МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. Ломоносова

Механико-математический факультет

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

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва
2008

Работа выполнена на кафедре дифференциальной геометрии и приложений Механико-математического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор А. И. Шафаревич.
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, доцент А. В. Боровских (Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова);
	кандидат физико-математических наук А. А. Васильев (Институт космических исследований Российской Академии Наук)
Ведущая организация:	Белгородский государственный университет.

Защита диссертации состоится 21 ноября 2008 года в 16 часов 40 минут на заседании диссертационного совета Д.501.001.84 при Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова по адресу: Российская Федерация, 119991, Москва, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, д. 1, Механико-математический факультет, аудитория 14-08.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Механико-математического факультета МГУ (Главное здание, 14 этаж).

Автореферат разослан 20 октября 2008 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета Д.501.001.84 при МГУ,
доктор физико-математических
наук, профессор А. О. Иванов

Общая характеристика работы.

Актуальность темы.

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[1]. В настоящее время в этой области активно работают П. Экснер, О. Пост, П. Курасов, У. Смелянский[2] и многие другие. Например, исследована обратная спектральная задача, 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, О. М. Пенкина, В. Л. Прядиева, А. В. Боровских, К. П. Лазарева[3] 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[4].

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[5];

[1]См., в частности, статью Н. И. Герасименко, Б. С. Павлов. *Задача рассеяния на некомпактных графах.* // Теоретическая и математическая физика, том 74, 3, 1988. С. 345–359.

[2]См., в частности, обзор P. Kuchment. *Graph models of wave propagation in thin structures.* // Waves in Random Media. V. 12, 4, 2002. p. 1–24 и ссылки в нем.

[3]См., в частности, книгу Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров. *Дифференциальные уравнения на геометрических графах.* М.: Изд-во “Физматлит”, 2004. 272 С. и ссылки в ней.

[4]См., в частности, P. Exner, O. Post. *Convergence of spectra of graph-like thin manifolds.* // J. Geom. Phys. 54, 2005. p. 77–115.

[5]F. Ali-Mehmeti. *Nonlinear waves in networks.* // Mathematical Research. — 1994. V. 80. 174 p.

Ю. В. Покорный, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, А. В. Копытин, серия работ 1999-2003; C. Cattaneo, L. Fontana[6]).

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[7].

Цель работы.

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

Методы исследования.

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

Научная новизна.

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 точ-

[6] C. Cattaneo, L. Fontana. D'Alambert formula on finite one-dimensional networks. // J. of Math. Anal. and Appl. — V. 284, N 2, 2003. p. 403–424.

[7] Н. В. Глотов, *Дифференциальные уравнения на геометрических графах с особенностями в коэффициентах: дис. ... канд. физ.-мат. наук.* Воронеж, 2007. 93 С.

ностью до $O(h^{5/2})$.

Теоретическая и практическая ценность.

Работа носит теоретический характер. Результаты, полученные в диссертационной работе, являются развитием теории квазиклассического приближения и позволяют описывать асимптотические решения для широкого класса задач. Они могут быть использованы в математической физике и теории дифференциальных уравнений.

Апробация работы.

Результаты диссертационной работы докладывались

- на кафедральном семинаре кафедры дифференциальной геометрии и приложений под руководством академика РАН А. Т. Фоменко, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, 2008;
- на семинаре профессора Г. Книпера в Рурском университете Бохума, Бохум, Германия, 2004;
- на Воронежской весенней математической школе "Понтрягинские чтения - XVI", Воронеж, 2005;
- на международном симпозиуме "Образование через науку", МГТУ имени Н. Э. Баумана, Москва, 2005;
- на международной конференции "Дни Дифракции", ПОМИ РАН, Санкт-Петербург, 2006;
- на международной конференции "Теория операторов, анализ и математическая физика" (OTAMP-2006), Лундский университет, Лунд, Швеция, 2006;
- на международной конференции "Дифференциальные уравнения и динамические системы", Суздаль, 2006;
- на международной конференции "Теория операторов, анализ и математическая физика" (OTAMP-2008), Центр имени Банаха ПАН, Бедлево, Польша, 2008;
- на международной конференции "Дифференциальные уравнения и динамические системы", Суздаль, 2008.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в девяти работах автора, список которых приведен в конце автореферата [1–9].

