

 УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

# ТРУДЫ

студенческого центра  
прикладных математических  
исследований



Университет ИТМО  
Санкт-Петербург  
2014

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

# ТРУДЫ

студенческого центра  
прикладных математических  
исследований

кафедра высшей математики

Санкт-Петербург  
2014

**ТРУДЫ студенческого центра прикладных математических исследований.** Под ред. И.Ю. Попова, А.А.Кубенского СПб: Университет ИТМО, 2014, 101 с.

В сборнике собраны статьи, отражающие научные результаты студентов и аспирантов кафедры высшей математики, полученные ими в ходе работы в студенческом центре прикладных математических исследований.  
ISBN 978-5-7577-0422-0



**Университет ИТМО** – ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров, известной как проект «5 в 100». Цель Университета ИТМО – становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

© Университет ИТМО, 2014

© Авторы 2014

## Введение

Студенческий центр прикладных математических исследований создан в 2010-2011 уч.г. для активизации научной работы студентов-математиков НИУ ИТМО в области прикладных исследований, а также для улучшения взаимодействия между различными кафедрами в области математического моделирования, включая математические консультации специалистов по техническим наукам силами студентов с высоким уровнем математической подготовки. Создание и функционирование Центра поддерживается Программой развития Санкт-Петербургского национального исследовательского университета ИТМО и департаментом научных исследований и разработок ИТМО. Центр проводит регулярные еженедельные научные семинары с привлечением специалистов с других кафедр и из других вузов. Студенты активно участвуют в международных научных конференциях. На их счету и победы в конкурсах научных проектов, и дипломы международных студенческих математических олимпиад. В настоящее время центр оборудован 25 компьютерами, на которых проводится работа как в рамках спецкурсов по учебным планам 01.04.00 (Прикладная математика и информатика) по кафедре высшей математики, так и работа студентов по тематике бакалаврских и магистерских работ, научные семинары. В Центре студенты и аспиранты, готовящие бакалаврские, магистерские и кандидатские диссертации, имеют возможность представить свои результаты на семинарах, обменяться идеями, обсудить возникающие проблемы с коллегами. Наконец, Центр создает ту научную среду, без которой вхождение студента в науку затруднено. С 2011 г. ежегодно выпускаются «Труды студенческого центра прикладных математических исследований». Настоящее издание представляет собой четвертый том указанных «Трудов».

# Содержание

М.А. Белов <b>Оператор Дирака на квантовом графе</b>	<b>6</b>
А.А. Бойцев <b>Явно решаемые модели, описываемые суммой тензорных произведений операторов</b>	<b>12</b>
О.А. Догонашева <b>Граф с дельта-потенциалами, периодически расставленными по спирали, в магнитном поле</b>	<b>17</b>
С. Еженкова <b>Моделирование распространения света в градиентной среде с наноразмерными неоднородностями</b>	<b>22</b>
А.А. Ермакова <b>О связи бинарных отношений элементов группы</b>	<b>27</b>
А.А. Клементьева <b>Граничные условия для сферического электростатического зонда в слабоионизированной столкновительной плазме</b>	<b>30</b>
М.О. Ковалева <b>Об условии дискретности спектра гамильтониана квантового графа с <math>\delta</math> – соединением в вершинах</b>	<b>34</b>
О.М. Корнеева <b>Исследование характеристик квантовых микроволновых гауссовых полей методом косвенных измерений</b>	<b>38</b>
И.В. Макеев <b>Решения гидродинамических уравнений в сферической системе координат</b>	<b>44</b>
И.Ф. Мелихов <b>Исследование дискретного спектра гамильтониана взаимодействующих частиц в искаженном волноводе с помощью метода Хартри-Фока</b>	<b>48</b>

А.С. Мелихова <b>О непрерывном спектре прямой цепочки слабо связанных резонаторов с условием Дирихле на границе</b>	<b>57</b>
П.А. Павутец <b>Расчет двумерного течения вязкой жидкости со свободной границей при малых числах Рейнольдса</b>	<b>66</b>
S. Petrenko <b>Morphemic features for dependency parsing</b>	<b>73</b>
А.И. Попов <b>Течение Стокса с высокими контрастами вязкости: численный метод</b>	<b>77</b>
Р.С. Садыкова <b>Алгебра событий и принцип двойственности</b>	<b>82</b>
Р.В. Трусов <b>Модель автоматической классификации результатов эксперимента ATLAS</b>	<b>87</b>
В.О. Шереметьев <b>Исследование условной эволюции вакуумного состояния в динамическом эффекте Казимира при непрямом протоколе фотодетектирования</b>	<b>93</b>

## ОПЕРАТОР ДИРАКА НА КВАНТОВОМ ГРАФЕ

М.А. Белов

Belov.eagle@mail.ru

Рассматривается оператор Дирака на математической модели квантового графа «цепочка с изгибом». Исследуется теоретическая возможность возникновения связанных локализованных состояний в окрестности соединения кристаллических решеток.

**Ключевые слова:** оператор Дирака, квантовый граф, графен.

### 1. Введение

Исследование физических свойств различных соединений полукристаллов и нанотрубок обретает все больший интерес. Математическому моделированию наноструктур посвящается множество работ, так как они дают возможность создавать диоды, транзисторы, усилители и более сложные устройства нано-масштаба [1]. Особый интерес представляет возможное наличие связанных состояний в окрестностях областей их соединения и соответствующие этим состояниям дискретные значения энергии, так как в таких состояниях электрон может находиться длительное время.

Математические модели на основе квантовых графов в отличие от дискретных обладают большим числом параметров, что позволяет отделить эффекты ограниченности модели от эффектов геометрии системы [2]. Также модели квантовых графов являются явнорешаемыми, что позволяет всесторонне исследовать систему.

Для описания прохождения электрона через области соединения полукристаллов в большинстве случаев используют операторы Шредингера и Дирака. Принципиальное их различие состоит в том, что оператор Шредингера описывает поведение нерелятивистских частиц, а Дирака – релятивистских.

Одной из наиболее актуальных с практической стороны является модель графена, благодаря его особым физическим свойствам. Высокая подвижность носителей заряда делает его перспективным для использования в нанoeлектронике и возможную замену кремния в интегральных микросхемах. В данной работе исследуется теоретическая возможность возникновения связанных локализованных состояний в окрестности точки соединения кристаллических решеток модели «цепочка с изгибом». Такая система является подсистемой структуры графена, а поставленная задача является подзадачей математического моделирования графена.

Несколько лет назад вышла статья [3], в которой был найден дискретный спектр для модели графа, аналогичной моей, но с заданным оператором Шредингера. Естественным следствием стал вопрос о возможном наличии таких состояний у той же системы, но описываемой оператором Дирака. Именно этот вопрос стал определяющим в моем выборе предмета исследования и темы выпускной квалификационной работы.

### 2. Модель

Модель квантового графа «цепочка с изгибом» представляет собой соединение полукристаллических решеток под некоторым углом  $\varphi$  (рис. 1).

Одними из самых простых для математического моделирования являются структуры кристаллов. Их удобно представлять периодически расположенными элементарными ячейками, состоящими из одного или нескольких атомов. Модель полной структуры кристалла получается параллельными переносами такой ячейки на определенные векторы трансляций, длины которых равны периодам решетки. Поэтому многие задачи описания всего кристалла сводятся к описанию свойств одной ячейки.

Состояние кристалла описывается волновой функцией, которая зависит от координат составляющих его частиц – атомных ядер и электронов. Однако ввиду того, что массы

электронов намного меньше масс ядер, наличия электронных остовов атомов, как правило, не берут в расчет. Поэтому координаты атомов считают жестко заданными в соответствии с периодичностью кристаллической решетки.

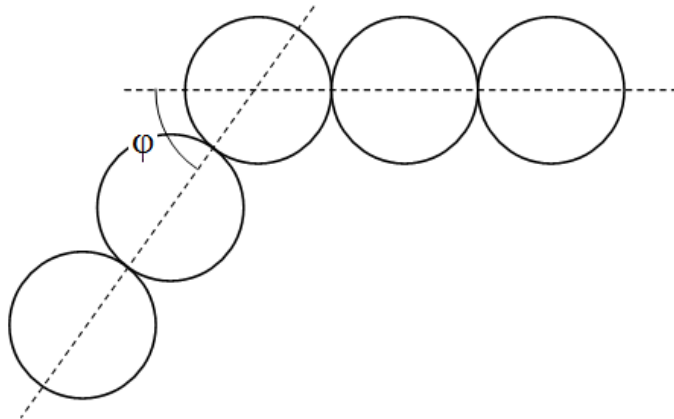


Рис. 1 Модель квантового графа «цепочка с изгибом».

Состояния частиц в потенциальном поле могут описываться операторами Шредингера и Дирака. То есть задача сводится к решению соответствующих уравнений для многоэлектронной волновой функции, находящейся в периодическом поле ионных остовов. Однако принятие в расчет энергии взаимодействия свободных электронов между собой зачастую делает задачу очень сложной. Поэтому часто прибегают к одноэлектронному приближению, в котором взаимодействие отдельного электрона со всеми остальными описывается эффективным потенциалом, который действует на него со стороны всех остальных электронов.

Для задания точечных потенциалов в математической модели кристаллов часто используют дельта-функции. Случай, когда потенциал представляет собой периодический набор дельта-функций с периодом  $a$ , носит название модели Кронига-Пенни [4]:

$$p(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \alpha \delta(x - nT).$$

Такая модель описывает потенциал в виде прямоугольных ям. Форма потенциальных барьеров далека от реального потенциала ионных остовов, однако, даже такая грубая модель в состоянии предсказать основные закономерности энергетического спектра движущихся в кристалле электронов.

Решение поставленной задачи использует связь оператора Дирака и теории матриц монодромии. Приложения, имеющие отношение к теории матриц монодромии и решениям Флоке-Блоха, описаны, например, в работе [5]. Одномерной системой Дирака будем называть систему вида:

$$\begin{cases} y_2' + p(x) \cdot y_1 = \lambda y_1 \\ y_1' + r(x) \cdot y_2 = \lambda y_2 \end{cases},$$

где  $p(x)$  и  $r(x)$  - гладкие периодические функции с периодом  $a$ . Обозначим через  $\phi(x, \lambda)$  и  $\mathcal{G}(x, \lambda)$  частные решения системы Дирака, удовлетворяющие следующим начальным условиям:

$$\phi(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \phi_1(x, \lambda) \\ \phi_2(x, \lambda) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{G}(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_1(x, \lambda) \\ \mathcal{G}_2(x, \lambda) \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \phi_1(0, \lambda) = \mathcal{G}_2(0, \lambda) = 0 \\ \phi_2(0, \lambda) = \mathcal{G}_1(0, \lambda) = 1 \end{cases}.$$

Такие решения линейно независимы, поэтому любое решение системы Дирака может быть представлено в виде их линейной комбинации:

$$y(x, \lambda) = C_1 \mathcal{G}(x, \lambda) + C_2 \phi(x, \lambda),$$



где  $C_1$  и  $C_2$  - произвольные постоянные. То есть между решениями системы Дирака и векторами  $C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$  существует взаимно однозначное соответствие:  $y(x, \lambda) \leftrightarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ . В силу периодичности функций  $p(x)$  и  $r(x)$ , получаем, что:

$$y(a, \lambda) = C_1 \mathcal{G}(a, \lambda) + C_2 \phi(a, \lambda) \leftrightarrow T \bar{C},$$

где матрица  $T$  – матрица монодромии (трансфер-матрица), выражаемая через значения функций  $\phi(x, \lambda)$  и  $\mathcal{G}(x, \lambda)$  в точке  $x = a$ :

$$T = T(a, \lambda) = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_1(a, \lambda) & \phi_1(a, \lambda) \\ \mathcal{G}_2(a, \lambda) & \phi_2(a, \lambda) \end{pmatrix}.$$

Таким образом, матрица монодромии позволяет переводить решения, определенные на интервале  $[0, a]$ , на всю вещественную ось с помощью соотношения:

$$y(x + na, \lambda) = T^n \bar{C}, \quad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

### 3. Порядок проведения исследования и вычисления

Оператор Дирака в матричном виде определяется выражением:

$$D_0 = ic \frac{d}{dx} \otimes \sigma_1 + \frac{c^2}{2} \otimes \sigma_3, \quad \text{Dom}(D_0) = H^1(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2,$$

где  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  - матрицы Паули, соответственно равные:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Системой Дирака будем называть систему вида:

$$D_0 \psi = \lambda \psi.$$

Ее можно переписать в развернутом виде:

$$\begin{pmatrix} \frac{c^2}{2} & -ic \frac{d}{dx} \\ -ic \frac{d}{dx} & -\frac{c^2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

или в наглядном эквивалентном виде системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{c^2}{2} \psi_1 - ic \psi_2' = \lambda \psi_1 \\ -ic \psi_1' - \frac{c^2}{2} \psi_2 = \lambda \psi_2 \end{cases}.$$

Очевидно, что полученная система представляет собой однородную систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами. Несложными вычислениями находятся ее общие решения:

$$\begin{cases} \psi_1 = i \sqrt{\frac{c^2 + 2\lambda}{c^2 - 2\lambda}} (C_1 e^{kx} - C_2 e^{-kx}), \\ \psi_2 = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx} \end{cases},$$

где  $k = \frac{\sqrt{c^4 - 4\lambda^2}}{2c}$ . Отсюда несложно получить условие вещественнозначности числа  $k$ :

$c^2 > 2\lambda$ . Оно равносильно дискретности получаемого спектра и возможному наличию локализованных состояний. В противном случае спектр непрерывен и для нашей задачи интереса не представляет.

Обозначим приложение оператора Дирака к нашей системе «цепочка с изгибом». Выделим один период одного из полукристаллов (рис. 2). На каждой из четырех его «ветвей» определены функции  $\psi_{1,2}^j$ , соответствующие оператору Дирака.

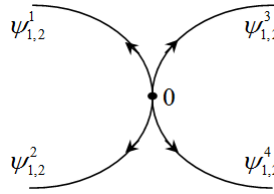


Рис. 2 Один период кристаллической решетки.

Запишем граничные условия «сшивки» в точке О:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^4 \psi_2^j(+0) = -\frac{i\alpha}{c} \psi_1(0) \\ \psi_1(0) = \psi_1^j(+0) = const, \forall j = 1, \dots, 4 \end{cases} .$$

Условия симметричности системы:

$$\psi_1^1\left(\frac{\pi}{2}\right) = \psi_1^2\left(\frac{\pi}{2}\right), \quad \psi_2^1\left(\frac{\pi}{2}\right) = \psi_2^2\left(\frac{\pi}{2}\right).$$

Решения систем Дирака для каждой из функций  $\psi_{1,2}^j$  выражаются через соответствующие им  $C_{1,2}^j$ . Используя приведенные граничные условия и условия симметричности, а так же решение системы Дирака в общем виде, определим зависимость  $C_{1,2}^{3,4}$  от  $C_{1,2}^{1,2}$ :

$$\begin{cases} C_1^1 = C_1^2, \quad C_2^1 = C_2^2, \\ \begin{cases} C_1^3 = C_1^4 = (\gamma - 1)C_1^1 - (\gamma + 1)C_2^1 \\ C_2^3 = C_2^4 = \gamma C_1^1 - \gamma C_2^1 \end{cases} \end{cases} ,$$

где  $\gamma = \frac{\alpha}{4c} \sqrt{\frac{c^2 + 2\lambda}{c^2 - 2\lambda}}$ .

Теперь можно явно записать матрицу монодромии  $T$ , пересчитывающую решения левого конца полупериода на решения правого конца:

$$\begin{pmatrix} C_1^3 \\ C_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1^4 \\ C_2^4 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} C_1^2 \\ C_2^2 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} \gamma - 1 & -\gamma - 1 \\ \gamma & -\gamma \end{pmatrix}.$$

Нетрудно найти ее собственные числа и отношение координат соответствующих им собственных векторов:

$$\lambda_q = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 8\gamma}}{2}, \quad \frac{e_1^q}{e_2^q} = \frac{\gamma + \lambda_q}{\gamma}, \quad q = 1, 2.$$

Вернемся к исходной модели и рассчитаем поведение в месте изгиба. Нам необходимо определить зависимость  $C_{1,2}^{5,6}$  от  $C_{1,2}^{1,2}$  (рис. 3), аналогично тому, как сделали это для периода полукристалла.

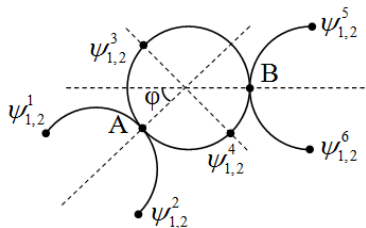


Рис. 3 Функции, определяющие поведение в окрестности изгиба цепочки.

Связь между  $C_{1,2}^{3,4}$  и  $C_{1,2}^{1,2}$  аналогична найденной ранее и определяется той же матрицей монодромии  $T$ . Для определения зависимости  $C_{1,2}^{5,6}$  от  $C_{1,2}^{3,4}$  снова запишем граничные условия и условия симметричности, но уже в точке В:

$$\begin{cases} \psi_2^3(\phi) + \psi_2^4(\phi) + \psi_2^5(0) + \psi_2^6(0) = -\frac{i\alpha}{c} \psi_1^3(\phi), \\ \psi_1^3(\phi) = \psi_1^4(\phi) = \psi_1^5(0) = \psi_1^6(0) \\ \psi_1^3(\phi) = \psi_1^4\left(\frac{\pi}{2} + \phi\right), \psi_2^3(\phi) = \psi_2^4\left(\frac{\pi}{2} + \phi\right). \end{cases}$$

Решив данную систему уравнений, получим матрицу монодромии  $T'$ , связывающую  $C_{1,2}^{5,6}$  и  $C_{1,2}^{3,4}$ :

$$\begin{pmatrix} C_1^5 \\ C_2^5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1^6 \\ C_2^6 \end{pmatrix} = T' \begin{pmatrix} C_1^3 \\ C_2^3 \end{pmatrix}, \quad T' = \begin{pmatrix} \frac{\gamma}{-e^{k\phi}} & \frac{1-\gamma}{-e^{k\phi}} \\ \frac{1+\gamma}{-e^{-k\phi}} & \frac{\gamma}{e^{-k\phi}} \end{pmatrix}.$$

Имея зависимость  $C_{1,2}^{5,6}$  от  $C_{1,2}^{3,4}$  и  $C_{1,2}^{3,4}$  от  $C_{1,2}^{1,2}$ , нетрудно выразить  $C_{1,2}^{5,6}$  через  $C_{1,2}^{1,2}$ :

$$\begin{pmatrix} C_1^5 \\ C_2^5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1^6 \\ C_2^6 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} C_1^3 \\ C_2^3 \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} -\frac{(\gamma+1)^2 e^{k\phi}}{2\gamma} + \frac{\gamma^2}{(\gamma-1)e^{k\phi}} & \frac{\gamma e^{2k\phi} + e^{2k\phi} + \gamma + 3}{2e^{k\phi}} \\ \frac{\gamma^2(2e^{-k\phi} - e^{k\phi}) + e^{k\phi}}{2\gamma} & \frac{(\gamma-1)(e^{k\phi} + e^{-k\phi})}{2} \end{pmatrix}.$$

Определив собственные числа  $\lambda_{1,2}^M$  и отношение координат соответствующих им собственных векторов матрицы монодромии  $M$ , получим ключ к решению поставленной задачи: приравняв отношение координат собственных векторов матриц  $T$  и  $M$  соответственно, получим уравнение на  $\lambda$ . Наличие решений этого уравнения будет говорить о теоретической возможности наличия связанных состояний системы «цепочка с изгибом».

К сожалению, недостающие уравнения пока не составлены и не решены, однако получение матриц монодромии  $T$  и  $M$  делает понятным, что это лишь технически емкие вычисления, и не представляют идеологических трудностей.

### 3. Выводы

В работе разобран механизм моделирования структуры соединенных полу-кристаллов. Точечные заряды задаются в соответствии с моделью Кронига-Пенни на основе  $\delta$ -функций, а для нахождения точек дискретного спектра оператора Дирака используется матрица монодромии окрестности изгиба. Такая модель позволяет описать спектральные свойства двух соединенных под углом полукристаллов с точечными потенциалами.

Модель квантового графа «цепочка с изгибом» является подсистемой модели графена. Задача нахождения связанных локализованных состояний исследуемой структуры выступает в роли подзадачи нахождения связанных локализованных в графене, что представляет огромный научный интерес.

Получаемая математическая модель обладает большой гибкостью с том смысле, что позволяет находить решения соединения полукристаллов различной конфигурации, варьируя угол их соединения и значения точечных зарядов.

Полностью решить необходимые уравнения пока не удалось, однако уже проделанная работа оставляет за собой лишь технически емкие математические вычисления. Идеологической сложности они не представляют, и будут выполнены в ходе продолжения работы по данной теме.

## Список литературы

- [1] Wei, D. and Liu, Y., The Intramolecular Junctions of Carbon Nanotubes // *Advanced Materials*. 2008.– 20: 2815-2841. doi: 10.1002/adma.200800589.
- [2] Лобанов И.С., Попов И.Ю. Рассеяние на стыке нанотрубок «зигзаг» и «кресло»// *Наносистемы: физика, химия, математика*. 2012. Т. 3. No. 2. С. 4-26.
- [3] Duclos P. On the spectrum of a bent chain graph / P. Duclos, P. Exner, O. Turek // *J. Phys. A: Math. Theor*, 2008. – 41-C.415206/1-18-Библиограф.: с. 17–18.
- [4] Kronig, R. de L.: *Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices* / R. de L. Kronig, W.G. Penney. – *Proc. Roy. Soc. (London)* – 1931.– Vol. 130A.
- [5] Левитан Б. М. Операторы Штурма – Лиувилля и Дирака / Б. М. Левитан, И. С. Саргсян. – М. : Наука, 1988. – 432 с.

## ЯВНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ, ОПИСЫВАЕМЫЕ СУММОЙ ТЕНЗОРНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ ОПЕРАТОРОВ

А.А. Бойцев  
boitsevanton@gmail.com

### 1. Введение

Операторы, представляющие из себя сумму тензорных произведений, часто возникают в вопросах квантовой механики. Исследование спектральных свойств самосопряженных операторов (наблюдаемых) является ключевым в описании поведения квантовой системы. Фундаментальное отличие квантовой физики от классической проявляется в наличии взаимодействия между частями сложной системы. К настоящему времени представлено много физических моделей взаимодействия, но все они работают с приближениями. До сих пор нет корректного математического описания взаимодействия подсистем.

В то же время, в работах М. Крейна и Н. Наймарка [1, 2] описывается фундаментальная теория расширения симметрических операторов и теория обобщенных резольвент. С точки зрения физики, расширение симметрического оператора дает параметризованный набор самосопряженных операторов, из которого, при правильном выборе параметров, можно получить оператор, корректно описывающий взаимодействие систем.

Цель настоящей работы – получить взаимодействие между квантовыми системами, используя теорию расширений и метод граничных троек [3–14]. Мы будем рассматривать оператор  $S$ , имеющий вид  $S = A \otimes I_T + I_A \otimes T$ , где  $A$  – плотно заданный симметрический оператор в гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}_A$ , а  $T$  – ограниченный и самосопряженный оператор. Результаты для такого типа операторов получены в работе [15], мы продемонстрируем применение ранее полученных результатов на конкретных примерах.

**Ключевые слова:** самосопряженное расширение оператора, тензорное произведение.

### 2. Линейные отношения

Линейное отношение  $\Theta$  в  $\mathcal{H}$  – это замкнутое линейное подпространство  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ . Множество всех линейных отношений в  $\mathcal{H}$  обозначим  $\tilde{C}(\mathcal{H})$ . За  $C(\mathcal{H})$  обозначим множество всех замкнутых (не обязательно плотно заданных) операторов в  $\mathcal{H}$ . Сопоставляя каждому оператору  $T \in C(\mathcal{H})$  его график  $\text{gr}(T)$ , мы получим, что  $C(\mathcal{H})$  является подпространством  $\tilde{C}(\mathcal{H})$ .

Необходимость рассмотрения множества  $\tilde{C}(\mathcal{H})$  в теории операторов мотивируется следующими соображениями: в отличие от множества  $C(\mathcal{H})$ , множество  $\tilde{C}(\mathcal{H})$  замкнуто по отношению к взятию сопряженного и обратного отношений  $\Theta^*$  и  $\Theta^{-1}$ , которые определяются следующими соотношениями:

$$\Theta^* = \left\{ \begin{pmatrix} k \\ k' \end{pmatrix} : (h', k) = (h, k'), \forall \begin{pmatrix} h \\ h' \end{pmatrix} \in \Theta \right\} \text{ и } \Theta^{-1} \{ \{g, f\} : \{f, g\} \in \Theta \}.$$

Линейное отношение  $\Theta$  называется симметрическим, если  $\Theta \subset \Theta^*$  и самосопряженным, если  $\Theta = \Theta^*$ .

### 3. Граничные тройки

Мы напомним некоторые основные факты, относящиеся к граничным тройкам. Пусть  $S$  – плотно заданный симметрический оператор с равными индексами дефекта  $n_{\pm}(S) = \dim(R_{\pm i})$ , где  $R_z = \ker(S^* - z)$ ,  $z \in \mathbb{C}_{\pm}$ , действующий на сепарабельном гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}$ .

**Определение 1** [7]. Замкнутое расширение  $\tilde{S}$  оператора  $S$  называется правильным, если  $\text{dom}(S) \subset \text{dom}(\tilde{S}) \subset \text{dom}(S^*)$ . Два правильных расширения  $\tilde{S}'$  и  $\tilde{S}$  называются дизъюнктными, если  $\text{dom}(\tilde{S}') \cap \text{dom}(\tilde{S}) = \text{dom}(S)$ , а к тому же трансверсальными, если  $\text{dom}(\tilde{S}') + \text{dom}(\tilde{S}) = \text{dom}(S^*)$ .

Обозначим множество всех правильных расширений  $S$ , пополненное остальными расширениями  $S$  и  $S^*$ , как  $\text{Ext}_S$ . Любое самосопряженное или максимальное диссипативное (аккумулятивное) расширение является правильным.

**Определение 2** [7]. Тройка  $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$ , где  $\mathcal{H}$  – вспомогательное гильбертово пространство,  $\Gamma_0, \Gamma_1: \text{dom}(S^*) \rightarrow \mathcal{H}$  – линейные отображения, называется граничной тройкой оператора  $S^*$ , если выполнено соотношение

$$(S^*f, g) - (f, S^*g) = (\Gamma_1 f, \Gamma_0 g) - (\Gamma_0 f, \Gamma_1 g), \quad f, g \in \text{dom}(S^*), \quad (1)$$

и отображение  $\Gamma = (\Gamma_0, \Gamma_1)^T: \text{dom}(S^*) \rightarrow \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  сюръективно.

Граничная тройка  $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  для оператора  $S^*$  всегда существует, если  $n_+(S) = n_-(S)$ . Так же стоит заметить, что  $n_{\pm}(S) = \dim(\mathcal{H})$  и  $\ker(\Gamma_0) \cap \ker(\Gamma_1) = \text{dom}(S)$ .

С каждой граничной тройкой  $\Pi$  сопоставляют два канонических самосопряженных расширения  $S_j = S^*|_{\ker(\Gamma_j)}$ ,  $j \in \{0, 1\}$ . Для любого расширения  $S_0 = S_0^* \in \text{Ext}_S$  найдется (вообще говоря, не единственная) граничная тройка  $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  оператора  $S^*$  такая, что  $S_0 = S^*|_{\ker(\Gamma_0)}$ .

С помощью подхода граничных троек, мы можем параметризовать все правильные расширения следующим образом.

**Теорема 1** [5, 8]. Пусть  $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  – граничная тройка для оператора  $S^*$ . Тогда отображение

$$\text{Ext}_S \ni \tilde{S} \rightarrow \Gamma \text{dom}(\tilde{S}) = (\Gamma_0 f, \Gamma_1 g)^T: f \in \text{dom}(\tilde{S}) = \Theta \in \tilde{C}(\mathcal{H}) \quad (2)$$

устанавливает биекцию между  $\text{Ext}_S$  и  $\tilde{C}(\mathcal{H})$ . Мы пишем  $\tilde{S} = S_{\Theta}$ , если  $\tilde{S}$  отвечает  $\Theta$  по биекции (2). Кроме того, верны следующие предложения:

1.  $S_{\Theta}^* = S_{\Theta^*}$ , кроме того  $S_{\Theta}^* = S_{\Theta}$  в том и только том случае, когда  $\Theta = \Theta^*$ .
2.  $S_{\Theta}$  является симметрическим (самосопряженным) в том и только том случае, когда  $\Theta$  симметрическое (самосопряженное) отношение.
3. Расширения  $S_0$  и  $S_{\Theta}$  дизъюнктны (трансверсальны) в том и только том случае, если найдется замкнутый (ограниченный) оператор  $B$  такой, что  $\Theta = \text{gr}(B)$ . В таком случае биекция принимает вид  $S_{\Theta} = S_{\text{gr}(B)} = S^*|_{\ker(\Gamma_1 - B\Gamma_0)}$ .

В частности,  $S_j = S^*|_{\ker(\Gamma_j)} = S_{\Theta_j}$ ,  $j \in \{0, 1\}$ , где  $\Theta_0 = \{0\} \times \mathcal{H}$  и  $\Theta_1 = \mathcal{H} \times \{0\} = \text{gr}(O)$ , где  $O$  – нулевой оператор в  $\mathcal{H}$ . Также стоит отметить, что  $\tilde{C}(\mathcal{H})$  содержит тривиальные линейные соотношения  $\{0\} \times \{0\}$  и  $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ , которые параметризуют расширения  $S$  и  $S^*$  соответственно, для любой граничной тройки  $\Pi$ .

#### 4. Гамма-поле, функция Вейля и формула Крейна

Напомним некоторые факты, касающиеся гамма-поля и функции Вейля.

**Определение 3** [4, 5]. Пусть  $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$  – граничная тройка для оператора  $S^*$  и  $S_0 = S^*|_{\ker(\Gamma_0)}$ . Операторнозначные функции  $\gamma(\cdot): \rho(S_0) \rightarrow [\mathcal{H}, \mathcal{H}]$  и  $M(\cdot): \rho(S_0) \rightarrow [\mathcal{H}]$ , определяемые соотношениями  $\gamma(z) = (\Gamma_0|_{R_z})^{-1}$ ,  $M(z) = \Gamma_1 \gamma(z)$ ,  $z \in \rho(S_0)$  называются гамма-полем и функцией Вейля, отвечающими граничной тройке  $\Pi$  соответственно.

Очевидно, что функция Вейля может быть определена и другим образом, как  $M(z)\Gamma_0 f_z = \Gamma_1 f_z, f_z \in R_z, z \in \rho(S_0)$ .

