

УДК 519.7

КПXXXXXX

№ держреєстрації 0111U005226

Инв. №

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ

ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
(ОДЕКУ)

65016, м. Одеса – 16, вул. Львівська, 15, тел. (0482) 32 67 39

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор Одеського державного
екологічного університету, д.т.н., проф.

_____/Ю.С.Тучковенко/

2015.12.01

ЗВІТ

ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

РОЗВИТОК ТА ЗАСТОСУВАННЯ КІБЕРНЕТИЧНИХ МЕТОДІВ

ДОСЛІДЖЕННЯ ДИНАМІКИ ІЄРАРХІЧНИХ ХАОТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ У

КВАНТОВИХ, ІНФОРМАЦІЙНИХ ТА ГЕОФІЗИЧНИХ СИСТЕМАХ

(заключний)

Керівник НДР

зав. кафедри вищої та прикладної
математики, д-р фіз.-мат. наук, проф.

/ О.В.Глушков /

2015

Рукопис закінчено «01» 12. 2015 р.

Звіт затверджено на засіданні науково-технічної ради ОДЕКУ від _____ р.,

протокол № _____

СПИСОК АВТОРІВ

| | |
|--|--------------------------------------|
| Керівник, зав. каф. вищої та прикладної математики, д-р фіз.-мат. наук, професор | О.В. Глушков (р.1-4, висновки) |
| Завідувач кафедри інформаційних технологій, д-р. фіз.-мат. наук, професор | Г.П.Препелиця (р.1) |
| Завідувач кафедри іноземних мов, канд. філ. наук, доцент | І.Ю.Пьянова (п.р.1.2) |
| Професор кафедри вищої та прикладної математики, д-р фіз.-мат. наук, професор | О.Ю.Хецеліус (р.2, висновки) |
| Професор кафедри вищої та прикладної математики, д-р фіз.-мат. наук, професор | А.А.Свинаренко (р.3, висновки) |
| Професор кафедри інформаційних технологій, д-р хім. наук, професор | Ю.О. Кругляк (р.1) |
| Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент | Ю.Г.Чернякова (р.4, висновки) |
| Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент | П.Г.Башкар'юв (п.р.4.2) |
| Доцент кафедри вищої та прикладної математики, канд. фіз.-мат. наук, доцент | Г.В.Ігнатенко (п.р.3.2) |
| Доцент кафедри природокористування, канд.геогр.наук | Ю.Я. Бунякова (п.р.4.3, висновки) |
| Мол.наук.співр. НДЧ, кафедра вищої та прикладної математики, канд.геогр.наук | Г.В. Романова (п.р.4.4) |
| Старший викладач кафедри вищої та прикладної математики | В.В.Буяджи (р.3) |
| Викладач кафедри військової підготовки | В.Ф.Мансарлійський (п.р.2.2) |
| Нормоконтролер | С. Малацковська |

РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 100с., 14 мал., 5 табл., 211 джерел.

Об'єкт дослідження – квантові, інформаційні, геофізичні системи.

Мета роботи – розвиток, удосконалення та застосування квантово-динамічних і хаос-кібернетичних методів до дослідження динаміки ієрархічних хаотичних процесів у квантових, інформаційних та інших (напр., геофізичних) системах, зокрема, аналізу, моделювання та можливого прогнозування часової динаміки атомних і молекулярних систем в електромагнітному полі, виявлення елементів динамічного хаосу та кількісне обчислення топологічних та динамічних інваріантів систем.

Методи дослідження – кібернетичні методи, методи нелінійного аналізу, методи теорії хаосу, обчислювальні методи для комп'ютерного моделювання.

В роботі розвинуто та адаптовано універсальний, комплексний (з хаос-геометричним і нейромережним блоками та блоком прогнозування) апарат, який одноманітно і одночасно включає низку нових квантово-динамічних моделей і низку або удосконалених або значно покращених методів методів нелінійного аналізу та теорії хаосу і на його основі виконано кількісне вивчення параметрів хаосу в атомній динаміці в змінному електромагнітному полі, зокрема, вперше одержані дані щодо розмірностей вкладення, глобальних розмірностей, показників Ляпунова λ_α , які доказують реалізацію в атомній динаміці у мікрохвильовому полі режиму хаотичної іонізації. Робота в цьому напрямку проводиться вперше.

Розроблені нові чисельні підходи та отримані на основі їх основні нові дані складній динаміці квантових та інших систем демонструють ефективність підходу і перспективні можливості до подальшого використання в широкому колі інших задач математичної фізики та обчислювальної математики, квантової інформатики, геофізики тощо.

ХАОС-КІБЕРНЕТИЧНІ МЕТОДИ, КВАНТОВІ, АТОМНІ ТА
МОЛЕКУЛЯРНІ, ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ, ДИНАМІКА ІЄРАРХІЧНИХ
ХАОТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

ЗМІСТ

| | |
|---|----|
| ВСТУП..... | 7 |
| 1 Сучасні уявлення про хаос в динаміці нелінійних процесів в системах і приладах..... | 10 |
| 1.1 Вступні зауваження..... | 10 |
| 1.2 Загальні уявлення про квантовий хаос..... | 14 |
| 1.3 Короткий огляд методик аналізу нелінійних коливальних систем по хаотичним часовим рядам динамічних характеристик..... | 23 |
| 2 Новий універсальний однаковий хаос-геометричний і нейросетевой підхід до моделювання і прогнозування еволюційної динаміки хаотичних систем та аналізу їх характеристик..... | 29 |
| 2.1 Вступні зауваження..... | 29 |
| 2.2 Тест наявності хаосу в системі з шумом..... | 30 |
| 2.3 Відновлення фазового простору..... | 32 |
| 2.3.1 Вибір часової затримки..... | 33 |
| 2.3.2 Вибір розмірності вкладення..... | 35 |
| 2.4 Класифікація часового ряду..... | 38 |
| 2.5. Спектральні засоби дослідження параметрів хаосу. Статистика енергетичного спектра..... | 42 |
| 2.6 Новий хаос-геометричний підхід до побудови моделі прогнозу еволюції динамічної системи..... | 45 |
| 2.7 Приклад нейросетевой реалізації моделювання і розпізнавання складного патерна..... | 48 |
| 2.8 Алгоритм хаос-геометричного і нейросетевого підходу до виявлення | |

| | |
|--|----|
| хаосу, аналізу та прогнозування нелінійної динаміки системи..... | 53 |
|--|----|

| | |
|---|----|
| 3 Застосування хаос-кібернетичних методів до дослідження динаміки нелінійних процесів у квантових (атомних) системах у зовнішніх полях..... | 56 |
| 3.1 Вступ..... | 56 |
| 3.2 Хаос-динамічний підхід до аналізу динаміки забруднення атмосфери промислового міста..... | 57 |
| 3.3 Динаміка рідбергівських атомів в мікрохвильовому полі..... | 59 |
| 3.4 Кількісний опис характеристик хаотичної динаміки атомів у мікрохвильовому полі..... | 63 |
| 4 Новий квантово-динамічний та хаос-геометричний підхід до моделювання хаотичної динаміки нелінійних процесів в молекулярних системах в електромагнітному полі..... | 67 |
| 4.1 Вступ. Молекулярні системи в електромагнітному полі та актуальні проблеми теорії молекулярного квантового хаосу..... | 67 |
| 4.2 Класично-динамічне моделювання молекул в полі. Новий квантово-динамічний підхід до опису молекулярної хаотичної динаміки..... | 69 |
| 4.3 Застосування квантово-динамічного та хаос-геометричного підходу до аналізу хаотичної динаміки двоатомної молекули в ІЧ полі..... | 73 |
| Висновки..... | 76 |
| Перелік посилань..... | 78 |

ВСТУП

За теперішнього часу до числа вкрай актуальних та надто складних напрямків фізики елементів, систем та приладів безумовно відноситься дослідження регулярної та хаотичної динаміки для різних класів квантових, квантово-генераторних систем та приладів. Природно це обумовлюється дуже стрімким в останнє десятиріччя розвитком так званого квантового приладобудування, зокрема створювання нових типів квантових систем та приладів (лазерні діоди, хаотичні квантові генератори і лазери, одноатомні мазери, атомні годинники, квантові машини Карно з «радіаційною» робочою речовиною, бозе-конденсатні системи у парах лужних атомів тощо). Для вказаних систем та приладів принципіальне важливе значення грають прояви ефект хаосу, взагалі елементів хаотичної динаміки. Напр., хаотичні коливання у динаміці лазерних діодів заслуговують дуже велику увагу через їх безпрецедентні потенційні застосування в технологіях безпечних комунікацій, побудові так званих хаотичних лідарів, оптичних рефлектометрів, істинних генераторів випадкових чисел і так далі.

Добре відомо, що перехід до режиму дисипативного хаосу у функціонуванні ЯМР-мазеру забезпечує побудову на його основі нових типів детекторів сигналів, з безпрецедентною чутливістю особливо при наближенні керуючого параметра системи до точки так званої біфуркації подвоєння, причому подібні детектори слабких сигналів на нестабільних мазерних системах можуть працювати у діапазоні $1-10^6$ Гц.

У різноманітних лазерних інформаційних та метрологічних приладах, як правило, використовуються одночастотні лазери зі стабілізацією частоти. Відзначимо, до речі, що саме такі лазери лежать в основі існуючих оптичних

еталонів метра і часу. В системах активної стабілізації характеристик випромінювання таких лазерів використовується зворотний зв'язок із запізненням, який за певних рівнів може викликати виникнення хаотичних режимів генерації. Далі, за теперішнього часу провідні світові центри лазерного, квантово-оптичного приладобудування ведуть інтенсивні розробки нових типів оптичних томографів для використання в біомедицині, матеріалознавстві і діагностиці розсіюючих середовищ, нових методів та приладів діагностики параметрів оптичних хвильоводів, фотонно-кристалічних середовищ, волоконно-оптичних ліній зв'язку.

Часто використовуємі для таких цілей твердотільні піко- і наносекундні лазери з активною синхронізацією мод є досить складними лазерними системами, оскільки існують жорсткі вимоги на режими синхронізації, а також теплової дрейф резонатора, стабільність частоти радіочастотного генератора. В теорії нелінійних коливань відомо, що стохастичні флуктуації впливають на процес синхронізації в автоколивальних системах, зменшуючи із зростанням потужності шуму ширину зони синхронізації. Відкриття феномену стохастичного резонансу радикально змінило уявлення про оптимальні співвідношення сигналу до шуму. Вплив стохастичного шуму на режим синхронізації лазерних мод практично не досліджувалося. В силу особливостей напівпровідникових лазерів (велике число геніруємих частот, особливості дисперсії робочого переходу) очікується, що типові сценарії хаотизації можуть радикально і дуже складно змінювати режими роботи лазера. Дослідження хаотизації випромінювання напівпровідникових лазерів, безсумнівно важливі, оскільки інжекційні лазерні діоди складають основу як надшвидкісних інформаційних систем, так і дискових систем типу CD або DVD. В сучасних квантових приладах і приладах майбутнього так звані квантово-хаотичні ефекти, які на сьогодні тільки починають досліджуватися, мають ще більше значення.

Слід нагадати, що починаючи з робіт Пуанкаре, Колмогорова, Лоренца, Ляпунова, Ейнштена, Гейзенберга, Фейнмана, Арнольда, Мозера, Фейгенбаума, Мандельброта, Сіная та багатьох інших, теорія хаоса, яка насправді включає досить багато різноманітних напрямків, до певних пір розвивалася в основному

академічно й дуже відокремлено (якісна теорія диференціальних рівнянь, ергодичні теорії, фрактальна геометрія, методи класичної механіки тощо) [1-20,57-64,111-135,169-181].

Сучасна нелінійна динаміка встановила основні механізми виникнення нестійкостей і сценарії переходу до хаосу в нелінійних динамічних системах; напр., до одного із основних сценаріїв виникнення хаосу в системі пов'язаних осциляторів – так званий сценарій Рюелю-Такенса. Але в реальних, особливо квантових генераторах, приладах і системах, хаотична динаміка приймає значно більш складні, частково або взагалі повністю не з'ясовані форми. Особливе значення у цьому сенсі має галузь дослідження квантового хаосу в атомно-молекулярних системах в інтенсивних зовнішніх полях, де, не дивлячись на цілу низку досить вагомих результатів останніх років, одержаних в основному методами класичної динаміки, існує гостра необхідність, по-перше, розробки нових квантово-динамічних моделей хаосу в атомних та молекулярних системах у полі (сучасні методи опису резонансів автоіонізаційного, штарківського, зеєманівського типів), їх сильної взаємодії, включаючи стохастичне злиття, досі не можуть вважатися повністю задовільними), по-друге, розробки, удосконалення та застосування в єдиному комплексі різноманітних методів сучасної теорії хаосу та нелінійного аналізу.

1. СУЧАСНІ УЯВЛЕННЯ ПРО ХАОС В ДИНАМІЦІ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В СИСТЕМАХ І ПРИЛАДАХ.

1.1 Вступні зауваження

До теперішнього часу очевидним є той факт, що переважна число фізичних (насправді, і біологічних, екологічних, соціальних і т.д.) систем та приладів (в сенсі дослідження динаміки нелінійних процесів) є дуже складними, причому ця особливість проявляється на різних просторових і часових масштабних рівнях [1-6,11-92]. У зв'язку з цим вивчення їх фундаментальних властивостей дотепер виявляється далеким від задовільного рівня. Природно, перелік завдань вивчення динаміки складних систем включає колосальне число систем, в тому числі, атомно-молекулярні, лазерні, квантово-генераторні, загалом радіофізичні системи, турбулентні потоки в різних середовищах, фізико-хімічні системи, біологічні популяції, нарешті, суспільство як система комунікацій і його підсистеми: економічні, політичні та інші соціальні системи.

Піонерами теорії вважаються французький фізик і філософ Анрі Пуанкаре (довів теорему про повернення), російські математики А. Н. Колмогоров і В. І. Арнольд, Мозер, які побудували теорію хаосу, звану КАМ (теорія Колмогорова-Арнольда-Мозера). Теорія вводить поняття аттракторів (у тому числі, дивних аттракторів як канторових структур, що притягують), стійких орбіт системи (т. зв. КАМ-торів). Істотний розвиток теорія отримала в другій половині ХХ століття, разом з роботами Едварда Лоренца (Edward Lorenz) з Массачусетського технологічного інституту і франко-американського математика Бенуа Б. Мандельброта (Benoit B. Mandelbrot). Едвард Лоренц свого часу (початок 60-х

років ХХ століття, робота опублікована в 1963 році) розглядав, у чому виникає трудність при прогнозуванні погоди. До роботи Лоренца в світі науки панувало дві думки щодо можливості точного прогнозування погоди на нескінченно тривалий термін, одне з яких стисло можна охарактеризувати як детермінізм Лапласа.

Французький математик, Жюль Анрі Пуанкаре в 1903 році він писав: «Якби ми точно знали закони природи і положення Всесвіту в початковий момент, ми могли б точно передбачити положення того ж Всесвіту в наступний момент. Але навіть якби закони природи відкрили нам всі свої таємниці, ми й тоді могли б знати початкове положення тільки наближено. Якби це дозволило нам передбачити подальше становище з тим же наближенням, це було б все, що нам потрібно, і ми могли б сказати, що явище було передбачено, що воно керується законами. Але це не завжди так; може трапитися, що малі відмінності в початкових умовах викличуть дуже великі відмінності в кінцевому явищі. Мала помилка в перших породить величезну помилку в останньому. Пророкування стає неможливим, і ми маємо справу з явищем, яке розвивається з волі випадку». У цих словах Пуанкаре ми знаходимо постулат теорії хаосу про залежність від початкових умов.

Подальший розвиток науки, особливо квантової механіки, і одного з її розділів, а саме, теорії квантового хаосу, спростувало детермінізм Лапласа. У 1927 році німецький фізик Вернер Гейзенберг сформулював знаменитий квантовий принцип невизначеності. Цей принцип пояснює, чому деякі випадкові явища не підкоряються лапласовому детермінізмові. Гейзенберг показав принцип невизначеності на прикладі радіоактивного розпаду ядра. Так через дуже мали розміри ядра неможливо знати всі процеси, що відбуваються всередині нього. Тому, скільки б інформації ми не збирали про ядро, точно передбачити, коли це ядро розпадеться неможливо. У Пуанкаре ми знаходимо постулат теорії хаосу про залежність від початкових умов.

Непередбачуваність хаосу пояснюється в основному істотною залежністю від початкових умов. Стосовно до неможливості робити довгострокові прогнози

погоди істотну залежність від початкових умов іноді називають «ефектом метелика». «Ефект метелика» вказує на існування ймовірності того, що помах крила метелика в Бразилії призведе до появи торнадо в Техасі. Один з головних висновків теорії хаосу, таким чином, полягає в наступному – майбутнє передбачити неможливо, так як завжди будуть помилки виміру, породжені, в тому числі незнанням усіх факторів і умов. Те ж саме простише – малі зміни та/або помилки можуть породжувати великі наслідки.

Ще одним з основних властивостей хаосу є експоненціальне накопичення помилки. Згідно з квантовою механікою початкові умови завжди невизначені, а відповідно до теорії хаосу – ці невизначеності будуть швидко приростати і перевищать допустимі межі передбачуваності. Другий висновок теорії хаосу – достовірність прогнозів з часом швидко падає. Даний висновок є істотним обмеженням для застосовності фундаментального аналізу, що оперує, як правило, саме довгостроковими категоріями. На жаль, точного математичного визначення поняття хаос поки не існує. Зараз найчастіше хаос визначають як крайню непередбачуваність постійного нелінійного і нерегулярного складного руху, що виникає в динамічній системі. Ключовим, фундаментальним питанням при описі динаміки її системи є можливість прогнозу її еволюції в майбутньому, тобто передбачуваність поведінки.

Останнім часом робляться активні спроби розвитку теорій прогнозу в фізиці динамічних систем, і, зокрема, додатки методів нелінійної теорії, теорії хаосу до аналізу складних систем, що передбачають опис їх еволюційної динаміки системою диференціальних рівнянь. Чим складніше влаштована система, тим більше рівнянь необхідно для її адекватного опису.

Водночас, відомі приклади систем, описуваних, взагалі кажучи, невеликою кількістю рівнянь, але демонструють вельми складну поведінку. Ймовірно, найвідомішими прикладами таких систем є система Лоренца, біліярд Синає і ін. Вони описуються, скажімо, трьома рівняннями (тобто в розгляд включені 3 незалежні змінні), але динаміка їх поведінки в часі демонструє елементи хаосу (т.зв. «детермінований хаос»). Зокрема, Лоренцу вдалося виявити

причину хаотичної поведінки системи, пов'язаного з різницею в початкових умовах. Навіть мікроскопічне відхилення двох систем на самому початку в процесі еволюції приводить до експоненціального накопиченню помилок і відповідно їх стохастическому розбіжності (як наслідок, до неможливості в метеорології точного передбачення змін погоди на досить тривалий термін). При аналізі спостерігаємої динаміки зміни деяких характеристичних параметрів систем у часі досить складно сказати, до якого класу належить дана система і якою буде її еволюція в майбутньому.

Сучасна теорія хаосу, або в більш загальному уявленні, нелінійна теорія, включає в себе кілька ідейно пов'язаних напрямків, в тому числі, теорія нелінійних коливань і хвильових процесів, теорія катастроф, теорія динамічних систем, теорія динамічного хаосу, фрактальна і мультифрактального геометрія, комплексна аналітична динаміка. Для аналізу часових рядів фундаментальних динамічних параметрів в останні роки активно з тим або іншим ступенем успіху розробляються і застосовуються раз-особисті методи, зокрема, нелінійний спектральний і трендовий аналіз, дослідження Марковських ланцюгів, wavelet і мультифрактальний аналіз, формалізм матриць пам'яті і метод еволюційних пропагаторів і т.д. Більшість з шуканих підходів також відносяться до фізики нелінійних процесів.

У теорії динамічних систем розроблені методи, що дозволяють по записи часового ряду одного з параметрів відновити деякі динамічні характеристики всієї системи. Для динамічних систем прийнятим представленням розвитку процесу в часі є побудова «портрета» в фазовому просторі (тобто просторі, координатами якого є змінні стану).

Нелінійна динамічна система [1-3,11-20,57-64] характеризуються дивним аттрактором – множиною, що притягує, в фазовому просторі, в якому розташовані хаотичні траєкторії. Розмірністю вкладення m називається найменша ціла розмірність простору, що містить весь аттрактор. Вона відповідає кількості незалежних змінних, що однозначно визначає усталений рух динамічної системи. Множина, відповідна дивному аттрактору, є фрактальною. Фрактальна множина

(самоподібний об'єкт) – характеризується дробовою фрактальною розмірністю [2] (точніше, цілим спектром різновизначених розмірностей, співпадаючих для регулярних фракталів, але такими, що розрізняються для природних систем).

Аналізу часових рядів фундаментальних характеристик різних, в тому числі, фізичних і т.д. систем в останні роки присвячується колосальне число робіт, в тому числі, аналіз з позиції теорії динамічних систем і хаосу, фрактальних множин [1-6,11-20,57-64,111-135]. Характерною особливістю практично всіх виконаних до теперішнього часу досліджень в області хаосу в системах і динаміці процесів в приладах є використання, як правило, якогось одного одиничного методу з усього арсеналу методів нелінійної теорії. Мається на увазі той факт, що дослідники використовують, скажімо, єдиний метод фрактальних множин, і на його основі ідентифікують феномен хаосу, або використовують якісну теорію диференціальних рівнянь (як правило, рівнянь класичної механіки) і в її рамках аналізують особливості прояву хаосу.

У серії робіт [205-223] був розроблений універсальний, однаковий комплексний підхід до нелінійного моделювання та прогнозування хаотичних процесів в динамічних системах, про який детальніше йтиметься в пр. 1.5. Наш підхід, в т.ч., включає використання та концепції компактного геометричного аттрактора і нейромережних (штучний інтелект) алгоритмів.

Зрозуміло, в рамках застосування методів теорії хаосу, попередньо вирішується ряд задач, пов'язаних з дослідженням часових рядів ключових динамічних параметрів системи (нелінійних процесів в приладах), проведенням тесту на наявність хаосу в системі, відновленням мультифрактального спектра, спектра розмірностей Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка, ентропії Колмогорова, побудови еволюційної моделі прогнозу.

1.2 Загальні уявлення про квантовий хаос

За сучасними уявленнями, теорія квантового хаосу фактично вивчає квантово-механічні системи, що є хаотичними в класичному межі. За традицією,

під квантовим хаосом мається на увазі сукупність ефектів, які спостерігаються в квантово-фізичних системах, що відносяться до суто нелінійних ефектів, прояв яких в квантових системах, описуваних рівняннями типу Шредінгера або матриці щільності. Добре відомо, що квантова механіка, яка існує більше 60 років, дозволяє описувати як системи, що інтегруються в класичному межі (як наприклад, атом водню), так і класично неінтегруємих системи (як наприклад, атом гелію). Відомий принцип відповідності вказує на те, що в квазікласичних області при масштабах системи порівнянних з довжиною хвилі де-Бройля квантова механіка безперервним чином переходить до класичної. З іншого боку, в квантовій механіці поняття траєкторії, по крайній мере, в прагматичної або копенгагенської інтерпретації втрачає звичний сенс (воно знову з'являється тільки в квазікласичних області). В інтерпретації феномена квантового хаосу коректніше говорити про такі характерні прояви як перетин енергетичних рівнів в багатопараметричному просторі, елементах стохастичности в спектрах особливо високозбуджених станів атомно-молекулярних систем, феномені кластеризації станів, інтерференції, флуктуації, злитті резонансних станів (квантових нелінійних резонансів) в стохастичні шари і т.д.

До 90-х років минулого сторіччя, було виконано відносно невелике число теоретичних і експериментальних робіт, в яких вивчався квантовий хаос. Виняток становлять тільки експерименти, в яких досліджувалися ядерні спектри. Феноменальною подією стали виконані Клепнером і співр., Бейфілдом і Кохом досліди з високозбуджених атомами водню, що знаходяться в сильному мікрохвильовому полі, а також експерименти з тими ж атомами водню, поміщеними в магнітне поле [11,25,58,82-88]. Слід також згадати серію робіт Штокмана і Штейна [12] з вивчення хаосу хвильових полів, зокрема, електромагнітних коливань мікрохвильового діапазону в резонаторах неправильної форми (мікрохвильових порожнинах). При цьому так звані мікрохвильові білліарди описуються або рівнянням Гельмгольца або еквівалентним йому стаціонарним рівнянням Шредінгера. До числа найбільш яскравих прикладів квантово-хаотичної системи, зрозуміло, відноситься атом

водню в магнітному полі. За сьогоднішніми уявленнями, виявлені в спектрі атома водню в магнітному полі численні резонансні стани (резонанси) з малими та аномально малими ширинами пояснюється в рамках теорії хаосу цілком переконливо. Згідно [6], їх виникнення не прийнято пов'язувати з якоюсь прихованою симетрією або феноменом локалізації, а пояснюється випадковими інтерференційними явищами і флуктуаціями, властивими, насправді, всім хаотичним системам.

