

На правах рукописи
УДК 514.8

Чернышев Всеволод Леонидович

**Квазиклассические асимптотики в спектральных задачах и
эволюционных уравнениях на сингулярных множествах.**

Специальность: 01.01.04 — Геометрия и топология.

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
д.ф.-м.н., профессор
А. И. Шафаревич

Москва
2008

Содержание

	стр.
Введение	4
1. Квазиклассические асимптотики в спектральных задачах для уравнений Шредингера на квантовых графах.	20
1.1. Общие замечания.	20
1.2. Постановка задачи.	20
1.3. Алгоритм построения правил квантования.	22
1.4. Доказательство теоремы 1.1.	26
1.5. Примеры.	31
1.5.1. Случай двух двух точек, соединенных двумя отрезками.	31
1.5.2. Дерево с двумя λ -вершинами.	32
1.5.3. Граф $K_{1,3}$	33
1.6. Асимптотические собственные значения, соответствующие собственным функциям, локализованным в вершине графа.	34
1.7. Описание ядер для случая нулевого потенциала.	36
2. Квазиклассическая асимптотика и статистические свойства гауссовых пучков для нестационарного уравнения Шредингера на геометрическом графе.	39
2.1. Вводные замечания.	39
2.2. Распространение квантовых пакетов на геометрическом графе.	39
2.2.1. Комплексный росток Маслова на прямой.	39
2.2.2. Гауссовы пакеты на полупрямой.	41
2.2.3. Случай двух бесконечных лучей, сходящихся в одной точке.	44
2.2.4. Случай трех бесконечных лучей, сходящихся в одной точке.	47
2.2.5. Случай петли.	49
2.2.6. Распространение квантовых пакетов на произвольном графе.	50
2.3. Статистика распространения квантовых пакетов.	52
2.3.1. Асимптотика числа квантовых пакетов.	53
2.3.2. Плотность распределения пакетов.	59
2.4. Распространение гауссовых пакетов на однородном дереве.	61
3. Квазиклассические спектральные серии квантового оператора Шредингера, соответствующие неизолированным положениям равновесия.	65

3.1. Постановка асимптотической квантовой задачи.	65
3.2. Спектральные серии, соответствующие неизолированным положениям равновесия.	66
Список использованных источников	73

Введение

Работа посвящена описанию квазиклассического приближения для уравнений квантовой механики, соответствующего сингулярным множествам, в частности, построению квазиклассической теории на геометрических графах.

Теория дифференциальных уравнений и краевых задач на геометрических графах интенсивно развивается в последние десятилетия. Дифференциальные уравнения на пространственных сетях используются при моделировании различных задач естествознания: колебаний упругих сеток, процессов в сетях волноводов, состояний электронов в молекулах и других.

Большую часть работ в этой области условно можно разделить на два направления. Первое из них связано с применением методов теории операторов, теории самосопряженных расширений. Такой подход одним из первых использовал Б. С. Павлов, вместе с соавторами, в 80-х годах (см., в частности, статью [3]). В настоящее время в этой области активно работают П. Экснер, О. Пост, П. Курасов, У. Смелянский (см. обзор [29] и ссылки в нем) и многие другие. Например, в работе [30] исследована обратная спектральная задача и получена формула следа. Второе направление связано с получением аналогов классических результатов теории дифференциальных уравнений для случая геометрических графов. В частности, исследовались спектральные и качественные свойства решений краевых задач, построена теория неосцилляции, изучалась функция Грина, активно исследуются волновые процессы на графах. Здесь можно отметить работы Ю. В. Покорного, В. Л. Прядиева, А. В. Боровских, О. М. Пенкина, К. П. Лазарева, С. А. Шаброва (см. книгу [15] и ссылки в ней) и других.

Возрос интерес к уравнениям Шредингера на сетях. Произошло это в связи с тем, что квантовые системы могут описываться тонкими многообразиями, которые в пределе стягиваются к графам (см., например, [27]).

Для волнового уравнения на геометрическом графе (а точнее, на декартовом произведении графа и \mathbb{R}) при гладких условиях трансмиссии получены аналоги формулы Даламбера, и для некоторых классов геометрических графов описаны профили прямой и обратной волн (F. Ali-Mehmeti [22]; Ю. В. Покорный, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, А. В. Копытин, серия работ 1999-2003; С. Cattaneo, L. Fontana [24]). Исследовано гиперболическое уравнение на геометрическом графе, которое на ребрах этого графа имеет вид одномерного

волнового уравнения, а в вершинах имеет особенность типа δ -функции при младшей производной по времени (см. [5]).

Целью диссертационной работы является описание поведения квазиклассических решений уравнения Шредингера на сингулярных множествах. Основное внимание уделено случаю геометрических графов.

В работе применяются методы теории дифференциальных уравнений, топологии, дифференциальной геометрии, теории графов, линейной алгебры, теории уравнений математической физики.

Получен алгоритм построения правил квантования (обобщающих известные правила квантования Бора-Зоммерфельда) для случая геометрических графов. Описаны ядра оператора Лапласа, действующего на k -формах, определенных на сети. Кроме того, найдены асимптотические собственные значения, соответствующие собственным функциям, локализованным в вершине графа.

В квазиклассическом приближении описано распространение гауссовых пакетов на графе, в начальный момент локализованных в одной точке. Основное внимание уделено статистике поведения асимптотических решений при стремлении времени к бесконечности. Показано, что подсчет числа квантовых пакетов на графе связан с известной теоретико-числовой задачей нахождения числа целочисленных точек в расширяющемся симплексе. Получены явные формулы для старшего члена асимптотики в некоторых важных частных случаях.

Таким образом, построена квазиклассическая теория для уравнений квантовой механики, заданных на геометрическом графе.

Кроме того, рассматривается двумерная поверхность и оператор Шредингера на ней. Предполагается, что критические точки потенциала образуют на поверхности некоторую кривую, гомеоморфную окружности. Для оператора Шредингера найдены соответствующие спектральные серии с точностью до $O(\hbar^{5/2})$.

Во **введении** обсуждается актуальность диссертации, ее научная новизна. Кроме того, в нем приводится краткий обзор результатов работы.

Первая глава посвящена квазиклассическим асимптотикам в спектральных задачах для стационарных уравнений Шредингера на геометрических графах.

В параграфе 1.1 обсуждаются некоторые вводные замечания.

В параграфе 1.2 речь идет о том, что такое геометрический граф. В отличие от графа топологического, в котором ребро представляет собой просто

отношение между вершинами, в геометрическом графе ребро — это некоторая кривая.

Вводится оператор Шредингера на сети. Делается это стандартным (см. [15]) образом.

Пусть V произвольная, непрерывная на Γ и гладкая на ребрах функция, принимающая действительные значения. Тогда оператор Шредингера

$$\widehat{H} = -h^2 \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x)$$

определен на множестве функций из пространства Соболева $\psi \in \bigoplus_{j=1}^N H^2(\gamma_j)$, удовлетворяющих следующим граничным условиям в вершинах:

1. функция ψ непрерывна на Γ ;

2.

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a_m)} \alpha_j \frac{d\psi_j}{dx}(a_m) = 0, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}, \quad m = 1, 2, \dots, M - K \quad (1)$$

во всех внутренних вершинах (то есть в вершинах валентности, большей чем единица);

3. $\psi(a_m) = 0$ во всех внешних (висячих) вершинах, то есть в вершинах валентности один.

Второе условие называется условием трансмиссии.

Далее рассматриваются некоторые специальные виды условий трансмиссии.

Определение. Будем говорить, что условия трансмиссии имеют вид условий Кирхгофа, если все коэффициенты в условиях трансмиссии входят со знаком “плюс”, когда ребро из вершины выходит, и со знаком “минус”, когда, наоборот, ребро входит в вершину. Если, кроме того, в каждой вершине значения коэффициентов равны между собой по модулю, такие условия называются натуральными.

Затем рассматривается, в каких случаях оператор Шредингера будет самосопряженным и будет иметь дискретный спектр. В частности, оператор заведомо самосопряжен, если условия трансмиссии являются натуральными. В первой главе рассматриваются только компактные графы.

В параграфе 1.3 изложен алгоритм построения правил квантования, обобщающих правила квантования Бора-Зоммерфельда.

Граф деформируется (на нем отмечаются точки поворота и удаляются куски, для которых $\lambda < V(x)$), а потом по нему выписывается матрица размера $2N - K$ на $2N - K$ (здесь N — количество ребер в графе, K — число висячих вершин). Коэффициенты зависят от интегралов вида $\phi_j = \frac{1}{h} \int_{\gamma_j} \sqrt{\lambda - V_j(y)} dy$, где γ_j — ребро графа, а $V_j(x)$ — потенциал, ограниченный на j -ое ребро.. Равенство определителя этой матрицы нулю (1.4) и будет аналогом правила квантования. А именно, справедлива

Теорема 1.1. Если $\lambda = O(1)$ — корень уравнения (1.4), то тогда существует функция $\xi(x)$ (порядка $O(1)$) из области определения оператора \hat{H} такая, что $\hat{H}\xi(x) = \lambda\xi(x) + O(h^2)$. То есть λ является точкой h^2 -псевдоспектра (см. [25]) оператора \hat{H} .

Нас интересует вопрос о том, когда найденное нами λ приближает точное собственное значение оператора \hat{H} . Это будет так в том случае, когда оператор является самосопряженным.

Определение. Под “преобразованием оператора на графе в самосопряженный” понимается такая замена параметризации на графе, которая делает определенный в разделе 1.2 оператор самосопряженным.

Перемычкой мы называем ребро, которое удаляется из базисного цикла в графе в процессе получения остовного дерева.

Первым числом Бетти $\beta_1(\Gamma)$ геометрического графа будем называть (см. [6]) ранг первой группы гомологий для соответствующего клеточного комплекса. Хорошо известно (см. [9]), что для графа первое число Бетти (его еще называют цикломатическим числом) равно $N - M + P$. Здесь N — количество ребер, M — количество вершин, P — число связных компонент графа.

Утверждение 1. Оператор \hat{H} , определенный на дереве, всегда может быть преобразован в самосопряженный.

Замечание. Для того, чтобы оператор \hat{H} , определенный на произвольном графе, можно было преобразовать в самосопряженный, достаточно, чтобы были выполнены $\beta_1(\Gamma)$ условий.

Отметим, что возможность привести задачу к эквивалентной самосопряженной отмечается при доказательстве Теоремы 5.9 (стр.102) в книге [15], но там используется умножение уравнения на каждом ребре на подходящую константу, что не позволяет сохранить глобальную непрерывность функции $V(x)$.

Справедлива

Теорема 1.2. Если λ — корень уравнения (1.4), и оператор может быть преобразован в самосопряженный, то существует собственное число μ оператора \widehat{H} такое, что $\lambda - \mu = O(h^2)$ (то есть λ является асимптотическим собственным числом).

Следствие. Для случая, когда рассматриваемый граф — дерево, наш алгоритм всегда дает приближение к точке настоящего спектра оператора \widehat{H} .

Параграф 1.3 посвящен доказательству Теоремы 1.1. В этом рассуждении используется, кроме прочего, частный случай канонического оператора Маслова.

В параграфе 1.4 разобрано несколько примеров применения алгоритма. Среди них граф $K_{1,3}$ с новыми вершинами.

Асимптотические собственные значения, соответствующие собственным функциям, локализованным в вершине графа, обсуждаются в параграфе 1.5. Ранее мы рассматривали ту часть спектра, которой соответствуют собственные функции, осциллирующие на ребрах. В этом параграфе речь идет о собственных значениях, соответствующих функциям, локализованным в одной точке и имеющим вид $V(a) + O(h)$. Случай, когда решение сконцентрировано на ребре, не представляет для нас интереса, так как полностью описан, например, в [11]. Если решение локализовано в вершине графа, то верна следующая теорема.

Теорема 1.3. Пусть для потенциала $V(x)$ в точке a выполнены следующие условия:

- 1) значения первых односторонних производных $V'_j(a)$ для каждого ребра равны нулю,
- 2) значения вторых односторонних производных $V''_j(a)$ совпадают и положительны.

Тогда существует асимптотическое собственное число

$$E = V(a) + \sqrt{\frac{V''(a)}{2}} h + O(h^{3/2}).$$

Другими словами, существует непрерывная на графе и гладкая на ребрах функция $\xi(x)$ такая, что $\widehat{H}\xi(x) = E\xi(x) + O(h^{3/2})$. Если рассматриваемый оператор является самосопряженным, то построенное E приближает точное собственное значение μ (расстояние между ними есть величина порядка $O(h^{3/2})$).

Этот вариант осцилляторного приближения не учитывает глобальную структуру графа.

Замечание. Старшая часть асимптотической собственной функции при выполнении условий Теоремы 1.3 имеет вид $\exp(S/h)c_0$ и не зависит, как и асимптотическое собственное значение с точностью до $O(h^{3/2})$, от коэффициентов в условии трансмиссии. Но на следующие поправки это условие уже влияет. В частности, для получения приближения порядка $O(h^{5/2})$ для собственных чисел нужно, дополнительно к условиям теоремы, потребовать, чтобы значения односторонних третьих производных $V_j'''(a)$ совпадали по модулю, а их знаки удовлетворяли условию $\sum_j \alpha_j \operatorname{sgn}(V_j'''(a)) = 0$.

Параграф 1.6 посвящен описанию ядер оператора для случая нулевого потенциала, при действии на k -формы.

Рассмотрим оператор Лапласа (оператор Шредингера с нулевым потенциалом) на графе.

Для компактных гладких многообразий без края хорошо известна связь ядра оператора Лапласа, действующего на k -формах, с топологическими характеристиками многообразия (см., например, книгу [18] и ссылки в ней).

Естественно возникает вопрос: справедливы ли аналогичные свойства для стратифицированных множеств, в частности, для геометрических графов? На него дают ответ приведенные ниже утверждения. Граф компактен. Функции предполагаются непрерывными. Кроме того, предполагается, что условия трансмиссии имеют вид условий Кирхгофа.

Утверждение 2. Размерность ядра оператора Лапласа, действующего на 0-формах, определенных на геометрическом графе, равна числу связных компонент графа, не содержащих висячих вершин (то есть, не имеющих края).

Далее отмечается, что условия трансмиссии не обязательно должны иметь вид условий Кирхгофа для того, чтобы ядро имело размерность, равную единице (для связного графа) почти для всех значений коэффициентов. Приводится соответствующий пример.

Затем рассматриваются 1-формы на геометрических графах. Речь идет только о сетях без висячих вершин.

Определение. На каждом ребре рассмотрим выражение вида $f_j(x)dx$, и пусть в вершинах будет выполнено условие

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a)} \sigma(\gamma_j, a) f_j(a) = 0,$$

где $\sigma(\gamma_j, a) = 1$, если ребро входит в вершину, и $\sigma(\gamma_j, a) = -1$, если выходит. Такую совокупность будем называть 1-формой на графе.

Теперь определим лапласиан на 1-формах. Оператор Лапласа действует на 1-формы, для которых $f_j(x)$ — гладкие функции на ребрах, удовлетворяющие краевым условиям

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a)} \sigma(\gamma_j, a) f_j'(a) = 0,$$

здесь $\sigma(\gamma_j, a) = 1$, если ребро входит в вершину, и $\sigma(\gamma_j, a) = -1$, если выходит. На каждом ребре оператор задается соотношением $\Delta = dd^* + d^*d$ (см. [18]). Отметим, что на каждом ребре оператор Лапласа форме $f_j(x)dx$ сопоставляет форму $-f_j''(x)dx$.

Утверждение 3. Для оператора Лапласа с натуральными условиями трансмиссии, на графе без висячих вершин, размерность ядра, при действии на 1-формы, равна первому числу Бетти.

Вторая глава посвящена квазиклассическим асимптотикам и статистическим свойствам гауссовых пучков для нестационарного уравнения Шредингера на геометрическом графе.

Глава разделена на три части. В первой (2.1) обсуждаются вводные замечания. Здесь рассматриваются свойства уравнения в частных производных (нестационарного уравнения Шредингера), пространственная переменная в котором меняется на геометрическом графе. Основной эффект “разветвления” пространства состоит в многократном отражении от вершин графа, что приводит к появлению нетривиальных статистических явлений. Особенно ясно такие свойства видны при описании гауссовых пакетов (изначально локализованных вблизи одной точки); мы строим соответствующие решения при помощи простейшего варианта комплексного ростка Маслова [11].

Нужно отметить близость изучаемых вопросов к некоторым краевым задачам для гиперболических уравнений на сетях. Интересные результаты в этой области были получены в работах [5], [17], [16], [4].

Рассматриваются геометрические графы с конечным числом ребер и вершин. Допускаются ребра бесконечной длины, а также петли и кратные ребра.

Вторая часть главы (раздел 2.2) посвящена распространению квантовых пакетов на геометрическом графе.

Сперва, в параграфе 2.2.1, обсуждается известная схема построения решений в виде квазиклассических гауссовых пакетов на прямой. Рассматривается нестационарное уравнение Шредингера

$$-h^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) = ih \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad (2)$$

где V — гладкая функция (потенциал). Соответствующий гамильтониан имеет вид $H = p^2 + V(x, t)$ (см. [10]).

Начальные условия выбираем в виде узкого пакета, локализованного при $h \rightarrow 0$ вблизи точки x_0 :

$$\psi(x, 0) = K \exp \left(\frac{i(a(x - x_0)^2 + b(x - x_0) + c)}{h} \right). \quad (3)$$

Здесь b и c — вещественные константы, а мнимая часть a больше нуля. K имеет вид $K = h^{-1/4} K_1$, $K_1 \in \mathbb{R}$. Нормировочный множитель $h^{-1/4}$ введен для того, чтобы гарантировать $\psi(x, 0) = O(1)$ в норме пространства L^2 .

Решение строится с помощью двух гамильтоновых систем, одна из которых определяет распространение носителя пакета, а вторая является линеаризацией первой и рассматривается в комплексном пространстве (она определяет форму пакета). Точная формулировка и явная формула для решения приведены в Утверждении 4. Следом, в Утверждении 5 раздела 2.2.2, обсуждается случай полупрямой.

Далее, в Утверждении 6 в параграфе 2.2.3, описано решение для случая двух бесконечных лучей, сходящихся в одной точке.

В разделе 2.2.4 обсуждается ситуация пересечения трех бесконечных лучей.

В следующем параграфе (2.2.5) рассматривается граф, имеющий форму петли. Он представляет собой окружность с одной выделенной точкой, в которой заданы условия трансмиссии. Начальные условия заданы в некоторой другой точке $x = x_0$. Сперва квантовый пакет, определенный начальными данными, достигнет вершины графа. После этого два квантовых пакета будут двигаться в противоположных направлениях (это, по сути, случай двух ребер, соединенных в одной вершине, разобранный ранее). Показано, что оба этих квантовых пакета вернуться в вершину графа в один и тот же момент, если потенциал не зависит явным образом от времени. Таким образом, на петле в каждый момент времени будет находиться не более двух квантовых пакетов.

Нормируем коэффициенты в условии трансмиссии, а именно, потребуем, чтобы $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

Утверждение 7. Рассмотрим задачу Коши для нестационарного уравнения Шредингера на графе-петле. Тогда квазиклассическое решение будет представлять собой два гауссова пакета, движущихся на графе. Причем в момент отражения амплитуда того квантового пакета, который соответствует “волне”, “прошедшей” на первом шаге, равна, после n отражений, $(2n\alpha_1 - n + 1)\varphi_0^{(1,1)}$, а амплитуда того, который соответствует “отраженной волне”, равна $(2n\alpha_1 - n)\varphi_0^{(1,1)}$.

Раздел 2.2.6 посвящен описанию распространения пакетов в случае произвольного геометрического графа. На каждом ребре это делается с помощью комплексного ростка Маслова (то есть, при помощи нахождения решений гамильтоновой системы и ее линеаризации). А для описания поведения в вершинах графа достаточно рассмотреть случай звездного графа.

Обобщая приведенные в разделе 2.2 рассуждения, можно сформулировать следующее утверждение.

Теорема 2.1. Дан звездный граф, причем валентность единственной вершины a равна n . Пусть начальные данные имеют вид (2.2), где точка x_0 лежит на одном из ребер. Тогда решение задачи

$$\widehat{H}\psi(x, t) = ih\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} + O(h^{3/2})$$

представляет собой, в любой конечный момент времени, сумму конечного числа квантовых пакетов, то есть функций вида $\exp\left(\frac{iS^j(x, t)}{h}\right)\varphi^j(t)$, где $S^j = S_0^j(t) + (x - x_j(t))S_1^j + S_2^j(x - x_j(t))^2$, $Im S_2^j > 0$. Говоря точнее, пришедший в вершину a пакет разделяется на n пакетов, бегущих по инцидентным вершине ребрам. На каждом из ребер решение определяется гамильтоновой системой обыкновенных дифференциальных уравнений (2.7) и ее линеаризацией (2.8). Причем начальные значения для амплитуд определяются следующими формулами.

Для отраженного квантового пакета:

$$\varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \frac{\alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_n}{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}\varphi_0^{(1,1)}(\beta). \quad (4)$$

Для прошедших квантовых пакетов:

$$\varphi_0^{(k,1)}(\beta) = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}\varphi_0^{(1,1)}(\beta), \quad (5)$$

где $k = 2, \dots, n$.

Здесь β — момент времени, когда исходный пакет пришел в точку a .

Если стоящий в левой части оператор \hat{H} является самосопряженным, то это решение отличается от точного решения нестационарного уравнения Шредингера не более, чем на $O(\hbar^{1/2})$.

Таким образом, квазиклассическое решение задачи Коши в любой конечный момент времени будет представлять собой конечное количество гауссовых пакетов, движущихся на геометрическом графе.