Также следует заметить, что гамма-поле и функция Вейля голоморфны на  $z \in \rho(S_0)$ .

Для любого правильного (не обязательно самосопряженного) расширения  $\tilde{S}_\Theta \in Ext_S$  с непустым резольветным множеством  $\rho(\tilde{S}_\Theta)$  имеет место следующая формула Крейна [4, 5]:

$$(S_\Theta - z)^{-1} - (S_0 - z)^{-1} = \gamma(z)(\Theta - M(z))^{-1} \gamma^*(\bar{z}), z \in \rho(S_0) \cap \rho(S_\Theta). \quad (3)$$

Данная формула расширяет стандартную формулу Крейна, которая справедлива для канонических расширений, на любые  $\tilde{S}_\Theta \in Ext_S$  с  $\rho(\tilde{S}_\Theta) \neq \emptyset$ . Кроме того, ввиду определения гамма-поля и функции Вейля, данная формула имеет прямую связь с граничными тройками.

## 5. Ранее полученные результаты

Пусть  $A$  – плотно заданный симметрический оператор на сепарабельном гильбертовом пространстве  $H_A$ , а  $T$  – ограниченный самосопряженный оператор, заданный на сепарабельном гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}_T$ . Рассматривается оператор  $S = A \otimes I_T + I_A \otimes T$ . Данный оператор определяется как замыкание оператора  $A \odot I_T + I_A \odot T$  так, что

$$\text{dom}(A \odot I_T + I_A \odot T) = \left\{ f = \sum_{k=1}^n g_k \otimes h_k : g_k \in \text{dom}(A), h_k \in \mathcal{H}_T \right\} \text{ и}$$

$$(A \odot I_T + I_A \odot T)f = \sum_{k=1}^n (A g_k \otimes h_k + g_k \otimes T h_k), f \in \text{dom}(A \odot I_T + I_A \odot T).$$

Оператор  $S$  оказывается замкнутым симметрическим оператором [9].

**Теорема 2** [15]. Если  $\Pi_A = \{\mathcal{H}_A, \Gamma_0^A, \Gamma_1^A\}$  – граничная тройка оператора  $A^*$ , тогда  $\Pi_S = \{\mathcal{H}, \Gamma_0^S, \Gamma_1^S\}$  – граничная тройка для оператора  $S^*$ , где

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_T, \quad \Gamma_0^S = \Gamma_0^A \otimes I, \quad \Gamma_1^S = \Gamma_1^A \otimes I.$$

Для гамма-поля и функции Вейля верны следующие результаты.

**Теорема 3** [15]. Пусть  $\Pi_A = \{\mathcal{H}_A, \Gamma_0^A, \Gamma_1^A\}$  – граничная тройка оператора  $A^*$  с гамма-полем  $\gamma_A(z)$ . Если  $\Pi_S = \{\mathcal{H}, \Gamma_0^S, \Gamma_1^S\}$  – граничная тройка для оператора  $S^*$ , то гамма-поле  $\gamma_S(z)$ , отвечающее граничной тройке  $\Pi_S$  допускает представление

$$\gamma_S(z) = \int_a^b d\hat{E}_T(\lambda) \gamma_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} = \int_a^b \gamma_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} d\hat{E}_T(\lambda),$$

где  $z \in \mathbb{C}_\pm, \sigma(T) \subset [a, b)$ .

**Теорема 4** [15]. Пусть  $\Pi_A = \{\mathcal{H}_A, \Gamma_0^A, \Gamma_1^A\}$  – граничная тройка оператора  $A^*$  с функцией Вейля  $M_A(z)$ . Если  $\Pi_S = \{\mathcal{H}, \Gamma_0^S, \Gamma_1^S\}$  – граничная тройка для оператора  $S^*$ , то функция Вейля  $M_S(z)$ , отвечающая граничной тройке  $\Pi_S$  допускает представление

$$M_S(z) = \int_a^b d\hat{E}_T(\lambda) M_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} = \int_a^b M_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} d\hat{E}_T(\lambda),$$

где  $z \in \mathbb{C}_\pm, \sigma(T) \subset [a, b)$ .

## 6. Пример

Рассмотрим симметрический оператор  $A = -\frac{d^2}{dx^2}$  с областью определения

$$\text{dom}(A) = \{f \in W_2^2(0; +\infty) : f(0) = f'(0) = 0\},$$

в гильбертовом пространстве  $L_2(\mathbb{R})$ . Следует отметить, что  $n_\pm(A) = 1$ . В качестве ограниченного самосопряженного оператора  $T$  рассмотрим

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

действующий на пространстве  $\mathbb{C}^2$ . Вычислим граничную форму оператора  $A^*$ . Интегрируя по частям, получим

$$(A^* f, g) = - \int_0^{+\infty} f'' \bar{g} dx = -f' \bar{g} \Big|_0^{+\infty} + f \bar{g}' \Big|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} f \bar{g}'' dx,$$

то есть

$$(A^* f, g) - (f, A^* g) = -f' \bar{g} \Big|_0^{+\infty} + f \bar{g}' \Big|_0^{+\infty}.$$

Очевидно, что  $\Gamma_0^A f = f(0)$ ,  $\Gamma_1^A f = f'(0)$ , а значит, по теореме 2 имеем

$$\Gamma_0^S f = f(0) \otimes I, \quad \Gamma_1^S f = f'(0) \otimes I.$$

Построим гамма-поле, отвечающее оператору  $A^*$ . Так как дефектный элемент имеет вид  $e^{i\sqrt{z}x}$  (мы выбираем ветку корня так, что  $\text{Im} \sqrt{z} > 0$ ), то

$$\Gamma_0^A e^{i\sqrt{z}x} = 1,$$

тем самым

$$\gamma_A(z) = 1.$$

Так как оператор  $T$  - самосопряженный, то  $T = P_1 - P_2$ , где  $P_i$  - проекторы и

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Вычислим функцию Вейля для  $A^*$ , получим

$$M_A(z) = \Gamma_1^A \gamma_A(z) = i\sqrt{z}.$$

Тогда, согласно теореме 4, имеем

$$M_S(z) = M_A(z-1) \otimes P_1 + M_A(z+1) \otimes P_2 = \begin{pmatrix} i\sqrt{z-1} & 0 \\ 0 & i\sqrt{z+1} \end{pmatrix}.$$

## 7. Заключение

В данной работе проведен обзор результатов, полученных для оператора  $S = A \otimes I_T + I_A \otimes T$ , где  $A$  – плотно заданный, симметрический оператор, а  $T$  – ограниченный и самосопряженный оператор. Мы построили гамма-поле и функцию Вейля для этого оператора, используя технику граничных троек. С помощью формулы Крейна получена параметризация всех самосопряженных расширений.

## Список литературы

- [1] Крейн М.Г., Лангер Г.К. Дефектные подпространства и обобщенные резольвенты в пространстве  $P_k$  // Функциональный анализ и приложения. 1971. № 3. С. 54–69.
- [2] Наймарк М.А. Линейные дифференциальные операторы. Наука. 1969. (уточнить количество страниц)
- [3] Baumgartel H., Wollenberg M. Mathematical scattering theory // Mathematical textbooks and monographs. 1983. Derkach V.A., Malamud M.M. On the Weyl function and Hermite operators with lacunae // Dokl. Ak. Nauk USSR. 1987. N 5. P. 1041–1046.
- [4] Derkach V.A., Malamud M.M. Generalized resolvents and the boundary value problems for Hermitian operators with gaps // J. Func. Anal. 1991. N 1. P. 1–95.
- [5] Derkach V.A., Malamud M.M. The extension theory of Hermitian operators and the moment problem // J. Math. Sci. 1995. N 2. P. 141–242.
- [6] Gorbachuk V.I., Gorbachuk M.L. Boundary value problems for operator differential equations // Mathematics and it's applications. 1991.
- [7] Malamud M.M. Some classes of extensions of a Hermitian operator with lacunae // Ukraine Mat. Zh. 1992. N 2. P. 215–233.



- [8] Malamud M.M., Neidhardt H. Sturm-liouville boundary value problems with operator potentials and unitary equivalence // J. Differ. Equations. 2012. N 11. P. 5875–5922.
- [9] Smudgen K. Unbounded self-adjoint operators on Hilbert space // Graduate texts in mathematics. 2012.
- [10] Malamud M.M., Malamud S.M. Spectral theory of operator measures in a Hilbert space // Algebra and analys. 2003. N 3. P. 1–77.
- [11] Gorbachuk M.L. Self-adjoint boundary problems for a second-order differential equation with unbounded operator coefficient // Funct. Anal. Appl. 1971. N 5. P. 9–18.
- [12] Birman M.S. Existence conditions for wave operators // Izv. Akad. Nauk SSSR. 1963. N 27. P. 883–906.
- [13] Malamud M.M., Neidhardt H. On the Kato-Rosenblum and the Weyl-Neuman theorems // Dokl. Akad. Nauk. 2010. N 2. P. 162–166.
- [14] Boitsev A.A., Neidhardt H., Popov I.Yu. Weyl function for sum of operators tensor product // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics. 2013. N 6. P. 747–759.

## ГРАФ С ДЕЛЬТА-ПОТЕНЦИАЛАМИ, ПЕРИОДИЧНО РАССТАВЛЕННЫМИ ПО СПИРАЛИ, В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**О.А. Догонашева**  
xomaiya@gmail.com

Строится модель типа квантового графа для спиральной периодической системы точечных потенциалов в магнитном поле. Получено спектральное уравнение в явном виде.

**Ключевые слова:** квантовые графы, спектральная задача, магнитные эффекты.

### 1. Введение

Начало интенсивных исследований квантовых графов с магнитным полем связано с изучением эффекта Ааронова-Бома. Существует несколько работ, касающихся спектральных свойств подобных гамильтонианов [1-5].

### 2. Постановка задачи

Мы представляем оператор в магнитном поле на графе в пространстве  $R^3$ . Общие рассуждения о том, как это можно сделать, представлено в статье [4], в данной же статье решается конкретная задача для графа в виде спирали. Итак, определим ребро  $e$  на отображении

$$r : [0, l_e] \rightarrow R^3 : r(t) = (r_1(t), r_2(t), r_3(t)) .$$

Здесь мы используем натуральную параметризацию  $|\dot{r}^2| \equiv 1$ , длина ребра равна  $l_e$ ,  $\dot{r}^2$  – производная  $r(t)$ . Магнитное поле  $\mathbf{B}$  определяется векторным потенциалом

$$\mathbf{A} : R^3 \rightarrow R^3, \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

Скалярный потенциал  $V$  мы полагаем равным нулю. В нашем случае оператор Шредингера в магнитном поле принимает форму:

$$Hf(r) = -(\nabla - i\mathbf{A})^2 f$$

В этой формуле  $V = 0$ ,  $e = \hbar = 1$ ,  $m = 1/2$ . Мы рассматриваем этот оператор на линии. Соответственно, оператор импульса ограничен тангенциальным подпространством на кривой.

$$\dot{r} \cdot (\nabla - i\mathbf{A})f = \dot{r} \cdot (\nabla f) - i(\dot{r} \cdot \mathbf{A})f = \frac{\partial f(r(t))}{\partial t} - ia(t)f(r(t))$$

Здесь,

$$a(t) = \dot{r}(t) \cdot \mathbf{A}(r(t))$$

В соответствии с таким представлением, оператор Ландау на кривой принимает форму

$$Hf(t) = -\left(\frac{\partial}{\partial t} - ia\right)^2 f(t)$$

Удобно использовать трюк, приводящий к устранению магнитного поля. А именно, сделаем следующую подстановку:

$$f(t) = g(t)e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau}$$

Следовательно,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - ai\right) e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} g(t) = -aif(t) + g'(t)e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} + g(t)ia(t)e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} = e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} \frac{\partial}{\partial t} g(t)$$

Отсюда:

$$He^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} = e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + V(t)\right).$$

Таким образом, спектральная задача  $Hf = Ef$  сводится к задаче для функции  $g$ . Эта функция удовлетворяет обычному «свободному» уравнению Шрёдингера

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2} g(t) = Eg(t)$$

Заметим, что если  $V \neq 0$ , то получаем обычное уравнение Шрёдингера с потенциалом  $V$ :

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + V\right)g = Eg.$$

### 3. Граничные и магнитные условия

Магнитное поле приводит к изменениям в граничных условиях. Для оператора Шрёдингера на метрическом графе, граничное условие на вершине – это линейное отношение между значениями  $f$  и  $f'$  для инцидентных ребер. Для оператора Ландау мы должны заменить производную на так называемую магнитную производную  $\partial = \frac{\partial}{\partial t} - ia$ . Конечно, она совпадает с обычной производной при отсутствии магнитного поля. Соответственно, условие на  $f$  у вершины  $v$  графа имеет вид:

$$\begin{cases} f_e(v) = f_{e'}(v), & e \cap e' = v, \\ \sum \partial f'(e(v)) = \alpha f_e'(v). \end{cases}$$

Здесь,  $f_e(v)$  обозначает значение волновой функции  $f$  для ребра  $e$  у соответствующей вершины  $v$ . Мы предполагаем, что здесь имеются  $\delta$  – потенциалы с силой  $\alpha$  у вершин. Здесь мы представляем нашу систему в виде графа с вершинами и ребрами (длина ребра -  $l$ ). Суммирование идет по ребрам, инцидентным данной вершине.  $\chi(l)$  – значение некоторой функции, определяющей сингулярность у вершины.

Заменим магнитную производную  $f(t)$  магнитной производной  $g(t)$ , согласно правилу выше:

$$\partial f_e(t) = \partial \left( e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} g(t) \right) - aig(t)e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau} = g'(t)e^{i \int_0^t a(\tau) d\tau}$$

Следовательно,

$$\begin{cases} \partial f_e(0) = g_e'(0), \\ \partial f_e(l) = g_e'(l)e^{i\Phi_e(v)}, \\ f_e(0) = g_e(0), \\ f_e(l) = g_e(l)e^{i\Phi_e(v)}, \end{cases}$$

$$\theta(x) = \Phi_e(v) = \begin{cases} \int_0^t a_e(\tau) d\tau, & v \in e \\ 0 \end{cases}$$

Следовательно, связывающие условия в вершинах имеют вид:

$$\begin{cases} e^{i\Phi_e(v)} g_e(v) = g_{e'}(v) e^{i\Phi_{e'}(v)} \\ \sum_e g'_e(v) e^{i\Phi_e(v)} = \alpha g_e(l) \end{cases}$$

Более того, мы имеем условие периодичности (условие Блоха):

$$\begin{cases} g_e(0) = g_e(L) e^{ipL}, \\ g'_e(0) = g'_e(L) e^{ipL}. \end{cases}$$

В данном случае,  $T$  – это период (постоянная решетки),  $p$  – квазиимпульс.

#### 4. Спектр

Решение уравнения (5) для ребра  $e$  имеет форму:

$$g_e(t) = C_e^+ \phi_1(t) + C_e^- \phi_2(t)$$

Здесь

$$\begin{cases} \phi_1(t) = e^{\sqrt{-E}t} \\ \phi_2(t) = e^{-\sqrt{-E}t} \end{cases}$$

В нашем случае граф имеет простую форму спирали. Мы будем рассматривать ситуацию, когда ячейка решетки (один шаг спирали) содержит шесть равноудаленных  $\delta$  – потенциалов, длины ребер равны  $l$  (конечно, можно просто поменять количество потенциалов в ячейке решетки).

Чтобы найти коэффициенты, воспользуемся граничными условиями. Рассмотрим первую вершину  $e$  решетки. Мы имеем два инцидентных ребра. Соответствующие функции обозначим как  $g_1(t)$  и  $g_2(t)$ . Следовательно:

$$\begin{cases} C_2^+ + C_2^- = C_1^+ \phi_1(l) e^{i\Phi_1(l)} + C_1^- \phi_2(l) e^{i\Phi_1(l)} \\ C_1^+ \phi_1(l) e^{i\Phi_1(l)} - C_1^- \phi_2(l) e^{i\Phi_1(l)} - C_2^+ + C_2^- = \frac{\alpha}{\sqrt{-E}} (C_1^+ \phi_1(l) + C_1^- \phi_2(l)) \end{cases}$$

Используя эти условия, мы выражаем  $C_2^+$  и  $C_2^-$  через  $C_1^+$  и  $C_1^-$ . Аналогичные условия дают соотношения между функциями  $g_2(t)$  и  $g_3(t)$ ,  $g_3(t)$  и  $g_4(t)$ ,  $g_4(t)$  и  $g_5(t)$ ,  $g_5(t)$  и  $g_6(t)$ . В результате, мы получаем отношение между  $C_1^+$ ,  $C_1^-$  и  $C_6^+$ ,  $C_6^-$ :

$$\begin{cases} C_6^+ = A_1 C_1^+ + B_1 C_1^- \\ C_6^- = A_2 C_1^+ + B_1 C_1^- \end{cases}$$

Здесь коэффициенты  $A_1, A_2, B_1$  и  $B_2$  определены следующим образом.

$$\begin{aligned} A_1 = & \left[ \varphi_1^2 H - \varphi_2^2 H - \varphi_1 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H \right] \left[ \varphi_1^3 H^3 + \frac{\alpha}{E} \varphi_1^2 \varphi_2 H^2 - \varphi_1 \varphi_2^2 H^3 + \varphi_1^2 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_1 \varphi_2^2 H^3 \right. \\ & + \varphi_2 H \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right) \left. \right] \\ & - \left[ \varphi_1 \varphi_2 H \left( H^2 + \frac{\alpha}{E} H - \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 \right) + \varphi_1^2 H \frac{\alpha}{E} + \varphi_2^2 H \left( H - \frac{\alpha}{E} \right) \right] \left[ 2\varphi_1^2 \varphi_2 H^3 \right. \\ & \left. + \varphi_1 \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H^2 + \varphi_1 \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_2^3 H^3 + \varphi_2 H \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right)^2 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_1 &= \left[ 2\varphi_1\varphi_2H - \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H \right] \left[ \varphi_1^3 H^3 + \frac{\alpha}{E} \varphi_1^2 \varphi_2 H^2 - \varphi_1 \varphi_2^2 H^3 + \varphi_1^2 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_1 \varphi_2^2 H^3 \right. \\
&\quad \left. + \varphi_2 H \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right) \right] \\
&\quad + \left[ -\varphi_2^2 \left( H^2 - \frac{\alpha}{E} H - \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 \right) + \varphi_1 \varphi_2 H \left( H - 2 \frac{\alpha}{E} \right) \right] \left[ 2\varphi_1^2 \varphi_2 H^3 + \varphi_1 \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H^2 \right. \\
&\quad \left. + \varphi_1 \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_2^3 H^3 + \varphi_2 H \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right)^2 \right] \\
A_2 &= \left[ \varphi_1^2 H - \varphi_2^2 H - \varphi_1 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H \right] \left[ \varphi_1^3 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_1^2 \varphi_2 H^3 + \varphi_1 H \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 \varphi_1^2 \varphi_2 H - 2\varphi_1 \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H^2 + \varphi_2^3 H^3 + \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right)^2 \right] \\
&\quad - \left[ \varphi_1 \varphi_2 H \left( H^2 + \frac{\alpha}{E} H - \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 \right) + \varphi_1^2 H \frac{\alpha}{E} + \varphi_2^2 H \left( H - \frac{\alpha}{E} \right) \right] \left[ \varphi_1^2 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_1 \varphi_2^2 H^3 \right. \\
&\quad \left. + \varphi_2 H \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right) + \varphi_1 \varphi_2^2 \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 H + \varphi_1^2 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H^2 \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right)^2 \right] \\
B_2 &= \left[ 2\varphi_1\varphi_2H - \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H \right] \left[ \varphi_1^3 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_1^2 \varphi_2 H^3 + \varphi_1 H \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 \varphi_1^2 \varphi_2 H - 2\varphi_1 \varphi_2^2 \frac{\alpha}{E} H^2 + \varphi_2^3 H^3 + \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right)^2 \right] \\
&\quad + \left[ -\varphi_2^2 \left( H^2 - \frac{\alpha}{E} H - \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 \right) + \varphi_1 \varphi_2 H \left( H - 2 \frac{\alpha}{E} \right) \right] \left[ \varphi_1^2 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H^2 - \varphi_1 \varphi_2^2 H^3 \right. \\
&\quad \left. + \varphi_2 H \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right) + \varphi_1 \varphi_2^2 \left( \frac{\alpha}{E} \right)^2 H + \varphi_1^2 \varphi_2 \frac{\alpha}{E} H^2 \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\alpha}{E} \varphi_1 - \varphi_2 H \right) \left( \varphi_2 \frac{\alpha}{E} + \varphi_1 H \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

где

$$H = e^{i\Phi}, \varphi_1 = \varphi_1(l), \varphi_2 = \varphi_2(l)$$

Используя условие периодичности, приходим к следующей системе:

$$\begin{cases} C_6^+ \phi_1(l) + C_6^- \phi_2(l) = [C_1^+ + C_1^-] e^{ipl} \\ C_6^+ \phi_1(l) - C_6^- \phi_2(l) = [C_1^+ - C_1^-] e^{ipl} \end{cases}$$

Эта система имеет нетривиальные решения, если ее определитель  $I(E)$  равен нулю:

$$I(E) = \begin{vmatrix} A_1 - \frac{e^{ipl}}{\varphi_1} & B_1 \\ A_2 & B_2 - \frac{e^{-ipl}}{\varphi_2} \end{vmatrix}$$

Спектральные точки ( $E$ ) получаются из нулей  $I(E)$ . Зоны получаются варьированием квазиимпульса.

$$0 < p < \frac{2\pi}{L}, L = 6$$

Остальные значения будут повторять эти траектории из-за периодичности.

## 5. Заключение

Итак, в работе построена модель типа квантового графа для спиральной периодической системы точечных потенциалов в магнитном поле. Спектральное уравнение получено в явном виде.

## Список литературы

- [1] Analysis on Graphs and its Applications, Ed by. Exner P. et al. — Proc. Symp. Pure Math., AMS, 2008
- [2] P. Exner, J. Lipovsky: Non-Weyl resonance asymptotics for quantum graphs in a magnetic field. Phys. Lett. A375 (2011), 805-807
- [3] V. Kostrykin, R. Schrader: Quantum wires with magnetic fluxes, Comm. Math. Phys. 237 (2003), 161–179
- [4] И.С. Лобанов, Е.С. Трифанова. Прямые и обратные задачи в модели квантовых графов. Наносистемы: Phys. Chem. Math. 3 (5), 6-32 (2012).
- [5] Kuchment, P., Quantum graphs: I. Some basic structures. Waves Random Media, 14 (2004), S107 - S128.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТА В ГРАДИЕНТНОЙ СРЕДЕ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ

**С. Еженкова**  
nmaadara@gmail.com

Строится математическая модель, описывающая движение светового луча в среде с изменяющимся коэффициентом преломления, образованной оседающими в жидкости частицами. Получено распределение по размерам частиц, оседающих в жидкости; рассчитана траектория светового луча в данной среде; исследована зависимость траекторий светового луча от начальной концентрации частиц.

**Ключевые слова:** принцип Ферма, уравнение Эйлера.

### 1. Введение

В последнее время изучением градиентных сред и процессов в них занимаются многие исследователи [1-3].

В данной работе рассматривается градиентная среда, образованная оседающими в жидкости частицами. Для вычисления пути следования луча в ней используется принцип Ферма, то есть луч следует по траектории, минимизирующей функционал Ферма [4,5].

Цель работы – построение математической модели, описывающей процесс оседания частиц в жидкости и вычисление траектории движения луча в полученной среде.

В работе рассчитана плотность функции распределения по размерам частиц, оседающих в жидкости; на основании этой плотности рассчитано возмущение показателя преломления среды, образованной оседающими частицами; также рассчитана траектория светового луча в данной среде и исследована зависимость траекторий светового луча от начальной концентрации частиц.

### 2. Формулировка модели

В качестве объекта исследования возьмем сосуд с жидкостью, в котором находятся частицы разных размеров. Более тяжелые частицы оседают на дно, более легкие остаются у поверхности, и, таким образом, они распределяются по глубине, создавая градиентную среду. На нее падает световой луч, и рассматривается его дальнейшее поведение.

#### 2.1. Расчёт траектории движения луча

Рассмотрим время прохождения света на небольшом участке пути:

$$dt = \frac{dl}{v} = \frac{n}{c} dl \quad (1)$$

Здесь:

$dt$  – время прохождения;

$dl$  – участок пути;

$v$  – скорость прохождения,

$n$  – показатель преломления,

$c$  – скорость света.

Время прохождения на участке пути конечного размера:

$$t_{1,2} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{n}{c} dl \quad (2)$$

Вычислим путь частицы:

$$dl = \sqrt{dx^2 + dz^2} = dx \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx}\right)^2}, \quad (3)$$

Подставим (3) в (2):

$$t_{1,2} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{n(z)}{c} \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx}\right)^2} dx \quad (4)$$

По принципу Ферма из всех путей, связывающих  $P_1$  и  $P_2$ , луч будет следовать по тому пути, для которого вариация интеграла равна 0:

$$\delta \int_{x_1}^{x_2} \frac{\hat{n}(z)}{c} \sqrt{1 + z'^2} dx = 0 \quad (5)$$

Функция, реализующая экстремум интеграла (6), должна удовлетворять уравнению Эйлера:

$$\frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial z'} = \frac{\partial F}{\partial z} \quad (6)$$

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{n}{c} \frac{z'}{\sqrt{1+z'^2}} \right) = \frac{1}{c} \frac{dn}{dz} \sqrt{1+z'^2}, \quad (7)$$

Сократим на  $c$ :

$$\frac{d}{dx} \left( n \frac{z'}{\sqrt{1+z'^2}} \right) = \frac{dn}{dz} \sqrt{1+z'^2} \quad (8)$$

Запишем коэффициент преломления среды с учетом возмущения:

$$n = n_0(1 + \hat{n}(z)), \quad (9)$$

где  $\hat{n}(z)$  – относительное отклонение коэффициента преломления от постоянного значения,  $n_0$  – начальная концентрация частиц. Подставим (9) в (8):

$$\frac{d}{dx} \left[ n_0(1 + \hat{n}(z)) \frac{z'}{\sqrt{1+z'^2}} \right] = n_0 \frac{d\hat{n}(z)}{dz} \sqrt{1+z'^2} \quad (10)$$

Сократим на  $n_0$  и  $z'$ , и возьмем для упрощения относительно малые наклоны луча и малые возмущения коэффициента преломления:

$$\begin{aligned} z'^2 &\ll 1 \\ \hat{n}(z) &\ll 1 \\ z'' &= \frac{d\hat{n}(z)}{dz} \end{aligned} \quad (11)$$

Запишем граничные условия:

$$\begin{aligned} z|_{x=0} &= z_0 \\ z'|_{x=0} &= z'_0 \end{aligned}$$

В свою очередь,  $z''$  можно разложить следующим образом:

$$z'' = \frac{dz'}{dz} \frac{dz}{dx} = \frac{dz'}{dz} z' \quad (12)$$

Из (11)-(12) следует:

$$\frac{dz'}{dz} z' = \frac{d\hat{n}(z)}{dz} \quad (13)$$

Проинтегрируем (13) с учетом граничных условий (на участке от 0 до  $z$ ):

$$\frac{z'^2}{2} - \frac{z'_0{}^2}{2} = \hat{n}(z) - \hat{n}(0) \quad (14)$$

$$z'^2 = z'_0{}^2 + 2(\hat{n}(z) - \hat{n}(0)) \quad (15)$$

Извлечем квадратный корень:

$$z' = \frac{dz}{dx} = \sqrt{z'_0{}^2 + 2(\hat{n}(z) - \hat{n}(0))} \quad (16)$$

Отсюда:

$$dx = \frac{dz}{\sqrt{z'_0{}^2 + 2(\hat{n}(z) - \hat{n}(0))}} \quad (17)$$

В итоге получаем интегральный вид уравнения траектории луча:

$$x = \int_0^z \frac{dz}{\sqrt{z'_0{}^2 + 2(\hat{n}(z) - \hat{n}(0))}} \quad (18)$$

## 2.2. Расчет процесса оседания частиц в жидкости

Рассмотрим частицу, оседающую в жидкости с постоянной скоростью. На частицу действуют сила притяжения, сила трения, а также выталкивающая сила. Запишем условие равновесия сил, приложенных к оседающей частице:

$$6\pi\mu Rv = \frac{4}{3}\pi R^3(\rho - \rho_{ж})g \quad (19).$$



То есть  $v = \gamma R^2$  – скорость оседания частицы, где  $\gamma = \frac{2(\rho - \rho_{ж})g}{9\mu}$ .

Вычислим радиус той частицы, которая в момент времени  $t$  оказалась на глубине  $z$ .

За время  $t$  до глубины  $z$  с поверхности жидкости доходят частицы определенного радиуса: более крупные опустились ниже, более легкие еще не успели дойти.

Для расчета рассмотрим скорость частицы:

$$v = \frac{z}{t} \quad (20)$$

$$\gamma R_z^2 = \frac{z}{t} \quad (21)$$

Приравняем (20) и (21). Отсюда радиус той частицы, которая к моменту времени  $t$  дойдет до глубины  $z$  выглядит следующим образом:

$$R_z(z, t) = \sqrt{\frac{z}{\gamma t}} \quad (22)$$

Рассмотрим  $f(R, z, t)$  – плотность функции распределения частиц по размерам в момент времени  $t$  на глубине  $z$ .

Уравнение для ее расчета представляет собой уравнение неразрывности и выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial z} = 0 \quad (23)$$

Решение данного уравнения позволит вычислить возмущение показателя преломления полученной среды (31) для уравнения хода лучей (18).

Запишем начальное условие:

$$f|_{t=0} = f_0(R, z)\theta(z) \quad (24)$$

Решение данного уравнения выглядит следующим образом:

$$f(R, z, t) = f_0(R)\theta(z - \gamma R^2 t) \quad (25)$$

Здесь:

$f_0(R)$  – плотность функции распределения в начальный момент времени,

$z = \gamma R^2 t$  – координата частицы (ось направлена вниз, вдоль направления ускорения свободного падения частиц).

Удельный объем (объем частиц в единице объема):

$$V_p(z, t) = \int_0^\infty \frac{4}{3}\pi R^3 f(R, z, t) dR = \frac{4}{3}\pi \int_0^{R_z(z, t)} R^3 f_0(R) dR \quad (26)$$

$f_0(R) = n_0 \alpha^2 R e^{-\alpha R}$  – плотность функции распределения в начальный момент времени, где  $n_0$  – начальная концентрация частиц.