До певних пір вважалося найбільш природним вивчення феномена хаосу на основі методів класичної механіки і якісної теорії диференціальних рівнянь, в рамках яких природно оперувати поняттями типу біфуркація, нестійкість, граничний цикл, дивний аттрактор і т.д. [1-3,57-64,111-135]. Їх застосування до квантових систем виявляється також цілком прийнятним, більш того, часто сценарій встановлення хаотичної динаміки в квантових моделях в чому (не завжди) аналогічний класичному. Наприклад, стохастическое рух електрона в атомі в зовнішніх полях природно інтерпретується на мові розгляду певного типу резонансних взаємодій мод, що відповідають руху в цих полях, причому область його прояви звужується при збільшенні того чи іншого взаємодії. Якісна картина процесу встановлення хаотичної динаміки в квантових системах в загальних рисах зводиться до наступного сценарієм: зовнішнє, наприклад, магнітне поле призводить до появи первинних нелінійних резонансів, сильна взаємодія між якими призводить до появи вторинних резонансів і виникненню стохастичних шарів в околиці сепаратриси резонансів, аж до освіти павутини Арнольда. При значенні напруженості зовнішнього поля вище деякого критичного значення різні стохастичні шари зливаються, приводячи до виникнення в системі глобальної стохастичності.

В якості ілюстрації використання класичних методів, слідуючи огляду Лисиці [25] (див. також монографію Глушкова [6]), розглянемо детальніше задачу про класичні траєкторії при русі атомного в кулонівському і магнітному полях (атом водню). Картина класичного руху була детально досліджена Делосом, Кнудсон і Нойда шляхом чисельного рішення класичних рівнянь руху електрона в

кулонівському і магнітному полях (див. огляд [25]). Загальновідомо, що при збільшенні напруженості магнітного поля B , в яке поміщений атом водню, енергетичний спектр атома змінюється від чисто кулонівського (ридберговських) до осциляторний спектру Ландау з прилеглим до нього одновимірним квазікулоновським спектром. В рамках класичного розгляду, траєкторія електрона повинна еволюціонувати в міру збільшення B від кеплеровського еліпса до ларморовських гуртків. Рівняння класичних траєкторій в циліндричних координатах $\hat{\rho}$ і \hat{z} (вісь $Oz \parallel B$) виходять за допомогою гамільтониана H , що містить кулонівський потенціал $-e^2(\hat{\rho}^2 + \hat{z}^2)^{-1/2}$, відцентровий потенціал $L_z^2/2m\hat{\rho}^2$ і «діамагнітний» член $e^2 B^2 \hat{\rho}^2 / 8mc^2$. Виявляється, що гамільтонови рівняння руху для канонічно сполучених координат $\hat{\rho}$ і \hat{z} та імпульсів \hat{p}_ρ , \hat{p}_z можуть бути приведені до безрозмірною формі з одним параметром:

$$L = L_z \left(\frac{e^2 B^2}{mc^2} \right)^{1/6} m^{-1/2} e^{-4/3}, \quad (1.1)$$

є комбінацією параметрів кулонівського (e^2) і магнітного ($\sim B^2$) взаємодій. Така форма рівнянь виходить після заміни змінних

$$\begin{aligned} \rho = \frac{\hat{\rho}}{\alpha}, \quad z = \frac{\hat{z}}{\alpha}, \quad p_\rho = \frac{\hat{p}_\rho}{\beta}, \quad p_z = \frac{\hat{p}_z}{\beta}, \\ p_z = \frac{\hat{p}_z}{\beta}, \quad t = \frac{\hat{t}}{\gamma}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

$$\text{где} \quad \alpha = \left(\frac{mc^2}{B^2} \right)^{1/3}, \quad \beta = m^{1/2} e^{2/3} \left(\frac{e^2 B^2}{mc^2} \right)^{1/6}, \quad \gamma = \frac{mc}{eB}. \quad (1.3)$$

У нових змінних гамільтониан \hat{H} містить єдиний параметр – ефективну z -компоненту кутового моменту L . Рівняння руху:

$$\frac{d\rho}{dt} = p_\rho, \quad \frac{dz}{dt} = p_z,$$

$$\frac{dp_\rho}{dt} = -\frac{\rho}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{\rho}{4} + \frac{L^2}{\rho^3}, \quad (1.4)$$

$$\frac{dp_z}{dt} = -\frac{z}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}}.$$

Траєкторії електрона в змінних ρ , z , p_ρ , p_z є все ще складними. Чисельні розрахунки траєкторій проводилися за наступною схемою: належало $z = 0$, для даних значень H і L вибиралося двадцять випадкових значень змінних ρ і p_ρ ; p_z знаходилося з гамільтониана, після чого вирішувалися рівняння руху. Електрон фактично рухається в ефективному потенціалі

$$V(\rho, z) = -(\rho^2 + z^2)^{-1/2} + \frac{L^2}{2\rho^2} + \frac{\rho^2}{8}, \quad (1.5)$$

який володіє двома характерними значеннями – \min при $z_0 = 0$ в точці ρ_0 :

$$\frac{\rho_0^4}{4} + \rho_0 - L^2 = 0, \quad V(\rho_0) = E_{\min}(L), \quad (1.6)$$

і енергією E_s відриву електрона від ядра при $z \rightarrow \infty$:

$$\rho_s = (2L)^{1/2}, \quad (1.7)$$

$$V(\rho_s, \infty) = \frac{L}{2} = E_s(L). \quad (1.8)$$

Далі для зручності опису руху електрона з енергією вводиться безрозмірний енергетичний параметр:

$$f = (E - E_{\min}(L))(E_s - E_{\min}(L))^{-1}, \quad (1.9)$$

рівну нулю при $E = E_{\min}$ і одиниці при $E = E_s$. На рис. 1.1 (з огляду [25]) показана схема областей руху електрона на площині f, L , а на рис. 1.2 – вид фазових траєкторій в площині $z = 0$ для ряду значень f і L .

Аналіз наведених малюнків показує, що темні області (рис. 1.2) відповідають стохастичним траєкторіям: *а)* область еліптичних траєкторій відповідає звичайному руху по кеплеровським еліпсам, витягнутих уздовж позитивної або негативної осі (лібратори); тут вірна умова

$$E \geq -1/10L^2.$$

Основна частина траєкторій (ротатори) відповідає руху по еліпсах, близьким до площини x, y ; *б)* область спіральних траєкторій реалізується в сильному магнітному полі і відповідає різкого поділу періодів рухів уздовж (вісь Oz) і поперек магнітного поля; *в)* нерегулярний режим руху реалізується при порівнянній величині взаємодії електрона з кулонівським і магнітним полем і виявляється в тому, що траєкторія суцільним чином заповнює фазовий (p_ρ, ρ) -простір (див. рис. 1.2); механізм виникнення стохастичного руху в класичній динаміці до кінця не ясний, хоча, очевидно, пов'язаний з резонансами 2 наявних періодичних рухів: по кеплерівському еліпсу і ларморовской окружності; *г)* тут реалізується перехідний режим при порівнянних взаємодіях, але при менших енергіях (режим стійкого руху), причому при $L \sim 1.5$ рух різко відмінний як від еліпсів, так і кіл. Зрозуміло, аналіз хаосу в квантових системах проводився не тільки на основі методів класичної механіки (по суті, в рамках ньютонівської динаміки), а й на основі напівкласичних або полуквантових методик, зокрема,

методу квантових траєкторій (квантування до класичної механіки), інтервалів по траєкторіях Фейнмана-Хігса, теорії «періодичних орбіт» Гутзвіллера, методу замкнутих орбіт Делоса (див. [13,58]).

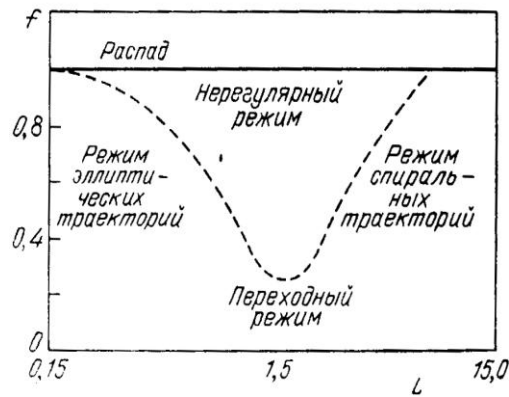


Рисунок 1.1- Схема областей руху електрона на площині моменту L и

$$\text{безразмерных } f = [E - E_{\min}(L)] [E_s(L) - E_{\min}(L)]^{-1}$$

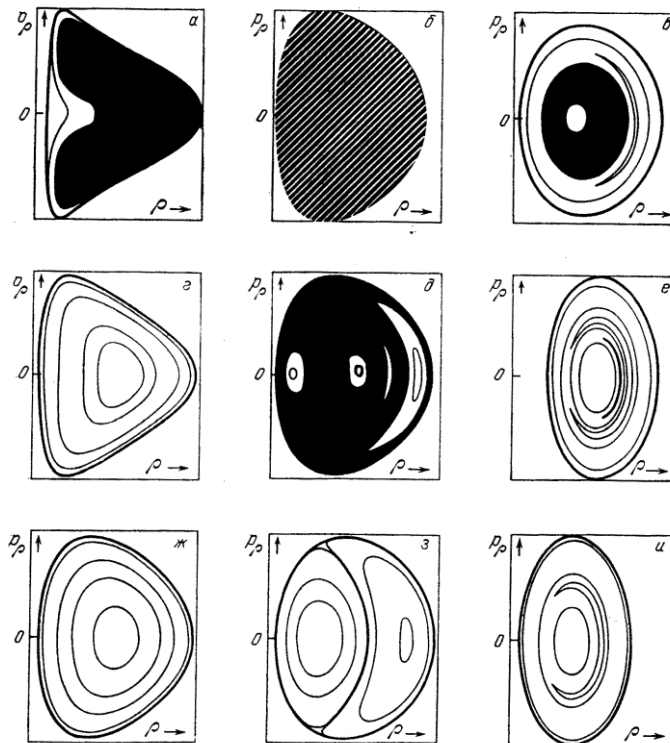


Рисунок 1.2. Вид фазових траєкторій p_ρ, ρ електрона в площині $z = 0$ для ряду значень f и L .

Два останніх методу розроблялися з метою опису хаотичних ефектів, виявлених експериментально у відомих класичних експериментах Гартона-Томкінса по фотоіонізації атома барію в магнітному полі (див. [71]). У цих експериментах вперше був виявлений складний спектр вузьких резонансів, із збільшенням напруженості магнітного поля поступово зливаються в квазіконтинууми.

До зазначених методів варто також додати і метод комплексних координат, реалізований в серії робіт Деланде і співр., теорія випадкової матриці Фрієдріха-Вінтгена, метод діагоналізації на водородоподобном базисі Хегерфелдта-Хеннеберга і Преображенського-Рапопорта, квазікласична модель Кучієва-Сушкова, чисельно-квантові моделі Глушкова і співр. (див. [6,25, 42-5158,93,94]).

Зазначені дослідження переконливо довели, що квантові системи являють собою досить реалістичні приклади неінтегруємих систем, в яких мають місце квантові прояви класичного хаосу. Це стимулювало значне число робіт з вивчення динаміки багатоелектронних, збуджених атомів в магнітному або окремо електромагнітному полі, а також схрещених електричному і магнітному полях.

Однак, слід підкреслити, що незважаючи на суттєвий прогрес у розумінні феномена хаосу навіть в зазначених задачах, багато кількісні аспекти опису резонансів в спектрах атомів у зовнішніх полях далекі від задовільного рівня, також як і вивчення спектральної динаміки складних багатоелектронних атомів у вільному стані (без накладення зовнішніх полів) або цих же атомів в лазерному полі з утворенням численних Багатофотонні резонансів. Стисло кажучи, до цих пір в більшості робіт йдеться тільки, більшою мірою, про якісне або, в кращому випадку, напівкількісному аналізі на основі одного або максимум двох критеріїв ідентифікації хаосу. Основна методика дослідження полягала лише у вивченні розподілу відповідних резонансних станів в спектрі атома і визначенні типу імовірнісного розподілу, наприклад, Пуассона або Вигнера. Більш загальним є, природно, розподіл Броді:

$$p_q(s) = A s^q \exp(-\alpha s^{q+1}) , \quad (1.10)$$

де $\alpha = [\Gamma\{(q+2)/(q+1)\}]^{q+1}$,

$A = (q+1)\alpha$, котре для значень $q=0$ и $q=1$ переходить відповідно або в розподіли Пуассона:

$p_p(s) = \exp(-s)$ або

Вігнера: $p_w(s) = (1/2)\pi \exp(-\pi s^2/2)$.

Далі, як тільки вдавалося ідентифікувати у вирішенні завдання розподіл Вігнера, відразу ж робився висновок про наявність в динаміці системи елементів квантового хаосу. Зрозуміло, при наявності переконливих експериментальних доказів в задачах про атоми в зовнішніх полях ця методика працювала надійно. Однак, за відсутністю експерименту при вирішенні задач про спектральну динаміку квантових систем ясну відповідь про відсутність хаосу або навпаки, його присутності опинявся дуже скрутним, якщо не сказати, взагалі неможливим.

Як вказувалося в [1-3,11-20,57-64], проблема тут зводилася до максимально точному, по суті, прецизійному розрахунку досить великої частини спектра резонансних станів (резонансів), що, по-перше, навіть на сучасному рівні розвитку теоретичної спектроскопії є вкрай проблематичним, по-друге, один або два критерії виявлення хаосу в системі виявляються не досить надійними. Класичним прикладом такої проблеми є проблема хаосу в спектрі He, розглянута, зокрема, Domke, Menzel, Zakrzewski-Delande, Connerade, Glushkov-Svinarenko (див., напр., [42-51,69-81]), які різною інтерпретацією намагалися відповісти на питання, схилиючись до думки, що феномен хаосу в спектрі гелію не реалізується, зокрема й тому, що $q = 0.3-0.58$.

У нашій роботі цей клас задач також буде розглянуто і для його вирішення буде запропоновано новий, універсальний, однаковий метод, який, природно, і включає як окремий елемент аналіз статистики рівнів в атомному спектрі, але базується на комплексі різних підходів нелінійної теорії, що включає зокрема, метод варіацій Марка-Аронсона, метод стохастичних функцій пам'яті, мультифрактальний формалізм, вейвлет-аналіз, метод взаємної інформації, метод

кореляційного інтеграла (алгоритм Гроссбергера-Прокаччі), алгоритм помилкових найближчих сусідів, аналіз показників Ляпунова, метод сурогатних даних і ін. [1-3,11-20,23,57-64,111-135, 205-220].

1.3 Короткий огляд методик аналізу нелінійних коливальних систем по хаотичним часовим рядам динамічних характеристик

Розглянемо тут детальніше, слідуючи [167-170,212,214], деякі основні методики моделювання нелінійних коливальних систем, виходячи із знання тимчасових (частотних) рядів, їх ключових динамічних характеристик. Відзначимо тут же, що, насправді, викладені нижче методики застосовні до значно ширшого класу хаотичних систем, хоча спочатку вони були розроблені для аналізу виключно коливань різних елементів механізму з метою визначення джерела вібрацій [4]. При цьому різноманітність специфічних ситуацій, а також наявність шумів і нестационарності визначили появи безлічі підходів до виявлення та оцінки "інтенсивності" зв'язку. Шукані методики розвивалися в рамках математичної статистики і спектрального аналізу, теорії інформації, нелінійної динаміки [1-3,57-64].

Сюди ж слід віднести і розрахунок взаємних кореляційних функцій і функцій когерентності, аналіз проходження подій в часових рядах, оцінку розподілу найближчих сусідів в просторі станів, визначення характеристик "переносу інформації" між сигналами [111-135,211-214]. Зрозуміло, спочатку кожна з методик була зорієнтована на певний вузький клас систем, в яких мало місце наявність нелінійності і хаосу, починаючи від вібрацій твердотільних конструкцій і закінчуючи задачами аналізу механізмів патологій в нейрофізіології і аналізу флуктуацій забруднюючих речовин в атмосфері промислових міст. Природно, починати будь-який аналіз динаміки нелінійної системи з визначення структури її моделі.

Як приклад розглянемо модель зв'язку двох автоколивальних систем з запізненням [170], представлену на рис. 1. Це дві системи, що представляють собою включені в кільце нелінійний підсилювач f , лінію затримки τ , фільтр ε

(інерційний елемент). Штриховими лініями показані різні варіанти підключення в точки I, II і III елементів зв'язку з коефіцієнтами передачі k . Різним типам зв'язку відповідають різні структури математичних моделей:

$$\varepsilon_{1,2} \frac{dx_{1,2}(t)}{dt} = -x_{1,2} + f_{1,2}(x_{1,2}(t - \tau_{1,2}) + k_{2,1}x_{2,1}(t - \tau_{1,2})), \quad (1.11)$$

$$\varepsilon_{1,2} \frac{dx_{1,2}(t)}{dt} = -x_{1,2} + f_{1,2}(x_{1,2}(t - \tau_{1,2}) + k_{2,1}x_{2,1}(t)), \quad (1.12)$$

$$\varepsilon_{1,2} \frac{dx_{1,2}(t)}{dt} = -x_{1,2} + f_{1,2}(x_{1,2}(t - \tau_{1,2})) + k_{2,1}x_{2,1}(t). \quad (1.13)$$

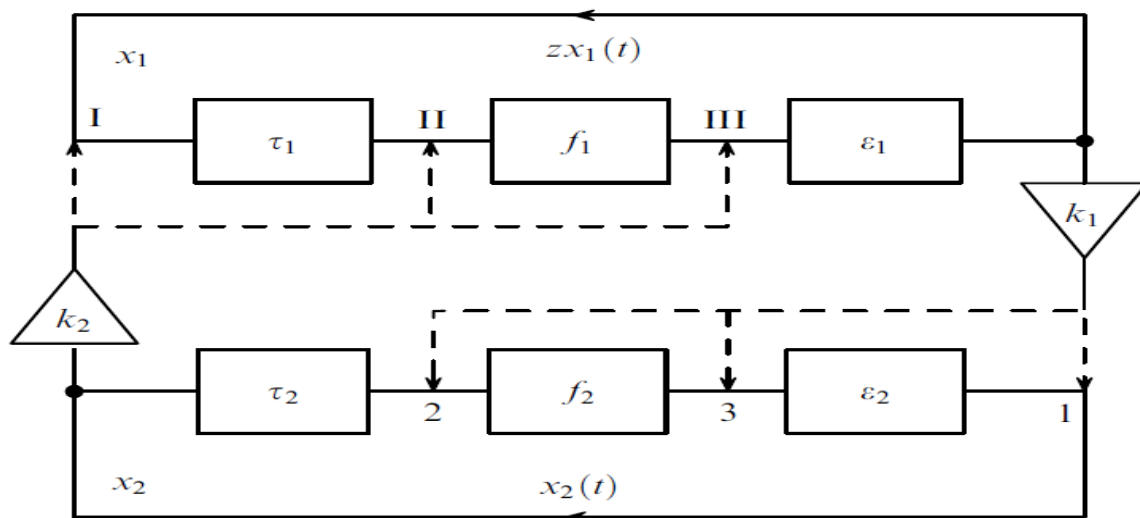


Рисунок 1.3. Блок-схема пов'язаних систем з запізненням X_1 і X_2 . Елементи, позначені як τ_1 і τ_2 , f_1 і f_2 , ε_1 і ε_2 , забезпечують відповідно затримку, нелінійне і інерційне перетворення коливань, а елементи k_1 і k_2 визначають величину зв'язку систем X_1 і X_2 один з одним. 1-3 – точки, в яких система X_1 діє на систему X_2 , I-III – точки, в яких X_2 діє на X_1 .

Рівняння (1.11) в даній моделі описує спосіб зв'язку, який позначимо як I/I: перша система з запізненням впливає на другу в точці 1, а друга система впливає на першу в точці I. Відповідно, (1.12) і (1.13) описують пов'язані системи для способів зв'язку 2/II і 3/III відповідно. При способах впливу друг на друга, що розрізняються, системи X_1 і X_2 описуються різними рівняннями. Передбачається

далі, що найкращий результат виходить при виборі тієї з моделей, яка правильно відображає спосіб введення зв'язків між автогенераторами в фізичному експерименті та між еталонними динамічними системами в чисельному експерименті [170].

Інший підхід до розуміння і виявленню причинно-наслідкових зв'язків в системі в відсутність будь-якої інформації про структуру модельних рівнянь дає методика, заснована на побудові елементарної моделі прогнозу, що представляє узагальнення лінійного підходу типу Грейнджера [3,211,2143]. Ідеологія цієї методики до побудови найпростіших прогностичних моделей ("індивідуальні" і "спільні") по часовим рядах $\{x_1(t_1), \dots, x_1(t_N)\}$ і $\{x_2(t_1), \dots, x_2(t_N)\}$. Далі вивчається можливість поліпшення прогнозу динаміки першої системи при обліку значень змінної другої системи, тобто виявлення ознаки наявності впливу другої системи на першу (якщо такого поліпшення не можна досягти ускладненням індивідуальної моделі). Типова реалізація полягає в оцінці впливу другої системи на першу допомогою індивідуальної авторегрессионной моделі виду

$$x_1(t_n) = f_1(x_1(t_{n-1}), x_1(t_{n-2}), \dots, x_1(t_{n-d_1}), a_0) + \xi_n, \quad (1.14)$$

де f_1 – алгебраїчний многочлен порядку K , d_1 – розмірність моделі, ξ_n – шум з нульовим середнім. Оцінки коефіцієнтів a_0 знаходяться за допомогою методу найменших квадратів (МНК), тобто допомогою мінімізації середнього квадрата помилки прогнозу

$$\sigma_1^2 = \frac{1}{N - n_0} \sum_{n=n_0+1}^N (x_1(t_n) - f_1(x_1(t_{n-1}), \dots, x_1(t_{n-d_1}), a_0))^2 \quad (1.15)$$

де $n_0 = \max(d_1, d_2)$, величина d_2 визначена нижче. Потім з використанням двох рядів будується спільна модель

$$x_1(t_n) = g_1(x_1(t_{n-1}), \dots, x_1(t_{n-d_1}), \dots, x_2(t_{n-1}), \dots, x_2(t_{n-d_2}), \mathbf{a}) + \eta_n, \quad (1.16)$$

де d_2 – число врахованих значень x_2 , g_1 – многочлен порядку, η_n – шум з нульовим середнім. Досягнутий за допомогою МНК мінімальний середній квадрат помилки прогнозу визначається як

$$\sigma_{2 \rightarrow 1}^2 = \frac{1}{N - n_0} \sum_{n=n_0+1}^N (x_1(t_n) - g_1(x_1(t_{n-1}), \dots, x_1(t_{n-d_1}), \mathbf{a}))^2. \quad (1.17)$$

Поліпшення прогнозу ряду x_1 при обліку низки x_2 характеризується різницею квадратів помилок

$$PI_{2 \rightarrow 1} = \sigma_1^2 - \sigma_{2 \rightarrow 1}^2. \quad (1.18)$$

Для оцінки статистичної значимості відмінності отриманої з часового ряду величини $PI_{2 \rightarrow 1}$ від нуля часто використовується аналітична формула, заснована на припущенні про те, що процеси x_1 і x_2 не пов'язані, а помилки прогнозу (залишкові помилки) моделей (1.14) і (1.16) обумовлені впливом нормального білого шуму. Тоді нормована величина

$$F_{2 \rightarrow 1} \equiv \frac{(N - n_0)(\sigma_1^2 - \sigma_{2 \rightarrow 1}^2)}{(P_2 - P_1)\sigma_{2 \rightarrow 1}^2}, \quad (1.19)$$

де P_1 і P_2 – числа коефіцієнтів індивідуальної та спільної моделей, має F-розподіл Фішера з $(P_2 - P_1, N - n_0 - P_2)$ ступенями свободи. Значимість відмінності від нуля перевіряється за допомогою F-тесту [9].

Ще одна альтернативна методика оцінки достовірності існування виявлених зв'язків в системі називається методом сурогатних даних, основна ідея якої полягає в аналізі штучно отриманих пар не пов'язаних між собою сигналів, однак зберігають певні деякі риси динаміки досліджуваних процесів (напр., Вихідні

часові ряди, зсунуті відносно один друга на інтервал часу, більший часу автокореляції процесів) [167-170]. Тоді в моделях (1.14) і (1.16) величини d_1 , d_2 і K приймають такі значення, при яких среднеквадратические помилки прогнозу моделей (формули (1.15) і (1.17)) стабілізуються, тобто перестають істотно зменшуватися зі зростанням d_1 , d_2 і K . Як показує досвід застосування шуканої методики (див., напр., [214]), найбільш прийнятні і значущі результати виходять тільки при використанні малих розмірностей і багаточленів низького порядку. З іншого боку, використання найбільш простих моделей для оцінки причинності по Грейнджеру сильно звужує область ефективних додатків методу, тобто, сама по собі в одиначній реалізації до аналізу динаміки системи методика навряд чи може гарантувати завжди позитивний результат. Зауважимо, саме це одна з причин чому при аналізі багатьох апіорі хаотичних систем такий підхід виявляється не успішним разом з класичним лінійним аналізом.

З іншого боку, викладені методики розглядалися спочатку як перші кроки до виявлення елементів емпіричних моделей реконструкції еволюції складної системи. Така постановка задачі хороша відома, наприклад, в стандартній математичній статистиці як спроба *ідентифікації систем*, в нелінійній динаміці – як спроба *реконструкції динамічних систем*. Поширений підхід в останні роки включає емпіричне моделювання на основі нелінійних різницевих рівнянь (відображень)

$$x_{n+1} = F(x_n, c) \quad (1.20a)$$

або звичайних диференціальних рівнянь

$$dx/dt = F(x, c), \quad (1.20б)$$

де x – D -мірний вектор стану,

F – вектор-функція,

c – P -мірний вектор параметрів,

n – дискретний час,

t – безперервний час.

