Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Л. Чернышев, А. И. Шафаревич, Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе, *Матем. заметки*, 2007, том 82, выпуск 4, 606–620

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm3853>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.205.225.156

26 апреля 2023 г., 14:28:37

Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе

В. Л. Чернышев, А. И. Шафаревич

Рассматривается задача построения асимптотических решений спектральной задачи для уравнения Шрёдингера на геометрическом графе. Дифференциальные уравнения на множествах такого типа возникают при анализе процессов в системах, допускающих представление в виде набора одномерных континуумов, взаимодействующих только через концы, например, при описании колебаний решетки из струн или стержней, стационарных состояний электронов в молекуле, акустических систем. Интерес к уравнениям Шрёдингера на сетях возрос, в частности, в связи с тем, что объекты нанотехнологий могут описываться тонкими многообразиями, которые в пределе могут стягиваться к графам (см. [1]). Основным результатом данной работы является алгоритм построения правил квантования (обобщающих известные правила квантования Бора–Зоммерфельда), который проиллюстрирован рядом примеров. Также рассматривается задача описания ядер оператора Лапласа, действующего на k -формах, определенных на сети. Кроме того, найдены асимптотические собственные значения, соответствующие собственным функциям, локализованным в вершине графа.

Библиография: 13 названий.

1. Введение

1.1. Общие замечания. Под геометрическим графом (сетью) здесь понимается одномерный клеточный комплекс. Большая часть (в частности, [2]) результатов, касающихся дифференциальных уравнений на сетях, собрана в книге [3]. Там же приведены примеры физических задач, приводящих к дифференциальным уравнениям на графах, и результаты, относящиеся к связи этих задач с теорией уравнений в частных производных. Кроме того, необходимо упомянуть работу [4], содержащую хороший обзор прикладных областей, в которых возникают тонкие графоподобные структуры. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики подробно обсуждается в книге [5].

Работа выполнена при частичной поддержке программы “Развитие научного потенциала высшей школы” (проект РНП 2.1.1.2381), грантов РФФИ-НЦНИ-а 05-01-22002, РФФИ 05-01-00968-а и DFG-RAS 436 RUS 113/572.

1.2. Постановка задачи. Геометрический граф Γ состоит из ребер (гладких регулярных кривых) и вершин (точек). Не исключаются случаи кратных ребер и петель. Ребра обозначаем γ_j , а вершины a_j . Рассматриваются только конечные графы. Через $\Gamma(a)$ обозначается совокупность ребер, примыкающих к вершине a . На каждом ребре выбрана естественная параметризация.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ $\hat{H}$. Зададим дифференциальный оператор на графе (соответствующее уравнение получим, рассматривая для него задачу Штурма–Лиувилля) (см. [3]).

Возьмем на каждом ребре некоторую параметризацию. Например, будем считать что в качестве параметра взято расстояние от вершины. На ребрах наш оператор (обозначим его $\hat{H}$) совпадет с одномерным оператором Шрёдингера:

$$-h^2 \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x). \quad (1)$$

Теперь опишем краевые условия. В вершинах степени больше единицы задаем условия трансмиссии

$$\sum_{\Gamma(a)} \alpha_j \frac{\partial \psi_j}{\partial x}(a) = 0, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}; \quad (2)$$

здесь через $\psi_j(x)$ обозначено ограничение ψ на j -е ребро. И требуем, чтобы значения $\psi_j(a)$ совпадали, т.е. функция ψ , определенная на всем графе, была непрерывна. В вершинах степени один требуем выполнения условий Дирихле (т.е. $\psi(a) = 0$).

Потенциал $V(x)$ предполагаем функцией непрерывной на всем графе и гладкой на ребрах. Через $V_j(x)$ обозначаем потенциал, ограниченный на j -е ребро.

Нас интересует асимптотическая (при $h \rightarrow 0$) спектральная задача для такого оператора: $\hat{H}\psi = \lambda\psi$.

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

В [6] (см. аналогичное утверждение в [3]) доказано, что оператор $\hat{H}$ 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 является самосопряженным, если условия трансмиссии являются натуральными.