Тогда:

$$V_p(z, t) = \frac{4}{3}\alpha^2 n \pi \int_0^{R_x} R^4 e^{-\alpha R} dR \quad (27)$$

Проинтегрировав (29), получаем итоговую формулу для удельного объема частиц:

$$V_p(z, t) = \frac{4}{3}\alpha^2 n \pi \left( \frac{24}{\alpha^4} - \frac{24e^{-\alpha R}}{\alpha^4} - \frac{24Re^{-\alpha R}}{\alpha^4} - \frac{12R^2 e^{-\alpha R}}{\alpha^3} - \frac{4R^3 e^{-\alpha R}}{\alpha^2} - \frac{R^4 e^{-\alpha R}}{\alpha} \right) \quad (28)$$

Рассчитаем возмущение показателя преломления:

$$\bar{n} = \bar{n}_0 \left( 1 - V_p(z, t) \right) + \bar{n}_p V_p(z, t) \quad (29)$$

$$\bar{n} = \bar{n}_0 (1 + \hat{n}(z)) \quad (30)$$

Здесь:

$\bar{n}_0$  – показатель преломления среды в начальный момент времени,

$\bar{n}_p$  – показатель преломления среды, образованной оседающими частицами.

Приравняем (29) и (30) и получим возмущение показателя преломления в полученной среде:

$$\hat{n}(z) = \left( \frac{\bar{n}_p}{\bar{n}_0} - 1 \right) V_p(z, t) \quad (31)$$

### 3. Результаты

Построен график траектории движения светового луча:

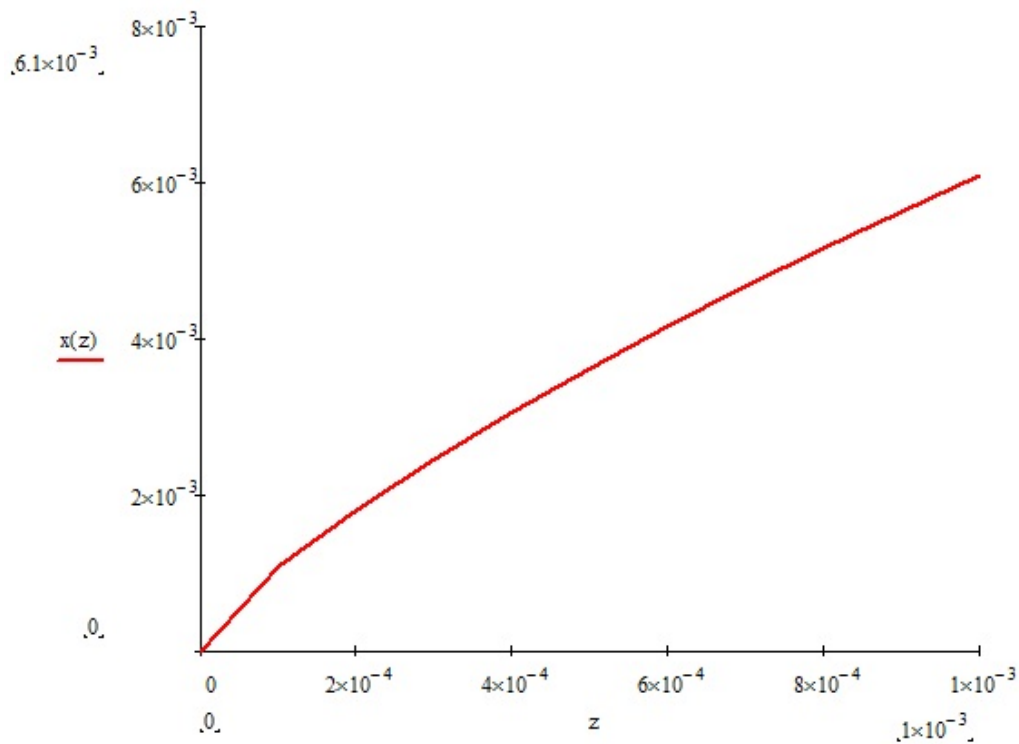


Рисунок 1: Траектория движения светового луча

Построен график, на котором изображено семейство траекторий лучей при заданном наборе концентраций частиц:

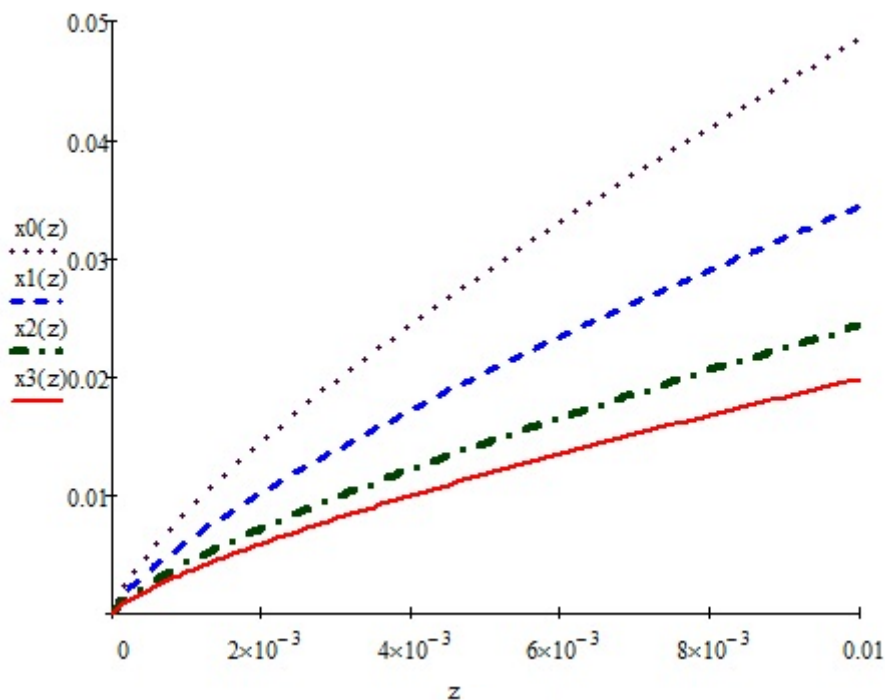


Рисунок 2: График зависимости смещения семейства траекторий луча

На данном графике:

$x_0(z)$  – траектория движения луча при заданной концентрации  $0,5 * 10^3 \text{ см}^{-3}$ ;

$x_1(z)$  – траектория движения луча при заданной концентрации  $1 * 10^3 \text{ см}^{-3}$ ;

$x_2(z)$  – траектория движения луча при заданной концентрации  
 $2 * 10^3 \text{ см}^{-3}$ ;  
 $x_3(z)$  – траектория движения луча при заданной концентрации  
 $3 * 10^3 \text{ см}^{-3}$ .

#### **4. Выводы**

Построена математическая модель, описывающая процесс оседания частиц в жидкости; вычислена траектория движения луча в полученной среде.

#### **Список литературы**

- [1] Верхотуров О.П. Градиентная оптика. -Новосибирск: СГГА, 2003.
- [2] Southwell W.H. Ray Tracing in Gradient-Index Media. J. Opt. Soc. Am. -1982.
- [3] Ильин В.Г., Меланьина Т.М., Ремизов Н.В. Расчет хода луча в градах. Сравнение двух методов. Оптико-механическая промышленность. -1984.-№12.
- [4] Борн М, Вольф Э. Основы оптики.-М.: Наука, 1973.
- [5] Герцбергер М. - Современная геометрическая оптика. - М.:Изд-во Ин. лит., 1962.

## О СВЯЗИ БИНАРНЫХ ОТНОШЕНИЙ ЭЛЕМЕНТОВ ГРУППЫ

**Ермекова Айнагуль Амангельдиновна**

aina.ermekova@mail.ru

Павлодарский государственный университет имени С. Торайгырова,  
магистрант ММАТ-12н, Павлодар, Казахстан

Стажер кафедры высшей математики Университета ИТМО, С.-Петербург, Россия  
Научный руководитель - к.ф.-м.н., профессор Павлюк И.И., Email:ivan.pavlyuk@mail.ru

В статье рассматриваются связи бинарных отношений элементов группы, а именно вопросы о связи свойств, отношений коммутативности, сопряжения. Связи реализуются через понятия сравнимости элементов группы относительно соответствующего отношения.

**Ключевые слова:** группа, структура группы, коммутативность, неабелевы централизаторы, бинарные отношения.

Пусть  $G = \langle G; ? \rangle$  - некоторая группа, и  $H = \langle H; ? \rangle$  - подгруппа группы  $G$ . С помощью подгруппы  $H$  на множестве  $G$  элементов группы  $G$  можно определить бинарное отношение " $\equiv$ ": для любых двух элементов  $a$  и  $b$  из  $G$

$$a \equiv b$$

в том и только в том случае, если в  $H$  существует такой элемент  $h$ , что выполняется равенство

$$a = b \circ h.$$

**Теорема 1** Отношение " $\equiv$ " является отношением эквивалентности на множестве  $G$ .

Доказательство. Для доказательства надо показать, что отношение " $\equiv$ " рефлексивно, симметрично и транзитивно.

1) Рефлексивность. Так как нейтральный элемент группы  $e$  принадлежит  $H$ , то для любого элемента  $a$  из  $G$   $a = a \circ e$  и, следовательно,  $a \equiv a$ .

2) Симметричность. Из  $a \equiv a$  следует существование в  $H$  такого элемента  $h$ , что  $a = b \circ h$ . Отсюда получаем, что  $a \circ h^{-1} = b$ . Так как  $H$  - подгруппа, то  $h^{-1}$  принадлежит  $H$  и, следовательно,  $b \equiv a$ .

3) Транзитивность. Пусть  $a \equiv b$  и  $b \equiv c$ . Это означает, что в  $H$  существуют такие элементы  $h_1$  и  $h_2$ , что  $a = b \circ h_1$  и  $b = c \circ h_2$ . Отсюда получаем, что  $a = b \circ h_2 \circ h_1$ . Так как  $H$  - подгруппа, то произведение  $h_2 \circ h_1$  принадлежит  $H$  и, следовательно,  $a \equiv c$ .

Известно, что любое отношение эквивалентности, заданное на некотором множестве, определяет разбиение этого множества на непересекающиеся классы эквивалентных элементов. Следовательно, и отношение " $\equiv$ ", заданное на множестве  $G$  с помощью подгруппы  $H$ , определяет разбиение множества  $G$  на классы эквивалентности. Эти классы называют левыми смежными классами группы  $G$  по подгруппе  $H$ , а само разбиение называют левосторонним разложением  $G$  группы по подгруппе  $H$ .

Левый смежный класс группы  $G$  по подгруппе  $H$ , содержащий элемент  $a$ , обозначим  $aH$ . Из определения отношения " $\equiv$ " следует, что каждый элемент смежного класса  $aH$  имеет вид  $ah$ , где  $h \in H$ .

Заметим, что одним из левых смежных классов является само множество  $H$ . Этим классом служит класс  $eH$ , порожденный нейтральным элементом  $e$  [1].

Введенные бинарные отношения: коммутативности  $k \equiv [ ]$ ; центральной эквивалентности  ${}_1 \equiv [ ]$ ; сопряжения  $c \equiv [ ]$ ; на элементах группы визуализируется через метрическое представление графов этих отношений. Они детализируют свойства компонентов структуры группы, дают завершённое относительно завершённую картину групповых свойств как её элементов так и подгрупп. Вопрос о связи свойств, перечисленных отношений, реализуется через понятия сравнимости элементов группы относительно соответствующего отношения. Теоретико-групповое сравнение с переменной компонентности относительно бинарного отношения как и уравнение сравнение относительно отношения равенства характеризует свойства элементов группы  $[ ]$ . Решения группового сравнения объединяет элементы группы в комплексы, которые зачастую представляют новые объекты группы или подчеркивают ранее неизвестные свойства существующих объектов. Так решения  $R(a^x = a)$  сравнения  $a^x = a$  заданного на элементах произвольной группы характеризует централизатор – элемент  $a$  в группе.

Понятно, что сравнения  $a^x = a$  есть частный вид сравнения  $a^x = b$ , вытекающего определения отношения сопряженности:

$$a_c \stackrel{aef}{\Leftrightarrow} (\exists x \in G/a^x = b).$$

Решения  $R(a^x = b)$  сравнения  $a^x = b$  характеризует смежный класс группы по ее подгруппе  $C(a)$ . Одним из смежных классов в разложении группы  $G$  по ее подгруппе  $C(a)$  является централизатор  $C(a)$ , то есть, тот смежный класс, который является подгруппой в группе  $G$ . А этот смежный класс характеризуется решением  $R(a^x = a)$  сравнения  $a^x = a$ . Таким образом,

$$R(a^x = a) = C(a).$$

Совершенно иное бинарное отношение  $k \equiv$  коммутативности, заданное на элементах группы:  $a_k \equiv b \stackrel{aef}{\Leftrightarrow} (ab = ba)$ ,  $[ ]$  которое в отличие от отношения сопряженности не является отношением эквивалентности (оно лишь рефлексивно и симметрично  $[ ]$ , но решение

$R(x_k \equiv a)$  сравнения  $x_k \equiv a$ , заданного на элементах произвольной группы  $G$  так же дают компоненту  $C(a)$  группы  $G$ , в чем легко убедиться, используя определение отношения коммутативности. Приведенные бинарные отношения дополняют друг друга свойственными в группе  $G$ . Это хорошо просматривается в разложении группы  $G$  на смежные классы по централизатору некоторого ее элемента. Далее, центральная эквивалентность

$a_1 \equiv b \Leftrightarrow (C(a) = C(b)[ ])$ , так же характеризует элементы группы  $G$ , но уже комплексно, упаковывая их в компоненты самой группы. Понятно, что решение  $R(x_1 \equiv a)$  сравнения  $x_1 \equiv a$  будет  $C(a) = C(x)$ . Если же рассмотреть одностороннюю сравнимость, то есть  $(x_1 \equiv a \stackrel{aef}{\Leftrightarrow} \{x/C(a): C(a) \cap C(x) \neq \emptyset\})$  получим решение  $R(x_1 \equiv a)$  сравнения

$x_1 \equiv a$ , которое характеризует понятие модулятора  ${}_1 M(a)$  элемента  $a$  в группе  $G$ . Известно  $[ ]$ , что  ${}_1 M(a)$  - подгруппа группы  $C(a)$ . В общем случае эта подгруппа  ${}_1 M(a)$  не совпадает с подгруппой  $C(a)$ . В частности, такое совпадение невозможно для неабелевых централизаторов. В тоже время, отношение центральной эквивалентности характеризует некоторую подгруппу  $({}_1 M(a))$  группы  $C(a)$ . Обобщая приведенные выводы, можно сформулировать следующий результат.

### **Выводы:**

#### **Теорема 2.**

Сравнения  $x_1 = a$ ,  $a^x = a$  эквивалентны на элементах произвольной группы  $G$ , а решения  $R(x_1 \equiv a)$  сравнения  $x_1 \equiv a$  содержится в

$R(x_k \equiv a) = R(a^x \equiv a)$ , то есть:

- 1)  $x_k \equiv a \cong a^x \equiv a$ ;
- 2)  $R(x_1 \equiv a) \leq R(x_k \equiv a) = R(a^x \equiv a)$ .

## Список литературы

- [1] <http://sgma.alpha-design.ru/MMORPH/N-2-html/1.HTM/> ГРУППЫ И ГОМОМОРФИЗМЫ © 1997 г. Е. П. Емельченков, В. Е. Емельченков
- [2] И.Гроссман, И.Магнус Группы и их графы.-Radmon hause, 1964 – 245с.
- [3] Каргаполов М.Н., Мерзляков Ю.Н. Основы теории групп.-М: Наука-1982 г.-288 с.
- [4] Емельченков Е.П.,Кристалинский Р.Е. Группы и симметрии. Математическая морфология. Том 1. Выпуск 1. - Смоленск: Изд-во СГМА. 1996. С. 3-28.
- [5] Курош А. Г., Теория групп. - М.: Наука, 1967.
- [6] Калужнин Л.А. Введение в общую алгебру. - М.: Наука, 1973.

## ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ СФЕРИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ЗОНДА В СЛАБОИОНИЗОВАННОЙ СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

А.А. Клементьева, А.В. Норин  
777alla7@mail.ru

Получены зависимости ионного и электронного токов от малого значения потенциала зонда. Особенностью полученных в работе зависимостей является их универсальность, они применимы, как для толстого, так и для тонкого слоя объемного заряда, в силу того, что граничные условия для концентраций заряженных частиц на зонде выражаются через потоки на зонд.

**Ключевые слова:** слабоионизованная плазма, зонд, ток на зонд, потенциал зонда, уравнение Пуассона.

Сферические электрические зонды до сих пор являются эффективным инструментом диагностики плазмы [1]. Для слабоионизованной однотемпературной плазмы с замороженными реакциями ионизации и рекомбинации используется система уравнений диффузии заряженных частиц и уравнения Пуассона, которая в безразмерном виде имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dn_e}{dt} - n_e \frac{d\Phi}{dt} = -\gamma_e \\ \frac{dn_i}{dt} + n_i \frac{d\Phi}{dt} = -\gamma_i \\ \frac{d^2\Phi}{dt^2} = \mu \frac{n_e - n_i}{2t^4} \end{cases} \quad (1)$$

где  $t \in [0; 1]$ ,  $n_e, n_i, \Phi, \gamma_e, \gamma_i$  – безразмерные концентрации, безразмерный электростатический потенциал и безразмерные полные потоки заряженных частиц на зонд,  $\mu$  – квадрат отношения радиуса зонда к радиусу Дебая.

Обычно система решается при следующих граничных условиях:

$n_e(0) = n_i(0) = 1$ ;  $\Phi(0) = 0$ ;  $\Phi(1) = \Phi_0$ . В первых работах [2,3] строилось численное и асимптотическое решения в случае тонкого слоя объемного заряда  $\mu \gg 1$  при условиях  $n_e(1) = n_i(1) = 0$  на зонде. Асимптотическому анализу сингулярной системы (1) посвящена работа [4]. Но при нулевых условиях для заряженных частиц на зонде первые два уравнения системы (1) неприменимы вблизи зонда. Попытка преодолеть это затруднение была предпринята в работах [5,6], где вблизи зонда вводился тонкий бесстолкновительный слой, описываемый уравнением Власова, а решения для макропараметров приравнивались на границе зон. Если предположить, что распределения заряженных частиц приближаются к распределению Максвелла на расстоянии длины свободного пробега, то концентрации заряженных частиц на зонде легко связать с потоками заряженных частиц на зонд. В настоящей работе рассмотрены решения системы (1) для произвольных  $\mu$ , но при малом значении электрического потенциала зонда  $\Phi_0$ .

Рассмотрим систему (1). Заметим, что  $\gamma_e, \gamma_i$  – константы и если бы у системы было еще два граничных условия для концентраций на зонде, то из решения системы (1) можно было бы получить зависимость безразмерных токов на зонд в зависимости от значения  $\Phi_0$ .

Будем искать  $n_e, n_i$  в виде  $n_e = c_e(t) \exp(\Phi)$ ;  $n_i = c_i(t) \exp(-\Phi)$ .

Тогда, подставив эти выражения в уравнения для концентраций системы (1), имеем:

$$\begin{cases} c'_e \exp(\Phi) = -\gamma_e \\ c'_i \exp(-\Phi) = -\gamma_i \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} c'_e = -\gamma_e \exp(-\Phi) \\ c'_i = -\gamma_i \exp(\Phi) \end{cases}$$

Откуда

$$\begin{cases} n_e(t) = \exp(\Phi)(c_e(0) - \gamma_e \int_0^t \exp(-\Phi(\tau)) d\tau) \\ n_i(t) = \exp(-\Phi)(c_i(0) - \gamma_i \int_0^t \exp(\Phi(\tau)) d\tau) \end{cases}$$

где, подставив граничные условия  $n_e(0) = 1, n_i(0) = 1, \Phi(0) = 0$  в уравнения  $n_e = c_e(t) \exp(\Phi); n_i = c_i(t) \exp(-\Phi)$ , получаем:  $c_e(0) = c_i(0) = 1$ .

Тогда концентрации определяются формулами:

$$\begin{cases} n_e(t) = \exp(\Phi)(1 - \gamma_e \int_0^t \exp(-\Phi(\tau)) d\tau) \\ n_i(t) = \exp(-\Phi)(1 - \gamma_i \int_0^t \exp(\Phi(\tau)) d\tau) \end{cases} \quad (2)$$

После подстановки полученных выше формул для концентраций в уравнение Пуассона, последнее принимает вид:

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} = \frac{\mu}{2t^4} \left\{ [\exp(\Phi) - \exp(-\Phi)] + \gamma_i \exp(-\Phi) \int_0^t \exp(\Phi(\tau)) d\tau - \gamma_e \exp(\Phi) \int_0^t \exp(-\Phi(\tau)) d\tau \right\}$$

В данном уравнении электрический потенциал на зонде  $\Phi_0$  – малая величина ( $e\phi_0 \ll kT$ ), При этом малы и токи на зонд  $\gamma_i$  и  $\gamma_e$ . Ограничившись членами первого порядка малости, получаем

$$\exp(-\Phi) \int_0^t \exp(\Phi(\tau)) d\tau = \left( \int_0^t (1) d\tau \right) = t, \quad \exp(\Phi) \int_0^t \exp(-\Phi(\tau)) d\tau = t$$

Тогда уравнение Пуассона примет вид:

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} = \frac{\mu}{2t^4} (2\Phi + (\gamma_i - \gamma_e)t)$$

Это линейное неоднородное дифференциальное уравнение 2-го порядка с переменными коэффициентами:

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} - \frac{\mu}{t^4} \Phi = \frac{\mu(\gamma_i - \gamma_e)}{2t^3}$$

Решаем его как обычное уравнение такого типа. Находим общее решение однородного

уравнения  $\frac{d^2\Phi}{dt^2} - \frac{\mu}{t^4} \Phi = 0$ . Согласно [7] общее решение однородного уравнения имеет вид

$$\Phi(t) = t \cdot \left( c_1 \exp\left(\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right) + c_2 \exp\left(-\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right) \right).$$



Решение неоднородного уравнения строится методом вариации постоянных:

$$\Phi(t) = c_1(t) y_1(t) + c_2(t) y_2(t),$$

где  $y_1(t) = t \exp\left(\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right)$ ,  $y_2(t) = t \exp\left(-\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right)$ , а  $c_1'(t)$  и  $c_2'(t)$  удовлетворяют системе:

$$\begin{cases} c_1'(t) y_1(t) + c_2'(t) y_2(t) = 0 \\ c_1'(t) y_1'(t) + c_2'(t) y_2'(t) = \frac{\mu(\gamma_i - \gamma_e)}{2t^3}. \end{cases}$$

Для  $c_1'(t)$  и  $c_2'(t)$  находим решение

$$c_1'(t) = -\frac{\sqrt{\mu}}{4t^2}(\gamma_i - \gamma_e) \exp\left(-\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right), \quad c_2'(t) = \frac{\sqrt{\mu}}{4t^2}(\gamma_i - \gamma_e) \exp\left(\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right).$$

Откуда  $c_1(t) = c_1(1) - \frac{\gamma_i - \gamma_e}{4} \left( \exp\left(-\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right) - \exp(-\sqrt{\mu}) \right)$ ,

$$c_2(t) = c_2(1) + \frac{\gamma_i - \gamma_e}{4} \left( \exp(\sqrt{\mu}) - \exp\left(\frac{\sqrt{\mu}}{t}\right) \right).$$

Из условий  $\Phi(0) = 0$ ,  $\Phi(1) = \Phi_0$  получаем:

$$c_1(1) + \frac{\gamma_i - \gamma_e}{4} \exp(-\sqrt{\mu}) = 0 \quad \text{и} \quad c_2(1) = \left( \Phi_0 + \frac{\gamma_i - \gamma_e}{4} \right) \exp(\sqrt{\mu}).$$

Откуда

$$\Phi(t) = \Phi_0 t \exp\left(\sqrt{\mu} - \frac{\sqrt{\mu}}{t}\right) + \frac{\gamma_i - \gamma_e}{2} t \left( \exp\left(\sqrt{\mu} - \frac{\sqrt{\mu}}{t}\right) - 1 \right) \quad (3)$$

По формуле (3) определяется безразмерный потенциал зонда.

Будем считать, что вблизи зонда функции распределения заряженных частиц максвелл-болцмановские, а на зонд попадает половина частиц, т.е. плотность тока равна половине концентрации частиц, умноженных на тепловую

скорость  $\frac{\Gamma_\alpha}{4\pi a^2} = \frac{1}{2} N_\alpha V_{T\alpha}$ ;  $\alpha = e, i$ , где  $V_{T\alpha} = \sqrt{\frac{3kT}{m_\alpha}}$  - тепловая скорость частиц,  $N_\alpha$  -

концентрация заряженных частиц на зонде. Тогда  $\gamma_\alpha = \frac{a}{2D_\alpha} \frac{N_\alpha}{N_\infty} \sqrt{\frac{3kT}{m_\alpha}} = n_\alpha \frac{a}{2D_\alpha} \sqrt{\frac{3kT}{m_\alpha}}$ .

Если учесть, что  $D_\alpha = \frac{l_\alpha c_\alpha}{3}$ , а  $c_\alpha = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_\alpha}}$ , то  $n_\alpha = \frac{2l_\alpha}{3a} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \gamma_\alpha$ . Для определения  $\gamma_e(\Phi_0)$

и  $\gamma_i(\Phi_0)$ , а, следовательно, для построения вольт-амперной характеристики осталось решить систему уравнений, где  $\Phi(t)$  определяется уравнением (3),

$$\begin{cases} \frac{2l_e}{3a} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \gamma_e = \exp(\Phi_0) \left(1 - \gamma_e \int_0^1 \exp(-\Phi(\tau)) d\tau\right) \\ \frac{2l_i}{3a} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \gamma_i = \exp(-\Phi_0) \left(1 - \gamma_i \int_0^1 \exp(\Phi(\tau)) d\tau\right) \end{cases}$$

Откуда:

$$\begin{cases} \gamma_e = \frac{\exp(\Phi_0)}{\frac{2l_e}{3a} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} + \exp(\Phi_0) \int_0^1 \exp(-\Phi(\tau)) d\tau} \\ \gamma_i = \frac{\exp(-\Phi_0)}{\frac{2l_i}{3a} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} + \exp(-\Phi_0) \int_0^1 \exp(\Phi(\tau)) d\tau} \end{cases},$$

где  $\Phi(\tau)$  определяется уравнением (3).

### Список литературы

- [1] Чан П., Тэлбот Л., Турян К. Электрические зонды в неподвижной и движущейся плазме // Изд. "Мир", М.1978, С. 201.
- [2] *Su C.H., Lam S.H.* Continuum theory of spherical electrostatic probes // *Phys. Fluids*. 1963. V. 6. № 10. P. 1479-1491.
- [3] *Cohen I.M.* Asymptotic theory of spherical electrostatic probes in a slightly ionized, collision-dominated gas // *Phys. Fluids*. 1963. V. 6. № 3. P. 1492-1499.
- [4] Кашеваров А.В. Второе уравнение Пенлеве в теории электрического зонда. Некоторые численные решения // *ЖВММ*. 1998. Т.38. № 6. С. 992-1000.
- [5] Гунько Ю.Ф., Норин А.В. Сферический электростатический зонд в слабоионизованной плазме с тонким бесстолкновительным экранирующим слоем // *Вестник ЛГУ*. 1979. № 13. С. 75-79.
- [6] Калинина Н.А. Задача о малом сферическом зонде в слабоионизованной плазме с тонким бесстолкновительным слоем // *Труды студенческого центра прикладных математических исследований*. 2012. Т.2. С. 52-60. НИУ ИТМО. СПб.
- [7] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям // Изд. "Наука", М. 1971, С. 442

## ОБ УСЛОВИИ ДИСКРЕТНОСТИ СПЕКТРА ГАМИЛЬТониАНА КВАНТОВОГО ГРАФА С $\Delta$ – СОЕДИНЕНИЕМ В ВЕРШИНАХ

**М.О. Ковалева**  
vega14@mail.ru

Условие Молчанова дискретности спектра для потенциала на вещественной оси (или полуоси) хорошо изучено. Цель работы – получить аналогичное условие для квантового графа. Мы рассматриваем случай с  $\delta$ -соединением в вершинах графа. На каждом ребре графа определен оператор Шредингера с потенциалом. Выбран случай, когда граф имеет бесконечные концы (ребра) и/или бесконечные цепочки вершин, такие, что каждые соседние соединены конечным числом ребер. Доказана теорема типа Молчанова для дискретности спектра Гамильтониана квантового графа.

**Ключевые слова:** спектр, квантовый граф.

### 1. Введение

Тип спектра Гамильтониана – это важная характеристика, которая зависит от базовых свойств соответствующей физической системы. Именно поэтому спектральная задача привлекает много внимания на протяжении долгого времени. В частности, дискретность спектра показывает, что соответствующая система имеет только связанные состояния. Как правило, полное описание физической системы – это очень тяжелая задача. Для этого физики обычно используют модельные гамильтонианы. Одна из наиболее широко используемых и эффективных моделей – это модель квантового графа. Это метрический граф с оператором Шредингера, определенным на каждом ребре и условиями сшивки в вершинах графа, которые определяют возможности прохождения вершины (см. [1-6]).

Эффективное условие для потенциала, дающего дискретность спектра гамильтониана было предложено Молчановым в [7]. Это условие становится необходимым и достаточным, если мы предполагаем, что потенциал ограничен снизу. Такое предположение тесно связано с задачей поиска нулей собственной функции. Это довольно древняя задача, которая возникла после теоремы Штурма. Другой основополагающий результат в данной области – это теорема Куранта о узловых множествах собственных функций. В настоящий момент это интенсивно исследуется по важным физическим причинам (см. [8-11]). Задача описания узлового множества, основанная на теореме Куранта еще не решена для общего случая.

Условие Молчанова для потенциала на вещественной оси (полуоси), которое гарантирует дискретность спектра соответствующего одномерного Гамильтониана, хорошо известно [12-13]. Рассмотрим следующий оператор на вещественной полуоси:

$$(H - \lambda I)u(x) = -u''(x) - (\lambda - q(x))u(x) = 0, \quad (1)$$

Пусть потенциал  $q(x)$  удовлетворяет следующим условиям:

1.  $q(x)$  ограничена снизу, то есть существует такая константа  $c$ ,  $c > 0$ , что для каждого  $x$  выполняется:  $q(x) > -c$ .
2. для любого  $w > 0$   $\lim_{x \rightarrow \infty} \int_x^{x+w} q(x) dx = \infty$ .

Тогда для каждого фиксированного  $\lambda$  любой решение  $u(x)$  уравнение (1) имеет конечное число нулей на полуоси  $(0, \infty)$  и спектр задачи (1) дискретный.

Наша задача – получить аналогичное условие для квантового графа определенного вида.

