

На правах рукописи



Дедок Василий Александрович

**ЧИСЛЕННЫЕ И АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ
НА МЕТРИЧЕСКИХ ГРАФАХ**

05.13.18 Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск 2010

Работа выполнена в лаборатории волновых процессов Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Бондаренко Анатолий Николаевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Кистенев Юрий Владимирович

доктор физико-математических наук,
профессор Шаповалов Александр Васильевич

Ведущая организация: Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск

Защита состоится 24 июня 2010 г. в 10.30 на заседании диссертационного совета Д 212.267.08 при Томском государственном университете по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, корп. 2, ауд. 102.

Отзывы на автореферат (в двух экземплярах), заверенные гербовой печатью организации, просим направлять по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, ученому секретарю ТГУ Буровой Н.Ю.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета.

Автореферат разослан 20 мая 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.267.08
доктор технических наук, профессор



А.В. Скворцов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Возникновение интереса к дифференциальным задачам на графах в первую очередь связано с возможными практически применениями. Так, одна из наиболее простых математической модели молекулы дается обыкновенным дифференциальным оператором на графе, изображающем молекулу, с самосопряженными условиями в вершинах графа. Такой подход применялся в работах Б.С. Павлова, М.Д. Фаддеева, Н.И. Герасименко. Рассматриваемая ими модель рассматривалась при расчете электронных колебаний сложной молекулы в рамках модели свободных электронов. Расширение модели путем присоединения к компактной части графа бесконечных лучей, позволяет получить гибкую математическую конструкцию, которая, будучи одномерной, воспроизводит свойства многомерных объектов. К. Rudenberg и С.W. Scherr эффективно использовали данную модель при проведении численных экспериментов. Ю.В. Мельниковым и Б.С. Павловым рассматривалось возможное применение задачи рассеяния на графах в проектировании микроэлектронных устройств. Применимость данной модели к физическим задачам исследования распространения волн в тонких структурах, мезоскопических средах, задачах акустики, оптики, сверхпроводимости исследовали Р. Kuchment, V. Adamyan, E. Akkermans, A. Comtet, J. Desbois, G. Montambaux, C. Texier, S. Alexander, P. Exner, A. Figotin, T. Kottos.

Обратные задачи для дифференциальных уравнения впервые рассматривал М. Кас в классической работе о восстановлении формы барабана. В дальнейшем, к этой теме не раз обращались В. Gutkin, U. Smilanski, P. Kurasov, F. Stenberg. Однако получить точные аналитические результаты оказывается возможным только в ряде частных случаев. Исследования, связанные с получением аналога уравнения Гельфанда-Левитана-Марченко в ряде некоторых частных случаях простых графов связаны с именами следующих ученых: В.А. Марченко, I. Trooshin, К. Mochizuki. Однако их результаты могут быть применены для конечного набора частных случаев.

Рассматриваемая модель оказалась очень интересна и с теоретической точки зрения, J.-P. Roth, Н.Р. McKean, I.M. Singer, R. Carlson исследовали спектральные свойства оператора, С.П. Новиковым рассматривался дискретный оператор Шредингера на графах и связь этого объекта с симплектической геометрией.

Исследования по тематике диссертационной работы связаны с изучением сред, физическая структура которых обладает свойством масштабной инвариантности или наличием линейных размеров всех порядков. В частности, материалы, мезоскопическая структура характеризуется свойством масштабной инвариантности 5-10 порядков, обладают уникальными физи-

ческими свойствами, обусловленные наличием внутреннего самоподобия. В связи с этим особенно актуальной становится задача построения математических моделей данных сред, а так же достоверной проверки адекватности данных моделей.

Как было уже замечено, прямое применение аналитических методов для исследования этих сред на мезоуровне сопряжено с высокой сложностью возникающих задач, что приводит к необходимости разработки эффективных численных алгоритмов или конструктивных аналитических методов, служащими основой для численного изучения свойств моделей.

Цель работы заключается в разработке методов построения аналитических решений прямых и обратных задач для уравнения Шредингера на метрических графах произвольной структуры, а так же численном исследовании асимптотических свойств решений этих задач.

