

**В. А. Бабенко\****Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, Україна*\*Відповідальний автор: [pet2@ukr.net](mailto:pet2@ukr.net)

## ДОСЛІДЖЕННЯ БІКВАДРАТИЧНОГО АНГАРМОНІЧНОГО ОСЦИЛЯТОРА НА ОСНОВІ НЕЛІНІЙНОГО ВАРІАЦІЙНОГО МЕТОДУ РЕЛЕЯ–РІТЦА. I. РОЗРАХУНОК ТА АНАЛІЗ РІВНІВ ЕНЕРГІЇ ТА ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ

Для квантового біквдратичного ангармонічного осцилятора з гамільтоніаном  $H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 x^2) + \lambda x^4$  продовжено наші дослідження його властивостей на основі застосування збіжного розкладу хвильової функції системи за модифікованим осциляторним базисом з варійованою підгінною частотою  $\omega_0$ , тобто за повним набором власних функцій  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}$  деякого опорного гармонічного гамільтоніана  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 x^2)$ . Даний запропонований нами підхід дає змогу кардинально прискорити збіжність розкладів завдяки додатковій адаптації базисних функцій до структури досліджуваної системи. Основну увагу приділено строгій математичній реалізації варіаційної схеми з оптимізацією частоти базису  $\omega_0$  як справжньої нелінійної варіаційної змінної. Розгляд здійснено в рамках узагальненого нелінійного варіаційного методу Релея–Рітца, згідно з яким виконано процедуру мінімізації енергії станів системи за нелінійним параметром  $\omega_0$  з метою точного розрахунку його оптимального значення при різних значеннях константи зв'язку осцилятора  $\lambda$  та порядку варіаційного базису  $N$ . Уперше для даної моделі виконано повну строгую чисельну реалізацію цієї процедури з точним контролем, що дає можливість перейти від евристичного вибору параметрів до строго алгоритмічного та відтворюваного розрахунку. Таке строге варіаційне обґрунтування дає змогу дослідити структуру функціонала енергії та особливості поведінки нелінійного параметра. Показано, що запропонований підхід забезпечує стандартну точність обчислень енергії  $10^{-8}$  при дуже малому порядку базису  $N \approx 6 \div 7$  та зберігає при цьому свою ефективність у всій області сильного зв'язку – при будь-яких  $\lambda$ . Досліджено поведінку оптимізованого частотного параметра  $\omega_0$  залежно від порядку базису  $N$  і виявлено та інтерпретовано важливий ефект варіаційного плато – широкої ділянки зміни параметра  $\omega_0$ , у межах якої розрахована енергія залишається практично сталою. Далі цим методом розраховано хвильові функції системи для ряду значень  $\lambda$ . Отримані результати демонструють, що нелінійна оптимізація базису є надзвичайно дієвим механізмом значного підвищення ефективності варіаційних розрахунків як для енергій, так і для хвильових функцій.

*Ключові слова:* ангармонічний осцилятор, гармонічний осциляторний базис, біквдратичний ангармонічний осцилятор, нелінійний варіаційний метод, метод Релея–Рітца, квантова теорія поля.

### 1. Вступ

Квантовий ангармонічний осцилятор – фундаментальна та універсальна модельна система квантової теорії поля (КТП) та квантової механіки. Він широко використовується в багатьох областях [1–25], включаючи опис квантових флуктуацій, збуджень в атомних ядрах і твердих тілах, механізмів самодії в скалярних моделях КТП та вивчення потенціальних ям. Завдяки змістовній формі гамільтоніана з багатою динамікою модель охоплює широкий спектр квантових ефектів, і є важливою тестовою системою для апробації та розвитку аналітичних підходів і чисельних методів. Додаткові відомості про модель та її значення, а також докладні бібліографії подано в наших попередніх роботах [19, 21, 24,

25]. Ця робота є продовженням наших попередніх досліджень [24, 25], у яких модель біквдратичного ангармонічного осцилятора досліджувалася методом розкладу хвильової функції за повним набором власних функцій гармонічного осцилятора (осциляторним базисом). У [25] було запропоновано підхід для прискорення збіжності розкладів через введення модифікованого осциляторного базису з варійованою підгінною частотою  $\omega_0$  як додатковим нелінійним параметром. Такий модифікований базис з довільною частотою є узагальненням стандартного базису з фіксованою частотою і дає змогу адаптувати форму базисних функцій до структури хвильової функції системи через варіювання частоти базисних функцій  $\omega_0$ . Запропонований підхід значно

© Автор(и), 2026

Стаття опублікована ІЯД НАН України за умовами відкритого доступу за ліцензією [CC BY-NC 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

підвищив ефективність методу, особливо в області сильного зв'язку, – завдяки раціональному вибору частоти  $\omega_0$ . Аналіз показав високу швидкість збіжності розкладів, досягнуту варіюванням частоти  $\omega_0$  – у всьому діапазоні константи зв'язку осцилятора  $\lambda$ , включаючи область сильної ангармонічності. Це уможливило точні розрахунки рівнів енергії при будь-яких  $\lambda$ , використовуючи малу кількість  $N \lesssim 11$  базисних функцій без потреби збільшувати  $N$  зі зростанням  $\lambda$ . Отже, запропонований метод варіювання частоти оптимізованого базису уможливує високоточні обчислення при малій розмірності базису в усьому діапазоні  $\lambda$ , демонструючи високу ефективність і збіжність.

Відтак, у [25] на основі емпіричного вибору частоти модифікованого осциляторного базису при кожному значенні  $\lambda$  було показано, що оптимальний підбір частоти дає змогу досягти високої точності розрахунків при використанні лише  $N \lesssim 11$  базисних функцій навіть в області сильного зв'язку. Це підкреслює ключову роль частоти базису як фундаментального нелінійного ступеня свободи, що визначає масштаб і структуру наближення. Однак у [25] підбір частотного параметра  $\omega_0$  здійснювався суто емпірично, що є методичним обмеженням, яке поточна робота усуває строгою процедурою. Незважаючи на практичну ефективність підходу, запропонованого в роботі [25], у ній не наведено строгого обґрунтування вибору параметра  $\omega_0$  і не досліджувалася його залежність від розмірності базису, тобто була відсутня постановка і реалізація повної варіаційної задачі на мінімум енергії. Розвиваючи підхід [25], ми продовжуємо дослідження моделі біквадратичного осцилятора на основі розкладу хвильової функції за модифікованим осциляторним базисом. Однак тепер застосовується строгий метод оптимізації в рамках узагальненого нелінійного варіаційного методу Релея–Рітца (РР) з точною оптимізацією за варіюваним нелінійним параметром – частотою базису. Такий підхід усуває обмеження, пов'язані з використанням раніше емпіричним підбором частоти. Сам метод РР тісно пов'язаний з методом розкладу за базисом. Нелінійний метод РР можна розглядати як узагальнення методу розкладу за базисом, доповнене варіюванням нелінійних параметрів, що визначають форму пробних базисних функцій. У нашому випадку таким параметром є частота осциляторного базису  $\omega_0$ . Дотепер застосування узагальненого методу РР з оптимізацією за частотою базису до задачі про біквадратичний

осцилятор не виконувалося. Нами ця прогалина заповнюється: уперше систематично реалізовано строге чисельне розв'язання повної варіаційної задачі з мінімізацією енергії за частотою базису. Тобто, частота  $\omega_0$  розглядається далі як справжня варіаційна змінна, оптимальне значення якої для кожного  $\lambda$  та заданого порядку базису  $N$  визначається за допомогою строгої чисельної мінімізації енергії стану. Це дає змогу перейти від емпіричного підбору частоти до алгоритмічно реалізованої строгої процедури її оптимізації. Такий підхід відкриває можливість детального аналізу структури варіаційного функціонала, виявлення закономірностей у поведінці оптимізованого параметра, порівняння різних підходів оптимізації, а також подальшого суттєвого прискорення збіжності розкладів за осциляторним базисом. Отже, дане дослідження продовжує попередній аналіз і завершує його у вигляді повної, математично строгої реалізації нелінійної варіаційної оптимізації на просторі осциляторних функцій із варіюваною частотою. У цілому ж представлений підхід переводить вибір частоти  $\omega_0$  з області евристики в строгу варіаційну процедуру з перевірочними критеріями та відтворюваною чисельною реалізацією.

## 2. Лінійний варіаційний метод РР та його зв'язок з методом розкладу за базисом

Розглянемо спочатку лінійний варіаційний метод РР у зв'язку з раніше застосованим нами методом розкладу за повним базисом [24, 25] – з метою виявлення спільних рис і підготовки переходу до узагальненого нелінійного варіаційного методу РР з оптимізацією за нелінійним параметром. Одним з основних методів розв'язання стаціонарного рівняння Шредингера  $H\psi = E\psi$  для хвильової функції  $\psi$  зв'язаного основного стану системи є варіаційний метод [26–29], що ґрунтується на мінімізації функціонала енергії (функціонала Релея):

$$\mathcal{E}[\psi] \equiv R[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (1)$$

Тут  $\mathcal{E}[\psi]$  – середнє значення енергії системи з гамільтоніаном  $H$  у стані  $\psi$ . Варіаційний принцип [26–29] стверджує, що для будь-якої пробної функції  $\psi = \psi_{trial}$  значення функціонала енергії в цьому стані  $\psi_{trial}$  завжди не менше точної енергії  $E_0$  основного стану:

$$\varepsilon = \mathcal{E}[\psi_{trial}] = \langle H \rangle \geq E_0. \quad (2)$$

Таким чином, будь-яка пробна функція дає оцінку зверху для енергії основного стану –  $\mathcal{E}[\psi_{trial}] \geq E_0$ . Деяка пробна функція  $\psi$  повинна належати гільбертову простору системи та звичайно обирається нормованою на одиницю:  $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$ . Отже, розрахунок енергії основного стану зводиться до знаходження мінімуму функціонала Релея (1) за нормованою хвильовою функцією  $\psi$ . Практично це означає вибір пробної функції залежною від декотрих  $N$  незалежних параметрів  $\alpha_n - \{\alpha_n\}_{n=0}^{N-1}$ . Обчислення відношення (1) на заданій функції  $\psi = \psi(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1})$  дає вираз  $R = R(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1})$  залежний від цих невідомих параметрів  $\alpha_n$ . Тоді визначення необхідних значень параметрів  $\alpha_n$  зводиться до знаходження мінімуму величини  $R(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1})$ , тобто до розв'язання системи  $N$  рівнянь

$$\frac{\partial R}{\partial \alpha_n} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (3)$$