В загальних рисах побудову алгоритму реконструкція намагаються починати з попереднього аналізу експериментальних даних і вибору структури моделі: типу і числа рівнянь, виду функцій F і зв'язку динамічних змінних x з спостерігаються величинами, потім проводять підгонку моделі на основі принципів типу принципу мінімакса, максимального правдоподібності або МНК в різних варіантах. Як показує аналіз більшості робіт в даному напрямку, спроби розробки нема кого методу з універсальною працездатністю виявилися безуспішні. Математичні моделі часто виходять громіздкими і полукачественними. Найбільш складний випадок "чорного ящика", при якому інформація про структуру можливої адекватної моделі взагалі відсутня (відоме "прокляття розмірності"). Як приклад спеціальних технологій реконструкції, спрямованих на деякий виділений клас об'єктів, можна вказати системи, що знаходяться під зовнішнім впливом.

У серії робіт [1-3,167-171,211-214] наведені досить цікаві результати дослідження щодо підвищення точності оцінок параметрів простих стохастичних моделей, включаючи випадок прихованих змінних, елементарні оптимізації структури моделей, і т.д. Для нас тут дуже важливо підкреслити, що до цих пір стисло викладені, а також родинні їм методики аналізу еволюційної динаміки хаотичних систем ніколи не застосовувалися до завдань хаотичної динаміки атомно-молекулярних квантових систем, а також в аналізі феномена квантового хаосу. В нашій роботі в найбільш повної і оптимизационної формі це зроблено вперше.

2. НОВИЙ УНІВЕРСАЛЬНИЙ ЄДИНООДНАКОВИЙ ХАОС-ГЕОМЕТРИЧНИЙ І НЕЙРОСЕТЕВОЙ ПІДХІД ДО МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ ЕВОЛЮЦІЙНОЇ ДИНАМІКИ ХАОТИЧНИХ СИСТЕМ ТА АНАЛІЗУ ЇХ ХАРАКТЕРИСТИК

2.1 Вступні зауваження

Нижче ми викладемо основні моменти нашого удосконаленого комплексного хаос-геометричного підходу до дослідження у подальшому динаміки атомно-молекулярних та лазерних систем, згідно із роботами [211-220]. Розглянемо скалярну вимірну величину $s(t_0 + n\Delta t) = s(n)$, де t_0 – деякий початковий момент часу, Δt – часовий інтервал, через який вироблялося n вимірювань. У загальному випадку $s(n)$ може бути будь-яким часовим рядом, в тому числі і вимірними концентраціями атмосферних газів і аерозолів.

Перша задача будь-якого дослідження полягає в тому, щоб на основі даних вимірювань відновити фазовий простір системи. Природно, що відновити нескінченне число ступенів свободи тільки на основі $s(n)$ неможливо. Однак можна прийняти точку зору, згідно з якою виміряні величини, що визначають дисипативну систему, лежать на геометричному об'єкті (аттракторе) набагато менший, ніж у реального простору станів, розмірності. Тому можна розглядати методи для моделювання еволюції на аттракторе, а не еволюції в повному оригінальному фазовому просторі з нескінченною розмірністю.

Друге завдання зводиться до прогнозу майбутнього стану системи на основі відновленого фазового простору. Тут слід зазначити, що в дуже рідкісних випадках відновлення фазового простору може привести до системи диференціальних рівнянь.

Одним з обмежень, що перешкоджає цьому, є наявність у вимірах шуму, що характерно і для більшості процесів, що протікають в природі. Природно, цей шум

може бути відфільтрований при відновленні аттрактора, що призведе до більш точної ідентифікації динаміки системи. Однак наявність шуму все одно позначиться на якості прогнозу.

Однією з чудових особливостей методів, використовуваних в теорії хаосу, є те, що багато з них можуть працювати і при наявності шуму. Оскільки основним завданням будь-якої науки є, скоріше, прогноз, а не аналіз даних, застосування таких методів може бути досить ефективним. Методика роботи з хаотичним часовим рядом може бути зведена до кількох процедур:

- ідентифікація хаотичного режиму;
- реконструкція фазового простору;
- класифікація часових рядів;
- побудова моделі прогнозу.

Справжній розділ, якраз і присвячений опису методів, які дозволяють здійснити зазначені вище процедури.

2.2 Тест наявності хаосу в системі з шумом

Цей тест був введений зовсім недавно Готтвотом і Мелбенем [111] і був в подальшому ними модифікований для випадку хаосу з шумом [112]. Він має переваги перед традиційними методами ідентифікації хаосу, які будуть описані нижче. По-перше, цей тест застосовується безпосередньо до даних часового ряду і не вимагає відновлення фазового простору. Більш того, несуттєва і природа динамічної системи, що лежить в основі тимчасового ряду. По-друге, це бінарний тест, який дає, в принципі, 0 або 1, тобто цілком однозначний результат.

Розглянемо дискретний тимчасовий ряд $s(n)$ із $n = 1, 2, 3, \dots$. Виберемо речову константу c (на практиці вибирається якась кількість значень c). Для кожного значення c , визначимо для всіх n

$$p(n) = \sum_{j=1}^n s(j) \cos(jc). \quad (2.1)$$

Далі, визначимо середньоквадратический зсув

$$M(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [p(j+n) - p(j)]^2. \quad (2.2)$$

Якщо динаміка системи є регулярною (періодичною чи квазіперіодичною), то з ймовірністю одиниця $M(n)$ є обмеженою функцією від n . Однак якщо динаміка хаотична (в досить нежорсткому сенсі), то з ймовірністю одиниця $M(n) = V(n) + O(1)$ для деяких $V > 0$, що показано авторами методу [111]. Визначимо швидкість асимптотического росту середньоквадратического зсуву

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log M(n)}{\log n}. \quad (2.3)$$

Тоді $K = 0$ є ознакою регулярної динаміки, а $K = 1$ – хаотичної.

Далі, припустимо, що тестується часовий ряд з кінцевим числом даних $s(n)$, $1 \leq n \leq N$. Визначимо

$$M(n) = \frac{1}{N-n} \sum_{j=1}^{N-n} [p(j+n) - p(j)]^2. \quad (2.4)$$

Якщо $n \ll N$, то цілком припустимо, що ставлення $M(n)$ до n буде аналогічним зазначеному вище. Щоб запобігти логарифмування негативних значень, можна використовувати співвідношення $\log(M(n) + 1)$ до $\log n$ для $1 \leq n \leq N_1$ з деяким обраним N_1 , $1 \ll N_1 \ll N$. Авторами методу показано на практиці [112], що досить вибрати $N_1 = N/10$. Тепер, значення K близьке до нуля визначає регулярну динаміку, а близьке до 1 – хаотичну.

Авторами методу [112] також рекомендується вибрати випадковим чином певна кількість (100) значень констант s_i для кожної розрахувати значення K , а в

якості кінцевого результату взяти медіану всіх розрахованих K .

Описаний вище метод з успіхом був застосований [111, 112] для деяких класичних хаотичних систем, причому в деяких випадках рівень шуму в аналізованому часовому ряді досягав 20%.

2.3 Відновлення фазового простору

Якщо динамічна система є нелінійною, застосування перетворення Фур'є не дасть, швидше за все, будь-якого задовільного результату, як у випадку лінійної системи. Пов'язано це з тим, що процеси, що призводять до хаотичного режиму, є фундаментально багатовимірними. Тому необхідно відновлювати фазовий простір системи, якнайкраще використовуючи інформацію, що міститься в $s(n)$. Цей процес реконструкції призведе якогось набору d -мірних векторів $y(n)$, які замінять спостережені скалярні дані, і полягає в поєднанні динамічних концепцій про нелінійних системах, як про генераторах інформації, і геометричних уявлень про те, як виявити аттрактор за допомогою координат, визначених на основі їх інформаційно-теоретичного змісту.

Ще в 1980 році Пекад та ін. [114] представили міркування про використання координат з часовою затримкою для реконструкції фазового простору наблюденной динамічної системи і, як наслідок, похідної за часом від s . Основна їхня ідея полягає в тому, насправді немає необхідності мати похідні, щоб сформувати систему координат, в якій захоплена структура орбіт в фазовому просторі, а можна напряду використовувати запізнілі змінні $s(n+\tau)$, де τ – деяке ціле число, яке потрібно визначити. Тоді, використовуючи сукупність часових затримок для створення вектора в d -вимірному просторі

$$y(n) = [s(n), s(n + \tau), s(n + 2\tau), \dots, s(n + (d-1)\tau)], \quad (2.5)$$

можна одержати необхідні координати. В нелінійної системі $s(n + j\tau)$ – деяка

(невідома) нелінійна сукупність реальних фізичних змінних. Надалі такий підхід був розвинений в роботі Соєра і ін. [113]. Те, що така методика цілком задовільно працює, можна побачити на прикладі класичного аттрактора Лоренца, показаного в роботі Аббарбанель та ін. [115].

2.3.1 Вибір часової затримки.

Положення теореми вкладення Мане і Тейкенса [116,117], що допустима будь-яка часова затримка, не завжди застосовно в конкретному випадку. Якщо τ занадто мало, то координати $s(n + j\tau)$ і $s(n + (j+1)\tau)$ будуть так близькі один до одного, що їх не можна буде розрізнити одна від іншої.

Аналогічно, якщо τ занадто велике, то $s(n + j\tau)$ і $s(n + (j+1)\tau)$ будуть повністю незалежні один від одного в статистичному сенсі і проекції орбіт на аттрактор будуть спрямовані за двома абсолютно не пов'язаним напрямками. Тому необхідно вибрати якесь проміжне положення між двома згаданими випадками.

Першим підходом для вибору τ може бути розрахунок лінійної автокореляційної функції

$$C_L(\delta) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [s(m + \delta) - \bar{s}][s(m) - \bar{s}]}{\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [s(m) - \bar{s}]^2}, \quad (2.6)$$

де

$$\bar{s} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N s(m),$$

і знаходження часової затримки, на якій $C_L(\delta)$ перший раз переходить через якась значення, що дає цілком допустиме, в принципі, значення τ , при якому $s(n + j\tau)$ і $s(n + (j+1)\tau)$ лінійно незалежні.

Однак лінійна незалежність двох змінних не означає, що ці змінні незалежні нелінійно, так як нелінійна взаємозв'язок між ними може бути більше лінійною.

Тому переважніше застосовувати підхід, в якому використовується нелінійне поняття незалежності, а саме, середню взаємну інформацію.

Коротко, концепцію взаємної інформації можна описати таким чином. Нехай є дві системи A і B з результатами вимірювань a_i і b_k . Кількість бітів, яке можна дізнатися про виміри a_i за вимірюваннями b_k задається параметрами теорії інформації [118], як

$$I_{AB}(a_i, b_k) = \log_2 \left(\frac{P_{AB}(a_i, b_k)}{P_A(a_i)P_B(b_k)} \right), \quad (2.7)$$

де $P_{AB}(a_i, b_k)$ – загальна щільність розподілу ймовірності, а $P_A(a_i)$ и $P_B(b_k)$ – граничні щільності розподілу ймовірності для систем A і B , відповідно. Взаємна інформація є ненегативною, симетричною і дорівнює нулю тільки тоді, коли системи незалежні [118,214].

Середня взаємна інформація між вимірами будь-яких значень a_i системи A і b_k системи B – це середня величина по всіх можливих вимірах від $I_{AB}(a_i, b_k)$, тобто

$$I_{AB}(\tau) = \sum_{a_i, b_k} P_{AB}(a_i, b_k) I_{AB}(a_i, b_k). \quad (2.8)$$

Щоб застосувати останнє визначення в контексті деякої фізичної системи, замінимо систему A вимірами $s(n)$, а систему B – вимірами через певну часову затримку $s(n + \tau)$. Тоді середня кількість інформації про $s(n + \tau)$, яка мається під час вимірювань $s(n)$, буде

$$I(\tau) = \sum_{n=1}^N P(s(n), s(n + \tau)) \log_2 \left(\frac{P(s(n), s(n + \tau))}{P(s(n))P(s(n + \tau))} \right). \quad (2.9)$$

Тепер, як і у випадку з автокорреляційною функцією, потрібно визначити ту величину $I(\tau)$, яка б підходила для вибору часової затримки τ . Якщо τ занадто

мало, вимірювання $s(n)$ і $s(n + \tau)$ містять так багато інформації один про одного, що немає необхідності робити обидва виміри. Якщо τ велике, то $I(\tau)$ буде прагнути до нуля, і ніщо не буде пов'язувати $s(n)$ и $s(n + \tau)$, а це також не є кращим вибором. Фрейзер і Суїнні [119] рекомендували (і показали на прикладах) використовувати як τ значення, при якому $I(\tau)$ досягає свого першого локального мінімуму.

2.3.2 Вибір розмірності вкладення.

Метою визначення розмірності вкладення є відновлення настільки великого Евклидова простору R^d , щоб весь ряд точок розмірності d_A міг бути розгорнутий без будь-якої невизначеності. Згідно з положеннями теореми вкладення важливо мати таку розмірність d_E , щоб вона була більше d_A , тоді як вибір $d_E < d_A$ неприйнятний в кожному разі. Іншими словами, не потрібно шукати розмірність d_A , а можна взяти якусь завідомо більшу розмірність d_E . Наприклад, у разі низькорозмірні хаосу можна априорі задати розмірність вкладення 10 або навіть 15, що з точки зору математики буде цілком прийнятно. Однак при цьому виникають дві проблеми. По-перше, більшість даних вимагають перебору варіантів при комп'ютерних розрахунках в просторі R^d , і машинний час експоненціально зростає залежно від розмірності вкладення. По-друге, у присутності шуму або інших високочастотних компонентів у часових рядах, в «додаткові» розмірності, не обумовлені динамікою системи, потрапляють виключно високочастотні складові сигналу. Тому потрібно відшукати саме розмірність d_A .

Хоча методик, що дозволяють відновити розмірність аттрактора досить багато, найбільш ефективними, на наш погляд, слід вважати дві.

Перша методика, звана методом кореляційної розмірності, є однією з найбільш широко використовуваних при дослідженні наявності хаосу в часових рядах. Цей метод використовує кореляційний інтеграл функції $C(r)$ для того, щоб знайти відмінності між хаотичними і стохастическими системами. Для розрахунку

кореляційного інтеграла найбільш часто використовується алгоритм Грассбергера-Прокаччі [121], відповідно до якого

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N(n-1)} \sum_{\substack{i,j \\ (1 \leq i < j \leq N)}} H(r - \| \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j \|), \quad (2.10)$$

де H – ступінчаста функція Хевісайда, $H(u) = 1$ для $u > 0$ та $H(u) = 0$ для $u \leq 0$;

r – радіус сфери з центром в \mathbf{y}_i або \mathbf{y}_j ;

N – довжина часового ряду.

Якщо часовий ряд характеризується аттрактором, то кореляційний інтеграл $C(r)$ співвідноситься з радіусом r за допомогою

$$d_2 = \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}, \quad (2.106)$$

де d_2 – кореляційний розмірність, яку можна визначити як нахил лінії в координатах $\log C(r)$ і $\log r$ за допомогою середньквдратического підбору прямої лінії в деякому діапазоні r , званому діапазоном масштабування.

Якщо кореляційний розмірність досягає насичення на деякому значенні розмірності вкладення, то це сигналізує про елементи хаосу. Значення кореляційної розмірності, при якому вона досягає насичення, визначається як кореляційний розмірність аттрактора (d_A). Найближче ціле число більше, ніж d_2 , дає оптимальну (необхідну) розмірність вкладення d_E для реконструкції фазового простору або кількості змінних, необхідних для моделювання динаміки системи.

З іншого боку, якщо кореляційний розмірність необмежено збільшується з ростом розмірності вкладення, динаміка системи розглядається як стохастична. В першому випадку, тобто якщо кореляційна розмірність досягає насичення на деякому значенні розмірності вкладення, то в системі реалізується феномен хаосу, який характеризується при розгляді динаміки і спектроскопії квантових систем

асоціюється з появою своєрідного «спектрального аттрактора».

Зазначимо, що цей термін вперше введений в спільній роботі Глушкова А.В., Хецеліус О.Ю., Свинаренко А.А, і автора [213,214]. Говорячи концептуально, новий підхід до пошуку проявів хаосу в квантових спектрах може бути зведений фактично до чисельного аналізу особливостей і стати-стіки спектрів станів (резонансів) на основі концепції геометричного аттрактора з відновленням спектрального фазового простору.

Паралельно з використанням методу кореляційної розмірності з метою забезпечення надійності моделювання та прогнозування представляється доцільним використання також і алгоритму помилкових найближчих сусідніх точок. Надалі цей підхід використовується нами для того, щоб визначити розмірність вкладення для реконструкції фазового простору, а також перевірити результати, отримані за методом кореляційної розмірності.

Суть цього методу ґрунтується в пошуку відповіді на ключове питання теореми вкладення: коли буде виключено помилкове перетин орбіти самої себе внаслідок проекції аттрактора в простір занадто низькою розмірності. Іншими словами, потрібно визначити, коли точки в розмірності d є найближчими сусідами самих себе. Якщо досліджувати цю проблему в розмірності $d = 1$, потім – $d = 2$ і т.д. поки не залишиться помилкових найближчих сусідніх точок, то можна встановити, ґрунтуючись тільки на геометричному розгляді аттрактора, значення необхідної розмірності вкладення $d_E = d_N$.

В розмірності d кожен вектор

$$\mathbf{y}(k) = [s(k), s(k + \tau), s(k + 2\tau), \dots, s(k + (d-1)\tau)] \quad (2.11)$$

має найближчий сусідній вектор $\mathbf{y}^{NN}(k)$. Евклідова відстань в розмірності d між векторами $\mathbf{y}(k)$ і $\mathbf{y}^{NN}(k)$ назовемо $R_d(k)$:

$$R_d^2(k) = [s(k) - s^{NN}(k)]^2 + [s(k + \tau) - s^{NN}(k + \tau)]^2 + \dots + [s(k + \tau(d-1)) - s^{NN}(k + \tau(d-1))]^2. \quad (2.12)$$

Мабуть, $R_d(k)$ мало для випадку великої кількості даних N і має порядок $1/N^{1/d}$. В розмірності $d+1$ це відстань змінюється внаслідок $(d+1)$ -х координат $s(k + d\tau)$ и $s^{NN}(k + d\tau)$, а вираз для нього має наступний вигляд

$$R_{d+1}^2(k) = R_d^2(k) + [s(k + d\tau) - s^{NN}(k + d\tau)]^2. \quad (2.13)$$

Переходячи від розмірності d до розмірності $d+1$, можна визначити якусь межеву величину R_T , до якої сусідні точки є помилковими. Тоді, якщо

$$\frac{|s(k + d\tau) - s^{NN}(k + d\tau)|}{R_d(k)} > R_T, \quad (2.14)$$

найближчі сусідні точки в момент часу k є помилковими. Як було показано раніше [125,214], для значень R_T в діапазоні $10 \leq R_T \leq 50$ число помилкових сусідніх точок, що визначаються цим критерієм, постійно.

На практиці, визначається відсотковий вміст помилкових найближчих сусідніх точок і в якості d_N береться те значення, при якому цей відсотковий вміст майже дорівнює нулю.

2.4 Класифікація часового ряду

Коли фазовий простір відновлено для часового ряду, можна спробувати відповісти на питання про те, яка фізична першопричина відповідної поведінки системи. У випадку з лінійною системою можна застосувати Фур'є-аналіз, за результатами якого в якості характеристик фізичної системи можна використовувати максимуми спектра. При цьому, якщо такий аналіз здійснювати,

починаючи з різних точок у часі, то фаза сигналу через міняється, а положення піків спектрі – ні. Тому частотні характеристики лінійного сигналу можна розглядати як інваріанти динаміки і по ним порівнювати два різних часових ряду.

Для нелінійної системи з хаотичним режимом використовувати спектральні характеристики проблематично, тому необхідно вибрати якісь інші інваріанти, які не повинні змінюватися в процесі динаміки системи і для яких повинно виконуватися умова їх незмінності при невеликих змінах початкових умов. Серед цих інваріантів є топологічні (різні фрактальні розмірності) і динамічні (локальні і глобальні розмірності Ляпунова). Останні дуже корисні при розгляді фізики процесу і, до того ж, визначають передбачуваність нелінійної системи. Строго кажучи, для хаотичних систем орбіти непередбачувані, що пов'язано з нестійкістю в фазовому просторі. Однак, існує обмежена передбачуваність хаотичного руху фізичної системи, обумовлена глобальними і локальними розмірностями Ляпунова, які можна визначити, ґрунтуючись тільки на даних вимірювань.

Однією з ознак хаотичного режиму є сприйнятливість будь орбіти до невеликих змін початкових умов або малих збурень, які виникають вздовж орбіти. Внаслідок цієї сприйнятливості, безпосередньо порівнювати дві орбіти нелінійної системи один з одним недоречно, оскільки в загальному випадку вони повністю некорреліровані. Однак аттрактор буде один і той же. Він не залежить від початкових умов і тому може розглядатися як аналог частотних характеристик Фур'є в разі лінійної системи.

Використання тільки топологічних або тільки динамічних інваріантів для того, щоб охарактеризувати аттрактор, навряд чи дасть «повний» набір інваріантів, тому необхідно використовувати їх разом. Одна з фрактальних розмірностей – кореляційний – була описана раніше, а в цьому підрозділі розглядаються розмірності Ляпунова.

Концепція розмірностей Ляпунова існувала задовго до створення теорії хаосу і була розроблена для визначення стійкості лінійних і нелінійних систем. Розмірності Ляпунова визначаються як логарифми абсолютних величин власних значень лінеаризованної динаміки, осередненої по аттрактору. Негативні

розмірності вказують на локальну середню швидкість стиснення, а позитивні – розширення системи.

В теорії хаосу спектр розмірностей Ляпунова розглядається як захід впливу збурень початкових умов динамічної системи. Відзначимо також, що в диссипативній системі, якою є і хаотична, одночасно існують як позитивні, так і негативні (визначальні диссипативність) розмірності.

Так як розмірності Ляпунова визначаються як асимптотические середні швидкості, вони не залежать від початкових умов і вибору траєкторії, тому вони і розглядаються як інваріантні заходи аттрактора. Якщо отримати весь спектр розмірностей Ляпунова, то можна визначити інші інваріанти системи – ентропію Колмогорова і розмірність аттрактора.

Перший з цих інваріантів є середньою швидкістю, при якій інформація про стан не зберігається з плином часу, тобто є мірою передбачуваності, і може бути розрахований як сума всіх позитивних розмірностей Ляпунова [125]. Оцінка розмірності аттрактора забезпечується гіпотезою Каплана і Йорка [127]:

$$d_L = j + \frac{\sum_{\alpha=1}^j \lambda_{\alpha}}{|\lambda_{j+1}|}, \quad (2.15)$$

де j вибирається таким, що $\sum_{\alpha=1}^j \lambda_{\alpha} > 0$ і $\sum_{\alpha=1}^{j+1} \lambda_{\alpha} < 0$, а розмірності Ляпунова λ_{α} приведені в низхідному порядку.

Розглянемо далі метод розрахунку спектра розмірностей Ляпунова на основі якобіана відображення.

Зміни з часом вектора $y(n)$ визначаються векторним рівнянням

$$y(n+z) = \mathbf{F}(y(n+z)), \quad (2.16)$$

де \mathbf{F} – деяка, як правило, нелінійна векторна функція. Еволюція невеликих зсувів векторів в дотичному просторі визначається лінеаризованим рівнянням

$$\delta \mathbf{y}(n+z) = D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n)) \cdot \delta \mathbf{y}(n), \quad (2.17)$$

де $D\mathbf{F}$ – якобіан \mathbf{F} . Припустимо, що ми починаємо рухатися від якоїсь точки в фазовому просторі по орбіті, яка проходить через цю точку. Через S кроків за часом початкове обурення зросте (або зменшиться) до

$$\delta \mathbf{y}(n+Sz) = D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n+(S-1)z)) \dots D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n)) \cdot \delta \mathbf{y}(n) = \mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S) \delta \mathbf{y}(n). \quad (2.18)$$

Оселедець [127] довів важливу мультипликативну ергодичну теорему, в якій продемонстрував, що власні значення ортогональної матриці $\mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S) \cdot \mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S)^T$ такі, що

$$\lim_{S \rightarrow \infty} \left[\mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S) \cdot \mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S)^T \right]^{1/2S} \quad (2.19)$$

існує і має власні значення $e^{\lambda_1}, e^{\lambda_2}, \dots, e^{\lambda_d}$ для d -мірної динамічної системи, яка не залежить від $\mathbf{y}(n)$ майже для всіх $\mathbf{y}(n)$ всередині області тяжіння аттрактора. Тут λ_i і ϵ , як раз, розмірностями Ляпунова.

Тепер завдання полягає в тому, щоб на основі відновленого фазового простору чисельно оцінити якобіани $D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n))$ в околиці кожної точки орбіти, а

Щоб оцінити приватні похідні в фазовому просторі необхідно використовувати інформацію про сусідніх точках кожної точки орбіти на аттракторе. Концепція полягає в тому, щоб створити локальні відображення всіх точок в околиці точки $\mathbf{y}(n)$ на їх відображене зображення в околиці точки $\mathbf{y}(n+1)$. Таке відображення можна зробити локально лінійно, як, наприклад, в методі Сано і Савадо [128], хоча такий підхід дає точний розрахунок тільки найбільшого показника Ляпунова.

