качество $K(K-1)$ дочерних хромосом на данной итерации, то для следующей итерации выбраны K новых родительских хромосом из числа предыдущих родителей и детей. В новый набор родительских хромосом, естественно, выбирается лучшее решение на текущей итерации. Далее, часть решений берется с качеством, близким к лучшему, и остальные – случайным образом. Соотношение хороших и случайных решений зависит от конкретной реализации ГА, в нашем случае оно было близко к $K/2$. После того как сформирован массив новых родительских хромосом, итерация завершена, и если качество лучшего решения устраивает, то на этом процесс заканчивается, в противном же случае необходимо повторять процедуру генерации новых решений, пока Δe_i на данной итерации не станет меньше заданной точности.

2. Некоторые примеры решения обратной задачи Шредингера

Процедура решения прямой задачи Шредингера, которая используется для оценки качества хромосомы, была осуществлена нами с помощью программы Гогтаса и др. [1]. Теория метода подробно описана в [2, 3].

Для проверки метода решения обратной задачи Шредингера с помощью ГА был использован некий затравочный потенциал, который, как видно из

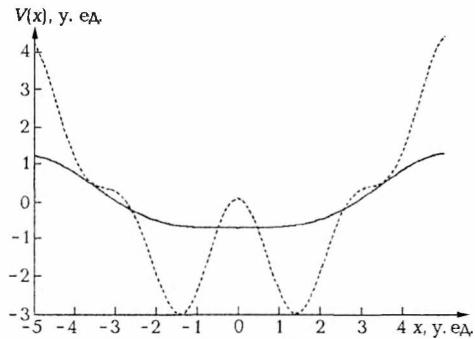


Рис. 2. Затравочный потенциал, использованный для решения обратной задачи Шредингера, и ее точное решение для заданного набора энергий.

Пунктирной линией обозначен затравочный потенциал

Таблица 1

Первые пять коэффициентов a_k разложения пробных потенциалов и точного решения

Номер	Затравочный потенциал	Точное решение	Потенциал решения (ГА)
a_0	0,0000000	0,0000000	0,0000255
a_1	-2,5000000	-1,0000000	-1,0000008
a_2	1,2500000	0,2500000	0,2500174
a_3	0,3000000	0,0000000	-0,0000590
a_4	1,0000000	0,0000000	-0,0000076

Таблица 2

Собственные значения энергии, соответствующие точному решению, и значения энергии, соответствующие численному решению обратной задачи Шредингера с помощью ГА

Номер	Решение	
	точное	численное
E_1	-0,59678894	-0,59678894
E_2	-0,21826978	-0,21826978
E_3	0,23778330	0,23778330
E_4	0,71780601	0,71780602
E_5	1,05466172	1,05466173

рис. 2, существенно отличается от потенциала, являющегося решением для заданного набора энергетических уровней. Параметры разложения обоих потенциалов приведены в табл. 1, здесь же даны их коэффициенты, полученные при решении обратной задачи Шредингера с помощью генетического алгоритма.

Как видно из табл. 2, точность решения составляет более 10^{-7} у. ед. Для расчета использовались пять пробных уровней энергии, число родительских хромосом составляло 17, количество итераций – 569. Как оказалось, количество итераций может зависеть не только от близости стартового пробного потенциала к точному решению, а также от качества генератора случайных чисел. Однако исследование данного вопроса выходит за рамки статьи.

Результаты расчетов для различных пробных потенциалов показали устойчивую сходимость к одному и тому же конечному потенциалу для заданного набора уровней энергии. На основании этого можно сделать вывод о применимости метода генетического алгоритма не только для решения обратной задачи Шредингера, но и для нелинейной минимизации некоторых функционалов.

1. Gogtas F., Balint-Kurti G.G., Marston C.C. // QCPE Program. 1993. № 647.
2. Marston C.C., Balint-Kurti G.G. // J. Chem. Phys. 1989. № 91. P. 3571.
3. Balint-Kurti G.G., Dixon R.N., Marston C.C. // Internat. Rev. Phys. Chem. 1992. № 11. P. 317.

Поступила в редакцию 12.09.2002.

Николай Геннадьевич Якутович – ассистент кафедры физики твердого тела.

Виктор Михайлович Анищик – доктор физико-математических наук, профессор, декан физического факультета.

УДК 537.86; 621.372.823

П.Д. КУХАРЧИК, В.М. СЕРДЮК, И.А. ТИТОВИЦКИЙ

К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ РЕЗОНАТОРНЫХ МОД НА ПОПЕРЕЧНОЙ ЩЕЛИ ПРОЕКЦИОННЫМ МЕТОДОМ

The problem of an electromagnetic field diffraction of a volume coaxial resonator azimuthally dependent mode on an internal transverse ring slot and cylindrical dielectric is considered. For its solution the method of fields decomposition by simple modes of the resonator without a slot is used. The discretization of integral Fredholm equations for field functions on a slot is carried out with the help of the projecting Galerkin method. The application of the system of sine basis functions for this purpose is substantiated which does not yield field singularities on borders of a slot.

Основной трудностью при решении задач дифракции электромагнитного излучения на щели является определение поля на ее поверхности. Для этого приходится привлекать дополнительные физические соображения, определяющие поведение поля непосредственно вблизи краев щели. Считается [1], что здесь оно должно вести себя подобно полю дифракции плоской волны на проводящей полуплоскости (решение Зоммерфельда [2, 3]) и иметь соответствующие сингулярности на краях. Однако возможен другой подход к определению функций поля на щели, не дающий сингулярностей как в промежуточных, так и в окончательных результатах. В данной работе он обосновывается применительно к объемному коаксиальному резонатору с поперечной кольцевой щелью, которая связывает область возбуждения по-