### 2. Теорема типа-Молчанова

Пусть  $\Gamma$  - квантовый граф,  $V(\Gamma)$  и  $E(\Gamma)$  - множества его вершин и ребер, соответственно. Предполагается, что граф имеет конечное число бесконечных продолжений (ребер) и/или бесконечные цепочки вершин, причем, соседние вершины соединены конечным числом ребер. Причем, нет необходимости в периодичности или симметрии этой цепочки, но

длины ребер в этой цепочке ограничены снизу и сверху некоторыми константами. Более того, мы предполагаем, что после удаления этих бесконечных цепочек граф будет содержать конечное число ребер (некоторые из них могут иметь бесконечную длину), как на рисунке 1.

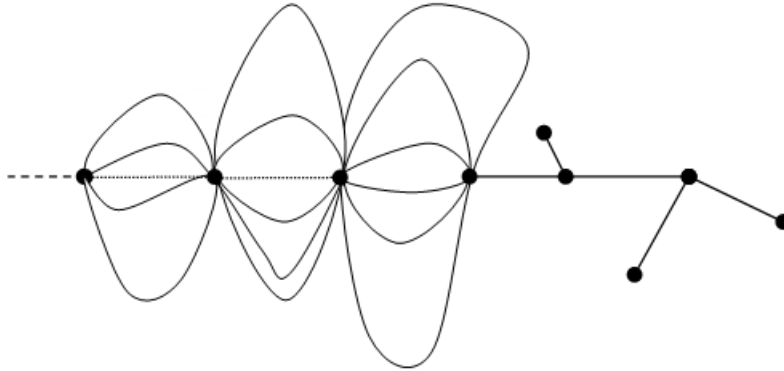


Рисунок 1. Граф с бесконечными цепочками

Мы предполагаем, что уравнение (1) определено на ребрах. Мы определяем граничные условия Дирихле в граничных вершинах графа и условия  $\delta$ -соединения во внутренних вершинах графа:

$$\sum_{e \in E_v} \frac{du}{dx_e}(v) = \beta_v u(v), \quad \beta_v < 0, \quad x \in V(\Gamma),$$

где  $V(\Gamma)$  - это множество вершин  $\Gamma$ ,  $E_v$  - это множество ребер, содержащих вершину  $v$ ,  $\beta_v, \beta_v < 0$  - некоторые вещественные числа.

**Theorem.** Пусть  $q(x)$  удовлетворяет на  $\Gamma$ :

1.  $q(x)$  ограничена снизу, то есть существует такая константа  $c > 0$ , что для каждой  $x$  имеет место следующее неравенство:  $q(x) > -c$ .
2. для любого фиксированного  $w > 0$ , для любого пути  $L$  на  $\Gamma$  выполняется

$$\lim_{\text{dist}(x,v) \rightarrow \infty} \int_L q(x) dx = \infty, \quad x \in L, |L| = w.$$

Здесь  $v$  - некоторая фиксированная вершина  $\Gamma$ .

Тогда для любого фиксированного  $\lambda$  любое решение  $u(x)$  уравнения (1) имеет конечное число нулей на  $\Gamma$ .

**Доказательство.**

1. Пусть  $\Gamma$  имеет конечное число ребер. Некоторые из них могут иметь бесконечную длину. Так как мы определили условие  $\delta$ -соединения во внутренних вершинах графа и условия Дирихле на граничных вершинах, то в вершинах графа нет точек сгущения.

Если имеется бесконечное множество нулей на ребре бесконечной длины, тогда  $u \equiv 0$  на ребре, и мы можем отбросить ребро и наложить условие Дирихле на концах убранного ребра. На каждом конечном ребре имеется конечное число нулей и, так как число ребер конечно, мы приходим к противоречию. Таким образом, если имеется бесконечное число нулей на  $\Gamma$ , тогда существует бесконечное ребро, обладающее этим свойством. Для такого ребра имеется обычное условие Молчанова для потенциала на вещественной полуоси, то есть, этот случай сводится к имеющейся теореме.

2. Пусть  $\Gamma$  имеет бесконечные продолжения (ребра) и бесконечные цепочки вершин, такие, что каждые соседние соединены конечным число ребер, см. Рисунок 1.

Бесконечное число нулей в части графа, которая не содержит цепочек, приводит к случаю из пункта 1, рассмотренному выше.

Пусть бесконечное число нулей имеется на бесконечной цепочке вершин, такой, что соседние соединены конечным числом ребер.

Вполне очевидно, что добавление константы в потенциале не меняет ситуацию. То есть достаточно рассмотреть случай, когда  $q(x) \geq 0$ . Пусть существует  $\lambda = \lambda_0 > 0$  такое, что существует решение  $u = u(x)$  уравнения (1), которое имеет бесконечное число нулей на цепочке.

Очевидно, что это невозможно для  $\lambda = \lambda_0 < 0$  из-за знака второй производной решения:  $u'' = -(\lambda - q(x))u$ . Таким образом, если существует корень  $\alpha$ , тогда не существует других корней, больших, чем  $\alpha$ .

Пусть  $w$  будет таким (малым) положительным числом, что  $w < \frac{1}{\lambda_0 + 1}$ . Выберем  $N$  таким большим, что для  $dist(x, v_0) > N$ , где  $v_0 \in V(\Gamma)$ , имеет место

$$\int_L q(t)dt > w(\lambda_0 + 1),$$

где  $L: x \in L, |L_0| = w$ . Можно выбрать  $N$  таким из условия для  $q(x)$ .

Согласно нашему предположению, что имеется бесконечное число нулей на цепочке, там существует некоторый путь через цепочку на бесконечность, который содержит бесконечное число нулей. Ниже мы будем рассматривать случай такого пути. Таким образом, мы можем выбрать такое  $n$  для этого пути, что  $dist(\alpha_n, v_0) > N$ , и далее выбрать  $m, n < m$  таким, что  $dist(\alpha_m, \alpha_n) > w$ . Далее можно предположить, что  $dist(\alpha_m, \alpha_n) = Pw$ , где  $P$  – это целое число (согласно условиям  $q(x) \geq 0, \int_L q(t)dt > w(\lambda_0 + 1)$ ).

Перепишем уравнение (1), принимая  $\lambda = \lambda_0: u'' = (q(x) - \lambda_0)u$ . Сложность возникает в вершинах графа, принадлежащих пути. Рассмотрим эту ситуацию. Предположим, что вершина  $v$  принадлежит пути. Мы умножаем обе части на  $u$  и интегрируем по пути от  $\alpha_n$  до  $\alpha_m$ :

$$\int_{\alpha_n}^v u'' u dt + \int_v^{\alpha_m} u'' u dt = \int_L q(t)u^2(t)dt - \lambda_0 \int_L u^2(t)dt. \quad (2)$$

Интегрирование по частям левой части приводит к:

$$- \int_L (u'(t))^2 dt + uu'|_{\alpha_n}^{\alpha_m} = - \int_L (u'(t))^2 dt + \alpha_v u^2(v).$$

Первый интеграл правой части может быть представлен в виде

$$\int_L q(t)u^2(t)dt = \sum_{k=1}^P \int_{L_k} q(t)u^2(t)dt,$$

где  $L = \cup L_k, |L_k| = w$ .

Теорема о среднем значении и (1) приводит к следующему неравенству:

$$\begin{aligned} \int_L q(t)u^2(t)dt &> (\lambda_0 + 1) \sum_{k=1}^P u^2(\xi_k)w = \\ &= (\lambda_0 + 1) \int_L u^2(t)dt - (\lambda_0 + 1) \sum_{k=1}^P \int_{L_k} [u^2(t) - u^2(\xi_k)]dt. \end{aligned} \quad (3)$$

То есть

$$\begin{aligned} [u^2(t) - u^2(\xi_k)] &= 2 \int_{\xi_k}^t u'(p)u(p)dp \leq \int_{\xi_k}^t u^2(p)dp + \int_{\xi_k}^t [u'(p)]^2 dp \leq \int_{L_k} u^2(p)dp + \\ &\int_{L_k} [u'(p)]^2 dp. \end{aligned}$$

Если на  $[\xi_k, t]$  имеется какая-либо вершина:

$$\int_{\xi_k}^v u'(p)u(p)dp + \int_v^t u'(p)u(p)dp = u^2(v) - u^2(\xi_k) + u^2(t) - u^2(v) = u^2(t) - u^2(\xi_k).$$

Таким образом, неравенство (3) дает:

$$\begin{aligned}
\int_L q(t)u^2(t)dt &> (\lambda_0 + 1) \int_L u^2(t)dt \\
&- (\lambda_0 + 1) \sum_{k=1}^P \int_{L_k} \int_L \{u^2(p)dp\}dt - (\lambda_0 + 1) \sum_{k=1}^P \int_{L_k} \left\{ \int_{L_k} (u'(p))^2 dp \right\} dt \\
&= (\lambda_0 + 1) \int_L u^2(t)dt - (\lambda_0 + 1)w \int_L u^2(t)dt \\
&- (\lambda_0 + 1)w \int_L [u'(t)]^2 dt. \tag{4}
\end{aligned}$$

Можно получить из (2) и (4):

$$\beta_v \sum_{i, v_i \in L} u^2(v_i) - \int_L [u'(t)]^2 dt > \{1 - (\lambda_0 + 1)w\} \int_L u^2(t)dt - (\lambda_0 + 1)w \int_L [u'(t)]^2 dt.$$

Итак, согласно условию  $\beta_v < 0$ , мы получаем неравенство

$$\{1 - (\lambda_0 + 1)w\} \int_L \{u^2(t) + [u'(t)]^2\} dt < 0,$$

что невозможно, так как  $(\lambda_0 + 1)w < 1$ . Теорема доказана.

### 3. Заключение

Принимая во внимание тот факт, что достаточное условие дискретности спектра – это то, что для любого фиксированного  $\lambda$  любое решение  $u$  уравнения (1) имеет конечное число нулей на  $\Gamma$  (см. [3]), можно сделать вывод, что теорема дает достаточное условие для дискретности спектра гамильтониана квантового графа.

### Список литературы

- [1] Exner P., Keating J. P., Kuchment P., Sunada T. and Teplyaev A. (eds.). Analysis on Graphs and Its Applications. Proc. Symp. Pure Math., 77, Providence, RI: Amer. Math. Soc. 2008.
- [2] O.Post. Spectral Analysis on Graph-like Spaces (Springer, Berlin, 2010).
- [3] G.Berkolaiko and P.Kuchment. Introduction to Quantum Graphs (Math. Surveys and Monographs, v. 186), Providence, RI: Amer. Math. Soc. 2008.
- [4] I. Yu. Popov, A. N. Skorynina, and I. V. Blinova. On the existence of point spectrum for branching strips quantum graph. J. Math. Phys. **55**, 033504 (2014); doi: 10.1063/1.4867604
- [5] P. Duclos, P. Exner, and O. Turek, “On the spectrum of a bent chain graph,” J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 415206 (2008).
- [6] P.Kuchment. Quantum graphs: I. Some basic structures. Waves Random Media, **14** (2004), S107 - S128.
- [7] A.M. Molchanov. On conditions of spectrum discreteness for self-adjoint differential operators of second order. Proc. Moscow Math. Soc. 1953, **2**, 169-199.
- [8] R.Band, G.Berkolaiko, U.Smilansky. Dynamics of nodal points and the nodal count on a family of quantum graphs. Ann. Henri Poincare, **13**, 145-184 (2012).
- [9] R. Band, G. Berkolaiko, H.Raz, U.Smilansky. The number of nodal domains on quantum graphs as a stability index of graph partitions. Commun. Math. Phys. **311**, 815–838 (2012). DOI: 10.1007/s00220-011-1384-9
- [10] Y. Colin de Verdiere. Magnetic interpretation of the nodal defect on graphs. Analysis & PDE. **6** (3) 1235-1242 (2013). DOI: 10.2140/apde.2013.6.1235.
- [11] A.Enciso, D.Peralta-Salas. Eigenfunctions with prescribed nodal sets. arXiv ID: 1404.103
- [12] B.M. Levitan, I.S. Sargsyan. Sturm-Liouville and Dirac operators, — Moscow: Nauka, 1988.
- [13] J. Eckhardt, A. Kostenko, M. Malamud, G. Teschl. One-dimensional Schrödinger operators with  $\delta'$ -interactions on Cantor-type sets. J. Differential Equations **257** (2014) 415–449

## ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК КВАНТОВЫХ МИКРОВОЛНОВЫХ ГАУССОВЫХ ПОЛЕЙ МЕТОДОМ КОСВЕННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

О.М. Корнеева

korneevaom@yandex.ru

В работе предлагается способ изучения микроволновых квантовых полей с помощью косвенных измерений, который аналогичен оптической гомодинной томографии. Показано, что с помощью данных, полученных в результате моделирования эксперимента, можно изучать различные характеристики тепловых, когерентных и сжатых гауссовых полей.

**Ключевые слова:** квантовая томография, матрица плотности, гауссово поле, косвенные измерения.

### 1. Введение

Изучение квантовых полей производят с помощью квантовой томографии. Методы квантовой оптической томографии хорошо развиты и представлены в различных работах [1 – 4]. Но если необходимо исследовать квантовые состояния микроволновых полей, то применение указанных выше методов невозможно в виду отсутствия счетчиков фотонов в микроволновом диапазоне. Классические состояния поля изучаются методами радиочастотного гомодинирования [5]. В работе [6] предложен метод квантовой эндоскопии, который позволяет восстанавливать чистые квантовые состояния радиочастотного поля.

В нашей работе предлагается подход, похожий на квантовую оптическую томографию, который применим для изучения квантовых микроволновых полей и восстановления матрицы плотности поля. Данные, полученные в результате непрямого детектирования, используются для получения различных статистических характеристик тепловых, когерентных и сжатых гауссовых полей.

### 2. Процедура детектирования

Конечной целью квантовой томографии является восстановление матрицы плотности поля  $\rho_f$ , через измерение функции квазивероятности, которыми являются функция Вигнера, P-функция и Q-функция, связанные между собой некоторыми выражениями [2]. Зная эти функции, можно через обратное преобразование Радона восстановить матрицу плотности поля в любом базисе [4]. В нашей работе информация о состоянии поля в резонаторе извлекается с помощью метода косвенных измерений. Метод заключается в пропускании через резонатор стабилизированного разреженного потока атомов-зондов и снятия распределения по энергетическим уровням вылетевших из резонатора, провзаимодействовавших с полем атомов [7, 8]. На рис.1 представлена установка для проведения процедуры непрямого детектирования.

Каждый атом-зонд может находиться в одном из двух энергетических состояний, как то основное состояние  $|0\rangle$  или возбужденное состояние  $|1\rangle$ . В эксперименте начальное состояние атома до взаимодействия с резонатором известно и равно основному энергетическому состоянию  $|0\rangle$ . Время взаимодействия атома с резонатором  $t$  мало (для удобства в дальнейшем будем использовать безразмерное время  $\tau = t\gamma$ , где  $\gamma$  – константа взаимодействия атома с резонатором). После вылета из резонатора атом несет в себе информацию о состоянии квантовой моды поля в резонаторе. Оператор развития системы резонатор-зонд имеет вид

$$S(\tau) = \begin{pmatrix} \cos \tau \sqrt{a^+ a} & -i a^+ \sin \tau \sqrt{a a^+} / \sqrt{a a^+} \\ -i \sin \tau \sqrt{a a^+} / \sqrt{a a^+} & \cos \tau \sqrt{a a^+} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $a^+, a$  – операторы рождения и уничтожения фотонов.

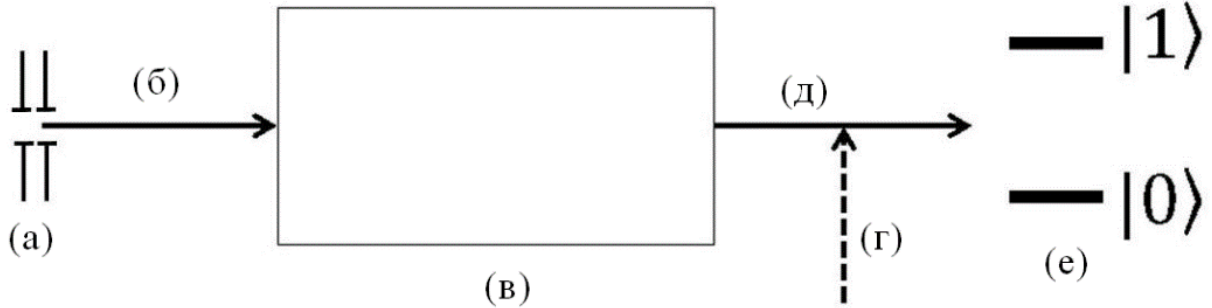


Рис. 1. Установка для дискретного детектирования.

(а) – селектор по скоростям атома, (б) – атом в известном энергетическом состоянии, (в) – резонатор, (г) – лазерный импульс, (д) – атом после взаимодействия с резонатором, (е) – селективный детектор по энергетическим состояниям атома

Теперь с помощью детекторов определим, в каком из двух возможных энергетических состояний находится атом-зонд после вылета. Вероятность обнаружить атом в энергетическом состоянии  $|\beta\rangle$  при условии, что он был запущен в состоянии  $|\alpha\rangle$ , выглядит следующим образом

$$P_{\beta\alpha}(\tau) = Tr_f \left[ \langle \beta | S(\tau) | \alpha \rangle \rho_f \langle \alpha | S^+(\tau) | \beta \rangle \right], \quad (2)$$

где  $\rho_f$  – матрица плотности поля в резонаторе,  $Tr_f$  – след по полевым состояниям. В эксперименте нас будет интересовать вероятность обнаружить атом в основном состоянии, если он до резонатора был приготовлен также в основном состоянии. Условием проведения эксперимента является малость времени взаимодействия атома с резонатором

$$\alpha = 0, \beta = 0, \tau \sqrt{\langle n \rangle} \ll 1, \quad (3)$$

где  $\langle n \rangle$  – среднее число фотонов в моде квантового поля. Тогда формула (2) принимает вид

$$P_{00}(\tau) \approx Tr_f \left[ (1 - a^+ a \tau^2) \rho_f \right] = 1 - \langle n \rangle \tau^2. \quad (4)$$

Проведя описанную процедуру детектирования для некоторого количества атомов с учетом того, что времени между пролетами атомов достаточно для восстановления начального состояния поля в резонаторе, можно определить распределение атомов по энергетическим состояниям после вылета, то есть вероятности  $P_{00}(\tau)$  и  $P_{10}(\tau)$ . Полученная в результате этого эксперимента информация позволяет узнать такую характеристику поля, как значение среднего числа фотонов  $\langle n \rangle$  в моде

$$\langle n \rangle = \langle a^+ a \rangle = Tr_f \left[ a^+ a \rho_f \right] \approx (P_{00}(2\tau) - 2P_{00}(\tau) + 1/2) / \tau^2. \quad (5)$$

Немного модифицируем установку и добавим взаимодействие вылетевшего атома с лазерным импульсом, длительность которого подбирается так, чтобы получить заданный сдвиг фаз  $\varphi$  суперпозиции атомных уровней



$$(|0\rangle, |1\rangle) \rightarrow \left( \frac{|0\rangle + ie^{-i\varphi}|1\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|0\rangle + ie^{i\varphi}|1\rangle}{\sqrt{2}} \right).$$

Теперь оператор развития системы после взаимодействий атома с резонатором и лазером имеет вид

$$R(\tau, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos\left(\tau\sqrt{a^+a}\right) - e^{i\varphi} \frac{\sin\left(\tau\sqrt{aa^+}\right)}{\sqrt{aa^+}} a & -ia^+ \frac{\sin\left(\tau\sqrt{aa^+}\right)}{\sqrt{aa^+}} - ie^{i\varphi} \cos\left(\tau\sqrt{aa^+}\right) \\ -ie^{-i\varphi} \cos\left(\tau\sqrt{a^+a}\right) - i \frac{\sin\left(\tau\sqrt{aa^+}\right)}{\sqrt{aa^+}} a & -ie^{-i\varphi} a^+ \frac{\sin\left(\tau\sqrt{aa^+}\right)}{\sqrt{aa^+}} + \cos\left(\tau\sqrt{aa^+}\right) \end{bmatrix}$$

Полностью охарактеризовать поле позволяют набор моментов  $M_k(\varphi)$  фазовой квадратуры  $K(\varphi)$  [2]

$$M_k(\varphi) = Tr_f \left[ (K(\varphi))^k \rho_f \right], \quad K(\varphi) = \left( a^+ e^{-i\varphi} + a e^{i\varphi} \right) / \sqrt{2} \quad (6)$$

где  $k$  – порядок момента,  $\varphi$  заданный сдвиг фаз. Нас будут интересовать значения первого и второго моментов фазовой квадратуры, которые, как будет показано в п.3, определяют гауссовы поля. Для получения этих значений, будем исследовать вероятность вылета подряд двух атомов в одинаковом энергетическом состоянии

$$P_{\beta\beta\alpha\alpha}(\tau, \varphi) = Tr_f \left[ \langle \beta | R(\tau, \varphi) | \alpha \rangle \langle \beta | R(\tau, \varphi) | \alpha \rangle \rho_f \langle \alpha | R^+(\tau, \varphi) | \beta \rangle \langle \alpha | R^+(\tau, \varphi) | \beta \rangle \right] \quad (7)$$

С учетом условий эксперимента (3) формула (7) принимает вид

$$P_{0000}(\tau, \varphi) \approx \frac{1}{4} + \frac{\tau^2}{4} - Tr_f \left[ \left( \frac{K(\varphi)}{\sqrt{2}} \tau - \frac{K^2(\varphi)}{2} \tau^2 \right) \rho_f \right] \quad (8)$$

Тогда выражения для первого и второго моментов с учетом (6) выглядят следующим образом

$$\begin{aligned} M_1(\tau, \varphi) &\approx -\left(4P_{0000}(\tau, \varphi) - P_{0000}(2\tau, \varphi) - 3/4\right) / \sqrt{2}\tau, \\ M_2(\tau, \varphi) &\approx \left(1/4 + P_{0000}(2\tau, \varphi) - 2P_{0000}(\tau, \varphi)\right) / \tau^2 \end{aligned} \quad (9)$$

Было проведено моделирование эксперимента и рассчитаны теоретические и экспериментальные значения моментов фазовой квадратуры первого и второго порядка. Соответствующие зависимости представлены на рис.2 и рис.3. Достаточно хорошие результаты были достигнуты при количестве экспериментов  $N = 120000$ .

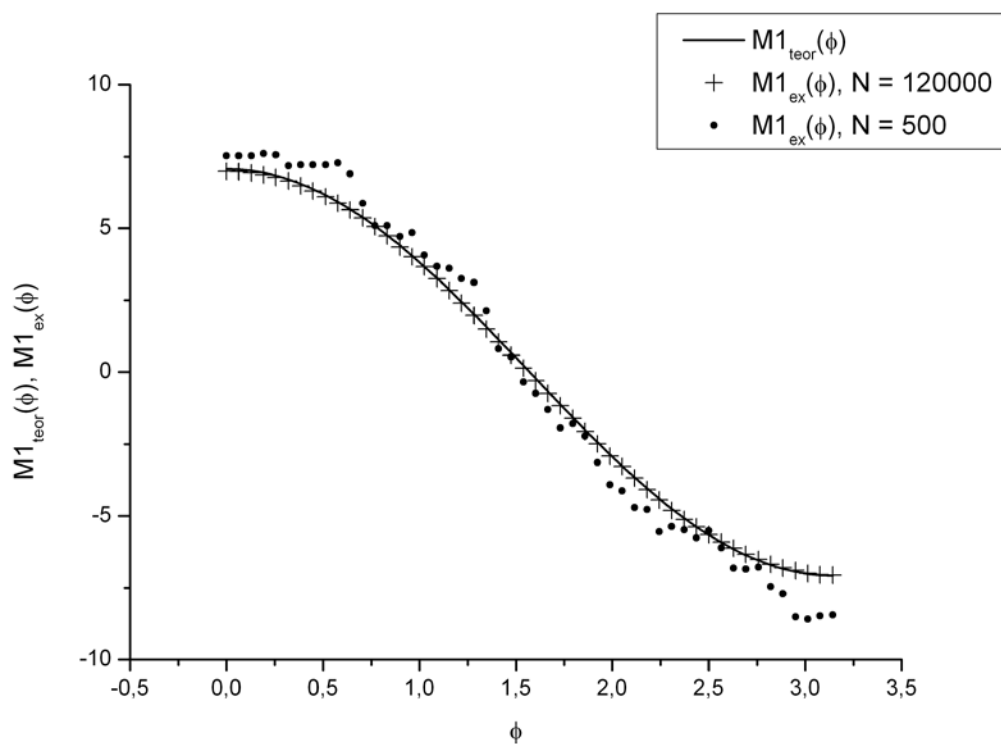


Рис. 2. Зависимость первого теоретического  $M1_{\text{teor}}$  и экспериментального  $M1_{\text{ex}}$  момента от фазы  $\phi$  при фиксированном времени  $\tau$

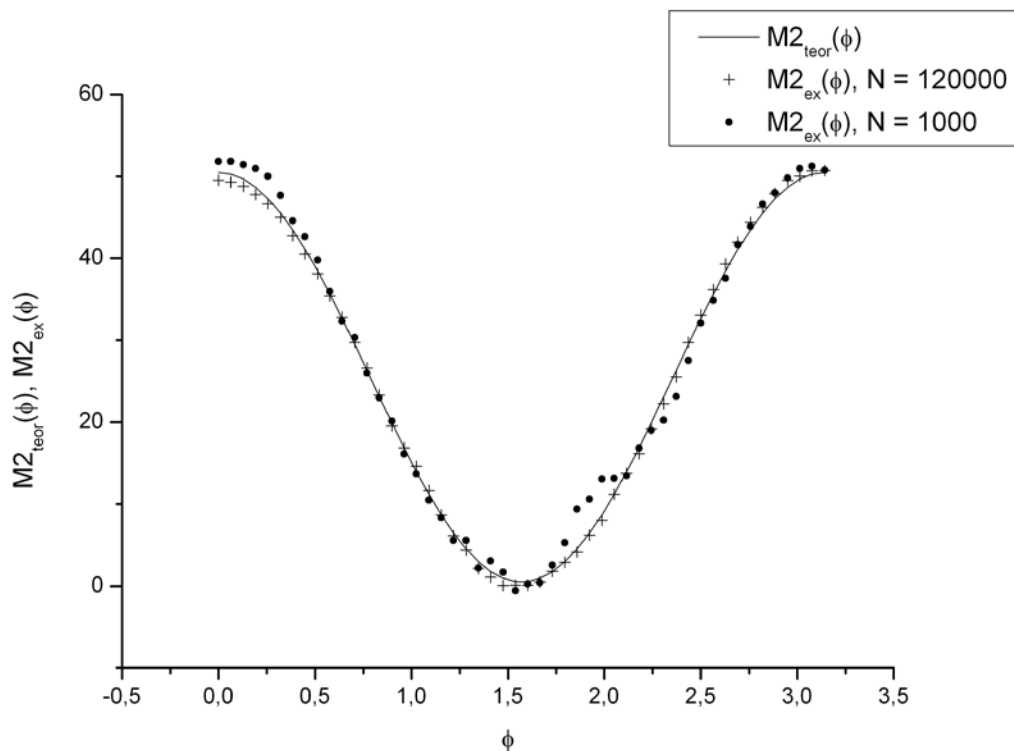


Рис. 3. Зависимость второго теоретического  $M2_{\text{teor}}$  и экспериментального  $M2_{\text{ex}}$  момента от фазы  $\phi$  при фиксированном времени  $\tau$

### 3. Исследование гауссовых полей

Покажем, что полученная в результате эксперимента информация помогает в изучении гауссовых полей, а также позволяет восстановить матрицу плотности. Как было сказано в п.2, функции квазивероятности полностью характеризуют квантовое поле и позволяют восстановить его матрицу плотности. Р-представление моды теплового гауссового поля имеет вид [9, 10]

$$P(\xi) = \frac{1}{\pi \langle n_t \rangle} \exp\left(-|\xi|^2 / \langle n_t \rangle\right),$$

где среднее число фотонов в моде теплового гауссова поля  $\langle n_t \rangle$ . Если предполагаем, что поле в резонаторе теплового, то достаточно измерения среднего числа фотонов в моде, которое рассчитывается по формуле (5) с помощью полученных в результате детектирования данных. Если гауссово поле является суперпозицией когерентного и теплового поля, то

$$P(\xi) = \frac{1}{\pi \langle n_t \rangle} \exp\left(-|\xi - \zeta|^2 / \langle n_t \rangle\right),$$

где  $|\zeta\rangle$  – когерентное состояние,  $\zeta = M_1(0) + iM_1(\pi/2)$ . В этом случае при определении среднего числа фотонов в моде по формуле (5) получим значение  $\langle n \rangle = \langle n_t \rangle + \langle n_c \rangle$ ,  $\langle n_c \rangle$  – среднее число фотонов в когерентной составляющей поля,  $\langle n_c \rangle = |\zeta|^2$ . Для смеси когерентного и сжатого полей функция Вигнера представима в виде [11]

$$W(\xi) = \exp\left(\frac{-|q - q_0|^2}{2|\mu - \nu|^2/4}\right) \exp\left(\frac{-|p - p_0|^2}{2|\mu + \nu|^2/4}\right),$$

где  $q = (a + a^+) / \sqrt{2}$ ,  $p = (a - a^+) / \sqrt{2}i$ ,  $q_0 = M_1(0)$ ,  $p_0 = M_1(\pi/2)$ ,  $\mu, \nu$  – параметры сжатия,  $|\mu - \nu|^2/4 = M_2(0) - M_1^2(0)$ ,  $|\mu + \nu|^2/4 = M_2(\pi/2) - M_1^2(\pi/2)$

Используя полученную в результате эксперимента информацию о среднем значении числа фотонов в моде, о первом и втором моментах фазовой квадратуры, можно восстановить описанные выше функции квазивероятности и проведя обратное преобразование Радона, реконструировать матрицу плотности поля [1]. Кроме того, можно изучать такие характеристики смеси когерентного и теплового полей как плотность вероятности для операторов  $p$  и  $q$ . Эти частичные вероятности характеризуют магнитную и электрическую составляющие поля.

### 4. Заключение

В работе представлен метод, который позволяет изучать квантовые поля не только в оптическом, но и в микроволновом диапазоне способом, аналогичным оптической гомодинной томографии. Получена связь первого и второго момента фазовой квадратуры квантового поля и среднего значения числа фотонов в моде с вероятностью обнаружения атома в основном энергетическом состоянии. Показана возможность применения описанного метода для изучения различных характеристик гауссовых полей. Метод может быть расширен для более общих видов полей при условии извлечения в процессе детектирования моментов более высоких порядков.

Проект выполнен в рамках базовой части Госзадания Минобрнауки РФ № 2014/190 и проектной части № 1.754.2014/К.