Замечание. Случай $\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n = 0$ отвечает несамосопряженному оператору и не имеет физического смысла. В статье [8] доказано, что спектр соответствующего оператора заполняет всю комплексную плоскость.

Нужно отметить схожесть выражений (2.42) и (2.43) и формул, полученных для случая гиперболического уравнения в [14].

Третья часть второй главы (2.3) посвящена статистике распространения гауссовых пакетов.

Как было доказано в предыдущем разделе, квазиклассическое решение задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера с начальными условиями вида (2.2), имеет вид $\Psi(x, t) + O(\hbar^{1/2})$, где $\Psi(x, t)$ — конечная сумма гауссовых пакетов. В этом разделе рассматривается асимптотика функции $\Psi(x, t)$ при $t \rightarrow \infty$, а именно изучается, как меняется со временем число квантовых пакетов. Заметим, что эта задача отличается от задачи описания асимптотики решения уравнения Шредингера при $t \rightarrow \infty$, так как оценка остатка справедлива только на конечных временах. С физической точки зрения это означает, что мы рассматриваем времена большие, но много меньшие, чем $1/\hbar$.

В этой части изучаются только конечные графы с компактными ребрами. Условия трансмиссии в вершинах берутся такими, чтобы оператор Шредингера был самосопряженным (см. [36]). В этом случае из формул (2.42) и (2.43) следует, что в вершинах степени 2 число квантовых пакетов не меняется (так как у отраженного квантового пакета нулевая амплитуда). Графы, в которых нет вершин степени 2, будем, следуя [30], называть *чистыми*. До конца третьей части рассматриваются только такие графы.

Кроме того, из формул (2.42) и (2.43) следует, что если квантовый пакет проходит вершину степени v , то при этом образуется ровно v новых квантовых пакетов.

Далее вводится величина t_j — время прохождения квантовым пакетом j -го ребра. Во второй части главы показано, что время прохождения определяется решениями гамильтоновой системы, при данных начальных

условиях. Предполагаем, что t_j линейно независимы над полем \mathbb{Q} (ситуация общего положения).

В третьей главе используются некоторые теоретико-числовые утверждения, связанные с подсчетом количества точек с целыми координатами, которые попадают в расширяющийся полиэдр. Результаты в этой области существенно зависят от того, рациональны или нет координаты вершин полиэдра. К рациональному случаю относятся результаты, связанные с полиномами (и квазиполиномами) Эрхарта (см. [26]) и обобщающие теорему Пика. Работа в этой области активно ведется в настоящее время (см. статью [23] и ссылки в ней). Результаты, относящиеся к случаю иррациональных координат, восходят к работе Харди и Литтлвуда [28], где разобран случай прямоугольного треугольника на плоскости. Ссылки, относящиеся к современному состоянию исследований в этой области, можно найти в [32] и [35].

Параграф 2.3.1 посвящен асимптотике числа квантовых пакетов с увеличением времени.

Определяем функцию $N(T)$ как число квантовых пакетов на графе к моменту времени T .

Пусть ω_j — это частота прохождения j -го ребра, то есть $\omega_j = 1/t_j$.

Утверждение 8. Для звездного графа (состоящего из одной вершины валентности v и v вершин степени 1, которые соединены с первой) справедлива формула

$$N(T) = \sum_{k=1}^{v-1} (v-k) \sum_{i=1}^{C_v^k} W(\Delta_k^i(\omega_1 T/2, \dots, \omega_k T/2)),$$

здесь $W(\Delta_k^i)$ — это число точек целочисленной решетки, которые лежат на i -ой грани k -мерного симплекса Δ_k , со сторонами $\omega_1 T/2, \dots, \omega_k T/2$.

Учитываются только грани старшей размерности, инцидентные началу координат.

Для почти всех значений t_1, \dots, t_v :

$$N(T) = \frac{1}{2^{v-1}(v-1)!} \sigma_{v-1}(\omega_1, \dots, \omega_v) T^{v-1} + o(T^{v-1}).$$

Здесь σ_k — стандартный симметрический многочлен степени k .

Отметим, что для случая трех ребер можно, используя результаты, изложенные в [28], явно выписать и второй член асимптотики, а именно:

$$N(T) = \frac{1}{8} \sigma_2(\omega_1, \omega_2, \omega_3) T^2 + \frac{1}{2} \sigma_1(\omega_1, \omega_2, \omega_3) T + o(T).$$

Общую ситуацию описывает

Теорема 2.2. В случае произвольного графа функция $N(T)$ представляется в виде $CT^{v-1} + o(T^{v-1})$. Здесь v — число ребер в графе.

Нужно отметить, что коэффициент при старшей степени может быть не равен сумме коэффициентов, соответствующих вершинам максимальной степени, если рассматривать их как вершины звездного графа. Например, справедливо следующее

Утверждение 9. Для графа, который состоит из двух вершин, соединенных v ребрами, справедливы формулы

$$N(T) = \sum_{k=1}^{v-1} (v-k) \sum_{i=1}^{C_v^k} W(\Delta_k^i(\omega_1 T, \dots, \omega_k T)),$$

$$N(T) = \frac{1}{(v-1)!} \sigma_{v-1}(\omega_1, \dots, \omega_v) T^{v-1} + o(T^{v-1}).$$

Заметим, что если граф имеет сложную структуру, то задача выписывания формулы для старшего члена асимптотики становится значительно более трудоемкой. В каждом конкретном случае нужен перебор по всем подграфам-деревьям, в которых вершина максимальной валентности имеет степень на единицу меньше, чем в исходном графе. При этом, кроме вклада, который дает рассмотрение этой вершины как звездной (см. Утверждение 8), нужно учитывать количество квантовых пакетов, которые она “передает” другим вершинам максимальной валентности. Таким образом, на главный член асимптотики влияют: 1) время прохождения каждого из ребер в графе и 2) топологическая структура подграфа, связывающего вершины максимальной валентности.

В следующем параграфе (2.3.2) ставится вопрос о том, как можно описать распределение квантовых пакетов на геометрическом графе. Справедливо следующее утверждение:

Теорема 2.3. Рассмотрим граф, упомянутый в Утверждении 9, для случая $v = 3$ (он состоит из двух вершин a и b , соединенных 3 ребрами). Рассмотрим на одном из ребер отрезок cd , время прохождения которого равно τ . Тогда, для почти всех t_1, t_2, t_3 (см. [32]), отношение числа квантовых пакетов на этом отрезке к числу квантовых пакетов на всем графе стремится к выражению

$$\frac{N_{cd}(T)}{N(T)} \rightarrow \frac{\sigma_3}{\sigma_2} \tau \equiv \frac{\omega_1 \omega_2 \omega_3}{\omega_1 \omega_2 + \omega_1 \omega_3 + \omega_2 \omega_3} \tau \equiv \frac{1}{t_1 + t_2 + t_3} \tau.$$

Получается, что квантовые пакеты распределяются (при заданном потенциале и начальных условиях) равномерно по времени прохождения ребра. Очевидно, что это не означает, что пакеты распределяются равномерно по пространственной координате.

Было проведено численное моделирование для конечных сетей. Для упомянутых графов значение старшего коэффициента асимптотики совпало с полученным теоретически.

Последняя часть второй главы (2.4) посвящена распространению гауссовых пакетов на однородном дереве.

Рассматривается бесконечное дерево, у которого валентность всех вершин, кроме корневой, одинакова и равна v . Число, на единицу меньше валентности, называем *числом ветвления* b . Предполагаем, кроме того, что длина всех ребер одинакова и равна l . Потенциал одинаков для всех ребер (можем, для простоты, считать его нулевым). Соответственно, и время прохождения всех ребер будет одинаковым (обозначим его L). Дифференциальные операторы на подобных деревьях изучались, например, в работах [34] и [33].

Можно рассмотреть задачу о распространении гауссовых пакетов на таком графе. Формулы, описывающие поведение пакетов в вершинах, приведены в одном из предыдущих разделов. Рассматриваем только самосопряженный случай. При этом в каждой вершине амплитуда делится в таком соотношении: $2/v$ для каждого прошедшего пакета и $2/v - 1$ для отраженного. В корневой вершине требуем выполнения условия Дирихле.

Определение. Энергией на ребре называем следующую величину:

$$E_{\gamma_j} = \int_{\gamma_j} |\Psi|^2 dx.$$

Очевидно, что она определяется суммой квадратов амплитуд для пакетов, носители которых попали на ребро.

Легко описать изменение энергии при прохождении вершины графа. Например, для бинарного дерева (то есть, для случая $b = 2$) получаем, что $8/9$ энергии проходит, а отражается $1/9$. Суммарная энергия не меняется.

Пусть начальные данные имеют вид (2.2) и сконцентрированы на ребре, инцидентном корневой вершине. Возникает вопрос: вся ли энергия “уйдет на бесконечность” или будут ребра, на которых, в пределе при стремлении времени к бесконечности, энергия не будет стремиться к нулю?

Регулярность дерева делает задачу комбинаторной, так как все взаимодействия происходят только в фиксированные моменты времени вида $t_0 + nL$, где L — время прохождения ребра, а t_0 — время, за которое первый пакет достигнет вершины.

В разделе 2.4 явно указан вид состояния ρ , которое переходит в себя через время равное $2L$.

Численное моделирование показывает, что для бинарного дерева доля энергии, которая осталась на начальном участке, стремится к $1/2$. Отметим, что это значение соответствует проекции начальных данных на вектор ρ . С увеличением числа ветвления доля энергии, которая остается на начальном участке графа, возрастает. При $b = 3$ оказывается, что остается $2/3$, а $b = 4$ дает $3/4$ (см. таблицу 1). Можно предположить, что для произвольного числа ветвления доля энергии составляет $(b - 1)/b$.

Третья глава посвящена квазиклассическим спектральным сериям квантового оператора Шредингера, соответствующим неизолированным положениям равновесия.

Теория квазиклассического квантования (см., например, [11], [10]) позволяет сопоставлять инвариантным множествам гамильтоновой системы спектральные серии соответствующего квантового оператора. В параграфе 3.1 описана постановка асимптотической квантовой задачи.

На двумерной поверхности рассматривается оператор Шредингера с потенциалом, критические точки которого образуют замкнутую кривую. Введем, возможно локально, такие координаты r и φ на поверхности, что φ будет отсчитываться вдоль рассматриваемой кривой.

Классическая функция Гамильтона имеет вид $H = g^{ij}p_i p_j + V(r)$, если $g_{ij}(r, \varphi)$ — метрика на рассматриваемой поверхности. Ясно, что кривая $\{\{r, \varphi, p_r, p_\varphi\} | V'(r) = 0, p_r = 0, p_\varphi = 0\}$ состоит из критических точек гамильтониана, то есть положений равновесия.

Стандартная конструкция (см., например, [11]) для описания спектральных серий, соответствующих изолированным невырожденным положениям равновесия, неприменима в этой ситуации. Третья глава диссертации посвящена построению спектральных серий в рассматриваемом случае.

Оказывается, что асимптотическое $mod O(\hbar^{3/2})$ (такая точность является общепринятой в теории комплексного ростка) собственное значение “бесконечно вырождено”, то есть ему соответствует бесконечное множество асимптотических собственных функций. А именно, справедливо следующее

Утверждение 10. Если взять $\psi = U(\varphi)e^{iS/h}$, где $S = i\lambda(r - r_0)^2$,

$\lambda = \sqrt{\frac{V''(r_0)}{8g^{22}}}$, а $U(\varphi)$ — произвольная гладкая финитная функция, то ψ будет

асимптотической собственной функцией оператора $H\left(\varphi, r, -ih\frac{\partial}{\partial\varphi}, -ih\frac{\partial}{\partial r}\right)$ с точностью до $O(h^{3/2})$, причем асимптотическое собственное значение имеет вид

$$E = V(r_0) + \sqrt{\frac{g^{22}V''(r_0)}{8}}h.$$

Здесь r_0 — корень уравнения $V'(r) = 0$.

Асимптотическое вырождение означает, что расстояние между точными собственными значениями, вообще говоря, $o(h^{3/2})$. Ниже приводится утверждение, описывающее асимптотические спектральные серии с большей точностью.

Теорема 3.1. Пусть u_0 — гладкое решение уравнения второго порядка с периодическими коэффициентами

$$A(\varphi)u_0''(\varphi) + B(\varphi)u_0'(\varphi) + C(\varphi)u_0(\varphi) = E_2u_0(\varphi),$$

где $A(\varphi)$, $B(\varphi)$, $C(\varphi)$ вычисляются по явным формулам (см. (3.20) и (3.21) ниже), и пусть при $E_2 = E_{2n}$ существует периодическое решение (то есть, E_{2n} — соответствующее собственное значение). Тогда квазиклассическое решение спектральной задачи для оператора (3.1) с точностью до $O(h^{5/2})$ имеет вид:

$$E = V(r_0) + \sqrt{\frac{g^{22}V''(r_0)}{8}}h + E_{2n}h^2$$

— асимптотическое собственное число (n — целое),

$$\psi = U(\varphi, r)e^{iS/h}$$

— асимптотическая собственная функция.

Здесь $U = u_0(\varphi) + u_1(\varphi)(r - r_0) + \frac{u_2(\varphi)}{2}(r - r_0)^2$ (где u_1 , u_2 вычисляются по (3.17) и (3.18)), а $S = i(\lambda(r - r_0)^2 + \lambda_1(r - r_0)^3 + \lambda_2(r - r_0)^4)$.

Причем

$$\lambda = \sqrt{\frac{V''(r_0)}{8g^{22}}},$$

а λ_1 и λ_2 вычисляются по формулам (3.10).

Эти решения уже не являются вырожденными. Именно повышение порядка позволило разделить асимптотические решения, которые до этого совпадали с точностью до $O(h^{3/2})$.

В статье [38] разобран пример применения этой конструкции в случае коэффициентов g_{ij} , соответствующих частному случаю редуцированной (см. книгу [31] и ссылки в ней) задачи двух тел на пространстве Лобачевского.

Работа выполнена при частичной поддержке подпрограммы «Фундаментальные исследования» ведомственной научной программы «Развитие научного потенциала высшей школы» Федерального агентства по образованию РФ, проекта РНП 2.1.1.2381 программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 годы)», гранта 07-07-00223 РФФИ.

В заключение автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю профессору А. И. Шафаревичу за постановки задач и постоянное внимание к работе, а также всему коллективу кафедры дифференциальной геометрии и приложений, под руководством академика РАН А. Т. Фоменко, за возможность плодотворно заниматься научной работой. Автор благодарит профессоров О. М. Касим-Заде, П. Б. Курасова, С. Ю. Доброхотова, Н. Г. Мощевитина за полезные обсуждения и ряд ценных замечаний.

1. *Квазиклассические асимптотики в спектральных задачах для уравнений Шредингера на квантовых графах.*

1.1. Общие замечания.

Рассматривается задача построения правил квантования в квазиклассическом приближении для уравнения Шредингера на геометрическом графе. Под геометрическим графом (сетью) здесь понимается одномерный клеточный комплекс. В этой главе рассматриваются только компактные графы.

Основным результатом данного раздела является алгоритм построения правил квантования, который проиллюстрирован рядом примеров.

1.2. Постановка задачи.

Геометрический граф Γ — одномерный клеточный комплекс. Ребра обозначаем γ_j , а вершины a_j . Рассматриваются только конечные графы. Не исключаются случаи кратных ребер и петель. Через $\Gamma(a)$ обозначается совокупность ребер, примыкающих к вершине a . Число вершин обозначим буквой M , ребер N , висячих вершин K .

Под квазиклассическим квантованием для уравнений квантовой механики здесь понимается сопоставление геометрическим объектам спектральных серий оператора Шредингера.

Зададим дифференциальный оператор \hat{H} (соответствующее уравнение получим, рассматривая для него задачу Штурма-Лиувилля) на графе (см. [15]).

Каждое ребро отождествляется с отрезком действительной прямой. Мы вводим пространство $L^2(\Gamma)$ функций на графе:

$$L^2(\Gamma) = \oplus \sum_{j=1}^N L^2(\gamma_j),$$

со стандартным скалярным произведением

$$(f, g) = \int_{\Gamma} f(x) \overline{g(x)} dx. \quad (1.1)$$

Пусть V произвольная, непрерывная на Γ и гладкая на ребрах функция, принимающая действительные значения. Тогда оператор Шредингера

$$\widehat{H} = -h^2 \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) \quad (1.2)$$

определен на множестве функций из пространства Соболева $\psi \in \bigoplus_{j=1}^N H^2(\gamma_j)$, удовлетворяющих следующим граничным условиям в вершинах:

1. функция ψ непрерывна на Γ ;

2.

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a_m)} \alpha_j \frac{d\psi_j}{dx}(a_m) = 0, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}, \quad m = 1, 2, \dots, M - K \quad (1.3)$$

во всех внутренних вершинах (то есть, в вершинах валентности большей, чем единица);

3. $\psi(a_m) = 0$ во всех внешних (висячих) вершинах, то есть в вершинах валентности один.

Нас интересует асимптотическая (при $h \rightarrow 0$) спектральная задача для такого оператора (сам оператор будем обозначать \widehat{H}).

Определение. Будем говорить, что условия трансмиссии имеют вид условий Кирхгофа, если все коэффициенты в условиях трансмиссии входят со знаком “плюс”, когда ребро из вершины выходит, и со знаком “минус”, когда, наоборот, ребро входит в вершину. Если, кроме того, в каждой вершине значения коэффициентов равны между собой по модулю, такие условия называются натуральными.

В [3] (см. аналогичное утверждение в [15]) доказано, что оператор \widehat{H} является самосопряженным, когда коэффициенты при второй производной в уравнениях на ребрах равны соответствующим коэффициентам в условиях трансмиссии. В нашем случае все коэффициенты при вторых производных равны между собой (и равны $-h^2$). Таким образом, оператор заведомо самосопряжен, если условия трансмиссии являются натуральными.

В [3] доказана теорема о дискретности спектра оператора \widehat{H} на компактном графе в случае самосопряженных условий трансмиссии. В [8] доказано, что условие самосопряженности можно заменить на более слабое условие: нужно, чтобы нашлась внутренняя вершина, в которой вектор, составленный из α_j (с

учетом ориентации ребер), не был бы ортогонален вектору, в котором каждая компонента равна 1. Если это условие не выполнено, спектр заполняет всю комплексную плоскость.

1.3. Алгоритм построения правил квантования.

Сформулируем алгоритм построения правил квантования.

1) Шаг первый: разметка новых вершин. Находим и отмечаем точки, где $V(x) = \lambda$. Эти точки, называемые точками поворота, в классической механике ограничивают область допустимого движения.

2) Шаг второй: деформация графа. Изменяем граф следующим образом: удаляем из него те участки, на которых $\lambda < V(x)$. Мы получим граф, возможно несвязный, у которого появятся новые вершины. Каждой связной компоненте нового графа соответствует своя спектральная серия, и тем самым задача, возможно, распадается на несколько (по числу связных компонент). Далее рассматриваем связный граф с вершинами двух типов: “старые” и “новые” (то есть, точки где $V(x) = \lambda$). Если нашлись связные куски, на которых нет вершин исходного графа, то соответствующие им правила квантования можно сразу выписать (это одномерная задача, заданная на отрезке), и в дальнейшем мы этот случай отбрасываем. Вновь появившиеся висячие вершины будем называть λ -вершинами.

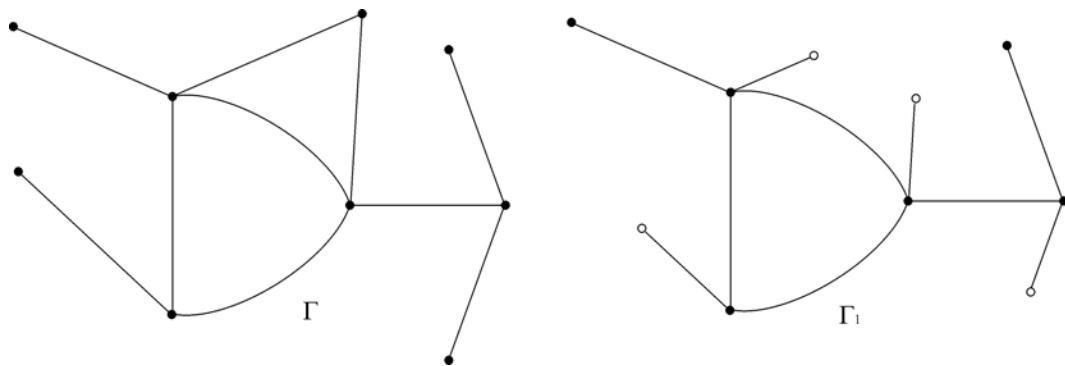


Рис. 1.1. Пример деформации графа.

3) Шаг третий: изменение ориентации части ребер. Все вершины степени один (висячие) считаем начальными точками. Для ребер, не соприкасающихся с вершинами степени один, ориентацию (направление, в котором будет откладываться аргумент решения одномерного уравнения) оставляем без

изменений. Этот шаг носит вспомогательный характер и упрощает дальнейшие шаги.

4) Шаг четвертый: выписывание уравнений. Всего их будет $2N - K$ (здесь N — количество ребер в графе, K — число висячих вершин). На каждом ребре, при выполнении соответствующих ограничений на потенциал, существует гладкое решение, зависящее от двух произвольных постоянных (обозначим их A_j и B_j). Выпишем линейную систему для определения этих коэффициентов. Уравнения выписываются по вершинам графа.