В рамках указанной цели были поставлены **следующие задачи**:

1. Разработать метод вычисления спектральных данных и данных рассеяния для уравнения Шредингера на компактных и некомпактных графах при операциях составления сложных графов из более простых подграфов.
2. Исследовать применимость разработанного метода для вычисления данных рассеяния для уравнения Шредингера на последовательных итерациях самоподобного графа Серпинского.
3. Разработать конструктивный алгоритм для решения задачи оптической томографии с точечными неоднородностями соответствующей восстановлению метрической и топологической структуры полного графа по данным рассеяния для оператора Шредингера на нем. Проанализировать взаимное соответствия моделей рассеяния и квантового случайного блуждания.
4. Исследовать характеристики антирезонансных и локализованных состояний методом компьютерного моделирования на последовательных итерациях самоподобных графов (например графа Серпинского).
5. Исследовать асимптотические свойства вероятности возвращения частицы, представляющую собой меру локализации, в модели квантового случайного блуждания на решетках разных размерностей с помощью компьютерного моделирования.

Методы исследования. При решении поставленных задач использовались методы математической физики, дифференциальных уравнений, математического моделирования.

Научная новизна полученных автором результатов заключается в следующем:

1. Впервые разработан метод спектральной хирургии квантовых графов, состоящий в описании преобразований данных рассеяния и спектральных данных при операциях композиции. Данный метод отличается от существующих "правил Кирхгофа для квантовых графов" отсутствием необходимости определения сложной операции произведения по ребрам, а так же возможностью описания преобразования спектра, а не только данных рассеяния. Разработанный метод позволил впервые получить нелинейное соотношение на коэффициенты матрицы рассеяния для оператора Шредингера на последовательных итерациях конечно-разветвленного графа Серпинского.
2. На основе формулы следа для уравнения Лапласа на компактном графе доказана теорема разложения по путям для данных рассеяния оператора Шредингера на некомпактных графах. Данный результат позволил решить задачу оптической томографии с точечными неоднородностями, соответствующую восстановлению метрической и топологической структуры полного графа по данным рассеяния для оператора Шредингера на нем. Вторым применением этого результата явилось доказательство взаимного соответствия моделей задачи рассеяния и квантового случайного блуждания.
3. С помощью компьютерного моделирования процесса рассеяния на самоподобном графе Серпинского, основанного на разработанном методе спектральной хирургии, были описаны характеристики антирезонансных состояний. В отличие от аналитического подхода, метод прямого моделирования позволил проанализировать свойства коэффициентов матрицы рассеяния на итерациях существенно большего порядка графа Серпинского, представляющего большой интерес как одной из математической модели мезоуровня. Результаты моделирования позволили сформулировать гипотезу локализации для конечно-разветвленного графа Серпинского.
4. Методом математического моделирования были проанализированы асимптотические свойства вероятности возвращения частицы в модели квантового случайного блуждания на решетках разных размерностей. Численно предсказан и аналитически подтвержден квантовый аналог теоремы Пойа о возвратности квантового случайного блуждания на прямой. Результат моделирования на решетках больших размерностей для различных матриц Адамара позволил сформулировать ряд гипо-

тез, описывающих асимптотические свойства вероятности возвращения, представляющую собой меру локализации.

Теоретическая значимость работы. В работе разработана техника спектральной хирургии квантовых графов, впервые позволившая конструктивно подойти к задаче вычисления данных рассеяния на объектах произвольной сложности. Это позволит получить решения принципиально нового класса задач на объектах с самоподобной структурой.