Вирішення цієї проблеми може бути отримано, якщо взяти до уваги сімейство відображень від околиці до околиці і потім витягти якобієву матрицю з

такого відображення. Це означає, що локально в просторі станів, тобто поблизу точки $\mathbf{y}(n)$ на аттракторі, динаміка $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{F}(\mathbf{x})$ апроксимується за допомогою

$$\mathbf{F}_n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^M \mathbf{c}_n(k) \phi_k(\mathbf{x}) \quad (2.20)$$

де $\phi_k(\mathbf{x})$ – множина деяких базисних функцій.

Коефіцієнти $\mathbf{c}_n(k)$ визначаються підбором за методом найменших квадратів, мінімізуючи різниці для взятого ряду сусідніх точок $\mathbf{y}(n+1)$ до ряду сусідніх точок $\mathbf{y}(n)$. Тоді чисельна апроксимація до локального якобіану є результатом диференціювання цього наближеного локального відображення.

Крім обчислення показників Ляпунова, ентропії Колмогорова, зрозуміло, важливою і корисною характеристикою виявлення хаосу в системі є оцінка спектра потужності. Розглянемо далі декотрі спектральні засоби дослідження феномену квантового хаосу, які доповнюють викладений апарат.

2.5 Спектральні засоби дослідження параметрів хаосу.

Статистика енергетичного спектра

В динаміці квантових систем, у тому числі, дослідженнях з квантового хаосу, більш привичними у порівнянні із викладеним вважаються так звані спектральні засоби. Слід зауважити, що перші кроки у розробці такого апарату дослідження хаосу насправді прийшли із теорії складних ядер. Фактично, основою дослідження статистики енергетичного спектра квантових хаотичних систем з'явилася статистична теорія спектрів, розвинена для опису структури спектра складних ядер. Бібліографія основних робіт по статистичній теорії спектрів міститься в оглядах, присвячених статистиці енергетичного спектра в зв'язку з проблемою квантового хаосу; (див. [1-3,11-20]). Названа теорія досліджує властивості розподілу власних значень для матриць з випадковими елементами, належать певним статистичним ансамблям. В останні роки було встановлено, що

висновки статистичної теорії справедливі так же для спектрів навіть складних атомів і дво-трьох- багато-атомних молекул.

Основною передумовою застосування методів і моделей статистичної теорії спектрів до опису квантової хаотичної системи є уявлення про складний, псевдовипадковий склад енергетичного спектра. Це якісно узгоджується і з відомим уявленнями, а саме: якщо становище рівнів складним чином змінюється при зміні параметрів гамільтоніана, то детальний опис системи рівнів не представляє фізичного інтересу. Важливіше виявляються стійкі усереднені характеристики системи рівнів. Таким чином, дослідження статистики енергетичного спектра використовує друге рішення альтернативи, трактуючи квантовий хаос як властивість групи станів.

Розповсюдженою характеристикою структури енергетичного спектра є функція розподілу відносної величини міжрівневих відстаней S_n :

$$S_n = (E_n - E_{n-1})\rho(E_n), \quad (2.21)$$

де $\rho(E)$ - щільність рівнів .

Звичайно передбачається, що $\rho(E)$ мало змінюється на відстанях порядку між рівневого:

$$d \ln \rho(E)/dE \ll 1;$$

До речі, ця умова звичайно виконується в квазікласичному випадку. Функція розподілу $P(S)$ випадкової величини S унормована умовами:

$$\int_0^{\infty} P(S) dS = 1, \quad \int_0^{\infty} SP(S) dS = 1.$$

Якщо положення рівнів не корельовано, то $P(S)$ дається розподілом Пуассона $P_p(S) = \exp(-S)$, якщо в системі має місце хаос тоді реалізується розподіл Вігнера (у загальному виді - розподіл Броді; дивись рис.1.4).

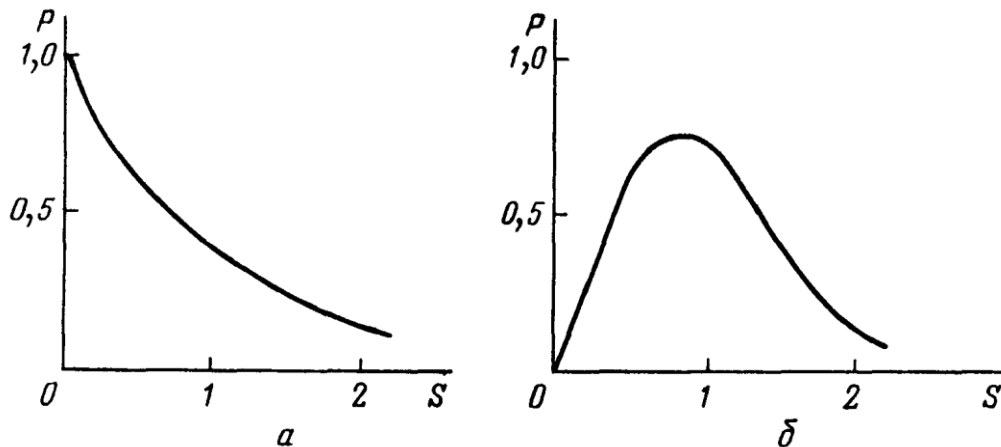


Рисунок 2.1 - Граничні форми розподілу міжрівневих Рис. 8. Предельні форми розподілу міжрівневих відстаней $P(S)$: розп. Пуассона (а); розп.Вігнера (б)

Також характеристикою ступеня впорядкованості рівнів в спектрі на великих в порівнянні з міжрівневою відстанню є спектральна жорсткість $\Delta_3(L)$. Звичайно для послідовності рівнів ε_n , нормованих на одиничну щільність ($\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + S_n$), вводиться ступінчаста функція $n(\varepsilon)$, рівна числу рівнів з $\varepsilon_n \leq \varepsilon$. За побудовою $n(\varepsilon)$ має вигляд сходів з одиничним в середньому нахилом. Функція $\Delta_3(x, L)$ визначається як мінімум квадратичного відхилення $n(\varepsilon)$ на інтервалі $(x, x + L)$ від прямої лінії :

$$\Delta_3(x, L) = \frac{1}{L} \min_{A, B} \int_x^{x+L} (n(\varepsilon) - A\varepsilon - B)^2 d\varepsilon \quad (2.22)$$

Значення $\langle \Delta_3(x, L) \rangle$, усереднене за значеннями x з області, в якій характер флуктуації спектра можна вважати незмінним, залежить тільки від L і позначається $\Delta_3(L)$. Функція $\Delta_3(L)$ описує впорядкованість спектра на великих ділянках: чим повільніше росте $\Delta_3(L)$ з ростом L , тим менш вірогідні в спектрі тісні кластери рівнів і лакуни зі зниженою щільністю рівнів. Для еквідистантної послідовності рівнів $\Delta_3(L) = 1/12$. Для випадково розподілених, некорреліованих рівнів $\Delta_3(L) = L/15$.

Ще один набір параметрів, що характеризують структуру енергетичного спектра, дається коефіцієнтами кореляції $C(n)$ величин енергетичних інтервалів, розділених фіксованим числом рівнів :

$$C(n) = \frac{\sum_i (s_{i-n}-1)(s_i-1)}{[\sum_i (s_{i+n}-1)^2 \sum_i (s_i-1)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (2.23)$$

Накінець, також зауважимо, що широку популярність у спектральних дослідженнях квантового хаосу (особливо з точки зору механізму перекриття та злиття резонансів) одержав відомий критерій хаосу Чірікова, а саме перекриття нелінійних резонансів як відношення суми напівширин резонансів до відстаней між ним $K = [(\Gamma_1/2) + (\Gamma_2/2)] / |E_2 - E_1|$. Вважається що при достатньо великих значеннях ($K \geq 4$), в системі реалізується розвинута хаотичність (див. докладніше, напр., [11,18]). Слід відзначити, що хоча, перелічені характеристики завжди корисно розраховувати у випадку складних атомно-молекулярних систем, до самого останнього часу спектральні засоби практично не використані в адекватній мірі у сучасних дослідженнях спектральної динаміки атомних систем.

2.6 Новий хаос-геометричний підхід до побудови моделі прогнозу еволюції динамічної системи

Основна ідея побудови нашої моделі прогнозування хаотичних властивостей складних систем полягає у використанні традиційної концепції компактного геометричного аттрактора, на якому еволюціонують дані вимірювань, плюс імплементація нейромережових алгоритмів. Існуючі на сьогодні в теорії хаосу моделі прогнозу ґрунтуються саме на концепції аттрактора і описані в цілому ряді робіт (див., наприклад, [1-3,11-20, 57-64,211-220]). Сенс концепції полягає фактично в вивченні еволюції аттрактора в фазовому просторі системи і в певному сенсі моделювання («вгадування») часової еволюції. З математичної точки зору [16], мова йде про те, що в фазовому просторі системи деяка орбіта безперервно

згортається на саму себе внаслідок дії дисипативних сил і нелінійної частини динаміки, тому виявляється можливим знаходження в околиці будь-якої точки орбіти $\mathbf{y}(n)$ інших точок орбіти $\mathbf{y}^r(n)$, $r = 1, 2, \dots, N_B$, які прибувають в околицю $\mathbf{y}(n)$ в повністю розрізняються часи, відмінні від n . Зрозуміло, далі можна намагатися будувати різні види інтерполяційної функції, які враховують всі околиці фазового простору і одночасно пояснюють як ці околиці еволюціонують від $\mathbf{y}(n)$ до всьому сімейству точок близько $\mathbf{y}(n + 1)$. Використання інформації про фазовий просторі при моделюванні еволюції деякого геофізичного (екологічного тощо) процесу в часі може розглядатися як фундаментальний елемент у моделюванні хаотичних процесів. С точки зору сучасної теорії нейронних систем і нейроінформатики (див., наприклад, [173]) процес моделювання еволюції системи можна описати деяким узагальненими еволюційними динамічними нейроуравненнями (рівняннями міємодінаміки). Імітуючи далі процес еволюції складної системи як еволюції відповідної нейромережі з елементами самонавчання, самоадаптації і т.д., виникає можливість суттєвого поліпшення якості прогнозування еволюційної динаміки хаотичної системи. Розглядаючи нейросеть (в нашому випадку, доречний термін «геофізична» нейросеть) з певним числом нейронів, як звичайно, можна ввести в розгляд синаптичні оператори S_{ij} нейрона u_i на нейроне u_j , причому відповідна синаптична матриця зводиться до числової матриці сил синаптичних зв'язків: $W = \|w_{ij}\|$. Оператор активації описується стандартним нейроуравненням, визначальним формально еволюцію нейромережі у часі:

$$s'_i = \text{sign}\left(\sum_{j=1}^N w_{ij} s_j - \theta_i\right), \quad (2.24)$$

де $1 < i < N$.

Зрозуміло, можливі й більш складні варіанти запису рівнянь еволюції нейромережі. Для нас принциповим є інший доведений факт, пов'язаний з інформаційним поведінкою нейродинамічної системи. З точки зору теорії

хаотичних динамічних систем, стан нейрона (хаос-геометрична інтерпретація сил синаптичного взаємодії і т.д.) можуть бути зображені струмами в фазовому просторі системи, топологічна структура якого визначається, очевидно, числом і положенням аттракторів.

Для визначення асимптотичної поведінки системи принципово важливим стає інформаційний аспект проблеми, а саме, факт приналежності її початкового стану до басейну тяжіння певного аттрактора. Моделюючи кожен геофізичний аттрактор деякій записом в пам'яті, процес еволюції нейросистеми, тобто переходу з початкового стану в (наступні) кінцевий стан являє собою модель реконструкції по спотвореній інформації повного запису, тобто модель асоціативного розпізнавання образу.

Області тяжіння різних аттракторів при цьому розділені сепаратриси, тобто певними поверхнями в фазовому просторі, структура яких, зрозуміло, є досить складною, однак імітує властивості досліджуваного хаотичного об'єкта. Тоді, як звичайно, наступний природний крок полягає в побудові параметризованих нелінійних функції $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{a})$, які перетворюють $\mathbf{y}(n)$ в $\mathbf{y}(n + 1) = \mathbf{F}(\mathbf{y}(n), \mathbf{a})$, а потім використовувати різні, в тому числі, нейромережеві критерії для визначення параметрів \mathbf{a} (див. нижче). Найпростіше цю програму реалізувати, розглядаючи спочатку локальні околиці, тобто вводити модель (моделі) процесу, що відбувається в околиці, по самій околиці і, комбінуючи разом ці локальні моделі, конструюючи далі глобальну нелінійну модель, що описує більшу частину структури самого аттрактора.

Хоча, згідно з класичною теоремою Колмогорова-Арнольда-Мозера, динаміка еволюціонують в багатовимірному просторі, розмір і структура якого зумовлюється початковими умовами, це, однак, не дає вказівки функціонального вибору модельних елементів в повній відповідності з джерелом хаотичних даних. Однак дані не дають «підказки» відносно того, яку модель вибрати, щоб вона відповідала джерелу хаотичних даних. І найпростіші поліноміальні моделі, і дуже складні комплексні моделі можуть привести до асимптотическим в часі орбітах з дивним аттракторам, тому за частину моделювання – зв'язок з фізикою –

відповідальність несе дослідник. Тому фізика «зводиться» до алгоритмічної підгонці даних без будь-якої інтерпретації цих даних. Ріссанен припустив [129], що, швидше за все, не існує алгоритмічного рішення того, як вибрати модель по одним лише даним.

Однією з найбільш поширених форм локальної моделі є модель типу моделі Шрейбера [19] (див. також [212-214]) яка в узагальненому нами варіанті має вигляд

$$s(n + \Delta n) = a_0^{(n)} + \sum_{j=1}^{d_A} a_j^{(n)} s(n - (j-1)\tau), \quad (2.25)$$

де Δn – часовий інтервал, на який дається прогноз.

Коефіцієнти зазвичай намагаються визначити на основі того чи іншого методу варіаційного обчислення, зокрема, в найпростішому варіанті це можна зробити методом найменших квадратів, враховуючи тільки ті точки, які знаходяться всередині околиці невеликих розмірів точки $s(n)$. Зрозуміло, тоді коефіцієнти будуть змінюватися по всьому фазового простору, а процедура підгонки фактично еквівалентна рішенням $(d_A + 1)$ лінійних рівнянь з $(d_A + 1)$ невідомими. Доречно нагадати, що в цьому випадку дані, які використовуються при підгонці, зазвичай охоплюють локально не всі доступні розмірності, а тільки якесь підпростір. Природно, тоді ясно, що лінійна система підгінних рівнянь погано обумовлена, і, крім того, при наявності шуму в принципі можуть виникнути «нефізичні» рішення, що відносяться до «напрямку» шуму до майбутніх точок.

2.7 Приклад нейросетевой реалізації моделювання і розпізнавання складного паттерна

В цьому підрозділі ми представимо модельні результати використання нейронних мереж (НМ) для моделювання і розпізнавання складних образів. Детальний аналіз сучасного стану теорії та практичних додатків, нейронних мереж

представлений, наприклад, в [173,214], де в тому числі розглянуті і багато ключових питань, що мають відношення до їх основних динамічних параметрам, моделям функціонування.

Серед невирішених завдань вкрай важливим є завдання моделювання динаміки НМ систем з подачею на вхід системи складних нелінійних сигналів, в тому числі і зашумлених патернів.

Нейронна мережа, її характеристики. Основні аспекти використовуваної нами надалі нейромережі на основі фотонного відлуння викладені, зокрема, в роботах [173,212,263,264]. Принципова схема нейромережі для обробки послідовності образів y^1, \dots, y^p має наступний вигляд: $\{\downarrow \text{Вхід} \rightarrow \text{Накопичувальна матриця } F1 \rightarrow \rightarrow \text{Корреляційна область} \rightarrow \text{Накопичувальна матриця } F2 \rightarrow \text{Вихід} \rightarrow \text{Порогове устройство} \rightarrow \uparrow\}$.

Перший імпульс має рівну одиниці амплітуду на всій площині середовища, другий визначає вектори пам'яті, що надходять у вигляді вертикальних стовпців і забезпечують нагромадження в середовищі матриць пам'яті $F_1 = F_2$ розміром $(N \cdot p)$, а третій імпульс, амплітуда якого визначається розпізнаванням одновимірним чином, надходить на вхід системи і рівномірно розподіляється по середовищі в горизонтальному напрямку. В результаті виникають стимульовані луна-сигнали, які збираються оптично в горизонтально розташований одновимірний масив в кореляційної області.

На першому етапі обчислюються внутрішні твори між вхідним вектором і векторами пам'яті. Вираз для амплітуди сигналу стимульованого фотонного відлуння має класичний вид $u(m) \sim \sum_j y_j^m y_j^{in}$. Внутрішні твори зважують накопичені в матриці F2 відповідні вектори пам'яті $u(m) \sim \sum_j y_j^m y_j^{in}$. Ця операція також призводить до виникнення сигналів стимульованого еха, які далі сумуються, приводячи до одновимірного розподілу з амплітудою

$$s_i \sim \sum_m u(m) y_{ii}^m = \sum_m (y_i^m) \sum_j y_j^m y_j^{in}.$$

Шукані співвідношення, а також порогові перетворення і зворотний зв'язок визначають динаміку НМ з хеббовської матрицею зв'язку. Один з важливих переваг реалізації НМ, заснованої на ефекті фотонної луни, є можливість заміни дозволу образів пам'яті в просторі дозволом в часі. В результаті це призводить до можливості обробки 2D-масивів. Облік ефекту запізнювання виробляється в рамках стандартної схеми (див. [173]).

Розроблений нами програмний комплекс НМ моделювання володіє наступними ключовими характеристиками: багат шаровість, можливість введення навчання, зворотного зв'язку і контрольованих шумів. Відповідна НМ є нелінійною N-шаровою мережею, що складається з входу, прихованих і вихідних шарів (див. деталі в [214,264]). Кожен шар складається з n_k вузлів і послідовних шарів $(k-1, k)$, з'єднаних за допомогою масивів ваг $(w_{i,j}^k)$. Спочатку НМ навчається на досить великій вибірці репрезентативних даних. Мета навчання – оптимізація ваг на основі помилки між очікуваним і розрахованим виходами. Шуканий процес базується на використанні алгоритму зворотного поширення помилки із застосуванням до послідовності $(N+1)$ -елементів (наприклад, послідовності радарних зображень полів об'єктів). Значення величин опадів містяться в усіх n_0 пікселях зображень полів об'єктів представляють собою вхідний вектор. В табл. 1 наведені використані в справжній моделі дані.

Таблиця 2.1 - Дані про вектори, використаних в справжній моделі

| Шари | Позначення | Інтервал | Розмір |
|------------------|------------|-------------------|--------------------|
| 1 вхідний шар | y_i^0 | $i=1, \dots, n_0$ | $n_0=n \times 100$ |
| 2 захований шар | y_i^1 | $i=1, \dots, n_1$ | $n_1=300$ |
| 3 вихідний шар | y_i^2 | $i=1, \dots, n_2$ | $n_2=1 \times 100$ |
| Очікуваний вихід | y_i^3 | $i=1, \dots, n_3$ | $n_3=1 \times 100$ |

Вектор y_i^0 перетвориться в вектор y_i^1 (прихований шар), який, в свою чергу, перетвориться у вихідний вектор y_i^2 . Обидва перетворення виконуються з використанням матриці ваг в відповідності з наступною формулою

$$y_i^k = f\left\{\sum_{j=1}^{n_k-1} w_{i,j}^k y_j^{k-1} + w_{i,0}^k\right\} \quad i=1,\dots,n_k; k=1,\dots,2; \quad (2.26)$$

У формулі (1.46) функції f є так званою функцією передачі, для визначення якої ми використовуємо функцію виду $f=1/[1+x^{b(D)}]$, де $b(D)$ є так званим оптимізаційним параметром (D-фрактальною розмірністю).

Вихідний вектор y_i^2 містить вихідний результат, тобто послідовність (N+1) патернів (об'єктних зображень). Ключовий далі є процедура порівняння отриманих вихідних результатів з очікуваними. Для цих цілей розраховується величина відхилення (помилки) $e_i^2 = y_i^3 - y_i^2$, $i=1,\dots,n_2$. На підставі даних про помилки, далі проводиться коригування всіх ваг для прихованого і вихідного шарів нейромережі наступним чином

$$\Delta w_{i,j}^2 = \alpha^2 e_i^2 (1 - y_i^2) y_i^2 y_j^1, \quad i=1,\dots,n_2; j=1,\dots,n_1. \quad (2.27)$$

де α^2 – параметр навчання. Далі помилки e_i^2 і кориговані ваги $w_{i,j}^k$ поширюються в зворотному напрямку для оцінки помилки попереднього шару

$$e_i^1 = (1/n_2) \sum_{j=1}^{n_2} e_j^2 w_{j,i}^2 \quad i=1,\dots,n_1. \quad (2.28)$$

Нарешті, по аналогії коригуються всі ваги між вхідним і прихованим шарами. Навчання проводиться, поки не буде виконано задане число ітерацій, чи не опанована задана точність. Коли процес навчання завершено, далі реалізується прогноз в 15-хвилинний інтервал вперед (N+1 елементів) з використанням послідовності N-елементів з відомими вагами. Якість моделювання перевіряється як на залежних (входять до навчальної вибірки), так і незалежних (не входять в

навчальну вибірку) даних. Модель, заснована на описаній неймережі, використовувалася нами в комп'ютерному експерименті з моделювання та розпізнаванню складних патернів. Зокрема, в якості вхідного брався зашумлений солитон-подібний імпульс виду

$$f(\tau) = |A_0|^2 \operatorname{ch}^{-1}(b\tau), \quad (2.29)$$

де A_0 и b – параметри імпульсу. В якості нейронної функції використана функція виду: $f(x) = 1/[1 + \exp(-\delta x)]$. Інші параметри вказані в [6-8]. На рис. 2.2 наведені результати роботи п'ятишарової неймережі, зокрема, результат комп'ютерного експерименту з вхідним імпульсом (2.29) з адитивним шумом інтенсивності D [2,5].

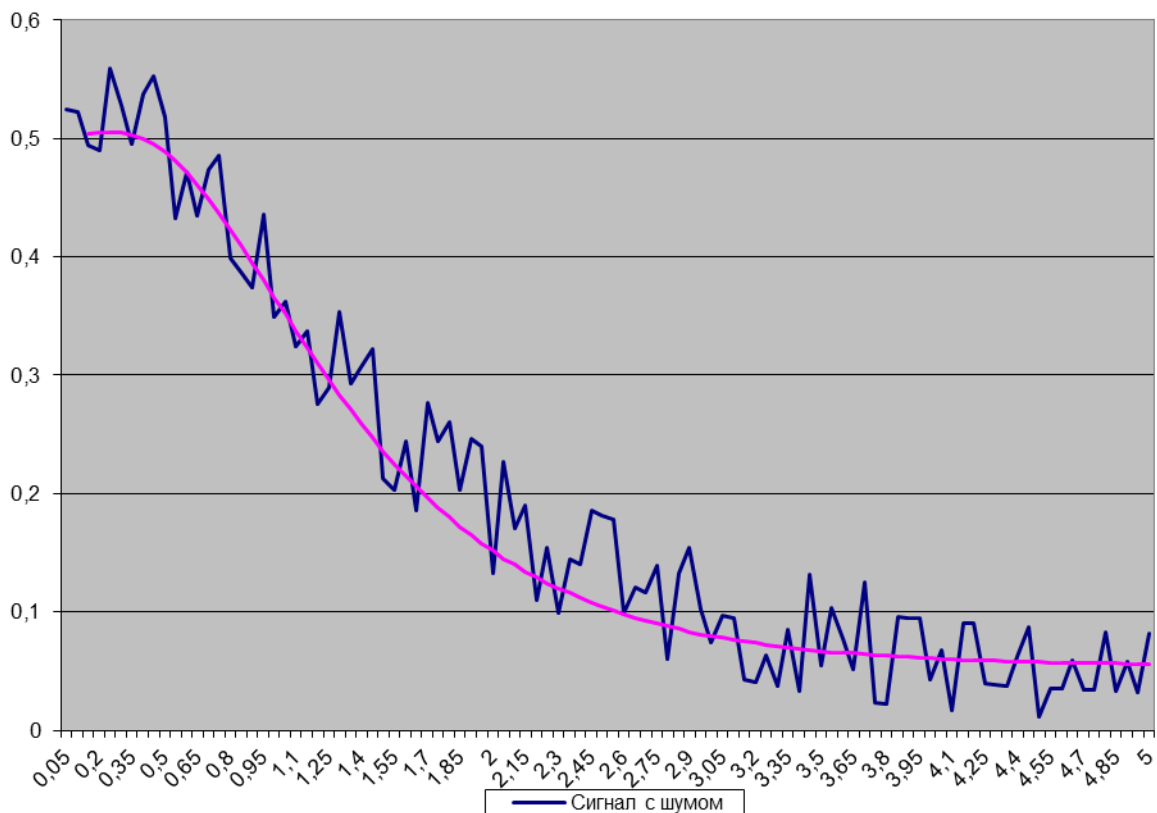


Рисунок 2.2 - Результат моделювання динаміки НМ для випадку зашумленої вхідний послідовності

При певному значенні параметра D (величина змінювалася в інтервалі 0.000-0.0050) процес навчання мережі та відтворення сигналу виявляється оптимальним. Когерентність входу і виходу опинялася оптимальної при певному рівні шуму. Шукане значення параметра D , при якому досягався оптимальний рівень, дорівнювало 0,0021; тобто фактично тут йдеться про можливість реалізації в системі режиму стохастичного резонансу [5,12]. Основний висновок полягає в тому, що використана НМ забезпечує прийнятний рівень обробки вхідних сигналів самої різної форми і складності.