Подшаг первый (уравнения для внутренних вершин графа). Рассмотрим “старую” вершину, все соседи которой — вершины исходного графа степени больше единицы. Выпишем уравнения, соответствующие такой вершине. Сначала записываем группу уравнений, соответствующих условию непрерывности решения. Если степень вершины равна k , то их будет $k - 1$. Каждому выходящему ребру соответствует сумма $A_j + B_j$, а каждому входящему $A_j e^{i\phi_j} + B_j e^{-i\phi_j}$. Эти выражения приравниваются друг к другу. Здесь введено обозначение $\phi_j = \frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{\lambda - V_j(y)} dy$ — интеграл взят по ребру, а $V_j(x)$ — потенциал, ограниченный на j -ое ребро. И еще одно уравнение получается как следствие условия трансмиссии в точке. На этот раз вклад исходящего ребра равен $A_j - B_j$, а входящего $A_j e^{i\phi_j} - B_j e^{-i\phi_j}$. Вклады суммируются с коэффициентами α_j и приравниваются нулю.

Подшаг второй (уравнения для вершин, у которых есть соседи степени один). Осталось рассмотреть вершины трех типов: λ -вершины, вершины исходного графа степени один и вершины исходного графа степени выше единицы, у которых есть соседи степени один. Уравнения мы будем записывать только в вершинах последнего, третьего, типа. Есть два варианта. Первый: с такой вершиной соседствует λ -вершина. В ней есть условие склейки решения, что дает возможность выразить одну из произвольных постоянных, определяющих решение на ребре, соединяющем λ -вершину и вершину исходного графа, через другую. Тогда в вершине третьего типа к остальным уравнениям, которые выписываются так же, как на подшаге первом, можно добавить соответственно: $\cos(\phi_j - \frac{\pi}{4})A_j$ в условия непрерывности и $i \sin(\phi_j - \frac{\pi}{4})A_j$, с коэффициентом α_j , в следствие из условий трансмиссии. Второй вариант: соседней оказалась висячая вершина исходного графа. Тогда вклады в уравнения, записываемые для вершины третьего типа, будут такие:

$2i \sin \phi_j A_j$ в условия непрерывности и $2 \cos \phi_j A_j$, с коэффициентом α_j , в условие трансмиссии.

Как можно заметить, есть два простых примера, к которым, в силу их простоты, описанная конструкция не применима. А именно, это два графа: пара “старых” вершин соединена одним ребром, или вершина исходного графа соединена с λ -вершиной. Ниже эти примеры разобраны.

5) Шаг пятый: подсчет определителя, соответствующего линейной системе, составленной на предыдущих шагах. Приравниваем определитель нулю (требование существования нетривиальных решений):

$$\det(A(\lambda)_{(2N-K) \times (2N-K)}) = 0. \quad (1.4)$$

Это и есть аналог правил квантования для геометрических графов.

Теорема 1.1. Если $\lambda = O(1)$ — корень уравнения (1.4), то тогда существует функция $\xi(x)$ (порядка $O(1)$) из области определения оператора \hat{H} такая, что $\hat{H}\xi(x) = \lambda\xi(x) + O(h^2)$. То есть λ является точкой h^2 -псевдоспектра (см. [25]) оператора \hat{H} .

Доказательство теоремы 1.1 приведено ниже.

Нас интересует вопрос, когда найденное нами λ приближает точное собственное значение оператора \hat{H} . Это будет так в том случае, когда оператор является самосопряженным.

Достаточным условием самосопряженности (см. [3], выкладка основана на применении формулы интегрирования по частям) является попарное совпадение следующих коэффициентов: α_k в условии трансмиссии и коэффициента при второй производной на соответствующем ребре.

Определение. Под “преобразованием оператора на графе в самосопряженный” понимается такая замена параметризации на графе, которая делает определенный в разделе 1.2 оператор самосопряженным.

Перемышкой мы называем ребро, которое удаляется из базисного цикла в графе в процессе получения остовного дерева.

Первым числом Бетти $\beta_1(\Gamma)$ геометрического графа будем называть (см. [6]) ранг первой группы гомологий для соответствующего клеточного комплекса. Хорошо известно (см. [9]), что для графа первое число Бетти (его еще называют цикломатическим числом) равно $N - M + P$. Здесь N — количество ребер, M — количество вершин, P — число связных компонент графа.

Утверждение 1 *Оператор \widehat{H} , определенный на дереве, всегда может быть преобразован в самосопряженный (см. [15]).*

Замечание. Для того, чтобы оператор \widehat{H} , определенный на произвольном графе, можно было преобразовать в самосопряженный, достаточно, чтобы были выполнены $\beta_1(\Gamma)$ условий, а именно: совпадение коэффициентов $\tilde{\alpha}$ и $\tilde{\rho}$ в конечной точке каждой перемычки. Тильда над символом означает, что он был изменен. Так, например, $\tilde{\alpha}$ — это значение коэффициента в условиях трансмиссии, после применения процедуры, описанной в доказательстве Утверждения.

Доказательство Утверждения 1. Возьмем в дереве корень (степени больше единицы). Применим к графу следующую процедуру: на всех ребрах, выходящих из данной вершины и таких, что соответствующее $\alpha_j \neq 1$, сделаем линейную замену переменной: $y = k_j x$. Рассмотрим одно из ребер и для простоты будем считать, что оно имеет номер 1. Уравнение переписется в виде

$$-h^2 \frac{1}{k^2} \frac{d^2 \psi(y/k)}{dy^2} + V(y/k) \psi(y/k) = \lambda \psi(y/k).$$

А условия трансмиссии, соответственно в начальной (a) и конечной (b) точках:

$$\frac{\alpha_1}{k} \frac{d\psi_j}{dx} + \sum_{\Gamma(a) \setminus \{1\}} \alpha_j \frac{d\psi_j}{dx} = 0.$$

$$\frac{\beta_1}{k} \frac{d\psi_j}{dx} + \sum_{\Gamma(a) \setminus \{1\}} \beta_j \frac{d\psi_j}{dx} = 0.$$

Теперь, если мы хотим добиться совпадения коэффициентов в условии трансмиссии ($\tilde{\alpha}$) и в уравнении ($\tilde{\rho}$), нам остается положить $k = 1/\alpha_1$.

$$\tilde{\alpha} = \frac{\alpha_1}{k} = \frac{1}{k^2} = \tilde{\rho}$$

Если α_1 было отрицательным, мы, делая линейную замену, поменяли ориентацию ребра. Мы изменили коэффициенты в уравнении и в условиях трансмиссии, не изменив при этом множество функций, удовлетворяющих этим условиям. В стартовой вершине условия самосопряженности теперь выполнены. Во всех вершинах, которые примыкают к данной (в частности, в b), домножим условия трансмиссии так, чтобы для второго конца ребра было выполнено условие равенства коэффициентов (в точке b на α_1/β_1).

Повторим процедуру, стартовав из вершин, в которых закончили первый шаг. Ясно, что мы в состоянии охватить всё дерево.

В случае произвольного графа, на перемычках (их будет $\beta_1(\Gamma)$) мы можем осуществить первый этап приведения к самосопряженному виду, но не можем потом подходящим способом домножить условия трансмиссии. Соответственно, остается еще проверить, выполняются ли равенства ($\tilde{\alpha} = \tilde{p}$).

Отметим, что возможность привести задачу к эквивалентной самосопряженной отмечается при доказательстве Теоремы 5.9 в книге [15] (стр.102), но там используется умножение уравнения на каждом ребре на подходящую константу, что не позволяет сохранить глобальную непрерывность функции $V(x)$.

Теорема 1.2. Если λ — корень уравнения (1.4), и оператор может быть преобразован в самосопряженный, то существует собственное число μ оператора \hat{H} такое, что $\lambda - \mu = O(h^2)$ (то есть λ является асимптотическим собственным числом).

Следствие. Для случая, когда рассматриваемый граф — дерево, наш алгоритм всегда дает приближение к точке настоящего спектра оператора \hat{H} .

1.4. Доказательство теоремы 1.1.

Рассматривается задача

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi + O(h^2), \quad \|\psi\| = O(1).$$

Асимптотическое решение (асимптотическую собственную функцию) будем искать в виде канонического оператора Маслова, примененного к некоторой функции. Для ребер, которые соединяют вершины исходного графа, достаточно рассмотреть метод ВКБ. Будем искать решение в виде

$$\psi = \exp\left(\frac{iS}{h}\right) (\varphi_0 + \varphi_1 h + \varphi_2 h^2 + \dots). \quad (1.5)$$

Для выписывания условий квантования нам достаточно ограничиться первым членом асимптотики (про то, как добиться точности $O(h^2)$, будет сказано ниже). Для этого возьмем в (1.5) только первое слагаемое.

Подставляя (1.5) в уравнение на ребре и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях h , получим при h^0 уравнение, которое называется уравнением Гамильтона-Якоби:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x) = \lambda.$$

Откуда, выбрав в качестве начальной точки точку a — начальную вершину ребра при заданной параметризации, получаем

$$S = \pm \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy. \quad (1.6)$$

После этого, приравнявая коэффициенты при h^1 , получим уравнение, называемое уравнением переноса. Используя его решение, строим на ребре асимптотическую собственную функцию в виде

$$\psi = \frac{1}{\sqrt[4]{\lambda - V(x)}} \cdot \left(A \exp\left(\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) + B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(z)} dz\right) \right). \quad (1.7)$$

Она зависит от двух постоянных (A и B). Определить значения этих коэффициентов позволяют условия склейки решения в вершинах графа.

Для ребра, соприкасающегося с λ -вершиной, то есть точкой поворота, решение получаем, применяя метод канонического оператора Маслова. А именно, вне окрестности λ -вершины, решение в этом случае будет выглядеть так:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt[4]{\lambda - V(x)}} A \cos\left(\frac{1}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy - \frac{\pi}{4}\right). \quad (1.8)$$

На каждом ребре выражение (1.7) дает нам решение с заданной точностью $O(h^2)$. Но так как мы хотим сохранить условия в вершинах в том же виде, что и для порядка $O(h)$, мы вынуждены рассмотреть второе слагаемое в (1.5). А именно, будем искать решение в виде

$$\psi = \frac{1}{(\lambda - V(x))^{1/4}} \left(A \exp\left(\frac{iS}{h}\right) + B \exp\left(-\frac{iS}{h}\right) \right) + h \left(\chi_1(x) \exp\left(\frac{iS}{h}\right) + \chi_2(x) \exp\left(-\frac{iS}{h}\right) \right). \quad (1.9)$$

На ребре мы получим, что эта функция, как и (1.7), удовлетворяет уравнению с точностью до $O(h^2)$. Теперь обратимся к вершинам и распишем (1.3) в точке a подробнее. Посчитаем производную выражения в (1.9), а после домножим на h :

$$\begin{aligned}
& i\sqrt[4]{\lambda - V(a)} \cdot \\
& \cdot \left(A \exp \left(\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy \right) - B \exp \left(-\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy \right) \right) + \\
& + h \left(A \exp \left(\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy \right) + B \exp \left(-\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy \right) \right) \cdot \\
& \cdot \frac{dV}{dx}(a) \frac{1}{4(\lambda - V(a))^{5/4}} + \\
& + \chi_1(a) \exp \left(\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy \right) ih\sqrt{\lambda - V(a)} + \\
& + \chi_2(a) \exp \left(-\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy \right) ih\sqrt{\lambda - V(a)} + O(h^2).
\end{aligned} \tag{1.10}$$

Таким образом, если взять

$$\begin{aligned}
\chi_1(a) &= \frac{i}{4} \frac{dV}{dx}(a) A (\lambda - V(a))^{-7/4}, \\
\chi_2(a) &= -\frac{i}{4} \frac{dV}{dx}(a) B (\lambda - V(a))^{-7/4},
\end{aligned}$$

то мы получим, что условия трансмиссии для получения решения с точностью до $O(h^2)$ будут такими же, как и для $O(h)$.

Заметим, что изменение структуры графа все еще дает возможность получить погрешность порядка h^2 . На втором шаге алгоритма вводятся новые вершины, которые отмечают точки поворота. Локальные решения вблизи таких точек известны. В области тени решения, ограниченные при $h \rightarrow 0$, экспоненциально малы. Поэтому исключение соответствующего куска из графа не влияет на точность асимптотики.

Теперь, для того чтобы обосновать четвертый шаг алгоритма, нужно посмотреть, какие значения принимают асимптотические решения и их производные в начальных и конечных точках.

Для решений на ребрах, где нет точек поворота. Значение в начальной точке ребра равно $A_j + B_j$, в конечной $A_j e^{i\phi_j} + B_j e^{-i\phi_j}$ (используем введенное ранее обозначение ϕ_j). Здесь уже произведено сокращение на $(\sqrt{\lambda - V(x)})^q$. Оно возможно, так как $V(x)$ является функцией, непрерывной на Γ .

Выражение для производной:

$$h\psi' = i\sqrt[4]{\lambda - V(x)} \cdot \left(A \exp\left(\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) - B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(z)} dz\right) \right) + O(h). \quad (1.11)$$

Отметим, что условие трансмиссии в точке a аналогичным образом можно сократить на $\frac{i}{h}(\sqrt{\lambda - V(a)})^q$ и в дальнейшем, говоря об этом уравнении, мы будем сразу подразумевать, что сокращение произведено.

Значение производной в начале ребра: $A_j - B_j$. В конце ребра: $A_j e^{i\phi_j} - B_j e^{-i\phi_j}$.

Для решений на ребрах с точкой поворота. Мы можем использовать хорошо известный (см. [10]) вид ограниченного асимптотического решения при наличии точек поворота, приведенный в (1.8).

Тогда значение решения в начальной точке с заданной точностью равно $A \cos(\phi_j - \frac{\pi}{4})$. Значение производной в начальной точке (после проведенного по аналогии со случаем ребер первого типа сокращения): $-A \frac{1}{i} \sin(\phi_j - \frac{\pi}{4}) \equiv i \sin(\phi_j - \frac{\pi}{4}) A$.

Осталось пояснить, что для случая вершины исходного графа, имеющей степень один, получаем (ориентировав ребро соответствующим образом) условие $A + B = 0$, из которого выражаем B через A и подставляем в (1.11). Отсюда следует, что решение можно записать в следующей форме:

$$\psi = 2Ai \frac{1}{(\lambda - V(x))^{1/4}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right). \quad (1.12)$$

Соответствующие значения в конце ребра (при правильной ориентации) для решения $2iA_j \sin \phi_j$ и его производной (после сокращения): $2A_j \cos \phi_j$.

Мы получили линейную однородную систему на коэффициенты A_j и B_j . Условие того, что у этой системы есть нетривиальное решение (равенство нулю определителя), и есть способ найти правила квантования.

Осталось разобрать два простых случая, которые были упомянуты в конце четвертого шага алгоритма.

Эти два графа отнесены к особым, так как у них нет внутренних вершин, в которых можно записывать уравнения в соответствии с алгоритмом.

Первый случай. Граф устроен так: две точки a и b соединены одним отрезком. Рассмотрим спектральную задачу.

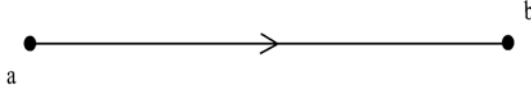


Рис. 1.2. Один отрезок и две обычные вершины.

Не повторяясь, сразу выпишем, какие условия наложены на функцию:

$$\begin{aligned}\psi(a) &= 0 \\ \psi(b) &= 0.\end{aligned}\tag{1.13}$$

Тогда система для определения A и B выглядит так:

$$\begin{aligned}A + B &= 0, \\ A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) + B \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) &= 0.\end{aligned}\tag{1.14}$$

Получаем, что для того, чтобы эта линейная однородная система имела ненулевые решения, нужно, чтобы

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) = 0.\tag{1.15}$$

То есть:

$$\frac{1}{\hbar\pi} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy = k, \quad k \in \mathbb{Z}.\tag{1.16}$$

Второй случай. Вершины снова две, но одна из них — λ -вершина. (Этот случай может быть получен из более сложного графа после второго шага алгоритма.) Ориентируем ребро из “старой” вершины в λ -вершину.

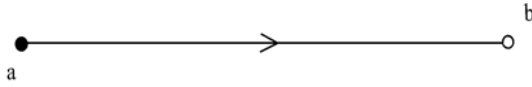


Рис. 1.3. Один отрезок и одна точка поворота.

Решение имеет вид (1.8). В вершине исходного графа оно должно быть равно нулю. Получаем условие:

$$\cos \left(\frac{1}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy - \frac{\pi}{4} \right) = 0. \quad (1.17)$$

Окончательно имеем

$$\frac{1}{h\pi} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy = \frac{3}{4} + k, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (1.18)$$

1.5. Примеры.

Здесь приведен ряд примеров. Обозначение ϕ_j было введено на четвертом шаге алгоритма. Напомним, что $\phi_j = \frac{1}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V_j(y)} dy$ — интеграл берется по ребру.

1.5.1. Случай двух точек, соединенных двумя отрезками.

Возьмем следующий граф: две точки a и b , соединенные двумя отрезками. Пусть, сначала, везде $\lambda < \min V(x)$.

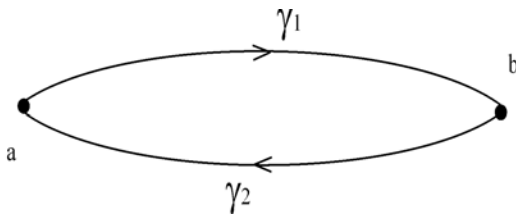


Рис. 1.4. Две обычные вершины соединены двумя отрезками.

Правило квантования имеет вид

$$\begin{aligned} & \cos(\phi_1 + \phi_2)(\alpha_1 - \alpha_2)(\beta_1 - \beta_2) - \cos(\phi_1 - \phi_2)(\alpha_1 + \alpha_2)(\beta_1 + \beta_2) + \\ & + 2(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1) = 0. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Здесь α_j обозначают коэффициенты в условиях трансмиссии в вершине a , а β_j , соответственно, в вершине b .

Рассмотрим частный случай, когда $\alpha_1 = -\alpha_2$ или $\beta_1 = -\beta_2$. Получаем, что тогда условие квантования имеет вид $\cos(\phi_1 + \phi_2) = 1$, то есть

$$\frac{1}{2h\pi} \left(\int_a^b \sqrt{\lambda - V_1(y_1)} dy_1 \right) + \frac{1}{2h\pi} \left(\int_a^b \sqrt{\lambda - V_2(y_2)} dy_2 \right) = k, k \in \mathbb{Z}. \quad (1.20)$$

1.5.2. Дерево с двумя λ -вершинами.

Если мы откажемся от условия $\lambda < \min_{[a,b]} V(x)$, то на ребрах рассмотренного выше графа могут появиться λ -вершины.

Если по одной λ -вершине появляется на каждом из ребер исходного графа на втором шаге алгоритма, то получаем объект, изображенный на рисунке 1.5.

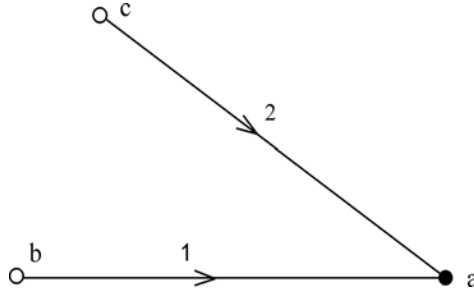


Рис. 1.5. Две новые вершины и одна старая.

Условия квантования имеют вид

$$\alpha_1 \sin\left(\phi_1 - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\phi_2 - \frac{\pi}{4}\right) + \alpha_2 \sin\left(\phi_2 - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\phi_1 - \frac{\pi}{4}\right) = 0.$$

Рассмотрим частный случай $\alpha_1 = \alpha_2$, соответствующий склеиванию из двух отрезков одного. Получаем

$$\frac{1}{h\pi} \int_b^a \sqrt{\lambda - V(y_1)} dy_1 + \frac{1}{h\pi} \int_c^a \sqrt{\lambda - V(y_2)} dy_2 = \frac{1}{2} + n, n \in \mathbb{Z}.$$

Это условие в точности совпадает с правилом Бора-Зоммерфельда для случая решения, заключенного между двумя точками поворота.

1.5.3. Граф $K_{1,3}$.

Рассмотрим звездный граф $K_{1,3}$ все вершины которого, кроме центральной, являются точками поворота (см. рис. 1.6).

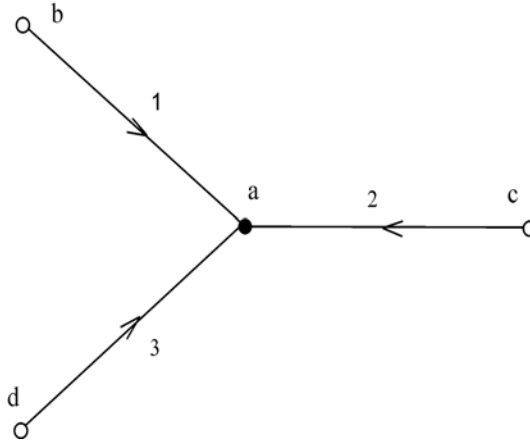


Рис. 1.6. $K_{1,3}$ с тремя λ -вершинами.

Правило квантования для этого графа:

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_1 - \alpha_3 - \alpha_2) \sin \left(\frac{\pi}{4} + \phi_1 - \phi_2 - \phi_3 \right) + \\
 & + (\alpha_3 - \alpha_1 + \alpha_2) \cos \left(\frac{\pi}{4} + \phi_1 + \phi_2 - \phi_3 \right) + \\
 & + (\alpha_2 - \alpha_1 - \alpha_3) \cos \left(\frac{\pi}{4} + \phi_1 + \phi_3 - \phi_2 \right) - \\
 & - \sin \left(\frac{\pi}{4} + \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 \right) (\alpha_1 + \alpha_3 + \alpha_2) = 0.
 \end{aligned} \tag{1.21}$$

Теперь рассмотрим $K_{1,3}$, у которого имеется только одна λ -вершина (см. рис.1.7).