Практическая ценность работы. Разработанный метод позволяет существенно упростить численные вычисления данных рассеяния путем замещения части вычислений аналитическими результатами, на порядок увеличить сложность исследуемых объектов при моделировании сред с новыми характеристиками.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждена строгим применением методов теории рассеяния и дифференциального исчисления, а так же сравнением результатов решения задач методами прямого численного моделирования и аналитическими методами.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Получены аналитические соотношения, описывающие преобразование спектральных данных и данных рассеяния для уравнения Шредингера на компактных и некомпактных графах при операциях составления сложных графов из более простых подграфов. На основе полученных соотношений получено ренормализационное соотношение на коэффициенты матрицы рассеяния для оператора Шредингера для последовательных итераций конечно-разветвленного графа Серпинского.
2. Доказана теорема разложения по путям для данных рассеяния оператора Шредингера на некомпактных графах. На ее основе разработан конструктивный алгоритм решения задачи оптической томографии с точечными неоднородностями соответствующей восстановлению метрической и топологической структуры полного графа по данным рассеяния для оператора Шредингера на нем. Доказано взаимное соответствие моделей рассеяния на графах и квантового случайного блуждания.
3. Методом компьютерного моделирования процесса рассеяния на последующих итерациях самоподобного графа Серпинского описаны характеристики антирезонансных состояний. Сформулирована гипотеза локализации для конечно-разветвленного графа Серпинского.
4. Методом компьютерного моделирования исследованы асимптотические свойства вероятности возвращения частицы в модели квантового случайного блуждания на решетках разных размерностей. Численно пред-

сказан и аналитически подтвержден квантовый аналог теоремы Поля о возвратности квантового случайного блуждания на прямой. Результат моделирования на решетках больших размерностей для различных матриц Адамара позволил сформулировать ряд гипотез, описывающих асимптотические свойства вероятности возвращения, представляющую собой меру локализации.

Апробация работы. Основные положения диссертации и отдельные ее результаты докладывались и обсуждались в 2003-2009г. в рамках семинаров чл.-корр. В.Г. Романова, чл.-корр. И.А. Тайманова, академика А.А. Боровкова и проф. А.М. Блохина в Институте математики им. С.Л. Соболева СО РАН, а также на следующих конференциях:

1. На международной конференции "The 7th Korea-Russian International Symposium on Science and Technology. KORUS-2003". (Ulsan, Republic Korea, 2003);
2. На конференции "Алгоритмический анализ неустойчивых задач". (Екатеринбург, Россия, 2004);
3. На международной конференции "The 8th Korea-Russian International Symposium on Science and Technology. KORUS-2004". (Tomsk. Russia, 2004);
4. На всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям с участием иностранных ученых. (Новосибирск, Россия, 2004);
5. На международной конференции "The 9th Korea-Russian International Symposium on Science and Technology. KORUS-2005". (Novosibirsk, Russia, 2005);
6. На международной конференции АМАДЕ. (Минск, Беларусь, 2006);
7. На международной конференции "Обратные и некорректные задачи математической физики" посвященной 75-летию академика М.М. Лаврентьева. (Новосибирск, Россия, 2007);
8. На региональной научной конференции молодых ученых "Наука. Техника. Инновации." (Новосибирск, 2002, 2003гг.);
9. На всероссийской научной конференции молодых ученых "Наука. Техника. Инновации." (Новосибирск, 2004, 2005, 2006, 2007, 2009гг.).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 12 работ, в том числе 1 работа в журнале из перечня ВАК.

Структура работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, приложения и списка литературы из 108 наименований. Общий объем диссертации составляет 136 страниц, в том числе основной текст 129 страницы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформулирована цель и задачи диссертационного исследования, изложена его научная новизна, раскрыты теоретическое значение и практическая ценность полученных результатов, кратко излагается содержание диссертационной работы.

Первая глава посвящена задаче рассеяния на геометрических графах: прямой спектральной задаче и задаче рассеяния, обратной задаче рассеяния и обратной задачей оптической томографии.

Рассматриваются произвольные конечные графы и семейство операторов $\{L_i\}_{i=1}^B$, с каждым направленным ребром b связываются отрезки $[0, l_b]$ или полубесконечные лучи $[0, \infty)$

$$L_i = -\frac{d^2}{dx_i^2} + u_i(x_i), \quad L_G = \sum_{i=1}^B \oplus L_i.$$

Унитарность оператора рассеяния обеспечивают граничные условия вида

a) ψ непрерывна в узлах графа

$$\psi_{(i,j)}(x)|_{x=x_i} = \psi_i;$$

b) сумма производных по всем исходящим дугам в каждой вершине пропорциональна значению волновой функции в этой вершине

$$\sum \psi'_{(i,j)}(x)|_{x=x_i} = \lambda_i \psi_i.$$

В зависимости от типа рассматриваемой проблемы рассматриваются компактные или некомпактные графы. На компактном графе G задачу о спектре оператора L_G называют *задачей Штурма-Лиувилля*. Для некомпактного графа определяется *матрица рассеяния* и рассматривается *задача рассеяния*.