Структура работы.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, выводов и списка литературы. Работа изложена на 78 страницах, содержит 11 иллюстраций и одну таблицу. Библиография включает 46 наименований. Нумерация формул организована по порядку, в соответствии с номером главы и пункта.

Краткое содержание диссертации.

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[8] 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 $\psi \in \oplus \sum\limits_{j=1}^{N} H^2(\gamma_j)$, удовлетворяющих следующим граничным условиям в вершинах:

1. функция ψ непрерывна на Γ;

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

   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.

[8] См., в частности, книгу Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров. *Дифференциальные уравнения на геометрических графах.* М.: Изд-во “Физматлит”, 2004. 272 С. и ссылки в ней.

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 $\phi_j = \frac{1}{h}\int\limits_{\gamma_j}\sqrt{\lambda - V_j(y)}dy$, где γ_j — ребро графа, а $V_j(x)$ — потенциал, ограниченный на j-ое ребро. Равенство определителя этой матрицы нулю (2) и будет аналогом правила квантования.

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

А именно, справедлива

Теорема 1.1. Если $\lambda = O(1)$ — корень уравнения (2), то тогда существует функция $\xi(x)$ (порядка $O(1)$) из области определения оператора $\widehat{H}$ такая, что $\widehat{H}\xi(x) = \lambda\xi(x) + O(h^2)$. То есть λ является точкой h^2-псевдоспектра[9] оператора $\widehat{H}$.

Нас интересует вопрос о том, когда найденное нами λ приближает точное собственное значение оператора $\widehat{H}$. 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.

[9]E. Davies. *Pseudospectra of differential operators.* // J.Oper.Theory, 43, 2000. p. 243–262.

Первым числом Бетти $\beta_1(\Gamma)$ геометрического графа будем называть ранг первой группы гомологий для соответствующего клеточного комплекса[10]. Хорошо известно[11], 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.

Замечание. Для того, чтобы оператор $\widehat{H}$, 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 отмечалась и в других работах[12], 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 (2), 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 применения 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 в лите-

[10]Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко. *Современная геометрия. Методы и приложения. Т.3: Теория гомологий.* М.: Эдиториал УРСС, 2001. 288 С.

[11]Н. Кристофидес. *Теория графов. Алгоритмический подход.* М.: Мир, перевод с английского: редактор Г.Гаврилов, 1978. 432 С.

[12]Например, при доказательстве теоремы 5.9 (стр.102) в книге Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров. *Дифференциальные уравнения на геометрических графах.* М.: Изд-во “Физматлит”, 2004. 272 С.

ратуре[13]. 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 $\sum\limits_j \alpha_j\, sgn(V_j'''(a)) = 0$.

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[14].

[13] См., например, В. П. Маслов. *Комплексный метод ВКБ для нелинейных уравнений.* / М.: Наука, 1977. 384 С.

[14] См., например, книгу Х. Цикон, Р. Фрезе, Б. Саймон, В. Кирш. *Операторы Шредингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии.* — М.: Мир, перевод с английского А. В. Соболева под редакцией Д. Р. Яфаева, 1990. 406 С. 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 $\triangle = dd^* + d^*d$. 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[15].

Нужно отметить близость изучаемых вопросов к некоторым краевым задачам для гиперболических уравнений на сетях[16].

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

$$-h^2\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)=ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}, \tag{3}$$

где V — гладкая функция (потенциал). Соответствующий гамильтониан имеет вид[17]: $H=p^2+V(x,t)$.

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

$$\psi(x,0)=K\exp\left(\frac{i(a(x-x_0)^2+b(x-x_0)+c)}{h}\right). \tag{4}$$

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.