Правило квантования:

$$\begin{aligned}
 & \alpha_1 \cos \phi_1 \sin \phi_2 \sin \left(\phi_3 + \frac{\pi}{4} \right) + \alpha_3 \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \left(\phi_3 + \frac{\pi}{4} \right) + \\
 & + \alpha_2 \sin \phi_1 \sin \left(\phi_3 + \frac{\pi}{4} \right) \cos \phi_2 = 0.
 \end{aligned} \tag{1.22}$$

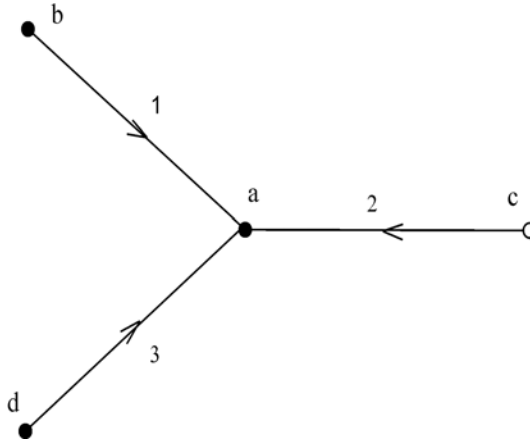


Рис. 1.7. $K_{1,3}$ с одной λ -вершиной.

1.6. Асимптотические собственные значения, соответствующие собственным функциям, локализованным в вершине графа.

Ранее мы рассматривали ту часть спектра, которой соответствуют собственные функции, осциллирующие на ребрах. Теперь перейдем к собственным значениям, соответствующим функциям, локализованным в одной точке и имеющим вид: $V(a) + O(h)$. Случай, когда решение сконцентрировано на ребре, не представляет для нас интереса, т.к. полностью описан, например, в [11]. Если решение локализовано в вершине графа, то верна следующая теорема.

Теорема 1.3. Пусть для потенциала $V(x)$ в точке a выполнены следующие условия:

- 1) значения первых односторонних производных $V_j'(a)$ для каждого ребра равны нулю,
- 2) значения вторых односторонних производных $V_j''(a)$ совпадают и положительны.

Тогда существует асимптотическое собственное число

$$E = V(a) + \sqrt{\frac{V''(a)}{2}} h + O(h^{3/2}).$$

Другими словами, существует непрерывная на графе и гладкая на ребрах функция $\xi(x)$ такая, что $\hat{H}\xi(x) = E\xi(x) + O(h^{3/2})$. Если рассматриваемый оператор является самосопряженным, то построенное E приближает точное собственное значение μ (расстояние между ними есть величина порядка $O(h^{3/2})$).

Этот вариант осцилляторного приближения не учитывает глобальную структуру графа.

Замечание. Старшая часть асимптотической собственной функции при выполнении условий Теоремы 1.3 имеет вид $\exp(S/h)c_0$ и не зависит, как и асимптотическое собственное значение с точностью до $O(h^{3/2})$, от коэффициентов в условии трансмиссии. Но на следующие поправки это условие уже влияет. В частности, для получения приближения порядка $O(h^{5/2})$ для собственных чисел нужно, дополнительно к условиям теоремы, потребовать, чтобы значения односторонних третьих производных $V_j'''(a)$ совпадали по модулю, а их знаки удовлетворяли условию $\sum_j \alpha_j \operatorname{sgn}(V_j'''(a)) = 0$.

Доказательство. Следуя идеям, изложенным в [10], будем искать решение спектральной задачи на каждом ребре в виде

$$\psi^j = \exp\left(\frac{iS^j}{h}\right) (\varphi_0^j + \varphi_1^j h + \varphi_2^j h^2 + O(h^{5/2})), \quad (1.23)$$

$$E = E_0 + E_1 h + E_2 h^2 + O(h^{5/2}). \quad (1.24)$$

Рассмотрим спектральную задачу на каждом ребре отдельно. Приравнявая слагаемые при одинаковых степенях h , получим уравнение на S (которое называется уравнением Гамильтона-Якоби и соответствует h^0) и уравнение на φ_m^j (уравнение переноса). Будем искать их решения в окрестности точки a в виде отрезков ряда Тейлора. Для этого возьмем функцию S^j в виде

$$S^j = S_2^j(x-a)^2 + S_3^j(x-a)^3 + S_4^j(x-a)^4 + O((x-a)^5). \quad (1.25)$$

Функции φ_k^j разложим в ряд до членов порядка $O((x-a)^3)$:

$\varphi_0^j = c_0^j + c_1^j(x-a) + c_2^j(x-a)^2 + O((x-a)^3)$, $\varphi_1^j = d_0^j + d_1^j(x-a) + d_2^j(x-a)^2 + O((x-a)^3)$. Функцию $V(x)$, ограниченную на ребро, запишем так: $V^j(x) = V_0^j + V_1^j(x-a) + V_2^j(x-a)^2 + V_3^j(x-a)^3 + O((x-a)^4)$.

Воспользуемся тем, что $(x-a)^m \exp((x-a)/h) = O(h^{m/2})$.

Приравнявая слагаемые одного порядка малости, получим систему алгебраических уравнений. А именно:

При h^0 : $V_0^j c_0^j = E_0 c_0^j$. Для порядка $h^{1/2}$: $(x-a)(V_0^j c_1^j + V_1^j c_0^j) = E_0 c_1^j(x-a)$. Для порядка h^1 : $4(S_2^j)^2(x-a)^2 c_0^j - 2iS_2^j c_0^j + V_0^j c_2(x-a)^2 + d_0^j V_0^j + V_1^j c_1^j(x-a)^2 + V_2^j(x-a)^2 c_0^j = E_0 c_2(x-a)^2 + E_1 c_0^j + E_0 d_0^j$.

Решая ее (на каждом ребре отдельно), находим, что $E_0 = V^j(a)$, $V_1^j = (V^j)'(a) = 0$. Далее $4S_2^{j^2} + V_2^j = 0$, $E_1 = -2iS_2^j$. Следовательно, $E_1 = \sqrt{V_2^j}$. Уравнение для слагаемых порядка $h^{3/2}$ даст, после необходимых сокращений: $12S_2^j S_3^j + V_3^j = 0$, $2S_2^j c_1^j + 3S_3^j c_0^j = 0$.

Отсюда получаем, что система разрешима, если значения первых односторонних производных (при подходе по каждому ребру) от потенциала в вершине равны нулю, а значения вторых односторонних производных положительны (это следует из того, что ψ должна быстро убывать с удалением от точки) и совпадают.

Теперь рассмотрим условия трансмиссии и условие непрерывности решения в вершине. Подставляя вид ψ в условия непрерывности, получим, что значения $\varphi_0^j(a)$ должны совпадать. Условие трансмиссии, взятое с точностью до $O(h^2)$, запишется в виде: $\sum \alpha^j c_1^j = 0$ и $\sum \alpha^j d_1^j = 0$ и тем самым влияет только на поправку порядка $h^{1/2}$ к собственной функции.

1.7. Описание ядер для случая нулевого потенциала.

Рассмотрим оператор Лапласа (оператор Шредингера с нулевым потенциалом) на графе.

Для компактных гладких многообразий без края хорошо известна связь ядра оператора Лапласа, действующего на k -формах, с топологическими характеристиками многообразия (см., например, книгу [18] и ссылки в ней).

Естественно возникает вопрос: справедливы ли аналогичные свойства для стратифицированных множеств, в частности, для геометрических графов? На него дают ответ приведенные ниже утверждения. Граф компактен. Функции предполагаются непрерывными.

В дальнейшем тексте предполагается, что условия трансмиссии имеют вид условий Кирхгофа.

Утверждение 2 *Размерность ядра оператора Лапласа, действующего на 0 -формах, определенных на геометрическом графе, равна числу связных компонент графа, не содержащих висячих вершин (то есть, не имеющих края).*

Доказательство. Это утверждение непосредственно следует из результатов, изложенных в [15]. Следствие 2 Теоремы 3.1 (стр. 61) утверждает,

что если $u(x)$ — гармоническая функция без нулей в Γ , то для любой другой гармонической на Γ функции $w(x)$, неколлинеарной $u(x)$, отношение $w(x)/u(x)$ не может иметь внутри Γ ни глобальных максимумов, ни глобальных минимумов. Рассмотрим одну связную компоненту графа и возьмем в качестве $u(x)$ константу. Предположим, что существует гармоническая функция не коллинеарная $u(x)$, и придем к противоречию. Таким образом, на каждой связной компоненте гармоническая функция может быть только константой. Если висячих вершин нет, то эту постоянную можно выбирать произвольным образом. Если же в какой-то связной компоненте есть висячая вершина, то из-за наличия в ней условия Дирихле, константа будет нулевой.

Отметим, что условия трансмиссии не обязательно должны иметь вид условий Кирхгофа. Приведем простой пример, который показывает, что размерность ядра и в том случае, когда знаки коэффициентов не согласованы с ориентацией, равна единице (для связного графа) почти для всех значений коэффициентов. Рассмотрим следующий граф: две точки a и b , соединенные двумя отрезками (см. рисунок 1.4). В ядре лежат функции, непрерывные на всем Γ и линейные на каждом из ребер. Нетрудно показать, что для всех α_j (коэффициенты в вершине a) и β_j (коэффициенты в вершине b), для которых не выполнены соотношения: $\alpha_1 l_2 = \alpha_2 l_1$, $\beta_2 l_1 = \beta_1 l_2$ (l_i — длины отрезков), ядро будет одномерным. В противном случае его размерность будет равна двум.

Нужно отметить, что утверждение, аналогичное Утверждению 2, было получено в недавно вышедшей работе [30] для случая натуральных условий трансмиссии.

Перейдем к рассмотрению 1-форм на геометрических графах. Будем рассматривать только графы без висячих вершин.

Определение. На каждом ребре рассмотрим выражение вида $f_j(x)dx$, и пусть в вершинах будет выполнено условие

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a)} \sigma(\gamma_j, a) f_j(a) = 0, \quad (1.26)$$

где $\sigma(\gamma_j, a) = 1$, если ребро входит в вершину, и $\sigma(\gamma_j, a) = -1$, если выходит. Такую совокупность будем называть 1-формой на графе.

Теперь определим лапласиан на 1-формах. Оператор Лапласа действует на 1-формы, для которых $f_j(x)$ — гладкие функции на ребрах, удовлетворяющие краевым условиям

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a)} \sigma(\gamma_j, a) f_j'(a) = 0, \quad (1.27)$$

здесь $\sigma(\gamma_j, a) = 1$, если ребро входит в вершину, и $\sigma(\gamma_j, a) = -1$, если выходит. На каждом ребре оператор задается соотношением $\Delta = dd^* + d^*d$ (см. [18]).

Отметим, что на каждом ребре оператор Лапласа форме $f_j(x)dx$ сопоставляет форму $-f_j''(x)dx$. Действительно, слагаемое d^*d обращается в ноль, так как $d(f_j(x)dx) = 0$. Рассмотрим первое слагаемое $d^* = - * d *$. Справедливы следующие соотношения: $*(f_j(x)dx) = f_j(x)$, $d(f_j(x)) = f_j'(x)dx$, $*(f_j'(x)dx) = f_j'(x)$, $d(-f_j'(x)) = -f_j''(x)dx$.

Утверждение 3 *Для оператора Лапласа с натуральными условиями трансмиссии, на графе без висячих вершин, размерность ядра, при действии на 1-формы, равна первому числу Бетти.*

Доказательство. На каждом ребре 1-форма, которая лежит в ядре, имеет вид $(c_j x + b_j)dx$. Условия трансмиссии в определении оператора совпадают с условиями трансмиссии для случая функции на графе. Они определяют c_j . Повторяя рассуждения, приведенные в доказательстве Утверждения 2 для случая функций, получим, что все c_j равны нулю. Связь между b_j найдем из краевых условий, входящих в определение 1-формы. Выписываем систему линейных алгебраических уравнений для определения постоянных. Из того, что краевые условия имеют указанный вид, непосредственно следует, что матрица системы будет совпадать с матрицей инцидентности графа. Воспользуемся широко известным фактом, что ранг в этом случае равен числу вершин минус число связных компонент графа (см. [9]), то есть $M - P$. Следовательно, размерность пространства решений будет равна числу ребер минус число вершин и плюс число связных компонент $(N - (V - P))$. Отсюда и из определения числа Бетти непосредственно следует утверждение.

2. Квазиклассическая асимптотика и статистические свойства гауссовых пучков для нестационарного уравнения Шредингера на геометрическом графе.

2.1. Вводные замечания.

В настоящей главе изучаются свойства уравнения в частных производных (нестационарного уравнения Шредингера), пространственная переменная в котором меняется на геометрическом графе. Основной эффект “разветвления” пространства состоит в многократном отражении от вершин графа, что приводит к появлению нетривиальных статистических явлений. Особенно ясно такие свойства видны при описании гауссовых пакетов (изначально локализованных вблизи одной точки); мы строим соответствующие решения при помощи простейшего варианта комплексного ростка Маслова [11].

В первой части главы мы описываем распространение квантовых пакетов на произвольном геометрическом графе и разбираем ряд примеров. Вторая часть посвящена вопросам, касающимся статистики распространения таких пакетов. Эта задача оказалась связана с известной теоретико-числовой задачей о подсчете количества целых точек, попадающих в расширяющийся симплекс.

Нужно отметить близость изучаемых вопросов к некоторым краевым задачам для гиперболических уравнений на сетях. Интересные результаты в этой области были получены в работах [5], [17], [16], [4].

2.2. Распространение квантовых пакетов на геометрическом графе.

Рассмотрим геометрический граф (см. первую главу) с конечным числом ребер и вершин. Допускаются ребра бесконечной длины, а также петли и кратные ребра. Оператор Шредингера на графе определим стандартным образом (см. первую главу). В вершинах степени один (висячих вершинах) выполнено условие Дирихле.

2.2.1. Комплексный росток Маслова на прямой.

Напомним сперва известную схему построения квазиклассических гауссовых пакетов на прямой. Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера

$$-h^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) = ih \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

где V — гладкая функция (потенциал). Соответствующий гамильтониан имеет вид $H = p^2 + V(x, t)$ (см. [10]).

Начальные условия выберем в виде узкого пакета, локализованного при $h \rightarrow 0$ вблизи точки x_0 :

$$\psi(x, 0) = K \exp \left(\frac{i(a(x - x_0)^2 + b(x - x_0) + c)}{h} \right). \quad (2.2)$$

Здесь b и c — вещественные константы, а мнимая часть a больше нуля. K имеет вид $K = h^{-1/4} K_1$, $K_1 \in \mathbb{R}$. Нормировочный множитель $h^{-1/4}$ введен для того, чтобы гарантировать $\psi(x, 0) = O(1)$ в норме пространства L^2 .

Утверждение 4 (см. [11].) *Функция*

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & K \exp \left(- \int_0^t \frac{p_l(t)}{q_l(t)} dt \right) \\ & \cdot \exp \left(\frac{i(S_0(t) + S_1(t)(x - X(t)) + S_2(t)(x - X(t))^2)}{h} \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

является решением уравнения

$$\widehat{H} \psi(x, t) = ih \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + O(h^{3/2}).$$

Если стоящий в левой части оператор \widehat{H} является самосопряженным (см. первую главу), то это решение отличается от точного решения нестационарного уравнения Шредингера не более, чем на $O(h^{1/2})$.

Здесь

$$S_0(t) = c + \int_0^t ((P(t))^2 - V_0(t)) dt, \quad (2.4)$$

$$S_1(t) = b - \int_0^t V_1(t) dt = b + \int_0^t P(t) dt, \quad (2.5)$$

$$S_2(t) = \frac{p_l(t)}{2q_l(t)}. \quad (2.6)$$

$X(t)$, $P(t)$ — решения системы Гамильтона

$$\begin{aligned}\dot{X}(t) &= H'_p(X(t), P(t)) \\ \dot{P}(t) &= -H'_x(X(t), P(t)),\end{aligned}\tag{2.7}$$

с начальными данными: $X(0) = x_0$, $P(0) = b$. А $q_l(t)$, $p_l(t)$ — решения линеаризованной системы

$$\begin{aligned}\dot{q}_l &= 2p_l \\ \dot{p}_l &= -\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} q_l.\end{aligned}\tag{2.8}$$

Начальные данные для нее можно взять в виде: $q_l(0) = 1$, $p_l(0) = 2a$.

В дальнейшем изучается отражение пакетов описанного вида. Всюду для простоты предполагается отсутствие на графе точек поворота (см. [11]); их наличие может быть учтено стандартным образом.

2.2.2. Гауссовы пакеты на полупрямой.

Начнем с простейшего примера: пусть в графе имеется единственная вершина O и только одно ребро (бесконечной длины). Результаты этого пункта понадобятся нам в дальнейшем при рассмотрении произвольного графа.

Будем считать, что вершина соответствует $x = 0$. Потребуем выполнения в ней условия Дирихле: $\psi(0, t) = 0$.

Конфигурационное пространство представляет собой полуплоскость (\mathbb{R}_- для координаты x и \mathbb{R} для t). Соответствующие сопряженные координаты назовем p и E .

Решение будем искать в виде суммы падающей и отраженной волн:

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{iS^1(x, t)}{h}\right) \varphi_0^1(x, t) + \exp\left(\frac{iS^2(x, t)}{h}\right) \varphi_0^2(x, t) + O(h^{1/2}).\tag{2.9}$$

Повторяя выкладки, приведенные в [11], мы получим для каждой из функций уравнения Гамильтона-Якоби и переноса, решения которых выписываются стандартным образом. Для нахождения S^1 и φ^1 снова поставим начальные условия, а для S^2 и φ^2 — краевые.

К системе Гамильтона добавятся два уравнения: $\dot{t} = 1$ и $\dot{E} = 0$.

Начальные условия имеют вид: $X^1(0) = x_0$, $P^1(0) = b$, $t^1 = \tau$ (и $\tau=0$), $E^1 = -H(x_0, b)$, $q_l^1(0) = 1$, $p_l^1(0) = 2a$, $S_0^1(0) = c$, $S_1^1(0) = b$, $C = K$.

А краевые, соответственно: $X^{(2)}(\beta) = 0$, $P^{(2)}(\beta) = -P^1(\beta)$, $t^{(2)} = \tau + \beta$ (и $\tau=0$), $E^{(2)} = -H(0, -P^1(\beta))$, $q_l^{(2)}(\beta) = q_l^1(\beta)$, $p_l^{(2)}(\beta) = p_l^1(\beta)$, $S_0^{(2)}(\beta) = S_0^1(\beta)$, $S_1^{(2)}(\beta) = -S_1^1(\beta)$, $C = K$.

Здесь β — момент отражения, то есть время, за которое гауссов пакет доходит до вершины полупрямой. Функции S^1 и φ^1 описаны в Утверждении 4. Опишем теперь $S^{(2)}$ и $\varphi^{(2)}$.

Утверждение 5 *Выражение (2.9) является решением уравнения*

$$\widehat{H}\psi(x, t) = ih\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} + O(h^{3/2}).$$

Если стоящий в левой части оператор \widehat{H} является самосопряженным, то это решение отличается от точного решения нестационарного уравнения Шредингера не более, чем на $O(h^{1/2})$.

Первое слагаемое описано в Утверждении 4, а второе имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & K \exp \left(- \int_0^\beta \frac{p_l^{(1)}(t)}{q_l^{(1)}(t)} dt - \int_\beta^t \frac{p_l^{(2)}(t)}{q_l^{(2)}(t)} dt \right) \cdot \\ & \cdot \exp \left(\frac{i(S_0^{(2)}(t) + S_1^{(2)}(t)(x - X(t)) + S_2^{(2)}(t)(x - X(t))^2)}{h} \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Здесь

$$S_0^{(2)}(t) = S_0^1(\beta) + \int_\beta^t ((P^{(2)}(t))^2 - V_0(t)) dt, \quad (2.11)$$

$$S_1^{(2)}(t) = -S_1^1(\beta) - \int_\beta^t V_1(t) dt = b + \int_\beta^t P^{(2)}(t) dt, \quad (2.12)$$

$$S_2^{(2)}(t) = \frac{p_l^{(2)}(t)}{2q_l^{(2)}(t)}. \quad (2.13)$$

$X^{(2)}(t)$, $P^{(2)}(t)$ — решения гамильтоновой системы

$$\begin{aligned} \dot{X}^{(2)}(t) &= H'_p(X^{(2)}(t), P^{(2)}(t)) \\ \dot{P}^{(2)}(t) &= -H'_x(X^{(2)}(t), P^{(2)}(t)) \\ \dot{t}^{(2)} &= 1, \\ \dot{E}^{(2)} &= 0, \end{aligned} \quad (2.14)$$

с краевыми условиями: $X^{(2)}(\beta) = 0$, $P^{(2)}(\beta) = -P^1(\beta)$, $t^{(2)} = \tau + \beta$, $E^{(2)} = -H(0, -P^1(\beta))$. А $q_l^{(2)}(t)$, $p_l^{(2)}(t)$ — решения линеаризованной системы (2.8). Начальные данные для нее можно взять в виде: $q_l^{(2)}(\beta) = q_l^1(\beta)$, $p_l^{(2)}(\beta) = p_l^1(\beta)$,

$$C = K \exp \left(- \int_0^\beta \frac{p_l^{(2)}(t)}{q_l^{(2)}(t)} dt \right).$$

Доказательство. Формулы для решений получаем из Утверждения 4. Кроме того, нужно проверить, что при $0 < t < \beta$ экспоненциально мало второе слагаемое, а при $t > \beta$ — первое.