В [6] доказана теорема о дискретности спектра оператора $\hat{H}$ на компактном графе в случае самосопряженных условий трансмиссии. В [7] 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.

2. Основные результаты

2.1. Описание ядер. Рассмотрим оператор Лапласа (оператор Шрёдингера 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 [8] 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. Условия трансмиссии имеют вид условий Кирхгофа.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. *Размерность ядра оператора Лапласа, действующего на 0-формах, определенных на геометрическом графе, равна числу связных компонент графа, не содержащих висячих вершин (т.е. не имеющих, в некотором смысле, края).*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Это утверждение непосредственно следует из результатов, изложенных в [3]. Следствие 2 теоремы 3.1 [3; с. 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.

Нужно отметить, 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. рис. 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 1, было получено в недавно вышедшей работе [9] для случая натуральных условий трансмиссии.

Теперь 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

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

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. [8]).

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

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. *Первым числом Бетти* для геометрического графа будем называть (см. [10]) ранг первой группы гомологий для соответствующего клеточного комплекса.

ЗАМЕЧАНИЕ. Хорошо известно (см. [11]), что для геометрического графа первое число Бетти (его еще называют *цикломатическим числом*) равно $n - v + p$. Здесь n – количество ребер, v – количество вершин, p – число связных компонент графа.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. *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 1 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. [11]), т.е. $v - p$. 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.

2.2. Алгоритм вычисления асимптотических при $h \rightarrow 0$ собственных чисел оператора $\hat{H}$. В качестве исходных данных имеем геометрический граф и заданную на нем непрерывную функцию $V(x)$.

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” (т.е. 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 в дальнейшем будем называть λ -вершинами.

Рис. 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. Здесь описан процесс выписывания однородной системы линейных алгебраических уравнений. На каждом ребре мы получаем решение, зависящее от не более, чем двух произвольных постоянных. Краевые условия в вершинах приводят к уравнениям на эти константы. Правило квантования получается как требование существования нетривиального набора постоянных.

Всего уравнений 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 исходящему 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

$$\phi_j = \left(\frac{1}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V_j(y)} dy \right)$$

– интеграл взят по ребру. 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: $\cos(\phi_j - \pi/4)A_j$ в условия непрерывности и $i \sin(\phi_j - \pi/4)A_j$, 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 детерминант нулю (требование существования нетривиальных решений):

$$\det A(\lambda) = 0. \quad (3)$$

Это и есть обобщение правила квантования Бора–Зоммерфельда на случай геометрических графов.

ТЕОРЕМА 1. Если λ – корень уравнения (3), то существует непрерывная на графе и гладкая на ребрах функция $\xi(x)$ порядка $O(1)$ такая, что $\hat{H}\xi(x) = \lambda\xi(x) + O(h^2)$. Другими словами, λ является точкой h^2 -псевдоспектра (см., например, [12]) оператора $\hat{H}$.

Нас интересует вопрос: когда найденное нами λ приближает настоящее 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.

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

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. *Для того чтобы оператор $\hat{H}$, определенный на данном графе, можно было преобразовать в самосопряженный, достаточно, чтобы были выполнены $\beta_1(\Gamma)$ условий ($\beta_1(\Gamma)$ – первое число Бетти графа Γ), а именно: совпадение коэффициентов $\tilde{\alpha}$ (из условий трансмиссии) и $\tilde{p}$ (коэффициента при второй производной) в конечной точке каждой перемышки.*

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. Как уже обсуждалось в п. 1.2, достаточным условием самосопряженности (см. [6], 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. В нашем случае на всех ребрах коэффициент при второй производной (обозначим его p) один и тот же и равен $-h^2$. Мы можем домножить все условия трансмиссии на $-h^2$, при этом они не изменятся. Таким образом, мы можем принять, что все $p = 1$.