## Список литературы

- [1] D'Ariano G. M., Paris M., Sacchi M. Quantum Tomography // *Advances in Imaging and Electron Physics*. 2003. Vol. 128. p. 205–308.
- [2] Vogel K., Risken H. Determination of quasiprobability distributions in terms of probability distributions for the rotated quadrature phase // *Physical Review A*. 1989. Vol. 40. p. 2847–2849.
- [3] D'Ariano G. M., Leonhardt U., Paul H. Homodyne Detection of the Density Matrix of the Radiation Field // *Physical Review A*. 1995. Vol. 52. p. 1801.
- [4] Smithey D. T., Beck M., Raymer M. G., Faridani A. Measurement of the Wigner distribution and the density matrix of a light mode using optical homodyne tomography: application to squeezed states and the vacuum // *Physical Review Letters*. 1993. Vol. 70. p. 1244.
- [5] Dicke R. H. The Measurement of thermal radiation at microwave frequencies // *Review of Scientific Instruments*. 1946. Vol. 17. p. 268.
- [6] Bardroff P. J., Mayr E., Schleich W. P. Quantum state endoscopy: Measurement of the quantum state in a cavity // *Physical Review A*. 1995. Vol. 51. p. 4963
- [7] Walls D. F. and Milburn G. J. *Quantum Optics*. Berlin: Springer-Verlag, 1994. p. 351.
- [8] Miroshnichenko G. P. Measuring statistical characteristics of a quantized mode in various photodetection regimes // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2007. Vol. 104. p. 724–735.
- [9] Roy J. Glauber. Coherent and Incoherent States of the Radiation Field // *Physical Review*. 1963. Vol. 131. p. 2766.
- [10] Lachs G. Theoretical aspects of mixtures of thermal and coherent radiation // *Physical Review*. 1965. Vol. 138. p. B1012–B1016.
- [11] Lai Y., Haus H. A. Characteristic functions and quantum measurements of optical observables // *Quantum Optics*. 1989. Vol. 1. p. 99.

## РЕШЕНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В СФЕРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

**И.В. Макеев**

ilya.makeev@gmail.com

Рассматриваются уравнения Стокса с переменной вязкостью и плотностью в сферической системе координат. Выводятся решения уравнений при линейной зависимости вязкости от радиуса. Данные решения могут быть использованы в качестве эталона для численных алгоритмов.

**Ключевые слова:** стоксово течение жидкости, сферические координаты, эталонные решения.

### 1. Введение

Одной из задач, решаемых в геодинамике, является моделирование медленных течений в земной мантии [1]. Такие течения описываются уравнениями Стокса, решение которых в большинстве случаев может быть найдено только численно. Широко применяемым подходом при оценке работы численных алгоритмов является сравнение численного решения с точным решением задачи [2]. В данной работе выводятся некоторые точные решения уравнений Стокса с переменной вязкостью и плотностью в сферической системе координат.

### 2. Основные уравнения

В сферических координатах  $(r, \theta, \varphi)$  Стоксово течение жидкости с переменной вязкостью и плотностью описываются уравнениями [3]:

$$\begin{aligned}(\nabla \cdot \sigma)_r &= -\rho G_r \\ (\nabla \cdot \sigma)_\theta &= -\rho G_\theta \\ (\nabla \cdot \sigma)_\varphi &= -\rho G_\varphi \\ \nabla(\rho v) &= 0\end{aligned}$$

где  $\sigma(v)$  - тензор напряжений,  $\eta$  - вязкость жидкости,  $\rho$  - плотность жидкости,  $G$  - сила тяжести.

Компоненты дивергенции тензора напряжений в сферических координатах имеют вид:

$$\begin{aligned}(\nabla \cdot \sigma)_r &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sigma_{rr}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sigma_{\theta r} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \sigma_{\varphi r}}{\partial \varphi} - \frac{\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{\varphi\varphi}}{r} \\ (\nabla \cdot \sigma)_\theta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sigma_{r\theta}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sigma_{\theta\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \sigma_{\varphi\theta}}{\partial \varphi} + \frac{\sigma_{r\theta} - \sigma_{\varphi\varphi} \operatorname{ctg} \theta}{r} \\ (\nabla \cdot \sigma)_\varphi &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sigma_{r\varphi}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sigma_{\theta\varphi} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \sigma_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\sigma_{r\varphi} + \sigma_{\theta\varphi} \operatorname{ctg} \theta}{r}\end{aligned}$$

В сферических координатах получаем следующие компоненты девиаторного тензора напряжений:

$$\begin{aligned}\tau_{rr} &= 2\eta \frac{\partial v_r}{\partial r}, \tau_{\theta\theta} = 2\eta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right), \\ \tau_{\varphi\varphi} &= 2\eta \left( \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta \right), \\ \tau_{r\theta} &= \eta \left( r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right), \tau_{r\varphi} = \eta \left( \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\varphi}{r} \right) \right), \\ \tau_{\theta\varphi} &= \eta \left( \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{v_\varphi}{\sin \theta} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} \right)\end{aligned}$$

Уравнения движения запишутся в виде:

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{rr}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tau_{r\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \tau_{r\varphi}}{\partial \varphi} - \frac{\tau_{\theta\theta} + \tau_{\varphi\varphi}}{r} - \frac{\partial P}{\partial r} &= -\rho G_r, \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\theta}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tau_{\theta\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \tau_{\varphi\theta}}{\partial \varphi} + \frac{\tau_{r\theta} - \tau_{\varphi\varphi} \operatorname{ctg} \theta}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} &= -\rho G_\theta, \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\varphi}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tau_{\theta\varphi} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \tau_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\tau_{r\varphi} + \tau_{\theta\varphi} \operatorname{ctg} \theta}{r} - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial P}{\partial \varphi} &= -\rho G_\varphi\end{aligned}$$

Уравнение неразрывности:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho v_\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\rho v_\varphi) = 0$$

### 3. Вывод решений

Пусть  $v_r = v_r(r)$ ,  $v_\theta = v_\theta(r, \theta)$ ,  $v_\varphi = v_\varphi(r, \theta)$ ,  $\rho = \rho(r)$ ,  $\eta = \eta(r)$ , тогда уравнения движения запишутся в виде:

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 2\eta \frac{\partial v_r}{\partial r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\eta r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) \sin \theta) - \\ - \frac{1}{r} 2\eta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right) - \frac{1}{r} 2\eta \left( \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta \right) - \frac{\partial P}{\partial r} &= -\rho G_r\end{aligned}\tag{1}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \eta r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right)) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (2\eta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right) \sin \theta) + \\ + \frac{1}{r} \eta \left( r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) \right) - \frac{1}{r} 2\eta \left( \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta \right) \operatorname{ctg} \theta - \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} &= -\rho G_\theta\end{aligned}\tag{2}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^3 \eta \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\varphi}{r} \right)) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \eta \left( \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{v_\varphi}{\sin \theta} \right) \right) \sin \theta \right) + \\ + \eta \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\varphi}{r} \right) + \eta \left( \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{v_\varphi}{\sin \theta} \right) \right) \operatorname{ctg} \theta - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial P}{\partial \varphi} &= -\rho G_\varphi\end{aligned}\tag{3}$$

Уравнение неразрывности примет вид:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho v_\theta \sin \theta) = 0\tag{4}$$

Будем искать такие решения, для которых  $v_\theta = v_{\theta 1} \operatorname{ctg} \theta$ , где  $v_{\theta 1} = v_{\theta 1}(r)$ .

В этом случае уравнение неразрывности не будет содержать функций от угла  $\theta$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r^2 v_r) - \frac{1}{r} \rho v_{\theta 1} = 0\tag{5}$$

Далее поставим условия  $P = P(r)$ ,  $G_r = G_r(r)$ ,  $G_\theta = 0$ ,  $G_\varphi = 0$ .

Уравнение (1) может быть приведено к виду:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 2\eta \frac{\partial v_r}{\partial r}) - \eta \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_{\theta 1}}{r} \right) - 4\eta \frac{v_r}{r^2} + 2\eta \frac{1}{r^2} v_{\theta 1} - \frac{\partial P}{\partial r} = -\rho G_r\tag{6}$$

Преобразовав уравнение (2), получим:

$$\operatorname{ctg}\theta\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\eta r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\theta 1}}{r}\right)\right)+2\eta\frac{1}{r^2}v_{\theta 1}+\frac{1}{r}\eta\left(r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\theta 1}}{r}\right)\right)\right)=0$$

Приравняв к нулю выражение в скобках, получаем уравнение для нахождения  $v_{\theta 1}$ :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^3\eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\theta 1}}{r}\right)\right)+2\eta\frac{1}{r^2}v_{\theta 1}+\eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\theta 1}}{r}\right)=0 \quad (7)$$

Одним из решений уравнения (7) для случая с линейной вязкостью  $\eta = cr$  будут функции:

$$v_{\theta 1} = Cr^{\sqrt{2}-1} \quad (8)$$

Им соответствуют следующие выражения для скорости:

$$v_{\theta} = Cr^{\sqrt{2}-1}\operatorname{ctg}\theta \quad (9)$$

Если известна зависимость  $v_{\theta 1}(r)$  от радиуса, то из уравнения (5) находим:

$$v_r = \frac{1}{\rho r^2} \int \rho r v_{\theta 1} dr \quad (10)$$

Подставим (8), (10) в уравнение (6). Проинтегрировав, находим давление

$$P(r) = \int \left(\rho G_r + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 2\eta\frac{\partial v_r}{\partial r}\right) - \eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\theta 1}}{r}\right) - 4\eta\frac{v_r}{r^2} + 2\eta\frac{1}{r^2}v_{\theta 1}\right) dr \quad (11)$$

Будем искать решение уравнения (3) в виде  $v_{\varphi} = v_{\varphi 1} \sin \theta$ , где  $v_{\varphi 1} = v_{\varphi 1}(r)$ .

Уравнение (3) примет вид:

$$\sin \theta \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^3\eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\varphi 1}}{r}\right)\right)+\eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\varphi 1}}{r}\right)\right)=0$$

Приравняв к нулю выражение в скобках, получим уравнение для нахождения  $v_{\varphi 1}$ :

$$r\frac{\partial}{\partial r}\left(\eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\varphi 1}}{r}\right)\right)+4\eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\varphi 1}}{r}\right)=0 \quad (12)$$

Введем новую переменную  $y(r) = \eta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\varphi 1}}{r}\right)$ . Тогда уравнение (12) запишется в виде:

$$ry' + 4y = 0$$

Проинтегрировав, получим:

$$y = c_1 \frac{1}{r^4}$$

Выполнив обратную замену, получим уравнение для  $v_{\varphi 1}$ :

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_{\varphi 1}}{r}\right) = c_1 \frac{1}{\eta r^4}$$

Проинтегрировав, находим:

$$v_{\varphi 1} = c_1 r \int \frac{1}{\eta r^4} dr$$

В результате для  $v_{\varphi 1}$  получаем следующее выражение:

$$v_{\varphi} = r\left(c \int \frac{1}{\eta r^4} dr + c_1\right) \sin \theta \quad (13)$$

#### 4. Результаты

Формулы (8), (9), (10), (13) задают некоторые решения уравнений Стокса в сферической системе координат для случая, когда вязкость является линейной функцией от радиуса. Данные решения могут использоваться в качестве эталона при оценке качества работы численных алгоритмов.

## **Список литературы**

- [1] Gerya T.V.: Introduction to Numerical Geodynamic Modelling, Cambridge University Press, 2010.
- [2] Popov I.Y., Lobanov I.S., Popov S.I., Popov A.I., Gerya T.V.: Practical analytical solutions for benchmarking of 2-D and 3-D geodynamic Stokes problems with variable viscosity. Solid Earth. Vol. 5. No. 1. pp. 461–476, 2014.
- [3] Tackley J.P, Ismail-Zadeh A.: Computational Methods for Geodynamics, Cambridge University Press, 2010.



## ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА ГАМИЛЬТониАНА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ В ИСКАЖЕННОМ ВОЛНОВОДЕ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ХАРТРИ-ФОКА

**И.Ф. Мелихов**  
ivan.melikhov@gmail.com

В работе исследуется дискретный спектр гамильтониана системы, состоящей из нескольких взаимодействующих частиц, помещенных в деформированный волновод. С физической точки зрения задачу можно переформулировать как изучение возможности локализации и хранения частиц в слоистых наноматериалах с дефектами. Рассматривается два вида взаимодействия между частицами: дельта-типа и кулоновское. Для решения задачи используется метод Хартри-Фока. Уравнения, получаемые с его помощью, решаются методом конечных элементов. В работе исследуется вместимость волноводов в зависимости от геометрии дефекта, количества частиц и интенсивности их взаимодействия.

**Ключевые слова:** спектральная теория, метод Хартри-Фока.

### 1. Введение

В последнее время интерес к нанотехнологиям неуклонно растет, как в нашей стране, так и во всем мире. Стоит отметить, что по-настоящему «нано» могут считаться только те технологии, которые принципиально невозможны в больших масштабах. Таким образом, наноустройства – это не просто уменьшенная в размерах версия макроустройств. Они основаны на принципиально новых для техники явлениях, проявляющихся только в микромире. Неудивительно, что для теоретического описания принципов работы подобных устройств широко применяется аппарат квантовой механики.

Целью данной работы является исследование дискретного спектра гамильтониана системы частиц, помещенных в деформированный волновод. Дискретный спектр интересен тем, что его значениям соответствуют связанные состояния системы. Эта задача может быть переформулирована как исследование вопроса о возможности локализации и хранения частиц в волноводе.

Задача работы – изучить зависимость количества вмещаемых волноводом частиц от его величины деформации.

Приложения такой задачи могут быть весьма интересны. Одно из них – локализация двух электронов для проведения двухкубитовой операции в квантовом компьютере. Второе возможное применение – создание водородного аккумулятора, основанного на нанослоистой структуре. В последнее время появляется все больше техники на водородном топливе, однако у этого топлива есть недостаток: оно крайне взрывоопасно. Как правило, для его транспортировки используются баллоны. В настоящее время широко изучается вопрос хранения водородного топлива в наноструктурных материалах. Подобные твердотельные аккумуляторы обладали бы большей безопасностью, устойчивостью к механическим и температурным воздействиям, занимали бы меньше объема и были бы более пригодны для транспортировки.

Один из перспективных материалов для этой цели является материал с нанослоистой структурой. Эксперименты показали, что после обогащения такой структуры водородом, концентрация водорода возрастает вблизи дефектов и неоднородностей структуры [1].

Строя математическую модель этого явления, можно рассматривать частицы в нанослое как частицы, помещенные в волновод. Было показано, что в случае одной частицы в прямом волноводе не возникает связанных состояний и хранение частиц принципиально невозможно, но

при наличии деформации геометрии волновода у системы появляется дискретный спектр и частица локализуется вблизи дефекта [2]-[10]. Характерно, что чем больше возмущение, тем дальше смещается собственное число гамильтониана от границы непрерывного спектра.

Для системы из нескольких взаимодействующих частиц найти точное решение не представляется возможным. Для упрощения постановки задачи используется метод Хартри-Фока. Полученные после его применения дифференциальные уравнения решаются методом конечных элементов.

Исследуется три вида деформации волновода: волновод с локальным возмущением на одной из границ, два волновода, связанные друг с другом через «окно», и изогнутый волновод. Также в задаче изучается два вида взаимодействия между частицами: дельта-типа, которое хотя и является грубым упрощением реального взаимодействия, сильно упрощает решение задачи, и кулоновского типа, описывающего реальное взаимодействие между частицами.

В ходе численного эксперимента была выбрана наиболее эффективная с точки зрения вместимости частиц конфигурация деформации волновода. Для этой геометрии и планируется продолжить исследования.

## 2. Теория

Рассмотрим несколько взаимодействующих частиц, помещенных в деформированный нанослой или волновод. В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием гамильтониан такой системы будет иметь вид:

$$\hat{H} = \sum_k \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 + U_k \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ j \neq k}} V_{jk} = \sum_k \hat{H}_k + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ j \neq k}} \hat{H}_{jk}, \quad (1)$$

где  $m$  – масса частицы,  $U_k$  – потенциал внешнего поля,  $V_{jk}$  – потенциал взаимодействия частиц. С ростом числа частиц размерность задачи возрастает очень быстро, и решать ее в таком виде практически невозможно, поэтому уравнение (1) нужно упростить. Упрощение предлагается проводить с использованием вариационного метода.

Существует два способа использования вариационного принципа для получения приближенной волновой функции многочастичной системы [12]. При первом подходе рассматривается класс функций конкретного аналитического вида, содержащих параметры. Наилучшие значения этих параметров находятся из условия минимизации функционала энергии. В этом случае задача сводится к решению системы нелинейных алгебраических уравнений относительно конечного числа параметров.

Второй подход, впервые примененный В.А. Фоком [12], заключается в рассмотрении класса многочастичных волновых функций, построенных определенным образом из произвольных функций. В этом случае после применения вариационного принципа задача сводится к решению системы дифференциальных уравнений на эти функции.

Простейший метод решения многочастичных задач, относящийся ко второму подходу – метод Хартри, который также называют методом среднего поля. В приближении Хартри считается, что каждая частица движется в «самосогласованном» поле, создаваемом другими частицами. Таким образом частицы взаимодействуют между собой лишь посредством среднего поля. Математически это выражается тем, что одночастичные волновые функции удовлетворяют уравнениям Хартри:

$$\left[ \hat{H}_k + \sum_{\substack{j \\ j \neq k}} \int \psi_j^*(r_j) \hat{H}_{jk} \psi_j(r_j) dr_j \right] \psi_k(r_k) = E_k \psi_k(r_k) \quad (k = \overline{1, n}), \quad (2)$$

где  $\psi_i$  – одночастичные волновые функции,  $r_i$  – пространственные координаты частицы.

Описанный метод Хартри имеет один очень существенный недостаток. Дело в том, что для фермионов, в частности, электронов и протонов, волновая функция системы должна удовлетворять принципу Паули то есть, говоря математически, быть антисимметричной относительно перестановки двух частиц:

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_n) = -\psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_n). \quad (3)$$

Решение Хартри не удовлетворяет этому условию. Поэтому, если учитывать спин частиц, метод Хартри может быть оправдано применен только для системы из двух фермионов с противоположно направленными спинами, так как в этом случае пространственная часть волновой функции будет симметрична относительно перестановок, а необходимую антисимметричность даст спиновая часть. Именно этот подход и был применен для аналогичной задачи в работе [11]

Недостаток метода Хартри был устранен советским ученым В.А. Фоком. Он предложил искать многочастичную функцию в виде детерминанта Слейтера:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) & \dots & \psi_n(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \dots & \psi_n(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(x_n) & \psi_2(x_n) & \dots & \psi_n(x_n) \end{vmatrix}, \quad (4)$$

где  $\psi_k$  – одночастичные ортонормированные волновые функции, а  $x_k$  представляет собой набор спиновой и пространственных координат.

Применяя вариационный принцип, и разделяя волновые функции частиц с разными спинами, можно получить уравнения Хартри-Фока [13], [14]. Введем два оператора: кулоновский

$$\hat{J}_j^{\uparrow\downarrow} \psi_k(r_k) = \left[ \int \psi_j^{*\uparrow\downarrow}(r_j) V_{jk} \psi_j^{\uparrow\downarrow}(r_j) dr_j \right] \psi_k(r_k) \quad (5)$$

и обменный

$$\hat{K}_j^{\uparrow\downarrow} \psi_k(r_k) = \left[ \int \psi_j^{*\uparrow\downarrow}(r_j) V_{jk} \psi_k(r_j) dr_j \right] \psi_j^{\uparrow\downarrow}(r_k). \quad (6)$$

Уравнения Хартри-Фока можно записать в следующем виде:

$$\hat{F}^{\uparrow} \psi_k^{\uparrow} = \left[ \hat{H}_k + \sum_{j=1}^{n^{\uparrow}} (\hat{J}_j^{\uparrow} - \hat{K}_j^{\uparrow}) + \sum_{j=1}^{n^{\downarrow}} \hat{J}_j^{\downarrow} \right] \psi_k^{\uparrow} = E_k^{\uparrow} \psi_k^{\uparrow} \quad k = \overline{1, n^{\uparrow}}, \quad (7)$$

$$\hat{F}^{\downarrow} \psi_k^{\downarrow} = \left[ \hat{H}_k + \sum_{j=1}^{n^{\uparrow}} \hat{J}_j^{\uparrow} + \sum_{j=1}^{n^{\downarrow}} (\hat{J}_j^{\downarrow} - \hat{K}_j^{\downarrow}) \right] \psi_k^{\downarrow} = E_k^{\downarrow} \psi_k^{\downarrow} \quad k = \overline{1, n^{\downarrow}}, \quad (8)$$

(9)(10)

где индексы  $\uparrow$  и  $\downarrow$  относятся к частицам с различными спинами. Оператор  $\hat{F}$  называется фокианом.

Теперь задача сводится к отысканию  $n^{\uparrow}$  и  $n^{\downarrow}$  наименьших собственных значений и соответствующих им собственных функций операторов  $\hat{F}^{\uparrow}$  и  $\hat{F}^{\downarrow}$  соответственно.

При нахождении дискретного спектра необходимо учитывать, что соответствующие уровни энергии  $E_1, \dots, E_n$  должны быть ниже порогового значения – границы непрерывного спектра  $E_{bot} = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ , где  $L$  – ширина волновода на бесконечности.

### 3. Численная модель

В данной работе строится модель системы взаимодействующих частиц, помещенных в деформированный волновод при отсутствии внешнего поля ( $U_k = 0$ ). Считается, что все частицы находятся в одной плоскости, таким образом изучается двумерная задача. Уравнение Шрёдингера

для данной системы упрощается методом Хартри-Фока, описанным выше, и полученные уравнения (9)-(10) решаются методом конечных элементов.

В работе исследуются три вида деформации волновода, упоминавшиеся во введении: i) волновод с деформированной границей (рис.1), ii) два волновода, связанные через окно (рис.2), iii) изогнутый волновод (рис.3). Для каждой конфигурации введем параметр  $\alpha$ , характеризующий величину деформации волновода. Для первой геометрии деформацию зададим формулой  $H \sin(\frac{x+b}{2b} \pi)$  и определим  $\alpha = H/L$ , ширину возмущения зафиксируем:  $b = 0.4L$ ; для второй геометрии  $\alpha = a/L$ ; для третьей –  $\alpha = L/R$ , с фиксированной длиной искривленной части:  $c = L$ . Для всех конфигураций большее значение параметра соответствует большей деформации. На стенках волновода (сплошная линия на рис. 1-3) задается условие Дирихле. На боковых стенках (пунктирная линия) полагается условие Неймана.

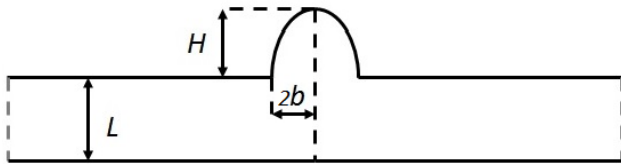


Рисунок 1. Волновод с деформированной границей

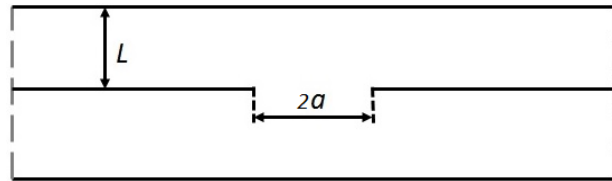


Рисунок 2. Связанные волноводы

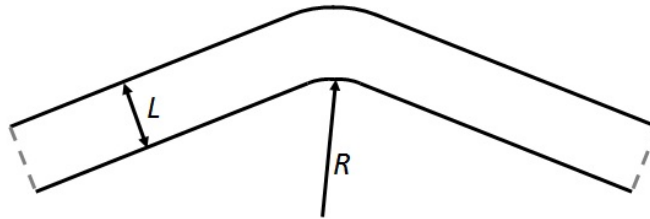


Рисунок 3. Изогнутый волновод

В данной работе рассматриваются два вида потенциала взаимодействия между частицами: дельта-потенциал и кулоновский. Достоинство первого – простота реализации и скорость расчета, так как кулоновский (5) и обменный (6) интегралы существенно упрощаются. Кулоновский потенциал же является более физичным и лучше описывает реальное взаимодействие между частицами, но нахождение решения становится очень трудоемкой задачей.

Для нахождения решения уравнений Хартри-Фока (9)-(10) используется метод конечных элементов. В случае дельта потенциала применяется пакет FreeFEM++ [15]. Как и в случае метода Хартри [11] решение ищется итерационным методом. При расчете с кулоновским потенциалом существующие пакеты метода конечных элементов неприменимы, так как они не могут разрешить кулоновские интегралы с подобным ядром. Поэтому было решено разработать собственную программу в пакете Wolfram Mathematica [16], позволяющую проводить расчеты с помощью метода конечных элементов с любым видом потенциала.

#### 4. Результаты

В работах, посвященных изучению поведения одной частицы, было показано, что при большей деформации дискретный спектр системы дальше смещается от границы непрерывного спектра. При наличии двух частиц с одинаковым знаком заряда, при достаточной интенсивности взаимодействия связанное состояние будет разрушаться. Более того, частицы взаимодействуют неявно, подчиняясь принципу Паули. Таким образом в системе присутствуют конкурирующие

факторы – деформация волновода с одной стороны и интенсивность взаимодействия и принцип Паули с другой – от которых зависит возможность получения связанных состояний системы. В ходе исследования была изучена эта зависимость в нескольких частных случаях.

## 5. Описание программы

Как уже было сказано, для расчета задачи с кулоновским потенциалом была написана программа, реализующая метод конечных элементов, в пакете Wolfram Mathematica. Здесь не будет описываться сам метод конечных элементов (литературы по этому вопросу очень много, например можно отметить [17], [18]), укажем только особенности данной реализации. Программа позволяет решать задачу на собственные функции в прямоугольной области, разбитой на квадратные элементы. Для расчетов применяются лагранжевы базисные функции. Порядок функций может быть выбран равным одному или двум. Во всех вычислениях применялись квадратичные базисные функции.

Благодаря особенностям геометрии при изменении ширины окна на величину, равную шагу сетки, нет необходимости перестраивать сетку, а следовательно и вычислять все интегралы перекрытия. Возможность вычисления кулоновских интегралов лишь один раз существенно уменьшает время изучения задачи при разных значениях ширины окна.

Четырехмерные кулоновские интегралы от базисных функций вычисляются с помощью адаптивного метода Монте-Карло. Из-за ограничения по памяти был использован усеченный кулоновский потенциал:

$$V_{ij} = \begin{cases} U_c/|r_i - r_j| & |r_i - r_j| \leq \beta \\ 0 & |r_i - r_j| > \beta \end{cases}$$

где  $\beta$  кратно шагу сетки  $h$ . Так, например, для сетки  $75 \times 10$  элементов и  $\beta = 5h$  матрица кулоновский интегралов от базисных функций занимает около 6 Гб оперативной памяти.

Задача на нахождение обобщенных собственных векторов матрицы Фока решается с помощью метода Арнольди, который эффективен для нахождения небольшого числа собственных векторов разреженной матрицы.

## 6. Хранение частиц без взаимодействия

В таблице приведены минимальные значения параметра деформации, при которых возможно хранить в волноводе заданное количество частиц с одинаковым спином. Фактически, при отсутствии явного взаимодействия между частицами единственным фактором, разрушающим связанные состояния, является принцип Паули. При отсутствии взаимодействия две частицы с разными спинами описываются пространственной волновой функции свободной частицы, поэтому для их хранения достаточно малой деформации при любой геометрии. Видно, что для хранения двух и больше частиц с одинаковым спином, подходят только волноводы связанные через окно. С точки зрения локализации частиц – это самая эффективная конфигурация.

Количество частиц с одинаковым спином	Волновод с деформированной границей	Связанные волноводы	Изогнутый волновод
1	$\alpha > 0$	$\alpha > 0$	$\alpha > 0$
2	---	0.77	---
3	---	1.32	---
4	---	1.95	---
5	---	2.50	---

## 7. Вместимость волноводов, связанных через окно

Изучим возможности хранения частиц в двух волноводах, связанных через окно. На рис. 4-6 показана электронная плотность для различного числа частиц, взаимодействующих посредством  $\delta$ -потенциала. Как и ожидалось, частицы локализируются вблизи дефекта – окна.

Уже отмечалось, что на наличие дискретного спектра влияют разные факторы: взаимодействие между частицами и величина возмущения волновода. На рис. 7 показана область на плоскости  $U_c - \alpha$ , в которой связанное состояние существует, для случая двух частиц с нулевым суммарным спином, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала. Подобная область для  $\delta$ -потенциала была приведена в работе [11]. Видно, что чем сильнее взаимодействуют частицы, тем больше необходимая для их хранения величина деформации  $\alpha$ . Вследствие плохой сходимости итерационного метода для больших значений интенсивности взаимодействия  $U_c$  точную границу области найти не удалось.

Для  $\delta$ -потенциала была построена зависимость минимальной деформации от числа частиц и суммарного спина системы, приведенная на рис.8. При фиксированном количестве частиц нижние точки на графике соответствуют системам с меньшим суммарным спином. Видно, что чем больше количество частиц с одним спином, тем большая деформация требуется, чтобы их удержать. Таким образом, главным фактором, разрушающим связанные состояния, является принцип запрета Паули. Результаты, отображенные на графике, также можно трактовать с практической точки зрения. Наиболее пригодной для хранения является система с минимальным суммарным спином. Из графика видно, что для хранения четного числа частиц с нулевым суммарным спином необходима та же деформация, что и для системы на одну частицу меньше.