На траектории выполнено: $P^2(t) + V(X(t)) = E$. Отсюда получаем, что $P(t)$, при отсутствии точек поворота, может быть только или отрицательным или положительным. Отсюда, в силу уравнений Гамильтона, $\dot{X}(t) > 0$ для первого слагаемого в (2.9) и $\dot{X}(t) < 0$ для второго. Применим теорему Лагранжа к функции $X(t)$ на отрезке от произвольного t до $t = \beta$: $X(t) = \dot{X}(\xi)(t - \beta)$. Отсюда получаем, что $X^{(1)}(t) > 0$ при $t > \beta$ и $X^{(2)}(t) > 0$ при $t < \beta$. За счет того, что условие диссипативности ($ImS > 0$) сохраняется под действием гамильтонова потока (см. [11]), получаем, что до $t = \beta$ асимптотическое решение задается первым слагаемым, а после — вторым (напомним, что конфигурационное пространство определено неравенством $x < 0$).

Это доказывает корректность постановки начальных условий только для первого слагаемого.

Тот факт, что $q_l(t)$ не обращается в ноль, следует из диссипативности ростка (то есть, из того факта, что $Im(S_2)$ сохраняет знак). Докажем это.

$$Im(S_2(t)) = \frac{1}{2} Im \left(\frac{p_l(t)}{q_l(t)} \right) = Im \left(\frac{1}{|q_l(t)|^2} p_l \bar{q}_l \right) = \frac{1}{4i|q_l(t)|^2} (p_l \bar{q}_l - q_l \bar{p}_l). \quad (2.15)$$

Отсюда получаем, что знак $Im(S_2(t))$ определяется выражением $\langle q_l, p_l \rangle = (p_l \bar{q}_l - q_l \bar{p}_l)$. Покажем, что эта величина не зависит от t . Для этого найдем производную от $\langle q_l, p_l \rangle$ и убедимся, что, в силу линеаризованной системы Гамильтона, она равна нулю. Таким образом, эта величина не меняется при изменении t , а в начальный момент времени не равна нулю, так как $Im(S_2(0)) = Im(a) > 0$.

Теперь, если предположить, что $q_l = 0$, получим $\langle q_l, p_l \rangle = 0$, а это противоречит диссипативности.

2.2.3. Случай двух бесконечных лучей, сходящихся в одной точке.

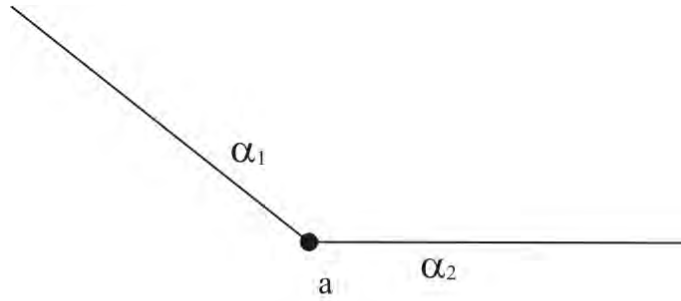


Рис. 2.1

На том ребре, на котором заданы начальные данные, будем искать решение в виде

$$u^{(\gamma_1)}(x, t) = \exp\left(\frac{iS^{(1)}(x, t)}{h}\right) \varphi_0^{(1)}(t) + \exp\left(\frac{iS^{(2)}(x, t)}{h}\right) \varphi_0^{(2)}(t) + O(h^{1/2}). \quad (2.16)$$

На другом — в виде

$$\psi(x, t) = u^{(\gamma_2)}(x, t) = \exp\left(\frac{iS^{(3)}(x, t)}{h}\right) \varphi_0^{(3)}(t) + O(h^{1/2}). \quad (2.17)$$

Здесь через $u^{(\gamma_j)}(x, t)$ мы обозначили решение, ограниченное на j -тое ребро. Введем обозначение $\psi^{(k,j)}(x, t) = \exp\left(\frac{iS^{(k,j)}(x, t)}{h}\right) \varphi_0^{(k,j)}(t)$, где k — номер ребра, а j — номер квантового пакета на ребре.

Дополним уравнение Шредингера условиями непрерывности решения на всем графе $u^{(\gamma_1)}(0, t) = u^{(\gamma_2)}(0, t)$ и условиями трансмиссии, которые в общем случае имеют вид

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a)} \alpha_j \frac{\partial u^{(\gamma_j)}}{\partial x}(0, \beta) = 0, \quad (2.18)$$

а в рассматриваемой ситуации выглядят так:

$$\alpha_1 \frac{\partial u^{(\gamma_1)}}{\partial x}(0, \beta) + \alpha_2 \frac{\partial u^{(\gamma_2)}}{\partial x}(0, \beta) = 0. \quad (2.19)$$

Используя наши обозначения, получим $u^{(\gamma_1)}(x, t) = \psi^{(1,1)}(x, t) + \psi^{(1,2)}(x, t)$, а $u^{(\gamma_2)}(x, t) = \psi^{(2,1)}(x, t)$.

Условия запишутся в виде

$$\psi^{(1,1)}(x, t) + \psi^{(1,2)}(x, t) = \psi^{(2,1)}(x, t), \quad (2.20)$$

$$\alpha_1 \left(\frac{\partial \psi^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta) + \frac{\partial \psi^{(1,2)}}{\partial x}(0, \beta) \right) + \alpha_2 \frac{\partial \psi^{(2,1)}}{\partial x}(0, \beta) = 0. \quad (2.21)$$

Учтем тот факт, что

$$\frac{\partial S^{(1,2)}}{\partial x}(0, \beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta),$$

$$\frac{\partial S^{(2,1)}}{\partial x}(0, \beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta).$$

Из (2.20) следует, что $S_0^{(1,1)}(0, \beta) = S_0^{(1,2)}(0, \beta) = S_0^{(2,1)}(0, \beta)$. Кроме того, $\varphi_0^{(1,1)}(\beta) + \varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \varphi_0^{(2,1)}(\beta)$.

Тогда из (2.21) получаем

$$\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta) \left(\alpha_1 \varphi_0^{(1,1)}(\beta) - \alpha_1 \varphi_0^{(1,2)}(\beta) - \alpha_2 \varphi_0^{(2,1)}(\beta) \right) = 0. \quad (2.22)$$

Условие отсутствия точек поворота приводит к тому, что $\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x} \neq 0$. И, следовательно,

$$\alpha_1 \varphi_0^{(1,1)}(\beta) - \alpha_1 \varphi_0^{(1,2)}(\beta) - \alpha_2 \varphi_0^{(1,1)}(\beta) + \varphi_0^{(1,2)}(\beta) = 0. \quad (2.23)$$

В итоге, получаем для амплитуды отраженного квантового пакета выражение

$$\varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \varphi_0^{(1,1)}(\beta), \quad (2.24)$$

а для амплитуды прошедшего квантового пакета выражение:

$$\varphi_0^{(2,1)}(\beta) = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \varphi_0^{(1,1)}(\beta). \quad (2.25)$$

Начальные данные полностью определяют $\psi^{(1,1)} = \exp\left(\frac{iS^{(1,1)}(x,t)}{h}\right) \varphi_0^{(1,1)}(x, t)$.

Таким образом, доказано

Утверждение 6 *Главный член асимптотического решения задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера на геометрическом графе с начальными условиями (2.2), условиями непрерывности и условиями трансмиссии (2.19), состоящем из двух бесконечных ребер, соединенных в одной вершине, имеет вид (2.16), (2.17).*

Слагаемое $\psi^{(1,1)}$ вычисляется по начальным условиям.

Слагаемое $\psi^{(1,2)}$ имеет вид

$$\psi^{(1,2)}(x, t) = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} K \exp \left(- \int_0^\beta \frac{p_l^{(1,1)}(t)}{q_l^{(1,1)}(t)} dt - \int_\beta^t \frac{p_l^{(1,2)}(t)}{q_l^{(1,2)}(t)} dt \right) \cdot \exp \left(\frac{i(S_0^{(1,2)}(t) + S_1^{(1,2)}(t)(x - X(t)) + S_2^{(1,2)}(t)(x - X(t))^2)}{h} \right). \quad (2.26)$$

Здесь

$$S_0^{(1,2)}(t) = S_0^{1,1}(\beta) + \int_\beta^t ((P^{(1,2)}(t))^2 - V_0(t)) dt, \quad (2.27)$$

$$S_1^{(1,2)}(t) = -S_1^{(1,1)}(\beta) - \int_\beta^t V_1(t) dt = b + \int_\beta^t P^{(1,2)}(t) dt, \quad (2.28)$$

$$S_2^{(1,2)}(t) = \frac{p_l^{(1,2)}(t)}{2q_l^{(1,2)}(t)}. \quad (2.29)$$

$X^{(1,2)}(t)$, $P^{(1,2)}(t)$ — решения системы Гамильтона

$$\begin{aligned} X^{\dot{(1,2)}}(t) &= H'_p(X^{(1,2)}(t), P^{(1,2)}(t)) \\ P^{\dot{(1,2)}}(t) &= -H'_x(X^{(1,2)}(t), P^{(1,2)}(t)) \\ t^{\dot{(1,2)}} &= 1, \\ E^{\dot{(1,2)}} &= 0. \end{aligned} \quad (2.30)$$

с краевыми условиями: $X^{(1,2)}(\beta) = 0$, $P^{(1,2)}(\beta) = -P^{(1,1)}(\beta)$, $t^{(1,2)} = \tau + \beta$, $E^{(1,2)} = -H(0, -P^{(1,2)}(\beta))$, $q_l^{(1,2)}(t)$. А $p_l^{(1,2)}(t)$ — решения линеаризованной системы (2.8). Начальные данные для нее можно взять в виде: $q_l^{(1,2)}(\beta) = q_l^{(1,1)}(\beta)$, $p_l^{(1,2)}(\beta) = p_l^{(1,1)}(\beta)$.

Слагаемое $\psi^{(2,1)}$ (“прошедший” квантовый пакет) имеет вид

$$\psi^{(2,1)}(x, t) = \frac{2\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} K \exp \left(- \int_0^\beta \frac{p_l^{(1,1)}(t)}{q_l^{(1,1)}(t)} dt - \int_\beta^t \frac{p_l^{(2,1)}(t)}{q_l^{(2,1)}(t)} dt \right) \cdot \exp \left(\frac{i(S_0^{(2,1)}(t) + S_1^{(2,1)}(t)(x - X(t)) + S_2^{(2,1)}(t)(x - X(t))^2)}{h} \right). \quad (2.31)$$

Здесь

$$S_0^{(2,1)}(t) = S_0^{1,1}(\beta) + \int_\beta^t ((P^{(2,1)}(t))^2 - V_0(t)) dt, \quad (2.32)$$

$$S_1^{(2,1)}(t) = -S_1^{1,1}(\beta) - \int_\beta^t V_1(t) dt = b + \int_\beta^t P^{(2,1)}(t) dt, \quad (2.33)$$

$$S_2^{(2,1)}(t) = \frac{p_l^{(2,1)}(t)}{2q_l^{(2,1)}(t)}. \quad (2.34)$$

$X^{(2,1)}(t)$, $P^{(2,1)}(t)$ — решения системы Гамильтона с краевыми условиями: $X^{(2,1)}(\beta) = 0$, $P^{(2,1)}(\beta) = -P^{(1,1)}(\beta)$, $t^{(2,1)} = \tau + \beta$, $E^{(2,1)} = -H(0, -P^{(2,1)}(\beta))$. А $q_l^{(2,1)}(t)$, $p_l^{(2,1)}(t)$ — решения линеаризованной системы (2.8). Начальные данные для нее можно взять в виде: $q_l^{(2,1)}(\beta) = q_l^{(1,1)}(\beta)$, $p_l^{(2,1)}(\beta) = p_l^{(1,1)}(\beta)$.

Замечание. Амплитуды прошедшего и отраженного пакетов определяются коэффициентами α_1, α_2 в условиях трансмиссии. Отметим, что оператор Шредингера самосопряжен, если $\alpha_1 = \alpha_2$; в этом случае коэффициент отражения нулевой, и пакет просто переходит с одного ребра графа на другое, не чувствуя вершины.

2.2.4. Случай трех бесконечных лучей, сходящихся в одной точке.

Аналогично предыдущему случаю (и используя полученные там формулы), рассмотрим граф, получаемый при соединении в одной точке трех лучей.

На том ребре, на котором заданы начальные данные, будем искать решение в виде

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \exp \left(\frac{iS^{(1,1)}(x, t)}{h} \right) \varphi_0^{(1,1)}(t) + \\ & + \exp \left(\frac{iS^{(1,2)}(x, t)}{h} \right) \varphi_0^{(1,2)}(t) + O(h^{1/2}). \end{aligned} \quad (2.35)$$

На двух остальных — в виде

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{iS^{(k,1)}(x, t)}{h}\right) \varphi_0^{(k,1)}(t) + O(h^{1/2}), \quad (2.36)$$

$k = 2, 3$.

Начальные данные полностью определяют $\psi^{(1,1)} = \exp\left(\frac{iS^{(1,1)}(x, t)}{h}\right) \varphi_0^{(1,1)}(t)$.

$$u^{(\gamma_1)}(x, t) = \psi^{(1,1)}(x, t) + \psi^{(1,2)}(x, t),$$

$$u^{(\gamma_2)}(x, t) = \psi^{(2,1)}(x, t),$$

$$u^{(\gamma_3)}(x, t) = \psi^{(3,1)}(x, t).$$

Получаем условия:

$$\psi^{(1,1)}(x, t) + \psi^{(1,2)}(x, t) = \psi^{(2,1)}(x, t) = \psi^{(3,1)}(x, t), \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \alpha_1 \left(\frac{\partial \psi^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta) + \frac{\partial \psi^{(1,2)}}{\partial x}(0, \beta) \right) + \alpha_2 \frac{\partial \psi^{(2,1)}}{\partial x}(0, \beta) + \\ + \alpha_3 \frac{\partial \psi^{(3,1)}}{\partial x}(0, \beta) = 0. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Учтем тот факт, что

$$\frac{\partial S^{(1,2)}}{\partial x}(0, \beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta),$$

$$\frac{\partial S^{(2,1)}}{\partial x}(0, \beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta),$$

$$\frac{\partial S^{(3,1)}}{\partial x}(0, \beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta).$$

Из (2.37) следует, что $S_0^{(1,1)}(0, \beta) = S_0^{(1,2)}(0, \beta) = S_0^{(2,1)}(0, \beta) = S_0^{(3,1)}(0, \beta)$. Кроме того, $\varphi_0^{(1,1)}(\beta) + \varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \varphi_0^{(2,1)}(\beta) = \varphi_0^{(3,1)}(\beta)$.

Тогда из (2.38) получаем

$$\begin{aligned} \alpha_1 \varphi_0^{(1,1)}(\beta) - \alpha_1 \varphi_0^{(1,2)}(\beta) - \alpha_2 (\varphi_0^{(1,1)}(\beta) + \varphi_0^{(1,2)}(\beta)) \\ - \alpha_3 (\varphi_0^{(1,1)}(\beta) + \varphi_0^{(1,2)}(\beta)) = 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

В итоге, получаем для амплитуды отраженного квантового пакета выражение:

$$\varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \frac{\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \varphi_0^{(1,1)}(\beta), \quad (2.40)$$

а для амплитуд прошедших квантовых пакетов — одинаковые выражения:

$$\varphi_0^{(2,1)}(\beta) = \varphi_0^{(3,1)}(\beta) = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \varphi_0^{(1,1)}(\beta). \quad (2.41)$$

2.2.5. Случай петли.

Граф представляет собой окружность с одной выделенной точкой, в которой заданы условия трансмиссии. Начальные условия заданы в некоторой другой точке $x = x_0$.

Сперва квантовый пакет, определенный начальными данными, достигнет вершины графа. После этого два квантовых пакета будут двигаться в противоположных направлениях (это, по сути, случай двух ребер, соединенных в одной вершине, разобранный ранее). Покажем, что оба этих квантовых пакета вернуться в вершину графа в один и тот же момент, если потенциал не зависит явным образом от времени.

На уровне энергии имеем: $P^2 + V = E$. Отсюда, и из системы Гамильтона, получаем, что

$$dt = \frac{\pm dx}{2\sqrt{E - V(x)}}.$$

Разные знаки здесь соответствуют разным квантовым пакетам. Однако, абсолютное значение промежутка времени, которое мы получим после интегрирования, для обоих случаев совпадает.

Таким образом, на петле в каждый момент времени будет находиться не более двух квантовых пакетов.

Нормируем коэффициенты в условии трансмиссии, а именно, потребуем, чтобы $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

Утверждение 7 *Рассмотрим задачу Коши для нестационарного уравнения Шредингера на графе-петле. Тогда квазиклассическое решение будет представлять собой два гауссова пакета, движущихся на графе. Причем в момент отражения амплитуда того квантового пакета, который соответствует “волне”, “прошедшей” на первом шаге, равна, после n отражений, $(2n\alpha_1 - n + 1)\varphi_0^{(1,1)}$, а амплитуда того, который соответствует “отраженной волне”, равна $(2n\alpha_1 - n)\varphi_0^{(1,1)}$.*

Доказательство. Применим принцип математической индукции. Для волны, пришедшей слева, коэффициент прохождения равен $2\alpha_1$, а отражения $\alpha_1 - \alpha_2 = 2\alpha_1 - 1$. Для волны, пришедшей справа, коэффициенты вычисляются симметрично. А именно: прохождения $2\alpha_2 = 2 - 2\alpha_1$, отражения $\alpha_2 - \alpha_1 = 1 - 2\alpha_1$.

Рассмотрим $n = 2$. Уйдет налево суммарно (повторяющийся множитель $\varphi_0^{(1,1)}$ опустим): $(2\alpha_1)^2 - (\alpha_1 - \alpha_2)^2 = 4\alpha_1 - 1$. Уйдет направо суммарно: $2\alpha_1(\alpha_1 - \alpha_2) + 2\alpha_2(\alpha_1 - \alpha_2) = 4\alpha_1 - 2$. Утверждение верно.

Теперь предположим, что оно уже доказано для некоторого k , и покажем, что из этого следует, что оно выполняется при $k + 1$.

Итак, на следующем шаге для волны, пришедшей слева: пройдет $2\alpha_1(2\alpha_1 k - k + 1)$, отразится $(2\alpha_1 - 1)(2\alpha_1 k - k + 1)$. А для волны, пришедшей справа: пройдет $(2 - 2\alpha_1)(2\alpha_1 k - k)$, отразится $(1 - 2\alpha_1)(2\alpha_1 k - k)$.

Итого, после очевидных сокращений, уйдет налево: $2\alpha_1(k + 1) - (k + 1) + 1$, направо: $2\alpha_1(k + 1) - (k + 1)$. Что и требовалось доказать.

Замечание. В самосопряженном случае коэффициенты α равны (а граф превращается в окружность без выделенных точек), и единственный квантовый пакет, не меняя амплитуды, движется по окружности.

2.2.6. Распространение квантовых пакетов на произвольном графе.

Приведенные выше рассуждения позволяют описать процесс распространения гауссовых пакетов на произвольном геометрическом графе. На каждом ребре это делается с помощью комплексного ростка Маслова (то есть, при помощи нахождения решений гамильтоновой системы и ее линеаризации). А для описания поведения в вершинах графа достаточно рассмотреть случай звездного графа.

Обобщая приведенные выше рассуждения, можно сформулировать следующее утверждение.

Теорема 2.1. Дан звездный граф, причем валентность единственной вершины a равна n . Пусть начальные данные имеют вид (2.2), где точка x_0 лежит на одном из ребер. Тогда решение задачи

$$\hat{H}\psi(x, t) = ih\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} + O(h^{3/2})$$

представляет собой, в любой конечный момент времени, сумму конечного числа квантовых пакетов, то есть, функций вида $\exp\left(\frac{iS^j(x,t)}{h}\right)\varphi^j(t)$, где $S^j = S_0^j(t) + (x - x_j(t))S_1^j + S_2^j(x - x_j(t))^2$, $\text{Im } S_2^j > 0$.

Говоря точнее, пришедший в вершину a пакет разделяется на n пакетов, бегущих по инцидентным вершине ребрам. На каждом из ребер решение определяется гамильтоновой системой обыкновенных дифференциальных уравнений (2.7) и ее линеаризацией (2.8). Причем начальные значения для амплитуд определяются следующими формулами.

Для отраженного квантового пакета:

$$\varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \frac{\alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_n}{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n} \varphi_0^{(1,1)}(\beta). \quad (2.42)$$

Для прошедших квантовых пакетов:

$$\varphi_0^{(k,1)}(\beta) = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n} \varphi_0^{(1,1)}(\beta), \quad (2.43)$$

гдк $k = 2, \dots, n$.

Здесь β — момент времени когда, исходный пакет пришел в точку a .

Если стоящий в левой части оператор \widehat{H} является самосопряженным, то это решение отличается от точного решения нестационарного уравнения Шредингера не более, чем на $O(h^{1/2})$.

Доказательство опирается на тот факт, что нам известен вид решения на каждом из ребер. Будем считать, что ребро, по которому пакет пришел в вершину, имеет номер 1. Используя введенное ранее обозначение для отдельного пакета $\psi^{(k,j)}(x,t) = \exp\left(\frac{iS^{(k,j)}(x,t)}{h}\right)\varphi_0^{(k,j)}(t)$, запишем решения на ребрах: $u^{(\gamma_1)}(x,t) = \psi^{(1,1)}(x,t) + \psi^{(1,2)}(x,t)$, $u^{(\gamma_j)}(x,t) = \psi^{(j,1)}(x,t)$ для $j > 1$.

