10. Попов А.А., Попова Л.Е. Справочник термиста. Изотермические и термокинетические диаграммы распада переохлажденного аустенита. М.: Изд-во машиностроительной литературы, 1961. 430 с.

Елена Ивановна ЛОБОДЕНКО —
доцент кафедры строительной механики
Тюменского государственного архитектурно-строительного университета,
кандидат физико-математических наук
lobodenko_lena@mail.ru

УДК 539.194

КВАТЕРНИОННАЯ СТРУКТУРА ОПЕРАТОРОВ, ОПИСЫВАЮЩИХ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

THE QUATERNION'S STRUCTURE OF THE OPERATORS WHICH DESCRIBE A VIBRATIONAL-ROTATIONAL MOLECULAR STATE

АННОТАЦИЯ. Установлено, что безразмерные операторы нормальных координат, соответствующих им импульсов и полного углового момента, входящие в эффективные колебательно-вращательные гамильтонианы аксиальных молекул принадлежат множеству кватернионов.

SUMMARY. The article states that the dimensionless normal coordinates operators, corresponding with moments and total angular momentum, included into the effective vibrational-rotational Hamiltonians of axial molecules, exhibit characteristics of quaternion.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Кватернионы, колебательные и вращательные операторы.

KEY WORDS. Quaternion, vibration and rotation operators.

В теоретической молекулярной спектроскопии в основном используют методы теории возмущений, т.к. точные решения уравнения Шредингера известны лишь для небольшого числа молекул. Исключительно высокая точность регистрации экспериментальных спектров предъявляет очень высокие требования к точности расчетов. Специфической особенностью данной области является использование при расчетах большого количества квантовых чисел, а также существование различных типов динамических переменных, «отвечающих за свои» диапазоны в энергетическом спектре. В каждом диапазоне применяют разные техники вычислений. Поэтому существует множество формулировок теории возмущений для стационарного уравнения Шредингера, кроме того, известны несколько форм представлений: матричные, операторные, адиабатические.

Чаще всего в теории колебательно-вращательных спектров молекул используется техника контактных преобразований [1]. В этом случае поправки к преобразованному гамильтониану ищутся в виде полиномов по операторам динамических переменных: нормальных координат, импульсов и компонент полного углового момента [2-5]. Если эффективные гамильтонианы не содержат некорректных приближений, то они задают математические модели, которыми пользуются и при обработке экспериментальных спектров, и при решении обратных спектроскопических задач. Нахождение таких моделей далеко не тривиальная процедура, т.к. необходимо учитывать высокие порядки теории возмущений, вырождения, резонансы, эффекты нежесткости, изотопозамещений и т.д. Матричные элементы вычисляются от не коммутирующих между собой операторов. К тому же может проявиться неоднозначность в результатах, т.к. различные методы возмущений, которые для изолированного невырожденного уровня совпадают во всех приближениях, дают различные выражения для эффективных гамильтонианов [6].

Во всех вышеуказанных работах операторы нормальных координат и импульсов полагались комплексными величинами, а операторы компонент полного углового момента — проекциями аксиальных векторов. Выполнение различных необходимых математических операций с такими операторами было довольно затруднительно и громоздко. Ниже показано, что данные операторы принадлежат множеству кватернионов, т.к. удовлетворяют всем необходимым свойствам этого множества. Использование математики кватернионов упрощает решение спектроскопической задачи по нахождению высоких поправок в эффективные гамильтонианы.

Основные свойства кватернионов и их алгебра

Кватернионом называется гиперкомплексное число, имеющее четыре мнимых единицы: 1, $\overline{i}$, $\overline{j}$, $\overline{k}$. Исторически сложившееся обозначение кватерниона — это разделение его на скалярную часть s и векторную $\mathbf{v} = x\overline{i} + y\overline{j} + z\overline{k}$, в этом случае его представляют как $q = s + \mathbf{v}$ [7–8]. Компоненты при мнимых единицах принадлежат множеству действительных чисел, а базисные элементы должны удовлетворять следующим свойствам:

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1,\ i \cdot j = -j \cdot i = k,$$
$$j \cdot k = -k \cdot j = i,\ k \cdot i = -i \cdot k = j. \tag{1}$$