Система (3) задає умову стаціонарності функції  $R(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1})$  за  $N$  змінними і еквівалентна задачі на стаціонарні точки. На практиці розв'язання таких систем звичайно замінюють пошуком стаціонарних точок функції  $R$  за допомогою чисельних методів [27]. У випадку вдалого вибору пробної функції отримане значення виразу (1) при знайдених значеннях параметрів  $\{\alpha_n^{(0)}\}_{n=0}^{N-1}$  ( $\varepsilon_0 = R(\alpha_0^{(0)}, \alpha_1^{(0)}, \dots, \alpha_{N-1}^{(0)})$ ) є близьким до точної енергії основного стану  $E_0$ , забезпечуючи оцінку зверху –  $\varepsilon_0 \geq E_0$ . Суттєвий прогрес у варіаційних обчисленнях дав лінійний метод РР [30], який зробив процедуру систематичною та послідовною. Метод засновано на представленні пробної функції у вигляді скінченної лінійної комбінації фіксованих незалежних базисних функцій  $\varphi_n$  з варійованими коефіцієнтами  $c_n$ , що відіграють роль невідомих параметрів  $\alpha_n$ . Тобто, пробна функція будується як лінійна суперпозиція базисних функцій, а саме – маючи у гільбертовому просторі системи деякий повний ортонормований базис  $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$  ( $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}$ ) – ми можемо побудувати пробну функцію у вигляді скінченної лінійної комбінації базисних функцій  $\varphi_n$ :

$$\psi = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \varphi_n, \quad (4)$$

де  $c_n$  – шукані невідомі коефіцієнти, а  $\varphi_n$  – фіксовані функції базису. При цьому лінійні коефіцієнти  $c_n$  підбираються так, щоб мінімізувати (1). При наявності у  $\varphi_n$  внутрішніх нелінійних параметрів їхні значення на даному кроці вважаються фіксованими. Підстановка (4) в (1) і мінімізація за  $\{c_n\}_{n=0}^{N-1}$  призводить до системи  $N$  лінійних алгебраїчних рівнянь для  $c_n$ :

$$\sum_{n=0}^{N-1} H_{mn} c_n = E c_m, \quad m = 0, 1, \dots, N-1, \quad (5)$$

де  $H_{mn} = \langle \varphi_m | H | \varphi_n \rangle$  – матричні елементи гамільтоніана  $H$  в базисі. Отже, в основі лінійного методу РР лежить вибір скінченного числа  $N$  базисних функцій і від  $N$  залежать усі параметри розкладу (4), включаючи нелінійні параметри, що входять у самі базисні функції. При цьому залежна від  $N$  пробна функція (4) та коефіцієнти її розкладу  $c_n$  відрізняються від точної хвильової функції і від точних коефіцієнтів її розкладу за нескінченновимірним базисом  $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ . Для підкреслення цієї відмінності іноді навіть використовують спеціальні позначення [31]. Таким чином, ця вихідна залежність усіх параметрів і величин від порядку базису  $N$  є артефактом скінченновимірного лінійного анзаца Рітца.

На відміну від лінійного методу РР, у методі розкладу хвильової функції за повним нескінченновимірним базисом  $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$  у гільбертовому просторі системи – цей розклад первинно задається у вигляді строгого нескінченновимірного розкладу вигляду

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n, \quad (6)$$

який теоретично в точності відтворює хвильову функцію  $\psi$ . Підстановка (6) у рівняння Шредингера призводить до нескінченної системи алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів  $c_n$ :

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_{mn} c_n = E c_m, \quad m = \overline{0, \infty}, \quad (7)$$

яка повністю еквівалентна початковому рівнянню  $H\psi = E\psi$ . І хоча за формою системи (5) і (7) збігаються при скінченному усіканні порядку системи (7), насправді між методом розкладу за повним базисом та лінійним методом РР є відмінності. А саме, в лінійному методі РР пробна функція задається як скінченна лінійна комбіна-

ція  $N$  базисних функцій, що використовується для наближеного опису точної хвильової функції. Тим самим у методі вже початково з'являється зовнішній додатковий параметр  $N$ , від якого залежить аналіз. Це робить метод РР нееквівалентним початковому рівнянню Шредінгера. У методі розкладу за базисом ситуація інша: розклад початково будується за повним нескінченним набором базисних функцій і початково жодний параметр  $N$  у постановці задачі не присутній. Підстановка такого розкладу в рівняння Шредінгера дає строго еквівалентну йому систему, а наближення виникає тільки при наступному фінальному усіканні ряду. У цьому полягає відмінність підходів. Отже, розклад за базисом є більш чітким методом, перевага якого в тому, що фізичні параметри базису (напр., частота) задаються початково один раз на основі певних міркувань і залишаються незмінними при збільшенні порядку базису  $N$ . Це виражається в незалежності характеристик базису від його розмірності. Навпаки, в методі РР параметри базису оптимізуються для кожного  $N$ , що потребує додаткових обчислень на кожному кроці та викликає нестабільність, а залежність розрахованих величин від  $N$  є ускладнюючим фактором. Однак це надає методу РР адаптивність і підвищує точність розрахунків при малих  $N$ . Отже, лінійний метод РР, що зводить задачу до скінченновимірної задачі, має виражену обчислювальну направленість. Він дає змогу перейти від варіаційного функціонала до скінченної системи лінійних рівнянь, що робить його ефективним інструментом наближеного чисельного розв'язання рівняння Шредінгера. Водночас метод розкладу за базисом, маючи більшу стабільність і передбачуваність, є формально строгим і еквівалентним рівнянню Шредінгера підходом і не містить залежності характеристик задачі від нефізичного параметра розмірності базису  $N$ . Подальший виклад показує, як ця різниця в постановці задачі напряду проявляється для методу РР у спостережуваній нерегулярній залежності  $\omega_0(N)$  та виникненні варіаційного плато.

### 3. Нелінійний варіаційний метод РР з оптимізацією за нелінійним параметром частоти осциляторного базису в застосуванні до біквдратичного осцилятора

Отже, у лінійному методі РР наближене розв'язання задачі на власні значення шукається у вигляді лінійної комбінації (4) скінченного числа базисних функцій  $\varphi_n$ , заздалегідь фіксованих. Проте ефективність методу при цьому істотно залежить від вдалості вибору базису,

особливо при малому  $N$ . Разом з цим у рамках лінійного методу РР можлива лише лінійна оптимізація за коефіцієнтами розкладу  $c_n$ , тоді як форма самих функцій  $\varphi_n$  залишається незмінною. Це обмежує гнучкість методу, особливо коли базис  $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$  погано узгоджується з формою точної хвильової функції. У таких випадках для підвищення точності потрібно або значно збільшувати розмірність базису  $N$ , або переходити до більш гнучкого опису. Відповідно, для покращення гнучкості та точності наближення в цих випадках застосовується узагальнений підхід, що передбачає введення одного або кількох внутрішніх нелінійних варіаційних параметрів, від яких залежать самі базисні функції  $\varphi_n$ . Такий перехід до узагальненого нелінійного варіаційного методу РР дає змогу розширити варіаційну свободу завдяки оптимізації характеристик самого базису. Класичним прикладом такого додаткового спеціального нелінійного ступеня свободи є частота  $\omega_0$  осциляторного базису, що лежить в основі методу розкладу за осциляторними функціями з адаптивним масштабом.

Розглянемо випадок, коли базисні функції  $\{\varphi_n(\alpha)\}_{n=0}^{\infty}$  залежать від одного додаткового нелінійного параметра  $\alpha = \alpha_N$  (далі  $\alpha \equiv \omega_0 > 0$ ). Тоді пробна функція  $\psi = \psi(c_0, c_1, \dots, c_{N-1}; \alpha_N)$  та коефіцієнти  $c_n = c_n(\alpha)$  залежать від  $\alpha$ , а його оптимальне значення  $\alpha_{\text{opt}}$  визначається з умови досягнення мінімуму значення енергії  $E_0 = E_0(\alpha)$ , отриманого у лінійній РР-задачі при заданому порядку базису  $N$  –  $\alpha_{\text{opt}}^{(N)} = \arg \min_{\alpha} E_0^{(N)}(\alpha)$ . Поки що обмежуємося тут розрахунком енергії основного стану  $E_0 = E_0(\alpha)$ . Таким чином, у найбільш поширеній версії нелінійного методу РР використовується один додатковий нелінійний параметр  $\alpha$ , що входить до структури базисних функцій  $\varphi_n(\alpha)$ . Тоді пробна функція знову записується у вигляді скінченної лінійної комбінації (4) базисних функцій  $\varphi_n(\alpha)$ , де, однак, усі величини додатково залежать від нелінійного параметра  $\alpha$ , включаючи лінійні варіаційні коефіцієнти розкладу  $c_n = c_n(\alpha)$ . Останні, як і раніше, відповідно до (5), визначаються через розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{n=0}^{N-1} H_{mn}(\alpha) c_n(\alpha) = E c_m(\alpha), \quad m = 0, 1, \dots, N-1, \quad (8)$$

де  $H_{mn}(\alpha) = \langle \varphi_m(\alpha) | H | \varphi_n(\alpha) \rangle$  – матричні елементи гамільтоніана  $H$  за базисними функціями  $\varphi_n(\alpha)$ , а система (8) розв’язується щоразу заново при новому черговому значенні  $\alpha$ .

Тобто, (8) – це задача на власні значення при фіксованому  $\alpha$ . Суть методу полягає, таким чином, у тому, щоб, зберігаючи лінійну структуру за коефіцієнтами  $c_n = c_n(\alpha)$ , забезпечити додаткову адаптацію форми базисних функцій до задачі. Це дає можливість суттєво підвищити ефективність і збіжність методу при малій кількості функцій у розкладі та врахувати відомі особливості форми хвильової функції. Далі для кожного заданого значення нелінійного параметра  $\alpha$  виконується стандартна лінійна варіаційна процедура: будується гамільтоніан у вибраному базисі  $\{\varphi_n(\alpha)\}_{n=0}^{\infty}$  і розв’язується матрична задача (8) на власні значення. Мінімальне з них,  $E_0(\alpha)$ , визначає енергію основного стану для заданого  $\alpha$ , а також відповідний власний вектор  $\{c_n(\alpha)\}_{n=0}^{N-1}$ . На наступному етапі виконується зовнішня нелінійна оптимізація за параметром  $\alpha$  –  $E_0^{(opt)} = \min_{\alpha} E_0(\alpha)$ , яка полягає в пошуку глобального мінімуму функції  $E_0(\alpha)$ . Такий підхід зберігає коректність варіаційного принципу, оскільки для будь-якого  $\alpha$  виконується нерівність  $E_0(\alpha) \geq E_0^{true}$ , і тому глобальне мінімальне значення функції  $E_0(\alpha)$  дає найкращу апроксимацію енергії основного стану при заданому порядку базису  $N$ . Тобто, ефективність і строгість методу забезпечуються тим, що варіаційний принцип діє при будь-якому  $\alpha$ , а оптимальний вибір  $\alpha = \alpha_{opt} = \arg \min_{\alpha} E_0(\alpha)$  згідно з умовою мінімуму  $E_0(\alpha)$  гарантує найкраще наближення. Формально додаткова необхідна умова глобального мінімуму для функції  $E_0(\alpha)$ , згідно з (3), може бути записана у вигляді:

$$\frac{\partial R}{\partial \alpha} = \frac{\partial E_0(\alpha)}{\partial \alpha} = \sum_{m,n=0}^{N-1} c_m(\alpha) c_n(\alpha) \frac{\partial H_{mn}(\alpha)}{\partial \alpha} = 0. \quad (9)$$

