

УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА НА ГРАФАХ И СИНГУЛЯРНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ: СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА И КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ПАКЕТОВ*

А.А. Толченников¹, В.Л. Чернышев², А.И. Шафаревич³

¹*Институт проблем механики РАН имени А.Ю. Ишлинского*

²*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”*

³*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова*

shafarev@yahoo.com, vchernyshev@hse.ru, tolchennikovaa@gmail.com

Поступила 10.12.2014

УДК 514.8+517.958+517.984.5

1 Введение

Уравнения Шрёдингера на геометрических графах изучаются, начиная с 30-х годов прошлого века; изначально они использовались в модели свободных электронов в органических молекулах (см., например, [32]). В последние тридцать лет теория дифференциальных уравнений на графах активно развивается в различных направлениях; одно из них — обобщение уравнений Шрёдингера на так называемые декорированные графы — пространства, получаемые из графов заменой вершин на двумерные или трехмерные поверхности. Такие объекты описывают, в частности,

*Работа поддержана РФФИ (гранты 12-01-31196, 13-01-00664, 14-01-00521) и программой поддержки ведущих научных школ (грант НШ-581.2014.1). В статье использованы результаты, полученные в ходе выполнения проекта 15-01-0091, в рамках Программы “Научный фонд НИУ ВШЭ” в 2015- 2016 гг.

сложные молекулы, атомы в которых обладают внутренними степенями свободы; кроме того, пространства переменной размерности естественным образом возникают при изучении квазидвумерных структур, к которым присоединены одномерные нити (провода). Уравнениям на графах и декорированных графах посвящена огромная литература; ссылки и обзоры различных аспектов теории можно найти, например, в книгах [14] и [2], а также в работах [22], [16], [5].

Авторы этой статьи, совместно с коллегами и учениками, развивали квазиклассическую теорию (то есть изучали асимптотические свойства решений уравнений Шрёдингера в квазиклассическом пределе) на графах и декорированных графах. В частности, в [25] был описан алгоритм вычисления асимптотики собственных значений оператора Шрёдингера на компактном графе, обобщающий известные правила Бора—Зоммерфельда. Квазиклассическая теория нестационарных локализованных волновых пакетов (когерентных состояний) на геометрическом графе развивалась в работах [26], [27], [28], [29], [4], [3]. В частности, была обнаружена связь этой теории с известными задачами аналитической теории чисел об асимптотике числа целых точек в многогранниках или о распределении абстрактных простых чисел (см. [37]). Для декорированных графов исследовалась структура ядра оператора Шрёдингера (то есть пространство “вакуумных” состояний), формулы следов и квазиклассическая асимптотика локализованных волновых пакетов; результаты изложены в работах [10], [27], [11], [4], [3].

Ниже приводится обзор упомянутых выше результатов, а также некоторые новые утверждения, полученные в последнее время. В частности, один из разделов работы посвящен компьютерным экспериментам, связанным с изучением статистики локализованных состояний. Структура работы следующая. В п. 2 мы приводим общее определение оператора Шрёдингера на геометрическом графе и обсуждаем квазиклассические свойства собственных значений и собственных функций. В п. 3 изложены результаты, относящиеся к динамике локализованных волновых пакетов на графе; в частности, изучается статистика числа таких пакетов и устанавливается связь с упомянутыми выше вопросами теории чисел. В п. 4 определяются декорированные графы, операторы Шрёдингера на них, и формулируются теоремы о структуре ядра такого оператора, а также об асимптотике следов экспоненты и резольвенты. В п. 5 описаны начальные факты, относящиеся к динамике локализованных пакетов на декорированных графах; п. 6 посвящен компьютерному моделированию.

2 Оператор Шрёдингера на геометрическом графе. Квазиклассические собственные функции

2.1 Определение оператора Шрёдингера на графе

Под геометрическим графом мы будем понимать одномерный комплекс Γ , состоящий из конечного числа вершин, некоторые пары из которых соединены одним или несколькими ребрами; допускается также наличие конечного числа ребер, выходящих из вершины и гомеоморфных полупрямой. На каждом ребре фиксирована параметризация x_j ; ребра будем обозначать через γ_j , вершины — через a_j . Пусть V — непрерывная функция на Γ , гладкая на каждом ребре (потенциал). На каждом ребре (то есть в пространстве $L^2(e_j)$) определен оператор Шрёдингера

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx_j^2} + V;$$

для определенности, будем считать, что он задан условиями Неймана в вершинах. Оператор Шрёдингера \hat{H} на графе Γ определяется из следующих требований.

1. \hat{H} — самосопряженный оператор в $L^2(\Gamma) = \bigoplus_j L^2(e_j)$.
2. При разделении графа на отдельные ребра оператор \hat{H} разделяется на операторы \hat{H}_j .

Сформулируем строгое определение; в $L^2(\Gamma)$ рассмотрим прямую сумму $\hat{H}_0 = \bigoplus_j \hat{H}_j$; область определения этого оператора — второе пространство Соболева $H^2(\Gamma)$. Ограничим оператор на подпространство функций, зануляющихся во всех вершинах графа (это и есть разделение графа на отдельные ребра); ограничение обозначим через \hat{H}_0 . Ясно, что \hat{H}_0 — симметричный оператор в $L^2(\Gamma)$.

Определение 1 Оператором Шрёдингера на графе Γ называется произвольное самосопряженное расширение \hat{H} оператора \hat{H}_0 .

Все операторы Шрёдингера могут быть описаны явно — они задаются краевыми условиями в вершинах графа. Именно: для каждой вершины и для каждого ребра, инцидентного ей, рассмотрим пару $\psi, h\psi'$ — предел функции и ее производной в вершине на соответствующем ребре (производная вычисляется по направлению, входящему в вершину). Образует из этих чисел $2N$ -мерный вектор $\xi = (q, p)$, $q = (\psi_1, \dots, \psi_N)$, $p = (h\psi'_1, \dots, h\psi'_N)$ (здесь N — число краев ребер). Зафиксируем в C^{2N} со стандартной косоэрмитовой формой $[\tilde{\xi}, \xi] = \sum_{j=1}^N (\tilde{p}_j \bar{q}_j - \tilde{q}_j \bar{p}_j)$ лагранжеву плоскость Λ ; каждая плоскость определяет самосопряженный оператор \hat{H} — его область определения состоит из функций, для которых вектор краевых значений ξ лежит в плоскости Λ .

Замечание 1 Каждая лагранжева плоскость — график унитарного оператора; поэтому краевые условия задаются унитарной $N \times N$ матрицей U . Именно: вектор ξ должен удовлетворять равенству

$$(\mathcal{E} - \mathcal{U}_v)q + i(\mathcal{E} + \mathcal{U}_v)p = 0, \quad (1)$$

где \mathcal{E} — единичная $d_v \times d_v$ матрица.

Замечание 2 Общие краевые условия связывают значения функции и ее производных во всех вершинах графа. Более естественно рассматривать отдельные краевые условия в каждой вершине, то есть для каждой вершины задавать унитарную $d \times d$ матрицу (d — степень вершины) и требовать выполнения равенств (1) для ребер, инцидентных данной вершине. Лагранжева плоскость Λ в этом случае — прямая сумма плоскостей, соответствующих отдельным вершинам. В дальнейшем мы рассматриваем именно такие “локальные” краевые условия.

Замечание 3 Иногда оператор Шрёдингера (или Штурма — Лиувилля) задают по-другому: вместо краевых условий (1) требуют непрерывности функции на всем гра-

фе и так называемых условий α -гладкости ([2]). Такой оператор, вообще говоря, несамосопряжен, и спектр его может быть весьма экзотическим — например, совпадать со всей комплексной плоскостью.

2.2 Квазиклассический спектр и собственные функции

Асимптотика при $h \rightarrow 0$ собственных значений оператора Шрёдингера на компактном графе описана в работе [25] в случае так называемых натуральных краевых условий (или условий Кирхгофа). Именно: по графу и по функции V выписывается квадратная матрица $A(\lambda, h)$; в [25] доказано следующее утверждение.

Теорема 1 Пусть $\lambda(h)$ — корень уравнения

$$\det A = 0. \quad (2)$$

Тогда существует собственное значение λ_0 оператора Шрёдингера, для которого $\lambda_0 = \lambda + o(h)$.

Замечание 4 Уравнение (2) представляет собой обобщение известного правила квантования Бора—Зоммерфельда и сводится к нему, если граф состоит из одного ребра. Асимптотические собственные функции конструктивно вычисляются.

В теории квазиклассического квантования хорошо известно, что у оператора Шрёдингера на гладком многообразии часто существуют асимптотические собственные значения и собственные функции, соответствующие устойчивым положениям равновесия классической гамильтоновой системы; в частности, собственные функции локализованы в малой окрестности этой точки. Естественный вопрос: существуют ли аналогичные собственные функции для оператора на графе, локализованные в окрестности его вершины? Известно, что в случае натуральных краевых условий (условий Кирхгофа) таких функций нет — собственная функция из вершины распределяется на инцидентные этой вершине ребра. Оказывается, если краевые условия находятся в общем положении, такие функции, вообще говоря, существуют. Именно: справедливо следующее утверждение.

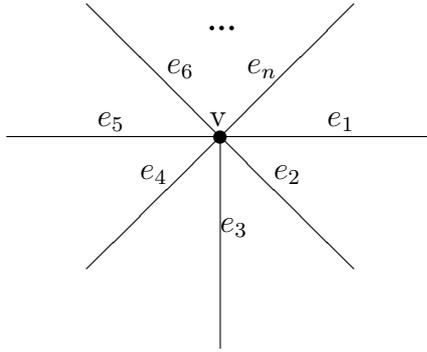
Теорема 2 (А. Э. Ильмаяров) Пусть v — вершина графа Γ , причем у матрицы U , определяющей краевое условие в точке v , существует собственное значение Λ , т.ч. $\Im \Lambda > 0$. Тогда существует собственное значение λ_0 оператора Шрёдингера вида

$$\lambda_0 = V(v) - \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda - 1}{\Lambda + 1} \right)^2 + O(h).$$

Соответствующая асимптотическая собственная функция при $h \rightarrow 0$ локализована в малой окрестности вершины v (то есть в любой точке, находящейся на не зависящем от h расстоянии от этой вершины, собственная функция есть $o(h^N)$ для любого N). В окрестности вершины асимптотическая собственная функция для любого N имеет вид $\psi(x) = e^{-\frac{S(x)}{h}} \varphi(x, h) + O(h^N)$, где S, φ — гладкие функции, φ — многочлен по h .

Из приведенной теоремы, вообще говоря, не вытекает, что точная собственная функция тоже локализована вблизи вершины. Рассмотрим два простейших примера, в которых собственные значения и собственные функции вычисляются точно. В этих примерах $V = 0$.

2.2.1 Сходящиеся в одной точке n лучей



Утверждение 1 Пусть $E \neq 1$ — собственное значение матрицы U . Тогда $\lambda = -\frac{1}{2} \left(\frac{1-E}{1+E} \right)^2$ — собственное значение \hat{H} ; собственная функция при $h \rightarrow 0$ локализована в малой окрестности вершины.

2.2.2 Две вершины, соединенные ребром длины l ; кроме того, к вершинам присоединены соответственно n и t бесконечных ребер



Соответствующие унитарные матрицы обозначим $\mathcal{U}_0, \mathcal{U}_1$.

Утверждение 2 Пусть c, k — решение системы уравнений

$$\det \left[(\mathcal{E} - \mathcal{U}_0) - ik(\mathcal{E} + \mathcal{U}_0) \text{diag} \left(\frac{1-c}{1+c}, 1, \dots, 1 \right) \right] = 0$$

$$\det \left[(\mathcal{E} - \mathcal{U}_1) - ik(\mathcal{E} + \mathcal{U}_1) \text{diag} \left(\frac{1-ce^{2\kappa l}}{ce^{2\kappa l} + 1}, 1, \dots, 1 \right) \right] = 0.$$

Тогда $\lambda = k^2$ — собственное значение \hat{H} ; соответствующая собственная функция при $h \rightarrow 0$ локализована в малой окрестности конечного ребра.