2.8 Алгоритм хаос-геометричного і нейросетевого підходу до виявлення хаосу, аналізу та прогнозування нелінійної динаміки системи

У короткому викладі реалізація викладеного нами комплексного підходу до подальшого аналізу квантових і лазерних систем зводиться до наступного: а) перевірка на наявність хаотичного режиму (тест Готтвода і Мелбена, метод кореляційної розмірності); б) відновлення фазового простору (вибір часової затримки, визначення простору вкладення за методами кореляційної розмірності і алгоритму помилкових найближчих сусідніх точок); в) визначення динамічних інваріантів хаотичної системи (глобальні показники Ляпунова); г) прогноз еволюції системи.

На рисунку 2.3 представлений повний алгоритм роботи з часовим рядом з метою визначення наявності в ньому хаотичної динаміки та застосування до нього методу нелінійного прогнозу. Для чисельних розрахунків нами в подальшому використовується програмний комплекс "Geomath", відмінно зарекомендував себе при вивченні різних геофізичних та екологічних систем (див., наприклад, [205-220]). Використання інформації про фазовий просторі може розглядатися в якості однієї з принципово нових ідей при побудові глобальної нелінійної моделі аналізу і прогнозу квантових систем ефективного і точного опису структури відповідного спектрального аттрактора. Для відновлення фазового простору слід застосовувати

метод тимчасової затримки з допомогою автокореляційної функції або альтернативний метод взаємної інформації (див. [87]). Для відновлення розмірності аттрактора застосовуються метод кореляційного інтеграла і алгоритм



Рисунок 2.3 - Алгоритм розрахунку характеристик хаотичного часового ряду і застосування до нього методу нелінійного прогнозу

помилкових найближчих сусідніх точок.

Після відновлення фазового простору далі вивчається сприйнятливість будь-якої «спектральної» орбіти до невеликих змін початкових умов або малих збурень. Для того, щоб охарактеризувати аттрактор, слід обчислювати топологічні і динамічні інваріанти, тобто по суті одну з фрактальних розмірностей, скажімо, описану кореляційну, і так звані розмірності Ляпунова, знаючи які можна визначити інші інваріанти системи, наприклад, ентропію Колмогорова, розмірність аттрактора.

3. ЗАСТОСУВАННЯ ХАОС-КІБЕРНЕТИЧНИХ МЕТОДІВ ДО ДОСЛІДЖЕННЯ ДИНАМІКИ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ У КВАНТОВИХ (АТОМНИХ) СИСТЕМАХ У ЗОВНІШНІХ ПОЛЯХ

3.1 Вступ

У цьому розділі ми розглянемо елементи хаосу в динаміці нелінійних систем принципово різної природи, а саме, геофізичних (точніше, часової динаміки забруднення повітряного басейну промислового міста на прикладі Одеси), й квантових (точніше, мова йде про квантовий хаос у атомних системах у зовнішньому електромагнітному полі) систем. Як буде показано, наш універсальний хаос-кібернетичний підхід є дуже корисним та ефективним і при розв'язанні такого класу задач. Нами вперше в хаотичній динаміці квантових систем застосовується універсальний одноманітний квантово-динамічний, хаос-кібернетичний підхід для докладного кількісного вивчення квантового хаосу в динаміці ридбергівських атомів в мікрохвильовому полі, зокрема наведемо дані обчислень залежності квазіенергії як функції параметрів зовнішнього поля, ймовірності іонізації як функції частоти поля і отримаємо кількісну діаграму прояву ефектів квантових флуктуацій, стабілізації, дестабілізації, а також фрактальних властивостей і особливостей виконання теореми КАМ [22, 142-155].

Нагадаємо, що наш підхід одноманітно і одночасно включає низку нових квантово-динамічних моделей і низку нових або удосконалених відомих методів аналізу, зокрема, кореляційно-інтегрального аналізу, фрактального і вейвлет-аналізу, алгоритми середньої взаємної інформації, хибних найближчих сусідів, апарат аналізу на основі показників Ляпунова, ентропії Колмогорова, спектра потужності, алгоритм сурогатних даних, метод нелінійного прогнозу, передбачених траєкторій, нейромережеві алгоритми тощо для розв'язання задач

кількісного моделювання та аналізу хаотичних особливостей у динаміці нелінійних процесів в різних класах систем та приладів [22, 79, 106, 111, 120, 142-160].

3.2 Хаос-динамічний підхід до аналізу динаміки забруднення атмосфери промислового міста

В данному підрозділі ми викладемо результати застосування удосконаленого хаос-динамічного апарату нелінійного аналізу (моделювання, прогнозування) до аналізу часової динаміки варіацій концентрації атмосферних забруднювачів (діоксиди нітрогену та сірки) у повітряному басейні м. Одеса, що дозволить уточнити дані, отримані раніше. Для використання хаос-геометричного підходу в нашому аналізі використані моніторингові дані щодо часових рядів концентрацій діоксидів нітрогену та сірки у повітряному басейні м. Одеси за період з 1976 р по 2000р. (відповідні дані докладно викладені, напр., в [188]). Остаточо для аналізу використані багаторічні щогодинні значення концентрацій по обом забруднювачам на постах 8 та 10 (м.Одеса): 25x8760 точок даних). Перевірка на наявність хаосу у часовому ряді концентрацій забруднюючих речовин у атмосфері докладно представлена вище й узагальнює попередню методику [184-188].

В таблиці 3.1 наведено результати часових затримок, розрахованих для перших 1000 значень часових рядів даних. Автокореляційна функція перетинає нуль лише для часових рядів концентрації NO₂ для моніторингової точки №15, а для інших часових рядів ця статистика залишається позитивною. Значення, де автокореляційна функція досягає значення 0,1 може бути обрана як τ , однак у [1] показано, що атрактор не може бути адекватно реконструйований для дуже великих значень τ . Таким чином, перед тим, як зробити остаточне рішення ми розраховуємо розмірність атрактору для усіх значень з табл. 3.1

Отриманий результат пояснює не лише некоректні значення τ , але й недоліки методу кореляційної розмірності. Відсоток хибних найближчих сусідів є відносно великим для великих τ . Якщо часова затримка визначається усередненою

спільною інформацією, тоді алгоритм хибних найближчих сусідів дає величину $d_E = 6$ для усіх забруднювачів.

Таблиця 3.1 - Часові затримки для різних значень C_L , і перший мінімум усередненої спільної інформації $I_{\min 1}$ для часових рядів NO_2 , SO_2 в м. Одесі

| | NO_2 | SO_2 |
|--------------|---------------|---------------|
| $C_L = 0$ | — | — |
| $C_L = 0.1$ | 141 | 218 |
| $C_L = 0.5$ | 8 | 15 |
| $I_{\min 1}$ | 11 | 21 |

Табл. 3.2 демонструє розраховані параметри: кореляційну розмірність (d_2), розмірність вкладення (d_E), розмірність Каплана-Йорке (d_L), дві перші експоненти Ляпунова $E(\lambda_1, \lambda_2)$, і середню межу передбачуваності (Pr_{\max} , годин) для часових рядів NO_2 , SO_2 на моніторингових точках Одеси (січень 1976 - грудень 2000). Можна відзначити що розмірність Каплана-Йорка, яка також є розмірністю атрактора є меншою ніж розмірність, отримана за допомогою алгоритму хибних найближчих сусідів.

Таблиця 3.2 - Кореляційна розмірність (d_2), розмірність вкладення (d_E), розмірність Каплана-Йорка (d_L), дві перші експоненти Ляпунова $E(\lambda_1, \lambda_2)$, і середня межа передбачуваності (Pr_{\max} , годин) для часових рядів NO_2 , SO_2 на моніторингових точках м. Одеси (січень 1976 - грудень 2000)

| | NO_2 | SO_2 |
|-------------|---------------|---------------|
| λ_1 | 0.0185 | 0.0164 |
| λ_2 | 0.0058 | 0.0061 |
| d_2 | 5.28 | 1.62 |
| d_E | 6 | 6 |

| | | |
|-------------|------|------|
| d_L | 4.08 | 5.03 |
| Pr_{\max} | 40 | 45 |

Наявність двох (з шести) позитивних λ_i дає змогу припустити, що система розширюється вздовж двох осей і звужується за чотирма восьми у 6-вимірному просторі. Часові ряди SO_2 мають найбільшу передбачуваність (більше 2х діб), а передбачуваність інших часових рядів має меншу передбачуваність яка складає дещо менше 2х діб.

Ітак, ми представили ілюстративні дані щодо аналізу динаміки концентрацій атмосферних забруднювачів (діоксиди нітрогену та сірки) у повітряному басейні м. Одеси на основі хаос-дингамічного підходу. Для реконструкції відповідного атрактору системи численно визначені часова затримка за допомогою методів автокореляційної функції та усередненої спільної інформації і розмірність вкладення за допомогою методів кореляційної розмірності та алгоритму хибних найближчих сусідів. Розраховані кореляційна розмірність, розмірність Каплана-Йорка, показники Ляпунова, ентропія Колмогорова, середня межа передбачуваності і доказано існування елементів низько розмірного хаосу в дослідженій системі. Очевидно, що хаос-динамічний підхід є універсальним ефективним апаратом дослідження хаотичної динаміки не тільки геофізичних, але й систем іншої природи, напр., квантової, для чого ми перейдемо далі до основних результатів нашого дослідження.

3.3 Динаміка рідбергівських атомів в мікрохвильовому полі

В цьому підрозділі ми застосуємо комплексний універсальний підхід до вивчення хаотичної динаміки рідбергівських атомів в мікрохвильовому полі.

Представляється корисним попередньо детальніше розглянути хаотичну динаміку атома водню в мікрохвильовому полі, вивчення котрої методами класичної динаміки було детально виконано в роботах Касата і співр., і ін. (див.,

напр., [161-163]). На рис. 4.1 приведені дані щодо обчисленої методами класичної механіки залежності ймовірності P іонізації атома Н як функції частоти [162, 163].

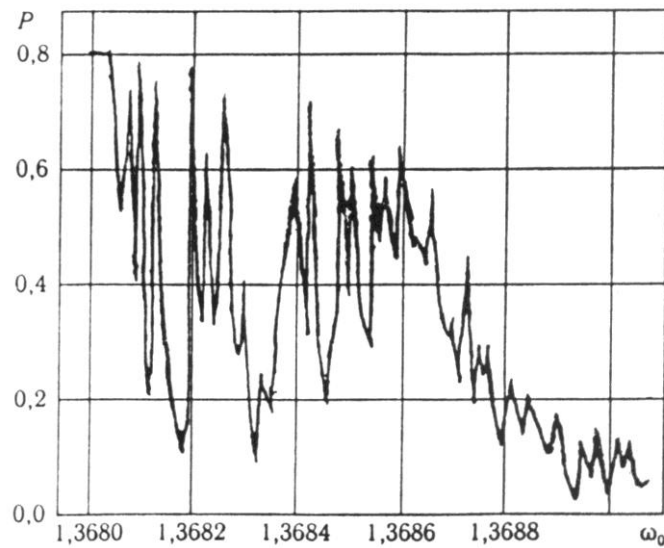


Рисунок 3.1 - Залежність ймовірності P іонізації атома Н від частоти

Наведена залежність демонструє унікальний феномен квантових флуктуацій, що спостерігаються аж до $\Delta\omega_0 \sim 10^{-6}$. Класичний розгляд показав, що при масштабованих параметрах частоти та напруженості поля

$$\omega_o = \omega n_o^3 > 1, \quad (3.1)$$

де n_o -початковий збуджений стан, і напруженості поля

$$\varepsilon_o = F_o n_o^4 > \varepsilon_c \approx (50\omega_o^{1/3})^{-1} \quad (3.2)$$

рух електрона переходить в хаотичний режим, і реалізується за механізмом класичної дифузії.

При $\omega_o \rightarrow 0$ критичне значення поля наближається до статичної межі $\varepsilon_o \approx 0,13$. З ростом ω_o (за умовою $\omega_o < 1$) значення критичного поля (для іонізації) зростає. Як що $\omega_o > 1$ (електрон знаходиться достатньо далеко від ядра) дія

зовнішнього поля призводить до осциляції електрона близько його кеплерівської орбіти з частотою

$$\Omega \approx \omega^2 / (F_0 m). \quad (3.3)$$

Так звана межа стабілізації системи визначається з умови

$$S = \omega / \Omega \gg 1, \quad (3.4)$$

яка виконується при

$$F_0 > F_{stab} = \beta \omega / m \quad (3.5)$$

(β - чисельний параметр), причому вона розташовується значно вище, ніж межа статичної іонізації і хаосу. Існування феномена стабільності атома в полі елегантно отримано також в рамках класичного ("Kepler map") динамічного моделювання, хоча формально класика працює за умови

$$\omega \ll 1 / n_o^2. \quad (3.6)$$

Процес включення поля з метою одержання стану атома в області стабілізації припускається таким, що час включення поля t_s менше орбітального періоду електрона $2\pi n_o^3$, так що вірно:

$$\int_0^{t_s} F(t) dt \cong 0. \quad (3.7)$$

В результаті іонізація відбувається після одного орбітального періоду. Границя дестабілізації дається виразом:

$$F_{dest} \approx 16L\omega_o^3 / \pi m^2 n_o^3 (L = Ln[(2F_o / \pi e)^{1/2} / \omega m]). \quad (3.8)$$

В роботах Casati та ін. була чисельно запропонована та реалізована класична модель дифузії електрона по спектру станів атома водню і повністю підтверджені згадані вище оцінки [162, 163]. Ми виконали чисельне дослідження хаотичної динаміки атомів літію, рубідію, ітербію, виходячи з кількісних даних по залежності ймовірності іонізації від часу, частоти і амплітуди мікрохвильового поля на основі комплексного підходу, викладеного в розділі 2. Далі для визначеності розглянемо детальніше атом літію, хоча скажемо, для атому рубідію має місце певна аналогічність даних, незважаючи на декотрі кількісні відмінності, які, однак, не є суттєвими для аналізу хаотичної динаміки. Рис. 3.2, зокрема, ілюструє розраховану нами залежність ймовірності іонізації атома від функції масштабованої частоти

$$\omega_0 = n_0^3 \omega \quad (3.9)$$

(тут взято: $F_0 = n_0^4 F$, $F_0=0.04883$; $n_0=63$; $F=3.1 \cdot 10^{-9}$ ат.од.).

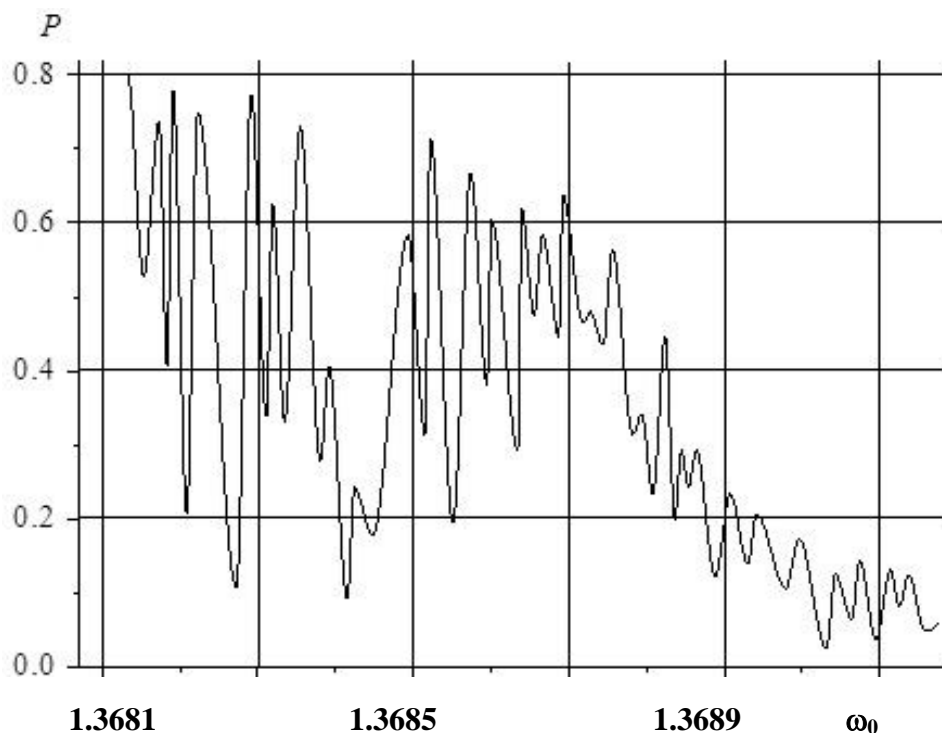


Рисунок 3.2 - Залежність ймовірності P іонізації атома Н від масштабованої частоти $\omega_0 = n_0^3 \omega$ (тут взято: $F_0 = n_0^4 F$, $F_0=0.04883$; $n_0=63$);

При цьому обрані параметри повністю відповідають заданим в експериментах Virginia, Munich groups [118, 164, 165] значенням, при яких експериментально спостерігалася іонізація атомів Li, Rb, в режимі хаосу.

3.4 Кількісний опис характеристик хаотичної динаміки атомів у мікрохвильовому полі

Схема обчислення включала, по-перше, побудову дискретного тимчасового ряду $p(n)$ із $n=1-1024$ з подальшим визначенням середньоквадратичного зсуву $M(n)$ та коефіцієнту Готтвода і Мелбена (для літію, рубідію, ітербію відповідно одержано: $K=0.82, 0.85, 0.92$).

Далі розраховувалася розмірність вкладення d_E за методом кореляційної розмірності та паралельно алгоритмом помилкових найближчих сусідніх точок. Згідно з алгоритмом Гроссбергера-Прокаччи [118], якщо динаміка змін характеристики системи демонструє хаотичні властивості, то кореляційна розмірність досягає насичення на деякому значенні розмірності вкладення.

На рис. 3.3 наведена розрахована нами залежність кореляційної розмірності (correlation dimension) від розмірності вкладення. (embedding dimension), а на рис.3.4 наведена залежність $\log C(r)$ від $\log r$. (всі дані по літію).

Важливий етап далі - обчислення глобальних розмірностей Ляпунова λ_α . та ентропії Колмогорова.

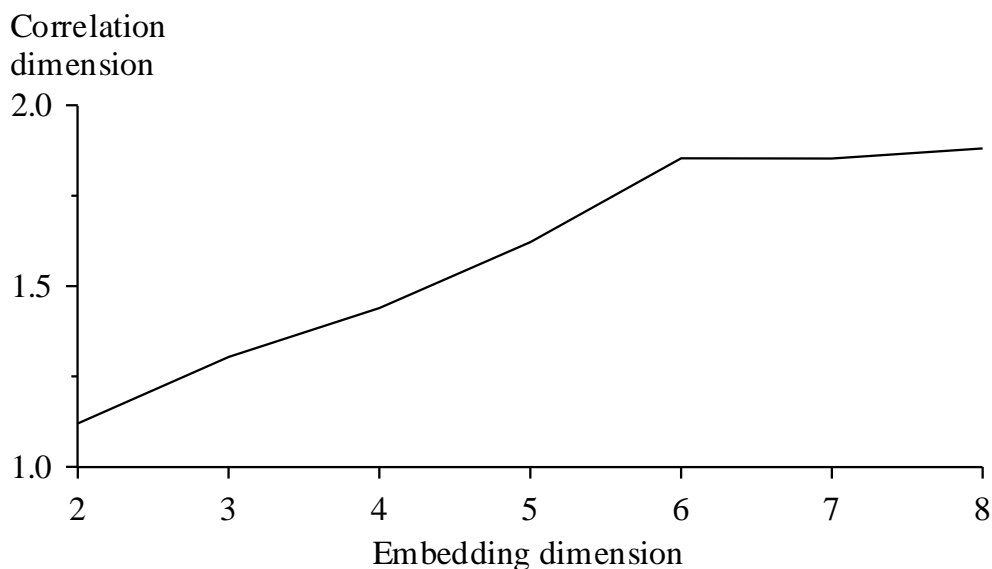


Рисунок 3.3- Залежність кореляційної розмірності (correlation dimension) від розмірності вкладення. (Embedding dimension; наш розрахунок)

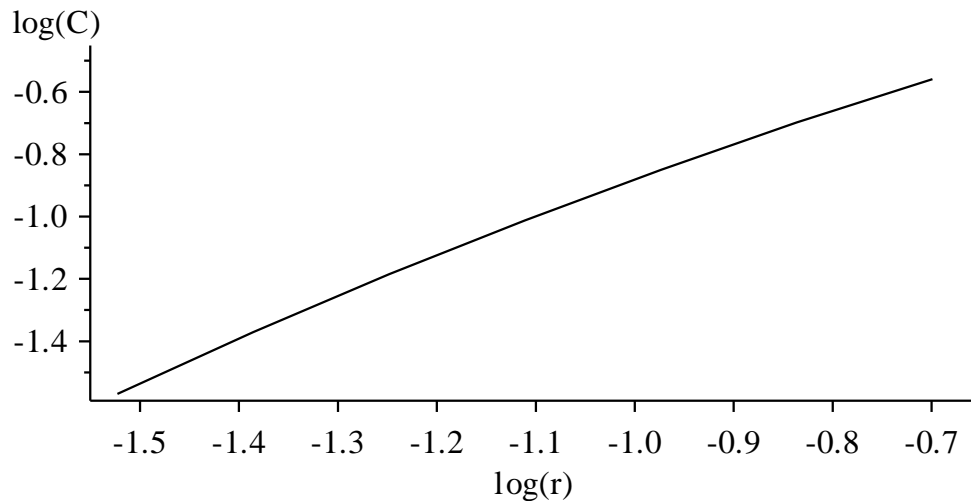


Рисунок 3.4- Залежність $\log C(r)$ від $\log r$ (наш розрахунок)

В таблиці 3.3 наведені чисельні значення показників Ляпунова, ентропії Колмогорова K_{entr} для трьох атомних систем. Додатність двох перших показників Ляпунова безумовно свідчить про хаотичний режим динаміки іонізації лужних атомів та атому ітербію у мікрохвильовому полі. Авжеж, можна дати далі й більш ретельний аналіз поведінки системи у фазовому просторі. На наш погляд, дуже корисним є побудова загальної динамічної діаграми атомних систем у мікрохвильовому полі.

Таблиця 3.3 - Чисельні значення показників Ляпунова $\lambda_1 - \lambda_6$ ентропії Колмогорова K_{entr} .

| Режим | К | λ_1 | λ_2 | λ_3 | λ_4 | λ_5 | λ_6 | K_{entr} |
|-----------|------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------|
| Хаос (Li) | 0.82 | 0.197 | 0.061 | 0.0000 | -0.0001 | -0.009 | -0.128 | 0.26 |
| Хаос (Rb) | 0.85 | 0.213 | 0.067 | 0.0000 | -0.0001 | -0.010 | -0.142 | 0.28 |
| Хаос (Yb) | 0.92 | 0.231 | 0.079 | 0.0000 | -0.0001 | -0.012 | -0.151 | 0.31 |

На рис. 3.5 наведена діаграма динаміки лужних атомів (літій) в полі у площині $(\varepsilon_0, \omega_0/m)$ У нижній частині динамічної діаграми розташована область стабільності системи у сенсі теореми Колмогорова- Арнольда-Мозера (КАМ). Нижня крива визначає межу області хаосу

$$\varepsilon_0 \sim (50\omega_0^{1/3})^{-1}. \quad (3.10)$$

При значеннях ω_0 ця границя наближується до статичної границі іонізації $\varepsilon_0 \approx 0,13$. атому водню. Штрихова лінія відповідає масштабованій напруженості: $F_0=0.0025$ (1), $F_0=0.05$ (2), $F_0=1$ (3). Стрілки наверху малюнка відповідають значенням (зліва направо): $n_0 = 4, 16, 32, 64$.