Основные результаты главы представлены в разделах 1.2 и 1.3, где рассматриваются теорема разложения и обратные задачи для задачи рассеяния.

Рассмотрим некомпактный граф G и задачу рассеяния с нулевым потенциалом на ребрах. Решение на каждом ребре может быть представлено как суперпозиция волн распространяющихся в противоположных направлениях

$$\psi(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}.$$

Обозначим A_b^{int} , B_b^{int} амплитуды волновой функции на ребрах компактной части, A_b^{ext} , B_b^{ext} соответственно на бесконечных ребрах. Рассматривая каждое внутреннее ребро как пару ребер с противоположными ориентациями, введем $2B \times L$ компонентные векторы

$$A = \begin{pmatrix} A^{int} \\ A^{ext} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} B^{int} \\ B^{ext} \end{pmatrix}, \quad B_i = \sum_j Q_{ij} A_j \text{ или } B = QA..$$

Для компактной части справедливо соотношение

$$A^{int} = RB^{int}.$$

далее

$$\begin{aligned} B^{int} - Q^{int} A^{int} &= \tilde{Q}^T A^{ext}, \\ R^{-1} A^{int} - Q^{int} A^{int} &= \tilde{Q}^T A^{ext}, \\ A^{int} &= (R^{-1} - Q^{int})^{-1} \tilde{Q}^T A^{ext}, \\ B^{ext} &= \left(Q^{ext} + \tilde{Q} (R^{-1} - Q^{int})^{-1} \tilde{Q}^T \right) A^{ext}. \end{aligned}$$

Тем самым мы получили представление для матрицы рассеяния S , связывающую входящие и исходящие амплитуды

$$\begin{aligned} B^{ext} &= SA^{ext}, \quad S = Q^{ext} + \tilde{Q} (R^{-1} - Q^{int})^{-1} \tilde{Q}^T, \\ S &= Q^{ext} + \tilde{Q} R \tilde{Q}^T + \tilde{Q} R Q^{int} R \tilde{Q}^T + \dots + \tilde{Q} R (Q^{int} R)^n \tilde{Q}^T + \dots \end{aligned}$$

Каждый член в этой сумме представляет собой суммы путей длины 0, 1, 2 и т.д. Тем самым для рассеяния только в вершинах, имеет место следующая формула суммирования по маршрутам

Теорема 1.5.

$$S_{ij}(k) = \begin{cases} R_{ii}(k), & \text{если } i = j \\ T_{ij}(k), & \text{если } i \neq j \end{cases} = \sum_C \alpha_C e^{il(C)k} = \sum_n \left(\sum_{C_n} \alpha_{C_n} e^{il(C_n)k} \right).$$

(Здесь C_n маршрут состоящий из n ребер, начинающийся в вершине i и заканчивающийся в j .)

Обратные задачи состоят в восстановлении характеристик носителя D по некоторым характеристикам решений уравнений Шредингера на нем возникли достаточно давно. Так, еще для частного случая уравнения Лапласа М. Кац рассматривал вместо области D барабан и задавался следующим вопросом: как, имея совершеннейшее ухо, по спектру гармоник определить форму барабана?

Задача восстановления топологической и метрической структуры графа основывается на использовании разложения производной *фазы рассеяния*

$$\Theta(k) = \frac{1}{2\pi i} \log[\det S(k)]$$

$$d_R(k) = \frac{d\Theta(k)}{dk} = \frac{L}{\pi} + \frac{1}{2\pi} \sum_p \left(\tilde{A}_p e^{ikl_p} + \tilde{A}_p^* e^{-ikl_p} \right).$$

Применение дополнительной информации, извлекаемой из матрицы рассеяния позволяет решить *обратную задачу*:

Теорема 1.10. *Матрица рассеяния $S(k)$ некомпактного связного метрического графа определяет однозначно длины ребер компактной части и смежность (в том числе и присоединение полубесконечных ребер) графа при условии что*