3 Динамика локализованных пакетов на графе

Ниже множество всех ребер, смежных с вершиной A , обозначается через $\Gamma(A)$, а e и v обозначают количество ребер и число вершин соответственно.

Нестационарное уравнение Шрёдингера на геометрическом графе Γ — это уравнение вида

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi. \quad (3)$$

Мы выбираем начальные условия в виде узкого пакета, сконцентрированного в окрестности одной точки z_0 , которая лежит на k -м ребре графа:

$$\psi(z, 0) = h^{-1/4} K(z_k) \exp\left(\frac{iS_0(z_k)}{h}\right). \quad (4)$$

$$S_0(x) = w(z_k - z_0)^2 + p_0(z_k - z_0),$$

здесь $z_0 \in \gamma_k$, $p_0 \in \mathbb{R}$, и w комплексное число, с $\text{Im}(w) > 0$, $K(z_j)$ — “срезающая” функция с носителем на ребре γ_k , $K = 1$ в окрестности точки z_0 . Множитель $h^{-1/4}$ введен, чтобы начальная функция $\psi(z_k, 0)$ имела порядок один в $L^2(\Gamma)$ норме. В силу положительности мнимой части w начальное условие сконцентрировано в малой окрестности z_0 : $\psi(z_k, 0) = O(h^\infty)$ при $|z_k - z_0| \geq \delta > 0$ (δ не зависит от h). Для простоты мы предполагаем, что $\frac{1}{2}p_0^2 + Q(z_0) > Q(z), \forall z \in \Gamma$, что гарантирует, что на ребрах нет точек поворота (см., например, [33], [35]). Отметим, что в случае присутствия точек поворота нужно просто продеформировать Γ : вырезать из графа точки поворота и рассмотреть связную компоненту, содержащую z_0 .

Асимптотическое решение задачи Коши (3)–(4) описано в [26], [28], где приведены явные формулы.

Теорема 3 (См. [26], [28]) *Решение задачи Коши (3)–(4) для $t \in [0, T]$ (T не зависит от h) выражается следующей формулой:*

$$\psi = \sum_{j=1}^{N(t)} h^{-1/4} \varphi_j(z_j, t) e^{iS_j(z_j, t)/h} + O(\sqrt{h}), \quad (5)$$

где $S_j(z_j, t) = S_j^0(t) + P_j(t)(z_j - Z_j(t)) + W_j(t)(z_j - Z_j(t))^2$, причем $P_j(t), Z_j(t)$ являются решениями гамильтоновой системы

$$\dot{z} = H_p, \quad \dot{p} = -H_z, \quad H = \frac{1}{2}p^2 + Q.$$

Эти решения определяются по начальным условиям на выбранном ребре $Z_k(0) = z_0$, $P_k(0) = p_0$; каждая траектория, приходящая в вершину в некоторый момент времени, порождает новые траектории, выходящие по всем ребрам, инцидентным этой вершине, с одинаковым импульсом, равным p . Функции $\varphi_j(z_j, t)$, $S_j^0(t)$ и $W_j(t)$ явно выражены через решение гамильтоновой системы, $\text{Im}W_j(t) > 0$. Через z_j мы снова обозначаем координаты на ребре графа, но индекс сейчас соответствует номеру пакета, а не номеру ребра (то есть координаты z_j могут совпадать для разных значений j).

Каждое слагаемое в сумме (5) локализовано в малой окрестности некоторой точки $Z_j(t)$. Здесь мы предполагаем, что все слагаемые, локализованные в окрестности одной точки, образуют один гауссов пакет. В дальнейшем, через $N(t)$ мы будем

обозначать общее число таких пакетов, то есть общее число слагаемых в (5), локализованных в разных точках.

В статьях [26], [28] было описано рассеяние гауссова пакета в вершине графа. Говоря точнее, было доказано, что любой пакет, приходящий в вершину валентности m , порождает m пакетов, расходящихся по всем ребрам инцидентным вершине. Импульс для этих пакетов одинаков (обозначен выше как P_j), а амплитуды определяются краевыми условиями в вершине. Для случая условий Кирхгофа в вершине валентности m амплитуда делится в следующем отношении: $(2 - m)/m$ для отраженного пакета и $2/m$ для каждого из $m - 1$ прошедших пакетов.

Мы будем изучать асимптотику $N(t)$ при $t \rightarrow \infty$. Нужно заметить, что эта задача отличается от задачи описания асимптотического поведения решения уравнения Шрёдингера при $t \rightarrow \infty$, так как оценка погрешности $O(\sqrt{h})$ справедлива только на конечных временах. Это означает, что мы сначала переходим к пределу при $h \rightarrow 0$ и только потом к пределу при $t \rightarrow \infty$. Более подробно подобные вопросы обсуждаются, например, в статье [39].

Обозначим через t_j время прохождения j -го ребра, то есть время за которое траектория соответствующей гамильтоновой системы проходит ребро. Если начальные условия зафиксированы, то времена прохождения являются аналогами длин ребер.

Замечание 5 Время прохождения любого ребра графа одинаково для всех гауссовых пакетов, которые проходят по этому ребру (при заданных начальных условиях).

В этом параграфе мы предполагаем, что соответствующие краевым условиям лагранжевы плоскости находятся в общем положении. Этого условия достаточно для того, чтобы быть уверенным в том, что когда k гауссовых пакетов пришло одновременно в вершину валентности v , то v пакетов начнут двигаться по ребрам, инцидентным этой вершине.

В [28] было доказано, что число гауссовых пакетов на произвольном конечном компактном графе с несоизмеримыми ребрами удовлетворяет следующей асимптотической формуле:

$$N(t) = Ct^{e-1} + o(t^{e-1}),$$

где e означает число ребер.

Этот результат был получен сведением задачи подсчета числа пакетов к задаче вычисления количества целых точек, лежащих на гранях расширяющегося симплекса. Грубо говоря, главная идея заключается в следующем. Рассмотрим моменты времени, в которые число пакетов может измениться. Это может произойти, только когда пакет приходит в вершину. С точностью до некоторого постоянного слагаемого это происходит в моменты времени вида $n_1 t_1 + \dots + n_e t_e$, где n_1, \dots, n_e — неотрицательные целые. Можно показать, что число пакетов увеличивается, когда хотя бы одно из чисел n_j было равно нулю. Доказано, что главный член асимптотики числа пакетов определяется количеством моментов, когда ровно одно $n_j = 0$. Количество таких моментов, не превосходящих t , равно числу целых точек n_1, \dots, n_e в объединении симплексов, определяемых неравенствами $n_1 t_1 + \dots + n_e t_e \leq t$; так как только одно $n_j = 0$, размерность каждого симплекса равна $e - 1$. Обзор результатов, относящихся к хорошо известной теоретико-числовой задаче о подсчете числа целых точек в симплексе с действительными вершинами, может быть найден, например, в статье [30].

Дальнейшие результаты (как, например, теорема о равномерности распределения или теорема о формуле для коэффициента C) основаны не только на приближении числа целых точек в многограннике его объемом, но и на нетривиальном теоретико-числовом анализе дальнейших поправок, проведенном в [31] (см., также, обзор в книге [38]). Поэтому эти результаты справедливы не для всех несоизмеримых времен прохождения, а только для почти всех.

Теорема 4 (О равномерности распределения, см. [4]) *Рассмотрим конечный компактный геометрический граф Γ . Рассмотрим отрезок со временем прохождения τ на произвольном ребре Γ . Пусть $N_\tau(t)$ означает число гауссовых пакетов на этом отрезке к моменту времени t . Тогда для почти всех несоизмеримых (то есть линейно независимых над \mathbb{Q}) t_1, \dots, t_e , выполняется:*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{N_\tau(t)}{N(t)} = \frac{\tau}{\sum_{j=1}^e t_j}.$$

Таким образом, для этого случая распределение пакетов асимптотически равномерно.

Теорема 5 (Старший коэффициент числа пакетов, см. [4]) *Рассмотрим конечный компактный геометрический граф Γ . Для почти всех несоизмеримых t_1, \dots, t_E коэффициент при старшем члене асимптотики имеет следующий вид:*

$$C = \frac{1}{2^{v-2}(e-1)!} \frac{\sum_{j=1}^e t_j}{\prod_{j=1}^e t_j}. \quad (6)$$

В статье [29] обсуждаются вопросы описания асимптотики количества пакетов для случая линейно зависимых над \mathbb{Q} времен прохождения ребер.

В этой ситуации, вообще говоря, нарушается установленное в [27], [28] соответствие между количеством гауссовых пакетов и числом узлов целочисленной решетки, попадающих на некоторые грани расширяющегося симплекса, однако, анализ их количества все равно возможен.

Сперва рассмотрим произвольный граф, для которого ранг системы времен прохождения равен единице. Оказывается, что число пакетов в этом случае растет только на конечном отрезке времени и стабилизируется на некотором значении, которое зависит от длин циклов.

Утверждение 3 *Пусть дан конечный связный граф с временами прохождения ребер $t_1 = n_1 t_0, \dots, t_e = n_e t_0$, где $n_i \in \mathbb{N}$ и $\text{НОД}(n_1, \dots, n_e) = 1$.*

Тогда, начиная с некоторого времени, количество пакетов будет постоянным. При этом:

1) Если существует цикл с временем прохождения, которое не делится нацело на $2t_0$, то

$$N(T) = 2 \sum_{i=1}^e n_i,$$

2) В противном случае

$$N(T) = \sum_{i=1}^e n_i.$$

Теперь рассмотрим ситуацию, когда ранг системы времен прохождения ребер равен двум для случая звездного графа с тремя ребрами. В статье [29] найден главный член асимптотики количества гауссовых пакетов.

Утверждение 4 Пусть есть звездный граф из трех ребер e_1, e_2, e_3 с временами прохождения $t_1 = nt_0, t_2 = mt_0, t_3$, где $n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N}$ ($\text{НОД}(n, m) = 1$), а t_3 таково, что ранг t_1, t_2, t_3 над \mathbb{Q} равен 2. Тогда количество пакетов асимптотически равно

$$N(T) = \frac{T}{2} \left(\frac{m+n}{t_3} + \frac{1}{t_0} \right) + o(T).$$

Старший коэффициент был получен при подсчете числа целых точек, попавших не на все двумерные грани симплекса, как в случае линейно независимых ребер, а на некоторые узкие области (полоски), лежащие на них.

Два приведенных утверждения и большое количество компьютерных экспериментов, проведенных вместе с О. В. Соболевым и Е. А. Бурковым, позволяют предположить, что в общем случае число пакетов на конечном компактном графе растет как T в степени $\text{rank}\{t_j\} - 1$, где $\text{rank}\{t_j\}$ — это ранг системы времен прохождения над \mathbb{Q} .

В общем случае схема нахождения асимптотики числа пакетов для случая конечных компактных графов выглядит так. По геометрическому графу строится некоторый многогранник в пространстве с заданной целочисленной решеткой. На этом многограннике размечается область, подсчет числа целых точек в которой и дает число пакетов.

4 Оператор Лапласа на декорированных графах, ядро, условия типа непрерывности, формулы следов

Неформально говоря, декорированные графы — это топологические пространства, полученные отождествлением концов ребер графа с точками на замкнутых ориентируемых римановых многообразиях размерности 1, 2 или 3. Операторами на таких пространствах можно моделировать гамильтониан заряженной частицы в массиве фуллеренов. Подобные объекты впервые появились в работе Б. С. Павлова [5], где изучалось движение электронов в однородных кристаллах из точечных атомов. Среди работ на эту тему можно отметить диссертацию И. С. Лобанова [6], в которой изучались спектральные свойства операторов Шрёдингера на периодических декорированных графах, работу Й. Брюнинга и В. А. Гейлера [22], в которой изучались свойства операторов на замкнутых многообразиях с прикрепленными полупрямыми, а также работы [7], [8].

4.1 Оператор Лапласа на декорированных графах

Определение 2 Рассмотрим набор отрезков $\{I_i = [0, l_i]\}_{i=1}^n$, а также набор гладких, замкнутых, связных, римановых многообразий $\{M_i\}_{i=1}^m$ с условием $\dim M_i \leq 3$. отождествим концы отрезков с точками на многообразиях, причем так, чтобы разным концам отрезков соответствовали разные точки на многообразиях. Полученное топологическое пространство X будем называть *декорированным графом*.