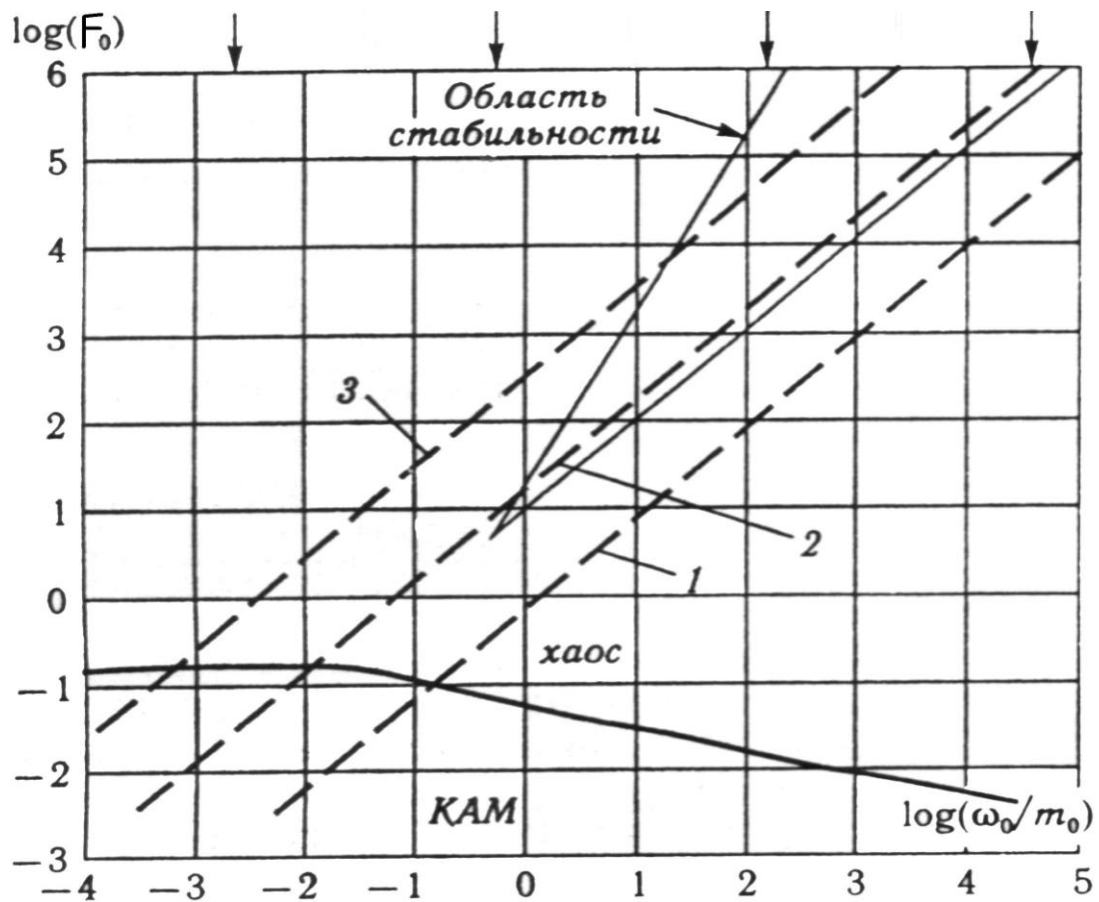


Рисунок 3.5 - Діаграма динаміки лужного атома в площині: $F_0, \omega_0/m_0$

Далі корисно оцінити масштабований параметр

$$\omega_o = \omega n_o^3 \quad (3.11)$$

(n_o початковий збуджений стан) для Li, Rb, Yb, при якому режим хаотичної іонізації переходить у режим динамічної стабілізації. Відповідна оцінка показує, що перехід відповідає значенням $\omega_o > 0.88$ (Li), $\omega_o > 0.31$ (Rb), що добре узгоджується з подібними оцінками [118, 165], відповідно, 0.9 і 0,3.

Наприкінці відзначимо, що рідбергівські лужні атоми на відміну від атома водню представляють собою значно складніші з точки зору динаміки об'єкти (незважаючи і на значне число елементів аналогії). З точки зору фізики квантового хаосу, аналог так званого класичного хаосу імплементується послідовністю однофотонних біля-резонансних переходів з квазівипадковою відбудовою від резонансу (це також має місце в атомі водню). Ця картина, однак, далі істотно модифікується за рахунок резонансного ускладнення структури спектра Флоке, зростаючого посилення зв'язку квазістаціонарних станів (резонансів у важких атомах, таких як напр., атом Yb, резонанси можуть піддаватися ефекту гігантського уширення) з континуумом, зростаючого впливу багатофотонних резонансів, а також, зрозуміло, різкого посилення значення релятивістського багатоелектронного остова. Мова, звичайно ж, йде про квантові зрушення фаз внаслідок розсіювання рідбергівського електрона на атомному остові. Зазначимо, що цей процес не має аналогу в класичній динаміці точкових частинок, яка зазвичай застосовується до атома водню. В цьому сенсі виявлена аналогія картини динамічної іонізації атома ітербію, до речі вперше дослідженого нами важкого атома групи лантанідів, заслуговує особливої уваги.

Звідки, зрозуміло, представляє значний фундаментальний і практичний інтерес експериментальне вивчення динаміки хаотичної іонізації не тільки для лужних атомів, але і більш складних атомів типу атомів лантанідів.

4 НОВИЙ КВАНТОВО-ДИНАМІЧНИЙ ПІДХІД ДО МОДЕЛЮВАННЯ ХАОТИЧНОЇ ДИНАМІКИ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В МОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ

4.1 Вступ. Молекулярні системи в електромагнітному полі та актуальні проблеми теорії молекулярного квантового хаосу

За теперішнього часу проблема квантового хаосу для двоатомних, а також багатоатомних молекул в електромагнітному полі знаходиться в числі найбільш актуальних та складних проблем сучасної хаотичної динаміки систем та приладів. У цьому напрямку слід згадати цикли робіт Заславського, Бермана та співр., Moore et al, Zhang et al (USA), Liang-Jun et al (China), Кондратенко і співр. та інших [2,6,18,19 56,95,136-143,201-203]. Серед експериментальних робіт, по-перше, слід відзначити роботи Летохова і співр. (ІСАН), Moore et al, Zhang et al (Каліфорнійський університет), Liang-Jun et al (China) та інших [147]. Летохов і співр. (ІСАН), Moore et al відкрили феномен стохастизації руху по спектру високо збуджених коливально-обертальних рівнів. Liang-Jun et al [136] досліджували динаміку хаосу і заплутаності в трьохатомних молекулярних системах на основі методу траєкторії у фазовому просторі і зясовували відповідність між класичним хаосом і квантовою динамічною заплутаністю. Нові квантово-динамічні моделі з урахуванням стохастичного механізму дифузії в квазіконтинуум, в межах яких вивчався зв'язок між інтегральними характеристиками багато фотонної іонізації та дисоціації в середовищі буферного газу, розроблялися в [54,95,96,140, 203,204].

Слід відзначити, що більшість робіт в галузі молекулярного квантового хаосу була присвячена застосуванню відомих методів класичної механіки (найбільш відома задача про динаміку ротатора). Серед напівкласичних та

квантових підходів слід відзначити метод ККЕС, метод розкладання по базису не збуджених молекулярних станів, апарат ТЗ та інші [2,6,18,136,147].

При вивченні стохастичности в класичних гамільтонових системах ефективними і зручними поняттями є «нелінійний резонанс» і «параметр перекриття» нелінійних резонансів. Перехід від регулярного руху до хаотичного можливий вже в системі двох нелінійних резонансів і виникає при досить сильному їх взаємодії (перекритті) [1,6,18,147]. В огляді [18] докладно розглянуті характерні динамічні і спектральні властивості молекул у зовнішньому полі на прикладі моделювання системи двох взаємодіючих квантових нелінійних резонансів. Також розглянуто явище квантового нелінійного резонансу (КНР) на прикладі системи, гамільтоніан якої був відразу записаний в кутових змінних. Авжеж в ситуації якщо вихідні змінні задачі не є кутовими, то попередньо звичайно переходять до квантово-механічного подання «дія-кут». Вивчення процесу нелінійної, у т.ч. хаотичної іонізації двохатомних (багатоатомних) молекул полем сильного лазерного випромінювання показало, що в цьому процесі є багато спільного з процесом нелінійної відповідно хаотичної іонізації атомів. Наприклад, іонізація в довгохвильовому межі (зокрема, інфрачервоним випромінюванням з довжиною хвилі 10 мкм) може бути описана напівкласичними тунельними моделями іонізації, розвиненими для атомів. Класична динаміка ядерної частини молекули або молекулярного іона звичайно визначається функцією Гамільтона (в системі центру мас), окремі доданки в якій мають відомий зміст, а саме, відповідають кінетичній енергії радіального руху (уздовж осі молекули), відцентровій енергії обертання молекули, потенційній енергії ядерного руху, яка в наближенні Борна - Оппенгеймера дорівнює енергії електронного рівня молекули, нарешті, енергії взаємодії із зовнішнім полем.

Але, для молекулярних систем є ряд специфічних особливостей, таких як поляризованість, або штарківське зрушення, які в молекулах значно більше, ніж в атомах. Природно всі особливості повинні бути враховані при побудові кількісно послідовних моделей для опису хаотичної динаміки, хаотичної іонізації молекул і молекулярних іонів.

Крім того, є очевидним, що з математичної, та обчислювальної точок зору моделювання динаміки молекул є ще більш складнішою задачею у порівнянні з достатньо складним класом задач моделювання хаотичної динаміки атомних систем. Накінець, підкреслимо особливо, що до теперішнього часу опис хаотичної динаміки в молекулярних системах у полі практично не був відображений у термінах теорії хаосу та нелінійного аналізу.

Слід відзначити, що нижче ми вперше у світі приведемо результати квантово-динамічного та хаос-геометричного дослідження феномену хаосу у молекулярних системах. В цілому, даний підрозділ присвячений викладенню нашого нового квантово-динамічного підходу до кількісного аналізу та моделювання регулярної та хаотичної динаміки молекулярних систем в електромагнітному полі, зокрема, динаміки двоатомних молекул в інфрачервоному (ІЧ) полі з елементами хаосу.

4.2 Класично-динамічне моделювання молекул в полі. Новий квантово-динамічний підхід до опису молекулярної хаотичної динаміки

Нижче ми викладемо новий підхід до моделювання хаотичної динаміки двоатомних молекул в інтенсивному електромагнітному полі, який, по-перше, базується на чисельному розв'язанні залежного від часу рівняння Шредінгера та реалістичній моделі Simons-Parr-Finlan для потенціалу двоатомної молекули (квантовий блок), по-друге, універсальному апараті нелінійного аналізу характеристик хаотичної динаміки (розділ 1), який включає застосування методів кореляційного інтегралу, алгоритмів середньої взаємної інформації, показників Ляпунова, спектру міцності, інш. для обчислення часових рядів населеностей коливальних рівнів, а також спектру наведеної поляризації.

Але спочатку, слідуючи роботам Заславського, Бермана та співр. (див., напр., [11,18,19,166]) розглянемо з точки зору класичної механіки динаміку взаємодії двохатомної молекули з ІЧ полем. Звичайно в класичному підході почати аналіз

обмеженням для обертального ступеня свободи молекули двовимірним наближенням. При класичному підході двохатомній молекулі в Σ -стані можна зіставити систему двох точкових мас з потенціалом взаємодії $U(r)$, що має мінімум при $r = r_0$ (r_0 – рівноважна відстань). В змінних дія-кут незбуреному руху молекули відповідає гамільтоніан: $H_0 = H_0(I, L^2)$, де величина I характеризує коливальний рух ядер ($I = 0$ відповідає відсутності коливань), змінна L збігається з моментом обертання. Парні змінні до I, L можна звичайно позначити як φ та θ (θ – кут між віссю x і віссю молекули). У наближенні малих значень $I, L (H_0(I, L^2) \equiv E \ll |U(r_0)|)$, гамільтоніна H_0 є :

$$H_0 = h\Omega n - yh\Omega n^2 + Bl^2 \quad (4.1)$$

$$r = r_0 + (2hn/\Omega M)^{1/2} \cos \varphi. \quad (4.2)$$

В (4.1), (4.2) здійснений перехід до безрозмірних $n = I/h, l = L/h$ і використані і стандартні позначення для частоти гармонійних коливань $\Omega = dH_0/dI$, $y = h(d^2H_0/dI^2)/\Omega$, моменту інерції $B = h^2 dH_0/dL^2$ і приведеної маси M .

Для розгляду процесу взаємодії молекули з лінійно поляризованим полем $E(t)$ з поляризацією вздовж осі x , гамільтоніан взаємодії молекули з випромінюванням записують у стандартному вигляді:

$$V_{int} = -(Ed) = -Ee_{eff}r \cos \theta \cdot \cos \omega t. \quad (4.3)$$

де $d = e_{eff}r$ -дипольний момент молекули,

$e_{eff} = d_0/r_0$.- ефективний заряд атомів,

або з урахуванням (4.3):

$$V_{int} = Wn^{1/2} \cos \theta \cdot \cos(\varphi - \omega t), \quad (4.4)$$

$$W = -e_{eff}E(2h/\Omega M)^{1/2},$$

де W - параметр взаємодії ІК випромінювання з молекулою. В класичному представленні з урахуванням відомої канонічної заміни змінних $(n, l) \rightarrow (n, k)$, $(\varphi, \theta) \rightarrow (\Theta, \bar{\Theta})$, де $k=l-n$, $\Theta = \varphi - \omega t + \theta$ - повільна фаза, $\bar{\Theta}$ - сполучена змінна до k , гамільтоніан $H_0 + V_{int}$ прийме вид

$$H = \Delta(k)n - \gamma n^2 + Bk^2 + \left(\frac{W}{2}\right) n^{\frac{1}{2}} \cos \Theta \equiv H_{eff}(n, \Theta) + Bk^2, \quad (4.5)$$

$$\Delta(k) = h(\Omega - \omega) + 2Bk, \gamma = yh\Omega - B.$$

Вираз (4.5) показує, що величина k є інтегралом руху, і, таким чином, задача звелася до аналізу 1-D системи з гамільтоніаном $H_{eff}(n, \Theta)$, де величина k грає роль параметра.

На рис.4.1 наданий фазовий портрет системи (4.5) [18], де можна добре видні приклади як хаотичної (1), так й регулярної (2) траєкторій молекули GeO в лінійно-поляризованому ІЧ полі достатньо високої інтенсивності (25 ГВт/см²).

Переривчата лінія відображає положення сепаратриси, безперервна лінія - положення центра головного нелінійного резонанса.

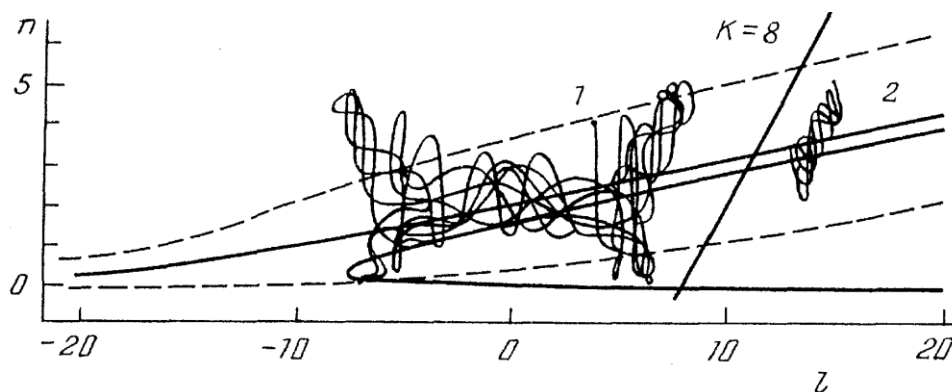


Рисунок 4.1. Фазовий портрет системи (4.5) для молекули GeO в лінійно-поляризованому ІЧ полі інтенсивності (25 ГВт/см²).

Наш підхід до моделювання хаотичної динаміки двоатомних молекул в інтенсивному електромагнітному полі базується на двох блоках, а саме, блоці універсального нелінійного аналізу (див. розділ 2), який фактично включає обчислення часових рядів в нашій задачі населеностей рівнів, поляризації, спектру міцності і квантового блоку. Останній включає розв'язання залежного від часу рівняння Шредінгера з використанням реалістичній моделі Simons-Parr-Finlan [102] для потенціалу двоатомної молекули:

$$U(r) = B_0[(r - r_e)/r]^2 \left\{ 1 + \sum_n b_n [(r - r_e)/r]^n \right\} \quad (4.6a)$$

або з урахуванням $x = r - r_0$

$$U(r) = B_0[x/(x + r_0)]^2 \left\{ 1 + \sum_n b_n [x/(x + r_0)]^n \right\} \quad (4.6b)$$

де коефіцієнти b_i зв'язані приведеними в [102] формулами з молекулярними сталими. Як показано в [102], потенціал (4.7) має переваги над такими відомими потенціалами як Rydberg-Klein-Rees, авжеж Morse і т.і. Далі задача зводиться до чисельного розв'язання рівняння Шредінгера

$$i\partial\Psi/\partial t = [H_0 + U(x) - d(x)E_M \varepsilon(t) \cos(\omega_L t)]\Psi \quad (4.7)$$

де E_M – максимальне значення напруженості поля, $\varepsilon(t) = E_0 \cos(\nu t)$ відповідає огібаючій імпульсу, для чого був використаний стандартний чисельний алгоритм [138]. Молекула у полі набуває наведеної поляризації і відповідно високочастотна складова поляризації молекули може бути визначена як:

$$P_x(t) = p_c^{(x)}(t) \cos \omega t + p_s^{(x)}(t) \sin \omega t, \quad (4.8a)$$

$$P_y(t) = p_c^{(y)}(t) \cos \omega t + p_s^{(y)}(t) \sin \omega t, \quad (4.8b)$$

де
$$p_c^{(x,y)}(t) = \left(\frac{1}{T} \right) \oint \langle \psi(t) | \hat{d}_{x,y} | \psi(t) \rangle \cos \omega t dt, \quad (4.9)$$

T — період зовнішнього поля.

Далі елементарно визначається відповідний спектр міцності як $S(\omega) = |F[p(t)]|^2$, причому, як звичайно, для виключення чисельного шуму при фур'є перетворенні використана техніка загасання, а саме при $t > t_p$ $p(t)$ замінюється на

$$p(t) \cos^2\{\pi(t - t_p)/[2(T - t_p)]\}, \quad (t_p < t < T)$$

з $T = 1.6t_p$ (безрозмірний час: $\tau = DB^2t/\hbar$).

Слід розуміти, що в регулярному випадку молекулярної динаміки у полі, спектр буде складатися з невеликого числа добре дозволених ліній. У разі лінійно поляризованого випромінювання в молекулі можливий режим квантового хаосу. При цьому енергія взаємодії системи з полем істотно перевищує константу ангармонізму $W > x\hbar\Omega$. В режимі квантового хаосу слід очікувати досить складним і близький до спектру випадкового процесу спектр [18,19,166]. В принципі для виникнення хаотичної динаміки потрібно, щоб в динаміку системи втягувалось як можна більше коливально-обертальних рівнів, що, авжеж, є можливим у режимі перекриття резонансів.

4.3. Застосування квантово-динамічного та хаос-геометричного підходу до аналізу хаотичної динаміки двоатомної молекули в ІЧ полі

Нижче ми наведемо результати чисельного моделювання хаотичної динаміки двоатомної молекули GeO в лінійно поляризованому полі.

Параметри шуканої молекули і поля: $\hbar\Omega = 985.8 \text{ cm}^{-1}$, $y\hbar\Omega = 4.2 \text{ cm}^{-1}$, $B = 0.48 \text{ cm}^{-1}$, $d_0 = 3.28 \text{ D}$, $M = 13.1 \text{ а.е.м.}$, інтенсивності випромінювання $2.5\text{-}25 \text{ ГВт / cm}^2$, відповідно: $W = 3.39\text{-}10,72 \text{ cm}^{-1}$.

Відповідний параметр Чірікова $\delta n = 2(Ed/B)^{\frac{1}{2}} \gg 1$. У випадку GeO мова йде про втягування більш ніж 200 коливально-обертальних рівнів.

На рис.4.2 наведена розрахована часова залежність поляризації для молекули GeO в полі в хаотичному режимі, а на рис.4.3 – відповідний спектр міцності.

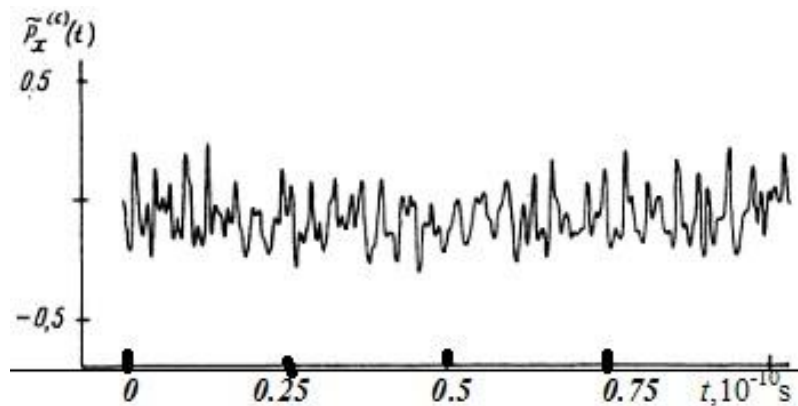


Рисунок 4.2 - Часова серія поляризації молекули GeO у полі (режим хаоса)

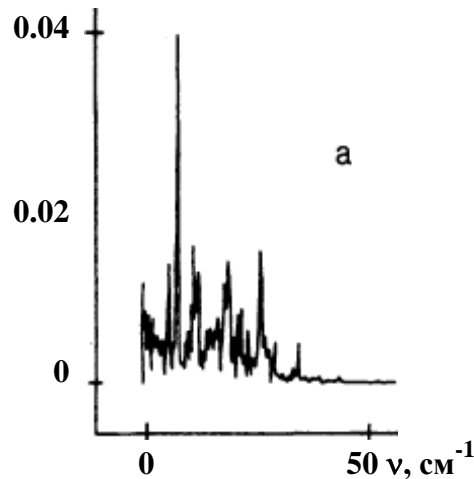


Рисунок 4.3 - Спектр міцності для поляризації молекули GeO у полі (режим хаоса)

Далі наведемо результати хаос-геометричного дослідження параметрів хаотичної динаміки молекули GeO у полі, зокрема, докладний аналіз часового ряду поляризації. В табл. 4.1 наведені дані щодо розрахованих кореляційної розмірності d_2 розмірності вкладення, визначеної на основі алгоритму хибних найближчих сусідніх точок (d_N) з указанням (%) хибних сусідів для різних значень часу затримки τ (див. деталі у підрозділі 1), а в таблиці 4.2- дані обчислення

показників Ляпунова (λ_i), розмірності аттрактора Каплан-Йорка, ентропії Колмогорова K_{entr} .

Таблиця 4.1. Кореляційної розмірність d_2 , розмірність вкладення, визначена на основі алгоритму хибних найближчих сусідніх точок (d_N) з відсотком хибних сусідів (%) розрахованих для різних значень часу τ

| τ | d_2 | (d_N) |
|--------|-------|-----------|
| 42 | 3.04 | 5 (4.2) |
| 4 | 2.73 | 3 (1.1) |
| 6 | 2.73 | 3 (1.1) |

Таблиця 4.2. Результати обчислення показників Ляпунова ($\lambda_1-\lambda_4$), розмірності аттрактора Каплан-Йорка (d_L), ентропії Колмогорова (K_{entr})

| Ряд | λ_1 | λ_2 | λ_3 | λ_4 | d_L | K_{entr} |
|-----|-------------|-------------|-------------|-------------|-------|------------|
| I | 0.146 | 0.0179 | -0.321 | -0.336 | 2.51 | 0.16 |

Як видно з таблиць, одержані дані по показникам Ляпунова (два позитивних показника), розмірностям: кореляційній, вкладення, Каплан-Йорка, ентропії Колмогорова вказують, що в системі реалізується хаотична динаміка з досить низько розмірним дивним аттрактором. Важливо, що розмірність Каплана-Йорка в нашому випадку менше за обчислену розмірність вкладення, що підтверджує правильність вибору останньої.

На кінець підрозділу зауважимо, що наведені результати фактично одержані нами вперше у світі, як й і цілому застосування викладеного у першому розділі апарата дослідження феномену в молекулярній хаотичній динаміці.

ВИСНОВКИ

Основні висновки роботи полягають у наступному:

1. Сучасна теорія моделювання генерації хаосу (у т .ч. квантового хаосу) в динаміці нелінійних процесів у широкому класі квантових (атомно-молекулярних систем у однорідних магнітному, електричному, електромагнітному полях), квантово-інформаційних та геофізичних систем та приладів потребує суттєвого розвитку і удосконалення як у фундаментальних аспектах, зокрема, розробці адекватних, принципово нових квантово-динамічних та нелінійно-геофізичних підходів обчислення енергетичних та спектральних параметрів, так й удосконаленні стохастично-статистичних та інших методів, взагалі, апарату нелінійного аналізу характеристик хаотичної динаміки, а також збільшення числа конкретних практичних застосувань до широкого кола квантових та лазерних систем та приладів, а також систем іншої фізичної природи, наприклад, геофізичних.
2. Вперше з метою адекватного, повного кількісного моделювання та аналізу хаотичних особливостей динаміці нелінійних процесів у квантових (атомних) системах розвинуто та адаптовано універсальний, комплексний (з хаос-геометричним і нейромережним блоками та блоком прогнозування) апарат, який одноманітно і одночасно включає низку нових квантово-динамічних моделей (наступні розділи) і низку або удосконалених або значно покращених методів, зокрема, кореляційно-інтегрального аналізу, фрактального та вейвлет-аналізу, алгоритми середньої взаємної інформації, хибних найближчих сусідів, апарат аналізу на основі показників Ляпунова, ентропії Колмогорова, спектра потужності, алгоритм сурогатних даних, метод нелінійного прогнозу, передбачених траєкторій, нейромережні алгоритми тощо.
3. Вперше універсальний хаос-кібернетичний комплекс нелінійного аналізу та прогнозу застосовано до кількісного вивчення параметрів хаосу в атомній динаміці в змінному електромагнітному полі і вперше одержані дані щодо розмірностей вкладення, глобальних розмірностей, показників Ляпунова λ_{α} , які

доказують реалізацію в атомній динаміці у мікрохвильовому полі режиму хаотичної іонізації. Обчислені два перших показники Ляпунова є позитивними; знайдено, що режим хаотичної іонізації у динаміці іонізації Li, Rb у мікрохвильовому полі при $\omega_o = \omega n_o^3 > 0.88$ (Li), $\omega_o > 0.31$ (Rb) переходить у режим динамічної стабілізації.