Начальные данные полностью определяют $\psi^{(1,1)} = \exp\left(\frac{iS^{(1,1)}(x,t)}{h}\right)\varphi_0^{(1,1)}(t)$, подробности приведены в Утверждении 4.

Для постановки краевых условий для $\psi^{(1,2)}(x,t)$ и $\psi^{(j,1)}(x,t)$, $j > 1$ выпишем условия непрерывности решения на всем графе $u^{(\gamma_1)}(0,\beta) = u^{(\gamma_j)}(0,\beta)$ $j > 1$ и условия трансмиссии:

$$\sum_{\gamma_j \in \Gamma(a)} \alpha_j \frac{\partial u^{(\gamma_j)}}{\partial x}(0,\beta) = 0. \quad (2.44)$$

Учтем тот факт, что

$$\frac{\partial S^{(1,2)}}{\partial x}(0,\beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0,\beta)$$

и

$$\frac{\partial S^{(j,1)}}{\partial x}(0, \beta) = -\frac{\partial S^{(1,1)}}{\partial x}(0, \beta),$$

для индексов $j > 1$.

Из условия непрерывности следует, что $S_0^{(1,1)}(0, \beta) = S_0^{(1,2)}(0, \beta) = S_0^{(j,1)}(0, \beta)$, $j > 1$. Кроме того, $\varphi_0^{(1,1)}(\beta) + \varphi_0^{(1,2)}(\beta) = \varphi_0^{(j,1)}(\beta)$, $j > 1$.

Эти уравнения, совместно с требованием отсутствия точек поворота, приводят к искомым формулам. Корректность постановки краевой задачи для $\psi^{(1,2)}(x, t)$ подробно обсуждается в доказательстве Утверждения 5.

Итак, мы можем описать эволюцию гауссова пакета в случае произвольного графа. В каждой из вершин, до которой дошел квантовый пакет, можно применить (2.42) и (2.43). Получаем решение уравнения (2.1) на подграфе исходного графа, содержащем точку, в которой заданы начальные данные. Таким образом, квазиклассическое решение задачи Коши в любой конечный момент времени будет представлять собой конечное количество гауссовых пакетов, движущихся на геометрическом графе.

Замечание. Случай $\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n = 0$ отвечает несамосопряженному оператору и не имеет физического смысла. В статье [8] доказано, что спектр соответствующего оператора заполняет всю комплексную плоскость.

Нужно отметить схожесть выражений (2.42) и (2.43) и формул, полученных для случая гиперболического уравнения в [14].

2.3. Статистика распространения квантовых пакетов.

Как было доказано в предыдущем разделе, квазиклассическое решение задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера с начальными условиями вида (2.2) имеет вид $\Psi(x, t) + O(h^{1/2})$, где $\Psi(x, t)$ — конечная сумма гауссовых пакетов. В этом разделе мы будем рассматривать асимптотику функции $\Psi(x, t)$ при $t \rightarrow \infty$, а именно будем изучать, как меняется со временем число квантовых пакетов. Заметим, что эта задача отличается от задачи описания асимптотики решения уравнения Шредингера при $t \rightarrow \infty$, так как оценка остатка справедлива только на конечных временах. С физической точки зрения это означает, что мы рассматриваем времена большие, но много меньшие, чем $1/h$.

В этом разделе изучаются только конечные графы с компактными ребрами. Условия трансмиссии в вершинах будем брать такими, чтобы оператор

Шредингера был самосопряженным (см. [36]). В этом случае из формул (2.42) и (2.43) следует, что в вершинах степени 2 число квантовых пакетов не меняется (так как у отраженного квантового пакета нулевая амплитуда). Графы, в которых нет вершин степени 2, будем, следуя [30], называть *чистыми*. Ниже в тексте мы рассматриваем только такие графы.

Кроме того, из формул (2.42) и (2.43) следует, что если квантовый пакет проходит вершину степени v , то при этом образуется ровно v новых квантовых пакетов.

Рассмотрим величину t_j — время прохождения квантовым пакетом j -того ребра. Напомним, что во второй части главы показано, что время прохождения определяется решениями гамильтоновой системы, при данных начальных условиях. Будем предполагать, что t_j линейно независимы над полем \mathbb{Q} (ситуация общего положения).

2.3.1. Асимптотика числа квантовых пакетов.

Определим функцию $N(T)$ как число квантовых пакетов на графе к моменту времени T .

Пусть ω_j — это частота прохождения j -го ребра, то есть $\omega_j = 1/t_j$.

Утверждение 8 *Для звездного графа (состоящего из одной вершины валентности v и v вершин степени 1, которые соединены с первой) справедлива формула*

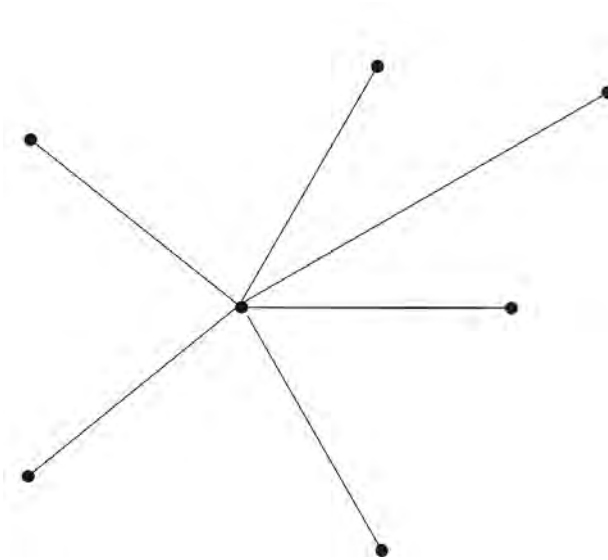


Рис. 2.2. Граф, имеющий форму звезды, $v = 6$.

$$N(T) = \sum_{k=1}^{v-1} (v-k) \sum_{i=1}^{C_v^k} W(\Delta_k^i(\omega_1 T/2, \dots, \omega_k T/2)), \quad (2.45)$$

здесь $W(\Delta_k^i)$ — это число точек целочисленной решетки, которые лежат на i -ой грани k -мерного симплекса Δ_k , со сторонами $\omega_1 T/2, \dots, \omega_k T/2$. Учитываются только грани старшей размерности, инцидентные началу координат.

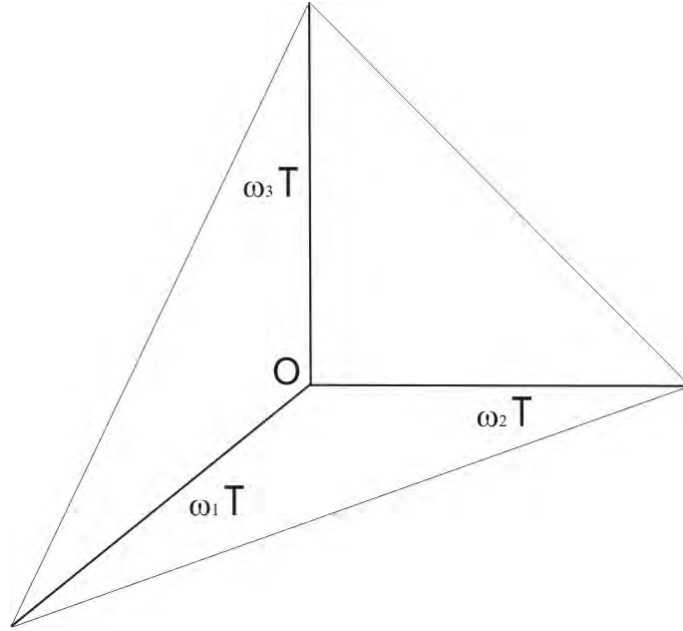


Рис. 2.3. Симплексы, $v = 3$.

$$N(T) = \frac{1}{2^{v-1}(v-1)!} \sigma_{v-1}(\omega_1, \dots, \omega_v) T^{v-1} + o(T^{v-1}). \quad (2.46)$$

Здесь σ_k — стандартный симметрический многочлен степени k .

Доказательство. Будем, для простоты, рассматривать граф, в котором только 3 ребра ($v = 3$). Выкладки в произвольном случае аналогичны.

Увеличение числа квантовых пакетов возможно только в вершинах графа. В соответствии с результатами, изложенными в первой части главы, в вершинах степени 1 (там, где задано условие Дирихле) количество квантовых пакетов увеличиваться не может. Нам осталось выяснить, что может происходить в вершине степени 3.

По теореме Коши (о единственности решения дифференциального уравнения на каждом из ребер) из вершины в каждый фиксированный момент времени не

может выходить (и в нее входить) больше трех квантовых пакетов. Таким образом, их количество может а) увеличиваться на 2 (когда приходит один пакет), б) увеличиваться на 1 (когда приходят 2 пакета по двум разным ребрам) и в) не меняться (когда по всем трем ребрам приходят квантовые пакеты).

Вариант а) реализуется в моменты времени, кратные удвоенному времени прохождения каждого из ребер. То есть, общий вклад в увеличение числа квантовых пакетов равен $2 \left(\left\lfloor \frac{T}{2t_1} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{T}{2t_2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{T}{2t_3} \right\rfloor \right)$.

Воспользуемся тем, что $[x] = x - \{x\}$ и второе слагаемое есть $o(x)$. Получаем выражение $\left(\frac{T}{t_1} + \frac{T}{t_2} + \frac{T}{t_3} \right) + o(T)$.

Теперь рассмотрим вариант б). Возможны три варианта выбора двух ребер из трех. Возьмем первое и второе.

Квантовым пакетам на графе, будем сопоставлять строки вида (i_1, i_2, \dots, i_m) , где i_m может равняться единице, двойке или тройке. А именно, если квантовый пакет сначала прошел туда и обратно по первому ребру, то на первое место ставим 1, а если по второму, то 2, и так далее. Ясно, что в любой момент времени каждый квантовый пакет можно описать такой строкой. Кроме того, если опустить начальный участок времени (когда квантовый пакет из начальной точки еще не пришел в первую вершину), каждой строке будет соответствовать квантовый пакет (для рассматриваемого графа). Нужно отметить, что строка не описывает, какие пакеты, взаимодействуя (по правилам, описанным в первой части этой главы), привели к образованию данного квантового пакета.

Для описания ситуации б) нам достаточно рассматривать только строки, у которых среди компонент есть только единицы и двойки. Действительно, если в вершину пришел пакет (для определенности, по первому ребру), то ему соответствует строка вида $(i_1, i_2, \dots, 1)$. Если квантовый пакет ко времени T прошел по всем трем ребрам, то найдутся еще два пакета, которые придут в эту же вершину по двум другим ребрам в тот же момент времени (и изменения количества квантовых пакетов не произойдет). Действительно, можно предъявить еще две строки, у которых будет та же сумма компонент, а на последнем месте будет находиться двойка или тройка.

Покажем, что увеличение числа квантовых пакетов происходит в моменты времени, соответствующие точкам с натуральными координатами, которые попали внутрь прямоугольного треугольника со сторонами $\frac{T}{2t_1}$ и $\frac{T}{2t_2}$.

Нам нужно подсчитать количество событий (обозначим их множество через A), состоящих в том, что в вершину одновременно пришли два

квантовых пакета. Выберем подмножество (назовем его B) множества строк, которое соответствует интересующим нас событиям, а потом подсчитаем число элементов в нем.

Одновременный приход в вершину двух квантовых пакетов по разным ребрам можно описать с помощью двух строк с одинаковой суммой компонент, но с разной последней координатой. Условимся сопоставлять этому событию только строки, у которых на последнем месте стоит двойка. Такие строки всегда имеются, так как отсутствие двойки среди компонент означает, что квантовый пакет не проходил по второму ребру, а такое невозможно при рассмотрении ситуации б). Как именно расположены остальные координаты (при заданной сумме), не важно, и мы будем рассматривать строки, у которых единицы стоят на первых местах.

Объясним, почему соответствие между элементами множеств A и B является взаимно однозначным. С одной стороны, любому событию отвечает не более одной строки указанного вида. Если предположить противное, то мы получим, что данное T имеет два разных представления вида $T = n2t_1 + m2t_2$ (по такой записи сразу можно выписать строку нужного вида), а это не так, в силу того, что t_1 и t_2 линейно независимы над \mathbb{Q} . Мы доказали инъективность. Сюръективность следует из того, что каждой строке из множества B соответствует момент времени T (по уже приведенной формуле), в который в вершине встретятся два квантовых пакета, пришедшие по разным ребрам.

Мы получили строки вида $(1, \dots, 1, 2, \dots, 2)$. Им можно взаимно однозначно сопоставить линейные комбинации вида $n2t_1 + m2t_2$, где n и m — натуральные. Если задано временное ограничение T , мы получаем условие: $2nt_1 + 2mt_2 \leq T$. Решения такого неравенства соответствуют точкам с натуральными координатами, которые попали внутрь прямоугольного треугольника со сторонами $\frac{T}{2t_1}$ и $\frac{T}{2t_2}$. Количество точек в треугольнике, с точностью до $o(T^2)$, равно его площади, то есть выражению $\frac{1}{2} \frac{T^2}{4t_1t_2}$ (в произвольном случае, мы получаем объем k -мерного симплекса).

Осталось просуммировать количество по вариантам выбора двух ребер и получить симметрический многочлен второй степени от частот, умноженный на T^2 , с коэффициентом $1/8$.

Нам нужен только старший член асимптотики, поэтому мы учитываем только слагаемое, имеющее порядок T^2 .

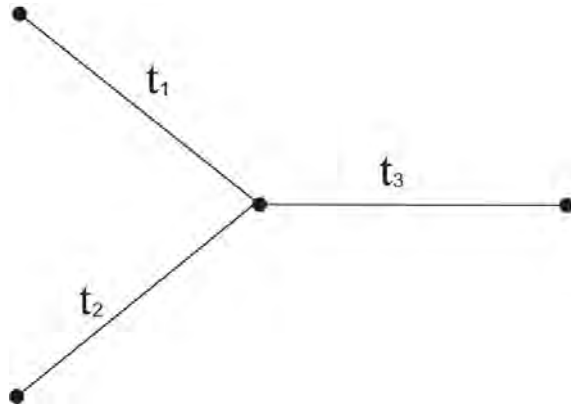


Рис. 2.4. Три ребра сходятся в одной точке.

Замечание. Для случая трех ребер можно, используя результаты, изложенные в [28], написать более точную формулу (выписать явно и второй член асимптотики), а именно:

$$N(T) = \frac{1}{8}\sigma_2(\omega_1, \omega_2, \omega_3)T^2 + \frac{1}{2}\sigma_1(\omega_1, \omega_2, \omega_3)T + o(T). \quad (2.47)$$

Теорема 2.2. В случае произвольного графа функция $N(T)$ представляется в виде $CT^{v-1} + o(T^{v-1})$. Здесь v — число ребер в графе.

Доказательство. Изменение числа квантовых пакетов возможно только в местах соединения ребер графа. Поведение в вершинах исследовано в Утверждении 8, где показано, что старший член асимптотики имеет степень не выше $v - 1$. Когда k пакетов приходит в вершину валентности v , то появляется $v - k$ новых пакетов. Число таких событий определяется линейными комбинациями времен прохождения ребер графа. Так как времена прохождения несоизмеримы над \mathbb{Q} , то наибольший вклад дают линейные комбинации, в которых число слагаемых на единицу меньше числа ребер в графе.

Замечание. Коэффициент при старшей степени может быть не равен сумме коэффициентов, соответствующих вершинам максимальной степени, если рассматривать их как вершины звездного графа. Например, справедливо следующее утверждение.

Утверждение 9 Для графа, который состоит из двух вершин, соединенных v ребрами, справедливы формулы:

$$N(T) = \sum_{k=1}^{v-1} (v - k) \sum_{i=1}^{C_v^k} W(\Delta_k^i(\omega_1 T, \dots, \omega_k T)), \quad (2.48)$$

$$N(T) = \frac{1}{(v-1)!} \sigma_{v-1}(\omega_1, \dots, \omega_v) T^{v-1} + o(T^{v-1}). \quad (2.49)$$

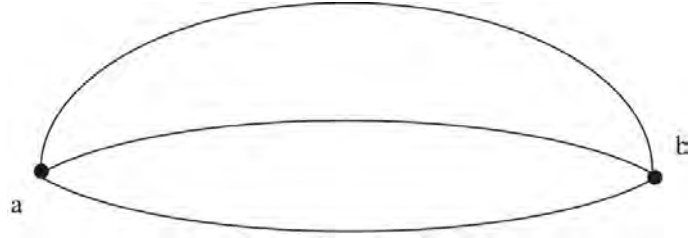


Рис. 2.5. Граф с кратными ребрами, $v = 3$.

Доказательство, в целом, повторяет доказательство Утверждения 8. Отличие состоит в том, что увеличение числа квантовых пакетов происходит не только тогда, когда выбранный квантовый пакет вернется в центральную вершину (пройдя ребро дважды), но и в другой вершине, после однократного прохождения ребра. Таким образом, для подсчета старшего члена асимптотики нам нужно учесть, сколько точек с целыми положительными координатами удовлетворяет неравенству $xt_1 + yt_2 < T$ (это “вклад” первых двух ребер, потом нужно будет рассмотреть и два других варианта).

Замечание. Если граф имеет сложную структуру, то задача выписывания формулы для старшего члена асимптотики становится значительно более трудоемкой. В каждом конкретном случае нужен перебор по всем подграфам-деревьям, в которых вершина максимальной валентности имеет степень на единицу меньше, чем в исходном графе. При этом, кроме вклада, который дает рассмотрение этой вершины как звездной (см. Утверждение 8), нужно учитывать количество квантовых пакетов, которые она “передает” другим вершинам максимальной валентности. А именно, при рассмотрении условий вида $q_1 l_1 + \dots + q_s l_s \leq T$ (см. доказательства Утверждений 8 и 2.3), где l_i — времена прохождения составных ребер, q_i натуральные, нужно учитывать не только четные q_i (как в случае звездного графа), если ребро соединяет две вершины максимальной степени. Таким образом, на главный член асимптотики влияют 1) время прохождения каждого из ребер на графе, 2) топологическая структура подграфа, связывающего вершины максимальной валентности.

2.3.2. Плотность распределения пакетов.

Теорема 2.3. Рассмотрим граф, упомянутый в Утверждении 9, для случая $v = 3$ (он состоит из двух вершин a и b , соединенных тремя ребрами). Рассмотрим на одном из ребер отрезок cd , время прохождения которого равно τ . Тогда, для почти всех t_1, t_2, t_3 (см. [32]), отношение числа квантовых пакетов на этом отрезке к числу квантовых пакетов на всем графе стремится к выражению

$$\frac{N_{cd}(T)}{N(T)} \rightarrow \frac{\sigma_3}{\sigma_2} \tau \equiv \frac{\omega_1 \omega_2 \omega_3}{\omega_1 \omega_2 + \omega_1 \omega_3 + \omega_2 \omega_3} \tau \equiv \frac{1}{t_1 + t_2 + t_3} \tau. \quad (2.50)$$

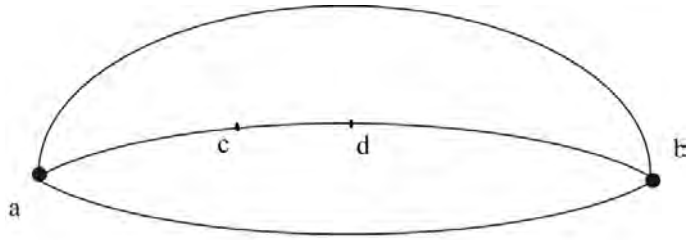


Рис. 2.6. Граф и выделенный отрезок cd на нем.

Замечание. Мы получаем, что квантовые пакеты распределяются (при заданном потенциале и начальных условиях) равномерно по времени прохождения ребра. Очевидно, что это не означает, что пакеты распределяются равномерно по пространственной координате.

Доказательство. Число точек на отрезке cd в момент времени T (обозначим его $N_{cd}(T)$) можно представить в виде

$$N_{cd}(T) = N_{\rightarrow c}(T) - N_{\rightarrow c}(T - \tau) + N_{\rightarrow d}(T) - N_{\rightarrow d}(T - \tau). \quad (2.51)$$

$N_{\rightarrow c}(T)$ обозначает количество квантовых пакетов, которое прошло через точку c от вершины a . Пусть время прохождения отрезка ac равно T_1 .

Покажем, что

$$N_{\rightarrow c}(T) = \frac{1}{12} \omega_1 \omega_2 \omega_3 (T - T_1)^3 + y(\omega_1, \omega_2, \omega_3, T_1) (T - T_1)^2 + o(T^2). \quad (2.52)$$

Как именно выглядит функция $y(\omega_1, \omega_2, \omega_3, T_1)$, не имеет для нас значения.

Обратим внимание на то, что $N_{\rightarrow c}(T)$ равно числу квантовых пакетов, которые вышли из вершины a по выбранному ребру в момент времени $T - T_1$. Чаще всего из вершины a квантовые пакеты выходят в момент, когда в эту вершину по всем трем ребрам пришли квазифотоны (и тогда изменение их количества не происходит). Подсчитаем количество таких ситуаций.

Квантовые пакеты, которые вышли из вершины a , прошли по всем трем ребрам и вернулись снова в эту вершину, описываются (см. доказательство Утверждения 8) неравенствами:

$$\begin{aligned} 2t_1x + 2t_2y + 2t_3z &\leq T, \\ (2x + 1)t_1 + (2y + 1)t_2 + 2zt_3 &\leq T, \\ (2x + 1)t_1 + yt_2 + (2z + 1)t_3 &\leq T, \\ 2xt_1 + (2y + 1)t_2 + (2z + 1)t_3 &\leq T. \end{aligned}$$

Каждое из эти неравенств дает вклад $\frac{1}{3!} \frac{T^3}{2t_1 2t_2 2t_3} + y_j(t_1, t_2, t_3)T^2 + o(T^2) = \frac{1}{48} \omega_1 \omega_2 \omega_3 T^3 + y_j(t_1, t_2, t_3)T^2 + o(T^2)$.