Тут, згідно з теоремою Хеллмана - Фейнмана [27, 28], внесок членів з похідними від коефіцієнтів  $c_n(\alpha)$  у (9) дорівнює нулю для власних векторів системи (8), а самі власні вектори передбачаються нормованими на одиницю:

$$\|\psi\|^2 = \sum_{n=0}^{N-1} c_n^2(\alpha) = 1.$$

Умова (9) є варіаційним рівнянням стаціонарності за параметром  $\alpha$  і дає змогу застосовувати чисельні методи оптимізації або, в окремих випадках, знаходити точку мінімуму аналітично. Таким чином, узагальнений метод РР поєднує лінійну оптимізацію за коефіцієнтами  $c_n = c_n(\alpha)$  з нелінійною оптимізацією форми базисних функцій за параметром  $\alpha$ , часто досягаючи високої точності при малій кількості базисних функцій. Тобто, підхід є двоступеневою варіаційною процедурою, яка об’єднує лінійний і нелінійний рівні оптимізації в рамках загальної задачі. Важливо, що умову стаціонарності (9) за параметром  $\alpha$  не можна просто розглядати як додаткове рівняння, приєднане до лінійної системи (8). Ці дві умови належать різним рівням варіаційної процедури: система (8) – це стандартна лінійна задача на власні значення при фіксованому  $\alpha$ , в той час як (9) визначає зовнішню нелінійну оптимізацію за  $\alpha$ . Спроба спільного розв’язання є недоцільною та складною, оскільки лінійна задача повинна бути розв’язана спочатку і природно виступає внутрішнім етапом процедури. Таким чином, узагальнений нелінійний метод РР реалізується як двоступенева процедура з послідовною лінійною та нелінійною оптимізацією. Незважаючи на строге варіаційне обґрунтування методу РР, фізична інтерпретація нелінійних варіюваних параметрів може бути неочевидною. Лінійні варіаційні параметри, які є коефіцієнтами  $c_n = c_n(\alpha)$  при фіксованих базисних функціях, часто допускають наочне тлумачення – як ваги конфігурацій або внески окремих базисних станів. Однак фізична інтерпретація нелінійних варіаційних параметрів може бути ускладнена. Це не перешкоджає застосуванню методу, але підкреслює його переважно чисельно-обчислюваний, а не інтерпретаційний характер. Таким чином, узагальнений нелінійний варіаційний підхід, на відміну від лінійного методу Рітца, включає варіювання параметрів, які визначають структуру базису, що забезпечує високу точність навіть при малій кількості функцій у розкладі. Однак це супроводжується ускладненням обчислювального ландшафту, включаючи можливу наявність цілого ряду локальних мінімумів і широких пологих ділянок («варіаційні плато»), а також чутливість до стратегії ініціалізації. Проте мотивація до оптимізації нелінійних параметрів очевидна: у багатьох задачах масштаб системи задалегідь невідомий, а тому невідповідний масштаб базису може призвести до вкрай неефективного наближення. Введення нелінійних параметрів дає змогу адаптувати базис під конкретну задачу та суттєво підвищити точність при

фіксованому порядку. Тобто, введення нелінійних параметрів надає базису додаткову гнучкість і дає можливість початково врахувати ключові особливості та масштаб розв'язку.

Для біквадратичного ангармонічного осцилятора, що визначається гамільтоніаном

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 x^2) + \lambda x^4, \quad (10)$$

природним і зручним базисом для розкладу хвильової функції системи  $\psi(x)$  є базис [24, 25]

власних функцій  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}_{n=0}^{\infty}$  деякого гармонічного осцилятора з довільною частотою  $\omega_0$  відмінною від  $\omega$ , тобто базис функцій деякого ефективного гармонічного гамільтоніана

$$\mathcal{H}^{(0)} = \mathcal{H}^{(0)}(\omega_0) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 x^2). \quad (11)$$

Опорний гамільтоніан нульового наближення (11), за власними функціями якого виконується розклад, відповідає деякій ефективній частоті

$$\sum_{n=0}^N \left[ \omega_0 \left( 2n + \frac{1}{2} \right) \delta_{mm} + \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega_0} \langle \xi^2 \rangle_{2m, 2n} + \frac{\lambda}{\omega_0^2} \langle \xi^4 \rangle_{2m, 2n} \right] c_{2n} = E c_{2m}, \quad m = 0, 1, \dots, N. \quad (12)$$

Тут безрозмірна координата  $\xi$  визначається як  $\xi \equiv \sqrt{\omega_0} x$ , а матричні елементи  $\langle \xi^2 \rangle_{mn}$  та  $\langle \xi^4 \rangle_{mn}$  відомі в явному вигляді [24, 25] і залежать лише від значень індексів.

Система (12) є стандартною секулярною системою рівнянь типу (8), де добре відомі базисні функції гармонічного осцилятора  $\varphi_n = \varphi_n(\omega_0)$  залежать від нелінійного варіюваного частотно-го параметра  $\omega_0$ . Унаслідок цього всі матричні елементи, параметри та власні значення є функціями від  $\omega_0$  і задача набуває вигляд типової нелінійної варіаційної задачі РР у сенсі розглянутого вище узагальненого методу РР з одним нелінійним параметром. Для кожного фіксованого значення  $\omega_0$  енергія основного стану  $E_0(\omega_0)$  визначається чисельно як найменше власне значення системи (12). Отримана таким чином функція  $E_0(\omega_0)$  далі чисельно досліджується з метою знаходження її глобального мінімуму – при заданих значеннях константи зв'язку осцилятора  $\lambda$  та порядку базису  $N$ , реалізуючи повну строгу варіаційну РР-оптимізацію за параметром  $\omega_0$ , як було описано вище. Конкретний чисельний пошук глобального мінімуму функції  $E_0(\omega_0)$  здійснювався нами з використанням

$\omega_0$ , яка в загальному випадку відрізняється від  $\omega$  і розглядається як певний вільний варіюваний підгінний параметр, що в даному контексті виконує роль нелінійного варіаційного параметра  $\alpha$ , розглянутого вище –  $\alpha \equiv \omega_0$ . При цьому завдяки ефективному та розумному вибору частоти  $\omega_0$  гамільтоніан (11) можна зробити досить вдалим і оптимальним нульовим наближенням, дуже близьким до вихідного повного гамільтоніана (10), а сам цей параметр  $\omega_0$  можна інтерпретувати як адаптивний параметр масштабу базису. Стосовно використаних в (10), (11) і надалі одиниць вимірювання, які ми будемо опускати – див. [25]. Виконуючи стандартний розклад (6), обмежуючись у ньому скінченною кількістю членів та враховуючи парність хвильової функції і повного гамільтоніана, одержуємо таку систему лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів  $c_{2n}(\omega_0)$  розкладу хвильової функції за довільним гармонічним базисом з частотою  $\omega_0$  у випадку основного та інших парних станів системи [25]:

стандартної стійкої двоетапної процедури, що включає початкове дискретне сканування з дрібним фіксованим кроком на широкому інтервалі з подальшим уточненням знайдених локальних мінімумів за допомогою прецизійної локальної процедури.

Результати відповідних точних оптимізаційних обчислень частотно-го параметра  $\omega_0$  та значення енергії  $E_0$  основного стану осцилятора для кількох типових значень параметра  $\lambda$  з області сильного зв'язку наведено в табл. 1, звідки видно чудову швидку збіжність розрахованих значень енергії  $E_0$  залежно від порядку варіаційного базису  $N$ . Стандартна точність розрахунку вісім цифр після коми досягається вже при  $N = 6$ , тобто при вкрай малому порядку базису. Водночас табл. 1 наочно демонструє той відомий артефакт варіаційного методу РР, про який ішлося вище: повну відсутність збіжності та дещо хаотичну осцилюючу поведінку обчисленого нелінійного варіаційного параметра  $\omega_0$  залежно від порядку розкладу  $N$ . Адже, попри швидко досягнуту збіжність розрахованого значення енергії, жодної практичної збіжності в розрахунку значень  $\omega_0$  не спостерігається. Більш того, у поведінці розрахованого значення  $\omega_0$  залежно від  $N$  виявляється поступове хаотичне

Таблиця 1. Значення частоти  $\omega_0$  варіаційного осциляторного базису та відповідні значення енергії  $E_0$  основного рівня біквдратичного ангармонічного осцилятора з частотою  $\omega = 1$ , розраховані при значеннях константи зв'язку  $\lambda = 1, 2, 5, 10$  у різних порядках  $N$  розкладу за базисом гармонічного осцилятора методом нелінійної варіаційної оптимізації РР (число врахованих базисних функцій варіаційного розкладу дорівнює  $N + 1$ )

