ternational conference on electromagnetics of complex media. –Lisbon 27-29 September 2000. –PP.317-320.

3. Semchenko I V., Kaganovich V E. Optical activity and selective reflection of light in stratified periodic structure, In Optics of Crystals, V V.Shepelevich, N.N.Egorov, Editors, Proceedings of SPIE Vol. 4358, p. 303-308 (2001).
4. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет: Пер. с англ. // Под. ред чл.- корр. АН СССР А. В. Ржанова и д-ра физ - наук К. К. Свиташева. - М.: Мир, 1981. – 583 с.

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ВАРИАЦИОННЫХ ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

А.В. Сосновский, А.А. Ючко
Научный руководитель – В.В. Андреев
Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины

Вариационный метод является наиболее используемым для решения уравнений квантовой механики, а также уравнений квантово-полевых моделей связанных состояний (см. например, [1]). В этом подходе решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Phi = E\Phi \tag{1}$$

сводится к решению задачи на собственные значения:

$$\sum_{j=1}^{N} \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle a_j = E a_i , \tag{2}$$

где функция Φ представлена в виде ряда $\Phi = \sum_{i=1}^{N} a_i \psi_i$,

а оператор Гамильтона имеет вид: $\hat{H} = \sqrt{k^2 + m^2} + V(r)$.

При решении уравнения (2) необходимо рассчитывать интегралы вида

$$\langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle = \langle \psi_i(r) | V(r) | \psi_j(r) \rangle + \langle \tilde{\psi}_i(k) | \sqrt{m^2 + k^2} \, | \tilde{\psi}_j(k) \rangle \tag{3}$$

В данной работе для расчета интегралов в аналитическом виде предлагается использовать программу в системе Mathematica с элементами динамического программирования. В дополнение предлагается вычислять интегралы с использованием рекуррентных соотношений для функций ψ_i. Такой подход позволяет получить выражения для решения уравнения (2) для любого значения *N*. При этом вычисления интегралов значительно ускоряются за счет динамического программирования рекуррентных соотношений.

В качестве примера рассмотрены интегралы $\int_0^\infty \psi_{nl}(r) V(r) \psi_{n'l}(r) r^2 dr$, где $\psi_{nl}(r)$ - осцилляторная волновая функция в координатном представлении [1], а потенциал $V(r) = \alpha r^\mu$, $\mu \ge -1$.

В данном примере получено ускорение вычислений приблизительно в 100 раз для *N*=2-30.

Рекуррентные соотношения для волновой функции

Используя стандартные рекуррентные соотношения для полиномов Лагерра и Якоби [2]

$$L_{n+1}^{\alpha}(x) = \frac{1}{n+1}\left[(2n + \alpha + 1 - x)L_n^{\alpha}(x) - (n + \alpha)L_{n-1}^{\alpha}(x)\right], \tag{4}$$

$$P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x)=\frac{1}{2}(2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta))\times$$
$$\times\left[\left((2n+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2)+x\frac{\Gamma(2n+\alpha+\beta+3)}{\Gamma(2n+\alpha+\beta)}\right)P_n^{(\alpha,\beta)}(x)-2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x)\right] \tag{5}$$

мы можем получить рекуррентные соотношения для волновой функции в координатном и импульсном представлениях. Для псевдокулоновской волновой функции имеем

$$R_{nl}(r)=\frac{N_{nl}}{n}\left[\frac{(2n+2l+1-2\beta r)}{N_{n-1,l}}R_{n-1,l}(r)-\frac{(n+2l+1)}{N_{n-2,l}}R_{n-2,l}(r)\right], \tag{6}$$

$$\widetilde{R}_{nl}(k)=\frac{\widetilde{N}_{nl}}{4n(n+l)(n+2l-1)}\left[\left(2(l+1)(2n+2l+1)+\left(\frac{k^2-\beta^2}{k^2+\beta^2}\right)\frac{\Gamma(2n+2l+3)}{\Gamma(2n+2l)}\right)\frac{\widetilde{R}_{n-1,l}(k)}{\widetilde{N}_{n-1,l}}-\right.$$
$$\left.-(n+l+1)(2n+2l-1)(2n+2l+1)\frac{\widetilde{R}_{n-2,l}(k)}{\widetilde{N}_{n-2,l}}\right] \tag{7}$$

и для осцилляторной волновой функции имеем:

$$R_{nl}(r)=\frac{N_{nl}}{n}\left[\frac{2n+l-1/2-(\beta r)^2}{N_{n-1,l}}R_{n-1,l}(r)-\frac{n+l-1/2}{N_{n-2,l}}R_{n-2,l}(r)\right], \tag{8}$$

$$\widetilde{R}_{nl}(k)=\frac{\widetilde{N}_{nl}}{n}\left[\frac{2n+l-1/2-(k/\beta)^2}{\widetilde{N}_{n-1,l}}\widetilde{R}_{n-1,l}(k)-\frac{n+l-1/2}{\widetilde{N}_{n-2,l}}\widetilde{R}_{n-2,l}(k)\right] \tag{9}$$