4. Викладено новий підхід до моделювання хаотичної динаміки двоатомних молекул в інтенсивному електромагнітному полі, який, по-перше, базується на чисельному розв'язанні залежного від часу рівняння Шредінгера та реалістичній моделі Simons-Parr-Finlan для потенціалу двоатомної молекули (квантовий блок), по-друге, універсальному апараті нелінійного аналізу характеристик хаотичної динаміки (хаос-геометричний блок), який включає застосування методів кореляційного інтегралу, алгоритмів середньої взаємної інформації, показників Ляпунова, спектральних методів інш. для обчислення часових рядів населеностів коливальних рівнів, наведеної поляризації; вперше розраховані кількісні параметри молекулярної хаотичної динаміки GeO в лінійно поляризованому полі інтенсивності до 25 ГВт/см^2 , у т.ч., кореляційна розмірність (2.73), розмірності вкладення, Каплана-Йорка (2.51), показники Ляпунова (два перших є позитивними; +,+), ентропія Колмогорова і т.і.

5. Отримані на основі хаос-кібернетичного підходу нові результати по складній динаміці атомних та молекулярних систем в електромагнітному полі і ілюстративні дані по динаміці забруднення атмосфери показують, по-перше, нові унікальні прояви елементів хаосу в різних за фізичною природою системах, а по-друге, демонструють універсальність, одноманітність й ефективність нашого підходу до аналізу та моделювання хаотичної динаміки принципово різних за природою систем.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Batani D. Matter in superintense laser field. / Eds. Batani D., Joachain C.;- N-Y:AIP,2007-560p.
2. Ullrich C. Superintense Laser Atoms Physics/ Ullrich C., Erhard S., Gross E.K.U.; N.-Y: Acad. Press., 2007.-580p.
3. Глушков А.В. Атом в электромагнитном поле/ А.В. Глушков. - Киев: КНТ, 2005.-400с.
4. Глушков А.В. Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем/ А.В. Глушков. - Одесса: Астропринт. 2008.- 900с.
5. Dunning F.B. Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields/ Dunning F.B., Mestayer J.J., Reinhold C.O., Yoshida S., Burgdorfer J.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.022001.-22p.
6. Grutter M. Spectroscopic study and multichannel quantum defect theory analysis of the Stark effect in Rydberg states of neon/ Grutter M., Zehnder O., Softley T.P., Merkt F.// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2008.-Vol.41.-P.115001.-11p.
7. Glushkov A.V. Co-operative laser nuclear processes: border lines effects/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V. // In: New projects and new lines of research in nuclear physics. Eds. G.Fazio and F.Hanappe, Singapore : World Sci.-2003.-P.242-268.
8. Baldwin G.G. Approaches to the development of gamma ray lasers / Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I. // Rev.Mod.Phys.-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742.
9. Гольданский В.И. О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер/ В.И. Гольданский, В.С. Летохов //ЖЭТФ.-1974.-Т.67,№2(8).-С. 513-516; Иванов Л.Н. Спектр электронно-ядерных гамма переходов ядра в атоме/ Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, // ЖЭТФ.-1987.-Т.93,№2(8).-С.396-402; Glushkov A.V. Nuclear quantum optics/ Glushkov A.V., Ivanov L.N., Letokhov V.S // Preprint of Institute for Spectroscopy of the USSR Acad. Sci.(ISAN), AS N4, 1991.-16P.
- 10.Glushkov A.V. DC strong - field Stark effect: New consistent quantum-mechanical approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//J.Phys.B:At.Mol.Opt. Phys.-1993.-Vol.26, N16.-P.L379-386; Preprint ISAN NAS-1, Moscow-Troitsk.-1992.-12P; Глушков

- А.В. Отрицательные ионы инертных газов/ Александр Васильевич Глушков//JETP Lett.-1992.-Vol.55,N2.-P.97-100.
11. Glushkov A.V. Cooperative Laser- e-Nuclear Processes: QED Calculation of Electron Satellites Spectra for Multicharged Ion in Laser Field/ Glushkov A.V., Malinovskaya S., Chernyakova Y., Svinarenko A.//Int.Journ.Quant.Chem.-2004.-Vol.99.-P.889-898.
 12. Shahbaz A. Nuclear quantum optics with X-ray laser pulses/ Shahbaz A., Muller C., Staudt A., Burvenich T.J., Keitel C.H. // Phys.Rev.Lett.-2007.-Vol.98-P.263901-1-263901-4.
 13. Ivanova E.P. The possibility of X-ray lasers based on inner-shell transitions of Ne-like ions/ Ivanova E.P., Zinoviev N.A. // Phys. Lett.A. – 2000 – V.274 – P.239-246.
 14. Беляев В. Плазменные сателлиты рентгеновских спектральных линий ионов в плазме твердотельных мишеней, нагреваемых пк-секундным лазерным импульсом/ Беляев В., Виноградов В., Курилов А. и др. //Письма в ЖЭТФ.-2003.-Т.78.-С.1216-1220.
 15. Glushkov A.V. QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A.//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer).-2008.-Vol.18.-P.541-558.
 16. Burvenich T.J. Dynamic nuclear Stark shift in superintense laser fields/ Burvenich T.J., Evers J., Keitel C.H. // Phys.Rev.C.-2006.-Vol.74.-P.044601-1-044601-10.
 17. Romanovsky M.Yu. Nuclear excitation and decay at the superstrong laser field/ Romanovsky M.Yu. // Laser Physics.-1998.-Vol.1,N1.-P.17-24.
 18. Ivanova E.P. Modern Trends in Spectroscopy of multi-charged Ions/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Aglitsky E.V.// Physics Rep.-1988.-Vol.166,N6.-P.315-390
 19. Ivanov L.N. Spectrum of plasma containing Ne-and Na-like ions: Consistent account for Rydberg and autoionization Rydberg series in balance equations/ Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.V., Glushkov A.V. // Phys. Scripta.-1996.-Vol.53.-P.653-667.

- 20.Иванов Л.Н. Селективная Ионизация атомов в электрическом и лазерном полях/ Л.Н. Иванов, В.С. Летохов // Квантовая Электроника.-1975.-Т.2,№3.-С.585-590
- 21.Glushkov A.V. Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions / Glushkov A.V., Ivanov L.N. // Phys. Lett.A.-1992.-Vol.170,N1.-P.33-37.
- 22.Глушков А.В. Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем/ Александр Васильевич Глушков. Одесса: Астропринт.-2006.-400С.
- 23.Glushkov A.V. Theoretical Study of Multicharged Ions Spectra of F-, Ne-Isoelectronic Sequences/ Glushkov A.V., Ivanova E.P.// Journ. Quant. Spectr. Rad.Transfer. (USA).-1986.-Vol.36, N2.-P.127-145.
- 24.Ландау Л.Д. Квантовая механика/ Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. -М.: Наука, 1977.-700С.
- 25.Лисица В.С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода/ В.С. Лисица //УФН.-1987.-Т. 153(3).-С.379-422.
- 26.Дамбург Р.Я. Асимптотический подход к задаче Штарка/ Р.Я. Дамбург, В.В. Колосов; Рига: Зилитис,1987.-180С.; Damburg R.J. Hydrogen atom in uniform electric field/ Damburg R.J., Kolosov V.V. // J.Phys.B.: Atom.,Mol.,Opt.Phys.-1979.-V.12,N22 .-P.2637-2644.
- 27.Казанский А.И. Диабатические квазистационарные состояния и неустойчивые замкнутые траектории/ А.И.Казанский, В.Н.Островский//ЖЭТФ.-1989.-Т.95,№4.-С. 1162-1168; Турбинер А.В., Об алгебраизации теории возмущений в квантовой механике//Письма в ЖЭТФ.-1981.-Т.33,№3.-С.15-18.
- 28.Popov V.S. Strong field Stark effect: perturbation theory and $1/n$ expansion / Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.V., Weinberg V.M. //Phys.Lett.A.-1990.-V.149,N9.-P.418-424; Popov V.S. $1/n$ expansion for the Stark effect in Rydberg atoms/ Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.V.//Phys.Lett.A.-1990.-V.149.-P.425-433.
- 29.Kornev A.S. Rydberg spectra of atoms and positive ions in the Thomas-Fermi model / Kornev A.S., Zon B.A. // J.Phys.B:At.Mol.Opt. Phys.-2003.-Vol.36,N14.-P.4027-4034.

30. Zimmerman M. Stark and Zeemane structure of Rydberg states of alkali-metal atoms/
Zimmerman M., Littman M., Kash M., Kleppner D. // Phys.Rev.A.-1979.-V.20,N6.-
P.2251-2275.
31. Brändas E. Pade approximants to Stark effect energies for excited states of hydrogen/
Brändas E., Floelich P., //Phys. Rev.A.-1977.-Vol.16.-P.2207-2216; Hehenberger M.
Weil's theory applied to the Stark effect in the hydrogen atom/ Hehenberger M.,
McIntosh H.V., Brändas E. //Phys.Rev.-1974.-V.10.-P.1494-1506.
32. Silverstone H. Stark effect in hydrogen: Dispersion relations, asymptotic formulas
and calculation of the ionization rate via high-order perturbation theory/ Silverstone
H., Adams B., Cizek J., Otto P.// Phys.Rev. Lett.-1979.-Vol.43,N20.-P.1498-1501.
33. Анохин С.Б., Иванов М.В., Атом водорода и лития в сильном электрическом
поле/ С.Б.Анохин, М.В.Иванов//Опт.Спектр.-1984.-Т.59.-С.499-502; Ivanov
M.V., Grid calculation of energies and widths for ground state of H molecule in
strong electric field/ Ivanov M.V. // Opt.Spectr.-1994.-V.78(5).-P.711-713.
34. Глушков А.В. Последовательный квантово-механический подход в задаче об
эффекте Штарка в сильном поле: Операторная форма теории возмущений.
Атомы H, Li, Tm в электрическом поле/ А.В.Глушков, Л.Н.Иванов // Матер.III
Семин. по Атомной Спектроскопии. - Черногоровка, 1992.-P.III-3.-P.21.
35. Glushkov A.V. DC Strong Field Stark effect: consistent quantum mechanical
approach/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.//Preprint N92-1-AS.-Institute of
Spectroscopy of RAN.-Troitsk,1992.-13p.;
Glushkov A.V. A broadening of the thulium atom autoionization resonances in a
weak electric field/ Glushkov A.V., Ivanov L.N.// Preprint N92-2-AS.- Institute of
Spectroscopy of RAN.-Troitsk,1992.-6p.
36. Глушков А.В. Атомы и двухатомные молекулы во внешних эффективных
полях N-компонентных материалов / Александр Васильевич Глушков //
Моделирование на ЭВМ элементарных атомных процессов.- Киев, 1992.-С.121-
124.
37. Filho O. Different approaches to Stark effect: Application to H ground state/Filho O,
Fonseca A.,Nazareno H.,Guimaraes P.//Phys.Rev.A-1990.-Vol.42.-P.4008-4014.

38. Stambulchik E. Stark effect of high- n hydrogen-like transitions: quasi-continuous approximation/ Stambulchik E., Maron I. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* -2008- Vol.41- P.095703 (9p).
39. Meng H-Y. Theoretical complex Stark energies of lithium by a complex scaling plus the B-spline approach/ Meng H-Y., Zhang Y-X., Kang S., Shi T-Y., Zhan M-S // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* -2008.-Vol.41.-P.155003 (12p).
40. Беляев В.С. Генерация быстрых заряженных частиц и сверхсильных магнитных полей при взаимодействии сверхкоротких интенсивных лазерных импульсов с твердотельными мишенями/ В.С.Беляев, В.П. Крайнов, В.С.Лисица, А.П. Матафонов // *УФН.*-2008.-Т.178. -С.823-852.
41. Harmin D.A. Theory of the non-hydrogenic Stark Effect/ Harmin D.A. // *Phys. Rev. Lett.* -1982.-Vol.49,N2.-P.128-131.
42. Glushkov A.V. Chaos and regular dynamics of complex atomic systems in magnetic field/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V. // *Journ. of Techn. Phys.* -1996.-Vol.37, N3-4.- P.347-348.
43. Ivanov M.V. Ground States of H, He, ..., Ne and their singly positive ions in strong magnetic fields: the high-field regime/ Ivanov M.V., Schnelcher P. // *Phys. Rev. A.* -2000.-V.61.-P. 2251-2263;
44. Kuklina I.V. H-like and He-like systems in super strong magnetic field/ Kuklina I.V., Shevchuk V.G. // *Uzhgorod Univ. Sci. Herald. Ser. Phys.* -2000.-V.8(2).-P.361-365.
45. Глушков А.В. КЭД теория сдвига и деформации радиационных атомных линий в поле лазерного излучения/ А.В.Глушков, Л.Н. Иванов // *Труды 3 сем. по Атом. Спектр.* – Черногоровка: ФИХФ АН СССР, 1992. –С.113-114; *Препринт Института Спектроскопии АН СССР №AS-3, Москва-Троицк, 1991.*
46. Glushkov A.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Consistent Quantum Approach/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Ambrosov S.V. // *Journ. of Techn. Phys.* -1997.-Vol.38,N2.-P.215-218.
47. Glushkov A.V. Resonances in Quantum Systems in Strong External Fields: Nonlinear Effects. Autoionization Resonances in Tm/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Shpinareva I.M. // *Journ. of Techn. Phys.* -1997.-Vol.38, N2.- P.211-214.

48. Glushkov A.V. QED theory of non-linear interaction of the complex atomic systems with laser field. Multi-photon resonances/ Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Polischuk V.N.//Journ. of Techn.Phys.-1997.-Vol.38, N2.- P.219-225.
49. Глушков А.В. Расчет характеристик радиационных линий много фотонного поглощения и излучения при взаимодействии атома с импульсом лазерного излучения/ А.В. Глушков, А.В. Лобода, // Журн. Прикл. Спектр.-2007.- Т.74, №2.-С.271-274.
50. Glushkov A.V. Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions / Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., Loboda A.V.// New Projects and New Lines of research in Nuclear physics.Eds. Fazio G. and Hanappe F.,pp.142-154, Singapore, World Sci. (2003).
51. Glushkov A.V. Generalized multiconfiguration model of decay of multipole giant resonances applied to analysis of reaction (μ -n) on the nucleus ^{40}Ca / Glushkov A.V., Lovett L., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Dubrovskaya Yu.V., Loboda A.V.//International Journal of Modern Physics A.-2009.- Vol. 24, N.2-3.-P.611-615.
52. Glushkov A.V. Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross-sections and strengths: Ne-like ions / Glushkov A.V., Ambrosov S., Loboda A., Gurnitskaya E., Prepelitsa G.// Int. Journ.Quant.Chem.-2005.-Vol.104, N4 .-P. 562-569.
53. Иванов Л.Н. Метод штурмовских орбиталей в расчетах физических свойств излучения атомов и ионов/ Л.Н. Иванов, Е.П. Иванова// ЖЭТФ.-1996.-Т.110.- С.483-498.
54. Glushkov A.V. Electron- β -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the β -Decay parameters/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L.// Advances in the Theory of Atoms, Molecular Systems and Condensed Matter (Berlin, Springer).-2009.-Vol.19.-P.301-328.
55. Glushkov A.V. QED Theory of Radiation Emission and Absorption Lines for Atoms and Atomic Ensembles in a Strong Laser Field/ Glushkov A.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P., Svinarenko A.A.// Physica Scripta.-2009.- Vol.134.-P.305001.

56. Khetselius O.Yu. Relativistic Calculating the Hyperfine Structure Parameters for heavy-Elements and Laser Detecting the Isotopes and Nuclear Reaction Products/ Khetselius O.Yu. // *Physica Scripta*.-2009.-Vol.134.-P. 305090-1--7.
57. Gutzwiller M. Chaos in Classical and Quantum Mechanics/ Gutzwiller M.-N.-Y.:Springer-Verlag, 1990.-720p.
58. Kleppner D. Irregular Atomic Systems and Quantum Chaos/ Kleppner D., Chun-Ho I., Welch G.R. - Ed. J.C.Gay, N-Y.: Kluwer, 1990.-P.21-48.
59. Ott E. Chaos in dynamical systems/ Ott E.; Cambridge: Cambridge Univ.Press,2002.-490p.; Wiggins S. Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos/ Wiggins S.; New York: Springer-Verlag, 1997.-688 p.
60. Gottwald G.A. A new test for chaos in deterministic systems / G.A. Gottwald, I. Melbourne/ Gottwald G.A. // *Proc. Roy. Soc. London. Ser. A*. – 2004. – Vol. 460. – P. 603-611.
61. Abarbanel H. Analysis of observed chaotic data in physical systems / Abarbanel H., Brown R., Sidorowich J. Tsimring L.//*Rev. Mod. Phys.* – 1993. – Vol. 65. – P. 1331-1392.
62. Letellier C. Analysis of the dynamics of a realistic ecological model/ Letellier C., Aziz-Alaoui M.A. // *Chaos, Solitons & Fractals*.-2002.-V.13, №1.-P.95-107; Sprott J.C. Coexistence and chaos in complex ecologies / Sprott J.C., Vano J.A., Wildenberg J.C., Anderson M.B., Noel J.K. // *Phys. Lett. A*.-2005.-V.335, № 2-3.-P.207-212.
63. Schreiber T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods/ Schreiber T. // *Phys. Rep.*-1999. V.308,№1.-P.1-64; Packard N.H. Geometry from a time series / N.H. Packard, J.P. Crutchfield, J.D. Farmer, R.S. Shaw // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45. – P. 712-716.
64. Grassberger P. Measuring the strangeness of strange attractors / Grassberger P, Procaccia I. // *Physica D*.-1983.- V.9.,№1-2.-P.189-208; Fraser A.M. Independent coordinates for strange attractors from mutual information / A.M. Fraser, H.L. Swinney // *Phys. Rev. A*. – 1986. – Vol. 33. – P. 1134-1140.

65. Глушков А.В. Томас-Фермиевская модель многочастичного осциллятора/ Александр Васильевич Глушков // Изв.вузов. Сер.Физика.- 1992.- N7.-С.41-47.
66. Зельдович Я.Б. Квазиэнергия квантово-механической системы в периодическом поле/Я.Б. Зельдович //ЖЭТФ.-1967.-Т.26.-С.1006-1018.
67. Преображенский М. Квазистационарные состояния атома водо-рода в поле сильной монохроматической волны/ Преображенский М., Рапопорт Л.//ЖЭТФ-1990.-Т.78-С.929-935;
68. Семенов В., Расчет вероятностей ионизации атома водорода линейно-поляризованной волной методом комплексных координат/В. Семенов//Опт. Спектр.-1983.-Т.54.-С.36-42.
69. Dupret K. Resonances in the Diamagnetic Rydberg Spectrum: Order and Chaos/ Dupret K., Zakrzewski J., Delande D.// Europhys.Lett.-1995.-V.31(5).-P.251-256.
70. Gasati G. Classical Stabilization of periodically kicked hydrogen atoms/ Gasati G., Guarneri I., Mantica G. // Phys.Rev.A.-1994.-V.50(6).-P.5018-5024.
71. Dando P.A. Atoms in Static Fields: Chaos or Diffraction/ Dando P.A., Monteiro T.S.// In: Photonic, Electronic, Atomic Collisions, Eds.W.Aumyr, H.Winter.-World Sci. Pub.,Singapore.- 1997.-P.621-630
72. Benvenuto F. Rydberg Stabilization of atoms in strong fields: “magic” mountain in chaotic sea/ Benvenuto F., Casati G., Shepelyansky D.L.// Z.Phys.B.-1994.-V.94.-P.481-486.
73. Cheng T. Rydberg atoms in parallel microwave and magnetic fields- classical dynamics/ Cheng T., Liu J., Chen S., Guo H. // Phys.Lett.A.-2000.-V.265.-P. 384-390.
74. Wang D. Influence of oscillating electric field on the recurrence spectra of a Li Rydberg atom in strong magnetic field/ Wang D., Din S., Liu S.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-2003.-V.36.-P.4225-4232..
75. Hegerfeldt G.C. Level statistics for continuous energy spectra with application to H atom in crossed electric and magnetic field/ Hegerfeldt G.C.,Henneberg R.// Phys.Rev.A.-1994.-Vol.49.-P.3531-3540.

76. Fielding H. Rydberg-electron wave-packet dynamics in electromagnetic fields and evidence for stabilization/ Fielding H., Wals J., van der Zande W., van den Heuvel H. // *Phys. Rev. A*-1995.-Vol.51.-P.611-618.
77. Rao J. Quantum manifestations of scattering orbits in scaled spectrum of non-hydrogenic atom in crossed fields/ Rao J., Delande D., Taylor K. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2002.-V.35.-P.L1-10.
78. Buchleitner A. Secular motion of the three-dimensional Rydberg states in a microwave field/ Buchleitner A., Delande D. // *Phys. Rev. A*-1997.-Vol.55.-P.1585-1598.
79. Bayfield J.E., Localization of chaotic diffusion for hydrogen atom in microwave fields/ Bayfield J.E., Casati G., Guarneri I., Sokol D.W. // *Phys. Rev. Lett.*-1989.-Vol.63.-P.364-368.
80. Krug A. Residual symmetries in the spectrum of periodically driven alkali Rydberg states/ Krug A., Buchleitner A. // *Europhys. Lett.*-2000.-Vol.49.-P.176-180; Chaotic Ionization of non-hydrogenic alkali Rydberg states// *Phys. Rev. Lett.* -2001.-Vol.86.-P.3538-3541.
81. Krug A. Microwave ionization alkali-metal Rydberg states in a realistic numerical experiment/ Krug A., Buchleitner A. // *Phys. Rev. A*-2002.-Vol.66.-P.053416 (10p.)
82. Koch P.M. Observation of resonances in microwave-stimulated Multiphoton excitation and ionization of highly excited hydrogen atoms/ Koch P.M., Bayfield J.E., Gardner L.D. // *Phys. Rev. Lett.* 1977.-Vol.39.-P.76-80.
83. Koch P.M. The importance of resonances in microwave ionization of excited hydrogen atoms/ Koch P.M., van Leeuwen K.A.H. // *Phys. Rep.*-1996.-Vol.255.-P.289-364.
84. Gallagher T. F. Ionization of sodium and lithium Rydberg atoms by 10-MHz to 15-GHz electric fields/ Gallagher T. F., Mahon C. R., Dexter J. L., Pillet P. // *Phys. Rev. A*-1991.- Vol.44.-P. 1859-1872.
85. Gallagher T. F. Classical subharmonic resonances in microwave ionization of lithium Rydberg atoms/ Gallagher T. F., Noel M. W., Griffith M. W. // *Phys. Rev. A*-2000.-Vol.62.-P.063401-063412.

86. Gallagher T. F. Microwave ionization of hydrogenlike Li and Na/ Gallagher T. F., Mahon C. R., Pillet P., Fu P., Newman J.B.// *Phys. Rev. A*.-1989.-Vol.39.-P.4545-4554.
87. Gallagher T. F. Microwave ionization of Rydberg states of the barium ion/ Gallagher T. F., Seng M., Eichmann U., Lange V., Sandner W.//*Eur.Phys.J.D*.-1998.-Vol.3.-P.21-26.
88. Walther H. From coherent to noiseinduced microwave ionization of Rydberg atoms/ Walther H., Benson O., Buchleitner A., raithel G., Arndt M., Mantegna R.//*Phys.Rev.A*-1995.-Vol.51.-P.4862-4876.
89. Ivanov L.N. Spectroscopy of autoionization resonances in heavy elements atoms/ Ivanov L., Letokhov V.S.// *Com.Mod.Phys.D:At.Mol.Phys.*-1985.-Vol.4.-P.169-184
90. Ivanov L.N. Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths/ Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L. //*Phys.Rev.A*.-1993.-Vol.48.-P.4365-4374.
91. Glushkov A.V. Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions/ Glushkov A.V.// *Low Energy Antiproton Physics. AIP Serie.*-2005.-Vol.796.-P.206-210.
92. Glushkov A.V. Resonance phenomena in heavy nuclei collisions and structurization of positron spectrum/ Glushkov A.V.//*Proc. SLAK (Stanford)*.-2007.-Vol.2.-P.111-117
93. Glushkov A.V. Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions / Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., Loboda A.V.// In: *New projects and new lines of research in nuclear physics*.Eds. G.Fazio, F.Hanappe, Singapore : World Scientific.-2003.-P.126-132.
94. Glushkov A.V. Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei during negative muon capture/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Dubrovskaya Yu.V., Vitavetskaya L.A.// *Recent Advances in Theory of Phys. and Chem. Systems (Berlin, Springer)*.-2006.-Vol.15.-P.301-308.

95. Glushkov A.V. Sensing the capture of negative muon by atoms: Energy approach/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Loboda A.V.// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2006.-N3.-P.21-26.
96. Glushkov A.V. Quantum stochastic modelling energy transfer and effect of rotational and v-t relaxation on multi-photon excitation and dissociation for CF_3Br molecules/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Shpinareva I.M., Kozlovskaya V.P., Gura V.I.// *Int. Journ.Quant.Chem.*-2005.-Vol.104, N4 .-P. 512-516
97. Glushkov A.V. Consistent quantum approach to new laser-electron-nuclear effects in diatomic molecules / Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Loboda A.V., Shpinareva I.M., Prepelitsa G.P.// *J.Phys.CS.*-2006.-Vol.35.-P.420-424.
98. Glushkov A.V. Consistent quantum theory of the recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Gurnitskaya E.P., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V.// *J.Phys.CS.*-2006.- Vol.35.- P.425-430.
99. Seaton M.J. Quantum defect theory/ Seaton M.J.// *Rep.Prog.Phys.*-1983.-Vol.46.- P.167-195
100. Ho Y-K., The method of complex coordinate rotations and its application to atomic collision processes//*Phys.Rep.*-1983.-Vol.99.-P.3-84.
101. Nakamura N. Relativistic effects on resonant interactions between electrons and highly charged ions/ Nakamura N., Kavanagh A.P., Watanabe H., Sakaue H.A., Li Y., Kato D., Currell F.J., Ohtani S.// *J.Phys.CS.*-2007.-Vol.88.-P.012066 (10p).
102. Badnell N.R. Calculations for electron-ion collisions and photoionization processes for plasma modeling/ Badnell N.R.//*J.Phys.CS.*-2007.-Vol.88.-P.012070 (8p)
103. Mocken G.R. Bound atomic dynamics in the MeV regime/ Mocken G.R., Keitel C.H.// *J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2004.-Vol.37.-P.L.275-283.
104. Sahoo B. Magnetic dipole hyperfine interactions in $^{137}Ba^+$ and accuracies of neutral weak interaction matrix elements/ Sahoo B, Gopakumar G., Chaudhuri R, Merlitz H., Mahapatra U., Makherjee D., Das B.P.//*Phys.Rev.A*-2003.-Vol.68.- P.040501 (12p).