Обозначим $m(i), m'(i)$ — номера многообразий, к которым примыкает i -ый отрезок. Обозначим $q_i \in M_{m(i)}, q'_i \in M_{m'(i)}$ — точки примыкания i -го отрезка.

Пусть $\Delta_i (i = 1, \dots, m)$ — самосопряженные операторы Лапласа-Бельтрами на M_i , $\Delta_{i+m} (i = 1, \dots, n)$ — самосопряженный оператор $-\frac{d^2}{dx^2}$ на L_i с условиями Неймана. Так как $\dim M_i \leq 3$, то $D(\Delta_i) = H^2(M_i) \subset C(M)$ (по теореме вложения Соболева) и можно определить операторы $\Delta_{0,i} \subset \Delta_i (i = 1, \dots, m+n)$:

$$D(\Delta_{0,i}) = \{f \in D(\Delta_i) \mid f(q) = 0, \text{ если } q \text{ — точка примыкания отрезка к } M_i\}$$

$$(i = 1, \dots, m)$$

$$D(\Delta_{0,i}) = \{f \in D(\Delta_i) \mid f(0) = f(l_{i-m}) = 0\} (i = m+1, \dots, m+n)$$

Пусть $H_0 = \bigoplus_{i=1}^{m+n} \Delta_{0,i}$ — это симметрический оператор с конечными равными индексами дефекта $(4n, 4n)$ (см. [9]).

Теорема 6 ([22]) *Любая функция $f \in D(\Delta_{0,i}^*)$ имеет следующее асимптотическое разложение в окрестности точки вклейки q :*

$$f(x) = a_j(f)F_0(x, q_j) + b_j(f) + R(x),$$

где $a_j(f), b_j(f) \in \mathbb{C}$,

$$F_0(x, q) = \begin{cases} -\frac{1}{2}d(x, q), & \text{если } \dim M = 1; \\ -\frac{1}{2\pi} \ln d(x, q), & \text{если } \dim M = 2; \\ \frac{1}{4\pi} d(x, q)^{-1}, & \text{если } \dim M = 3. \end{cases}$$

$$R(x, q) = \begin{cases} o(d(x, q)), & \text{если } \dim M = 1; \\ o(1), & \text{если } \dim M = 2 \text{ или } \dim M = 3. \end{cases}$$

$d(x, q)$ — геодезическое расстояние.

Определение 3 Всякое самосопряженное расширение H оператора H_0 будем называть *оператором Лапласа-Бельтрами на X* .

Определим линейные операторы $\Gamma^{(j)} : D(H_0^*) \rightarrow \mathbb{C}^{4n} (j = 1, 2)$:

$$\Gamma_1^{(1)}(f) = a_{q_1}(f_{m(1)}), \quad \Gamma_1^{(2)}(f) = b_{q_1}(f_{m(1)}),$$

$$\Gamma_2^{(1)}(f) = a_{q'_1}(f_{m'(1)}), \quad \Gamma_2^{(2)}(f) = b_{q'_1}(f_{m'(1)}),$$

...

$$\Gamma_{2n-1}^{(1)}(f) = a_{q_n}(f_{m(n)}), \quad \Gamma_{2n-1}^{(2)}(f) = b_{q_n}(f_{m(n)}),$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{2n}^{(1)}(f) &= a_{q'_n}(f_{m'(n)}), \quad \Gamma_{2n}^{(2)}(f) = b_{q'_n}(f_{m'(n)}). \\
\Gamma_{2n+1}^{(1)}(f) &= -f'_{m+1}(0), \quad \Gamma_{2n+1}^{(2)}(f) = f_{m+1}(0), \\
\Gamma_{2n+2}^{(1)}(f) &= f'_{m+1}(l_1), \quad \Gamma_{2n+2}^{(2)}(f) = f_{m+1}(l_1), \\
&\dots \\
\Gamma_{4n-1}^{(1)}(f) &= -f'_{m+n}(0), \quad \Gamma_{4n-1}^{(2)}(f) = f_{m+n}(0), \\
\Gamma_{4n}^{(1)}(f) &= f'_{m+n}(l_n), \quad \Gamma_{4n}^{(2)}(f) = f_{m+n}(l_n).
\end{aligned}$$

Каждой лагранжевой плоскости $\Lambda \subset \mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$ соответствует самосопряженное расширение H^Λ оператора H_0 такое, что $D(H^\Lambda) = \Gamma^{-1}(\Lambda)$ (см. [22]).

Теорема 7 ([10])

$$\ker H^\Lambda \simeq L \cap \Lambda,$$

где L — лагранжева плоскость в $\mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$.

Можно написать явную параметризацию плоскости L (см. [10]).

Расширение с условиями непрерывности

Вот два естественных соображения, которые позволяют фиксировать лагранжеву плоскость Λ , задающую оператор Лапласа—Бельтрами H^Λ на X .

1 условие. Потребуем, чтобы все непрерывные функции на X из $D(H_0^*)$ (с условиями Неймана на отрезках) лежали в $D(H^\Lambda)$. Это приводит к следующему условию на плоскость Λ : $K \subset \Lambda$, где K — $2n$ -мерная плоскость в $\mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$ вида:

$$K = \{(x_i^1, x_i^2) \mid x_i^1 = 0 \ \forall i = 1, \dots, 4n, \ x_j^2 = x_{j+2n}^2 \ \forall j = 1, \dots, 2n\}$$

2 условие. Потребуем, чтобы все функции из $D(H^\Lambda)$ имели совпадающие значения регулярных частей в точках склейки (но функциям разрешается иметь сингулярности в этих точках). То есть

$$D(H^\Lambda) \subset \{f = (f_1, \dots, f_{m+n}) \in D(H_0^*) \mid f_{i+m}(0) = b_{q_i}(f_{m(i)}),$$

$$f_{i+m}(l_i) = b_{q'_i}(f_{m'(i)}) \ \forall i = 1, \dots, n\}.$$

Это условие означает, что $\Lambda \subset S$, где S — $6n$ -мерная плоскость в $\mathbb{C}^{4n} \oplus \mathbb{C}^{4n}$ вида:

$$S = \{(x_i^1, x_i^2) \mid x_j^2 = x_{j+2n}^2 \ \forall j = 1, \dots, 2n\}.$$

Утверждение 5 [10] Существует единственная лагранжева плоскость

$$\Lambda_0 = \left\{ \begin{pmatrix} -Y \\ Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ X \end{pmatrix} \mid X, Y \in \mathbb{C}^{2n} \right\},$$

удовлетворяющая условию $K \subset \Lambda_0 \subset S$, где K и S — введенные выше плоскости.

Теорема 8 ([10]) 1) Для оператора H^{Λ_0} на декорированном графе (полученном декорацией конечного графа Γ) выполнено следующее неравенство:

$$\beta_0 \leq \dim \ker H^{\Lambda_0} \leq \beta_0 + \beta_1$$

где $\beta_i = \dim H_i(\Gamma, \mathbb{C})$.

2) Сколь угодно малым изменением длин ребер можно добиться того, чтобы $\dim \ker H^{\Lambda_0} = \beta_0$.

3) Если связный декорированный граф \tilde{X} получен приклеиванием к связному декорированному графу X новых ребер и многообразий, $\tilde{\Gamma}$ и Γ — их соответствующие графы, \tilde{d} и d — размерности ядер операторов Лапласа с условиями непрерывности на \tilde{X} и X , то выполнено следующее неравенство:

$$\beta_1(\Gamma) - d \leq \beta_1(\tilde{\Gamma}) - \tilde{d}.$$

Несложно привести пример (см. [10]) декорированного графа, для которого верхняя оценка этой теоремы достигается.

4.2 След квадрата резольвенты и экспоненты от оператора Лапласа на декорированном графе

Связь характеристик многообразия со спектром оператора Лапласа, построенного по римановой метрике многообразия, проявляется наиболее явно в асимптотических формулах следа для квадрата резольвенты $(\Delta + z^2)^{-2}$ ($z \rightarrow \infty$) и экспоненты оператора $e^{-\Delta t}$ ($t \rightarrow 0$). Для компактного риманова многообразия M (см. [12])

$$\text{Tr} e^{-\Delta t} \sim (4\pi t)^{-\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k,$$

где $a_k = \int_M a_k(x) dw_x$, $a_k(x)$ — полиномиальные выражения от компонент тензора кривизны и их ковариантных производных. В частности, $a_0(x) = 1$, и $6a_1(x)$ — скалярная кривизна.

Отсюда, применяя преобразование Меллина, мы можем найти след квадрата резольвенты. Например, при $\dim M = 2$:

$$\text{Tr}(\Delta + z^2)^{-2} \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k k!}{4\pi z^{2k+2}} = \frac{\text{Vol}(M)}{4\pi z^2} + \frac{\chi(M)}{6z^4} + \dots$$

Обобщением этих формул на случай декорированных графов посвящена диссертация С.В. Рогановой [11]. Для этих целей использовалась формула Крейна, выражающая разность резольвент двух дизъюнктивных расширений (то есть области определений которых пересекаются по нулю) через граничные операторы $\Gamma^{(i)}$. В отличие от классического случая риманова многообразия, формула для следа квадрата резольвенты оператора Лапласа на декорированных графах содержит в качестве коэффициентов при степенях z рациональные функции от $\ln z$. Получается так называемое псевдоасимптотическое разложение, разложение по $z^{-n} \ln^{-m} z$, $n, m \in \mathbb{N}$. Такое разложение, если существует, единственно. С.В. Рогановой было вычислено

псевдоасимптотическое разложение для расширений специального вида с условиями "локальности" (граничные условия в точке склейки содержат только значения функций, производных и коэффициенты при особенностях в этой точке). Это означает, что граничные условия имеют вид $\Gamma^{(2)} = \Lambda \Gamma^{(1)}$, где Λ — блочно-диагональная матрица.

Теорема 9 ([11]) *Рассмотрим декорированный граф, состоящий из двумерных многообразий M_i и ребер $\{L_i\}_{i=1}^n$ с длинами l_i . Рассмотрим оператор Лапласа–Бельтрами H^Λ , задаваемый граничными условиями вида $\Gamma^{(1)} f = \Lambda \Gamma^{(2)} f$, где Λ — состоящая из четырех диагональных блоков матрица:*

$$\Lambda = \begin{pmatrix} (\lambda_{i,i}) & (\lambda_{i,i+N}) \\ (\lambda_{i,i+N}) & (\lambda_{i+N,i+N}) \end{pmatrix}, \quad N = 2n, \quad \lambda_{i+N,i+N} \neq 0 \quad (i = 1, \dots, N)$$

Пусть $a_{k,i}$ — коэффициенты разложения следа экспоненты обычного оператора Лапласа–Бельтрами на многообразии M_i . Тогда след квадрата резольвенты $R(p) = (H^\Lambda + p)^{-1}$ имеет следующее p -псевдоасимптотическое разложение при $p \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \text{Tr} R^2 &= \frac{1}{4\pi p} \sum_{M_i} \text{Vol}(M_i) + \frac{1}{6p^2} \sum_{M_i} \chi(M_i) + \frac{1}{4p^{\frac{3}{2}}} \sum_{L_j} l_j + \frac{N}{2p^2} + \\ &\quad + \sum_{M_i} \sum_{k=2} a_{ki} \frac{\Gamma(k+1)}{4\pi p^{k+1}} \\ &\quad + \frac{c_2(\ln p)}{p^2} + \frac{c_{\frac{5}{2}}(\ln p)}{p^{\frac{5}{2}}} + \frac{c_3(\ln p)}{p^3} + \frac{c_{\frac{7}{2}}(\ln p)}{p^{\frac{7}{2}}} + O\left(\frac{1}{p^4}\right), \end{aligned}$$

где c_n — рациональные функции, которые имеют следующие $\ln p$ -разложение:

$$\begin{aligned} c_2 &= \frac{N}{\ln p} + \sum_{i=1}^N \left(1 - 2\gamma - 4\pi \lambda_{i,i} + 4\pi \frac{|\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}} \right) \frac{1}{\ln^2 p} + O\left(\frac{1}{\ln^3 p}\right), \\ c_{\frac{5}{2}} &= \sum_{i=1}^N \frac{3}{4\lambda_{i+N,i+N}} + \sum_{i=1}^N \frac{3\pi |\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}^2} \frac{1}{\ln p} + O\left(\frac{1}{\ln^2 p}\right), \\ c_3 &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}^2} + \sum_{i=1}^N \frac{2a_{1i} \lambda_{i+N,i+N}^3 + 8\pi |\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}^3} \frac{1}{\ln p} + O\left(\frac{1}{\ln^2 p}\right), \\ c_{\frac{7}{2}} &= \sum_{i=1}^N \frac{5}{4\lambda_{i+N,i+N}^3} + \sum_{i=1}^N \frac{15\pi |\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}^4} \frac{1}{\ln p} + O\left(\frac{1}{\ln^2 p}\right). \end{aligned}$$

Применяя преобразование Лапласа $\text{Tr}(t e^{-tH^\Lambda}) \doteq \text{Tr}(H^\Lambda + p)^{-2}$, получаем следующее утверждение.