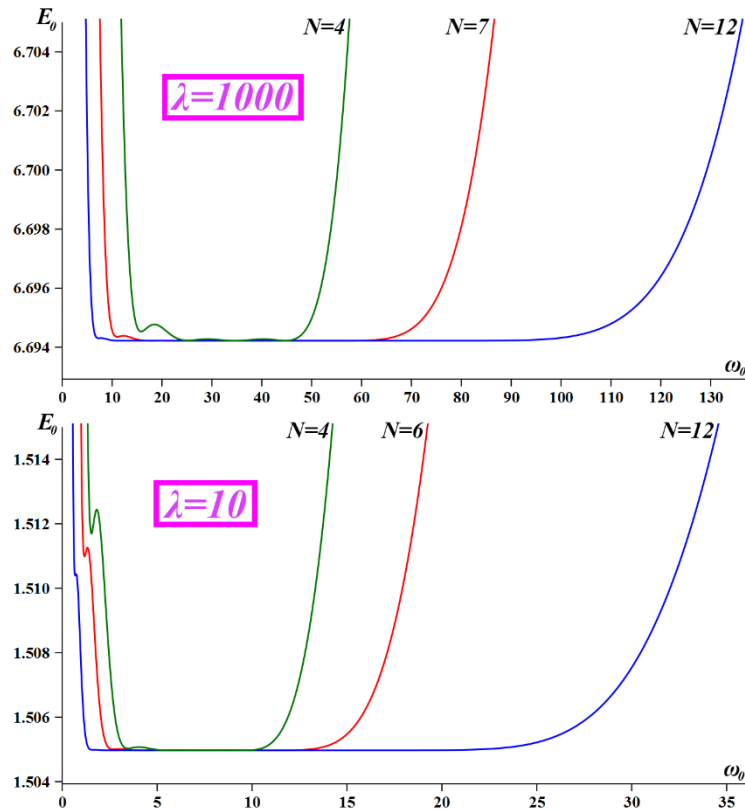
$N$	$\lambda = 1$		$\lambda = 2$		$\lambda = 5$		$\lambda = 10$	
	$\omega_0$	$E_0$	$\omega_0$	$E_0$	$\omega_0$	$E_0$	$\omega_0$	$E_0$
0	2,0	0,81250000	2,43484137	0,96440356	3,21446795	1,24431217	4,0	1,53125000
1	2,96543925	0,80417482	3,66080085	0,95218291	4,88796927	1,22555677	6,11359087	1,50627973
2	3,63764329	0,80380029	4,51568797	0,95161481	6,05676228	1,22466179	7,59094007	1,50507416
3	3,05132852	0,80377316	3,77821189	0,95157265	5,05740800	1,22459411	8,74588780	1,50498220
4	3,59314868	0,80377078	4,46548535	0,95156870	5,99508134	1,22458742	7,51689677	1,50497295
5	4,04801508	0,80377066	5,04234037	0,95156849	6,78200531	1,22458706	8,51059313	1,50497245
6	<b>4,44269918</b>	<b>0,80377065</b>	<b>5,54268695</b>	<b>0,95156847</b>	<b>7,46436966</b>	<b>1,22458704</b>	<b>9,37215364</b>	<b>1,50497241</b>
7	4,404887815	0,80377065	5,04677932	0,95156847	6,79167299	1,22458704	8,52482729	1,50497241
8	4,40564516	0,80377065	5,49862027	0,95156847	7,40740921	1,22458704	9,30199342	1,50497241
9	4,72839565	0,80377065	5,90729448	0,95156847	7,96423369	1,22458704	10,00475556	1,50497241
10	4,41751665	0,80377065	5,51585354	0,95156847	7,43325735	1,22458704	9,33594091	1,50497241
11	4,71637463	0,80377065	5,89404815	0,95156847	7,94830797	1,22458704	9,98584311	1,50497241
12	4,99294844	0,80377065	6,24399538	0,95156847	8,42484066	1,22458704	10,58711611	1,50497241

флюктуюче зростання, що підкреслює особливість методу: хороша апроксимація енергії не гарантує стійкості допоміжного параметра. Насправді така картина і подібна поведінка допоміжного нелінійного варіаційного параметра  $\omega_0$  є досить типовими при реалізації нелінійної варіаційної процедури РР-розрахунків. Тобто, результати проведених обчислень при послідовному збільшенні  $N$  показують, що жодної збіжності за  $N$  для розрахованої величини  $\omega_0(N)$  не спостерігається, незважаючи на те, що розраховане значення енергії  $E_0$  стрімко та дуже добре стабілізується. Це відображає фундаментальну особливість узагальненого методу РР: варіаційна енергія виступає як первинний фізичний результат, тоді як оптимальні значення нелінійних параметрів є лише допоміжними обчислювальними характеристиками, які не зобов'язані збігатися при зростанні  $N$ , можуть мати нерегулярну залежність від порядку базису й не завжди піддаються фізичній інтерпретації.

Таким чином, спостережувана поведінка параметра  $\omega_0$  жодним чином не суперечить варіаційному принципу, оскільки мінімізується енергія, а не сам допоміжний параметр  $\omega_0$ . Дійсно, енергія виступає як функціонал, що досягає мінімуму при певному оптимальному значенні  $\omega_0$ . Проте множина значень  $\omega_0$ , які дають близькі значення енергії, може бути достатньо широкою, що і спостерігається в нашому випадку. До того ж зі зростанням порядку базису  $N$  простір пробних функцій стає дедалі гнучкішим, даючи змогу досягати практично однакових значень енергії при різних  $\omega_0$ . У результаті виникає

ефект «багатошляхового наближення» – кілька значень  $\omega_0$  дають практично однаковий мінімум енергії. Слід також підкреслити, як зазначалося вище, що в багатьох випадках частота  $\omega_0$  осциляторного базису розкладу трактується просто як допоміжний нефізичний параметр, який не має самостійного змісту та значення. Наприклад, у розрахунках структури атомного ядра оптимальна частота осциляторного скінченного базису розглядається зазвичай як технічний параметр, а не як фізично осмислена величина, оскільки жодна конкретна частота осцилятора не здатна адекватно охарактеризувати усе атомне ядро.

Отже, в узагальненому нелінійному методі РР оптимальна частота  $\omega_0$  не зобов'язана збігатися зі зростанням порядку  $N$ , оскільки єдине, що гарантує варіаційний принцип – це збіжність енергії як спостережуваної величини. Поведінка ж допоміжного технічного параметра  $\omega_0$  залежно від  $N$  може бути нестійкою та осцилюючою, але водночас енергетично еквівалентною. Така ситуація відображає типовий прояв відомого ефекту варіаційного плато [31–36] (рисунок), коли широкий діапазон значень нелінійного параметра  $\omega_0$  дає практично однакову енергію  $E_0$ , незважаючи на суттєві коливання самого параметра. Цей ефект є характерною особливістю варіаційних РР-обчислень і був описаний у літературі [31–36]. У практичному сенсі це означає, що надійність результатів слід оцінювати не за стабільністю оптимального параметра, а за стійкістю самої енергії як основної спостережуваної величини.



Залежність енергії  $E_0^{(N)}(\lambda; \omega_0)$  основного рівня ангармонічного осцилятора від варіюваного за методом РР параметра частоти  $\omega_0$  гармонічного базису для значень константи зв'язку осцилятора  $\lambda = 10$  (нижня панель) та  $\lambda = 1000$  (верхня панель), розрахована в різних порядках  $N$  розкладу за варіаційним осциляторним базисом. Червоним кольором показано криві, що відповідають найменшому значенню порядку базису  $N$ , який забезпечує стандартну точність розрахунку. (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

Нестабільність поведінки параметра  $\omega_0$  та наявність варіаційного плато отримали аналітичне пояснення в [31], де було висвітлено появу плоского широкого мінімуму у вигляді плато з можливими невеликими коливаннями у залежності  $E_0(\omega_0)$  на основі аналітичної асимптотичної теорії. Робота [31] дає обґрунтування виникнення конкретного значення оптимального параметра та вказує на труднощі чисельної оптимізації, пов'язані з можливістю існування великої кількості дрібних локальних мінімумів, що і спостерігається. Оптимальне значення нелінійного параметра змінюється зі зростанням кількості базисних функцій немонотонно, як видно з табл. 1. Отже, результати табл. 1 повністю узгоджуються з висновками [31–36], де обґрунтовувалася наявність при розрахунках нелінійним методом РР варіаційного плато – широкого і слабо мінливого плоского мінімуму у залежності енергії від нелінійного варіаційного параметра. Рисунок наочно відображає цей ефект: залежність розрахованої енергії  $E_0$  від нелінійного параметра  $\omega_0$  демонструє яскраво виражене плоске плато для різних випадків значень константи

зв'язку  $\lambda$  та порядку базису  $N$ , надаючи явну концептуальну ілюстрацію типової ситуації у нелінійній варіаційній оптимізації.

Як видно з графіків, зі зростанням  $\lambda$  і  $N$  варіаційне плато суттєво розширюється, що обґрунтовує та пояснює можливість зручного емпіричного вибору оптимального значення параметра  $\omega_0$  з помірною точністю при розрахунках на основі розкладу за  $\omega_0$ -залежним осциляторним базисом, як це було реалізовано в нашій роботі [25]. Примітно, що чітко виражене плато спостерігається вже при малих значеннях порядку використаного базису  $N \geq 4$ , а його подальше розширення зі зростанням  $\lambda$  робить процедуру емпіричного вибору параметра  $\omega_0$  особливо стійкою в області сильного зв'язку. Отже, рисунок демонструє характерну залежність варіаційної енергії від нелінійного параметра – з широким плоским мінімумом і слабкими коливальними особливостями. Подібні плато є типовими для нелінійних РР-розрахунків і відображають відомий принцип мінімальної чутливості [37, 38]: в околі мінімуму енергія слабо реагує на варіації нефізичного параметра. Тобто рисунок якісно

ілюструє поширену ситуацію в нелінійних РР-розрахунках, коли залежність енергії  $E_0$  від нелінійного параметра  $\omega_0$  може мати дуже пологий плаский мінімум, у межах якого широкий діапазон значень  $\omega_0$  дає практично однакову енергію. Це, з одного боку, гарантує стійкість результатів до похибок вибору  $\omega_0$ , а з іншого – ускладнює точну локалізацію глобального мінімуму. При чисельній оптимізації це вимагає обережності, оскільки є можливою наявність багатьох локальних мінімумів – тому при розрахунках слід використовувати щільнішу сітку. Такі особливості підкреслюють необхідність ретельної перевірки та продуманої стратегії пошуку глобального мінімуму. Конкретно у розглянутому випадку широке плато функції  $E_0(\omega_0)$  може містити десятки локальних дрібних мінімумів уже при помірних значеннях порядку базису  $N$ , при цьому значення енергії в них можуть збігатися аж до 15–20-го знака після коми. Зі зростанням  $N$  кількість таких локальних мінімумів зростає, що додатково підкреслює необхідність особливої обережності під час пошуку глобального мінімуму, який забезпечує найкраще наближення до енергії. Тому при реалізації важливо використовувати надійні стратегії глобальної мінімізації.