Алгебру кватернионов H_R можно задать, используя полностью антисимметричный символ Леви-Чивита: $\varepsilon_{ijk} = \pm 1$, если $i \neq j$, $j \neq k$, $k \neq i$, в противном случае он равен нулю, здесь индексы i, j, k пробегают значения $1, 2, 3$. Четное число перестановок индексов i, j, k, получаемое из последовательности $1, 2, 3$, соответствует знаку плюс, а получаемое нечетным числом перестановок — знак минус. В этом случае соотношения между четырьмя базисными элементами e_0, e_1, e_2, e_3 удовлетворяют соотношениям:

$$\mathrm{e}_0\mathrm{e}_j = \mathrm{e}_j\mathrm{e}_0 = \mathrm{e}_j,\quad \mathrm{e}_0^2 = \mathrm{e}_0,\quad \mathrm{e}_i\mathrm{e}_j = \varepsilon_{ijk}\mathrm{e}_j - \delta_{ij}\mathrm{e}_0, \tag{2}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера: $\delta_{ij} = 1$ если $i = j$ и $\delta_{ij} = 0$ если $i \neq j$.

И тогда произвольный кватернион q определяется как линейная комбинация базисных элементов, а q_0, q_1, q_2, q_3 − вещественные числа:

$$q = q_0\mathrm{e}_0 + q_1\mathrm{e}_1 + q_2\mathrm{e}_2 + q_3\mathrm{e}_3. \tag{3}$$

В алгебре кватернионов определено *сложение*, *умножение* и *деление* двух кватернионов, *кватернионное сопряжение*, *норма* и *обратный кватернион*. Суммирование осуществляется путем сложения всех его компонент. Умножение производится при помощи обычных распределительных законов с учетом соотношений между базисными элементами, см. например (1) или (2), причем операция является некоммутативной, то есть в общем случае $qq' \neq q'q$. Кватернионное сопряжение — это операция, которая кватерниону $q = q_0 + \mathrm{q}$ ставит в соответствие кватернион $\overline{q} = q_0 - \mathrm{q}$. Произведение сопряженных кватернионов $q\,\overline{q}$ есть число. Это означает, что в линейном пространстве алгебры кватернионов может быть определена норма (модуль кватерниона) этого пространства

$$N(q) = \sqrt{q\,\overline{q}} = \sqrt{q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}\,. \tag{4}$$

Таким образом, квадрат модуля кватерниона равен сумме квадратов его компонент: $|q|^2 = q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$. Данное свойство аналогично такому же свойству для векторов и комплексных чисел. Однако существенное отличие кватернионов от векторов подчеркивает следующее свойство. Операция деления для кватернионов определена подобно соответствующей операции для комплексных чисел, то есть как операция, обратная операции умножения. Если $q' = \dfrac{q''}{q}$, то q' является решением уравнения $q' \cdot q = q''$. Решить это уравнение можно, помножив левую и правую часть на $\overline{q}$, и разделив обе части на квадрат модуля

$$q' = \frac{q''}{q} = \frac{q''\overline{q}}{q\,\overline{q}} = \frac{q''\overline{q}}{|q|^2}\,. \tag{5}$$

Так как модуль определен для любого кватерниона, делить можно на любой кватернион. При определении деления используется умножение, а кватернионы некоммутативны по умножению, поэтому делитель для кватернионов может быть как правым, так и левым. И в общем случае может быть два кватерниона, являющихся обратными заданному кватерниону. Но по одной из теорем высшей алгебры следует, если некая алгебра ассоциативна, то левый и правый делитель для числа этой алгебры совпадают. Поэтому для кватернионов левый и правый делители совпадают.

Обратный кватернион определен для каждого ненулевого кватерниона. *Нулевым* считается кватернион, у которого все его компоненты равны нулю: $q = 0$, если $q_0 = q_1 = q_2 = q_3 = 0$. Обратным по отношению к кватерниону q называется кватернион q^{-1}, обладающий свойством $q\,q^{-1} = q^{-1}q = 1$. Его нахождение подобно определению обратного к комплексному числу:

$$q^{-1} = \frac{\overline{q}}{|q|^2}\,. \tag{6}$$

Алгебру кватернионов можно рассматривать и как удвоение алгебры комплексных чисел, т.к. из кватернионов, у которых две из трех векторных компонент равны нулю, получают алгебру комплексных чисел. Свойства алгебр кватернионов и комплексных чисел совпадают за исключением свойства коммутативности. Таким образом, подмножествами кватернионов являются множества: R – вещественных чисел $(s, 0, 0, 0)$, C – комплексных чисел $(s, x, 0, 0)$ и V – векторов трехмерного пространства $(x, y, z, 0)$ — обычные и $(0, x, y, z)$ — аксиальные.