Теорема 10 ([13]) *В условиях предыдущей теоремы:*

$$t \cdot \text{Tr}(e^{-tH^\Lambda}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{M_i} \text{Vol}(M_i) + \frac{1}{6} \sum_{M_i} \chi(M_i) t + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{L_j} l_j t^{\frac{1}{2}} + \frac{N}{2} t +$$

$$+ \sum_{M_i} \sum_{k=2} \frac{a_{ki}}{4\pi} t^k +$$

$$+ s_1(\ln t)t + s_{\frac{3}{2}}(\ln t)t^{\frac{3}{2}} + s_2(\ln t)t^2 + s_{\frac{5}{2}}(\ln t)t^{\frac{5}{2}} + O(t^3),$$

где s_n — функции, которые имеют следующее $\ln t$ -разложение:

$$s_1 = -N \frac{1}{\ln t} + \left(\sum_{i=1}^N \left[1 - 2\gamma - 4\pi\lambda_{i,i} + 4\pi \frac{|\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}} \right] - \Gamma'(2)N \right) \frac{1}{\ln^2 t} + O\left(\frac{1}{\ln^3 t}\right),$$

$$s_{\frac{3}{2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}} - \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \frac{\pi |\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}^2} \frac{1}{\ln t} + O\left(\frac{1}{\ln^2 t}\right),$$

$$s_2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}^2} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{2a_{1i}\lambda_{i+N,i+N}^3 + 8\pi |\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}^3} \frac{1}{\ln t} + O\left(\frac{1}{\ln^2 t}\right),$$

$$s_{\frac{5}{2}} = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\lambda_{i+N,i+N}^3} - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \frac{\pi |\lambda_{i,i+N}|^2}{\lambda_{i+N,i+N}^4} \frac{1}{\ln t} + O\left(\frac{1}{\ln^2 t}\right).$$

Теорема 11 ([13]) Для оператора H^{Λ_0} с условиями “непрерывности”

$$\begin{aligned} \text{Tr}(H^{\Lambda_0} + z^2)^{-2} &= \sum_{M_i} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_{ki}k!}{4\pi z^{2k+2}} + \sum_{L_j} \left(\frac{l_j}{4z^3} + \frac{1}{2z^4} \right) \\ &+ \sum_{k=4}^{\infty} \frac{c_k(\ln z^2)}{z^k}, \end{aligned}$$

где c_k — рациональные функции

$$c_4(\ln z^2) = \frac{N}{\ln z^2} + \frac{N(1-2\gamma)}{\ln^2 z^2} + O\left(\frac{1}{\ln^3 z^2}\right),$$

$$c_5(\ln z^2) = 3\pi N \frac{1}{\ln z^2} + (-6\pi\gamma + 8\pi)N \frac{1}{\ln^2 z^2} + (12\pi\gamma^2 - 32\pi\gamma + 8\pi)N \frac{1}{\ln^3 z^2} + O\left(\frac{1}{\ln^4 z^2}\right),$$

$$c_6(\ln z^2) = \sum_{i=1}^N 5\pi a_{1i} \frac{1}{\ln z^2} + \sum_{i=1}^N (16\pi^2 - 10\pi\gamma a_{1i} + 8\pi a_{1i}) \frac{1}{\ln^2 z^2} +$$

$$+ \sum_{i=1}^N (-32\pi^2\gamma + 20\pi\gamma^2 a_{1i} + 48\pi^2 - 32\pi\gamma a_{1i}) \frac{1}{\ln^3 z^2} + O\left(\frac{1}{\ln^4 z^2}\right),$$

$$c_7(\ln z^2) = \sum_{i=1}^N 28\pi^2 a_{1i} \frac{1}{\ln^2 z^2} + \sum_{i=1}^N (80\pi^3 - 112\pi^2\gamma a_{1i} + 64\pi^2 a_{1i}) \frac{1}{\ln^3 z^2} +$$

$$+ \sum_{i=1}^N (-160\pi^3\gamma + 256\pi^3 - 384\pi^2\gamma a_{1i} + 336\pi^2\gamma^2) \frac{1}{\ln^4 z^2} + O\left(\frac{1}{\ln^5 z^2}\right).$$

Таким образом, часть разложения, не содержащая логарифмов, (содержащая степени z), совпадает с разложением квадрата резольвенты для прямой суммы операторов Лапласа на многообразиях и операторов Лапласа с условиями Неймана на отрезках, то есть

$$\sum_{M_i} \sum_k \frac{b_{ki}}{4\pi z^{2k+2}} + \sum_{L_j} \left(\frac{l_j}{4z^3} + \frac{1}{2z^4} \right).$$

5 Динамика обобщенных гауссовых пакетов на декорированных графах

Пусть Γ_d — декорированный граф; рассмотрим задачу Коши (3) — (4). Мы предполагаем, что точка z_0 лежит на ребре Γ_d (не на поверхности) и что начальная энергия достаточно велика: $\frac{1}{2}p_0^2 + Q(z_0) > Q(z), \forall z \in \Gamma_d$. Опишем сперва, что происходит в момент рассеяния. Для этого достаточно рассмотреть простейшую ситуацию: полу-прямая, соединенная с многообразием.

5.1 Рассеяние на многообразии

Пусть Γ_d — полупрямая, приклеенная к многообразию M в единственной точке q . Пусть t_0 — момент рассеяния (то есть момент, в который траектория системы Гамильтона на полупрямой достигает точки q). Рассмотрим сферу в T_q^*M : $L_0 : |p| = |P(t_0)|$. Пусть g_t — поток Гамильтоновой системы на M с гамильтонианом $H = \frac{1}{2}|p|^2 + Q$ и пусть L_t — сдвиг сферы L_0 за время t : $L_t = g_t L_0$.

Теорема 12 *На некотором интервале времени $t \in (t_0, t_0 + \varepsilon)$ решение задачи Коши (3) — (4) имеет вид*

$$\psi = \begin{cases} A(t)e^{\frac{iS(z,t)}{\hbar}}, & z \in \mathbb{R}_+, \\ K_{L_t}[B(x,t)], & x \in M. \end{cases} + O(\sqrt{\hbar})$$

Здесь $S(z,t)$ имеет тот же вид, что и выше (см. теорему 5), K_{L_t} — канонический оператор Маслова на изотропном многообразии L_t с комплексным ростком (см. [33], [34]), функции A и B выражаются явными формулами через матрицу U краевых условий.

Доказательство основано на изучении функции $K_{L_t}[B]$ при $t \rightarrow t_0+$; центральное наблюдение состоит в том, что эту функцию можно склеить с экспонентой так, чтобы выполнялись краевые условия.

Замечание 6 При $\hbar \rightarrow 0$ носитель функции ψ стремится к $\pi(L_t)$, где $\pi : T^*M \rightarrow M$ — естественная проекция. В общем положении ψ локализована вблизи поверхности коразмерности 1; назовем функцию $K_{L_t}[B]$ *обобщенным гауссовым пакетом* на гиперповерхности. Множество $\pi(L_t)$ назовем *носителем обобщенного гауссова пакета*. Отметим, что соответствующий классический объект представляет собой *не отдельную частицу, а поверхность, заполненную частицами, выпущенными из точки склейки*. Классические импульсы всех этих частиц равны по абсолютной величине — длина вектора импульса $|P(t_0)|$ совпадает с импульсом входящей частицы. В то же время, направления импульсов произвольны. В частности, если потенциал V равен нулю, частица, попадающая в точку склейки, порождает на поверхности функцию, локализованную вблизи геодезической сферы с центром в точке склейки (например, если M — стандартная сфера, функция локализуется вблизи параллелей).

Замечание 7 Пусть Γ_d — произвольный декорированный граф. В течение некоторого промежутка времени (окрестность момента t_0) решение имеет вид, описанный в

предыдущей теореме. Затем носитель обобщенного гауссова пакета достигает одной из точек склейки (эта точка, в частности, может совпадать с исходной точкой первого рассеяния); в этот момент появляется новый пакет, распространяющийся по отрезку, приклеенному в этой точке, и еще один, распространяющийся по многообразию. Когда один из этих пакетов, в свою очередь, достигает точки склейки, появляется еще два пакета, и так далее. Легко видеть, что, в любой момент времени t , число пакетов, локализованных на ребрах Γ_d (не на многообразиях), совпадает с числом пакетов, локализованных на некоторых отмеченных ребрах нового графа $\tilde{\Gamma}$. Именно: вершины $\tilde{\Gamma}$ соответствуют точкам склейки на Γ_d , а ребра соответствуют временам t_j прохождения траекторий гамильтоновой системы вдоль ребер Γ_d , а также между точками склейки на многообразиях. Две вершины нового графа соединены ребром, если существует траектория, соединяющая эти точки. Выберем ребра $\tilde{\Gamma}$, соответствующие отрезкам в Γ_d ; для изучения числа пакетов на этих ребрах можно воспользоваться результатами раздела 3.

5.2 Статистика обобщенных гауссовых пакетов на декорированных графах

Пусть Γ_d – декорированный граф с конечным набором одномерных ребер. Для произвольного конечного t решение задачи Коши имеет вид: $\psi = \sum_j \psi_j + O(\sqrt{\hbar})$, где ψ_j – обобщенные гауссовы пакеты. Пусть $N(t)$ – число пакетов, локализованных на отрезке γ_j на ребре Γ_d . Пусть t_j означает время прохождения траектории классической системы Гамильтона ребра или расстояния между двумя точками вклейки на многообразии.

Рассмотрим две возможные ситуации. Сначала мы будем предполагать, что *есть только конечное число времен* t_1, \dots, t_M . Примером такой ситуации может быть стандартная сфера, к которой приклеен в двух несопряженных точках отрезок. Геодезическими на сфере будут две дуги большого круга, таким образом, эквивалентный граф будет иметь две вершины и три ребра.

Теорема 13 Пусть t_j линейно независимы над \mathbb{Q} . Тогда для почти всех t_1, \dots, t_M и для почти всех лагранжесевых плоскостей Λ_j , задающих условия вклейки

$$N(t) = Ct^{M-1} + o(t^{M-1}),$$

при $t \rightarrow \infty$.

Для C справедливо соотношение:

$$C = \frac{\sum_{\gamma_j \in \Gamma_d} t_j}{2^{2e-2} (M-1)! \prod_{all} t_j}.$$

Здесь $2e$ – число точек q_j вклейки ребер (e – число одномерных γ_j), M – число времен прохождения t_j .

Аналогично, на основании результатов для геометрических графов, можно получить теорему о распределении числа гауссовых пакетов. Пусть δ – отрезок на произвольном ребре Γ_d . Обозначим через N_δ число пакетов, попавших на δ .

Теорема 14 Для почти всех t_1, \dots, t_M и для почти всех лагранжевых плоскостей Λ_j , задающих условия вклейки выполняется:

$$\frac{N_\delta(t)}{N(t)} \rightarrow \frac{t_\delta}{\sum_j t_j},$$

при $t \rightarrow \infty$.