Отже, одним із центральних питань в узагальненому методі РР є поведінка оптимального значення нелінійного параметра зі збільшенням порядку базису  $N$ . В ідеалі, зі зростанням  $N$ , вплив конкретного значення нелінійного параметра повинен зменшуватися (в граничному випадку нескінченно повного базису точний розв'язок може бути досягнутий взагалі без необхідності вибору будь-якого «найкращого» значення параметра). Однак практично спостерігається залежність оптимального значення нелінійного параметра від  $N$ : в одних випадках вона може бути плавною, а в інших – проявляти немонотонну й/або осцилюючу поведінку, як видно з табл. 1. Існують різні підходи до аналізу такої флюктуючої залежності  $\omega_0(N)$ . Найпростіший і найширше використовуваний підхід полягає у виборі деякого фіксованого порядку базису, зазвичай  $N \sim 10 \div 20$ , достатнього для досягнення необхідної точності розрахунків, і подальшій роботі при цьому фіксованому порядку базису  $N$ . Можливі й інші підходи до проблеми вибору порядку варіаційного базису  $N$  та аналізу флюктуючої залежності  $\omega_0(N)$ . Аналогічні табл. 1 розрахунки та дослідження збіжності для ряду значень параметра  $\lambda$  показують, що для досягнення стандартної точності розрахунку у вісім цифр після коми завжди є достатнім вибір

виключно малого порядку розкладу  $N = 7$  – абсолютно в усій практично значущій області зміни параметра  $\lambda$ . Лише в окремих випадках можлива похибка на одиницю у восьмій цифрі після коми. При цьому природно, що в області слабкого зв'язку для досягнення стандартної точності розрахунку виявляється достатнім обирати базис ще меншої розмірності, ніж  $N = 7$  – тим меншої, чим меншим є значення  $\lambda$ . У табл. 2 наведено відповідні, розраховані даним чином при різних значеннях  $\lambda$ , – значення частоти  $\omega_0$  варіаційного осциляторного базису і енергії  $E_0$  основного рівня ангармонічного осцилятора в тому мінімальному порядку базису  $N$ , який забезпечує цільовий заданий стандартний поріг точності  $d \leq 10^{-8}$ . Отримані результати свідчать, що вибір базису надзвичайно малої розмірності  $N \lesssim 7$  є достатнім для розрахунків зі стандартною точністю в усьому значущому інтервалі зміни параметра  $\lambda$ . Для порівняння, у роботі [25] (див. табл. 2 і 3 у [25]) застосовувався емпіричний вибір частоти осциляторного базису  $\omega_0$  і для досягнення тієї ж точності розрахунку був потрібен дещо більший порядок розкладу  $N \lesssim 11$ . Це пов'язано з тим, що в [25] при деяких значеннях параметра  $\lambda$  значення частоти базису  $\omega_0$  було обрано не зовсім точно та оптимально, що спричинило погіршення збіжності. Водночас точна варіаційна оптимізація за нелінійним параметром  $\omega_0$  є більш ресурсоемною, тоді як емпіричний вибір параметра  $\omega_0$ , за умови його потрапляння в область широкого плато, забезпечує таку саму точність розрахунків при суттєво менших обчислювальних витратах.

Однак разом із тим точна оптимізація за нелінійним параметром  $\omega_0$  є більш строгим, коректним і відтворюваним підходом, який може мати переваги та виправдовувати себе при розрахунках хвильових функцій і матричних елементів. Таким чином, підхід РР із фіксованим порядком розкладу  $N$  є практичним і методологічно обґрунтованим вибором. Він забезпечує досягнення необхідної точності при менших витратах та усуває практичний вплив флюктуацій параметра  $\omega_0$ , які виникають при зростанні  $N$ . Дійсно, після досягнення необхідної збіжності основної спостережуваної величини – енергії – подальша оптимізація  $\omega_0$  втрачає фізичний і обчислювальний сенс. Це дає змогу обґрунтовано перейти далі у більш простий режим чистого розкладу за базисом з фіксованими параметрами, використаний у наших попередніх роботах [24, 25] – з усіма раніше зазначеними перевагами такого підходу. Підсумково – строга варіаційна

Таблиця 2. Значення частоти  $\omega_0$  варіаційного осциляторного базису та відповідні значення енергії  $E_0$  основного рівня біквадратичного ангармонічного осцилятора, розраховані нелінійним методом РР при різних значеннях константи зв'язку осцилятора  $\lambda$  у тому мінімальному порядку  $N$  розкладу за гармонічним  $\omega_0$ -модифікованим базисом, який дає стандартну точність розрахунку у вісім цифр після коми

$\lambda$	$N$	$\omega_0$	$E_0$
1	6	4,44269918	0,80377065
2	6	5,54268695	0,95156847
5	6	7,46436966	1,22458704
10	6	9,37215364	1,50497241
20	7	10,71505421	1,86569580
25	7	11,53595923	2,00199638
50	7	14,51554469	2,49970877
100	7	18,27346819	3,13138417
*100	8	19,95182564	3,13138416
500	7	31,21849878	5,31989436
1000	7	39,32588917	6,69422085
2000	7	49,54199529	8,42749818
5000	7	67,23300167	11,43080444
10000	7	84,70504550	14,39799535
*10000	8	92,50016749	14,39799534
15000	7	96,96158174	16,47978269
20000	7	106,71910732	18,13722907

Примітка. Рядки, які наведені курсивом (позначені \*), містять додаткові порівняльні дані.

оптимізація за параметром  $\omega_0$  знімає суб'єктивність вибору  $\omega_0$  і робить обчислювальну процедуру відтворюваною, прогнозованою та методологічно цінною. При цьому саме питання про можливе «точне» або «істинне» значення допоміжного параметра  $\omega_0$  виявляється методологічно невизначеним і неідентифікованим – адже наявність широкого варіаційного плато в залежності  $E_0(\omega_0)$  означає, що цілий інтервал значень  $\omega_0$  призводить до практично однакового результату для спостережуваної розрахованої енергії й відмінності між значеннями параметра  $\omega_0$  не мають принципового значення.

#### 4. Розрахунок і побудова хвильових функцій біквадратичного ангармонічного осцилятора у рамках нелінійного варіаційного методу РР

Однією із суттєвих переваг розглянутого підходу є можливість зручного й точного розрахунку та побудови хвильових функцій різних станів системи при будь-якому  $\lambda$ , чого позбавлені багато інших підходів. Отже, при заданому значенні  $\lambda$  та визначеному для цього випадку згідно з методом РР оптимальному значенні  $\omega_0$ , можна обчислити відповідно до системи (12) для зада-

ного стану значення коефіцієнтів  $c_n$ , набір яких є хвильовою функцією системи в осциляторному представленні, що відповідає гармонічному осцилятору з частотою  $\omega_0$  – з необхідним урахуванням парності цього стану. У табл. 3 наведено розраховані таким чином значення коефіцієнтів  $c_{2n}$  розкладу (б) хвильової функції  $\psi_0(\lambda; x)$  основного стану системи за  $\omega_0$ -модифікованим осциляторним базисом для деяких значень параметра  $\lambda$ , що охоплюють увесь значущий інтервал його зміни. При цьому враховано 20 базисних функцій розкладу. Результати табл. 3 підтверджують дуже високу швидкість збіжності розкладів за гармонічним базисом  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}_{n=0}^{\infty}$  при відповідним чином обраному РР-оптимальному значенні частоти  $\omega_0$  для довільно великих значень параметра  $\lambda$ . При цьому жодного погіршення швидкості збіжності коефіцієнтів  $c_{2n}$  зі зростанням  $\lambda$  у даному випадку не спостерігається, як і при розрахунках рівнів енергії. Таким чином, табл. 3 дає табульовану хвильову функцію системи в осциляторному представленні, яке визначається гамільтоніаном  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0)$ , для низки типових значень параметра  $\lambda$ .

Таблиця 3. Значення коефіцієнтів  $c_{2n}$  розкладу (6) хвильової функції основного стану  $\psi_0(\lambda; x)$  біквдратичного ангармонічного осцилятора за  $\omega_0$ -модифікованим осциляторним базисом  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}$  при значеннях константи зв'язку  $\lambda = 1, \lambda = 10, \lambda = 100, \lambda = 1000$  і  $\lambda = 10000$

$n$	$c_{2n}(\lambda = 1)$	$c_{2n}(\lambda = 10)$	$c_{2n}(\lambda = 100)$	$c_{2n}(\lambda = 1000)$	$c_{2n}(\lambda = 10000)$
	$\omega_0 = 4,44269918$	$\omega_0 = 9,37215364$	$\omega_0 = 19,95182564$	$\omega_0 = 39,32588917$	$\omega_0 = 92,50016749$
0	$9,56635044 \cdot 10^{-1}$	$9,49355935 \cdot 10^{-1}$	$9,48332493 \cdot 10^{-1}$	$9,57062449 \cdot 10^{-1}$	$9,47839119 \cdot 10^{-1}$
1	$2,80773718 \cdot 10^{-1}$	$3,01278748 \cdot 10^{-1}$	$3,04203227 \cdot 10^{-1}$	$2,81616490 \cdot 10^{-1}$	$3,05507653 \cdot 10^{-1}$
2	$7,60900260 \cdot 10^{-2}$	$8,72859908 \cdot 10^{-2}$	$8,82743452 \cdot 10^{-2}$	$6,81353342 \cdot 10^{-2}$	$8,90184207 \cdot 10^{-2}$
3	$1,49578577 \cdot 10^{-2}$	$1,82224481 \cdot 10^{-2}$	$1,81795160 \cdot 10^{-2}$	$8,98411100 \cdot 10^{-3}$	$1,84029776 \cdot 10^{-2}$
4	$1,42841816 \cdot 10^{-3}$	$1,85868464 \cdot 10^{-3}$	$1,71188743 \cdot 10^{-3}$	$-5,67235020 \cdot 10^{-4}$	$1,74152513 \cdot 10^{-3}$
5	$-1,89711720 \cdot 10^{-4}$	$-2,41691432 \cdot 10^{-4}$	$-2,89246406 \cdot 10^{-4}$	$-4,02165245 \cdot 10^{-4}$	$-2,93216546 \cdot 10^{-4}$
6	$-7,47082964 \cdot 10^{-5}$	$-1,01680171 \cdot 10^{-4}$	$-1,03147748 \cdot 10^{-4}$	$-1,88409006 \cdot 10^{-6}$	$-1,05104462 \cdot 10^{-4}$
7	$2,63707891 \cdot 10^{-7}$	$3,69780211 \cdot 10^{-7}$	$3,16808224 \cdot 10^{-6}$	$2,09365254 \cdot 10^{-5}$	$3,20758492 \cdot 10^{-6}$
8	$3,42472732 \cdot 10^{-6}$	$4,96435730 \cdot 10^{-6}$	$5,34379466 \cdot 10^{-6}$	$5,22775903 \cdot 10^{-8}$	$5,46226691 \cdot 10^{-6}$
9	$1,30689341 \cdot 10^{-7}$	$1,71673610 \cdot 10^{-7}$	$-1,32115741 \cdot 10^{-9}$	$-1,34760056 \cdot 10^{-6}$	$-1,25976183 \cdot 10^{-9}$
10	$-1,86007338 \cdot 10^{-7}$	$-2,87336556 \cdot 10^{-7}$	$-3,19657746 \cdot 10^{-7}$	$7,87808768 \cdot 10^{-8}$	$-3,27823536 \cdot 10^{-7}$
11	$-6,55527315 \cdot 10^{-9}$	$-7,25644384 \cdot 10^{-9}$	$6,19052845 \cdot 10^{-9}$	$9,38430950 \cdot 10^{-8}$	$6,44798697 \cdot 10^{-9}$
12	$1,19495841 \cdot 10^{-8}$	$1,94688494 \cdot 10^{-8}$	$2,16490920 \cdot 10^{-8}$	$-1,66111465 \cdot 10^{-8}$	$2,22654027 \cdot 10^{-8}$
13	$-1,37044793 \cdot 10^{-10}$	$-5,73938548 \cdot 10^{-10}$	$-1,81876487 \cdot 10^{-9}$	$-5,67757233 \cdot 10^{-9}$	$-1,88725509 \cdot 10^{-9}$
14	$-8,35904022 \cdot 10^{-10}$	$-1,40845473 \cdot 10^{-9}$	$-1,50172044 \cdot 10^{-9}$	$2,33064858 \cdot 10^{-9}$	$-1,54722686 \cdot 10^{-9}$
15	$8,13228677 \cdot 10^{-11}$	$1,77363571 \cdot 10^{-10}$	$2,98422125 \cdot 10^{-10}$	$1,22911810 \cdot 10^{-10}$	$3,09743635 \cdot 10^{-10}$
16	$5,65123056 \cdot 10^{-11}$	$9,51010005 \cdot 10^{-11}$	$8,96719568 \cdot 10^{-11}$	$-2,47019857 \cdot 10^{-10}$	$9,23170151 \cdot 10^{-11}$
17	$-1,32302967 \cdot 10^{-11}$	$-2,72133795 \cdot 10^{-11}$	$-3,80752323 \cdot 10^{-11}$	$3,87829723 \cdot 10^{-11}$	$-3,95424130 \cdot 10^{-11}$
18	$-2,97034172 \cdot 10^{-12}$	$-4,46279685 \cdot 10^{-12}$	$-2,31469453 \cdot 10^{-12}$	$1,68241049 \cdot 10^{-11}$	$-2,33097671 \cdot 10^{-12}$
19	$1,57259278 \cdot 10^{-12}$	$3,12742630 \cdot 10^{-12}$	$3,79411457 \cdot 10^{-12}$	$-7,96955351 \cdot 10^{-12}$	$3,93722179 \cdot 10^{-12}$