Нормальные координаты, импульсы и полный угловой момент

Обычно для описания колебательно-вращательных состояний молекул в спектроскопии используют гамильтонианы, записанные либо в $p{-}q$-представлении, либо в представлении вторичного квантования. Представление вторичного квантования упрощало решение спектроскопической задачи, как в случае невзаимодействующих гармонических колебательных состояний, так и при учете их ангармоничности, а также нежесткости, центробежного и кориолисова взаимодействий. Наиболее отчетливо эти преимущества проявляются при исследовании случайных резонансов, ввиду того, что операторы рождения a^+ и уничтожения a колебательных квантов являются собственными функциями для супероператоров Примаса $D(\ldots)$ и $\frac{1}{D}(\ldots)$, с помощью которых находятся поправки в гамильтониан молекулы и генераторы унитарных преобразований для устранения неоднозначности решения спектроскопической задачи [2, 3, 9]. Кроме того, действие операторов a_i^+, a_i на волновую функцию молекулы в представлении чисел заполнения $|v_1, v_2, \ldots, v_i, \ldots\rangle$ соответствует процессу рождения или уничтожения колебательных квантов i-го типа. Например, $\Psi_i = \frac{(a_i^+)^n}{\sqrt{n!}}|0, 0, \ldots, 0, \ldots\rangle$ — состояние с n колебаниями ω_i.

Слагаемые, входящие в гамильтониан молекулы, представляют собой произведения колебательных, колебательно-вращательных или вращательных операторов. Ранее полагали, что операторы невырожденных колебаний принадлежат множеству R, вырожденных — множеству C, а операторы полного углового момента — V. Понятно, что любые математические преобразования приводили к сложностям, которые преодолевались по-разному в каждом конкретном случае. Считая операторы угловых моментов $\mathrm{J} = (0, k_x J_x, k_y J_y, k_z J_z)$, безразмерные колебательные операторы невырожденных и вырожденных нормальных координат, а также их импульсов:

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_n^+, i0, ja_n, k0\right), \qquad q_t = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_{t_a}^+, ia_{t_b}^+, ja_{t_a}, ka_{t_b}\right),$$

$$p_n = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(a_n, i0, -ja_n^+, k0\right) \text{ и } p_t = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(a_{t_a}, ia_{t_b}, -ja_{t_a}^+, -ka_{t_b}^+\right), \qquad (7)$$

соответственно принадлежащими множеству кватернионов, можно воспользоваться их алгеброй и избежать многих математических трудностей. Мнимая единица перед операторами импульса стоит только для удобства восприятия и их явной связи с формулами (7) из [9]. Таким образом, определенные колебательные и вращательные операторы удовлетворяют свойствам кватернионов.

Произведению кватернионов можно поставить в соответствие линейное преобразование 4-векторов: $q'' = A\,q'$, где

$$q'' = \begin{pmatrix} q_1'' \\ q_2'' \\ q_3'' \\ q_0'' \end{pmatrix}, \; q' = \begin{pmatrix} q_1' \\ q_2' \\ q_3' \\ q_0' \end{pmatrix}, \; A = \begin{pmatrix} q_0 & -q_3 & q_2 & q_1 \\ q_3 & q_0 & -q_1 & q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_0 & q_3 \\ -q_1 & -q_2 & -q_3 & q_0 \end{pmatrix}.$$

Матрицу A можно рассматривать как представление кватерниона q, если роль кватернионных единиц e_0, e_1, e_2, e_3 будут играть следующие 4×4-матрицы:

$$e_0=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad e_1=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&-1&0\\0&1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix},$$

$$e_2=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\-1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix},\quad e_3=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&-1&0\end{pmatrix},\tag{8}$$

удовлетворяющие соотношениям (2) при обычных правилах матричного умножения.