Здесь мы учли тот факт, что для почти всех t_1, t_2, t_3 количество целых точек, которые попали в симплекс со сторонами t_1T, t_2T, t_3T можно записать в виде $t_1 t_2 t_3 T^3 / 6 + y(t_1, t_2, t_3)T^2 + o(T^2)$ (см. [32] и ссылки там).

Итого, мы получаем, что по первому ребру уходит из вершины a в сторону точки c : $\frac{4}{48} \omega_1 \omega_2 \omega_3 T^3 + y(t_1, t_2, t_3)T^2 + o(T^2) = \frac{1}{12} \omega_1 \omega_2 \omega_3 T^3 + y(t_1, t_2, t_3)T^2 + o(T^2)$.

Мы доказали формулу (2.52). Подставляя ее в формулу (2.51), получим (пусть отрезок cd взят, для определенности, на первом ребре):

$$\begin{aligned} N_{cd}(T) &= \frac{1}{12} \omega_1 \omega_2 \omega_3 \cdot \\ &\cdot ((T - T_1)^3 - (T - T_1 - \tau)^3 + (T + T_1 + \tau - t_1)^3 - (T + T_1 - t_1)^3) + \\ &+ y_c(\omega_1, \omega_2, \omega_3, T_1)((T - T_1)^2 - (T - T_1 - \tau)^2) + \\ &+ y_d(\omega_1, \omega_2, \omega_3, T_1)((T + T_1 + \tau - t_1)^2 - (T + T_1 - t_1)^2) + o(T^2). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Получим, после очевидных сокращений:

$$N_{cd}(T) = \frac{1}{2} \tau T^2 \omega_1 \omega_2 \omega_3 + o(T^2).$$

Осталось только разделить это выражение на общее число квантовых пакетов на всем графе (полученное в Утверждении 9).

Замечание. Условием, которое гарантирует, что для данного набора t_1, t_2, t_3 второй член асимптотики будет иметь нужный нам вид, является то, что этот набор плохо приближается рациональными числами.

Было проведено численное моделирование для конечных графов. Эксперимент подтвердил правильность теоретических выкладок.

2.4. Распространение гауссовых пакетов на однородном дереве.

Рассмотрим бесконечное дерево, у которого валентность всех вершин, кроме корневой, одинакова и равна v . Число, на единицу меньшее валентности, будем называть *числом ветвления* b . Предположим, кроме того, что длина всех ребер одинакова и равна l . Потенциал одинаков для всех ребер (можем, для простоты, считать его нулевым). Соответственно, и время прохождения всех ребер будет одинаковым (обозначим его L). Дифференциальные операторы на подобных деревьях изучались, например, в работах [34] и [33].

Можно рассмотреть задачу о распространении гауссовых пакетов на таком графе. Формулы, описывающие поведение пакетов в вершинах, приведены в одном из предыдущих разделов. Будем рассматривать только самосопряженный случай. При этом в каждой вершине амплитуда делится в таком соотношении: $2/v$ для каждого прошедшего пакета и $2/v - 1$ для отраженного. В корневой вершине потребуем выполнения условия Дирихле.

Определение. Энергией на ребре будем называть следующую величину:

$$E_{\gamma_j} = \int_{\gamma_j} |\Psi|^2 dx.$$

Очевидно, что она определяется суммой квадратов амплитуд для пакетов, носители которых попали на ребро.

Легко описать изменение энергии при прохождении вершины графа. Например, для бинарного дерева (то есть, для случая $b = 2$) получаем, что $8/9$ энергии проходит, а отражается $1/9$. Суммарная энергия не меняется.

Пусть начальные данные имеют вид (2.2) и сконцентрированы на ребре, инцидентном корневой вершине. Возникает вопрос: вся ли энергия “уйдет на бесконечность” или будут ребра, на которых, в пределе при стремлении времени к бесконечности, энергия не будет стремиться к нулю?

Регулярность дерева делает задачу комбинаторной, так как все взаимодействия происходят только в фиксированные моменты времени вида $t_0 + nL$, где L — время прохождения ребра, а t_0 — время, за которое первый пакет достигнет вершины. Следуя В. Л. Прядиеву и [5], можно рассмотреть пространство амплитуд. При этом на каждом ребре удобнее выделить два направления движения и учитывать пакеты, движущиеся в разные стороны, отдельно. Амплитуды всех пакетов на графе в момент времени вида $t_1 + nL$ описываются одним вектором. Каждому ребру соответствуют две компоненты:

движение от корня (перечисляется первой) и движение к корню (перечисляется второй). Порядок, в котором ребра указываются в векторе, не имеет значения, так как переход от одного варианта к другому осуществляется с помощью линейной замены. Например, можно выбрать вариант, в котором ребра считаются по уровням, начиная от корня, а внутри каждого уровня — от правого ребра к левому. Рассматривается линейный оператор A , который описывает переход от текущего состояния (в момент T) к следующему ($T + L$). Такой оператор можно описать с помощью бесконечной матрицы. Рассматривается оператор B , равный квадрату A . Получаем, что эволюция начального состояния во времени описывается с помощью применения к исходному состоянию степеней оператора B .

Нужно отметить, что, согласно результатам предыдущего раздела, в любой конечный момент времени в векторе состояний будет только конечное число ненулевых компонент, если начальные данные были сконцентрированы в одной точке.

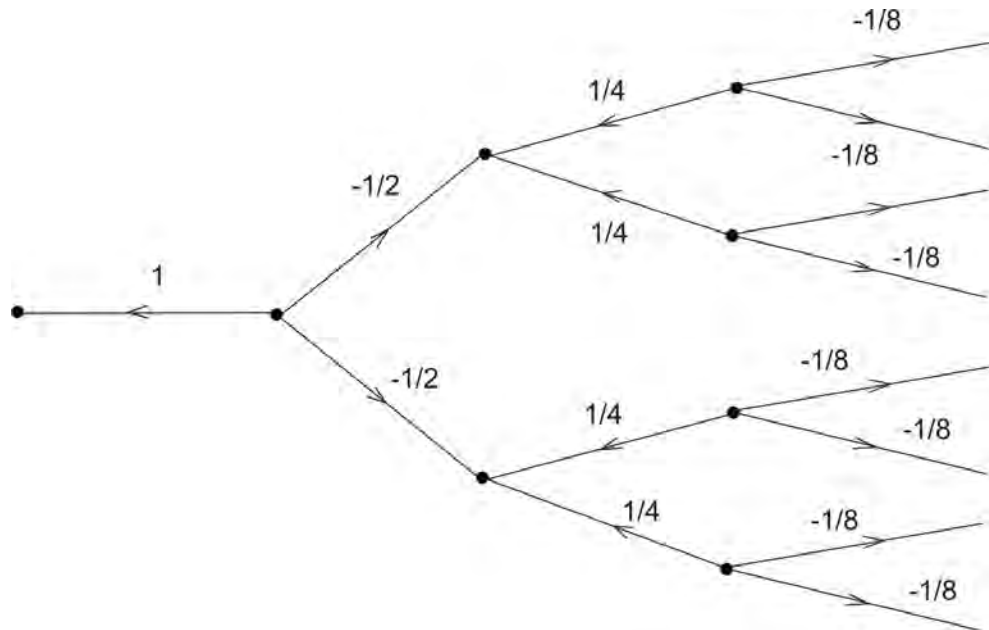


Рис. 2.7. Устойчивое состояние ρ .

Опишем состояние ρ , которое переходит в себя под действием оператора B . Возьмем в начальный момент времени такой вектор амплитуд: на первом ребре единицу (пакет движется к корню), на втором и третьем (то есть, на ребрах второго уровня) по $-1/2$ (пакеты движутся от корня), на ребрах третьего уровня по $1/4$ (движение к корню), на ребрах четвертого уровня по $-1/8$

(движение от корня) и так далее, так чтобы для амплитуд разных уровней было выполнено соотношение $a_{k+1} = -a_k/2$ и всякий раз направление движения менялось (см. рис. 2.7). Такое состояние, после двукратного применения оператора A , перейдет само в себя. То есть, мы описали собственную функцию оператора B . Таким образом, получаем, что, если в качестве начальных условий выбрать ρ , то энергия не “уходит на бесконечность”.

При начальных условиях, сосредоточенных на первом ребре, численное моделирование показывает, что для бинарного дерева доля энергии, которая осталась на начальном участке, стремится к $1/2$. Отметим, что это значение соответствует проекции начальных данных на вектор ρ . С увеличением числа ветвления доля энергии, которая остается на начальном участке графа, возрастает. При $b = 3$ оказывается, что остается $2/3$, а $b = 4$ дает $3/4$ (см. таблицу 1). Можно предположить, что для произвольного числа ветвления доля энергии составляет $(b - 1)/b$.

Энергия E по отношению к номеру уровня в дереве l , после 10000 шагов. Для случаев $b = 2$, $b = 3$ и $b = 4$.

l	$E, b = 2$	$E, b = 3$	$E, b = 4$
1	0,250000	0,444444	0,562499
2	0,125000	0,148148	0,140625
3	0,062500	0,049383	0,035156
4	0,031250	0,016461	0,008789
5	0,015625	0,005487	0,002197
6	0,007813	0,001829	0,000549
7	0,003906	0,000610	0,000137
8	0,001953	0,000203	0,000034
9	0,000976	0,000068	0,000009
10	0,000488	0,000023	0,000002
11	0,000244	0,000008	0,000001
12	0,000122	0,000003	0,000000
13	0,000061	0,000001	0,000000
14	0,000031	0,000000	0,000000
15	0,000015	0,000000	0,000000
16	0,000008	0,000000	0,000000
17	0,000004	0,000000	0,000000
16	0,000002	0,000000	0,000000
19	0,000001	0,000000	0,000000

3. *Квазиклассические спектральные серии квантового оператора Шредингера, соответствующие неизолированным положениям равновесия.*

Теория квазиклассического квантования (см., например, [11], [10]) позволяет сопоставлять инвариантным множествам гамильтоновой системы спектральные серии соответствующего квантового оператора (см. определение ниже).

На двумерной поверхности рассматривается оператор Шредингера с потенциалом, критические точки которого образуют замкнутую кривую. Введем, возможно локально, такие координаты r и φ на поверхности, что φ будет отсчитываться вдоль рассматриваемой кривой.

Классическая функция Гамильтона имеет вид $H = g^{ij}p_i p_j + V(r)$, если $g_{ij}(r, \varphi)$ — метрика на рассматриваемой поверхности. Ясно, что кривая $\{\{r, \varphi, p_r, p_\varphi\} | V'(r) = 0, p_r = 0, p_\varphi = 0\}$ состоит из критических точек гамильтониана, то есть положений равновесия. Стандартная конструкция (см., например, [11]) для описания спектральных серий, соответствующих изолированным невырожденным положениям равновесия, неприменима в этой ситуации. Асимптотические спектральные серии были найдены, исходя из их определения и руководствуясь общими принципами квазиклассического приближения.

Оказалось, что асимптотическое $mod O(h^{3/2})$ (такая точность является общепринятой в теории комплексного ростка) собственное значение “бесконечно вырождено”, то есть ему соответствует бесконечное множество асимптотических собственных функций. Именно, справедливо Утверждение 10.

Так как это, вообще говоря, не означает, что и точное собственное значение вырождено, то были найдены квазиклассические решения с более высоким порядком точности, а именно до $O(h^{5/2})$ (Теорема 3.1). Эти решения уже не являются вырожденными. Именно повышение порядка позволило разделить асимптотические решения, которые до этого совпадали с точностью до $O(h^{3/2})$.

3.1. Постановка асимптотической квантовой задачи.

Рассмотрим вейлевский псевдодифференциальный оператор \hat{H} (см. [7]). Наша цель состоит в отыскании квазиклассических решений для стационарного

уравнения Шредингера.

Пусть Λ — изотропное многообразие, заданное в кокасательном расслоении к конфигурационному пространству, лежащее в множестве уровня гладкой функции H и инвариантное относительно фазового потока гамильтоновой системы с этой функцией Гамильтона. Рассмотрим квантовый оператор Шредингера $H(x, -ih\frac{\partial}{\partial x})$ при $h \rightarrow 0$ (этот параметр в квантовой механике пропорционален постоянной Планка), то есть вейлевский псевдодифференциальный оператор с символом $H(x, p)$.

Определение (см. [21], [10]). Квазиклассическим решением уравнения Шредингера, соответствующим инвариантному многообразию Λ , называется пара $(\psi(x, h) \in L^2, E(h))$, приближенно удовлетворяющая спектральной задаче:

$$\begin{aligned} 1) & H \left(x, -ih\frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = E\psi + O(h^M), \quad M > 1, \\ 2) & \psi(x, h) = O(1), \end{aligned}$$

причем функция $\psi(x, h)$ — асимптотическая собственная функция — локализована вблизи проекции Λ на x -пространство:

$$3) \lim_{h \rightarrow 0} \psi(x, h) = 0, \quad x \notin \pi_x(\Lambda),$$

а асимптотическое собственное значение удовлетворяет соотношению:

$$4) \lim_{h \rightarrow 0} E(h) = H(x, p)|_{\Lambda}.$$

В соответствии с общей концепцией квантовой механики, оператор \hat{H} определен на подходящем всюду плотном подпространстве пространства $L^2(Q, d\mu)$ квадратично-интегрируемых функций. Детали подробно обсуждаются в статье [20] (см., также, книгу [12]). Под $O(h^\alpha)$, если речь идет о функциях, всюду понимается оценка в норме L^2 .

3.2. Спектральные серии, соответствующие неизолированным положениям равновесия.

На двумерной поверхности рассматривается оператор Шредингера с потенциалом, критические точки которого образуют замкнутую кривую. Введем, возможно локально, такие координаты r и φ на поверхности, что φ будет отсчитываться вдоль рассматриваемой кривой.

Классическая функция Гамильтона имеет вид $H = g^{ij}p_i p_j + V(r)$, если $g_{ij}(r, \varphi)$ — метрика на рассматриваемой поверхности. Соответствующий квантовый оператор Шредингера будет обычным дифференциальным оператором второго порядка (см. формулу 3.1).

Если взять $p_r = 0$ и $p_\varphi = 0$, а r_0 определить из уравнения $V'(r) = 0$, то дифференциал гамильтониана равен нулю, какое бы φ мы ни взяли. Таким образом мы получаем не изолированную особую точку, а целую окружность, состоящую из особых точек. Кратко такое множество положений равновесия можно записать так: $\{r, \varphi, p_r, p_\varphi \mid V'(r) = 0, p_r = 0, p_\varphi = 0\}$.

Рассмотрим оператор Шредингера для этой задачи подробнее. Его символ имеет вид:

$$H = g^{11}p_\varphi^2 + 2g^{12}p_\varphi p_r + g^{22}p_r^2 + V(r).$$

Тогда на функцию ψ оператор $H \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x} \right)$ действует так:

$$\begin{aligned} H \left(\varphi, r, -ih \frac{\partial}{\partial \varphi}, -ih \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi = & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (g^{11} \psi) + g^{11} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (\psi) \right) - \\ & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} (g^{22} \psi) + g^{22} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\psi) \right) - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial r} (g^{12} \psi) + g^{12} \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial r} (\psi) \right) + \\ & + V(r) \psi. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Опишем сперва квазиклассическое решение с точностью до $O(\hbar^{3/2})$, которая является стандартной для теории комплексного роста.

Утверждение 10 Если взять $\psi = U(\varphi)e^{iS/\hbar}$, где $S = i\lambda(r - r_0)^2$, $\lambda = \sqrt{\frac{V''(r_0)}{8g^{22}}}$, а $U(\varphi)$ — произвольная гладкая финитная функция, то ψ будет асимптотической собственной функцией оператора $H \left(\varphi, r, -ih \frac{\partial}{\partial \varphi}, -ih \frac{\partial}{\partial r} \right)$ с точностью до $O(\hbar^{3/2})$, причем асимптотическое собственное значение имеет вид

$$E = V(r_0) + \sqrt{\frac{g^{22}V''(r_0)}{8}} \hbar. \quad (3.2)$$

Здесь r_0 — корень уравнения $V'(r) = 0$.

Доказательство. Возьмем функцию $\psi = U(\varphi)e^{-\lambda(r-r_0)^2/\hbar}$ (λ мы определим позже). Для этого случая получаем (см. [21]):

$$H \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = e^{iS(x)/h} \cdot \left(HU - ih \left(\frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial U}{\partial x} \right) - \frac{ih}{2} Sp \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial x} \right) U + \varphi_1 h^2 \right), \quad (3.3)$$

где подставили $p = \frac{\partial S}{\partial x}$, а φ_1 ограничена константой.

В нашем случае $\frac{\partial H}{\partial p} = 0$, так как мы рассматриваем особую точку. Матрица $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$ имеет только один ненулевой элемент $\frac{\partial^2 S}{\partial r^2}$. Отсюда

$$Sp \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial x} \right) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_r^2} \frac{\partial^2 S}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi \partial p_\varphi} + \frac{\partial^2 H}{\partial r \partial p_r}.$$

Но

$$H''_{\varphi p_\varphi} = 2p_\varphi \frac{\partial g^{11}}{\partial \varphi} + 2p_r \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi},$$

$$H''_{rp_r} = 2p_\varphi \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} + 2p_r \frac{\partial g^{22}}{\partial r},$$

$$H''_{p_r p_r} = 2g^{22}.$$

После подстановки $p = \frac{\partial S}{\partial x}$, то есть $p_\varphi = 0$ и $p_r = 2i\lambda(r - r_0)$, получаем

$$H''_{\varphi p_\varphi} = 4i\lambda(r - r_0) \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi},$$

$$H''_{rp_r} = 4i\lambda(r - r_0) \frac{\partial g^{22}}{\partial r}.$$

В силу очевидной оценки: $e^{-x^2/h} x^n = O(h^{n/2})$, приходим к тому, что слагаемые $H''_{\varphi p_\varphi}$, H''_{rp_r} дадут вклад порядка $O(h^{3/2})$ (нужно взять $x = (r - r_0)$). Таким образом, результат применения оператора выглядит так:

$$U(\varphi) e^{iS/h} \left(-4g^{22} \lambda^2 (r - r_0)^2 + V(r_0) + \frac{V''(r_0)}{2} (r - r_0)^2 + \lambda g^{22} h \right) + O(h^{3/2})$$

(использовали $\frac{\partial^2 S}{\partial r^2} = 2i\lambda$, $V'(r_0) = 0$). Отсюда получаем, что $\lambda^2 = \frac{V''(r_0)}{8g^{22}}$, $E_0 = V(r_0)$, $E_1 = \lambda g^{22}$. Утверждение доказано.

Получаем, что асимптотическое собственное значение в рассматриваемом приближении бесконечно вырождено (ему соответствует бесконечно много

асимптотических собственных функций). Это, конечно, не означает, вообще говоря, что точный спектр оператора \widehat{H} вырожден, просто разные собственные числа могут совпадать с точностью до $O(h^{3/2})$. Чтобы изучить вопрос о снятии этого “асимптотического вырождения”, нужно построить поправки следующего порядка. Квазиклассические решения с точностью до $O(h^{5/2})$ описаны в теореме, которая приведена ниже.

Теорема 3.1. Пусть u_0 — гладкое решение уравнения второго порядка с периодическими коэффициентами:

$$A(\varphi)u_0''(\varphi) + B(\varphi)u_0'(\varphi) + C(\varphi)u_0(\varphi) = E_2u_0(\varphi),$$

где $A(\varphi)$, $B(\varphi)$, $C(\varphi)$ вычисляются по явным формулам (см. (3.20) и (3.21) ниже), и пусть при $E_2 = E_{2n}$ существует периодическое решение (то есть, E_{2n} — соответствующее собственное значение). Тогда квазиклассическое решение спектральной задачи для оператора (3.1) с точностью до $O(h^{5/2})$ имеет вид:

$$E = V(r_0) + \sqrt{\frac{g^{22}V''(r_0)}{8}}h + E_{2n}h^2$$

— асимптотическое собственное число (n — целое),

$$\psi = U(\varphi, r)e^{iS/h}$$

— асимптотическая собственная функция.

Здесь $U = u_0(\varphi) + u_1(\varphi)(r - r_0) + \frac{u_2(\varphi)}{2}(r - r_0)^2$ (где u_1 , u_2 вычисляются по (3.17) и (3.18)), а $S = i(\lambda(r - r_0)^2 + \lambda_1(r - r_0)^3 + \lambda_2(r - r_0)^4)$.

Причем

$$\lambda = \sqrt{\frac{V''(r_0)}{8g^{22}}},$$

а λ_1 и λ_2 вычисляются по формулам (3.10).

Доказательство. Будем искать приближенное решение уравнения

$$H\left(\varphi, r, -ih\frac{\partial}{\partial\varphi}, -ih\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi = E\psi \quad (3.4)$$

в виде $\psi = e^{iS/h}U(\varphi, r)$. Для того, чтобы эта функция удовлетворяла уравнению с точностью выше h^2 , должны выполняться

выписанные здесь равенства коэффициентов при степенях h .