105. Derevianko A. Dressing lines and vertices in calculations of matrix elements with the coupled-cluster method and determination of Cs atomic properties/ Derevianko A., Porsev S.G. // Phys.Rev. A.-2005.-Vol.71.-P.032509-1-10
106. Dorofeev D.L. Method of the Quantum Defect Green's Function for Calculation of Dynamic Atomic Polarizabilities/ Dorofeev D.L., Zon B.A., Kretinin I.Y., Chernov V.E.// Optics and Spectroscopy.-2005.-Vol. 99, N4.-Pe 540-548
107. Trabert E. M1/E2 decay rates in CoXI,NiXII,CuXIII measured at heavy-ion storage ring/ Trabert E., Saathoff G., Wolf A.//J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys.-2004.-Vol.37.-P.945-952
108. Gillaspay J.D. EBIT spectra of highly stripped ions from the visible to the X ray/ Gillaspay J.D. // Phys.Scripta.-1996.-Vol.65.-169-174.
109. Рагозин Е.Н. Лазерные источники в мягкой рентгеновской области спектра/ Рагозин Е.Н., И.И. Собельман// УФН.-2005.-Т.175.-С.1139-1141
110. Делоне Н.Б. Атом в сильном световом поле/ Н.Б.Делоне, В.П. Крайнов;-М.: Атомиздат., 1994.-370р.
111. Делоне Н.Б. Динамический штарковский сдвиг атомных уровней/ Н.Б.Делоне, В.П. Крайнов // УФН.- 1999.-Т.169, N7. -С.753-772.
112. Косарев И.Н. Кинетическая теория плазмы и газа. Взаимодействие мощных лазерных импульсов с плазмой/ И.Н. Косарев // УФН.-2007.-Т.176.-С.1267-1284.
113. Аглицкий Е.В. Спектроскопия автоионизационных состояний атомных систем/ Е.В. Аглицкий, У.И. Сафронова.- М.: Энергоатомиздат,1985.-160С.
114. Вайнштейн Л.А. Структура и характеристики ионов в плазме/ Л.А. Вайнштейн, В.П. Шевелько.-М.: Наука, 1986.-216С.
115. Дыхне А.М. Внезапные возмущения и квантовая эволюция/ А.М. Дыхне, Г.Л. Юдин. - М.: Наука, 1996.-380С.
116. Амусья М.Я. Атомный фотоэффект/ М.Я. Амусья - М.: Наука, 1983.- 272С.
117. Браун М.А., Гурчумелия А.Д., Сафронова У.И. Релятивистская теория атома/ М.А. Браун, А.Д. Гурчумелия, У.И. Сафронова.-М.: Наука, 1984.- 268С.
118. Окс Е.А. Спектроскопия плазмы с квазимонохроматическими электрическими полями/ Е.А. Окс. - М.:Энергоатомиздат.-1990.-240С.

119. Берка Ф. Атомы в астрофизике/ Под ред. Ф.Берка, И. Эйснера, Д. Хаммера , И. Персиваль.- М.: Мир.-1986.-340С.
120. Дмитриев Ю.Ю. Релятивистские эффекты в спектрах атомных систем/ Дмитриев Ю.Ю., Климчицкая Г.Л., Лабзовский Л.Н.-М: Энергоатомиздат, 1984.-230С.
121. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах/ В.С. Летохов.-М.:Наука.-1993.-408С.
122. Собельман И. Введение в теорию атомных спектров/ Собельман И.- М:Наука, 1977.-320С.
123. Радциг А.А. Справочник по атомной и молекулярной физике/А.А. Радциг, Б.М. Смирнов.- М.: Энергоиздат, 1986.-240С.; Corlis C. Energy levels of iron/ Corlis C., Sugar J.//J.Phys.Ch.Ref.Dat.-1982.-Vol.11.-P. 135-241
124. NIST atomic spectra database (version 3.1.3; 2009), <http://physics.nist.gov/asd3>.
125. Ланцош К. Практические вопросы прикладного анализа/ К. Ланцош.-М: Физматг., 1961
126. Botham C. Relativistic effects in atoms and molecules/ Botham C., Martensson A.M., Sanders P.G.-Vancouver: Elsevier,2001.- 645p.
127. Volz U. Precision lifetime measurements on alkali atoms and helium by beam-gas-laser spectroscopy/ Volz U., Schmoranzner H. //Phys.Scr.-1996.-Vol.65,N1.-P.48-56.
128. Buchanov V.V. Laser separation of Silicon Isotopes by the AVLIS Technology/ Buchanov V.V., Kazaryan M.A., Kalugin M.M., Prokhorov A.M.// Atomic and Molecular Pulsed Lasers.-Tomsk: SO RAN, 2001.-P.72.
129. Glushkov A.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in quantum optics/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // Europ.Phys.Journ. ST.-2008.- Vol.160.-P.195-204.
130. Glushkov A.V. Spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear effects in multiatomic molecules/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V.// Molec. Physics (UK).-2008.-Vol.106.-N9,10.-P.1257-1260.

131. Ivanova E.P. High-order corrections in Relativistic Perturbation Theory with model zero Approximation/ Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E.// *Physica Scripta*.-1985.-V.32,N4.-P.512-524.
132. Driker M.N. Relativistic calculation of spectra of 2-2 transitions in O-and F-like atomic ions/ Driker M.N., Ivanova E.P., Ivanov L.N., Shestakov A.F.// *Journ.Quant.Spectr. Rad.Transfer (USA)*.-1982.-Vol.28, N6.-P.531-535.
133. Bieron J. Lifetime and hyperfine structure of 3D_2 state of radium/ Bieron J., Froese-Fischer C., Fritzsche S., Pachucki K.// *J.Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*-2004.-Vol.37-P.L305-311.
134. Plummer M. Non-hermitian dynamics of argon atoms at 248 nm/ Plummer M., Noble C.J.// *J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2003.-Vol.36.-P.L219-L226.
135. Staudt A. Stabilization of He in intense high-frequency laser pulses beyond dipole approximation/ Staudt A., Keitel C.H.// *J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.*-2003-Vol.36-P.L203-209
136. Hasbani R. Resonant and non-resonant ionization of He by XUV short intense pulses/ Hasbani R., Cormier E., Bachau H.// *J.Phys.B.At.Mol.Phys.*-2000.-Vol.33.-P.2101-2116.
137. Bucksbaum P.H. Resonant double-excitation induced by wiggling ATI electrons/ Bucksbaum P.H., Sanpera A., Lewenstein M. // *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.*-1997-Vol.30.-P.L.843-850.
138. Laughlin C. Model potential method/ Laughlin C., Victor G.A. // *Adv. Atom. Mol. Phys.*-1988- Vol.25.- P.163-194.
139. Guimaraes M.N. A study of the confined hydrogen atom using the finite element method/ Guimaraes M.N., Prudente F.V.// *J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys.*-2005.-Vol.38.-P.2811-2825.
140. Courade E. Etal, Two-photon ionization of cold rubidium atoms with near resonant intermediate state/ Courade E., Anderlini M., Ciampini D.// *J.Phys.B. At.Mol.Opt.Phys.*-2004.-Vol.37.-P.967-979.

141. Mercuris T. Solution of the many-electron many-photon problem for strong fields: Application to Li^- in one and two-colour laser fields/ Mercuris T., Nikolaides C.A.//Phys.Rev.A.-2003.-Vol.67.-P.063403-1-063403-12.
142. Kamta G.L. Elucidating the mechanisms of double ionization using intense half-cycle, single-cycle and double-half-cycle pulses/ Kamta G.L., Starace A.F.// Phys.Rev.A.-2003.-Vol.68.-P.043413-1-043413-11.
143. Luc-Koenig E. Eigenchannel R-matrix study of two-photon processes including above-threshold ionization in magnesium/ Luc-Koenig E., Lyras A., Lecomte J.-M., Aymar M.// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1997.-Vol.30.-P.5213-5232.
144. Becker A. S-matrix analysis of coincident measurement of two-electron energy distribution for double ionization of He in an intense laser field/ Becker A., Faisal F.H.M.//Phys.rev.Lett.-2002.-Vol.89,N18.-P.193003-1-193003-4.
145. Bommels J. Low-lying resonances in electron-neon scattering: Measurement at 4-meV resolution and comparison with theory/ Bommels J., Franz K., Hoffmann T., et al // Phys.Rev.A.-2005.-Vol.71.-P.12074-1—10.
146. Fischer C.F. Calculation of negative ions in the multiconfiguration Hartree-Fock approximation : Ca , Sr / Fischer C.F. // Phys.Rev.A.-1989.-Vol.39,N3.- P.963-970.
147. Weiss A.W. Hartree-Fock line strengths for lithium, sodium and copper isoelectronic sequences/ Weiss A.W. //J.Quant.Spectr. Radiat.Transfer.-1977.-Vol.18, N5.- P.481- 491.
148. Johnson W.R. Relativistic random-phase approximation/ Johnson W.R., Lin C.D., Cheng K.T. // Phys.Scr.-1980.-Vol.21,N3.-P.409-422.
149. Johnson W. Relativistic random phase approximation in theory of negative ions/ Johnson W., Sapirstein J., Blundell S.A.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1989-Vol.23,N8-P.L175-182
150. Головинский П.А. Многоквантовые процессы на отрицательных ионах/ П.А. Головинский, Б.А.Зон //Изв.АН СССР.-1981.-Т.45,№12.-С.2305-2319.
151. Dreizler R.M., Density functional theory of relativistic systems/ Dreizler R.M.// Phys.Scripta.-1993.-Vol.46.-P.167-172.

152. Fuentealba P. On the reliability of semiempirical pseudopotentials: simulation of Hartree-Fock and Dirac-Fock methods/ Fuentealba P., Stoll H. // J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.- 1983.-Vol.16,N2.- P.L323-328.
153. Кос К. Multi-reference relativistic configuration interaction calculations for $2s^2 2p^2 P_{3/2} - ^2P_{1/2}$ M1 and E2 transitions in boron isoelectronic sequence/ Кос К.// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2003.-Vol.36.-P.L.93-98.
154. Глушков А.В. Релятивистский поляризационный потенциал много электронного атома/ Александр Васильевич Глушков // Изв.вуз. Физика.-1990.- N1.-С.5-9.
155. Ivanov L.N. Extrapolation of atomic ion energies by model potential method: Na-like spectra / Ivanov L.N.,Ivanova E.P.// Atom.Data Nucl .Data Tabl.-1979.- Vol.24,N2.-p.95-121.
156. Vidolova-Angelova E. Autoionization decay of excited Rydberg Tm states/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N., Angelov D.A.//J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.- 1988.-Vol.21.-P.3877-3890.
157. Vidolova-Angelova E.Relativistic perturbation method for investigating the radiation decay of highly excited many electron atoms: Tm atom/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N., Ivanova E.P., Angelov D.A.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.- 1986.-Vol.19.-P.2053-2069.
158. Vidolova-Angelova E. Autoionizing Rydberg states of thulium. Re-orientation decay due to monopole interaction/ Vidolova-Angelova E., Ivanov L.N.// J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.-1991.-Vol.24.-P.4147-4158.
159. Беков Г.И. Лазерная спектроскопия узких двукратно возбужденных автоионизационных состояний атома иттербия/ Г.И. Беков, Е. Видолова-Ангелова, Л.Н. Иванов, В.С. Летохов, В. Мишин// ЖЭТФ.- 1981.-Т.80,N3.- С.866-878.
160. Видолова-Ангелова Е.П. Узкие низколежащие состояния отрицательного иона Yb/ Е.П. Видолова-Ангелова, Е.П. Иванова, Л.Н. Иванов// Опт.Спектр.- 1983.-Т.54,N4.- С.590-596.

161. Видолова-Ангелова Е.П. Энергии и ширины автоионизационных состояний атома Yb / Е.П. Видолова-Ангелова, Е.П. Иванова, Л.Н. Иванов // *Опт.Спектр.*-1981.-Т.5.-С.243-248.
162. Видолова-Ангелова Е.П. Природа аномально узких резонансов в атомах редкоземельных элементов и их отрицательных ионах/ Е.П. Видолова-Ангелова, Л.Н. Иванов, Е.П. Иванова, В.С. Летохов//*Изв.АН СССР.Сер.Физич.*-1981.-Т.45,N12.-С.2300-2304
163. Glushkov A.V. Calculation of the spectroscopic characteristics of complex atoms and ions in electric field; the Thulium/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V. // *Bound Volume of Paris-Meudon Observatory (Paris, France).*-1996.-P.139-140.
164. Indelicato P. Projection operator in the multi-configuration Dirac-Fock method/ Indelicato P., Desclaux J.P. // *Phys.Scripta.*-1993.-Vol.46.-P.110-115.
165. Glushkov A.V. QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Chernyakova Yu. G., Svinarenko A.V., Khetselius O.Yu.// *Nucl. Phys.A.*-2004.-Vol. 734.-Pe21-25.
166. Ambrosov S. V. Laser photoionization sensor of the separating heavy isotopes and nuclear isomers: selective ionization by DC electric and laser field (U, Tm) / Ambrosov S. V. // *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2004.-N3.-P.53-62.
167. McEachran R. Relativistic version of generalized non-perturbative polarized orbital method/ McEachran R., Staufer A., Ji W., Zuo T.//*J.Phys.B.* -2004.-Vol.37.-P.885-904.
168. Martensson-Pendrill A.M. Many perturbation theory in atomic structure calculations/ Martensson-Pendrill A.M. // *Phys.Scripta.*-1993.-Vol.46.-P.102-109.
169. Migdalek J. Theoretical oscillator strengthes: Transitions in principal, sharp, diffuse spectral series of Li,Rb,In spectra/ Migdalek J. // *Can.J.Phys.*-1976.-Vol.54.-P.130-136.
170. Глушков А.В. Новый метод расчета спектра и самосогласованного поля отрицательных ионов/ Александр Васильевич Глушков// *Известия вузов. Сер.Физика.*-1990.-N9.-С.41-46.

171. Глушков А.В. Релятивистский расчет сил осцилляторов в Fr-подобных ионах методом модельного потенциала / Александр Васильевич Глушков// Опт. Спектр.-1991.-Т.70.-С.952-955.
172. Глушков А.В. Расчет сил осцилляторов в многозарядных ионах с одним электроном над замкнутым остовом/ Александр Васильевич Глушков// Опт. Спектр.-1992.-Т.72,№3.-С.542-547.
173. Glushkov A.V. Sensing the stochastic laser pulse structure and chaotic, photon-correlation effects in the non-linear multi-photon atomic dynamics in laser and DC electric field/ Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A.// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2004.- №2.-P.8-14.
174. Rusov V. On possible genesis of fractal dimensions in the turbulent pulsations of cosmic plasma – galactic-origin rays – turbulent pulsation in planetary atmosphere system/ Rusov V., Glushkov A., Loboda A., Khetselius O., Khokhlov V., Svinarenko A., Prepelitsa G.// Adv. in Space Research.-2008.-Vol.42.-P.1614-1627.
175. Glushkov A.V. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum/ Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V. // Sensor Electr. and Microsyst. Techn. (Ukraine).-2008.-N4.-P.5-11.
176. Glushkov A.V. DC Strong Field Stark Effect for Non-hydrogenic Atoms: Consistent Quantum Mechanical Approach/ Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A. // Int. Journ. Quantum Chem.-2004.-Vol.99,№5.-P.936-940.
177. Rusov V.D. Stochastic dynamics of the atomic systems in the crossed electric and magnetic field: the rubidium atom recurrence spectra/ Rusov V.D., Glushkov A.V., Korchevsky D.A., Vaschenko V.N., Ignatenko A.V.//Вісник Київського унів-ту. Сер.фіз.-мат.–2004.-№4.-524-529.
178. Ambrosov S.V. Sensing stochasticity of atomic systems in crossed electric and magnetic fields by analysis of level statistics for continuous energy spectra/ Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A., Kozlovskaya V.P.//Sensor Electronics and Microsystems Technologies-2005.-N2.-P.19-23.

179. Korchevsky D.A. Sensing stochasticity of atomic systems by analysis of recurrence spectra in an crossed DC magnetic and AC electric fields/ Korchevsky D.A., Ignatenko A.V., Shpinareva I.M. // *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2005.-N1.-P.21-26.
180. Glushkov A.V. Manifestation of the new laser-electron nuclear spectral effects in thermalized plasma: QED theory of cooperative laser-electron- nuclear processes/ Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Prepelitsa G.P., Ignatenko A.V.// *J.Phys.CS.*-2005.-Vol.178.-P.199-206.
181. Ignatenko A.V.Optical bi-stability effect for multi-photon absorption in atomic ensembles in a strong laser field/ Ignatenko A.V., Prepelitsa G.P., Perelygina T.B., Buyadzhi V.V.// *Photoelectronics.*-2009.- N18.-P.71-76.
182. Ambrosov S. Wannier-Mott exciton and H, Rb atom in a DC electric field: Stark effect/ Ambrosov S., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V.// *Photoelectronics.*-2008.- N17.-P.84-87.
183. Ignatenko A.V. Probabilities of the radiative transitions between stark sublevels in spectrum of atom in an DC electric field: new approach/ Ignatenko A.V.//*Photoelectronics.*-2007.-N16.-P.71-74.
184. Glushkov A.V. Using meteorological data for reconstruction of annual runoff series over an ungauged area: Empirical orthogonal functions approach/ Glushkov A.V., Loboda N.S., Khokhlov V.N. // *Atmospheric Research (Amsterdam, Elsevier).*-2005. – Vol. 77. – No. 1-4 – P. 100-113.
185. Glushkov A.V. Short-range forecast of atmospheric pollutants using non-linear prediction method/ Glushkov A.V., Khokhlov V., Loboda N.S., Bunyakova Y.// *Atmospheric Environment (Amsterdam,Elsevier).*-2008.-Vol.42.-N31-P.7284-7292.
186. Glushkov A.V. Signatures of low-dimensional chaos in hourly water level measurements at coastal site of Mariupol, Ukraine/ Glushkov A.V., Khokhlov V., Loboda N.S., Serbov N.G., Zhurbenko K.// *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment (Berlin, Springer).* – 2008. – Vol. 22. – No. 6. – P. 777-787.
187. Глушков А.В. Низкоразмерный хаос во временных рядах концентраций загрязняющих веществ в атмосфере и гидросфере / А.В. Глушков, В.Н. Хохлов,

- Н.Г. Сербов, Е.П. Баланюк, А.К. Балан, Ю.Я. Бунякова // Вестник Одесск. гос. эколог. ун-та. – 2007. – № 4. – С. 337-348.
188. Глушков А.В., Серга Э. Н., Бунякова Ю.Я., Хаос во временных рядах концентраций загрязняющих веществ в атмосфере (г. Одесса)//Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту.-2010.-N9.-С.184-189
189. Glushkov A.V., Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Prepelitsa G.P.//In: Coherence and Ultrashort Pulsed Emission, Ed. Duarte F. J. (Intech, Vienna).-2011.-P.159-186.
190. Glushkov A.V., Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field//Adv.in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology. Series: Progress in Theoretical Physics and Chemistry, Eds. M.Hotokka, J.Maruanı, E. Brändas, G.Delgado-Barrio (Berlin, Springer).-2013.-Vol.28.-Part2.-P.161-178.
191. Препелиця Г.П., Мікропроцесорні системи обробки даних та управління /Препелиця Г.П., Великий В.І.-Одеса: ТЕС, 2004.-212С.; Препелиця Г.П., Схемотехніка ЕОМ/Препелиця Г.П.-Одеса: ОДЕКУ, 2002.-303С.
192. Prepelitsa G.P., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: New approaches, uniformity and charm of chaos/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// Sensors Electronics and Microsystems Technologies.-2014.-Vol.11.-P.43-57.
193. Prepelitsa G.P., Non-linear optics and spectroscopy of atomic and laser systems with elements of a chaos//International Scientific Journal “Photoelectronics”ю-2013.-Vol.22.-P.51-60.
194. Prepelitsa G.P., Nonlinear dynamics of quantum and laser systems with elements of a chaos/ Prepelitsa G.P.// International Scientific Journal “Photoelectronics”.-2014.-Vol.23.-P.73-78.
195. Glushkov A.V., Geometry of Chaos I: Theoretical basis’s of a consistent combined approach/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Prepelitsa G.P., Svinarenko A.A.

- //International Scientific Journal "Proceedings of International Geometry Center".- 2013.-Vol.6,N1.-P.67-79.
196. Prepelitsa G.P., Non-linear analysis of chaotic self-oscillations in backward-wave tube/ Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B.//International Scientific Journal "Photoelectronics".-2013.-Vol.22.-P.103-107
197. Prepelitsa G.P., Nonlinear stochastic dynamics governing for quantum systems in external field: Chaos theory and recurrence spectra analysis/ Prepelitsa G.P., Kuzakon V.M., Buyadzhi V.V., Solyanikova E.P., Karpenko A.A., Korchevsky D.A.// Photoelectronics.-2012.-N21.-P.57-64.
198. Glushkov A.V., Kuzakon V.M., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V., Geometry of Chaos: Advanced computational approach to treating chaotic dynamics of some hydroecological systems II// International Scientific Journal "Proceedings of International Geometry Center".-2015.-Vol.8,N1.-P.91-96.
199. Prepelitsa G.P., New chaos-geometric and information technology analysis of chaotic generation regime in a single-mode laser system with absorbing cell// International Scientific Journal "Proceedings of International Geometry Center".- 2015.-Vol.8,N2.-P.97-103.
200. Glushkov A.V., Analysis and forecast of the hydroecological system pollution dynamics based on methods of chaos theory: new general scheme//Vestnik Odessa State Environmental University.-2015.-N19.-P.12-17.
201. Khetselius O.Yu., Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction and neural networks methods: Application to hydroecological system pollution dynamics//Vestnik Odessa State Environmental University.-2015.-N19.-P. 30-35.
202. Bunyakova Yu.Ya., Dynamics of chemical pollution in the forested watersheds: new data on correlation dimension and chaos elements in time series //Vestnik Odessa State Environmental University.-2015.-N19.-P. 36-40.
203. Glushkov A.V., Sensing interaction dynamics of chaotic systems within a chaos theory and microsystem technology geomath with application to neurophysiological systems/ Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V.,

- Brusentseva S.V., Zaichko P.A.// Sensor Electronics and Microsystems Technologies-2014.-Vol.11,N3.-P.62-69.
204. Glushkov A.V., Advanced relativistic energy approach to radiation decay processes in atomic systems/ Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Nikola L.V. //Photoelectronics (“Copernicus”).-2015.-Vol.24.-P.11-22.
205. Khetselius O.Yu., Hyperfine structure parameters of the mercury Hg isotopes: consistent nuclear-QED theory/ Khetselius O.Yu., Florko T.A., Smirnov A.V., Bunyakova Yu.Ya.//International Journal Photoelectronics (“Copernicus”).-2015.-Vol.24.-P.65-71.
206. Glushkov A.V., Spectroscopy of the complex autoionization resonances in spectrum of helium: Test and new spectral data/ Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ternovsky V.V., Smirnov A.V. , Zaichko P.A.//Photoelectronics (“Copernicus”).-2015.-Vol.24.-P.94-102.
207. Ignatenko A.V., On determination of radiative transitions probabilities in relativistic theory of diatomic molecules: new scheme/ Ignatenko A.V., Ponomarenko E.L., Kvasikova A.S., Kulakli T.A.//Photoelectronics (“Copernicus”).-2015.-Vol.24.-P.116-121.
208. Lepikh Ya.I., Glushkov A.V., Ternovsky V.B., Brusentseva S.V., Duborez A.V., Nonlinear dynamics of relativistic backward-wave tube in self-modulation and chaotic regime//Photoelectronics (“Copernicus”).-2015.-Vol.24.-P.77-87.
209. Glushkov A.V., Relativistic Quantum Chemistry: Advanced Approach to Construction of the Green's Function of the Dirac Equation with Complex Energy and Mean-Field Nuclear Potential/ Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Florko T.A., Shakhman A.N.// Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics: Series: Frontiers in Theoretical Chemistry and Physics, Eds. M.Nascimento, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Springer).-2015-Vol.29.-Ch.12.-P.197-218.
210. Prepelitsa G.P., New nonlinear analysis, chaos theory and information technology approach to studying dynamics of the the erbium one-ring fibre laser//Photoelectronics (“Copernicus”).-2015.-Vol.24.-P.38-43.

211. Prepelitsa G.P., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: new approaches, uniformity and charm of chaos/ Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A.// Sensor Electronics and Microsystems Techn.-2014.-Vol.11,N4.-P.43-57