В нашем случае для колебательных операторов вырожденных нормальных координат удобнее использовать связь между кватернионами и матрицами 2×2 Для этого представим кватернионы q'' и q', входящие в выражение $q''=q\,q'$, в виде симплектического разложения $q''=z_1''e_0+z_2''e_2$, $q'=z_1'e_0+z_2'e_2$, считая их комплексными 2-вектор-строками. Тогда произведение кватернионов можно записать как

$$\left(z_1'',z_2''\right)=\left(z_1',z_2'\right)\begin{pmatrix}z_1&z_2\\-z_2^*&z_1^*\end{pmatrix}.\tag{9}$$

Произведя замену $e_0\to1$, $e_1\to i$, и учитывая произвол в определении базиса комплексных чисел, получим

$$\begin{pmatrix}z_1&z_2\\-z_2^*&z_1^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}q_0+iq_1&q_2+iq_3\\-q_2+iq_3&q_0-iq_1\end{pmatrix}=$$

$$=q_0\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+q_1\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix}+q_2\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}+q_3\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}.\tag{10}$$

Здесь матрицы 2×2 реализуют представление алгебры кватернионов

$$e_0=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\ e_1=\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix},\ e_2=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\ e_3=\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}.\tag{11}$$

Эти матрицы с точностью до умножения на $-i$ и перестановки индексов 1 и 3 совпадают с матрицами Паули [10]

$$\sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\ \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\ \sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}.\tag{12}$$

Матрицы Паули обладают коммутационными свойствами:

$$\left[\sigma_k,\sigma_\ell\right]_-=\sigma_k\,\sigma_\ell-\sigma_\ell\,\sigma_k=2i\varepsilon_{k\ell p}\sigma_p,$$

$$\left[\sigma_k,\sigma_\ell\right]_+=\sigma_k\,\sigma_\ell+\sigma_\ell\,\sigma_k=2\delta_{k\ell},\tag{13}$$

(здесь $\varepsilon_{k\ell p}$ — антисимметричный символ Леви-Чивита, $\delta_{k\ell}$ — симметричный символ Кронекера, а индексы k, ℓ, p пробегают значения $1, 2, 3$) и ортогональны в том смысле, что

$$Sp\left(\sigma_\mu \sigma_\nu\right) = 2\,\delta_{\mu\nu}\,. \qquad (14)$$

В данном выражении индексы $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$. Символом Sp обозначают операцию нахождения суммы диагональных членов матрицы и называют следом матрицы или шпуром. Но, несмотря на соответствие между алгебрами матриц Паули и кватернионов: $e_0 \to \sigma_0 = 1$, $e_1 \to -i\sigma_1$, $e_2 \to -i\sigma_2$, $e_3 \to -i\sigma_3$, между ними есть существенное различие, связанное с тем, что кватернионы — это математический объект, определенный над вещественными числами, то есть коэффициенты разложения произвольного кватерниона по набору базисных элементов должны быть вещественны. Кроме того, для кватернионов определена операция кватернионного сопряжения, на языке матриц Паули она соответствует операции матричного транспонирования, но операция комплексного сопряжения для кватернионов не имеет аналога.

Пользуясь матричным представлением, удобно колебательные операторы вырожденных нормальных колебаний, соответствующих им импульсов и операторы углового момента записать в явном виде через лестничные операторы рождения $A^+_\pm = a^+_{t_a} \pm i\, a^+_{t_b}$, уничтожения $A^-_\pm = a_{t_a} \pm i\, a_{t_b}$ и сферических проекций углового момента J_z и $J_\pm = J_x \mp i\, J_y$, используемые в спектроскопии:

$$q_t = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} A^+_+ & A^-_+ \\ -A^-_- & A^+_- \end{pmatrix}, \quad p_t = \frac{-i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} A^-_+ & -A^+_+ \\ A^+_- & A^-_- \end{pmatrix} \text{ и}$$

$$\mathrm{J} = \begin{pmatrix} k_z J_z & k_x J_+ \\ k_x J_- & -k_z J_z \end{pmatrix}. \qquad (15)$$

Применение обычных правил перемножения матриц позволяет получить известные гамильтонианы аксиальных молекул более быстро и просто, особенно с использованием программ аналитических расчетов типа Maple, Mathematic и др.