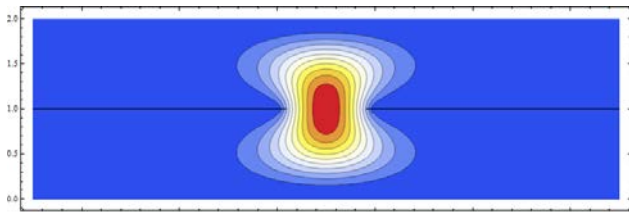


Рисунок 4. Электронная плотность для системы из двух электронов с разными спинами

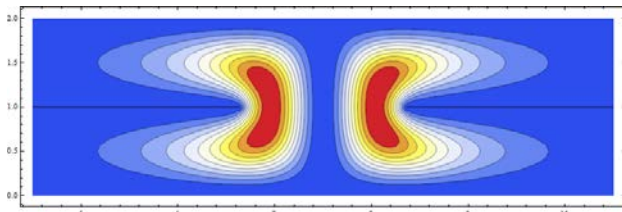


Рисунок 5. Электронная плотность для системы из двух электронов с одинаковыми спинами

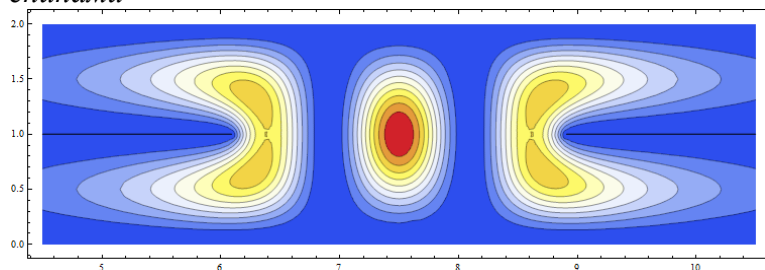


Рисунок 6. Электронная плотность для системы из трех электронов с одинаковыми спинами

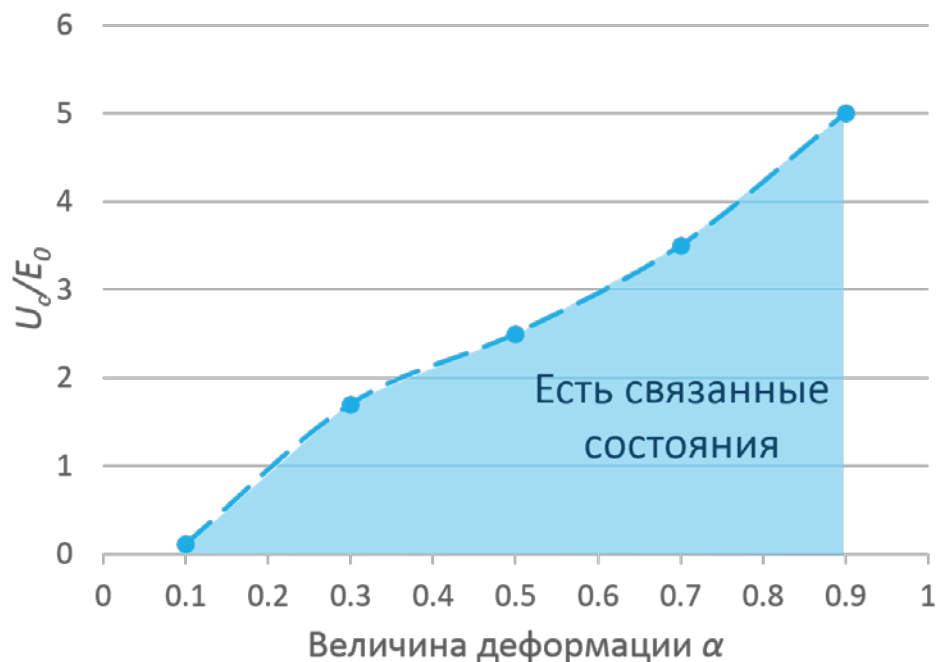


Рисунок 7. Область допустимых значений интенсивности взаимодействия и величины деформации. Две частицы, нулевой суммарный спин, кулоновский потенциал,  $E_0 = \hbar^2/(2mL^2)$

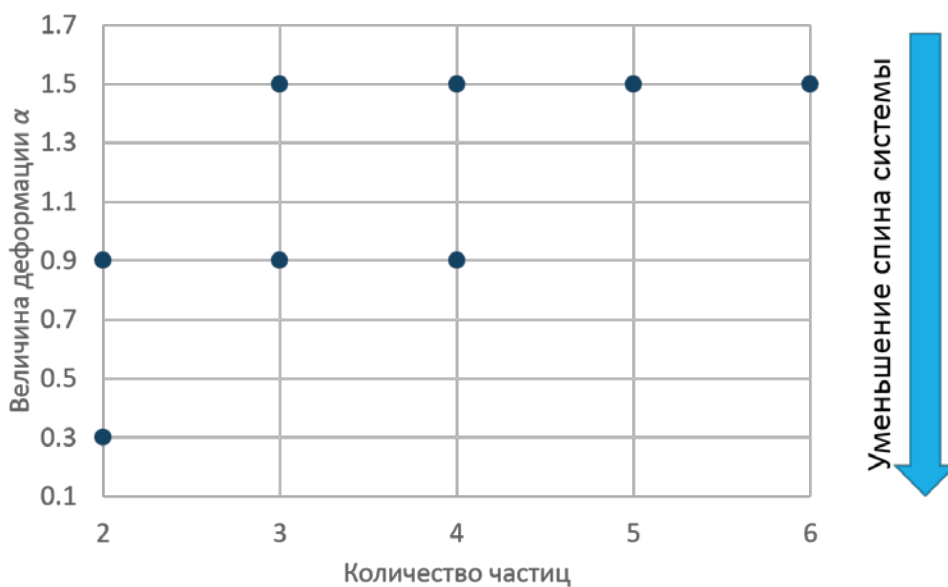


Рисунок 8. Вместимость двух волноводов, связанных через окно. Дельта-потенциал

## 8. Заключение

В работе был исследован дискретный спектр гамильтониана системы, состоящей из нескольких одинаковых фермионов, помещенных в искаженный волновод. С физической точки зрения задачу можно переформулировать как изучение возможностей локализации и хранения частиц в деформированных нанослоистых структурах.

Для упрощения многочастичной задачи был использован широко известный в квантовой

химии метод Хартри-Фока. Этот метод позволяет свести задачу решения уравнения Шрёдингера для многочастичного гамильтониана к отысканию одночастичных волновых функций, учитывая при этом свойство антисимметричности системы по отношению к замене двух частиц – принцип Паули.

В работе были изучены три различных геометрии дефекта волновода: волновод с деформированной границей, два волновода, связанные через окно, и изогнутый волновод. Также изучались два вида взаимодействия между частицами: упрощенное  $\delta$ -типа и кулоновское. Для расчета использовался метод конечных элементов. В случае первой и третьей геометрии был применен пакет FreeFem++. Недостатком этого и других пакетов является отсутствие возможности аккуратного расчета кулоновских интегралов. Для решения этой задачи была написана программа в математическом пакете Wolfram Mathematica, реализующая метод конечных элементов и разрешающая кулоновские интегралы. Эта программа была успешно применена к решению уравнений Хартри-Фока на геометрии двух связанных волноводов.

Расчеты при отсутствии взаимодействия – в этом случае фактором, разрушающим связанные состояния системы, является только принцип Паули – показали, что наиболее эффективной с точки зрения хранения частиц является геометрия двух связанных волноводов. Только она позволяет хранить две и больше частиц с одинаковым спином. Эта конфигурация волноводов была использована для исследования возможности хранения частиц с разным взаимодействием. Было показано, что основная трудность заключается в локализации частиц с одинаковым спином.

Дальнейшее развитие работы может идти по нескольким путям. Во-первых, можно доработать программу, чтобы иметь возможность рассчитывать конфигурацию системы на других геометриях. Интересно было бы сравнить поведение частиц при кулоновском и дельта-потенциалах. Во-вторых, можно изучать другие виды взаимодействия, например, описываемые потенциалом Леннарда-Джонса. В-третьих, для случая дельта-взаимодействия видится возможным обобщение задачи на трехмерное пространство. В такой постановке она была бы еще более реалистичной.

Работа поддержана в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы по теме: «Исследование квантово-механических моделей и связанных с ними задач теории операторов, формирующих фундаментальный базис для задач нанотехнологии» (ГК 07.514.11.4146).

### Список литературы

- [1] N.Yu.Nechaev. Mechanisms of Hydrogen Sorption, Solubility and Diffusivity in Carbon Nanomaterials, Relevance to the On-Board Storage Problem. Open-Access Journal for the Basic Principles of Diffusion Theory, Experiment and Application Diffusion Fundamentals 2 (2005) 100.1-100.2
- [2] P.Duclos, P.Exner, P.Stovichek. Curvature induced resonances in a two-dimensional Dirichlet tube. Annales de l'I.H.P. Section A. 1995. 62 (1), 81-101.
- [3] P. Duclos, P. Exner, D. Krejcirik: Locally curved quantum layers Ukrainian J. Phys., 45 (2000), 595-601
- [4] P. Exner, S.A. Vugalter: Bound states in a locally deformed waveguide: the critical case Lett. Math. Phys. 39 (1997), 59-68
- [5] P. Exner, S.A. Vugalter: Asymptotic estimates for bound states in quantum waveguides coupled laterally through a narrow window Ann. Inst. H. Poincare 65 (1996), 109-123.
- [6] P. Exner, P. Seba, M.Tater, D. Vanek: Bound states and scattering in quantum waveguides coupled laterally through a boundary window J. Math. Phys. 37 (1996), 4867-4887.



- [7] I.Yu.Popov. Asymptotics of bound state for laterally coupled waveguides. Rep. on Math. Phys. 1999. **43** (3) 427-437.
- [8] I.Yu.Popov. Asymptotics of resonances and bound states for laterally coupled curved quantum waveguides. Phys. Lett. A 2000. **269**. 148-153.
- [9] Linde H 2006 J. Phys. A: Math. Gen. 39 5105
- [10] P. Exner, S.A. Vugalter: On the number of particles that a curved quantum waveguide can bind J. Math. Phys. 40 (1999), 4630-4638
- [11] Попов С. И., Гаврилов М. И., Попов И. Ю. Two interacting particles in deformed nanolayer: discrete spectrum and particle storage. // Phys. Scr.. – 2012. – V. 3(86). – P. 17-23.
- [12] Хартри Д. Расчёты атомных структур. – М.: ИИЛ, 1960. – 256 с.
- [13] Фок В. А. Начала квантовой механики. – М.: Наука, 1976. – 376 с.
- [14] Альберт Мессиа. Квантовая механика. Т. 2 – М.: Наука, 1979. – 583 с.
- [15] [www.freefem.org/ff++/](http://www.freefem.org/ff++/)
- [16] [www.wolfram.com](http://www.wolfram.com)
- [17] Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.:«Мир», 1971.
- [18] Марчук Г. И., Агошков В. И.. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.:Наука, 1981.

## О НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ ПРЯМОЙ ЦЕПОЧКИ СЛАБО СВЯЗАННЫХ РЕЗОНАТОРОВ С УСЛОВИЕМ ДИРИХЛЕ НА ГРАНИЦЕ

А.С. Мелихова

alina.s.melikhova@gmail.com

Данная работа посвящена построению математической модели прямой цепочки слабо связанных шарообразных резонаторов с условием Дирихле на границе, составленной из идентичных шарообразных резонаторов, соединенных между собой точечными отверстиями (в точках соединения предполагается наличие условия  $\delta$ -соединения с константой связи  $\alpha$ , где  $\alpha \in \mathbf{R}$ ). Модель строится на основе теории самосопряженных расширений симметрических операторов и может быть отнесена к классу явно решаемых моделей.

Для прямой бесконечной цепочки с такими граничными условиями имеет смысл описание структуры непрерывного спектра. В данной работе на основе метода матриц монодромии были получены условия (система неравенств) для нахождения спектральных зон. В результате работы были получены выражения для границ спектральных зон для всех возможных значений параметра  $\alpha$ .

Тематика работы связана с фундаментальными вопросами теории операторов и имеет практическое применение при конструировании наносистем (полученные в работе результаты могут быть использованы, например, для построения реальных физических систем с заранее определенными свойствами).

**Ключевые слова:** зонная структура спектра, теория расширений, метод матриц монодромии,  $\delta$ -соединение, условие Дирихле

### Введение

На данный момент весьма обширной и довольно привлекательной областью науки, захватывающую интересы как теоретиков, так и практиков, является все то, что принято называть нанотехнологиями. И в первую очередь это касается, конечно же, квантовой механики. Теперь сложно представить некоторые области современной науки (например, электроники, молекулярной биологии и др.) без тех возможностей, которые нам открыл этот новый взгляд на мир.

С математической точки зрения большой интерес вызывают так называемые явно решаемые модели квантовой механики. А именно, речь идет о моделях, задающихся оператором Шредингера с потенциалами, сосредоточенными на дискретном множестве точек. Эти модели служат хорошей теоретической основой для построения множества существующих моделей.

Совершенно естественно, что создание хороших моделей очень интересно именно с практической точки зрения. Ведь, имея модель, можно сконструировать систему с требуемыми практиками и предсказанными теоретиками свойствами. На данный момент уже появились системы, существование которых ранее было просто немислимым. Это такие объекты, как, например, квантовые точки [1], квантовые провода [2], графен [3], нанотрубки [4], фуллерен [5] и проч. Среди всех этих структур можно еще выделить так называемый наностручок – систему, представляющую собой нанотрубку, заполненную молекулами фуллерена. Есть ряд экспериментальных работ (смотри, например, [6-9]), описывающих процесс создания подобных систем и их свойства. Поэтому очень важно создать математическую модель для описания подобных структур.

Данная работа посвящена построению математической модели прямой цепочки слабо связанных шарообразных резонаторов с условием Дирихле на границе, составленной из идентичных шарообразных резонаторов, соединенных между собой точечными отверстиями (в точках соединения предполагается наличие условия  $\delta$ -соединения). Построение данной модели будет проводиться в рамках теории самосопряженных расширений симметрических операторов, а ее дальнейший спектральный анализ основан на использовании метода матриц монодромии. В

результате исследования было получено решение спектральной задачи для построенной таким образом модели, а именно, найдена зависимость зонной структуры спектра соответствующего модельного оператора от параметров рассматриваемой системы (в данном случае – от «интенсивности соединения» в точках сочленения резонаторов).

## 1. Построение модели

Рассматриваемая в данной работе модель объединяет в себе идеи нескольких моделей: модели квантовых графов цепочечного типа (см., например, [10,11]) и моделей точечного отверстия (см. [12-15]), – и строится на основе теории самосопряженных расширений симметрических операторов (смотри, например, [16-18]). Рассматриваемая в работе система представляет собой прямую цепочку резонаторов (то есть центры всех резонаторов и точки их соединения лежат на одной прямой), а также предполагается наличие  $\delta$ -потенциала в точках соединения резонаторов (одинакового для всех точек, с константой связи  $\alpha \in \mathbf{R}$ ).

Мы будем решать стационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \lambda\psi(\mathbf{x}),$$

причем для простоты выберем систему единиц измерения такой, чтобы  $\hbar = 2\pi$ ,  $2m = e = 1$ . Для описания модельного гамильтониана  $\hat{H}$  необходимо сначала рассмотреть простейший случай – систему состоящую только из двух резонаторов, – и потом обобщить ее на случай бесконечного количества резонаторов.

### 1.1. Система двух связанных резонаторов

Пусть у нас есть два идентичных шара  $(\Omega_1, \Omega_2)$ , соединенных в точке  $x_0$ . Тогда исходный оператор для данной системы есть просто ортогональная сумма соответствующих лапласианов:  $-\Delta = (-\Delta_1) \oplus (-\Delta_2)$  на  $L_2(\Omega_1) \oplus L_2(\Omega_2)$ .

Для «включения» взаимодействия в точке  $\mathbf{x}_0$  воспользуемся процедурой «сужения-расширения». Итак, во-первых, сузим исходный оператор на множество всех гладких функций из области определения  $D(-\Delta)$  исходного оператора, которые обращаются в нуль в точке  $\mathbf{x}_0$ . Его замыкание (оператор  $-\Delta_0$ ) является симметрическим оператором с индексами дефекта (2,2), а его дефектные элементы можно представить в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 G_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_0}} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\partial^2 G_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_0}} \end{pmatrix},$$

где  $\frac{\partial^2 G_i(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_0}}$  – это вторые нормальные производные функции Грина для шара  $\Omega_i$  ( $i = 1, 2$ ), а  $\lambda_0$  – регулярное значение,  $\lambda_0 < 0$  (смотри, например, [17]). Так как самосопряженные расширения оператора – это сужения сопряженного оператора, то сначала построим сопряженный оператор  $-\Delta_0^*$ .

Область определения сопряженного оператора представима в следующем виде:

$$D(-\Delta_0^*) = D(-\Delta_0^F) \dot{+} N_{\lambda_0},$$

где  $D(-\Delta_0^F)$  – это расширение по Фридрихсу оператора  $-\Delta_0$ , а  $N_{\lambda_0}$  – дефектное подпространство, соответствующее регулярному значению  $\lambda_0$  (смотри, например, [19]). Причем, видно, что функция  $f$  ( $f \in D(-\Delta_0^*)$ ) представима в следующем виде:

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1^0 + a_1^- \frac{\partial^2 G_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_0}} + b_1^- \\ f_2^0 + a_2^+ \frac{\partial^2 G_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_0}} + b_2^+ \end{pmatrix},$$

где  $f_i^0 \in D(-\Delta_0)$  ( $i = 1, 2$ ), а  $a_1^-$ ,  $a_2^+$ ,  $b_1^-$ ,  $b_2^+$  – это некоторые коэффициенты.

А чтобы получить именно самосопряженное расширение оператора  $-\Delta_0$  нужно

установить некоторую линейную зависимость между коэффициентами  $a_1^-$ ,  $a_2^+$ ,  $b_1^-$ ,  $b_2^+$ . К примеру, расширение будет самосопряженным при выполнении следующего условия:  

$$\begin{cases} a_2^+ = -a_1^- \\ b_2^+ = b_1^- \end{cases}$$
. Это легко проверить, рассмотрев соответствующую граничную форму.

Далее перейдем к случаю бесконечного числа резонаторов, составляющих систему.

## 1.2. Бесконечная цепочка резонаторов

Обобщим эти результаты на случай (прямой) бесконечной цепочки следующим образом. Во-первых, теперь мы рассматриваем исходный оператор  $-\Delta = \bigoplus_{j \in \mathbb{Z}} (-\Delta_j)$  на  $\bigoplus_{j \in \mathbb{Z}} L_2(-\Delta_j)$ . Во-вторых, мы сужаем оператор  $-\Delta$  на множество всех гладких функций из области определения  $D(-\Delta)$ , которые обращаются в нуль в точках соединения резонаторов  $\mathbf{x}_j$ . Теперь сужение  $-\Delta_0$  такого оператора – это симметрический оператор с индексами дефекта  $(\infty, \infty)$ , а роль дефектных элементов играют  $\frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_j}}$ .

Сопряженный симметрическому оператору  $-\Delta_0$  оператор  $-\Delta_0^*$  также строится аналогично приведенным выше рассуждениям, и самосопряженное расширение  $-\widetilde{\Delta}_0^*$  может быть получено при, например, следующем выборе соотношения между коэффициентами:

$$\begin{cases} a_j^+ = -a_{j-1}^- \\ b_j^+ = b_{j-1}^- \end{cases} \quad (1)$$

При использовании указанных выше обозначений волновая функция в  $j$ -ом шаре для прямой цепочки может быть записана следующим образом:

$$\psi_j(\mathbf{x}) = a_j^+ \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda)}{\partial n_x \partial n_{x_j}} + a_j^- \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{j+1}, \lambda)}{\partial n_x \partial n_{x_{j+1}}},$$

а коэффициенты  $b_j^+$ ,  $b_{j-1}^-$  имеют следующий вид:

$$b_j^+ = a_j^+ \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j} \left( \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda)}{\partial n_x \partial n_{x_j}} - \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_j}} \right) + a_j^- \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{j+1}, \lambda)}{\partial n_x \partial n_{x_j}}, \quad (2)$$

$$b_{j-1}^- = a_{j-1}^+ \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j, \lambda)}{\partial n_x \partial n_{x_{j-1}}} + a_{j-1}^- \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j} \left( \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda)}{\partial n_x \partial n_{x_j}} - \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j, \lambda_0)}{\partial n_x \partial n_{x_j}} \right). \quad (3)$$

Чтобы завершить построение модели необходимо изменить условие (1), чтобы включить  $\delta$ -потенциал в точках соединения резонаторов. С точки зрения граничных форм это условие  $\delta$ -соединения с параметром  $\alpha$  примет в нашем случае следующий вид:

$$\begin{cases} a_j^+ = -a_{j-1}^- \\ b_j^+ - b_{j-1}^- = -\alpha a_{j-1}^- \end{cases} \quad (4)$$

Таким образом, модель построена.

Далее приведем спектральный анализ описанной выше системы.

## 2. Спектральный анализ системы

Для анализа периодических структур существует несколько подходов. В данной работе мы будем пользоваться методом матриц монодромии. А именно, нас будет интересовать то свойство матрицы монодромии, что во-первых, матричным уравнением она выражает линейную зависимость амплитуд волновых функций (в нашем случае – коэффициентов  $a_j^\pm$ ); а во-вторых, зная матрицу монодромии, скажем, для перехода от шара номер  $j - 1$  к шару номер  $j$  и матрицу перехода от  $j$ -ого шара к  $j + 1$ , с помощью их произведения (в обычном смысле) можно получить матрицу, связывающую  $j - 1$ -й и  $j + 1$ -й шары. Также известно, что асимптотическое поведение

нормы вектора  $\|(a_j^+, a_j^-)^T\|$  определяют спектральные свойства матрицы монодромии, следовательно, имеем следующую взаимосвязь:

- пусть  $(a_j^+, a_j^-)^T$  с точностью до мультипликативной константы есть собственный вектор матрицы монодромии  $M$ , отвечающий собственному числу  $\mu$  по модулю равным 1 (следовательно, этот вектор не зависит от номера  $j$ ), то коэффициенты  $a_j^\pm$  определяют обобщенную собственную функцию и соответствуют значению энергии, принадлежащему непрерывному спектру оператора;
- пусть теперь  $(a_j^+, a_j^-)^T$  есть собственный вектор, отвечающий собственному числу  $\mu$  по модулю меньшего 1 (что соответствует тому, что этот вектор экспоненциально убывает по  $j$ ), то коэффициенты  $a_j^\pm$  определяют собственную функцию и соответствуют значению энергии, принадлежащему точечному спектру оператора.

Получим явный вид матрицы монодромии для нашей цепочки. А именно, получим матричную связь коэффициентов  $a_j^\pm$  с коэффициентами  $a_{j-1}^\pm$ . Для этого подставим в систему (4) явный вид коэффициентов  $b_j^\pm$  (выражения (2), (3)) и после нескольких арифметических преобразований получим следующее:

$$\begin{pmatrix} a_j^+ \\ a_j^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \frac{F_D(x_{j-1}, x_j, \lambda)}{F_D(x_{j+1}, x_j, \lambda)} & \frac{X_D}{F_D(x_{j+1}, x_j, \lambda)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{j-1}^+ \\ a_{j-1}^- \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} a_{j-1}^+ \\ a_{j-1}^- \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где  $X_D = -\alpha + 2f_D = -\alpha + 2 \lim_{x \rightarrow x_j} (F_D(x, x_j, \lambda) - F_D(x, x_j, \lambda_0))$ ,  $F_D(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \lambda) = \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \lambda)}{\partial n_{x_i} \partial n_{x_j}} =$

$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l K_{lk}}{y_{lk}^2 - \lambda}$ ,  $f_D = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(\lambda - \lambda_0) K_{lk}}{(y_{lk}^2 - \lambda_0)(y_{lk}^2 - \lambda)}$ ,  $y_{lk}$  –  $k$ -й корень уравнения  $j_l(x) = 0$  ( $j_l(x)$  – сферическая функция Бесселя  $l$ -ого порядка),  $K_{lk}$  – нормировочный коэффициент. Матрица  $\mathbf{M}$  и есть искомая матрица монодромии.

Так как явный вид матрицы монодромии (5) и ее спектральные свойства известны, то получаем, что уравнение для получения непрерывного спектра (аналогично задаче для прямой цепочки резонаторов с условием Неймана на границе, рассмотренной в [20], можно показать, что дискретный спектр такой системы пуст и в случае условия Дирихле) имеет вид:  $|\mu| = 1$ , где  $\mu$  – собственное число матрицы монодромии  $\mathbf{M}$ , что в нашем случае может быть записано в виде следующего неравенства:

$$\left| \frac{X_D}{2F_D} \right| \leq 1, \quad (6)$$

Более того, последнее неравенство может быть также записано в следующей форме:

$$\begin{cases} f_D - F_D \leq -\alpha/2, \\ f_D + F_D \geq -\alpha/2, \\ F_D > 0; \\ f_D - F_D \geq -\alpha/2, \\ f_D + F_D \leq -\alpha/2, \\ F_D < 0. \end{cases} \quad (7)$$

Система (7) и является основным объектом исследования для описания зонной структуры непрерывного спектра модельного гамильтониана. Границы зон непрерывного спектра, полученные для всевозможных значений «интенсивности соединения»  $\alpha$ , будут являться основным результатом данной работы.

### 3. Результаты

Опишем структуру непрерывного спектра. Так как точки  $y_{l,k}^2$  (где  $l \in \mathbf{N}_0$ ,  $k \in \mathbf{N}$ )

расположены на оси энергий  $\lambda$  весьма нерегулярно, мы будем рассматривать по отдельности интервалы между соседними точками  $y_{l,k}^2$ . Всего возможны интервалы пяти «типов»: I –  $(-\infty; y_{0,1}^2)$ , II –  $(y_{2p',k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$ , III –  $(y_{2p',k'}^2; y_{2p''+1,k''}^2)$ , IV –  $(y_{2p'+1,k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$ , V –  $(y_{2p'+1,k'}^2; y_{2p''+1,k''}^2)$ , где  $k', k''$  – два, вообще говоря, любых натуральных числа;  $p', p''$  – два, вообще говоря, любых неотрицательных целых числа. Нам также понадобится явный вид функций, стоящих в левой части первых двух уравнений системы (7):

$$f_D \pm F_D = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \left( \frac{\lambda \pm (-1)^l y_{l,k}^2 - \lambda_0 (1 \pm (-1)^l)}{y_{l,k}^2 - \lambda_0} \frac{K_{l,k}}{y_{l,k}^2 - \lambda} \right). \quad (8)$$

Теперь, принимая во внимание соотношения (7) и (8), можно выписать все возможные конфигурации зон непрерывного спектра на каждом «типовом» интервале. Для большего удобства полученные результаты приведем в таблице 1 (пояснение к таблице будет приведено ниже).

**Таблица 1.** Структура непрерывного спектра для прямой цепочки с условием Дирихле

Тип интервала $\lambda$	Поведение функции $F_D$	Диапазон значений $\alpha$	Левая граница зоны $L (lbi)$	Правая граница зоны $R (rbi)$
I	$F_D > 0$	$(-\infty; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{0,1}^2}]$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{0,1}^2 - 0$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{0,1}^2}; +\infty)$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
II	$F_D < 0$ на $(y_{2p',k'}^2; \lambda^*)$ , $F_D > 0$ на $(\lambda^*; y_{2p'',k''}^2)$	$(-\infty; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}]$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p'',k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}; -2f_D _{\lambda=\lambda^*})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2f_D _{\lambda=\lambda^*}; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2})$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2}; +\infty)$	$y_{2p',k'}^2 + 0$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
III	$F_D < 0$ на $(y_{2p',k'}^2; y_{2p''+1,k''}^2)$ и $(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2} < (f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}$	$(-\infty; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}]$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p''+1,k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2})$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2}; +\infty)$	$y_{2p',k'}^2 + 0$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
	$F_D < 0$ на $(y_{2p',k'}^2; y_{2p''+1,k''}^2)$ и $(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2} \geq (f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}$	$(-\infty; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2})$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p',k'}^2 - 0$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2}; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2})$	$y_{2p',k'}^2 + 0$	$y_{2p''+1,k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}; +\infty)$	$y_{2p',k'}^2 + 0$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
	$F_D < 0$ на $(y_{2p',k'}^2; \lambda^*)$ , $F_D > 0$ на $(\lambda^*; \lambda^{**})$ $F_D < 0$ на $(\lambda^{**}; y_{2p''+1,k''}^2)$	$(-\infty; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}]$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p''+1,k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p''+1,k''}^2}; -2f_D _{\lambda=\lambda^{**}})$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2f_D _{\lambda=\lambda^{**}}; -2f_D _{\lambda=\lambda^*})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2f_D _{\lambda=\lambda^*}; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p',k'}^2})$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
IV	$F_D > 0$ на $(y_{2p'+1,k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$ и $(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2} < (f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}$	$(-\infty; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}]$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p'',k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2}; +\infty)$	$y_{2p'+1,k'}^2 + 0$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
	$F_D > 0$ на	$(-\infty; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p'+1,k'}^2 - 0$

	$(y_{2p'+1,k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$ или $(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2} \geq$ $(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}$	$[-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2}; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}]$	$y_{2p'+1,k'}^2 + 0$	$y_{2p'',k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}; +\infty)$	$y_{2p'+1,k'}^2 + 0$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
	$F_D > 0$ на $(y_{2p'+1,k'}^2; \lambda^*)$ , $F_D < 0$ на $(\lambda^*; \lambda^{**})$ $F_D > 0$ на $(\lambda^{**}; y_{2p'',k''}^2)$	$(-\infty; -2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}]$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p'',k''}^2 - 0$
		$(-2(f_D - F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}; -2f_D _{\lambda=\lambda^*})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$[-2f_D _{\lambda=\lambda^*}; -2f_D _{\lambda=\lambda^*}]$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$(-2f _{\lambda=\lambda^*}; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
	$[-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2}; +\infty)$	$y_{2p'+1,k'}^2 + 0$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$	
V	$F_D < 0$ на $(y_{2p'+1,k'}^2; \lambda^*)$ , $F_D > 0$ на $(\lambda^*; y_{2p'',k''}^2)$	$(-\infty; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}]$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$y_{2p'+1,k'}^2 - 0$
		$(-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'',k''}^2}; -2f_D _{\lambda=\lambda^*})$	$L: (f_D - F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D + F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$[-2f_D _{\lambda=\lambda^*}; -2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2})$	$L: (f_D + F_D) _{\lambda=L} = -\frac{\alpha}{2}$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$
		$[-2(f_D + F_D) _{\lambda=y_{2p'+1,k'}^2}; +\infty)$	$y_{2p'+1,k'}^2 + 0$	$R: (f_D - F_D) _{\lambda=R} = -\frac{\alpha}{2}$

Объясним, как была получена данный результат (таблица 1) на примере первых двух «типовых» интервалов – интервалов  $(-\infty; y_{01}^2)$ ,  $(y_{2p',k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$  (понятно, что рассуждения для описания границ спектральных зон, входящих в интервалы оставшихся трех типов, проводятся аналогично):

- На  $(-\infty; y_{01}^2)$   $F_D > 0$ , а значит, график функции  $f_D + F_D$  лежит выше графика функции  $f_D - F_D$  (смотри Рисунок 1). Таким образом, принимая

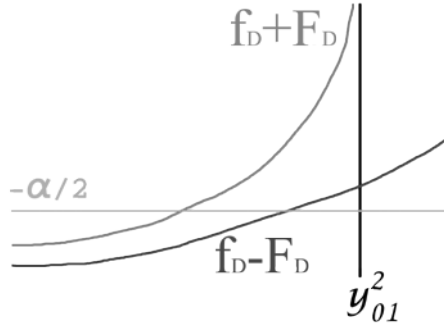


Рисунок 1. Схематичное поведение функций  $f_D + F_D$ ,  $f_D - F_D$  на  $(-\infty; y_{01}^2)$ .