При h^0 :

$$e^{iS/h} \left(g^{22} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + V(r) - E_0 \right) = 0 \pmod{o(h^2)}, \quad (3.5)$$

при h^1 :

$$e^{iS/h}.$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left(2g^{22} \frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial U}{\partial r} + 2g^{12} \frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial U}{\partial \varphi} + \left(g^{22} \frac{\partial^2 S}{\partial r^2} + \frac{\partial S}{\partial r} \left(\frac{\partial g^{22}}{\partial r} + \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} \right) \right) U \right) = \\ & = e^{iS/h} iE_1 U \pmod{o(h)}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

при h^2 :

$$e^{iS/h} (D^2(U) - iE_2 U) = 0 \pmod{o(1)}, \quad (3.7)$$

где

$$\begin{aligned} D^2(U) = & -\frac{1}{2} \left(g^{11} \frac{\partial^2 U}{\partial \varphi^2} + g^{22} \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + 2g^{12} \frac{\partial^2 U}{\partial r \partial \varphi} + \frac{\partial^2 (g^{11} U)}{\partial \varphi^2} \right) - \\ & - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (g^{22} U)}{\partial r^2} - \frac{\partial^2 (g^{12} U)}{\partial r \partial \varphi}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Теперь будем последовательно выписывать решения этих трех уравнений с нужной точностью.

Уравнение (3.5) решается точно:

$$S = \int \sqrt{\frac{E_0 - V(r)}{g^{22}(r)}} dr. \quad (3.9)$$

Так как $E_0 = V_0$, то разложение S имеет вид

$$i(\lambda(r - r_0)^2 + \lambda_1(r - r_0)^3 + \lambda_2(r - r_0)^4 + \dots) = i(\lambda(r - r_0)^2(1 + \sigma(r))).$$

Будем считать, что $S = i(\lambda(r - r_0)^2 + \lambda_1(r - r_0)^3 + \lambda_2(r - r_0)^4)$. Можно найти коэффициенты $\lambda, \lambda_1, \lambda_2$. Для этого разложим $V(r)$ до четвертого порядка, а g^{22} по r до второго порядка включительно.

В результате получим:

$$\lambda = \sqrt{\frac{V''(r_0)}{8g^{22}(r_0, \varphi)}}, \quad \lambda_1 = \frac{\sqrt{2}}{12} \frac{\left(\frac{V'''(r_0)}{3} - \frac{\frac{\partial}{\partial r} g^{22}(r_0, \varphi) V''(r_0)}{g^{22}(r_0, \varphi)} \right)}{\sqrt{g^{22}(r, \varphi) V''(r_0)}},$$

$$\lambda_2 = -\frac{\sqrt{2}}{576} (g^{22}(r_0, \varphi)^2 V'''^2 + 6 g^{22}(r_0, \varphi) V''' (\frac{\partial}{\partial r} g^{22}(r_0, \varphi)) V'' - 27 (\frac{\partial}{\partial r} g^{22}(r_0, \varphi))^2 V''^2 + 18 (\frac{\partial^2}{\partial r^2} g^{22}(r_0, \varphi)) V''^2 g^{22}(r_0, \varphi) - 3 V^{(4)} g^{22}(r_0, \varphi)^2 V'') / g^{22}(r_0, \varphi)^{5/2} V''^{3/2}$$
(3.10)

Переходим к уравнению, полученному приравниванием коэффициентов при h^1 . Рассмотрим (3.6) в точке $r = r_0$:

$$g^{22} \frac{\partial^2 S}{\partial r^2} - iE_1 = 0.$$

Значение для E_1 , которое мы получаем из этого соотношения, совпадает с тем, что выписано в (3.2).

Перепишем уравнение (3.6) в виде

$$g^{22} \frac{\partial U}{\partial r} + g^{12} \frac{\partial U}{\partial \varphi} + b(r, \varphi) U = 0, \quad (3.11)$$

где $b(r, \varphi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g^{22}}{\partial r} + \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial S}{\partial r} \left(g^{22} \frac{\partial^2 S}{\partial r^2} - iE_1 \right).$

Второе слагаемое при $r = r_0$ представляет собой неопределенность вида $\frac{0}{0}$. Раскрывая эту неопределенность, получим:

$$b(r_0, \varphi) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g^{22}}{\partial r} + \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} \right) + \frac{1}{6} \frac{V'''}{V''} g^{22} \quad (3.12)$$

Кроме того, нам будут нужны выражения для частных производных $b(r, \varphi)$ при $r = r_0$.

$$b'_\varphi(r_0, \varphi) = \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial r \partial \varphi}(r_0, \varphi) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g^{12}}{\partial \varphi^2}(r_0, \varphi) + \frac{3}{2} \frac{\lambda_1}{\lambda} \frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi}(r_0, \varphi), \quad (3.13)$$

$$b'_r(r_0, \varphi) = \frac{3}{4} \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial r^2}(r_0, \varphi) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g^{12}}{\partial r \partial \varphi}(r_0, \varphi) + 3 \frac{\lambda_2}{\lambda} g^{22}(r_0, \varphi) + \frac{\lambda_1}{\lambda} \left(\frac{3}{2} \frac{\partial g^{22}}{\partial r}(r_0, \varphi) - \frac{1}{4} \frac{V'''(r_0)}{V''(r_0)} g^{22}(r_0, \varphi) \right). \quad (3.14)$$

Представляя U в виде

$$U = u_0(\varphi) + (r - r_0)u_1(\varphi) + \dots, \text{ получаем } g^{22}(r_0, \varphi)u_1 + g^{12}(r_0, \varphi)\frac{\partial u_0}{\partial \varphi} + b(r_0, \varphi)u_0 = 0.$$

$$\text{Откуда } u_1(\varphi) = -\frac{b(r_0, \varphi)}{g^{22}(r_0, \varphi)}u_0(\varphi) - \frac{g^{12}(r_0, \varphi)}{g^{22}(r_0, \varphi)}\frac{\partial u_0}{\partial \varphi}.$$

Продифференцируем (3.11) по r :

$$\begin{aligned} & g^{22}(r_0, \varphi)u_2(\varphi) + g^{12}(r_0, \varphi)\frac{\partial u_1}{\partial \varphi}(\varphi) + b(r_0, \varphi)u_1(\varphi) + \\ & + u_1(\varphi)\frac{\partial g^{22}}{\partial r}(r_0, \varphi) + \frac{\partial g^{12}}{\partial r}(r_0, \varphi)\frac{\partial u_0}{\partial \varphi}(\varphi) + \frac{\partial b}{\partial r}(r_0, \varphi)u_0(\varphi) = 0. \end{aligned}$$

Заметим, что $u_1 = c_1^1\frac{\partial u_0}{\partial \varphi} + c_1^0u_0$, $u_2 = c_2^2\frac{\partial^2 u_0}{\partial \varphi^2} + c_2^1\frac{\partial u_0}{\partial \varphi} + c_2^0u_0$ и так далее.

Рассмотрим уравнение (3.7) в точке $r = r_0$:

$$\begin{aligned} & - \left(g^{11}\frac{\partial^2 U}{\partial \varphi^2} + g^{22}\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + 2g^{12}\frac{\partial^2 U}{\partial r \partial \varphi} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g^{11}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial r^2} + 2\frac{\partial^2 g^{12}}{\partial r \partial \varphi} \right) U - \\ & - \frac{\partial g^{22}}{\partial r}\frac{\partial U}{\partial r} - \frac{\partial g^{12}}{\partial r}\frac{\partial U}{\partial \varphi} - \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi}\frac{\partial U}{\partial r} - \frac{\partial g^{11}}{\partial \varphi}\frac{\partial U}{\partial \varphi} - E_2U = 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$U(r_0, \varphi) = u_0(\varphi), \quad \frac{\partial U}{\partial r}(r_0, \varphi) = u_1(\varphi), \quad \frac{\partial^2 U}{\partial r^2}(r_0, \varphi) = u_2(\varphi).$$

Подставляя выражения для u_1 и u_2 через u_0 , получим обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка с периодическими коэффициентами на функцию u_0 :

$$A(\varphi)u_0''(\varphi) + B(\varphi)u_0'(\varphi) + C(\varphi)u_0(\varphi) = E_2u_0(\varphi). \quad (3.16)$$

Действительно, подставляя

$$u_1(\varphi) = -\frac{b(r_0, \varphi)}{g^{22}(r_0, \varphi)}u_0(\varphi) - \frac{g^{12}(r_0, \varphi)}{g^{22}(r_0, \varphi)}\frac{\partial u_0}{\partial \varphi} \quad (3.17)$$

в выражение для u_2 , получим

$$\begin{aligned} & u_2(\varphi) = \frac{(g^{12})^2}{(g^{22})^2}\frac{\partial^2 u_0}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{g^{22}}\frac{\partial u_0}{\partial \varphi} \cdot \\ & \cdot \left(\frac{g^{12}}{g^{22}} \left(\frac{\partial g^{22}}{\partial r} + \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} \right) + 2b\frac{g^{12}}{g^{22}} - \frac{\partial g^{12}}{\partial r} - \frac{(g^{12})^2}{(g^{22})^2}\frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi} \right) + \\ & + u_0 \left(\frac{b}{g^{22}}\frac{\partial g^{22}}{\partial r} + \frac{g^{12}}{g^{22}}\frac{\partial b}{\partial \varphi} + \frac{b^2}{g^{22}} - \frac{\partial b}{\partial r} - \frac{b g^{12}}{(g^{22})^2}\frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi} \right) \frac{1}{g^{22}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Кроме этого, воспользуемся тем, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial \varphi} = & -\frac{1}{(g^{22})^2} \left(b'_\varphi g^{22} u_0 + b g^{22} \frac{\partial u_0}{\partial \varphi} - \frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi} b u_0 + \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} g^{22} \frac{\partial u_0}{\partial \varphi} \right) - \\ & -\frac{1}{(g^{22})^2} \left(g^{12} g^{22} \frac{\partial^2 u_0}{\partial \varphi^2} - g^{12} \frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi} \frac{\partial u_0}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Таким образом,

$$A = \frac{(g^{12})^2 - g^{11} g^{22}}{g^{22}} = -\frac{1}{g_{11}}, \quad B = -\frac{(g^{12})^2}{(g^{22})^2} \frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi} + 2 \frac{g^{12}}{g^{22}} \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} - \frac{\partial g^{11}}{\partial \varphi}, \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} C = & -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g^{11}}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g^{12}}{\partial r \partial \varphi} + \frac{1}{2} \frac{g^{12}}{g^{22}} \frac{\partial^2 g^{12}}{\partial \varphi^2} + \frac{g^{12}}{g^{22}} \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial r \partial \varphi} + \\ & + \left(\frac{(g^{12})^2}{(g^{22})^2} - \frac{g^{12}}{(g^{22})^2} \frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} - \frac{3}{2} \frac{g^{12}}{(g^{22})^2} \frac{\partial g^{22}}{\partial r} - \frac{1}{6} \frac{V'''}{V''} \frac{g^{12}}{g^{22}} \right) \frac{\partial g^{22}}{\partial \varphi} - \\ & - \frac{1}{24} \frac{\partial g^{22}}{\partial r} \frac{V'''}{V''} + \frac{1}{4} \frac{1}{g^{22}} \left(\frac{\partial g^{12}}{\partial \varphi} \right)^2 + g^{22} \left(-\frac{11}{144} \frac{(V''')^2}{(V'')^2} + \frac{1}{16} \frac{V^{(4)}}{V''} \right) + \\ & - \frac{1}{8} \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial r^2} - \frac{3}{16} \frac{1}{g^{22}} \left(\frac{\partial g^{22}}{\partial r} \right)^2. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Спектр оператора, стоящего в левой части (3.16), дискретный $E_2 = E_{2n}$, n — целое (см. [19]). Доказательство завершено.

В статье [38] разобран пример применения этой конструкции в случае коэффициентов g_{ij} , соответствующих частному случаю редуцированной (см. книгу [31] и ссылки в ней) задачи двух тел на пространстве Лобачевского.

Список использованных источников

1. Арнольд В. И. Математические методы в классической механике. М.: Наука, 1989, 472 С.
2. Боровских А. В. О распространении волн по сети. / А. В. Боровских, А. В. Копытин // Сборник статей аспирантов и студентов математического факультета / Воронеж. гос. ун-т. Воронеж, 1999. С. 21–25.
3. Герасименко Н. И. Задача рассеяния на некомпактных графах. / Н. И. Герасименко, Б. С. Павлов // Теоретическая и математическая физика, том 74, №3, 1988. С. 345–359.
4. Глотов Н. В. Описание решений волнового уравнения на конечном и ограниченном геометрическом графе при условии трансмиссии типа “жидкого” трения. / Н. В. Глотов, В. Л. Прядиев // Вестник Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика. Математика. 2006. №2. С. 185–193.
5. Глотов Н. В. Дифференциальные уравнения на геометрических графах с особенностями в коэффициентах: дис. ... канд. физ.-мат. наук / Н. В. Глотов. Воронеж, 2007. 93 С.
6. Дубровин Б. А. Современная геометрия. Методы и приложения. Т.3: Теория гомологий. / Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко. М.: Эдиториал УРСС, 2001. 288 С.
7. Егоров Ю. В. Линейные дифференциальные уравнения с частными производными. Элементы современной теории. / Ю. В. Егоров и М. А. Шубин. // Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. мат. Фундам. направления ВИНТИ, т. 31, 1988. С. 5-125.
8. Завгородний М. Г. Спектральная полнота корневых функций краевой задачи на графе. // Доклады АН, том 335, №3, 1994. С. 281–283.
9. Кристофидес Н. Теория графов. Алгоритмический подход. М.: Мир, перевод с английского: редактор Г. Гаврилов, 1978. 432 С.
10. Маслов В. П. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. / В. П. Маслов, М. В. Федорюк. — М.: Наука, 1976, 296 С.

11. Маслов В. П. Комплексный метод ВКБ для нелинейных уравнений. — М.: Наука, 1977. 384 С.
12. Маслов В. П. Нелинейные скобки Пуассона. Геометрия и квантование. / В. П. Маслов, М. В. Карасев М.: Наука, 1991. 368 С.
13. Пенкин О. М. О некоторых качественных свойствах уравнений на одномерном клеточном комплексе. О. М. Пенкин, Ю. В. Покорный. // Математические заметки, Том 59, №5, 1996. С. 777–780.
14. Покорный Ю. В. Волновое уравнение на пространственной сети. / Ю. В. Покорный, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских // Докл. РАН. Т. 388, № 1. 2003. С. 16–18.
15. Покорный Ю. В. [и др]. Дифференциальные уравнения на геометрических графах. / Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров. М.: Изд-во “Физматлит”, 2004. 272 С.
16. Прядиев В. Л. Описание решения начально-краевой задачи для волнового уравнения на одномерной пространственной сети через функцию Грина соответствующей краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения. // Современная математика и ее приложения, Том 38: Труды Международной конференции по динамическим системам и дифференциальным уравнениям, Суздаль 2004, Часть 3; Институт кибернетики Академии наук Грузии, Тбилиси, 2006. С. 82–95.
17. Копытин А. В. Об одном представлении решения волнового уравнения на сети. / А. В. Копытин, В. Л. Прядиев // Современные методы теории функций и смежные проблемы. Тезисы докладов. Воронеж, ВГУ, 2001. 313 С.
18. Саймон Б. Операторы Шрёдингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии. / Цикон Х., Фрёзе Р., Саймон Б., Кирш В. — М.: Мир, перевод с английского А. В. Соболева под редакцией Д. Р. Яфаева, 1990. 406 С.
19. Якубович В. А. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. / В. А. Якубович, В. М. Старжинский. М.: Наука, 1972. 718 С.

20. Шепетиллов А. В. Задача двух тел на пространствах постоянной кривизны. I. Связь гамильтониана с группой симметрий и редукция классической системы. // Теоретическая и математическая физика, том 124, № 2, 2000. С. 249-264.
21. Топологические методы в теории гамильтоновых систем. / Сборник статей под ред.: А. В. Болсинова, А. Т. Фоменко, А. И. Шафаревича. — М.: Изд-во “Факториал”, 1998. 320 С.
22. Ali-Mehmeti F. Nonlinear waves in networks. / F. Ali-Mehmeti // Mathematical Research. — 1994. V. 80. 174 p.
23. Barvinok A. Computing the Ehrhart quasi-polynomial of a rational simplex. // Mathematics of Computation, 75, 2006. p. 1449–1466.
24. Cattaneo C., Fontana L. D’Alambert formula on finite one-dimensional networks. // J. of Math. Anal. and Appl. — V. 284, N 2, 2003. p. 403–424.
25. Davies E. B. Pseudospectra of differential operators. // J. Oper. Theory, 43, 2000. p. 243–262.
26. Ehrhart E. Sur les polyèdres rationnels homothétiques à n dimensions. // C. R. Acad. Sci. Paris 254, 1962. p. 616—618.
27. Exner P. Convergence of spectra of graph-like thin manifolds. / P. Exner, O. Post. // J. Geom. Phys. 54, 2005. p. 77–115.
28. Hardy G. H. The lattice points of a right-angled triangle. / Hardy G. H. and Littlewood J. E. // Proc. London Math. Soc. (2) 20, 1921. p. 15—36.
29. Kuchment P. Graph models of wave propagation in thin structures. // Waves in Random Media. V. 12, № 4, 2002. p. 1-24.
30. Kurasov P. Inverse spectral problem for quantum graphs. / P. Kurasov, M. Nowaczyk // J. Phys. A: Math. Gen. 38, 2005. p. 4901–4915.
31. Shchepetilov A. V. Calculus and Mechanics on Two-Point Homogenous Riemannian Spaces Series: Lecture Notes in Physics, Vol. 707, Springer Berlin: 2006. 255 p.

32. Skriganov M.M. Ergodic theory on $SL(n)$, Diophantine approximations and anomalies in the lattice point problem. // *Invent. Math.* 132, no. 1, 1998. p. 1–72.
33. Solomyak M.Z. Schrödinger operators on homogeneous metric trees: spectrum in gaps. / M.Z. Solomyak, A.V. Sobolev // *Rev. Math. Phys.* 14, 2002. p. 421–468.
34. Solomyak M. Laplace and Schrödinger operators on regular metric trees: the discrete spectrum case. // *Function Spaces, Differential Operators and Nonlinear Analysis, The Hans Triebel Anniversary Volume*; D. Haroske, T. Runst, H.-J. Schmeisser (Ed.); Birkhäuser Verlag, 2003. p. 161–181.
35. Integer Points in Polyhedra – Geometry, Number Theory, Algebra, Optimization, a Snowbird Conference Proceedings. // *AMS, Contemporary Mathematics*, vol. 374, Providence, 2005. 191 p.

Работы автора по теме диссертации:

36. Чернышев В.Л. Квазиклассический спектр оператора Шредингера на геометрическом графе. / В.Л. Чернышев, А.И. Шафаревич // *Математические заметки*, том 82, №4, 2007. С. 606—620.
37. Chernyshev V.L. Semiclassical Asymptotics and Statistical Properties of Gaussian Packets for the Nonstationary Schrodinger Equation on a Geometric Graph. / V.L. Chernyshev, A.I. Shafarevich // *Russian Journal of Mathematical Physics*, Vol. 15, No. 1, 2008, p. 25–34.
38. Чернышев В.Л. Асимптотические спектральные серии, соответствующие вырожденным многообразиям для редуцирования квантовой задачи двух тел на пространствах постоянной кривизны // в сб. Я.Г. Синай, А.И. Шафаревич, *Квантовый хаос*. — Москва-Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Институт компьютерных исследований, 2008, С. 185-206.
39. Чернышев В.Л. Аналог правила квантования Бора-Зоммерфельда для геометрических графов. Описание ядер оператора Лапласа. // *Современная математика и ее приложения*, Том 54: Труды Международной конференции

по динамическим системам и дифференциальным уравнениям, Суздаль 2006, Часть 2; Институт кибернетики Академии наук Грузии, Тбилиси, 2008. С. 23–38.

40. Чернышев В. Л. Асимптотические решения дифференциальных уравнений на одномерных клеточных комплексах. // Образование через науку. Тезисы докладов Международной конференции. Москва, 2005 г. — М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2005, С. 593.
41. Чернышев В. Л. Свойства ядер оператора Лапласа на сети. // Современные методы теории краевых задач: Материалы Воронежской весенней математической школы “Понтрягинские чтения - XVII”. — Воронеж: ОАО “Центрально-Черноземное книжное издательство”, 2006. С. 195–196.
42. Чернышев В. Л. Аналог правила квантования Бора-Зоммерфельда для геометрических графов. Описание ядер оператора Лапласа. // Международная конференция по дифференциальным уравнениям и динамическим системам. Тезисы докладов. — Владимир. Владимирский государственный университет, 2006. С. 222–223.
43. Чернышев В. Л. Нестационарное уравнение Шредингера: статистика распространения гауссовых пакетов на геометрическом графе. // Международная конференция по дифференциальным уравнениям и динамическим системам. Тезисы докладов. — Владимир. Владимирский государственный университет, 2008. С. 254–255.
44. Chernyshev V. L. Spectral properties and semi-classical asymptotics for Schrödinger equations on quantum graphs. // Operator theory, analysis and mathematical physics, June 15-22, 2006, Book of abstracts. — Centre for Mathematical Sciences, Lund, Sweden, 2006, p. 9–10.
45. Chernyshev V. L. Geometrical properties and semi-classical asymptotics for Schrödinger equations on quantum graphs. / V. L. Chernyshev, A. I. Shafarevich // Days on Diffraction'2006. International seminar. Abstracts. Saint Petersburg: Universitas Petropolitana, 2006, p. 24.
46. Chernyshev V. L. Dynamics and statistics of gaussian packets on a geometrical graph. // Operator theory, analysis and mathematical physics, 15-22 June, 2008, Abstracts. — Stefan Banach International Mathematical Center, Poland, 2008, p. 5.