

## Momentový problém v molekulové fyzice

$$\Gamma(E) = 2\pi |\langle \phi_d | \hat{H}_I | \chi(E) \rangle|^2 \quad \langle \chi(E') | \hat{H}_0 | \chi(E) \rangle = E \delta(E - E')$$

- ▶ diskretizace kontinua

$$E, |\chi(E)\rangle \longrightarrow \{\epsilon_i, |\chi_i\rangle\}_{i=1}^N \quad \langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\Rightarrow \Gamma(\epsilon_i) \neq 2\pi |\langle \phi_d | \hat{H}_I | \chi_i \rangle|^2 \quad !!!$$

- ▶ rozklad jednotky a výpočet spektrálních momentů

$$\int dE |\chi(E)\rangle \langle \chi(E)| \approx \sum_i |\chi_i\rangle \langle \chi_i|$$

$$\Rightarrow \mu_k \equiv \int E^k \Gamma(E) dE \approx 2\pi \sum_i \epsilon_i^k \langle \phi_d | \hat{H}_I | \chi_i \rangle \langle \chi_i | \hat{H}_I | \phi_d \rangle$$

# Momentový problém a maximum entropie

- Problém: rekonstrukce nezáporné funkce  $\Gamma(E) \geq 0$

$$\int E^k \Gamma(E) dE = \mu_k, \quad k = 0, \dots, n$$

- Řešení:

1. **polynomiální rozklad – nefunguje!**
2. **Stieltjes imaging** –  $\Gamma(E)$  jako váha neznámé Gaussovy kvadratury
3. maximum **entropie?** –  $\Gamma(E)$  jako hustota pravděpodobnosti

$$S[\Gamma] = - \int \Gamma(E) \log \Gamma(E) dE + \sum_{k=0}^n \lambda_k \left( \int E^k \Gamma(E) dE - \mu_k \right)$$

Mead, Papanicolaou, *J. Math. Phys.* **25**, 2404 (1984)