---

[15] В. П. Маслов. *Комплексный метод ВКБ для нелинейных уравнений.* / М.: Наука, 1977. 384 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.; Н. В. Глотов, *Дифференциальные уравнения на геометрических графах с особенностями в коэффициентах: дис. ... канд. физ.-мат. наук.* Воронеж, 2007. 93 С.; Н. В. Глотов, В. Л. Прядиев. *Описание решений волнового уравнения на конечном и ограниченном геометрическом графе при условии трансмиссии типа "жидкого" трения.* // Вестник Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика. Математика. 2006. 2. С. 185–193; А. В. Копытин, В. Л. Прядиев. *Об одном представлении решения волнового уравнения на сети.* // Современные методы теории функций и смежные проблемы. Тезисы докладов. Воронеж, ВГУ, 2001. 313 С.

[17] В. П. Маслов, М. В. Федорюк. *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики.* / М.: Наука, 1976, 296 С.

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 вернутся 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 (4), 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 и ее линеаризацией[18]. Причем начальные значения для амплитуд определяются следующими формулами.

Для отраженного квантового пакета:

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

Для прошедших квантовых пакетов:

$$\varphi_0^{(k,1)}(\beta) = \frac{2\alpha_1}{\alpha_1+\alpha_2+\dots+\alpha_n}\varphi_0^{(1,1)}(\beta), \tag{6}$$

где $k = 2,\dots,n$.

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 $O(h^{1/2})$.

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. Доказано[19], что спектр соответствующего оператора заполняет всю комплексную плоскость.

Нужно отметить схожесть выражений (5) и (6) и формул, полученных для случая гиперболического уравнения[20].

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

[18] В работе указан явный вид этих систем.

[19] М. Г. Завгородний. *Спектральная полнота корневых функций краевой задачи на графе.* // Доклады АН, том 335, 3, 1994. С. 281–283.

[20] Ю. В. Покорный, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских. *Волновое уравнение на пространственной сети.* // Докл. РАН. Т. 388, 1. 2003. С. 16–18.

Как было доказано в предыдущем разделе, квазиклассическое решение задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера с начальными условиями вида (4) имеет вид $\Psi(x,\, t) + O(h^{1/2})$, где $\Psi(x,\, t)$ — конечная сумма гауссовых пакетов. В указанном разделе рассматривается асимптотика функции $\Psi(x,\, t)$ при $t{\to}\infty$, а именно, изучается, как меняется со временем число квантовых пакетов. Заметим, что эта задача отличается от задачи описания асимптотики решения уравнения Шредингера при $t{\to}\infty$, так как оценка остатка справедлива только на конечных временах. С физической точки зрения это означает, что мы рассматриваем времена бóльшие, но много меньшие, чем $1/h$.

В этом разделе изучаются только конечные графы с компактными ребрами. Условия трансмиссии в вершинах берутся такими, чтобы оператор Шредингера был самосопряженным (см. первую главу диссертации). В этом случае из формул (5) и (6) 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 называть *чистыми*[21]. До конца третьей части рассматриваются только такие графы.

Кроме того, из формул (5) и (6) 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[22] и обобщающие теорему Пика. Работа в этой области активно ведется в настоящее время[23]. Результаты, относящиеся к случаю иррациональных координат, восходят к работе Харди и Литтлвуда[24], где

[21] P. Kurasov, M. Nowaczyk. *Inverse spectral problem for quantum graphs.* // J. Phys. A: Math. Gen. 38, 2005. p. 4901–4915.

[22] E. Ehrhart. *Sur les polyèdres rationnels homothétiques à n dimensions.* // C. R. Acad. Sci. Paris 254, 1962. p. 616–618.

[23] См., в частности, статью A. Barvinok. *Computing the Ehrhart quasi-polynomial of a rational simplex.* // Mathematics of Computation, 75, 2006. p. 1449–1466 и ссылки в ней.

[24] G. H. Hardy and J. E. Littlewood. *The lattice points of a right-angled triangle.* // Proc. London Math. Soc. (2) 20, 1921. p. 15–36.

разобран случай прямоугольного треугольника на плоскости. Исследования в этой сфере продолжаются[25].