При помощи соотношений (6)-(9) мы можем получить рекуррентные соотношения для интеграла

$$I_{n,n',\mu}=\int_0^\infty R_{nl}(r)V(r)R_{n'l}(r)r^2dr \tag{10}$$

В случае псевдокулоновской волновой функции с потенциалом $V(r)=\alpha r^{\mu}$ мы имеем рекуррентное соотношение:

$$I_{n,n',\mu}=A_{nl}A_{n'l}\left[B_{nl}B_{n'l}I_{n-1,n'-1,\mu}-B_{nl}C_{n'l}I_{n-1,n'-1,\mu+1}-B_{nl}D_{n'l}I_{n-1,n'-2,\mu}-C_{nl}B_{n'l}I_{n-1,n'-1,\mu+1}+C_{nl}C_{n'l}I_{n-1,n'-1,\mu+2}+\right.$$
$$\left.+C_{nl}D_{n'l}I_{n-1,n'-2,\mu+1}-D_{nl}B_{n'l}I_{n-2,n'-1,\mu}+D_{nl}C_{n'l}I_{n-2,n'-1,\mu+1}+D_{nl}D_{n'l}I_{n-2,n'-2,\mu}\right] \tag{11}$$

где

$$\begin{cases} A_{nl}=\dfrac{N_{nl}}{n}, \\ B_{nl}=\dfrac{2n+2l+1}{N_{n-1,l}}, \\ C_{nl}=\dfrac{2\beta}{N_{n-1,l}}, \\ D_{nl}=\dfrac{n+2l+1}{N_{n-2,l}} \end{cases} \tag{12}$$

Полученные рекуррентные соотношения позволяют получать значения собственных значений для любого значения n. Мы для вычисления интегралов использовали систему MATHEMATICA. Также для ускорения расчетов мы использовали динамическое программирование.

Пример применения динамического программирования в среде Mathematica 4.1

Вычисление полиномов Лагерра с помощью рекуррентных соотношений.

$$Lag[n\_,\alpha\_,x\_]:=\frac{1}{n}*((2*(n-1)-\alpha+1-x)*Lag[n-1,\alpha,x]-(n-1+\alpha)*Lag[n-2,\alpha,x]);$$

$$Lag[0,\alpha,x]:=LaguerreL[0,\alpha,x];\quad Lag[1,\alpha,x]:=LaguerreL[1,\alpha,x];$$

$$Lag[2,\alpha,x]:=LaguerreL[2,\alpha,x];$$

$$Lagdyn[n\_,\alpha\_,x\_]:=Lagdyn[n,\alpha,x]=$$

$$=\frac{1}{n}*((2*(n-1)+\alpha+1-x)*Lagdyn[n-1,\alpha,x]-(n-1+\alpha)*Lagdyn[n-2,\alpha,x]);$$

$$Lagdyn[0,\alpha,x]:=LaguerreL[0,\alpha,x];\quad Lagdyn[1,\alpha,x]:=LaguerreL[1,\alpha,x];$$

$$Lagdyn[2,\alpha,x]:=LaguerreL[2,\alpha,x];\quad n:=25;$$

$$\{Lag[n,\alpha,x];//Timing, Lagdyn[n,\alpha,x];//Timing\}$$

$$\{7.982Second, Null\},\{0.39Second, Null\}$$

Из этого примера видно, что применение динамического программирования существенно экономит время расчетов.

Литература.

1. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Наука, 1973.
2. M. van Iersel, C.F.M. van der Burgh, and D.L.G. Bakker Techniques for solving bound state problems. Preprint hep-ph/0010243.

СНИЖЕНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТРЕНИЯ В ТУРБУЛЕНТНОМ ПОТОКЕ РАСТВОРАМИ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛИМЕРОВ

А.В. Бородин

Научный руководитель – В.Г.Родненков

Институт механики металополимерных систем им. В.А.Белого НАНБ

Изложены результаты исследования эффективности снижения гидродинамического трения растворами синтетических каучуков, использованных в качестве антитурбулентных присадок к летнему дизельному топливу. Показана зависимость антитурбулентной эффективности данных растворов от концентрации полимеров в исследуемой среде. Установлено явление деструкции полимерных добавок в турбулентном потоке. Предложены параметры для оценки возможности использования полимерных материалов в качестве антитурбулентных присадок.

Введение

Применение антитурбулентных добавок в трубопроводном транспорте дает возможность значительно (порядка 50% и выше) повысить производительность трубопроводов без привлечения больших объемов капиталовложений и дополнительных материало- и энергозатрат.

В связи с этим исследования, направленные на разработку недорогих и, вместе с тем, высокоэффективных специальных добавок к нефтепродуктам представляют значительный интерес.

Цели и задачи исследований

Целью исследований была оценка в лабораторных условиях способности высокомолекулярных эластомеров различных классов снижать гидродинамическое трение в турбулентном потоке.

Методика исследований и материалы.

Исследования проводились на специально разработанной установке — турбореометре, позволяющем измерять время протекания через трубку определенного диаметра известного объема исследуемой жидкости как с антитурбулентными добавками, так и без них.

Коэффициент снижения гидродинамического сопротивления или антитурбулентная эффективность добавки для таких установок рассчитываются по формуле

$$\psi=[1-(t_2/t_1)^2]*100\ \%, \tag{1}$$