во внимание (7) и предельные значения для (8) при  $\lambda \rightarrow y_{01}^2$ , получаем:

- если  $\alpha \leq -2(f_D - F_D)|_{\lambda=y_{01}^2}$ , тогда левая граница зоны  $lb_1$  может быть вычислена как решение следующего уравнения (для каждого фиксированного  $\alpha$ ):  $(f_D + F_D)|_{\lambda=lb_1} = -\frac{\alpha}{2}$ , а правая граница зоны  $rb_1$  совпадает с соответствующей границей рассматриваемого интервала:  $rb_1 = y_{01}^2 - 0$ ;
- если  $\alpha > -2(f_D - F_D)|_{\lambda=y_{01}^2}$ , тогда левая и правая границы зон следующие:  
 $lb_1: (f_D + F_D)|_{\lambda=lb_1} = -\frac{\alpha}{2}$ ,  $rb_1: (f_D - F_D)|_{\lambda=rb_1} = -\frac{\alpha}{2}$ .
- На  $(y_{2p',k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$  функция  $F_D$  меняет знак, а именно, на  $(y_{2p',k'}^2; \lambda^*)$   $F_D < 0$ , а на  $(\lambda^*; y_{2p'',k''}^2)$   $F_D > 0$ , где  $\lambda^*$  – (единственный) корень функции  $F_D$  на  $(y_{2p',k'}^2; y_{2p'',k''}^2)$ . Тогда в этом случае функции  $f_D \pm F_D$  ведут себя, как показано на Рисунке 2. Таким образом, для различных  $\alpha$  получаем:

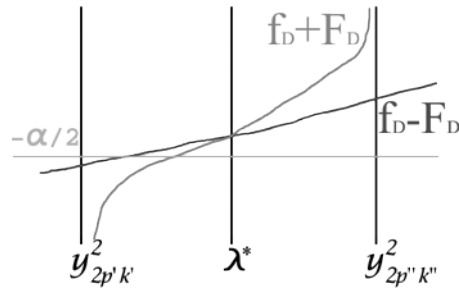


Рисунок 2. Схематичное поведение функций  $f_D + F_D$ ,  $f_D - F_D$  на  $(y_{2p' k'}^2; y_{2p'' k''}^2)$ .

- если  $\alpha \leq -2(f_D - F_D)|_{\lambda=y_{2p'' k''}^2}$ :  
 $lb_2: (f_D + F_D)|_{\lambda=lb_2} = -\frac{\alpha}{2}, \quad rb_2 = y_{2p'' k''}^2 - 0;$
- если  $-2(f_D - F_D)|_{\lambda=y_{2p'' k''}^2} < \alpha < -2 f_D|_{\lambda=\lambda^*}$ :  
 $lb_2: (f_D + F_D)|_{\lambda=lb_2} = -\frac{\alpha}{2}, \quad rb_2: (f_D - F_D)|_{\lambda=rb_2} = -\frac{\alpha}{2};$
- если  $-2 f_D|_{\lambda=\lambda^*} \leq \alpha < -2(f_D - F_D)|_{\lambda=y_{2p' k'}^2}$ :  
 $lb_2: (f_D - F_D)|_{\lambda=lb_2} = -\frac{\alpha}{2}, \quad rb_2: (f_D + F_D)|_{\lambda=rb_2} = -\frac{\alpha}{2};$
- если  $\alpha \geq -2(f_D - F_D)|_{\lambda=y_{2p' k'}^2}$ :  
 $lb_2 = y_{2p' k'}^2 + 0, \quad rb_2: (f_D + F_D)|_{\lambda=rb_2} = -\frac{\alpha}{2}.$

Таким образом, мы имеем точные выражения для границ спектральных зон  $lb_i$ ,  $rb_i$  при фиксированном параметре  $\alpha$  для  $i$ -го «типичного» интервала. А так как в таблице 3 представлены все возможные такие интервалы, то можно сказать, она полностью описывает зонную структуру непрерывного спектра в случае наличия условия Дирихле на границе шара.

Имея точные выражения для границ зон, представленные в таблице 1, можно численно промоделировать их поведение в зависимости от параметра соединения на любом типовом интервале. В качестве примера приведем результаты численного моделирования для интервала второго типа –  $(y_{21}^2; y_{02}^2)$  (смотри Рисунок 3).

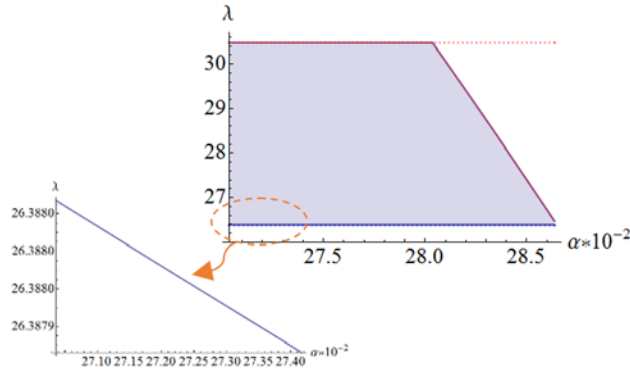


Рисунок 3. Зависимость ширины зоны непрерывного спектра, лежащей в интервале  $(y_{21}^2; y_{02}^2)$  от интенсивности соединения  $\alpha$  (красная и синяя пунктирная линия обозначают верхнюю и нижнюю границу типового интервала соответственно, красная и синяя сплошные линии – верхнюю и нижнюю границу спектральной зоны).

### Заключение

Итак, в данной работе была решена спектральная задача для прямой бесконечной цепочки слабо связанных шарообразных резонаторов с условием Дирихле на границе шаров и условием



$\delta$ -соединения в точках сочленения резонаторов. А именно, на основе теории самосопряженных расширений симметрических операторов была построена модель, описывающая указанную выше систему, и проведен ее спектральный анализ. В работе была полностью описана зонная структура непрерывного спектра соответствующего модельного оператора для всех возможных значений параметра соединения резонаторов (константы связи  $\alpha$ ).

Основной результат работы (выражения для границ зон для всевозможных значений константы связи) наглядно представлен в таблице 1 и может быть использован при численном моделировании системы (смотри, например, Рисунок 3). А также, описанная в работе модель может быть использована для построения реальной физической системы с заранее определенными свойствами, так как данная математическая модель позволяет найти такие параметры системы, которые обеспечат требуемые спектральные свойства реальной системы, и наоборот, предсказать спектральные свойства системы, зная значение константы связи резонаторов.

В дальнейшем на основе этой математической модели можно развить процедуру для описания спектра систем более сложной геометрической конфигурации (систем с изгибом, разветвлением или с «поворотом на  $180^\circ$ »), что позволит конструировать все более нетривиальные реальные физические системы.

### Список литературы

- [1] Wang C., Shim M., Guyot-Sionnest P. Electrochromic nanocrystal quantum dots. // *Science*. – 2001. – V. 291 (5512). – P. 2390-2392.
- [2] Rech J., Matveev K. A., Electronic transport in inhomogeneous quantum wires. // *J. Phys: Condens. Matter*. – 2008. – V. 20. – P. 164211.
- [3] Warner J. H., Schäffel F., Bachmatiuk A., Rümmeli M. H. Graphen: Fundamentals and emergent applications. – New York: Cambridge University Press, 2012. – 366 p.
- [4] Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and applications. – Springer, 2001.
- [5] Елецкий А. В., Смирнов Б. М. Фуллерены и структуры углерода. // *Успехи физических наук*. – 1995. – Т. 165. – N 9. – С. 977-1009.
- [6] Wang Y., Zhang H. J., Lu L., Stubbs L. P., Wong C. C., Lin J. Designed Functional Systems from Peapod-like Co@Carbon to Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@Carbon Nanocomposites // *ACS Nano*. – 2010. – V. 4. – No 8. – P. 4753-4761.
- [7] Yang Y., Li L., Li W. Plasmon Absorption of Au-in-CoAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Linear Nanopeapod Chains. // *J. Phys. Chem. C*. – 2013. – V. 117. – No 27. – P. 14142-14148.
- [8] Enyashin A. N., Ivanovskii A. L. Nanotubular composites: modeling of capillary filling of nanotubes of disulfide of molybdenum by molecules of TiCl<sub>4</sub>. // *Nanosystems: Phys. Chem. Math.* – 2010. – V. 1 – No 1. – P. 63-71.
- [9] Abou-Hamad E., Kim Yo., Talyzin A. V., Goze-Bac Ch., Luzzi D. E., Rubio A., Wagberg T. Hydrogenation of C<sub>60</sub> in Peapods: Physical Chemistry in Nano Vessels. // *J. Phys. Chem. C*. – 2009. – V. 113. – P. 8583-8587.
- [10] Duclos P., Exner P., Turek O. On the spectrum of a bent chain graph. // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2008. – V. 41. – P. 415206.
- [11] Kuchment P., Vainberg B. On the structure of eigenfunctions corresponding to embedded eigenvalues of locally perturbed periodic graphs operator. // *Commun. Math. Phys.* – 2006. – V. 268. – P. 673.
- [12] Popov I. Yu. The resonator with narrow slit and the model based on the operator extensions theory. // *J. Math. Phys.* – 1992. – V. 33 (11). – P. 3794-3801.
- [13] Popov I. Yu., Popova S. L. The extension theory and resonances for a quantum waveguide. // *Phys. Lett. A*. – 1993. – V. 173. – P. 484-488.

- [14] Popov I. Yu, Popova S. L. Zero-width slit model and resonances in mesoscopic systems. // *Europhys. Lett.* – 1993. – V. 24 (5). – P. 373-377.
- [15] Popov I. Yu. The extension theory and the opening in semitransparent surface. // *J. Math. Phys.* – 1992. – V. 33(5). – P. 1685-1689.
- [16] Березин Ф. А., Фаддеев Л. Д. Замечание об уравнении Шрёдингера с сингулярным потенциалом. // *ДАН СССР.* – 1961. – Т. 137. – N 5. – С. 1011-1014.
- [17] Павлов Б. С. Теория расширений и явнорешаемые модели. // *УМН.* – 1987. – Т. 42. – N 6 (258). – С. 99-131.
- [18] Альбеверлио С., Гестези Ф., Хеэг Крон Р., Хольден Х. Решаемые модели в квантовой механике. – М.: Мир, 1991.
- [19] Бирман М. Ш., Соломяк М. З. Спектральная теория самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве. – Санкт-Петербург: Лань, 2010. – 464 с.
- [20] Melikhova A.S., Popov I.Yu. Bent and branched chains of nanoresonators // *J. Phys.: Conference Series.* – 2014. – V. 541. – P.012061.

## РАСЧЕТ ДВУМЕРНОГО ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ СО СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕЙ ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ РЕЙНОЛЬДСА

П.А. Павутец  
papavutets@gmail.com

Строится математическая модель, описывающая процесс релаксации границы исходной области к окружности под действием сил поверхностного натяжения. Получено распределение давления в области на всех этапах релаксации границы.

**Ключевые слова:** капиллярные силы, свободная граница, малые числа Рейнольдса, гармонические функции.

### 1. Введение

В работе рассматривается стоксово течение вязкой ньютоновской жидкости в двумерной односвязной области со свободной границей под действием капиллярных сил. Квазистационарное приближение Стокса [1,2] используется для описания вязких течений с малыми числами Рейнольдса. Двумерные течения со свободной границей привлекали внимание многих исследователей [3-5].

Цель работы – построение математической модели, описывающей процесс релаксации границы исходной области к окружности.

В работе рассчитано распределение давления в области в виде разложения по полной системе гармонических функций. Рассчитаны коэффициенты этого ряда, а также найдены минимальное, максимальное значения давления и построен график распределения давления по области.

Опираясь на полученное распределение давления, рассчитывается поле скоростей, которая позволяет получить закон движения границы. Тем самым описан процесс релаксации границы. Как и следовало ожидать, расчет показывает, что форма границы приближается к окружности.

### 2.1 Формулировка модели

Запишем уравнения Стокса и уравнение неразрывности в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} = 0, \\ \frac{\partial v_{\beta}}{\partial x_{\beta}} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

где  $v_{\beta}$  – компоненты скорости жидкости,  $p_{\alpha\beta}$  – тензор напряжений,  $\alpha, \beta = 1, 2$ . Здесь и далее по повторяющимся индексам происходит суммирование.

$$p_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta} + \mu \left( \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial v_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) \quad (2)$$

Здесь  $p$  – давление,  $\mu$  – вязкость жидкости,  $\delta_{\alpha\beta}$  –  $\delta$ -символ Кронекера.

Будем считать, что деформация области происходит под действием силы поверхностного натяжения. Тогда, граничные условия имеют следующий вид:

$$p_{\alpha\beta} n_{\beta} \Big|_{\Gamma} = f_{\alpha} = -\sigma n_{\alpha} \frac{\partial n_{\beta}}{\partial x_{\beta}} \quad (3)$$

где  $n_{\alpha}$  – компоненты вектора внешней нормали к границе  $\Gamma$ ,  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения,  $\frac{\partial n_{\beta}}{\partial x_{\beta}}$  – скалярная кривизна границы.

Рассчитанное, согласно (1), (3), поле скоростей при текущей конфигурации границы позволяет рассчитать нормальную скорость деформации границы  $V_n$  и, следовательно, описать закон ее деформации:

$$V_n = v_{\beta} n_{\beta} \Big|_{\Gamma} \quad (4)$$

Уравнения Стокса описывают поле скоростей и давления в области, изменяющейся со временем, но сами уравнения не содержат параметра времени  $t$ . Поле скоростей в каждый момент времени определяется формой границы в тот же самый момент времени. Такой подход называется квазистационарным приближением. Рассчитанное таким образом поле скоростей описывает процесс релаксации границы.

### 2.2.1. Расчет давления для произвольной силы

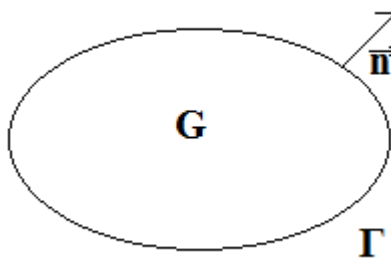


Рис.1. Пример области.

Умножим уравнение движения на произвольное гладкое векторное поле  $\kappa_{\alpha}$  и проинтегрируем по области  $G$ :

$$\int_G \kappa_{\alpha} \frac{\partial p_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} dG = \int_G \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\kappa_{\alpha} p_{\alpha\beta}) dG - \int_G p_{\alpha\beta} \frac{\partial \kappa_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} dG = 0 \quad (5)$$

В формулах (5) – (19) предполагается суммирование по дважды повторяющимся индексам. Применяя теорему Гаусса – Остроградского к первому и второму слагаемому (5), получаем:

$$\int_G \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\kappa_{\alpha} p_{\alpha\beta}) dG = \int_{\Gamma} \kappa_{\alpha} p_{\alpha\beta} n_{\beta} d\Gamma = \int_{\Gamma} \kappa_{\alpha} f_{\alpha} d\Gamma$$

$$\int_G p_{\alpha\beta} \frac{\partial \kappa_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} dG = \frac{1}{2} \int_G p_{\alpha\beta} \left( \frac{\partial \kappa_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial \kappa_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) dG$$

Пусть

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial \kappa_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial \kappa_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) = \psi \delta_{\alpha\beta} \quad (6)$$

Из (6) вытекают следующие условия:

$$1) \Delta \psi = 0$$

$$2) \Delta \kappa_\alpha = 0$$

Из (6) получаем следующее  $d(\kappa_1 + i\kappa_2) = (\psi + i\omega)d(x_1 + ix_2)$ , где  $\omega$  - функция, гармонически сопряженная к  $\psi$ . Из этого соотношения следует существование поля  $\kappa_\alpha$  для заданного гармонического поля  $\psi$ .

Тогда

$$\frac{1}{2} \int_G p_{\alpha\beta} \left( \frac{\partial \kappa_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \kappa_\beta}{\partial x_\alpha} \right) dG = \int_G p_{\alpha\beta} \psi \delta_{\alpha\beta} dG = \int_G \psi p_{\beta\beta} dG = (-2) \int_G p \psi dG$$

В итоге мы получаем следующее уравнение:

$$\int_G p \psi dG = \left( -\frac{1}{2} \right) \int_\Gamma \kappa_\alpha f_\alpha d\Gamma \quad (7)$$

### 2.2.2. Расчет давления для капиллярной силы

Так как  $n$  – единичная нормаль, то справедлива следующая запись

$$f_\alpha = (-\sigma) n_\alpha \frac{\partial n_\beta}{\partial x_\beta} = (-\sigma) \left( n_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\beta} - n_\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) n_\beta$$

В формулу (7) подставим  $f_\alpha$ . Обозначим через  $D_{\alpha\beta} = n_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\beta} - n_\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$

Рассмотрим интеграл, стоящий в правой части (7):

$$\int_\Gamma \kappa_\alpha f_\alpha d\Gamma = \int_\Gamma \kappa_\alpha (-\sigma) D_{\alpha\beta} n_\beta d\Gamma = (-\sigma) \int_\Gamma (D_{\alpha\beta} (\kappa_\alpha n_\beta) - n_\beta D_{\alpha\beta} \kappa_\alpha) d\Gamma \quad (8)$$

Применяя теорему Гаусса – Остроградского к первому интегралу (8), получаем:

$$\begin{aligned} \int_\Gamma D_{\alpha\beta} (\kappa_\alpha n_\beta) d\Gamma &= \int_\Gamma \left( n_\alpha \frac{\partial (\kappa_\alpha n_\beta)}{\partial x_\beta} - n_\beta \frac{\partial (\kappa_\alpha n_\beta)}{\partial x_\alpha} \right) d\Gamma = \\ &= \int_G \left( \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial (\kappa_\alpha n_\beta)}{\partial x_\beta} - \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{\partial (\kappa_\alpha n_\beta)}{\partial x_\alpha} \right) dG = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Поэтому:

$$\begin{aligned} \int_\Gamma \kappa_\alpha f_\alpha d\Gamma &= \sigma \int_\Gamma n_\beta D_{\alpha\beta} \kappa_\alpha d\Gamma \quad (10) \\ \int_\Gamma \kappa_\alpha f_\alpha d\Gamma &= \sigma \int_\Gamma n_\beta \left( n_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\beta} - n_\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \kappa_\alpha d\Gamma = \\ &= \sigma \int_\Gamma \left( n_\alpha n_\beta \frac{\partial \kappa_\alpha}{\partial x_\beta} - n_\beta n_\beta \frac{\partial \kappa_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) d\Gamma = \sigma \int_\Gamma \left( n_\alpha n_\beta \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \kappa_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \kappa_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\partial \kappa_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) d\Gamma = \\ &= \sigma \int_\Gamma \left( n_\alpha n_\beta \delta_{\alpha\beta} \psi - \frac{\partial \kappa_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) d\Gamma \stackrel{\alpha=\beta}{=} \sigma \int_\Gamma (\psi - 2\psi) d\Gamma = -\sigma \int_\Gamma \psi d\Gamma \end{aligned}$$

Тогда:

$$\int_G p \psi dG = \frac{\sigma}{2} \int_{\Gamma} \psi d\Gamma \quad (11)$$

Представим давление в виде разложения по полной системе гармонических функций:

$$p = \sum_k a_k \psi_k \quad (12)$$

где

$a_k$  – коэффициенты давления,

$$\psi_k = \begin{cases} 1 & , k = 0 \\ R^{\left[\frac{k}{2}\right]+1} \cos\left(\left(\left[\frac{k}{2}\right]+1\right)\theta\right), & k - \text{нечетное} \\ R^{\frac{k}{2}} \sin\left(\frac{k}{2}\theta\right) & , k - \text{четное} \end{cases}$$

$\bar{R}$  – радиальная координата границы области,  $R = |\bar{R}|$ ,  $\theta$  – угол между радиус – вектором  $\bar{R}$  и осью  $Ox$ .

В итоге мы получаем следующую систему уравнений:

$$\sum_k a_k \left( \int_G \psi_k \psi_n dG \right) = \frac{\sigma}{2} \int_{\Gamma} \psi_n d\Gamma \quad (13)$$

### 2.3. Расчет скорости

Введём функцию Эйри  $\varphi$  и выразим через нее тензор напряжений:

$$P_{\alpha\beta} = -\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\gamma \partial x_\gamma} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \quad (14)$$

При  $\alpha = \beta$  получаем:

$$P_{\beta\beta} = -\delta_{\beta\beta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\gamma \partial x_\gamma} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\beta \partial x_\beta} = -\Delta \varphi \quad (15)$$

Используя (15), запишем (14) в виде:

$$P_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} P_{\gamma\gamma} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \quad (16)$$

Подставляя (2) в (16), получаем:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = p \delta_{\alpha\beta} + \mu \left( \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad (17)$$

Введем  $W_\alpha = \frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha}$ . Тогда (17) приобретает вид:

$$\frac{\partial W_\alpha}{\partial x_\beta} = p \delta_{\alpha\beta} + \mu \left( \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad (18)$$

Используя (18), запишем

$$dW_\alpha = \frac{\partial W_\alpha}{\partial x_\beta} dx_\beta = p dx_\alpha + \mu \left( \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right) dx_\beta \quad (19)$$

Ведem вектор  $\vec{\Phi} = (\Phi_1, \Phi_2)$ . Дифференциалы его компонент имеют вид:

$$\begin{cases} d\Phi_1 = p dx_1 - \omega dx_2 \\ d\Phi_2 = p dx_2 + \omega dx_1 \end{cases}$$

Тогда:

$$d\Phi = d(\Phi_1 + i\Phi_2) = (p + i\omega)d(x_1 + ix_2) \quad (20)$$

$$\vec{\Phi} = \sum_k a_k \vec{\kappa}_k \quad (21)$$

где

$a_k$  – коэффициенты давления,

$$\vec{\kappa}_k = \begin{cases} \begin{pmatrix} R \cos(\theta) \\ R \sin(\theta) \end{pmatrix} & , k = 0 \\ \begin{pmatrix} R^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor + 2} \left( \lfloor \frac{k}{2} \rfloor + 2 \right)^{-1} \cos \left( \left( \lfloor \frac{k}{2} \rfloor + 2 \right) \theta \right) \\ R^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor + 2} \left( \lfloor \frac{k}{2} \rfloor + 2 \right)^{-1} \sin \left( \left( \lfloor \frac{k}{2} \rfloor + 2 \right) \theta \right) \end{pmatrix} & , k - \text{нечетное} \\ \begin{pmatrix} R^{\frac{k}{2} + 1} \left( \frac{k}{2} + 1 \right)^{-1} \sin \left( \left( \frac{k}{2} + 1 \right) \theta \right) \\ R^{\frac{k}{2} + 1} \left( \frac{k}{2} + 1 \right)^{-1} \cos \left( \left( \frac{k}{2} + 1 \right) \theta \right) \end{pmatrix} & , k - \text{четное} \end{cases}$$

Из (19) и (20) получаем формулу для расчета скорости движения границы:

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = \vec{v} = \frac{1}{2\mu} (\vec{W} - \vec{\Phi}) \quad (22)$$

### 3. Результаты

Процесс релаксации границы исходной области к окружности рассматривался с интервалом по времени  $\Delta t = 0.05$  секунд. Ниже представлены графики распределения давления в деформируемой области в конкретные моменты времени. Несмотря на то, что на последней картинке область похожа на окружность, процесс релаксации будет продолжаться дальше.

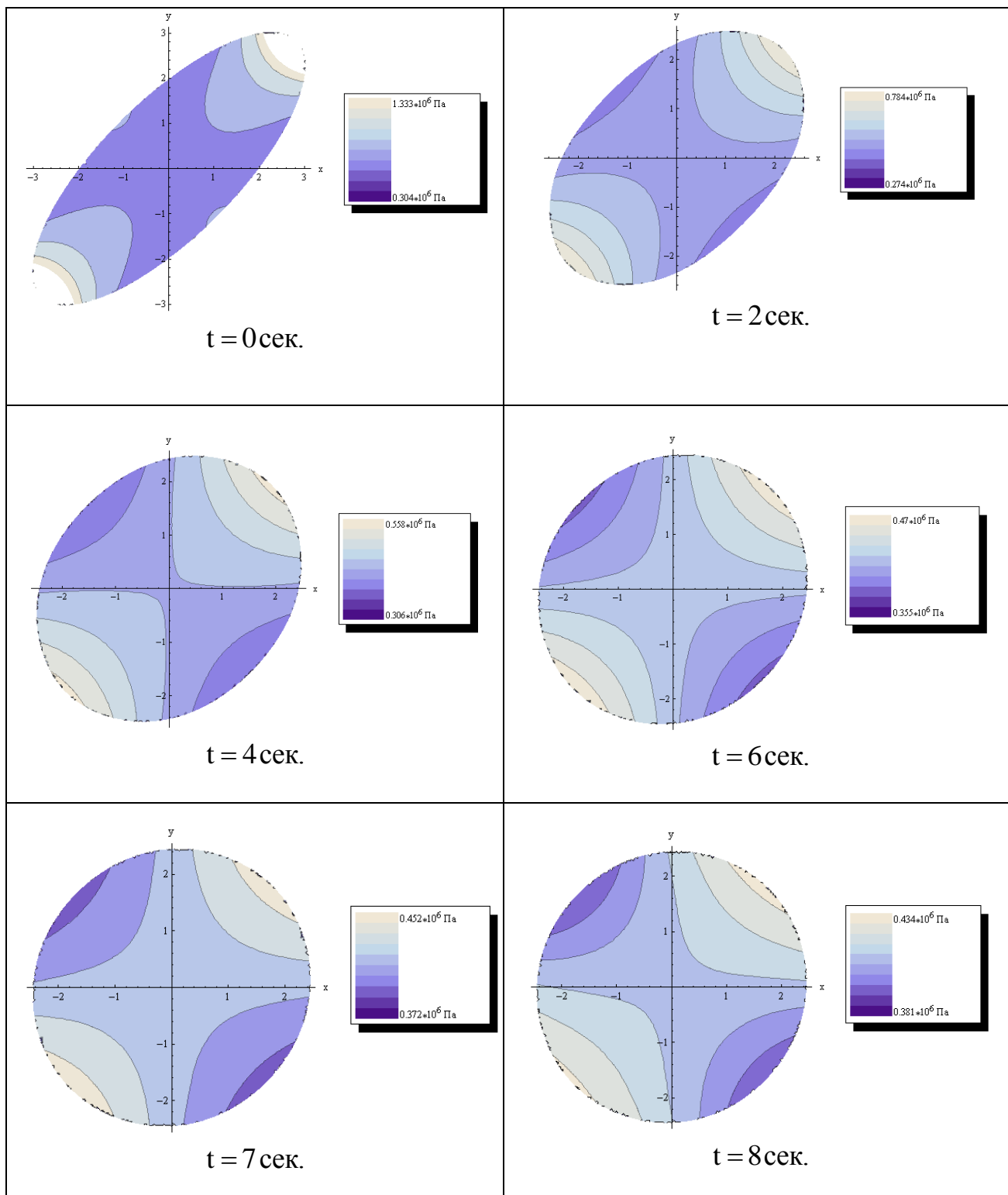


Рис.2 Графики распределения давления в деформируемой области в конкретные моменты времени

#### 4. Выводы

Построена математическая модель, описывающая процесс релаксации границы исходной области, заполненной вязкой жидкостью, к окружности под действием сил поверхностного натяжения.



## Список литературы

- [1] Frenkel, J. (1945). Viscous flow of crystalline bodies under the action of surface tension, *Journal of Physics*, Vol. 9, No. 5, pp. 385-391
- [2] Хаппель Дж., Бреннер Г. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. – М.: Мир, 1976.
- [3] Ионеску Д. Г. Теория аналитических функций и гидродинамика // Приложение теории функций в механике сплошной среды. Т. 2. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1965.
- [4] Антоновский Л.К. Динамика межфазной границы под действием капиллярных сил. Квазистационарное плоскопараллельное движение // ПМТФ. 1988. №3. С. 90 – 94.
- [5] Hopper, R.W. Coalescence of two equal cylinders: exact results for creeping viscous plane flow driven by capillarity// *J. Amer. Ceram. Soc.* 1984. V. 67. № 12. P. 262 – 264.

# MORPHEMIC FEATURES FOR DEPENDENCY PARSING

S. Petrenko

versusvoid@gmail.com

Capability to improve dependency parsing performance for Russian with utilization of morphemic features (annotated parts of word) is examined. Final model shows about 3% performance achievement over weak baseline and minimal achievement over strong one. Automatic extraction of annotated word segmentations from Wiktionary is considered as part of the research.

## 1. Introduction

The task of dependency parsing is stated as discovering dependencies (usually labeled) between words in sentence using such information as part-of-speech tags, word lemmas and usually some additional morphological features. For good overview of dependency parsing and its difference with constituency parsing see Covington (2001).

This paper examines usage of annotated word segmentations (to *morphemes*) as features for dependency parsing. Extraction of such segmentations is self-contained task and is investigated in Section 3. Though no technically similar researches were found, some of those with similar ideas are listed in Section 2.

Instruments, data and experiments setting are described in Section 4. Section 5 presents results of this experiments and derive some conclusions.

## 2. Related works

Different morphological features are used in dependency parsing almost always, which in their turn may or may not be estimated from morphemes. Some recent results on this topic in application to morphologically rich Arabic language can be found in Marton et al. (2013).

Some similar ideas of utilizing words structure appears in Luong et al. (2013), where word vectors were inducted on word parts. Such word vectors can be used in enhancement of neural-network based parsers.

No results regarding task of labeled morpheme segmentation were found. The unlabeled task is usually considered in unsupervised (the well-known Morfessor, Virpioja et al. 2013) or semi-supervised (Yang et al. 2007, Kohonen et al. 2010) settings. This solutions do not perform well in cases of rich non-concatenative morphology such as Russian, also significant accuracy is required for testing of such weak features. Fortunately Wiktionary project provides enough data to acquire model of reasonable quality.

Morphology-related learning from Wiktionary data was already investigated in Durrett and DeNero (2013), where authors attempted to learn whole morphological paradigm for German and Spanish, but their goal was constructive rather than analytical.

## 3. Morpheme segmentation

Morpheme is the smallest grammatical unit in a language. It can be either *free* and function as independent word (like *happy*) or bound, adding lexical meaning (like prefix **un-** and suffix **-ness** in **unhappiness**) or constructing word form (**-s** in **cats** or **-ed** in **worked**).

In Russian there are four main morpheme classes namely prefixes, roots, suffixes and inflexion. All but latter forms lexical meaning when inflexions are used for agreement. Additional classes like stem-connectors and postfixes were not probed as features in this research.