Выделим в графе максимальное дерево и сначала будем рассматривать только его. Возьмем в нем 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 перепишется в виде

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

А условия трансмиссии соответственно в начальной (a) и конечной (b) точках имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_1}{k} \frac{\partial \psi_j}{\partial x} + \sum_{\Gamma(a) \setminus \{1\}} \alpha_j \frac{\partial \psi_j}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\beta_1}{k} \frac{\partial \psi_j}{\partial x} + \sum_{\Gamma(a) \setminus \{1\}} \beta_j \frac{\partial \psi_j}{\partial x} &= 0. \end{aligned}$$

Теперь, если мы хотим добиться совпадения коэффициентов в условии трансмиссии ($\tilde{\alpha}$) и в уравнении ($\tilde{p}$), нам остается положить $k = 1/\alpha_1$. 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 все максимальное дерево. 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. Итак, остается просто проверить, выполняются ли равенства $(\tilde{\alpha} = \tilde{p})$.

Отметим, что возможность преобразовать задачу к эквивалентной самосопряженной отмечается при доказательстве теоремы 5.9 (с. 102) в книге [3], но там используется умножение уравнения на каждом ребре на подходящую константу, что не позволяет сохранить глобальную непрерывность функции $V(x)$.

ТЕОРЕМА 2. *Если λ – корень уравнения (3) и выполнены условия утверждения 3, то существует собственное число μ оператора $\hat{H}$ такое, что $\lambda - \mu = O(h^2)$ (т.е. λ является асимптотическим собственным числом).*

Заметим, что проверку условий утверждения 3 можно осуществлять не для исходного графа, а для (возможно, имеющего более простую структуру) графа, полученного на втором шаге алгоритма.

СЛЕДСТВИЕ. *Для случая, когда рассматриваемый граф – дерево, наш алгоритм всегда дает приближение к точке настоящего спектра оператора $\hat{H}$.*

2.3. Доказательство теоремы 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 (т.е. для ребер, не инцидентных λ -вершинам), достаточно применить метод ВКБ. То есть будем искать решение в виде

$$\psi = \exp\left(\frac{iS}{h}\right)(\varphi_0 + \varphi_1 h + \varphi_2 h^2 + \dots). \quad (4)$$

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 (4) только первое слагаемое.

Подставляя (4) в уравнение на ребре и приравнявая 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

$$S = \pm \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy. \quad (5)$$

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

$$\psi = \frac{1}{\sqrt[4]{\lambda - V(x)}} \left(A \exp\left(\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) + B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(z)} dz\right) \right). \quad (6)$$

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, т.е. точкой поворота, решение получаем, применяя метод канонического оператора Маслова. А именно, вне окрестности λ -вершины решение в этом случае будет выглядеть так:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt[4]{\lambda - V(x)}} A \cos\left(\frac{1}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy - \frac{\pi}{4}\right). \quad (7)$$

На каждом ребре (6) 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 (4). А именно, будем искать решение в виде

$$\begin{aligned} \psi = \frac{1}{(\lambda - V(x))^{1/4}} & \left(A \exp\left(\frac{iS}{h}\right) + B \exp\left(-\frac{iS}{h}\right) \right) \\ & + h \left(\chi_1(x) \exp\left(\frac{iS}{h}\right) + \chi_2(x) \exp\left(-\frac{iS}{h}\right) \right). \end{aligned} \quad (8)$$

На ребре мы получим, что эта функция, как и (6), удовлетворяет уравнению с точностью до $O(h^2)$. Теперь обратимся к вершинам и распишем (2) в точке a подробнее. Посчитаем производную выражения в (8), а после домножим на h :

$$\begin{aligned} & i \sqrt[4]{\lambda - V(a)} \left(A \exp\left(\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) - B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) \right) \\ & + h \left(A \exp\left(\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) \right. \\ & \quad \left. + B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) \right) \frac{\partial V}{\partial x}(a) \frac{1}{4(\lambda - V(a))^{5/4}} \\ & + \left(\chi_1(a) \exp\left(\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) \right. \\ & \quad \left. - \chi_2(a) \exp\left(-\frac{i}{h} \int_p^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) \right) i h \sqrt{\lambda - V(a)} + O(h^2). \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом, если взять

$$\chi_1(a) = \frac{i}{4} \frac{\partial V}{\partial x}(a) A (\lambda - V(a))^{-7/4},$$

$$\chi_2(a) = -\frac{i}{4} \frac{\partial V}{\partial x}(a) B(\lambda - V(a))^{-7/4},$$

то 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). Здесь уже произведено сокращение на $(\sqrt{\lambda - V(x)})^q$. Оно возможно, так как $V(x)$ является функцией, непрерывной на Γ .