Предположим теперь, что число времен t_1, \dots, t_M бесконечно. Так, например, может быть в ситуации, когда отрезок приклеили к двумерному плоскому тору. Число пакетов в этом случае растёт быстрее любого многочлена (см. [4]). Асимптотические оценки для некоторых подобных ситуаций описаны в препринте [3]. В этой статье мы обсуждаем их в последнем разделе, посвященном компьютерным экспериментам. Оценки были получены с использованием результатов из абстрактной аналитической теории чисел (см. [37]) и недавних результатов, посвященных изучению статистики газа Бозе—Маслова (см. статью [36] и ссылки в ней).

6 Компьютерные эксперименты, посвященные моделированию распространения гауссовых пакетов на декорированных графах

Целью этого раздела является описание экспериментов, посвященных моделированию распространения гауссовых пакетов на декорированных графах. Распространение волнового фронта на поверхности происходит вдоль геодезических, поэтому было интересно изучить поверхности с разным устройством множества геодезических, соединяющих две точки. Эксперименты проводились для декорированных графов, имеющих следующий вид: одна вершина (её заменяли на поверхность) с петлей (двумя различными “точками вклейки”). Велся подсчет $N(t)$ на вклеенном ребре. Ниже приводится описание программ, которые позволяют моделировать поведение гауссовых пакетов на некоторых таких графах. Полученные в опытах данные были сверены с асимптотическими оценками роста $N(t)$, выведенными аналитически в статьях [3], [4]. Эксперименты проводились в сотрудничестве с Е. А. Бурковым. Программы были написаны на языке $C++$, графики построены в MATLAB.

Далее длину вклеенного ребра обозначим L , A и B – точки вклейки этого ребра, AB_k – k -й путь движения волнового фронта по многообразию от A до B . В момент времени $t = 0$ единственный пакет на графе находится в середине “внешнего” ребра и движется по направлению к точке A .

6.1 Декорированный граф, полученный приклеиванием ребра к сфере

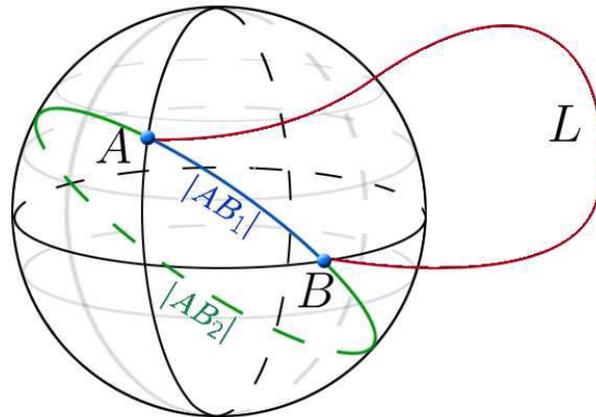


Рисунок 1 – Декорированный граф, полученный из стандартной сферы.

На стандартной сфере геодезическими являются дуги больших кругов и только они, поэтому “волновой фронт”, вышедший из точки A , достигнет точки B по двум направлениям за время $a = |AB_1|$ и $b = |AB_2|$. В качестве точек вклейки мы берем две произвольные точки, так чтобы они не были сопряжены друг другу. Эквивалентный граф выглядит следующим образом:

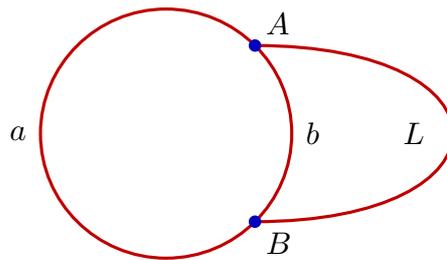


Рисунок 2 – Эквивалентный граф для случая сферы.

Можно заметить, что главный член асимптотики $N(t)$ зависит от $r = \text{rank}(a, b, L)$:

1. Если $r = 1$, то $N(t) = O(1)$, то есть число пакетов стабилизируется (пример – см. рисунок 3);
2. Если $r = 2$, то $N(t) = O(t)$ (пример – см. рисунки 4, 5);
3. Если $r = 3$, то $N(t) = O(t^2)$ (пример – см. рисунки 6, 7).

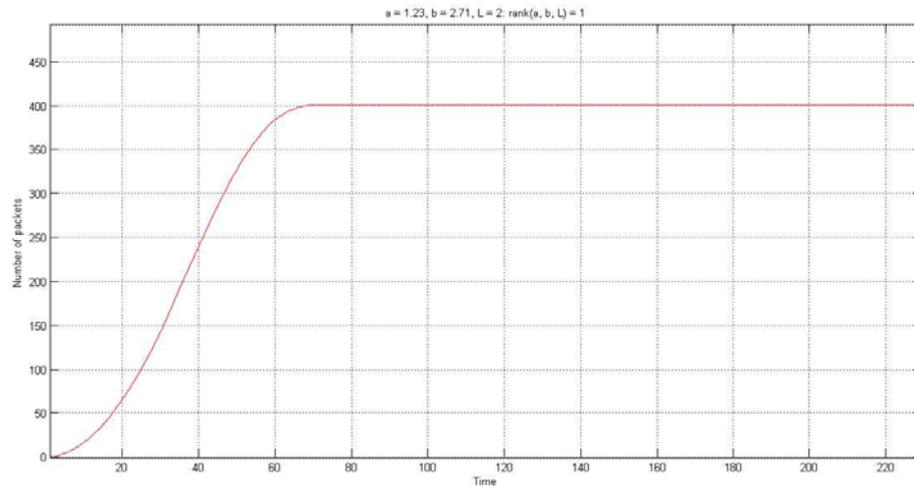


Рисунок 3

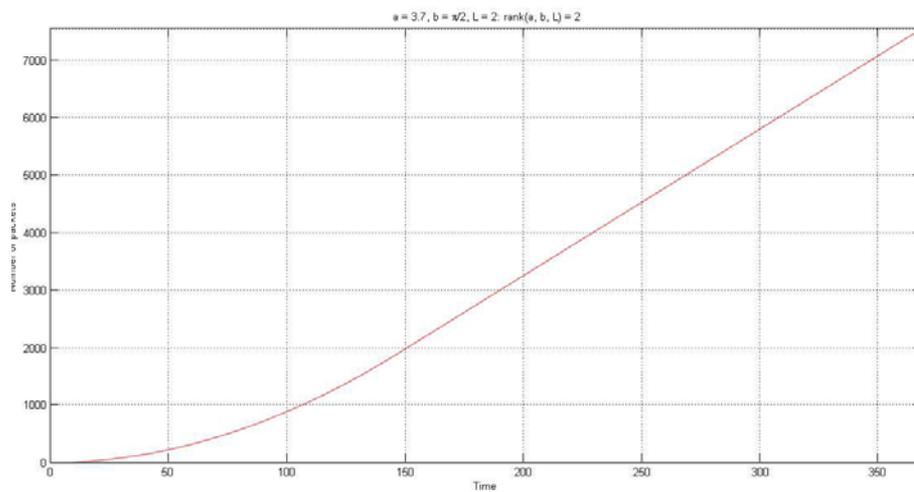


Рисунок 4

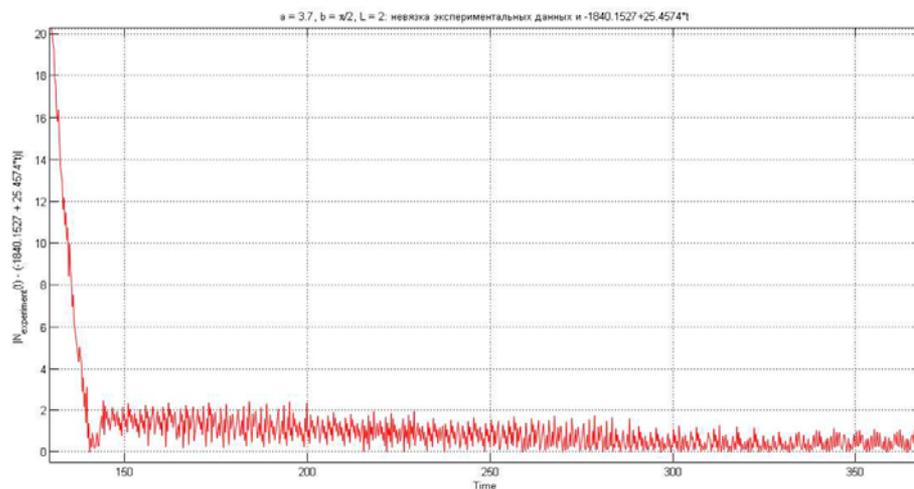


Рисунок 5

Третий результат соответствует оценке, полученной в [4] (Теорема 4.1):

$$N(t) = Ct^{M-1} + o(t^{M-1}),$$

где M – число ребер графа (в данном случае $M = 3$).

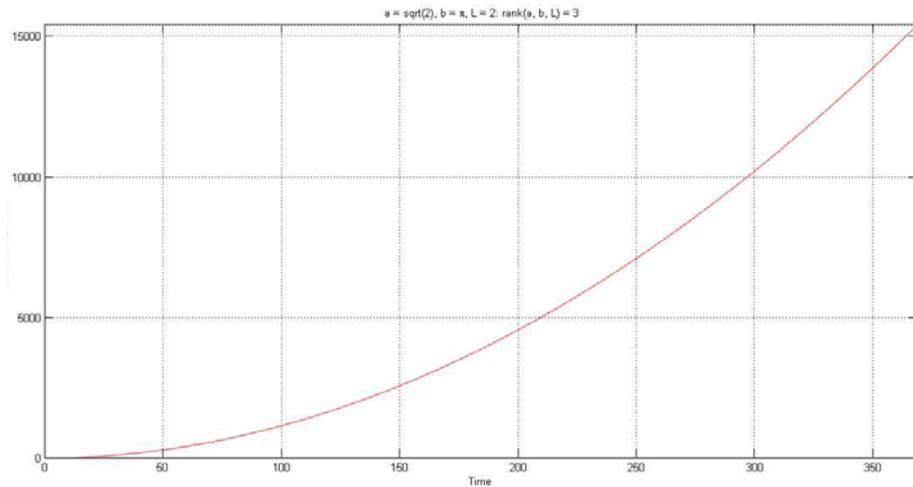


Рисунок 6

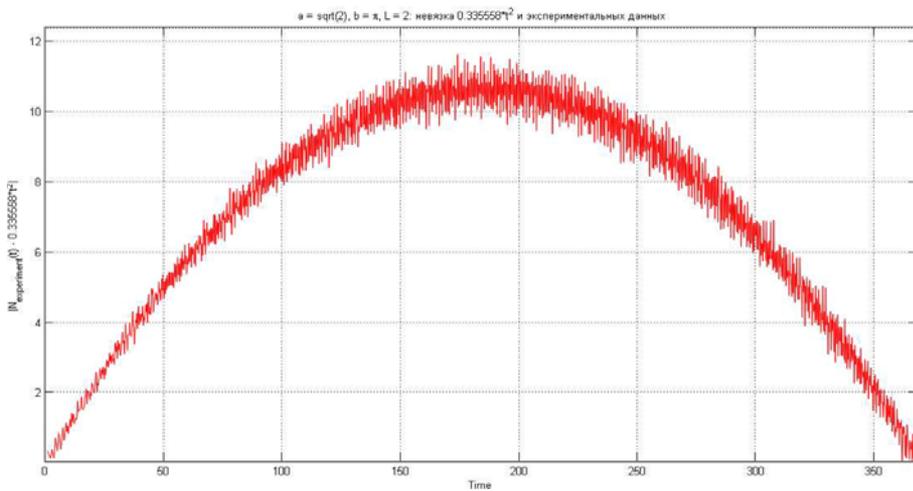


Рисунок 7

Замечание 8 Эквивалентный граф для декорированного графа, полученного из стандартной сферы, оказался конечным компактным. Соответственно, рост $N(t)$ оказался степенным, а главный член асимптотики имеет вид Ct^{r-1} , где $r = \text{rank}(a, b, L)$ (то есть рангу времен прохождения ребер над \mathbb{Q}). Аналогичный результат для случая звездных графов с тремя ребрами был разобран в статье [29].

