Решение неоднородного уравнения

22.04.95

[дополнения 27.07.95 1.08.95 14.02.97]

$\exists$ надо решить ур-ние

$$(H_0+V+A)\Psi = E\Psi$$

в первом порядке по A. H_0+V – невозмущенный гамильтониан, H_0 – его диагональ.

$\exists\ (H_0+V)\Psi_0 = E_0\Psi_0\ ,\ \Psi = \Psi_0+\Psi_1,$

$$\Rightarrow (H_0+V)\Psi_1 + A\Psi_0 = E_0\Psi_1 + E_1\Psi_0 \Rightarrow$$

$$(E_0-H_0-V)\Psi_1 = A\Psi_0 - E_1\Psi_0 \Rightarrow$$

$$\begin{cases} E_1 = \langle\Psi_0|A|\Psi_0\rangle \\ (E_0-H_0-V)\Psi_1 = A\Psi_0 - \Psi_0\langle\Psi_0|A|\Psi_0\rangle \end{cases}$$

Если $\exists$ правила отбора, по которым $\langle\Psi_0|A|\Psi_0\rangle=0$, то имеем просто

$$(E_0-H_0-V)\Psi_1 = A\Psi_0$$

Это уравнение можно решать итерационно по V:

$$(E_0-H_0)\Psi_1 = A\Psi_0 + V\Psi_1 \Rightarrow$$

$$(*)\quad \boxed{\Psi_1^{(k+1)} = \frac{1}{E_0-H_0}\left(A\Psi_0+V\Psi_1^{(k)}\right)}$$

Если ввести невязку Δ_k:

$$\Delta_k = (E_0 - H_0 - V)\,\psi_1^{(k)} - A\psi_0$$

то для нее получается:

$$\Delta_k = (E_0 - H_0 - V)\,\psi_1^{k} - A\,\psi_0 =$$

$$= (E_0 - H_0 - V)\,\frac{1}{E_0 - H_0}\left(A\psi_0 + V\psi_1^{(k-1)}\right) - A\psi_0 =$$

$$= \cancel{A\psi_0} - V\frac{1}{E_0 - H_0}A\psi_0 + V\psi_1^{(k-1)} - V\frac{1}{E_0 - H_0}V\psi_1^{(k-1)} - \cancel{A\psi_0}$$

$$= V\frac{1}{E_0 - H_0}\left[(E_0 - H_0 - V)\,\psi_1^{(k-1)} - A\psi_0\right] \Rightarrow$$

$$\boxed{\Delta_k = V\,\frac{1}{E_0 - H_0}\,\Delta_{k-1}}$$

Видно, что невязка убывает степенным образом по V

Т.о. решение задачи состоит из 3х частей

1. Решение нулевого приближения

$$H_0\psi_0 = E_0\psi_0$$

2. Построение вектора

$$Y = A\psi_0$$

3. Итерирование уравнения

$$\psi_1^{(k)} = \frac{1}{E_0 - H_0}\left(Y + V\psi_1^{(k-1)}\right)$$

В качестве A можно выбрать либо $E1$ амплитуду, либо PNC амплитуду.

Вычисление $A\Psi_0$

Пусть $\Psi_0 = \sum_i C_i \Phi_i$, Φ_i – детерминанты

$$A\Psi_0 = \sum_k \Big(\sum_i A_{ki} C_i\Big) \Phi_k$$

$A_{ki} \neq 0$, если Φ_i отличается от Φ_k одним состоянием.

$$A_{ki} = \langle n_k j_k m_k | A | n_i j_i m_i \rangle$$

Если $A = H_{WC}$ (weak charge), то согласно 26.03.93

$$(H_{WC})_{ki} = -i\, \frac{G\alpha\, Q_W}{8\pi\sqrt{2}} \int (f_k g_i - g_k f_i)(4\pi n(r))\, r^2 dr$$

$$= -4.12\, i\, Q_W\, R_{WC}^{ki} \;\; (Hz)$$

Если $A = E1_q$, то в L-калибровке будем иметь

$$(r_q)_{ki} = (-1)^{j_k - m_k} \begin{pmatrix} j_k & 1 & j_i \\ -m_k & q & m_i \end{pmatrix} (-1)^{j_i + g - s} \sqrt{(2j_k+1)(2j_i+1)\, g} \begin{Bmatrix} l_k & j_k & s \\ j_i & l_i & 1 \end{Bmatrix} \int (f_k f_i + g_k g_i)\, r \cdot r^2 dr$$

где $g = \frac{l_k + l_i + 1}{2} = l_{max}$

При этом $A\Psi_0$ не будет собственным вектором для J^2

Итерирование уравнения

1). Стартовое приближение.