Выводы

Такой подход позволяет более компактно записывать эффективные гамильтонианы молекул, учитывая высокие порядки теории возмущений — проще находить генераторы унитарных преобразований, устранять неоднозначность в определении спектроскопических постоянных, а также устанавливать взаимосвязи между молекулярными константами и спектроскопическими постоянными высоких порядков теории возмущения. Таким образом, упрощается решение спектроскопической задачи.

Хочется отметить, что с середины прошлого века кватернионы используют для описания вращательных движений абсолютно твердых тел и при создании компьютерных игр. В настоящее время ими пользуются при описании явлений релятивистской физики, гравитационной энергетики, вихревых движений, электромагнитных взаимодействий, тайн космоса и во многих других случаях. А при описании частиц, обладающих спином, в квантовой механике используют математическую конструкцию, называемую комплексным кватернионом, или бикватернионом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макушкин Ю.С., Тютерев Вл.Г. Методы возмущений и эффективные гамильтонианы в молекулярной спектроскопии. Новосибирск: Наука, 1984. 240 с.
2. Тютерев Вл.Г. Контактные преобразования и динамические переменные // Молекулярная спектроскопия высокого и сверхвысокого разрешения. Новосибирск: Наука, 1976. С. 93-115.
3. Жилинский Б.И., Перевалов В.И., Тютерев Вл.Г. Метод неприводимых тензорных операторов в теории спектров молекул. Новосибирск: Наука, 1987. 231 с.
4. Лободенко Е.И. и др. Резонансы Кориолиса в молекулах симметрии C_{3V} // Оптика и спектроскопия. 1987. Т. 62. Вып. 1. С. 54-58.
5. Lobodenko, E.I. at all. Reduced Effective Hamiltonian for Coriolis-Interecting ν_n and ν_t Fundamentals of C_{3V} Molecules // J. Mol. Spectrosc. 1987. V. 126. N 1. P. 159-170.
6. Watson, J.K.G. Determination of centrifugal distortion coefficients of asymmetric — top molecules // J. Chem. Phys. — 1967. V. 46. № 5. P. 1935-1949; Higher-degree centrifugal distortion of tetrahedral molecules // J. Mol. Spectosc. 1975. V. 55. № 3. P. 498-499.
7. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. М.: Наука, 1975. 302 с.
8. Арнольд В.И. Геометрия комплексных чисел, кватернионов и спинов. М.: МЦНМО, 2009. 40 с.
9. Макушкин Ю.С., Тютерев Вл.Г. Колебательно-вращательные взаимодействия в молекулах типа асимметричного волчка // Молекулярная спектроскопия высокого и сверхвысокого разрешения. Новосибирск: Наука, 1976. С. 66-92.
10. Березин А.В., Курочкин А.В., Толкачев Е.А. Кватернионы в релятивистской физике. М.: УРСС, 2003. 200 с.

Александр Григорьевич ИВАШКО —
зав. кафедрой информационных систем
Института математики и компьютерных наук
Тюменского государственного университета,
доктор технических наук, профессор

Александр Владимирович КУГАЕВСКИХ —
гл. специалист отдела автоматизации
филиала ОАО АКБ «ЮГРА» (г. Тюмень)
a-kugaevskikh@yandex.ru

УДК 004.93'14

ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ «НЕОКОГНИТРОН» ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ДРЕВНЕЕГИПЕТСКИХ ИЕРОГЛИФОВ

POSSIBILITY OF NEOCOGNITRON APPLICATION FOR RECOGNITION OF ANCIENT EGYPTIAN HIEROGLYPHS

АННОТАЦИЯ. В статье рассмотрена возможность применения аппарата искусственных нейронных сетей на примере неокогнитрона для задачи распознавания древнеегипетских иероглифов.

SUMMARY. The given article considers the possibility of application of a means of artificial neural networks on the basis of neocognitron used for recognition of ancient Egyptian hieroglyphs.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Искусственные нейронные сети, неокогнитрон, распознавание символов, распознавание образов.

KEY WORDS. Artificial neural networks, neocognitron, character recognition, a pattern recognition.