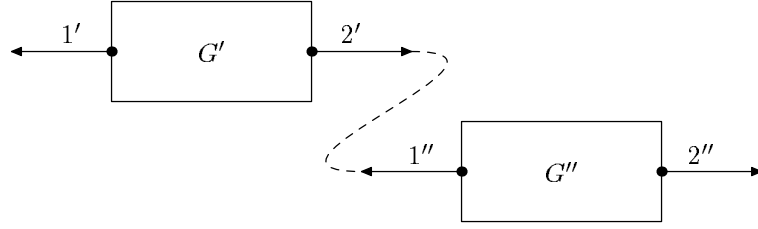
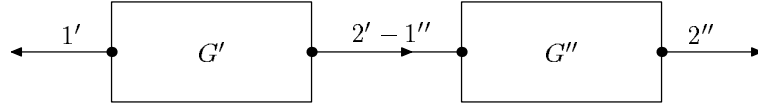
- *граф состоит из конечной и простой компактной части и бесконечных ребер. К каждой вершине может быть приклеено не больше чем одно бесконечное ребро*
- *длины ребер компактной части рационально независимы.*
- *элементы матрицы рассеяния в каждой вершине не обращаются в нуль.*

Данный результат имеет практическое применение в решении задачи оптической томографии восстановления среды с точечными неоднородностями. Как было показано, данная задача эквивалентна задаче рассеяния на полном графе, вершины которого образованы неоднородностями и источниками-приемниками.

В задаче томографии кроме восстановления структуры графа необходимо восстановить пространственное положение его вершин. Зафиксируем положения $y_i, i = 1, 2, \dots, n$ ($n \geq 4$) особых вершин "источников - приемников" волн. Потребуем чтобы они не лежали на одной плоскости. Добавим к ним вершины $x_i, i = 1, 2, \dots, t$ имеющие координаты неоднородностей в среде. Соединим получившееся множество вершин так, чтобы получился полный граф, а к "особым" вершинам приклеим бесконечные ребра.

Используя предыдущий результат, восстановим длины компактной части графа по данным рассеяния. Таким образом, мы получим расстояния от каждой вершины "неоднородности" до вершин "источников-приемников". Эти расстояния однозначно определяют положение "неоднородности" в пространстве как точку пересечения четырех сфер с радиусами в вершинах "источниках-приемниках" соответствующих радиусов.

Во **второй главе** рассматриваются 2 категории прямых задач:

Рис. 1: Склеиваемые графы G' и G'' .Рис. 2: Полученный граф G .

прямая задача рассеяния для некомпактного графа - конструирование матрицы рассеяния сложных графов используя данные рассеяния более простых подграфов и

прямая спектральная задача - аналогичная задача для вычисления спектра оператора Лапласа при аналогичных условиях.

Задачу конструирования сложных графов удобно разбить на более простые операции по *масштабированию* и *склейке* подграфов. Операция по масштабированию состоит в линейном изменении в γ раз размеров компактной части, операция склеивания состоит в замене одного или большего числа полубесконечных ребер конечными. На примере двух графов данная операция может быть проиллюстрирована рис. 1 и 2.

Данные процедуры могут быть дополнены операцией, обратной склеиванию и упрощающей структуру графа, *разрезанию*. Данная операция позволяет, например, получить из графов G и G' граф G'' .

Решение задачи рассеяния на масштабированном графе соответствует масштабированию энергетического параметра k : $S_\gamma(k) = S(\gamma k)$.

Задача преобразования данных рассеяния при операциях склеивания алгоритмически состоит во введении *оператора переноса*, сопоставляющего решению на одном ребре решение на другом.

Построим операторы SC'_{rl} и SC''_{lr} сопоставляющие решению на правом ребре графа G' решение на левом ребре и решению на левом ребре G'' решение на правом соответственно. Они имеют вид

$$SC'_{rl} = \begin{pmatrix} -R'_{22}T'^{-1}_{12} & T'^{-1}_{12} \\ T'_{21} - R'_{11}R'_{22}T'^{-1}_{12} & R'_{11}T'^{-1}_{12} \end{pmatrix},$$

$$SC''_{lr} = \begin{pmatrix} -R''_{11}T''^{-1}_{21} & T''^{-1}_{21} \\ T''_{12} - R''_{11}R''_{22}T''^{-1}_{21} & R''_{22}T''^{-1}_{21} \end{pmatrix}.$$