*Примітка.* Значення частоти  $\omega_0$  базису гармонічного осцилятора, використаного для розкладу, обрано для цих випадків згідно з табл. 2. Порядок розкладу за осциляторним базисом обрано таким, що дорівнює  $N = 19$  (врахування 20 базисних функцій).

Будь-яке конкретне значення хвильової функції  $\psi_0(\lambda; x)$  у координатному представленні при заданому значенні координати  $x$  легко може бути отримане з розкладу (6) при заданому значенні параметра  $\omega_0$ . При цьому, за використання 20 базисних функцій  $\varphi_n(\omega_0; x)$  розкладу, досягнута характерна точність розрахунку коефіцієнтів  $c_{2n}$ , тобто хвильової функції системи в осциляторному представленні, становить величину  $\lesssim 10^{-12}$  в усій області зміни константи зв'язку  $\lambda$ . Цікаво й важливо також відзначити, що в [31] була отримана асимптотика коефіцієнтів  $c_n(\lambda, \omega_0)$  при великих  $n$  і показано їхнє швидке експоненціальне асимптотичне спадання зі зростанням порядку  $n$ , що й видно з табл. 3. Це ще раз демонструє чудову збіжність основного розкладу (6) хвильової функції нашої системи за осциляторним базисом.

Співставлення результатів табл. 3 з результатами роботи [25] показує суттєве покращення досягнутої в даному випадку швидкості збіжності – завдяки більш оптимальному РР-вибору

значення параметра  $\omega_0$  згідно з табл. 2. У деяких випадках це покращення становить величину до чотирьох порядків для останнього коефіцієнта розкладу. Це пояснюється недостатньо точним емпіричним вибором у [25] значення параметра  $\omega_0$  при деяких  $\lambda$ . Отже, при обчисленні хвильової функції відповідно до розкладу за осциляторним базисом, більш правильний вибір параметра  $\omega_0$  згідно з методом РР має важливе значення, навіть суттєвіше для прискорення збіжності, ніж при розрахунку рівнів енергії. Останнє пояснюється загалом тоншим і чутливішим характером поведінки та особливостей форми хвильової функції порівняно з енергіями станів, які є більш грубими, усередненими інтегральними характеристиками кожного стану. Отже, застосування строгої схеми нелінійного методу РР з чисельно оптимізованим параметром  $\omega_0$  дає можливість істотно покращити збіжність розкладу хвильової функції за базисом – в окремих випадках спостерігалося зменшення амплітуд коефіцієнтів  $c_n$  на 3–4 порядки порівняно з результатами, отриманими при феноменологічно підібраних значеннях

$\omega_0$ . При цьому, незважаючи на те, що виграш у збіжності для енергії виявився порівняно помірним, досягнутий ефект компактності та структурної стійкості хвильової функції має важливе практичне і методологічне значення.

Слід зазначити, що оптимальний вибір значення параметра  $\omega_0$  з точки зору мінімізації енергії згідно з варіаційним принципом загалом не гарантує найкращої швидкості збіжності розкладу (6) хвильової функції системи за  $\omega_0$ -модифікованим осциляторним базисом. Власне, оптимальне значення параметра  $\omega_0$ , що забезпечує мінімум енергії, в загальному випадку не співпадає з оптимальним значенням, яке забезпечує найкращу збіжність функції за базисом. Тобто, оптимальне значення  $\omega_0^{(E)}$ , яке дає мінімум енергії (функції  $E_0(\omega_0)$ ), не повинно співпадати з оптимальним значенням  $\omega_0^{(w)}$ , при якому найшвидше збігається розклад хвильової функції, а тому для оптимізації збіжності розкладу хвильової функції може знадобитися використання іншого критерію оптимальності. Ситуація пояснюється тим, що глобальний мінімум функції  $E_0(\omega_0)$  дає найкраще наближення енергії як усередненої характеристики стану, але не гарантує рівномірного наближення всієї хвильової функції за нормою простору  $L^2(\mathbb{R})$ . Це зумовлено тим, що варіаційний критерій мінімізації енергії орієнтований на відтворення однієї скалярної величини – енергії стану – тоді як точність реконструкції форми хвильової функції вимагає іншого підходу до оптимізації, орієнтованого на структуру та поведінку коефіцієнтів  $c_n$ .

Таким чином, у ряді задач, при необхідності досягнення високої точності апроксимації хвильової функції, може знадобитися окреме самостійне визначення оптимального значення параметра  $\omega_0$ , яке забезпечить найкращу збіжність розкладу (6) за тим чи іншим критерієм. Це можна реалізувати, наприклад, за допомогою аналізу концентрації норми хвильової функції у початкових базисних функціях або через мінімізацію залишкової норми. Подібні можливі критерії оптимізації збіжності розкладу хвильової функції не формулюються у рамках стандартного варіаційного принципу, однак можуть бути теоретично і чисельно обґрунтовані. Більш детально обговорювати та використовувати різні можливі критерії збіжності розкладу (6) і подальшого покращення цієї збіжності ми не будемо. Зазначимо лише, що згідно з нашими оцінками та розрахунками вибір оптимального значення параметра  $\omega_0$  згідно з умовою мінімуму енергії є

дуже добрим вихідним нульовим наближенням також і з точки зору забезпечення швидкої збіжності розкладу хвильової функції за базисом. Аналіз показує, що оптимальне значення  $\omega_0^{(w)}$  для найкращої швидкості збіжності хвильової функції за базисом має бути обране дещо більшим порівняно з  $\omega_0^{(E)}$  – на величину не більше 10–20 % – і може забезпечити подальше покращення збіжності за базисом ще приблизно на порядок. Однак найбільш простим, практичним і ефективним способом розрахунку хвильової функції буде спосіб на основі використання наближення  $\omega_0^{(w)} \approx \omega_0^{(E)}$  та подальшого простого збільшення порядку базису  $N$  для досягнення необхідної практичної збіжності розкладу. Отже, у будь-якому випадку можливість використання лише 20 базисних функцій у широкому інтервалі значень  $\lambda$  для розрахунку хвильової функції системи з точністю  $\lesssim 10^{-12}$  є надзвичайно зручною, корисною і ефективною для розрахунку на цій основі відповідних матричних елементів, розподілів імовірності, спостережуваних величин тощо.

## 5. Обговорення та висновки

У цілому слід відзначити, що різні можливі підходи та пропозиції щодо вибору й оцінки частоти осциляторного базису розкладу для задач типу розглянутої, а також використання цього базису у варіаційних та інших розрахунках активно обговорювалися [31, 39–53]. І низка таких схем реалізації варіаційного методу РР у застосуванні до вивчення ангармонічного осцилятора включала використання осциляторного базису з різним чином оптимізованою його частотою – див., напр., [51, 52] та подальші посилання й обговорення там. Тобто метод РР реалізовувався в цих випадках з використанням осциляторного базису, частота якого підбиралася або оптимізувалася згідно з різними наближеними евристичними схемами. Докладний порівняльний аналіз ми плануємо подати у другій частині даної роботи; тут лише зазначимо: сам факт того, що в межах схеми РР було запропоновано майже десяток різних способів наближеної оптимізації та оцінки частоти осциляторного базису, свідчить про остаточну нерозв'язаність і незавершеність цього питання у рамках попередніх досліджень за методом РР. На відміну від них, дана робота вперше реалізує строгу нелінійну варіаційну процедуру РР на основі точної чисельної оптимізації частоти осциляторного базису розкладу в застосуванні до біквадратичного ангармонічного осцилятора, що заповнює суттєву про-

галину в літературі з варіаційних досліджень. Отримані нами прецизійні результати розрахунків створюють необхідну основу для об'єктивного порівняння, співставлення та аналізу різних підходів до вибору частоти варіаційного осциляторного базису, включаючи як нові, так і запропоновані раніше. Ці питання будуть детально розглянуті у другій частині даної роботи, де на основі отриманих результатів планується здійснити всебічний аналіз поведінки нелінійного параметра частоти використаного осциляторного базису як функції константи зв'язку осцилятора та порядку базису, а також порівняльне дослідження різних апроксимаційних евристичних схем і наближених методів розрахунку та оцінки цього ключового параметра.

У даній роботі було запропоновано та реалізовано строгий і формально завершений підхід до аналізу спектральних характеристик та інших властивостей моделі біквдратичного ангармонічного осцилятора на основі узагальненого нелінійного варіаційного методу РР з точною послідовною оптимізацією за нелінійним параметром частоти  $\omega_0$  осциляторного базису розкладу. Ключовим елементом даного підходу є розклад хвильової функції системи за деяким ефективним модифікованим осциляторним базисом з варійованою підгінною частотою  $\omega_0$ , яка трактується як справжній нелінійний варіаційний параметр, що оптимізується згідно з методом РР за допомогою чисельної процедури мінімізації енергії основного стану системи. Такий підхід дає змогу радикально прискорити збіжність розкладів завдяки додатковій адаптації базисних функцій до структури досліджуваної системи. Уперше для цієї задачі було виконано повну реалізацію строгої варіаційної чисельної оптимізації за частотою гармонічного базису розкладу, що дало можливість усунути емпіричний характер вибору частоти базису, застосований у нашій попередній роботі [25], та забезпечити контрольовану високоточну процедуру визначення енергії основного стану системи. Метод реалізовано як процедуру строгого чисельного пошуку – для кожного заданого значення константи зв'язку  $\lambda$  і порядку базису  $N$  – глобального мінімуму енергії основного стану системи  $E_0^{(N)}(\lambda; \omega_0)$  за частотним параметром  $\omega_0$ , що визначає форму гармонічного базису. Конкретний чисельний пошук глобального мінімуму функції  $E_0^{(N)}(\lambda; \omega_0)$  здійснювався з використанням стандартної стійкої двоетапної процедури, що включає початкове дискретне сканування з дрібним фіксованим кроком на широкому інтер-

валі з подальшим уточненням знайдених локальних мінімумів за допомогою прецизійної локальної процедури.