Выражение для производной

$$\begin{aligned} h\psi' = i\sqrt[4]{\lambda - V(x)} & \left(A \exp\left(\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) \right. \\ & \left. - B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(z)} dz\right) \right) + O(h). \end{aligned} \quad (10)$$

Отметим, что уравнение трансмиссии в точке a аналогичным образом можно сократить на $i/h(\sqrt{\lambda - V(a)})^q$ 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. [5]) вид ограниченного асимптотического решения при наличии точек поворота, приведенный в (7).

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

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 (10). Отсюда следует, что решение можно записать в следующей форме:

$$\psi = 2Ai \frac{1}{(\lambda - V(x))^{1/4}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_a^x \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right). \quad (11)$$

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 выделены, 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. 2. Один отрезок и две обычные вершины

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

$$\psi(a) = 0, \quad \psi(b) = 0. \quad (12)$$

Тогда система для определения A и B выглядит так:

$$\begin{aligned} A + B &= 0, \\ A \exp\left(\frac{i}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) + B \exp\left(-\frac{i}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

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

$$\sin\left(\frac{1}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy\right) = 0. \quad (14)$$

То есть,

$$\frac{1}{h\pi} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy = k, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (15)$$

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. 3. Один отрезок и одна точка поворота

Решение имеет вид (7). В вершине исходного графа решение должно быть равно нулю. Так что получаем условие

$$\cos\left(\frac{1}{h} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy - \frac{\pi}{4}\right) = 0. \quad (16)$$

Окончательно имеем

$$\frac{1}{h\pi} \int_a^b \sqrt{\lambda - V(y)} dy = \frac{3}{4} + k, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (17)$$

3. Некоторые примеры

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

3.1. 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. 4. Две обычные вершины соединены двумя отрезками

Правило квантования имеет вид

$$\cos(\phi_1 + \phi_2)(\alpha_1 - \alpha_2)(\beta_1 - \beta_2) - \cos(\phi_1 - \phi_2)(\alpha_1 + \alpha_2)(\beta_1 + \beta_2) + 2(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1) = 0. \quad (18)$$

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 $\cos(\phi_1 + \phi_2) = 1$, т.е.

$$\frac{1}{2h\pi} \left(\int_a^b \sqrt{\lambda - V_1(y_1)} dy_1 \right) + \frac{1}{2h\pi} \left(\int_a^b \sqrt{\lambda - V_2(y_2)} dy_2 \right) = k, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (19)$$

3.2. Дерево с двумя λ -вершинами. Если мы откажемся от рассмотренного выше условия $\lambda < \min_{[a,b]} V(x)$, то на ребрах 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 рис. 5.

Рис. 5. Две новые вершины и одна старая

Условие 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

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

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

3.3. Граф $K_{1,3}$. Рассмотрим звездный граф $K_{1,3}$, у которого две вершины являются точками поворота (см. рис. 6).

Рис. 6. $K_{1,3}$ с двумя λ -вершинами

Правило квантования для этого графа

$$\begin{aligned} &(\alpha_1 - 2\alpha_2)(\cos(\phi_1 - \phi_2 + \phi_3)) - \sin(\phi_1 - \phi_2 - \phi_3) - 2\alpha_3(\cos(\phi_1 - \phi_2 - \phi_3) \\ &\quad + \sin(\phi_1 - \phi_2 + \phi_3) + \sin(\phi_1 + \phi_2 - \phi_3)) + 2\alpha_3 \cos(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) \\ &\quad + (\alpha_1 + 2\alpha_2)(\cos(\phi_1 + \phi_2 - \phi_3) + \sin(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)) = 0. \end{aligned}$$

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

Выше 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, так как полностью описан, например, в [13]. Если решение локализовано в вершине графа, то верна следующая теорема.