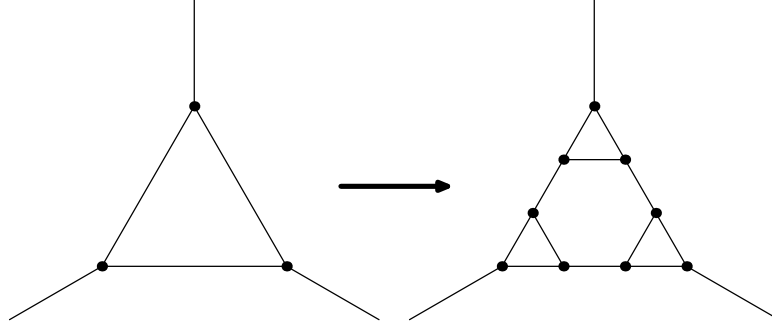


Рис. 3: Переход к следующей итерации.

Задача с падающей слева волной приводит к соотношению:

$$R_{11} = (e^{ikl} R'_{11} T'_{12} T'_{21} - e^{ikl} R'_{11} R'_{22} R'_{11} + e^{-ikl} R'_{11}) / (e^{-ikl} - e^{ikl} R'_{11} R'_{22}),$$

$$T_{12} = (T'_{12} T'_{21}) / (e^{-ikl} - e^{ikl} R'_{11} R'_{22}).$$

Рассматривая падающую справа волну получим соотношение на остальные коэффициенты:

$$R_{22} = (e^{ikl} R'_{22} T'_{12} T'_{21} - e^{ikl} R'_{22} R'_{11} R'_{22} + e^{-ikl} R'_{22}) / (e^{-ikl} - e^{ikl} R'_{11} R'_{22}),$$

$$T_{21} = (T'_{21} T'_{12}) / (e^{-ikl} - e^{ikl} R'_{11} R'_{22}).$$

Аналогичным образом вычисляются и данные рассеяния в случае разрезания графов.

Применение техники операторов переноса дает нам систему уравнений, описывающих соотношение между данными рассеяния свободной частицы на последующих итераций графа Серпинского:

$$R'(k) = R(k/3) + [b_1(k/3)e^{ik/3} + a_2(k/3)]T(k/3),$$

$$T'(k) = [a_1(k/3) + b_3(k/3)e^{ik/3}]T(k/3).$$

где

$$a_1 = \frac{-Te^{ik}(e^{ik}R - 1)}{D}, \quad b_1 = \frac{-Te^{ik}(e^{ik}R^2 - e^{ik}T^2 - R)}{D},$$

$$a_2 = \frac{-Te^{2ik}(e^{ik}R^2 - e^{ik}T^2 - R)}{D}, \quad b_2 = \frac{-T(e^{ik}R - 1)}{D},$$

$$a_3 = \frac{e^{2ik}T^2}{D}, \quad b_3 = \frac{e^{ik}T^2}{D},$$

$$D = -e^{3ik}T^3 + e^{3ik}R^2T - e^{2ik}RT - e^{3ik}RT^2 + e^{3ik}R^3 - e^{2ik}R^2 - e^{ik}R + 1.$$

Решение спектральной задачи для оператора Лапласа основано на алгоритмическом описании преобразований *секулярного уравнения*:

$$\det Z_{A,B}(k) = \det(AX(k) + i\sqrt{k}BY(k)) = 0.$$

В случае операции масштабирования графов выражение для секулярного уравнения принимает наиболее простой вид. Пусть граф G_γ получается из G путем растяжения в γ раз, A_G, B_G — матрицы граничных условий оператора Лапласа. Тогда секулярное уравнение для оператора Лапласа на графе G_γ имеет вид

$$\det Z_{G_\gamma}(k) = \left| A_G \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & I \\ 0 & e^{i\sqrt{k}\underline{\gamma}a} & e^{-i\sqrt{k}\underline{\gamma}a} \end{pmatrix} + i\sqrt{k}B_G \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & -I \\ 0 & -e^{i\sqrt{k}\underline{\gamma}a} & e^{i\sqrt{k}\underline{\gamma}a} \end{pmatrix} \right| = 0.$$