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

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

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

Учитываются только грани старшей размерности, инцидентные началу координат.

Для почти всех значений $t_1, \ldots, t_v$:

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

Здесь σ_k — стандартный симметрический многочлен степени k.

Отметим, что для случая трех ребер можно[26] 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 — максимальная степень вершин 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

[25] См., в частности, M. M. Skriganov. *Ergodic theory on* $\mathrm{SL}(n)$*, Diophantine approximations and anomalies in the lattice point problem.* // Invent. Math. 132, no. 1, 1998. p. 1–72.; *Integer Points in Polyhedra — Geometry, Number Theory, Algebra, Optimization, a Snowbird Conference Proceedings.* // AMS, Contemporary Mathematics, vol. 374, Providence, 2005. 191 p.

[26] используя результаты, изложенные в G. H. Hardy and J. E. Littlewood. *The lattice points of a right-angled triangle.* // Proc. London Math. Soc. (2) 20, 1921. p. 15–36.

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

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

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

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[27] t_1, t_2, t_3, отношение числа квантовых пакетов на этом отрезке к числу квантовых пакетов на всем графе стремится к выражению

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

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.

[27] См. M. M. Skriganov. *Ergodic theory on* SL(n)*, Diophantine approximations and anomalies in the lattice point problem.* // Invent. Math. 132, no. 1, 1998. p. 1–72.

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 меньшее валентности, называем *числом ветвления* b. Предполагается, 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 М. З. Соломяка, А. В. Соболева[28].

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:

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

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 (4) 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

[28]См., в частности статьи M. Z. Solomyak, A. V. Sobolev. *Schrödinger operators on homogeneous metric trees: spectrum in gaps.* // Rev. Math. Phys. 14, 2002. p. 421–468.; M. Solomyak. *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 и ссылки в них.

время, равное $2L$. 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 в работе). Можно предположить, что для произвольного числа ветвления доля энергии составляет $(b-1)/b$.

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

Теория квазиклассического квантования[29] 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[30] для описания спектральных серий, соответствующих изолированным невырожденным положениям равновесия, неприменима в этой ситуации. Третья глава диссертации посвящена построению спектральных серий в рассматриваемом случае.

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. А именно, справедливо следующее

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

[29] См., например, В. П. Маслов, М. В. Федорюк. *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики.* / М.: Наука, 1976, 296 С.; В. П. Маслов. *Комплексный метод ВКБ для нелинейных уравнений.* / М.: Наука, 1977. 384 С.

[30] См., например, В. П. Маслов. *Комплексный метод ВКБ для нелинейных уравнений.* / М.: Наука, 1977. 384 С.

$\sqrt{\dfrac{V''(r_0)}{8g^{22}}}$, 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, и пусть при $E_2 = E_{2n}$ существует периодическое решение (то есть, E_{2n} — соответствующее собственное значение). Тогда квазиклассическое решение спектральной задачи для оператора Шредингера 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 $U = u_0(\varphi) + u_1(\varphi)(r - r_0) + \dfrac{u_2(\varphi)}{2}(r - r_0)^2$ (где u_1, u_2 вычисляются по приведенным явным формулам, 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 явным формулам.

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 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.

Список литературы

[1] 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.

Чернышеву В. Л. принадлежат точные формулировки и доказательства всех утверждений.

[2] 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.

Чернышеву В. Л. принадлежат точные формулировки и доказательства всех утверждений.

[3] 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.

[4] 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.

[5] 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.

[6] 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.

[7] Чернышев В. Л. Нестационарное уравнение Шредингера: статистика распространения гауссовых пакетов на геометрическом графе. // Международная конференция по диффернциальным уравнениям и динамическим системам. Тезисы докладов. — Владимир. Владимирский государственный университет, 2008. С. 254–255.

[8] Chernyshev V. L. Spectral properties and semi-classical asymptotics for Schrödinger equations on quantum grpahs. // Operator theory, analysis and mathematical physics, June 15-22, 2006, Book of abstracts. — Centre for Mathematical Sciences, Lund, Sweden, 2006, p. 9–10.

[9] 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.