6.2 Декорированный граф, полученный приклеиванием ребра к цилиндру

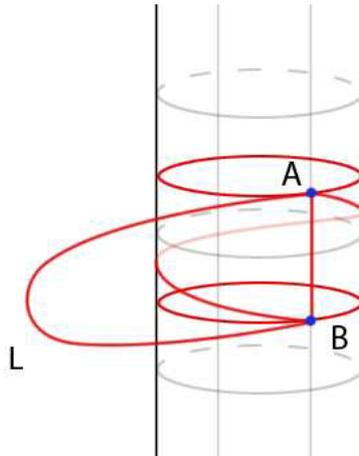


Рисунок 8 – Декорированный граф, полученный приклеиванием ребра к цилиндру.

Рассмотрим цилиндр с длиной окружности b , на котором точки A и B расположены на одной образующей, и кратчайшее расстояние между ними $|AB_0| = a$:

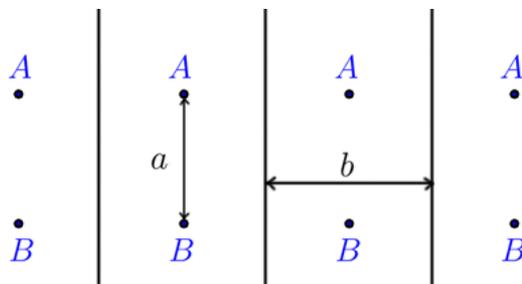


Рисунок 9 – Развёртка цилиндра

Волновой фронт, вышедший из точки A , возвращается обратно за время b и достигает точки B за время $|AB_k| = \sqrt{(kb)^2 + a^2}$, $k \in \mathbb{Z}_+$. Эквивалентный бесконечный граф выглядит следующим образом:

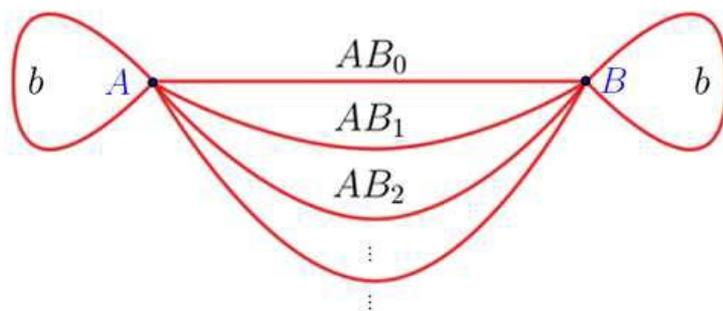


Рисунок 10 – Эквивалентный граф для случая цилиндра

В [3] (Теорема 2.1) дана следующая оценка роста $N(t)$:

$$\ln N(t) \leq \pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}} (1 + o(1)).$$

Пример работы программы для $L = 8$, $a = \sqrt{2}$, $b = \sqrt{5}$, подтверждающий оценку:

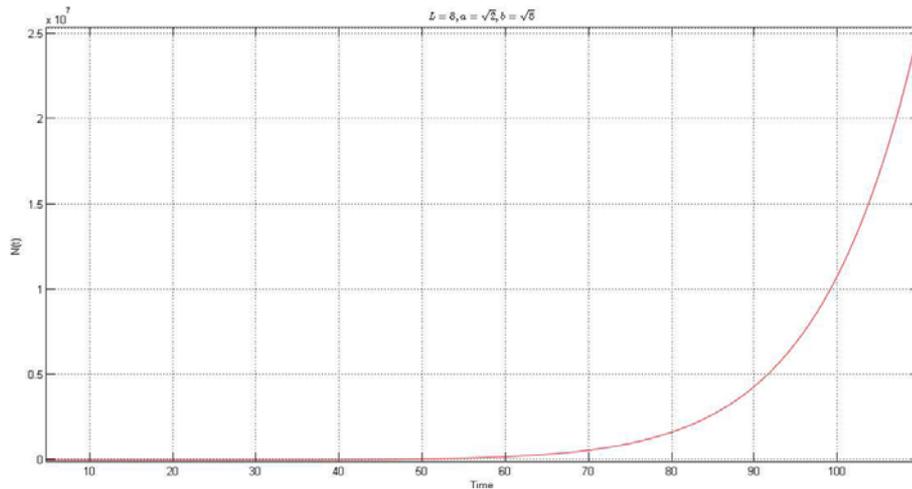


Рисунок 11

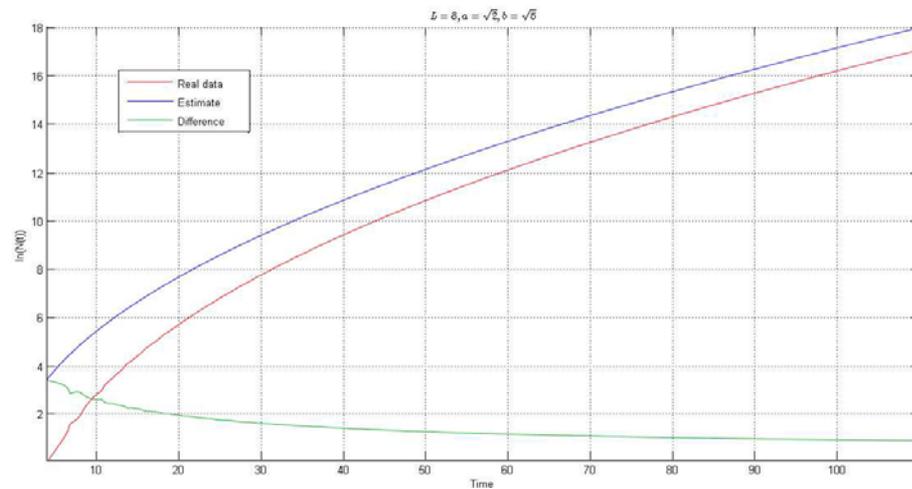


Рисунок 12

Замечание 9 Эквивалентный граф для декорированного графа, полученного из цилиндра, оказался бесконечным. Соответственно, рост $N(t)$ является субэкспоненциальным. Полученный по экспериментальным данным график $\ln N(t)$ отличается от оценки из статьи [3] сдвигом на некоторую постоянную, то есть разность принадлежит классу $o(t)$, что соответствует теореме. Более подробно значение этой разности обсуждается в подразделе 6.4.

6.3 Декорированный граф, полученный вклеиванием ребра в плоский тор

Рассмотрим развертку плоского тора – прямоугольник со сторонами a и b . Пусть, без ограничения общности, A совпадает с вершиной прямоугольника, а B имеет на прямоугольнике координаты c и d ($0 \leq c < b$, $0 \leq d < a$). Тогда $AB = \sqrt{c^2 + d^2}$.

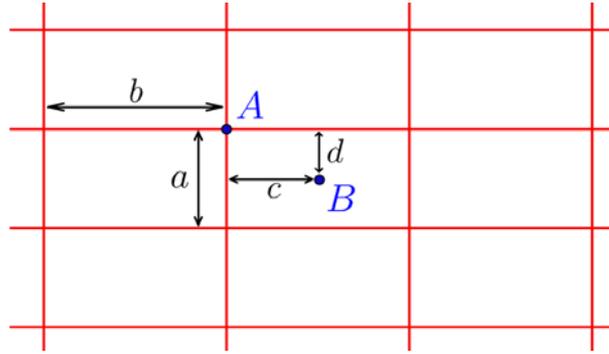


Рисунок 13 – Развёртка плоского тора

“Волна”, исходящая из точки A , возвращается обратно через промежутки времени $|AA_i| \in \{\sqrt{(pa)^2 + (qb)^2} \mid p, q \in \mathbb{Z}, GCD(p, q) = 1\}$ и достигает точки B через промежутки времени $|AB_i| \in \{\sqrt{(pa + d)^2 + (qb + c)^2} \mid p, q \in \mathbb{Z}\} \cup \{L\}$. Может случиться, что некоторые из этих путей в развертке лежат на одной прямой: тогда нужно учитывать только кратчайший из этих путей. Определив длины путей, можно рассмотреть эквивалентный бесконечный граф.

В [3] (Теорема 3.1) дана оценка следующая оценка роста $N(t)$:

$$\ln N(t) \leq 3 \left(\frac{5\pi}{8ab} \zeta(3) \right)^{\frac{1}{3}} t^{\frac{2}{3}} (1 + o(1)),$$

причем равенство достигается, когда входные параметры задачи линейно независимы над \mathbb{Q} .

Пример $N(t)$ с такими параметрами ($a = \pi, b = 3\sqrt{2}, c = \sqrt{3}, d = \sqrt{5}, L = 8$):

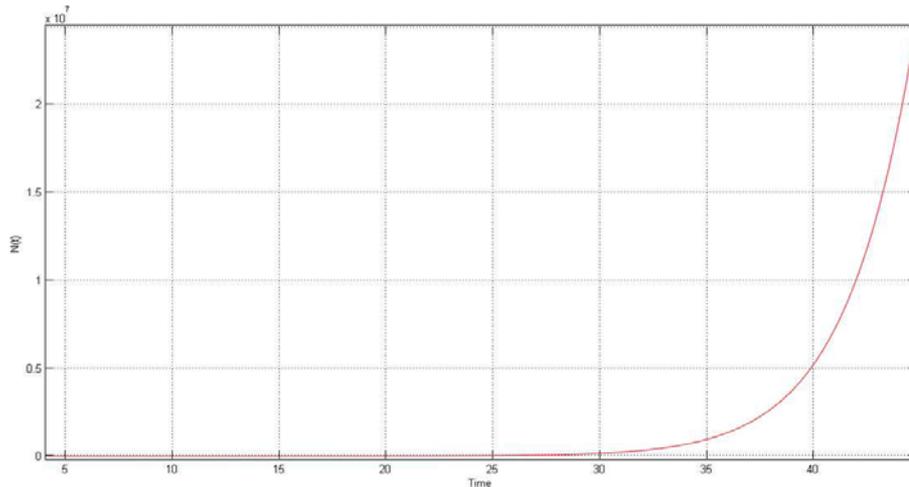


Рисунок 14

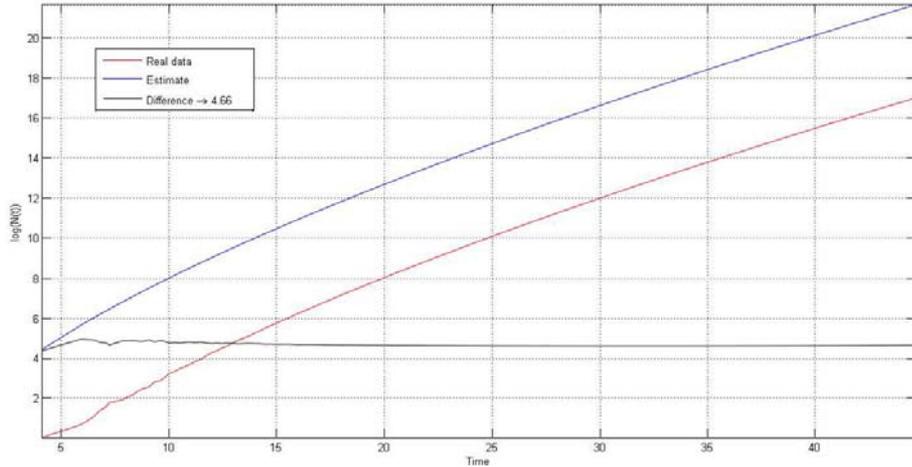


Рисунок 15 – Сравнение верхней оценки и $N(t)$ (разность) – 1

Как видно, экспериментально полученная функция и $3 \left(\frac{5\pi}{8ab} \zeta(3)\right)^{\frac{1}{3}} t^{\frac{2}{3}}$ отличаются на постоянное число, что подтверждает оценку. В то же время, когда среди параметров вклейки ребра есть линейно зависимые, невязка растет со временем. Ниже дан тот же график, но для $a = \pi, b = 4, L = 8, c = 2, d = 1$:

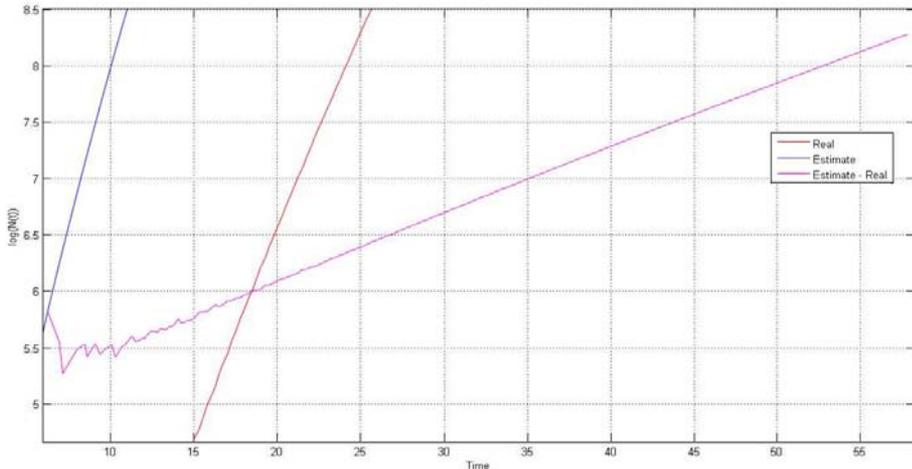


Рисунок 16 – Сравнение верхней оценки и $N(t)$ (разность) – 2

6.4 Исследование коэффициента перед экспонентой

Рассмотрим $N(t)$ для случая с цилиндром. Моделирующая программа продемонстрировала результаты, согласованные с асимптотической оценкой роста $N(t)$, данной в [3]:

$$\ln N(t) \leq \pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}} (1 + o(1)).$$

Согласно этой формуле, для случая общего положения, $N(t) = C \exp\left(\pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}}\right) + \text{поправки}$. Значит,

$$\ln N(t) - \pi \sqrt{\frac{2}{3b}} t^{\frac{1}{2}} \sim \ln C. \tag{7}$$

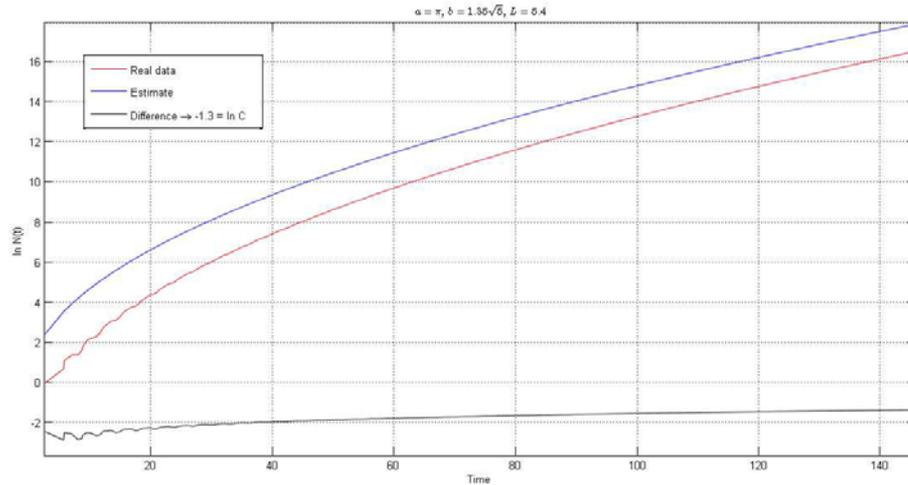
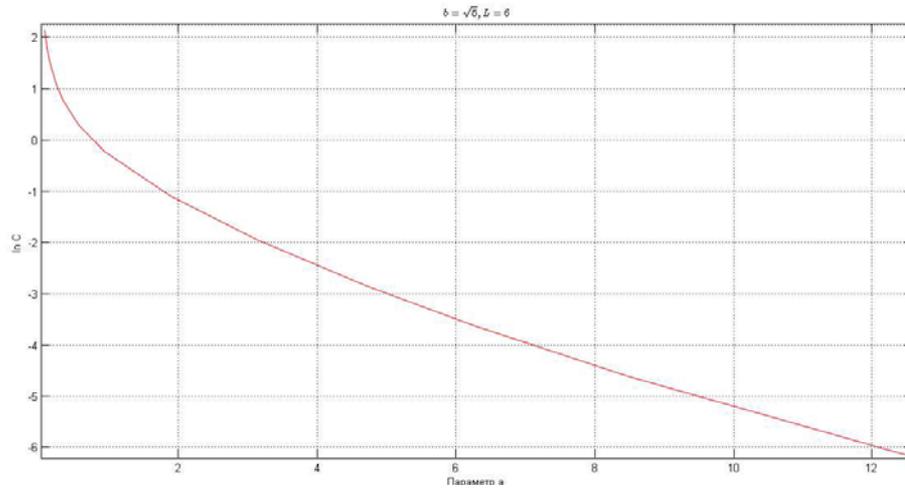


Рисунок 17 – Иллюстрация к утверждению (1)

Как зависит $\ln C$ от входных данных (параметров задачи a, b, L)? Это можно исследовать с помощью моделирующей программы. Попробуем менять один параметр:

Рисунок 18 – Изменение параметра a .

По-видимому, $\ln C = O(a)$ при $a \rightarrow \infty$: если поделить полученную функцию на a , она стремится к числу (в данном примере ≈ -0.45):

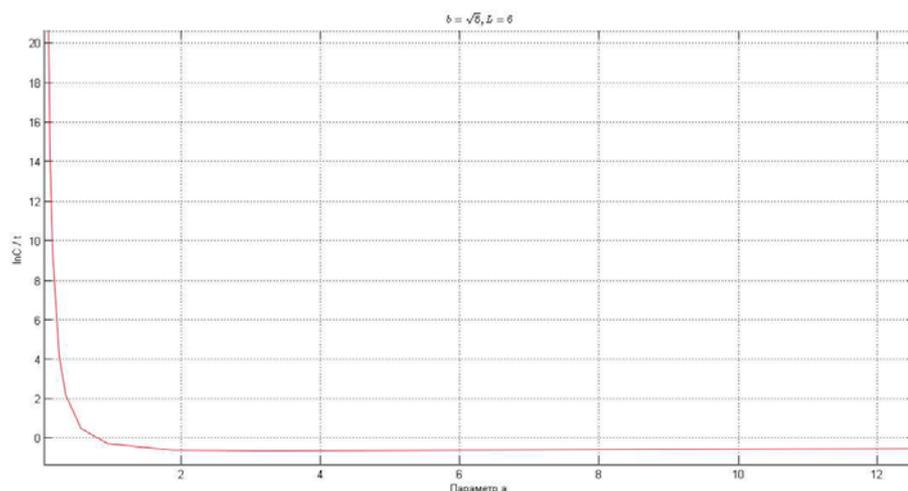


Рисунок 19

Теперь посмотрим, как $\ln C$ зависит от L и b :

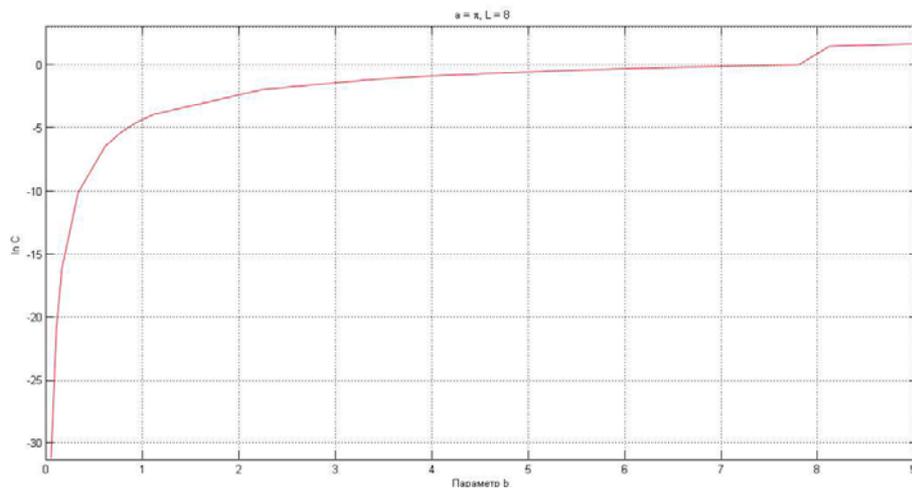


Рисунок 20

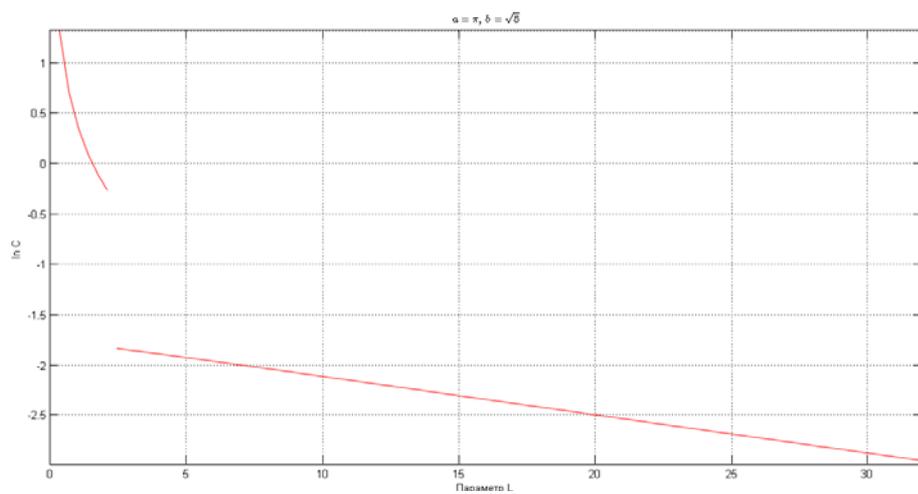


Рисунок 21

В обоих случаях наблюдается разрыв первого рода в точке $L = b$. По-видимому, $\ln C = O(L)$ при $L \rightarrow \infty$: $\frac{\ln C}{L} \rightarrow C_0 \approx -0.09$:

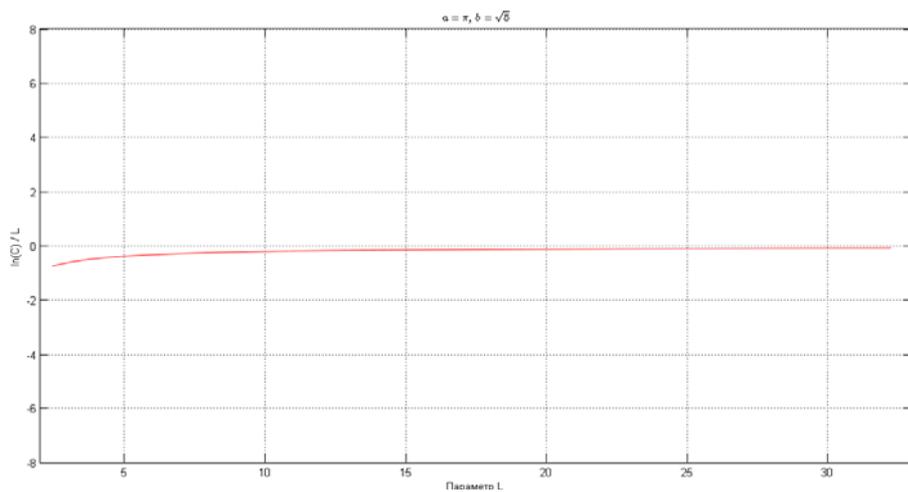


Рисунок 22

Для получения более общего представления можно построить графики $\ln C$ как функции двух переменных:

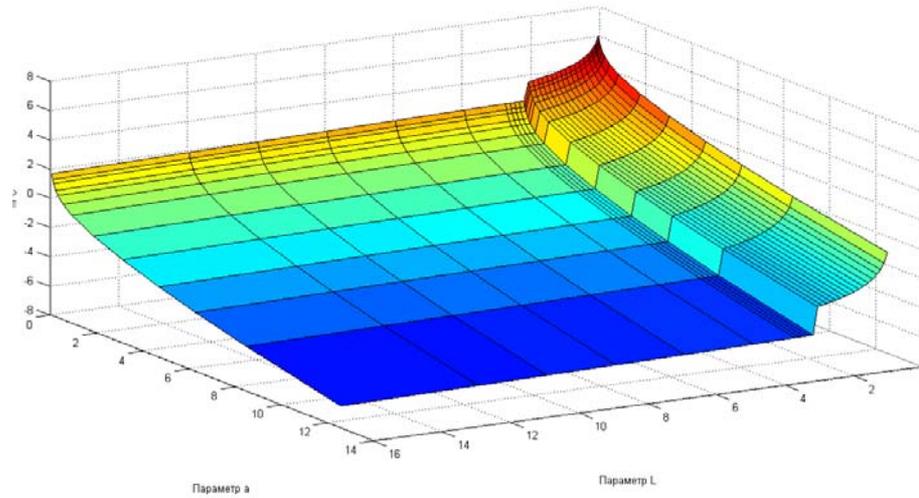


Рисунок 23 – Разрыв при $L = b$

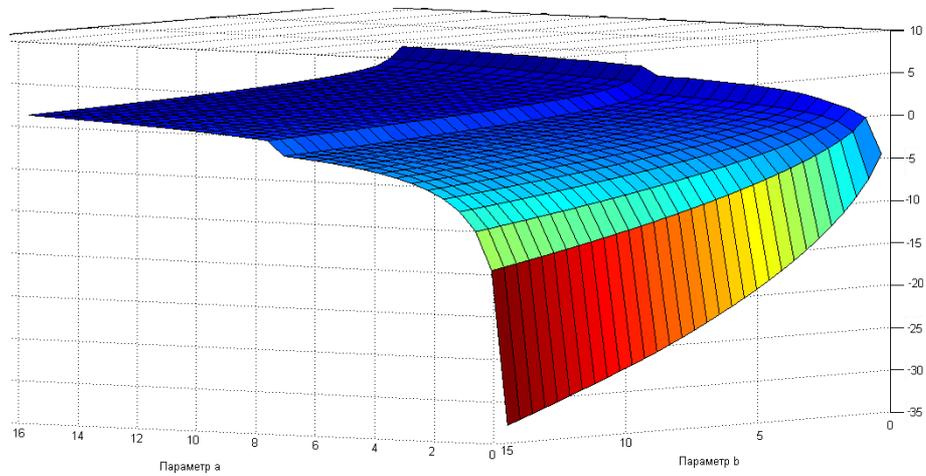


Рисунок 24 – Разрыв при $b = L$

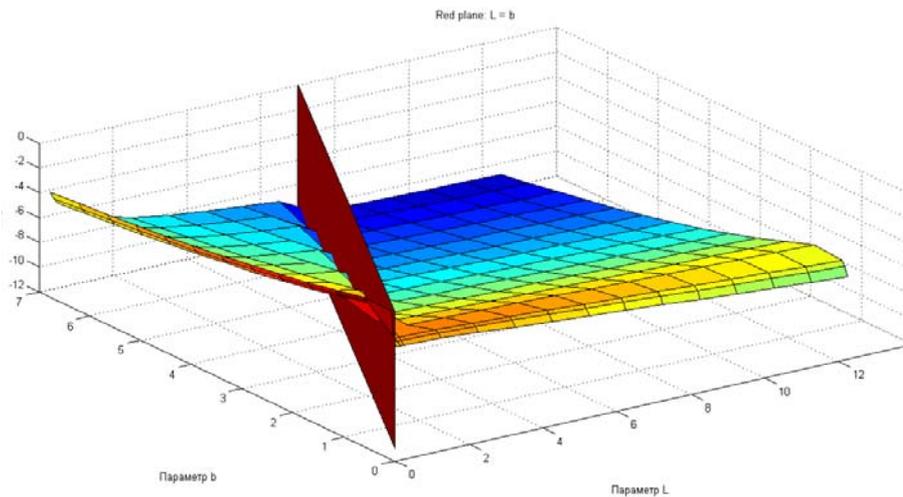


Рисунок 25 – Разрыв на прямой $b = L$

Замечание 10 Компьютерный эксперимент показывает, что логарифм константы, которая стоит перед экспонентой в старшем члене асимптотики для $N(t)$, зависит от всех трех параметров, то есть a , b и L . При этом показатель экспоненты зависит только от b . Логарифм константы, по всей видимости, принадлежит классам $O(a)$, $O(L)$ (параметры стремятся к бесконечности) и растет с ростом b . Кроме того, он имеет разрыв 1-го рода при совпадающих значениях параметров.

Список литературы

- [1] Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман. Теория линейных операторов в Гильбертовом пространстве. – М., “Наука”, 1966.
- [2] 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 Физ- матлит, М., 2004.
- [3] V. L. Chernyshev, Tolchennikov A. A. *Asymptotic estimate for the number of Gaussian packets on three decorated graphs* / Working papers by Series math "arxiv.org"/2014/3. No.1403.0263. (<http://arxiv.org>), 2014. 13 P.
- [4] Chernyshev V. L., Shafarevich A. I., *Statistics of gaussian packets on metric and decorated graphs*, Philosophical transactions of the Royal Society A., Volume: 372, Issue: 2007, Article number: 20130145, DOI: 10.1098/rsta.2013.0145, 2014.
- [5] Павлов Б. С. Электрон в однородном кристалле из точечных атомов с внутренней структурой. // Теоретическая и математическая физика. – 1987. – Т. 72, N 3.– С. 403–415.
- [6] И. С. Лобанов. Спектральные свойства гамильтонианов явнорешаемых моделей мезоскопических структур: декорированные квантовые графы и квантовые точки. Кандидатская диссертация, 2005.
- [7] Брюнинг Й., Гейлер В.А. Геометрическое рассеяние на компактных римановых многообразиях. // Доклады Академии Наук. – Т. 389, N. 3 – С. 310–313. 2003.
- [8] Брюнинг Й., Гейлер В.А., Лобанов И.С. Спектральные свойства операторов Шрёдингера на декорированных графах. // Математические заметки. –Т. 77, N.6 – С. 932–934. – 2005.
- [9] М. А. Наймарк. Линейные дифференциальные операторы. Наука, 1969.
- [10] А. А. Толченников. О ядре операторов Лапласа-Бельтрами с потенциалом нулевого радиуса и на декорированных графах.// Математический сборник – Т. 199, N7. – 123–138. – 2008.
- [11] S. Roganova. Direct and inverse spectral problems for hybrid manifolds. Dissertation, Humboldt Universitat zu Berlin – 2007.
- [12] S. Rosenberg. The Laplacian on a Riemannian manifold. // London Mathematical Society Student Texts. – Vol. 31. – Cambridge. – 1997.
- [13] А. А. Толченников. Спектральные свойства оператора Лапласа на декорированных графах и на поверхностях с дельта-потенциалами // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, МГУ – 2009.
- [14] Kuchment P., Berkolaiko G. *Introduction to Quantum Graphs*, Mathematical Surveys and Monographs, V. 186 AMS. 2014.
- [15] Brüning J. and Geyley V. A. Scattering on compact manifolds with infinitely thin horns. *J. Math. Phys.* **44**, 371, 2003.

- [16] Faddeev M.D., Pavlov B. S. Free electron model and scattering theory. *Theor. Math. Phys.*, **55**(2), 257–268. 1983.
- [17] Berkolaiko G. Quantum star graphs and related systems, PhD Thesis, University of Bristol. 135 p. 2000.
- [18] Tanner G. Spectral statistics for unitary transfer matrices of binary graphs, *Journal of Physics A* **33**, 3567–3586. 2000.
- [19] Gavish U., Smilansky U. Degeneracies in the length spectra of metric graphs, *Journal of Physics A* **40**, 2007. 10009–10020.
- [20] Sharp R. Degeneracy in the length spectrum for metric graphs, *Geometriae Dedicata* **149**, 2010. 177–188.
- [21] Gutkin B., Osipov V. Al. Clustering of periodic orbits and ensembles of truncated unitary matrices. <http://arxiv.org/abs/1305.0059>. 2013. 16 p.
- [22] Gutkin B., Osipov V. Al. Clustering of periodic orbits in chaotic systems, *Nonlinearity* **26**, No 1. 2013. 177–200.
- [23] Harrison J. M., Keating J. P. and Robbins J. M. 2011 Quantum Statistics on Graphs, *Proceedings of the Royal Society A - Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **467**, Issue: 2125, 2011. 212–233.
- [24] Adami R., Cacciapuoti C., Finco D. and Noja D. On the structure of critical energy levels for the cubic focusing NLS on star graphs., *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **45**, Issue 19, article id. 192001, 2012. 7 pp.
- [25] Чернышев В. Л., Шафаревич А. И. Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе. *Мат. Заметки*. 2007. Т. 82 (№4, 2007). 606–620.
- [26] Chernyshev V. L., Shafarevich A. I. 2008 Semiclassical Asymptotics and Statistical Properties of Gaussian Packets for the Nonstationary Schrödinger Equation on a Geometric Graph. *Russian Journal of Mathematical Physics*, **15**, No. 1, 25–34.
- [27] Чернышев В. Л., Толченников А. А., Шафаревич А. И. Асимптотические свойства и классические динамические системы в квантовых задачах на сингулярных пространствах. *Нелинейная динамика*. 2010. Т. 6, №. 3. 623–638.
- [28] Чернышев В. Л. Нестационарное уравнение Шрёдингера: статистика распространения гауссовых пакетов на геометрическом графе. *Труды Математического Института имени В. А. Стеклова*. 2010. Т. 270. 249–265.
- [29] Чернышев В. Л., Толченников А. А., Свойства распределения гауссовых пакетов на пространственной сети, *Наука и образование: электронное научное издание (МГТУ им. Н.Э. Баумана)*, 10, 2011.
- [30] Stephen S.-T. Yau, Linda Zhao and Huaiqing Zuo Biggest sharp polynomial estimate of integral points in right-angled simplices. In *Topology of algebraic varieties and singularities*, pp. 433–467. Amer. Math. Soc., Providence, RI. 2011.
- [31] Skriganov M. M. Ergodic theory on $SL(n)$, Diophantine approximations and anomalies in the lattice point problem. *Invent. Math.* **132**, no. 1. 1998. 1–72.
- [32] L. Pauling, *J. Chem. Phys.*, 4, 673, 1936.
- [33] Maslov V. P. *The Complex WKB Method for Nonlinear Equations 1: Linear Theory*. Springer, 1994. 300 p.
- [34] Maslov V. P. *Operational Methods*. Mir. 1976. 559 p.
- [35] Maslov V. P., Fedorjuk M. V. *Semi-classical approximation in quantum mechanics*, Springer, 2002. 316 p.

- [36] Назайкинский В. Е. Об энтропии газа Бозе–Маслова // Докл. РАН. 2013. Vol. 448. No. 3. 266–268.
- [37] Knopfmacher, J. Abstract Analytic Number Theory (2-nd edition). New York, Dover Publishing. 1990.
- [38] Арнольд В. И. Варченко А. Н. Гусейн-Заде С. М., Особенности дифференцируемых отображений (том 1). Классификация критических точек, каустик и волновых фронтов. 1982.
- [39] Roman Schubert, Raul O. Vallejos, Fabricio Toscano. How do wave packets spread? Time evolution on Ehrenfest time scales. Working papers by Series math "arxiv.org"./2011/11. No. arXiv:1112.4056. (<http://arxiv.org>), 2011. 30 P.

SCHRÖDINGER EQUATION ON GRAPHS AND SINGULAR SPACES: SPECTRAL PROPERTIES AND SEMICLASSICAL DYNAMICS OF LOCALIZED PACKETS

A.A. Tolchennikov¹, V.L. Chernyshev², A.I. Shafarevich³

¹*A. Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences*

²*National Research University Higher School of Economics*

³*Lomonosov Moscow State University*

shafarev@yahoo.com, vchernyshev@hse.ru, tolchennikovaa@gmail.com

Received 10.12.2014

We study spectral properties and semiclassical dynamics of localized packets on graphs and singular spaces. The structure of the paper is as follows. In Section 2 we give a general definition of the Schrödinger operator on a metric graph and discuss semiclassical properties of eigenvalues and eigenfunctions. In Section 3 we present the results related to the dynamics of localized wave packets on a graph. In particular, we study the statistics of the number of packets and establish a connection with some problems in number theory. In Section 4 we define a decorated graph and the Schrödinger operator on it. We formulate several theorems on the structure of the kernel of such operator and on asymptotics of the trace of the resolvent. In Section 5 we describe some facts relating to the dynamics of localized packets on decorated graphs. Section 6 is devoted to the results of computer modeling.