Используя подходящую перенумерацию ребер компактной части можно получить следующее описание преобразования секулярного уравнения:

Теорема 2.19 Пусть графы G, G^1 и G^2 , состоящие из компактной части и двух полубесконечных ребер, таковы, что G получается путем склейки графов G^1 и G^2 ребром длины l или что тоже самое, что G^1 получается путем разрезания G по ребру длины l , A, A^1, A^2, B, B^1, B^2 — матрицы граничных условий операторов Лапласа на соответствующих графов. Тогда секулярное уравнение $\det Z(k) = 0$, определяющее спектр оператора Лапласа графа G при операции склеивания графа имеет выражение:

$$\det Z_{A,B}(k) = \left| \begin{pmatrix} A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} X(k) + i\sqrt{k} \begin{pmatrix} B_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} Y(k) \right| = 0.$$

Таким образом, мы получили описание преобразований спектра при основных операциях хирургии квантовых графов: масштабировании и склеивании.

Третья глава посвящена исследованию проблемы локализации в моделях квантового блуждания, а так же доказательству квантового аналога теоремы Пойа.

Квантовое обобщение случайного блуждания рассматривает квантовую частицу, обладающей дополнительной степенью свободы и характеризуется $\Psi(n, t) = \begin{pmatrix} \psi_L(n, t) \\ \psi_R(n, t) \end{pmatrix}$ — двухкомпонентный вектор амплитуд в ячейке с номером n во время t . Поведение во времени функции Ψ задается следующим преобразованием:

Адамаровское случайное блуждание — случайное блуждание, задающееся правилами:

$$\begin{aligned} \Psi(n, t+1) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Psi(n-1, t) + \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi(n+1, t) \\ &= M_+ \Psi(n-1, t) + M_- \Psi(n+1, t), \end{aligned}$$

для соответствующим образом определенных матриц M_+ и M_- .

В более удобном для использования виде эволюция квантового блуждания в общем случае может быть записана как:

$$\Psi(n, t+1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \Psi(n-1, t) + \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi(n+1, t).$$

Мерой локализации в данной задаче может являться вероятность возвращения в исходную точку

$$P(0, t) = |\Psi_L(0, t)|^2 + |\Psi_R(0, t)|^2.$$

Пусть $\theta = 0$. Тогда $P(0, t) = 0$ для всех $t \geq 1$ и любого начального состояния квантовой частицы $\Psi(0, 0)$.

Пусть $\theta = \pi$. Тогда $P(n, t) = 0$ для всех $t \geq 1$, любого n ($|n| \geq 2$) и любого начального состояния квантовой частицы $\Psi(0, 0)$.

Результаты для промежуточных случаев получаются переходом к образу Фурье:

Вычислим преобразование Фурье волновой функции $\Psi(n, t+1)$:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(k, t+1) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} (M_{-\theta}\Psi(n-1, t) + M_{+\theta}\Psi(n+1, t))e^{ikn} = \\ &e^{ik}M_{-\theta}\tilde{\Psi}(k, t) + e^{-ik}M_{+\theta}\tilde{\Psi}(k, t) = M_{\theta}\tilde{\Psi}(k, t), \end{aligned}$$

где

$$M_{\theta} = \begin{pmatrix} e^{-ik} \cos\frac{\theta}{2} & e^{-ik} \sin\frac{\theta}{2} \\ e^{ik} \sin\frac{\theta}{2} & -e^{ik} \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Используя эту формулу $t+1$ раз, получаем

$$\tilde{\Psi}(k, t+1) = M_{\theta}^{t+1}\tilde{\Psi}(k, 0) \quad \text{или} \quad \tilde{\Psi}(k, t) = M_{\theta}^t\tilde{\Psi}(k, 0).$$

Эволюция данных блуждания описывается обратным преобразованием Фурье:

$$\Psi(n, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M_{\theta}^t \tilde{\Psi}(k, 0) e^{-ikn} dk$$