Таким чином, підхід дає змогу суттєво підвищити точність обчислень при малому порядку базису, а також забезпечити відмінну збіжність і високу передбачуваність результатів. Тобто дана реалізація дає змогу перейти від евристичних методів підбору частоти осциляторного базису до строго визначеної алгоритмічної процедури з відтворюваними результатами. Показано, що оптимізація частоти базису призводить до винятково швидкої збіжності осциляторних розкладів при використанні дуже малих розмірностей базису, причому ця висока збіжність зберігається на всьому інтервалі зміни константи зв'язку  $\lambda$ . Отже, запропонований підхід забезпечує стандартну точність обчислень енергії  $d \leq 10^{-8}$  при надзвичайно малому порядку базису  $N \lesssim 7$  і зберігає при цьому свою виняткову ефективність в усій області сильного зв'язку – за будь-яких  $\lambda$ . Це свідчить про високу ефективність і швидку збіжність методу при коректній адаптації базису до фізичної структури задачі. Результат  $N \lesssim 7$ , потрібний для досягнення стандартної точності, є вкрай малим і виглядає доволі переконливо. При цьому після досягнення необхідної збіжності основної спостережуваної величини – енергії – подальша оптимізація параметра  $\omega_0$  втрачає фізичний і обчислювальний сенс, а тому далі можна обґрунтовано перейти в режим чистого розкладу за базисом з фіксованими параметрами – з усіма зазначеними перевагами такого підходу. Отже, уперше для розглянутої моделі було виконано повний чисельний аналіз оптимізації за параметром  $\omega_0$ , що дало змогу системно дослідити енергетичний функціонал і структуру його мінімуму. Реалізований у роботі підхід підтверджує виключно високу ефективність розкладу за  $\omega_0$ -модифікованим осциляторним базисом і демонструє перспективність узагальненого нелінійного методу РР як універсального адаптивного інструменту аналізу і розрахунку.

Отримані результати чітко свідчать про те, що основоположний частотний параметр осциляторного базису  $\omega_0$  виконує роль фундаментального нелінійного ступеня свободи, який визначає форму та масштаб наближення та істотно впливає на точність і збіжність апроксимацій. Таким чином, мотивація для введення в розгляд і оптимізації нелінійних параметрів базису є очевидною: у більшості задач форма хвильової функції і масштаб системи заздалегідь невідомі, тому невідповідні форма та масштаб базису призво-

дять до вкрай неефективного наближення. Запровадження нелінійних параметрів дає змогу адаптувати базис до конкретної задачі та суттєво підвищити точність розрахунків при малому фіксованому порядку розкладу, забезпечуючи базису додаткову гнучкість і даючи можливість із самого початку враховувати ключові особливості розв'язку.

Додатково було досліджено поведінку оптимізованого частотного параметра  $\omega_0$  залежно від порядку базису  $N$ , виявлено її флуктуаційний характер і відсутність монотонної збіжності. Така поведінка залежності  $\omega_0(N)$  пов'язана з відомим з літератури [31–36] ефектом варіаційного плато, що проявляється у вигляді широкого й малочутливого мінімуму у залежності  $E_0(\omega_0)$  розрахованої варіаційної енергії від нелінійного параметра  $\omega_0$ . Подібна структура мінімуму відображає дію принципу мінімальної чутливості [37, 38] і водночас є як перевагою (у сенсі стійкості результатів), так і потенційним ускладненням для чисельної мінімізації (через наявність багатьох локальних мінімумів). Таким чином, у розглянутій задачі було виявлено та інтерпретовано важливий ефект варіаційного плато – ділянки зміни нелінійного параметра  $\omega_0$ , у межах якої розрахована енергія залишається практично сталою. Нестабільність поведінки нелінійного параметра  $\omega_0$  зі зростанням порядку розкладу  $N$  і наявність ефекту плато, при якому широкий діапазон значень нелінійного варіаційного параметра  $\omega_0$  дає практично однакове значення енергії  $E_0$ , незважаючи на суттєві коливання самого параметра, є характерною особливістю нелінійних варіаційних РР-розрахунків [31–36]. Розроблена аналітична асимптотична теорія на основі рівномірних розкладів [31] якісно пояснює появу такого плаского широкого мінімуму у вигляді плато з можливими невеликими коливаннями у залежності  $E_0(\omega_0)$  розрахованої варіаційної енергії від нелінійного параметра. Нами було показано, що зі зростанням параметрів  $\lambda$  і  $N$  варіаційне плато в нашій задачі суттєво розширюється, а це ключовим чином обґрунтовує та пояснює можливість зручного й стійкого емпіричного вибору оптимального значення параметра  $\omega_0$  з помірною точністю при розрахунках на основі розкладу за  $\omega_0$ -модифікованим осциляторним базисом, як це було реалізовано в нашій попередній роботі [25]. При цьому особливо важливим і примітним є те, що чітко виражене плато спостерігається вже при дуже малих значеннях порядку використаного базису  $N \geq 4$ .

Також однією з дуже суттєвих переваг розглянутого підходу, як нами відзначалося [24, 25], є можливість зручного й точного розрахунку та побудови хвильових функцій різних станів системи при будь-якому  $\lambda$ , чого позбавлені багато інших підходів. Відповідно, як типовий ілюстративний приклад, нами були побудовані хвильові функції основного стану системи для ряду типових значень параметра  $\lambda$ . При цьому збіжність хвильової функції системи в осциляторному представленні у випадку використання знайденого згідно з методом РР оптимального значення частоти базису  $\omega_0$  істотно прискорюється, що дає змогу надійно і точно обчислювати хвильову функцію для будь-яких значень  $\lambda$ . Таким чином, отримані результати свідчать про дуже високу швидкість збіжності розкладів за гармонічним базисом за умови належного вибору РР-оптимального значення частоти  $\omega_0$  для довільно великих значень параметра  $\lambda$ . Жодного погіршення швидкості збіжності коефіцієнтів розкладу зі зростанням  $\lambda$  у цьому випадку не спостерігається, як і при розрахунку енергій. При використаних 20 базисних функціях розкладу досягнута точність розрахунку коефіцієнтів розкладу  $c_{2n}$ , тобто хвильової функції системи в осциляторному представленні, становить величину  $\lesssim 10^{-12}$  в усій області зміни  $\lambda$ . Тобто, у даному випадку – при обчисленні хвильової функції згідно з її розкладом за осциляторним базисом – більш правильний і точний вибір параметра  $\omega_0$  згідно з методом РР має важливе значення, навіть більш суттєве для прискорення збіжності, ніж при розрахунках рівнів енергії. Отже, застосування строгої схеми нелінійного методу РР з чисельно оптимізованим параметром  $\omega_0$  дає змогу істотно покращити збіжність розкладу хвильової функції за осциляторним базисом. Відтак продемонстрована можливість використання лише 20 базисних функцій у широкому інтервалі значень  $\lambda$  для розрахунку хвильової функції системи з точністю  $\lesssim 10^{-12}$  є надзвичайно зручною, корисною й може успішно застосовуватися в практичних задачах. При цьому досягнутий ефект компактності та структурної стійкості хвильової функції має важливе методологічне і практичне значення.

Загалом проведено дослідження та отримані результати продемонстрували високу ефективність і методичну цінність узагальненої нелінійної варіаційної схеми РР, заснованої на точній чисельній оптимізації частоти  $\omega_0$  використаного

для розкладу  $\omega_0$ -модифікованого осциляторного базису. Запропонований підхід забезпечує суттєво більш швидку збіжність і точність розрахунків при дуже малій розмірності базису та відкриває можливості для побудови адаптивних базисних представлень, що налаштовуються під конкретну задачу. Завдяки введенню ключового фізично осмисленого нелінійного частотного параметра базису до структури варіаційного аналізу, метод дає змогу гнучко враховувати особливості досліджуваної системи та адаптувати наближення під її характерні форми та масштаби. Це робить схе-

му універсальною, а запропонований підхід може надалі застосовуватися для побудови узагальнених базисних розкладів та адаптивних варіаційних методів у ширшому класі задач квантової механіки.

Автор висловлює глибоку подяку О. В. Нестерову за корисні обговорення. Робота підтримана Програмою фундаментальних досліджень Відділення фізики і астрономії НАН України (тема № 0122U000886) та Фондом Саймонса.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ / REFERENCES