ТЕОРЕМА 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 настоящее 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 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 [5], будем искать решение спектральной задачи на каждом ребре в виде

$$\psi^j = \exp\left(\frac{iS^j}{h}\right)(\varphi_0^j + \varphi_1^j h + \varphi_2^j h^2 + O(h^{5/2})), \quad (20)$$

$$E = E_0 + E_1 h + E_2 h^2 + O(h^{5/2}). \quad (21)$$

Рассмотрим спектральную задачу на каждом ребре отдельно. Приравнявая слагаемые при одинаковых степенях h , получим уравнения на S (которое называется *уравнением Гамильтона–Якоби* и соответствует h^0) и 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

$$S^j = S_2^j(x-a)^2 + S_3^j(x-a)^3 + S_4^j(x-a)^4 + O((x-a)^5). \quad (22)$$

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

$$\begin{aligned} \varphi_0^j &= c_0^j + c_1^j(x-a) + c_2^j(x-a)^2 + O((x-a)^3), \\ \varphi_1^j &= d_0^j + d_1^j(x-a) + d_2^j(x-a)^2 + O((x-a)^3). \end{aligned}$$

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 $h^{1/2}$: $(x-a)(V_0^j c_1^j + V_1^j c_0^j) = E_0 c_1^j(x-a)$. 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.

Авторы благодарят А. В. Боровских, В. Э. Грикурова, П. Б. Курасова, С. Ю. Доброхотова за ряд ценных замечаний.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] P. Exner, O. Post, "Convergence of spectra of graph-like thin manifolds", *J. Geom. Phys.*, **54**:1 (2005), 77–115.
- [2] О. М. Пенкин, Ю. В. Покорный, "О некоторых качественных свойствах уравнений на одномерном клеточном комплексе", *Матем. заметки*, **59**:5 (1996), 777–780.
- [3] Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров, *Дифференциальные уравнения на геометрических графах*, Изд-во Физматлит, М., 2004.
- [4] P. Kuchment, "Graph models for waves in thin structures", *Waves in Random Media*, **12**:4 (2002), 1–24.
- [5] В. П. Маслов, М. В. Федорюк, *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики*, Наука, М., 1976.
- [6] Н. И. Герасименко, Б. С. Павлов, "Задача рассеяния на некомпактных графах", *ТМФ*, **74**:3 (1988), 345–359.
- [7] М. Г. Завгородний, "Спектральная полнота корневых функций краевой задачи на графе", *Докл. АН СССР*, **335**:3 (1994), 281–283.
- [8] Х. Цикон, Р. Фрёзе, Б. Саймон, В. Кирш, *Операторы Шрёдингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии*, Мир, М., 1990.
- [9] P. Kurasov, M. Nowaczyk, "Inverse spectral problem for quantum graphs", *J. Phys. A*, **38**:22 (2005), 4901–4915.
- [10] Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко, *Современная геометрия. Методы и приложения*, т. 3: Теория гомологий, Эдиториал УРСС, М., 2001.
- [11] Н. Кристофидес, *Теория графов: Алгоритмический подход*, Мир, М., 1978.
- [12] E. V. Davies, "Pseudospectra of differential operators", *J. Operator Theory*, **43**:2 (2000), 243–262.
- [13] В. П. Маслов, *Комплексный метод ВКБ для нелинейных уравнений*, Наука, М., 1977.

В. Л. Чернышев

Московский государственный технический университет

им. Н. Э. Баумана

E-mail: vchern@bmstu.ru, vchern@gmail.com

Поступило

23.10.2006

Исправленный вариант

01.03.2007

А. И. Шафаревич

Московский государственный университет

им. М. В. Ломоносова

E-mail: shafar@mech.math.msu.su