Вычисление быстроосциллирующих интегралов основано на применении техники стационарной фазы. Данный метод дает следующий результат:

$$\begin{aligned} P_{\theta}(0, t) &= |\alpha\Psi_{L1}(0, t) + \beta\Psi_{L2}(0, t)|^2 + |\alpha\Psi_{R1}(0, t) + \beta\Psi_{R2}(0, t)|^2 = \\ &\frac{C_1(\theta)}{t} \left| 2 \cos\left(\frac{t\pi}{2} - \frac{t\theta}{2} - \frac{\pi}{2}\right) (\alpha + i\beta) \right|^2 + \frac{C_1(\theta)}{t} \left| 2 \sin\left(\frac{t\pi}{2} - \frac{t\theta}{2} - \frac{\pi}{2}\right) (\alpha + i\beta) \right|^2 \\ &+ O(t^{-2}) = \frac{C(\theta)}{t} + O(t^{-2}). \end{aligned}$$

Тем самым, квантовое случайное блуждание является слабо локализованным. Этот факт является центральным результатом главы 3, который мы назвали квантовым аналогом теоремы Пойа (**Теорема 3.29**).

Далее в последней главе численно исследуется квантовое случайное блуждание, приводятся гипотезы локализации:

- Асимптотика вероятности возвращения квантовой частицы в начало координат не зависит от начальных условий.
- В большинстве случаев параметра квантовое блуждание неозвратно.

В заключении к диссертации приведены основные результаты работы:

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Дедок В.А. Спектральная хирургия квантовых графов / Бондаренко А.Н., Дедок В.А. // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2004. — №4(20). — С. 16—28.
2. Дедок В.А. Квантовая теорема Пойа / Бондаренко А.Н., Дедок В.А. // Сибирские электронные математические известия. 2009. Т.6. С. 199–210.
3. Бондаренко А.Н., Дедок В.А. Обратная задача рассеяния для уравнения Шредингера на полных графах / Бондаренко А.Н., Дедок В.А. // Наука. Техника. Инновации: Материалы докладов региональной научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2002. Ч.1. С. 189–190.
4. Дедок В.А. Хирургия квантовых графов / Бондаренко А.Н., Дедок В.А. // Наука. Техника. Инновации: Материалы докладов региональной научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2003. Ч.1. С. 218–219.
5. Дедок В.А. Локализация Андерсона в самоподобных структурах / А.Н. Бондаренко, В.А. Дедок. // Наука. Техника. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2004. Ч.1. С. 208–209.
6. Дедок В.А. Квантовая теорема Пойа и локализация Андерсона / А.Н. Бондаренко, В.А. Дедок. // Наука. Техника. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2005. Ч.1. С. 273–274.

7. Дедок В.А. Задача рассеяния на бесконечных самоподобных графах / А.Н. Бондаренко, В.А. Дедок. // Наука. Техника. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2006. Ч.1. С. 189–191.
8. Дедок В.А. Хирургия квантовых графов: преобразование спектра / А.Н. Бондаренко, В.А. Дедок. // Наука. Техника. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2007. Ч.1. С. 118–119.
9. Дедок В.А. Квантовое случайное блуждание на плоскости: численное исследование вероятности возвращения / А.Н. Бондаренко, В.А. Дедок. // Наука. Техника. Инновации: Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых. Новосибирск, 2009. Ч.1. С. 17–19.
10. Dedok V.A. Inverse scattering problem on quantum graphs in optical tomography technology / A.N. Bondarenko, V.A. Dedok // Proceedings KORUS 2003. University Ulsan, Korea, June 28 - July 6, 2003. v.3. P. 105–110.
11. Dedok V.A. Surgery of quantum graphs / A.N. Bondarenko, V.A. Dedok // Proceedings KORUS 2004. Tomsk Polytechnic University, Russia, June 26 - July 3, 2004. v. 2. P. 108–111.
12. Dedok V.A. Anderson Localization in 1-D Quantum Random Walk / A.N. Bondarenko, V.A. Dedok // Proceedings KORUS 2005. Novosibirsk State Technical University, Russia, June 26 - July 2, 2005. v.1 P. 27–32.

Отпечатано в ООО «Бухгалтер плюс»
г. Новосибирск, ул. Авиастроителей, д. 5/1
Телефон/факс: (383) 265-80-39
Тираж 125 экз.