1. C.M. Bender, T.T. Wu. Anharmonic oscillator. *Phys. Rev.* 184 (1969) 1231.
2. S.N. Biswas et al. Eigenvalues of  $\lambda x^{2m}$  anharmonic oscillators. *J. Math. Phys.* 14 (1973) 1190.
3. F.T. Hioe, E.W. Montroll. Quantum theory of anharmonic oscillators. I. Energy levels of oscillators with positive quartic anharmonicity. *J. Math. Phys.* 16 (1975) 1945.
4. F.T. Hioe, D. MacMillen, E.W. Montroll. Quantum theory of anharmonic oscillators: Energy levels of a single and a pair of coupled oscillators with quartic coupling. *Phys. Rep.* 43 (1978) 305.
5. B. Simon. Large orders and summability of eigenvalue perturbation theory: A mathematical overview. *Int. J. Quant. Chem.* 21 (1982) 3.
6. А.В. Турбинер. Задача о спектре в квантовой механике и процедура “нелинеаризации”. *УФН* 144 (1984) 35. (Rus) / A.V. Turbiner. The eigenvalue spectrum in quantum mechanics and the nonlinearization procedure. *Sov. Phys. Usp.* 27 (1984) 668.
7. A.V. Turbiner, A.G. Ushveridze. Anharmonic oscillator: Constructing the strong coupling expansions. *J. Math. Phys.* 29 (1988) 2053.
8. G.A. Arteca, F.M. Fernández, E.A. Castro. *Large Order Perturbation Theory and Summation Methods in Quantum Mechanics* (Berlin: Springer-Verlag, 1990) xi, 644 p.
9. B. Simon. Fifty years of eigenvalue perturbation theory. *Bull. Am. Math. Soc.* 24 (1991) 303.
10. F.M. Fernández, R. Guardiola. Accurate eigenvalues and eigenfunctions for quantum-mechanical anharmonic oscillators. *J. Phys. A* 26 (1993) 7169.
11. F.M. Fernández, R. Guardiola. The strong coupling expansion for anharmonic oscillators. *J. Phys. A* 30 (1997) 7187.
12. E.Z. Liverts, V.B. Mandelzweig, F. Tabakin. Analytic calculation of energies and wave functions of the quartic and pure quartic oscillators. *J. Math. Phys.* 47 (2006) 062109.
13. F.M. Fernández, J. Garcia. Highly accurate calculation of the real and complex eigenvalues of one-dimensional anharmonic oscillators. *Acta Polytech.* 57 (2017) 391.
14. J.C. del Valle, A.V. Turbiner. Radial anharmonic oscillator: Perturbation theory, new semiclassical expansion, approximating eigenfunctions. I. Generalities, cubic anharmonicity case. *Int. J. Mod. Phys. A* 34 (2019) 1950143.
15. H. Mutuk. Energy levels of one-dimensional anharmonic oscillator via neural networks. *Mod. Phys. Lett. A* 34 (2019) 1950088.
16. J.C. del Valle, A.V. Turbiner. Radial anharmonic oscillator: Perturbation theory, new semiclassical expansion, approximating eigenfunctions. II. Quartic and sextic anharmonicity cases. *Int. J. Mod. Phys. A* 35 (2020) 2050005.
17. P. Okun, K. Burke. Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021) e26554.
18. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Comment on: Uncommonly accurate energies for the general quartic oscillator. *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021) e26766.
19. В.А. Бабенко, Н.М. Петров. Про квантовий ангармонічний осцилятор та апроксимації Паде. *Ядерна фізика та енергетика* 22 (2021) 127. / V.A. Babenko, N.M. Petrov. On the quantum anharmonic oscillator and Padé approximations. *Nucl. Phys. At. Energy* 22 (2021) 127. (Ukr)
20. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. Anharmonic oscillator: a solution. *J. Phys. A* 54 (2021) 295204.
21. V.A. Babenko, N.M. Petrov. On the quartic anharmonic oscillator and the Padé-approximant averaging method. *Mod. Phys. Lett. A* 37 (2022) 2250172.
22. A.V. Turbiner, J.C. del Valle. From quartic anharmonic oscillator to double well potential. *Acta Polytech.* 62 (2022) 208.
23. A.V. Turbiner, J.C. del Valle Rosales. *Quantum Anharmonic Oscillator* (Singapore: World Scientific, 2023) xix, 286 p.

24. В.А. Бабенко, О.В. Нестеров. Про бікватратичний ангармонічний осцилятор – підхід у рамках розкладу по осциляторному базису. I. Дослідження та розрахунок енергій основного і збуджених станів. *Ядерна фізика та енергетика* 25 (2024) 216. / V.A. Babenko, A.V. Nesterov. The quartic anharmonic oscillator – an oscillator-basis expansion approach. I. Energy levels study and calculation. *Nucl. Phys. At. Energy* 25 (2024) 216. (Ukr)
25. В.А. Бабенко, О.В. Нестеров. Про бікватратичний ангармонічний осцилятор – підхід у рамках розкладу по осциляторному базису. II. Дослідження хвильових функцій і прискорення збіжності розкладів. *Ядерна фізика та енергетика* 26 (2025) 5. / V.A. Babenko, A.V. Nesterov. The quartic anharmonic oscillator – an oscillator-basis expansion approach. II. Study of the wave functions and acceleration of the expansions convergence. *Nucl. Phys. At. Energy* 26 (2025) 5. (Ukr)
26. А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (Москва: Наука, 1973) 704 с. (Rus) / A.S. Davydov. *Quantum Mechanics* (Oxford: Pergamon Press, 1976) xiii, 637 p.
27. S.T. Epstein. *The Variation Method in Quantum Chemistry* (New York: Academic Press, 1974) ix, 276 p.
28. R.K. Nesbet. *Variational Principles and Methods in Theoretical Physics and Chemistry* (Cambridge: Cambridge University Press, 2003) xiv, 229 p.
29. N. Zettili. *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. 3rd ed. (Chichester: Wiley, 2022) xx, 1001 p.
30. A.W. Leissa. The historical bases of the Rayleigh and Ritz methods. *J. Sound Vib.* 287 (2005) 961.
31. R.N. Hill. Dependence of the rate of convergence of the Rayleigh–Ritz method on a nonlinear parameter. *Phys. Rev. A* 51 (1995) 4433.
32. I. Alexandrov, S.A. Moszkowski, C.W. Wong. Lowest-order constrained variational method for simple many-fermion systems. *Nucl. Phys. A* 252 (1975) 13.
33. F.A. de Saavedra, E. Buendía. Variational and norm criteria in high-order perturbative-variational wavefunctions. *J. Phys. A* 22 (1989) 1933.
34. C. Semay, B. Silvestre-Brac, I.M. Narodetskii. Auxiliary fields and hadron dynamics. *Phys. Rev. D* 69 (2004) 014003.
35. G. De Gregorio et al. Spectroscopic properties of  $^4\text{He}$  within a multiphonon approach. *Phys. Rev. C* 105 (2022) 024326.
36. H.E. Kristiansen et al. Configuration weights in coupled-cluster theory. *J. Phys. Chem. A* 129 (2025) 2638.
37. P.M. Stevenson. Optimized perturbation theory. *Phys. Rev. D* 23 (1981) 2916.
38. P.M. Stevenson. *Renormalized Perturbation Theory and its Optimization by the Principle of Minimal Sensitivity* (Singapore: World Scientific, 2022) viii, 288 p.
39. R. McWeeny, C.A. Coulson. Quantum mechanics of the anharmonic oscillator. *Math. Proc. Cambridge* 44 (1948) 413.
40. C. Schwartz. A study of some approximation schemes in quantum mechanics. *Ann. Phys.* 32 (1965) 277.
41. W.E. Caswell. Accurate energy levels for the anharmonic oscillator and a summable series for the double-well potential in perturbation theory. *Ann. Phys.* 123 (1979) 153.
42. R. Balsa et al. Simple procedure to compute accurate energy levels of a double-well anharmonic oscillator. *Phys. Rev. D* 28 (1983) 1945.
43. C.-S. Hsue, J.L. Chern. Two-step approach to one-dimensional anharmonic oscillators. *Phys. Rev. D* 29 (1984) 643.
44. R.M. Quick, H.G. Miller. Comment on “Simple procedure to calculate accurate energy levels of a double-well anharmonic oscillator”. *Phys. Rev. D* 31 (1985) 2682.
45. R.N. Chaudhuri, M. Mondal. Hill determinant method with a variational parameter. *Phys. Rev. A* 40 (1989) 6080.
46. R.F. Bishop et al. Paths to optimization in the multistate Rayleigh–Ritz variational method: Applications to the double-well quantum anharmonic oscillator. *Phys. Rev. A* 40 (1989) 6154.
47. R.N. Chaudhuri, M. Mondal. Improved Hill determinant method: General approach to the solution of quantum anharmonic oscillators. *Phys. Rev. A* 43 (1991) 3241.
48. J.P. Killingbeck, T. Scott, B. Rath. A matrix method for power series potentials. *J. Phys. A* 33 (2000) 6999.
49. M. Jafarpour, D. Afshar. Calculation of energy eigenvalues for the quantum anharmonic oscillator with a polynomial potential. *J. Phys. A* 35 (2002) 87.
50. E. Van der Straeten, J. Naudts. The quantum double-well anharmonic oscillator in an external field. *J. Phys. A* 39 (2006) 933.
51. P. Kościk, A. Okopińska. The optimized Rayleigh–Ritz scheme for determining the quantum-mechanical spectrum. *J. Phys. A* 40 (2007) 10851.
52. W.-F. Lu, C.K. Kim, K. Nahm. The multistate Rayleigh–Ritz variational method with the principle of minimal sensitivity for anharmonic oscillators. *J. Phys. A* 40 (2007) 14457.
53. P. Pedram. Anharmonic oscillator and the optimized basis expansion. *Appl. Math. Comput.* 219 (2013) 4655.

V. A. Babenko\*

*Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*\*Corresponding author: [pet2@ukr.net](mailto:pet2@ukr.net)

**STUDY OF THE QUARTIC ANHARMONIC OSCILLATOR  
USING THE NONLINEAR RAYLEIGH–RITZ VARIATIONAL METHOD.  
I. CALCULATION AND ANALYSIS OF ENERGY LEVELS AND WAVE FUNCTIONS**

For the quantum quartic anharmonic oscillator with Hamiltonian  $H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 x^2) + \lambda x^4$ , our study has been further developed using a convergent expansion of the system's wave function in a modified oscillator basis with an adjustable frequency  $\omega_0$ , i.e., in the complete set of eigenfunctions  $\{\varphi_n(\omega_0; x)\}$  of a reference harmonic Hamiltonian  $\mathcal{H}^{(0)}(\omega_0) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 x^2)$ . Our proposed approach enables a significant improvement in the convergence rate of expansions through the additional adaptation of the basis functions to the specific structure of the system being analyzed. Primary attention is given to the rigorous mathematical implementation of the variational scheme, treating the basis frequency  $\omega_0$  as a true nonlinear variational parameter subject to optimization. Within the framework of the generalized nonlinear Rayleigh–Ritz variational method, the system's energy is minimized with respect to the nonlinear parameter  $\omega_0$  to accurately determine the optimal value of  $\omega_0$  for different values of the oscillator coupling constant  $\lambda$  and the variational basis size  $N$ . This study provides, for the first time, a fully rigorous numerical implementation of this procedure for the quartic anharmonic oscillator, ensuring precise control and enabling a transition from heuristic parameter selection to a systematic and reproducible algorithmic approach. This rigorous variational justification enables the exploration of the energy functional's structure and the behavior of the nonlinear parameter. It is shown that the proposed method provides standard  $10^{-8}$  accuracy in energy calculations, employing a remarkably small basis size of  $N = 6-7$ , while maintaining high efficiency throughout the strong-coupling region – for all values of  $\lambda$ . The behavior of the optimized frequency parameter  $\omega_0$  with respect to the basis size  $N$  was also investigated, along with the identification and interpretation of the important effect of the variational plateau – a broad region of variation in the parameter  $\omega_0$  where the computed energy remains nearly constant. The system's wave functions were also calculated using the proposed method for a range of  $\lambda$ . The obtained results demonstrate that nonlinear optimization of the basis is a highly effective means of substantially increasing the efficiency of variational calculations, both for energies and for the wave functions.

*Keywords:* anharmonic oscillator, harmonic oscillator basis, quartic anharmonic oscillator, nonlinear variational method, Rayleigh–Ritz method, quantum field theory.

Надійшла / Received 28.01.2026