Можно взять $\psi_1^{(0)} = \frac{1}{E_0 - H_0} A \psi_0$

либо решить систему (с учетом V) в меньшем подпространстве.

2). Для пробной функции $\psi_1^{(k)}$ строится невязка:

$$\Delta^{(k)} = A\psi_0 - (E_0 - H_0 - V)\psi_1^{(k)}$$

Эта операция требует умножения $\psi_1^{(k)}$ на V – наиболее дорогостоящая операция.

3). Следующее приближение строится "дешево":

$$\psi_1^{(k+1)} = \psi_1^{(k)} + \frac{1}{E_0 - H_0} \Delta^{(k)}$$

Это уравнение эквивалентно ур-нию ⊛.

Дополнение I_k 22.04.95

Выяснилось, что процедура, предложенная на стр. 4 и используемая в программе INE, – расходится.

Надо сделать так, чтобы невязка монотонно убывала. Для этого введем два свободных параметра, которые будем находить из условия минимума невязки:

Пусть надо решить ур-ние:

$$(E_0 - H_0 - V)\, X1 = Y1$$

Пусть $\exists$ приближенное решение $X1^k$ и вектор $B1^k = (E_0 - H_0 - V)\, X1^k$

Строим невязку и поправочный вектор

$$D^k = Y1 - B1^k$$

$$C^k = \frac{1}{E_0 - H_0} D^k$$

Будем искать новый вектор $X1^{k+1}$ в виде лин. комб.:

$$X1^{k+1} = \alpha X1^k + \beta C^k$$

и найдем α и β из условия минимума нормы невязки. Т.к. $\alpha = 1$ $\beta = 0$ соответствуют исходному приближению, минимум не может быть больше, и мы имеем монотонность убывания невязки.

Пусть $B2^k = (E_0 - H_0 - V)\, C^k$

Опуская значки "k", получаем систему для α и β:

$$\begin{cases} \langle B1|B1\rangle \alpha + \langle B1|B2\rangle \beta = \langle Y1|B1\rangle \\ \langle B1|B2\rangle \alpha + \langle B2|B2\rangle \beta = \langle Y1|B2\rangle \end{cases}$$

Необходимо хранить следующие вектора:

$X1^k$, $B1^k$, C^k, $B2^k$, $Y1$

Дополнение V 1.08.95

Неоднородное ур-ние в V-калибровке

I $H = H_0 + H_{рис}$

(1) $[H\bar{z}] = [H_0\bar{z}] = -ic\bar{\alpha} \Longrightarrow \langle i|\bar{z}|k\rangle = \frac{\langle i|-ic\bar{\alpha}|k\rangle}{E_i - E_k}$

Нас интересует МЭ $\langle f|\bar{z}|i\rangle$, где

(2) $$\begin{cases} |i\rangle = |i_0\rangle + \frac{|n_0\rangle\langle n_0|H_{рис}|i_0\rangle}{E_{i_0} - E_{n_0}} \\ |f\rangle = |f_0\rangle + \frac{|n_0\rangle\langle n_0|H_{рис}|f_0\rangle}{E_{f_0} - E_{n_0}} \end{cases}$$

I Прямое суммирование:

(3) $\langle f|\bar{z}|i\rangle = \langle f_0|\bar{z}|i_{рис}\rangle + \langle f_{рис}|\bar{z}|i_0\rangle$

$$= \frac{\langle f_0|\bar{z}|n_0\rangle\langle n_0|H_{рис}|i_0\rangle}{E_{i_0} - E_{n_0}} + \frac{\langle f_0|H_{рис}|n_0\rangle\langle n_0|\bar{z}|i_0\rangle}{E_{f_0} - E_{n_0}}$$

заменяем МЭ $\bar{z}$ на МЭ $\bar{\alpha}$:

(4) $$= \frac{\langle f_0|-ic\bar{\alpha}|n_0\rangle\langle n_0|H_{рис}|i_0\rangle - \langle f_0|H_{рис}|n_0\rangle\langle n_0|-ic\bar{\alpha}|i_0\rangle}{(E_{f_0} - E_{n_0})(E_{i_0} - E_{n_0})}$$

II Неод. ур-ние. Сразу пользуемся связью $\bar{z}$ и $\bar{\alpha}$:

(5) $$\langle f|\bar{z}|i\rangle = \frac{\langle f|-ic\bar{\alpha}|i\rangle}{E_f - E_i} = \frac{\langle f|-ic\bar{\alpha}|i\rangle}{E_{f_0} - E_{i_0}}$$

Раскрываем $|i\rangle$ и $|f\rangle$:

(6) $$\langle f|\bar{z}|i\rangle = \frac{\langle f_0|-ic\bar{\alpha}|i_{рис}\rangle}{E_{f_0} - E_{i_0}} + \frac{\langle f_{рис}|-ic\bar{\alpha}|i_0\rangle}{E_{f_0} - E_{i_0}}$$

$$(6a) = \frac{1}{E_{f_0}-E_{i_0}}\left(\frac{\langle f_0|-ic\alpha|n_0\rangle\langle n_0|H_{pnc}|i_0\rangle}{E_{i_0}-E_{n_0}} + \frac{\langle f_0|H_{pnc}|n_0\rangle\langle n_0|-ic\alpha|i_0\rangle}{E_{f_0}-E_{n_0}}\right)$$

Какая связь между этими двумя выражениями?
Приведем (6а) к общему знаменателю:

$$(7)\quad \langle f|\tilde{z}|i\rangle = \frac{1}{E_{f_0}-E_{i_0}}\left(\frac{(E_{f_0}-E_{i_0}+E_{i_0}-E_{n_0})\langle f_0|-ic\alpha|n_0\rangle\langle n_0|H_{pnc}|i_0\rangle - (E_{f_0}-E_{i_0}-E_{f_0}+E_{n_0})\langle . \times . \rangle}{(E_{i_0}-E_{n_0})(E_{f_0}-E_{n_0})}\right)$$

$$(7a) = \text{выражение } (4) + \frac{1}{E_{f_0}-E_{i_0}}\left(\frac{\langle f_0|-ic\alpha|n_0\rangle\langle n_0|H_{pnc}|i_0\rangle}{E_{f_0}-E_{n_0}} - \frac{\langle f_0|H_{pnc}|n_0\rangle\langle n_0|-ic\alpha|i_0\rangle}{E_{n_0}-E_{i_0}}\right)$$

и используя (1) в обратную сторону, получаем:

$$(8) = \text{выражение } (4) + \frac{1}{E_{f_0}-E_{i_0}}\langle f_0|[\tilde{z}\, H_{pnc}]|i_0\rangle$$

Т. о. использование V калибровки в прямом суммировании и в неоднородном уравнении – неэквивалентно (т. к. переход от (7а) к (8) требует полноты).

Использовать (6) для решения неод. ур-ние – легко.
Все, что надо, – это сосчитать два МЭ:

$$\langle f\|z\|i\rangle = \frac{-ic}{E_{f_0}-E_{i_0}}\left(\langle f_0\|\alpha\|i_{pnc}\rangle + (-1)^{J_f-J_i}\langle i_0\|\alpha\|f_{pnc}\rangle\right)$$

На стр. 3 даны явные выражения МЭ операторов $H_{рис}$ и E1. Для единообразия, перепишем их в терминах, которые используются в программах гра и a-eff.

Для произвольного оператора A ранга r имеем:

$$A_{ki} = \langle n_k l_k j_k m_k | A^r_q | n_i l_i j_i m_i \rangle$$
$$= (-1)^{j_k - m_k} \begin{pmatrix} j_k & r & j_i \\ -m_k & q & m_i \end{pmatrix} \eta_A F^A_{l_k j_k, l_i j_i} R^A_{n_k l_k j_k, n_i l_i j_i},$$

где F^A_{ki} – связывает приведенный МЭ с радиальным интегралом $\eta_A R^A_{ki}$, $\eta_A \begin{cases} = 1 & \text{для вещественных операторов} \\ = i & \text{для мнимых операторов} \end{cases}$

Такая запись соответствует факторизации принятой в программах гра и a_eff:

η_A - соответствует параметру ita $\left(\begin{matrix} it_A = 1 \text{ для } \eta = 1 \\ ita = -1 \text{ для } \eta = i \end{matrix} \right)$

r " " ij $(ij = 2r)$

F^A_{ki} " функции Factor$(l_i j_i l_k l_k)$

R^A_{ki} - радиальные интегралы, которые можно взять или из DTM или из гра.

Нам нужно вычислить

$$E1_{рис} = (-1)^{J_2 - M_2} \begin{pmatrix} J_2 & 1 & J_1 \\ -M_2 & Q & M_1 \end{pmatrix}^{-1} \sum_N \frac{\langle J_2 | B | N \rangle \langle N | A | J_1 \rangle}{E_i - E_N}$$

где $E_i = \begin{cases} E_2, & \text{если } B = H_{рис} \\ E_1, & \text{если } A = H_{рис} \end{cases}$

Т.о. результат решения неоднородного уравнения надо умножить на $(-1)^{J_2 - M_2} \begin{pmatrix} J_2 & 1 & J_1 \\ -M_2 & Q & M_1 \end{pmatrix}^{-1}$.