### 3.1. Corpus construction

Raw data for training morpheme segmentation model was taken from Russian Wiktionary and consisted of `{{{morpho}}}` template references similar to shown in figure 1, declension/conjugation table templates and references to them (figure 2). `{{{morpho}}}` template

provide annotated segmentation to morphemes of base word form. References to declension/conjugation table template contains different stems of word, which are then substituted for parameters in table template resulting in list of unannotated word forms.

```
{{{морфо|корень=крас|суфф1=от|оконч=a}}}
```

Figure 1: Russian Wiktionary {{{морфо}}} template reference examples for word красота showing segmentation to morphemes: root крас, suffix om and inflexion a.

Case	singular	plural
nominative	{{{ОСНОВА}}}а	{{{ОСНОВА1}}}Ы
genitive	{{{ОСНОВА}}}Ы	{{{ОСНОВА1}}}
dative	{{{ОСНОВА}}}е	{{{ОСНОВА1}}}аМ
accusative	{{{ОСНОВА}}}у	{{{ОСНОВА1}}}Ы
instrumental	{{{ОСНОВА}}}ой	{{{ОСНОВА1}}}ами
	{{{ОСНОВА}}}ою	
prepositional	{{{ОСНОВА}}}е	{{{ОСНОВА1}}}ах

```
{{{сущ ru fina 1d|основа=красот|основа1=красот}}}
```

Figure 2: Example of declension table template from Russian Wiktionary and reference to it.

Simple rule-based algorithm aligning base word form to other forms is then applied for segmentations extraction. Segmented base form and some other form are examined simultaneously and algorithm tries to find current part of word from base form in this other form. If it succeeds, it remembers this part and moves to next one. Due to Russian non-concatenative morphology number of ambiguous cases arise, where letter or whole part of word may appear or disappear in different forms. Resolution of most common such cases was hand-coded. For those interested in concrete implementation link to source code is presented in Section 5.

Of course such naive algorithm produce some noise in resulting data, but this noise is only a small addition to that of original Wiktionary data. No uniform rules for dealing with number of language artifacts such as consonant softening or appearing of 'й'(known as 'yot' or 'j') sound are defined, so they differ from user to user. In references to {{{морфо}}} template arguments are sometimes merged, sometimes left omitted, not to mention simply incorrect segmentations. Yet huge amount of data extracted gives a hope to deal with this noise during learning - about 400k segmentations were extracted at total. Due to limited computational resources only one eights of this data was really used.

Extracted segmentations are then segmented to letters in usual for segmentation-as-labeling way - each letter labeled with morpheme type and first letter has additional 'start' label. This encoding allows unambiguous segmentation reconstruction and ready to be learned by chosen tool.

### 3.2. Model and resulting performance

Default model to deal with segmentation or sequence labeling (or combination of both) is Conditional Random Fields (CRF), which provides state-of-art results in such tasks as part-of-speech tagging, named entities recognition and words (not morphemes!) segmentation in languages like Chinese, German and Arabic. Good overview of CRF can be found in Sutton and McCallum 2010. There are numerous tools implementing this model. Here Stanford NLP group's implementation (Finkel et al. 2005) is used as it specializes on natural language processing tasks and needs minimal tuning in terms of data.

Even model with standard for CRF simple features like previous, current, next letter, their combinations and letter position trained on small part of corpus gives accuracy about 80%. Provided with additional features (indication whether current letter starts or ends some morpheme using list of known morphemes) model results with precision 94.64% and recall 94.58%. Performance is estimated on the same automatically extracted data so values are certainly overrated. Small number of resulting model executions on random words were performed manually and in many cases correct results were received.

## 4. Experiments

### 4.1. Data

The dataset used in this research is the SynTagRus dependency treebank. Currently it contains 896656 tokens and 61728 sentences. A good overview of this treebank was given in Nivre et al. 2008, where previous results of it's evaluation with MaltParser were also presented. Due to computational resources limitation, only half of treebank was used, what makes evaluations setting more similar to that previous one.

Randomly selected half of treebank was converted to usual CoNLL format (<http://ilk.uvt.nl/conll/>), split in 70% train, 10% cross-validation and 20% test sets. For morphemic features investigation FORM column was segmented by model from Section 3, and all extracted prefixes, roots, suffixes and inflexions were added to corresponding separate columns.

### 4.2. Evaluation

Parser software used for evaluations is MaltParser (Nivre et al., 2006), which implements number of algorithms and achieved state-of-art performance in fully-supervised dependency parsing on number of languages. Additionally MaltOptimizer (Ballesteros and Nivre, 2012) - tool for MaltParser with functionality of automatic algorithm selection and optimization of algorithm's options and features on given dataset, was also used. Experiments were executed in following order

1. MaltOptimizer was executed on train data to obtain best algorithm with it's options and best features on standard CoNLL columns.
2. Selected in previous step algorithm with default options and features was trained providing baseline.
3. Morphemic features were selected starting from previous step baseline. Only simple input features on up to three previous or next words were examined, without considering features with transition over dependency tree or composition.
4. Model selected by MaltOptimizer in first step was combined with morphemic features.

## 5. Results and conclusions

Model	LAS	UAS
1) MaltOptimizer model	84.02	<b>86.56</b>
2) Baseline	75.11	80.90
3) Baseline + morphemic features	78.00	82.36
4) MaltOptimizer model + morphemic features	<b>84.14</b>	86.56

*Table 1: Resulting Labeled Accuracy Score and Unlabeled Attachment Score of four main evaluations. MaltOptimizer model actually gives best UAS score as number of attachments were lost with morphemic features added*

Algorithm selected by MaltOptimizer was NivreEager without attaching root dependencies during parsing, with Reduce transition, with pseudo-projective transformation on head and path. It gives about 9% LAS and 6% UAS gain over NivreEager baseline.

As shown in table 2 even simple features over imperfect morpheme segmentations were able to improve baseline LAS score for about 3% what may serve as evidence that such features do carry information about relation between words in sentence as expected. Yet minimal difference between enhanced model selected by MaltOptimizer and the same model with morphemic features added shows that this information adds nothing new to other features over standard fields like lemma, part-of-speech tag and their combinations. Additional experiments showed that main part of this gain is attained by the features over roots, i.e. lexical rather than morphological information. Also number of unlabeled attachments (four to be precise) were lost with morphemic features added.

From this results it became clear that presented approach may be applied when no direct grammatical information about words is available.

Further investigation of using lexical information from word parts to improve dependency parsing performance may be an interesting research direction.

Whole source code for presented work can be found at [github.com/versusvoid/know-your-roots](https://github.com/versusvoid/know-your-roots).

## References

- [1] Ballesteros, M. and Nivre, J. (2012). MaltOptimizer: An Optimization Tool for MaltParser. In Proceedings of the Demonstrations at the 13th Conference of the European Chapter of the Association for Computational Linguistics EACL '12 pp. 58–62, Association for Computational Linguistics, Stroudsburg, PA, USA.
- [2] Covington, M. A. (2001). A fundamental algorithm for dependency parsing. In Proceedings of the 39th Annual ACM Southeast Conference pp. 95–102.
- [3] Durrett, G. and DeNero, J. (2013). Supervised Learning of Complete Morphological Paradigms. In HLT-NAACL pp. 1185–1195, The Association for Computational Linguistics.
- [4] Finkel, J. R., Grenager, T. and Manning, C. (2005). Incorporating Non-local Information into Information Extraction Systems by Gibbs Sampling. In Proceedings of the 43rd Annual Meeting on Association for Computational Linguistics ACL '05 pp. 363–370, Association for computational Linguistics, Stroudsburg, PA, USA.
- [5] Kohonen, O., Virpioja, S. and Lagus, K. (2010). Semisupervised Learning of Concatenative Morphology. In Proceedings of the 11th Meeting of the ACL Special Interest Group on Computational Morphology and Phonology SIGMORPHON '10 pp. 78–86, Association for Computational Linguistics, Stroudsburg, PA, USA.
- [6] Luong, M.-T., Socher, R. and Manning, C. D. (2013). Better Word Representations with Recursive Neural Networks for Morphology. In CoNLL, Sofia, Bulgaria.
- [7] Marton, Y., Habash, N. and Rambow, O. (2013). Dependency Parsing of Modern Standard Arabic with Lexical and Inflectional Features. *Comput. Linguist.* 39, 161–194.
- [8] Nivre, J., Boguslavsky, I. M. and Iomdin, L. L. (2008). Parsing the SynTagRus Treebank of Russian. In Proceedings of the 22Nd International Conference on Computational Linguistics - Volume 1 COLING '08 pp. 641–648, Association for Computational Linguistics, Stroudsburg, PA, USA.
- [9] Nivre, J., Hall, J. and Nilsson, J. (2006). Maltparser: A data-driven parser-generator for dependency parsing. In In Proceedings of LREC.
- [10] Sutton, C. and McCallum, A. (2010). An Introduction to Conditional Random Fields. ArXiv e-prints.
- [11] Virpioja, S., Smit, P., Grönroos, S.-A. and Kurimo, M. (2013). Morfessor 2.0: Python implementation and Extensions for Morfessor Baseline. Report 25/2013 in Aalto University publication series SCIENCE + TECHNOLOGY Department of Signal Processing and Acoustics, Aalto University Helsinki, Finland.
- [12] Yang, M., Zheng, J. and Kathol, A. (2007). A semisupervised learning approach for morpheme segmentation for an Arabic dialect.

## ТЕЧЕНИЕ СТОКСА С ВЫСОКИМИ КОНТРАСТАМИ ВЯЗКОСТИ: ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

А.И. Попов  
popov239@gmail.com

### 1. Введение

Задача Стокса для случая высоких контрастов вязкости является серьезной вычислительной проблемой для геомоделирования. На границе двух сред вязкость меняется скачком (иногда – на несколько порядков). Использование стандартных вычислительных алгоритмов приводит к существенным ошибкам в решении на границе и вблизи границы раздела двух сред. Точное решение уравнений Стокса и неразрывности важно при моделировании тектонических процессов, происходящих в мантии Земли. Проблема численной обработки высоких контрастов вязкости и плотности интенсивно изучалась в конце 20 века. Результаты на сегодняшний день таковы: задача Стокса может быть решена достаточно быстро при использовании конечно-разностной дискретизации и мультисеточного метода [5-8]. К сожалению, алгоритм быстро сходится только при постоянной вязкости. Нас же интересует задача Стокса с вязкостью, меняющейся скачкообразно. Результаты моделирования показывают, что вязкость, как правило, меняется скачком лишь на ограниченном наборе участков малого объема. Поэтому здесь можно воспользоваться теорией уравнений в частных производных и аппаратом математической физики, где подобные возмущения хорошо изучены. Первые работы, посвященные локальным возмущениям, возмущениям конечного ранга и т.д. были опубликованы еще в 30-х годах 20 века. Современная теория возмущений основана на формуле Крейна, граничных тройках и т.д. Данные методы позволяют сравнительно легко посчитать резольвенту возмущенного оператора на кривых, поверхностях и фракталах.

В численных методах аналогом формулы Крейна является формула Шермана-Моррисона-Вудбари, позволяющая обратить матрицу возмущенного оператора. Мы предлагаем применить эту формулу к оператору для уравнений Стокса и неразрывности следующим образом: оператор разбиваем на два. Матрицу для первого оператора обратим, используя солвер для постоянной вязкости. Ранг второй матрицы будет пропорционален скачку вязкости. В этом случае нам поможет формула Вудбари, позволяющая получить точное решение для задачи с переменной вязкостью. В работе создан алгоритм для получения численного решения на основе формулы Вудбари. Данный метод хорош своей скоростью ибо в нашем случае скорость расчета не зависит от скачков вязкости.

### 2. Постановка задачи

Течение жидкости в мантии Земли описывается решением уравнения Стокса:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = -\rho g_i. \quad (1)$$

Для вязкой несжимаемой жидкости уравнение Стокса описывает связь между приложенными внешними силами и возникающим в жидкости вязким напряжением. Здесь сила вязкости -- это градиент тензора напряжения  $s$ , приложенные внешние силы -- произведение плотности  $\rho$  и ускорения свободного падения  $\mathbf{g}$ . При отсутствии плавления и фазовых переходов жидкость в геодинамике считается несжимаемой. Чтобы обеспечить несжимаемость, к уже упомянутому уравнению Стокса необходимо добавить уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2)$$

где  $\mathbf{v}$  -- вектор скорости,  $x_i$  -- координата в пространстве. Размер области обозначим за  $\Omega$ ,  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ . Наш метод не имеет ограничений по размерности пространства  $\mathbb{R}^d$ , однако для простоты изложения мы будем рассматривать двумерный случай.

Уравнения для сохранения импульса и массы необходимо дополнить двумя граничными условиями. Разобьем границу  $\Omega$  на две непересекающиеся области:  $\partial\Omega_N$  и  $\partial\Omega_D$ . Тогда граничные условия можно записать в виде:

$$\sum_{j=1}^d \sigma_{ij} n_j = a_i, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_N, \quad i = 1, \dots, d \quad \text{и} \quad (3)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_D. \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{n}$  обозначает внешнюю нормаль к границе  $\Omega$ ,  $\mathbf{a}$  -- приложенное усилие,  $\mathbf{b}$  -- скорость на  $\partial\Omega_D$ .

Теперь опишем механическое поведение материала. Учитывая изотропную вязкую реологию, связь тензора напряжения  $\mathbf{s}$  с тензором скорости деформации  $\mathbf{e}$  дается формулой:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\eta\dot{\varepsilon}_{ij}, \quad (5)$$

где  $\delta$  -- символ Кронекера,  $p$  -- давление,  $\eta$  -- вязкость жидкости. Скорость деформации дается формулой:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (6)$$

Перед тем, как проводить дискретизацию, избавимся от величин, имеющих размерность в вышеприведенных уравнениях. Для этого проведем процедуру динамического масштабирования. Сначала определим набор характерных единиц для данной задачи: характерная длина (например, размер области), характерное время (время деформации), характерная вязкость (к примеру, минимум вязкости в области). Затем поделим величины, присутствующие в уравнениях (масса, напряжение, сила, ...) на соответствующие характерные единицы. Получим набор безразмерных величин, равных 1. Обратное масштабирование, т.е. возврат к размерным единицам, проводить не будем. Следовательно, ошибки для скорости и давления также будут безразмерными величинами.

### 3. Дискретизация

Мы решаем уравнения (1) и (2) относительно переменных  $v_i$  и  $p$ . Эти уравнения можно привести к виду:

$$\sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \eta \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} = -\rho g_i, \quad i = 1, \dots, d. \quad (7)$$

$$\sum_{i=1}^d \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0. \quad (8)$$

Используем конечно-разностную дискретизацию на неколеблущейся сетке:

$$\left\{ \begin{array}{l} h_j^{-1} \nabla_j (\eta (h_j^{-1} \Delta_j v_i + h_i^{-1} \Delta_i v_j)) + \\ \sum_{j \neq i} h_j^{-1} \Delta_j (\eta (h_j^{-1} \nabla_j v_i + h_i^{-1} \nabla_i v_j)) - h_i^{-1} \nabla_i p = -\rho g_i, \\ \sum_{i=1}^d h_i^{-1} \Delta_i v_i = 0, \end{array} \right. \quad (9)$$

где  $h_i$  -- размер ячейки,  $\Delta_i$  и  $\nabla_i$  определены ниже:

$$\begin{aligned}\Delta_j f(x_1, \dots, x_d) &= f(x_1, \dots, x_i + h_i, \dots, x_d) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d), \\ \nabla_j f(x_1, \dots, x_d) &= f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d) - f(x_1, \dots, x_i - h_i, \dots, x_d).\end{aligned}$$

#### 4. Алгоритм Эрроу-Гурвица

Уравнение (9) можно привести к виду:

$$L \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\rho \mathbf{g} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где  $\mathbf{v}$  -- поле скоростей, оператор  $L$  определяется своей матрицей:

$$L = \begin{pmatrix} S & D \\ D^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$S$  и  $D$ , в свою очередь, определены следующими соотношениями:

$$\begin{aligned}(S\mathbf{v})_i &= h_j^{-1} \nabla_j (\eta (h_j^{-1} \Delta_j v_i + h_i^{-1} \Delta_i v_j)) + \\ &\sum_{j \neq i} h_j^{-1} \Delta_j (\eta (h_j^{-1} \nabla_j v_i + h_i^{-1} \nabla_i v_j)),\end{aligned} \quad (12)$$

$$(Dp)_i = h_i^{-1} \nabla_i p, \quad D^* \mathbf{v} = \sum_i h_i^{-1} \nabla_i v_i. \quad (13)$$

Уравнение относится к задаче о поиске седловой точки. Решение уравнения (10) может быть получено методом итераций как предел  $(\mathbf{v}, p)^T$  аппроксимаций  $(\mathbf{v}_k, p_k)$ . Например, с помощью одной из разновидностей алгоритма Эрроу-Гурвица:

$$\mathbf{v} = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{v}^k, \quad p = \lim_{k \rightarrow \infty} p^k, \quad (14)$$

$$\mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{v}^k + \varepsilon (-\rho \mathbf{g} + S\mathbf{v}^k - Dp^k), \quad p^{k+1} = p^k + \omega D^* \mathbf{v}^k. \quad (15)$$

К сожалению, нельзя гарантировать сходимость итерационного метода для произвольной вязкости  $\eta$ , выбрать параметры релаксации  $\varepsilon$ ,  $\omega$  также весьма сложно. Однако, если считать вязкость  $\eta$  постоянной, решение можно получить довольно быстро, используя, к примеру, мультисеточный метод или преобразование Фурье.

#### 5. Формула Вудбари

Аналогом формулы Крейна в дискретном случае является формула Вудбари. Здесь мы будем пользоваться только одним из приложений этой формулы.

Допустим, что  $A$  -- матрица размером  $N \times N$ ,  $U$  и  $V$  -- матрицы  $N \times M$ , где  $M < N$ . С помощью формулы Вудбари для матрицы  $A$ , возмущенной оператором  $UV^T$ , мы можем посчитать обратную. Для этого нам нужно посчитать поправку к обращенной матрице  $A$ :

$$(A + UV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(E + V^T A^{-1}U)^{-1}V^T A^{-1}, \quad (16)$$

где  $E$  -- единичная матрица.  $A^{-1}$  считаем известной. Нам осталось обратить матрицу  $E + V^T A^{-1}U$  размера  $M \times M$ .

Решаем уравнение. Выберем матрицы-столбцы  $\mathbf{u}_k$ ,  $\mathbf{v}_k$ ,  $k = 1, \dots, r$ ,  $r := \text{rank } UV^T$ , так чтобы:

$$UV^T = \sum_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^T.$$

Наша цель -- решить нижеприведенное уравнение для любой правой части  $\mathbf{b}$ :

$$\left( A + \sum_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^T \right) \mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (17)$$

Для этого потребуется сделать несколько шагов:



- Решаем  $r$  вспомогательных задач:

$$A\mathbf{z}_k = \mathbf{u}_k$$

и из полученных решений  $\mathbf{z}_k$  строим матрицу  $Z$ ,  $Z = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_r)$ .

- Обращаем матрицу

$$H = (E + V^T Z)^{-1},$$

где  $E$  -- единичная матрица.

- Решаем еще одну вспомогательную задачу:

$$A\mathbf{y} = \mathbf{b}.$$

- Тогда решение задачи дается следующим соотношением:

$$\mathbf{x} = \mathbf{y} - ZHV^T \mathbf{y}.$$

## 6. Основные достигнутые результаты. Применение формулы Вудбари к системе уравнений Стокса и неразрывности

Рассмотрим оператор  $L = L_0 + L_p$ . Обозначим за  $n$  общее число узлов сетки, за  $r$  -- число узлов, где градиент  $\Delta_j \eta_s$  не равен 0. Ранг оператора  $S_p$  меньше либо равен  $r \cdot d$ , где  $d$  -- размерность пространства. Согласно определению, ранг оператора  $L_p$  совпадает с рангом  $S_p$ . Нам нужно, чтобы  $r$  было меньше  $n$  (общее число ячеек сетки). Пусть  $A = L_0$ ,  $U$  -- единичный оператор,  $V = L_p$ . Тогда можно применить формулу (16) и обратить  $L_0$  одним из итерационных методов, например, мультисеточным методом. Процедура применения формулы такова:

- $r+1$  раз решаем уравнение  $L_0 x = y$ . Сложность операции зависит от метода и может варьироваться от  $O(n^d)$  до  $O(n)$ .
- Обращаем матрицу размера  $r \times r$ . Здесь количество операций будет меньше чем  $O(r^3)$ .

Конечно, при больших  $r$  время вычисления  $H = (E + V^T Z)^{-1}$  и затраченные ресурсы могут быть больше, чем в случае прямого обращения  $S$ . Однако, в обычной ситуации у данного метода есть 2 преимущества:

- Решение будет получено для любого  $\eta_s$ . В отличие от мультисеточного метода, здесь нет необходимости подбирать параметры.
- Сходимость  $S_0$  как правило лучше, чем у  $S_p$ . Следовательно, при малых  $r$  метод, основанный на формуле Вудбари, будет работать быстрее классического мультисеточного метода.

Тесты показывают, что ошибки в вычислении  $L_0^{-1}$  не оказывают критического влияния на точность метода. В большинстве случаев если невязка при вычислении  $L_0$  меньше, чем  $10^{-n}$ , то невязка для итогового решения будет порядка  $10^{-n+1}$ .

## 7. Заключение

Предложенный метод имеет следующие преимущества:

- Метод, основанный на формуле Вудбари, неитерационный. Он позволяет получить решение системы уравнений Стокса и неразрывности за фиксированное время. Таким образом, скорость метода не зависит от контраста вязкости.
- Для малых  $\eta_p$  предложенный метод будет работать быстрее итерационных.

Заметим, что большое число операций в предложенном подходе связано с обращением матрицы оператора  $L_0$  (при постоянной вязкости). Следовательно, если границы области

зафиксированы, обращать матрицу придется только 1 раз. Далее ее можно будет использовать для различных распределений вкраплений высокой вязкости. Более того, для областей с несложной геометрией для поиска  $L_0^{-1}$  можно воспользоваться преобразованием Фурье. Соответствующие собственные функции для  $L_0$  должны быть известны. Собственные функции зависят только от геометрии области и граничных условий. Так что если необходимо исследовать течения Стокса в какой-то конкретной области для различных распределений вкраплений высокой вязкости, нужно искать собственные функции только 1 раз. Затем их можно использовать для всех задач.

Итак, несколько улучшений для описанной техники:

- Если  $\eta_r = 0$ , решение можно получить быстрее, используя преобразование Фурье для обращения  $L_0$ .

- Вариант мультисеточного метода можно использовать для одновременного вычисления  $z_k$ , что уменьшит сложность алгоритма.

## 8. Области возможного применения результатов проекта

В проекте найдено решение системы уравнений Стокса и неразрывности в отсутствие трения в случае сильных контрастов вязкости. Данная задача решена численно, с использованием алгоритма, основанного на формуле Шермана-Моррисона-Вудбари. Численный алгоритм, основанный на формуле Вудбари, позволяет получить решение задачи в случаях, когда вязкость жидкости меняется скачком на порядок (и даже на несколько порядков, максимум -- до 10 порядков). Более того, решение не зависит от контраста вязкости. Данный метод полезен для расчета течений в случае резких контрастов вязкости, что представляет наибольшую трудность для вычислений. Работа алгоритма была протестирована на кластере Brutus (Швейцарский технологический институт г. Цюрих, Швейцария). Результаты тестов приведены на рисунках в приложении. Работа велась совместно с кафедрой геофизики Швейцарского федерального технологического института г. Цюрих (ETH Zurich).

## Список литературы

- [1] Gerya T., Lobanov I. S., Popov A. I., Popov I. Yu., Popov S. I. Practical analytical solutions for benchmarking of 2-D and 3-D geodynamic Stokes problems with variable viscosity. *Solid Earth*. 2014. Vol. 5. P. 461--476.
- [2] Popov A. I., Popov I. Yu., Lobanov I. S., Gerya T. Numerical approach to the Stokes problem with high contrasts in viscosity // *Applied Mathematics and Computation*. - 2014. - Vol. 235. - P. 17-25.
- [3] Gerya T., Lobanov I. S., Popov A. I., Popov I. Yu. Benchmark solutions for nanoflows. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2014. Vol. 5. P. 391--399.
- [4] Popov A. I., Popov I. Yu., Lobanov I. S., Popov S. I., Gerya T. Practical analytical solutions for benchmarking of 2-D and 3-D geodynamic Stokes problems with variable viscosity // *Solid Earth Discussions*. - 2013. - Vol. 5. - P. 2203-2281. - ISSN 1869-9537. - DOI 10.5194/sed-5-2203-2013. - URL: <http://www.solid-earth-discuss.net/5/2203/2013/sed-5-2203-2013.html>.
- [5] T. Gerya, *Introduction to Numerical Geodynamic Modelling*, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [6] A. Ismail-Zadeh, P. Tackley, *Computational Methods for Geodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [7] T. Duretz, D.A. May, T.V. Gerya, P.J. Tackley, Discretization errors and free surface stabilization in the finite difference and marker-in-cell method for applied geodynamics: a numerical study, *Geochem. Geophys. Geosyst.* 12 (2011) Q07004, <http://dx.doi.org/10.1029/2011GC003567>.
- [8] U. Christensen, Phase boundaries in finite amplitude mantle convection, *Geophys. J. R. Astron. Soc.* 68 (1982) 487--497.

## АЛГЕБРА СОБЫТИЙ И ПРИНЦИП ДВОЙСТВЕННОСТИ

Р.С. Садыкова

магистрант ПГУ им. С.Торайгырова, г. Павлодар, Казахстан

Стажер кафедры высшей математики Университета ИТМО, С.-Петербург, Россия

Научный руководитель - Дроботун Б.Н., д.п.н., профессор ПГУ им. С.Торайгырова

Проанализирован принцип двойственности для булевой алгебры событий.

**Ключевые слова:** алгебра событий, вероятность

1. Под вероятностным пространством [1, 144 с] в теории вероятностей понимается упорядоченная тройка  $\langle \Omega; \mathcal{B}; P \rangle$ , где  $\Omega$  - пространство элементарных исходов;  $\mathcal{B}$  -  $\sigma$ -алгебра событий;  $P$  - вероятностная мера на  $\mathcal{B}$ . При этом:

- под  $\sigma$ -алгеброй  $\mathcal{B}$  понимается семейство подмножеств множества  $\Omega$ , обладающее следующими свойствами:

1) для любого подмножества  $A \in \mathcal{B}$  его дополнение  $\bar{A} = \Omega \setminus A$ , также принадлежит  $\mathcal{B}$ ;

2) если  $\{A_n/n \in N\}$  - счетная совокупность подмножеств из  $\mathcal{B}$ , то  $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{B}$  и  $\bigcap_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{B}$ .

Другими словами  $\sigma$  - алгебра  $\mathcal{B}$  есть семейство подмножеств множества  $\Omega$ , замкнутая относительно взятия дополнений и счетных объединений и пересечений (подмножеств из  $\mathcal{B}$ );

- вероятностной мерой  $P$  на  $\sigma$  - алгебре  $\mathcal{B}$  называется функция, посредством которой каждому подмножеству  $A \in \mathcal{B}$  ставится в соответствие некоторое число  $P(A)$  такое, что:

1)  $P(A) \geq 0$ ;

2)  $P(\Omega) = 1$ ;

3) если  $\{A_n/n \in N\}$  - счетная совокупность попарно непересекающихся подмножеств из  $\mathcal{B}$ , то  $P(\sum_{i=1}^{\infty} (A_i)) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$ ;

- событиями вероятностного пространства считаются подмножества множества  $\Omega$ , принадлежащие  $\mathcal{B}$ .

Таким образом, событиями считаются не все подмножества множества  $\Omega$ , а лишь только те, которые принадлежат некоторой  $\sigma$  - алгебре.

В случае, когда пространство элементарных событий  $\Omega$  конечно, множество  $\mathcal{B}(\Omega)$  всех подмножеств множества  $\Omega$  будет, как нетрудно видеть,  $\sigma$  - алгеброй.

В соответствии с этим, далее будут рассматриваться вероятностные пространства вида  $\langle \Omega_S; \mathcal{B}(\Omega_S); P \rangle$  где  $\Omega_S$  - пространство элементарных исходов опыта  $S$ , охватываемого классической схемой теории вероятностей, а вероятностная мера  $P$  определяется по правилу:

$$(\forall \omega \in \Omega_S)(P(\omega) = 1/n),$$

где  $n = |\Omega_S|$  - число исходов опыта  $S$ .

2. Будем говорить, что опыт  $S$  охватывается классической схемой (или осуществляется по классической схеме), если из совокупности  $S^*$  можно выделить такую конечную подсовокупность  $\Omega_S$  событий, которая удовлетворяет следующим условиям:

а)  $\Omega_S$  - образует полную группу попарно несовместных и попарно равновероятных событий;

б) для любого события  $A \in S^*$ , по появившемся (в результате проведения опыта  $S$ ) событию  $\omega$  из  $\Omega_S$ , можно достоверно судить о том, произошло событие  $A$  или нет.

Подмножество  $\Omega_S$  называется пространством элементарных событий.

В дальнейшем будем предполагать, что все опыты  $S$  осуществляются по классической схеме.

На множестве  $S^*$  определяются (по хорошо известным правилам) теоретико-вероятностные операции:  $+$ ;  $\cdot$ ; и  $\bar{\phantom{x}}$  - сложения, умножения и взятие противоположного события, соответственно. Меньше внимания в учебной литературе уделяется бинарным отношениям  $\rightarrow$  - следования и  $\equiv$  - равносильности событий, которые вводятся на  $S^*$  следующим образом. Пусть  $A; B \in S^*$ .

а) Событие  $B$  называется следствием события  $A$  (символически  $A \rightarrow B$ ), если появление события  $A$  в результате проведения опыта  $S$  влечет за собой появление события  $B$ ;

б) События  $A$  и  $B$  называются равносильными (символически  $A \equiv B$ ), если событие  $B$  является следствием события  $A$  и событие  $A$  является следствием события  $B$ .

Нетрудно видеть, что отношения  $\rightarrow$  и  $\equiv$  удовлетворяют следующим свойствам:

- |  |   |
|--|---|
| 1) $A \rightarrow A$ ;   | 5) $A \rightarrow \Omega$ ;                             |
| 2) Если $A \rightarrow B$ и $B \rightarrow C$ , то $A \rightarrow C$ ; | 6) $A \equiv A$ ;                                       |
| 3) Если $A \rightarrow B$ и $B \rightarrow A$ , то $A \equiv B$ ;      | 7) Если $A \equiv B$ и $B \equiv C$ , то $A \equiv C$ ; |
| 4) $\emptyset \rightarrow A$ ;   | 8) Если $A \equiv B$ , то $B \equiv A$ ,                |

для любых  $A; B; C \in S^*$ .

Отметим, что свойства 1) - 2) показывают, что отношение  $\rightarrow$  - следования является отношением квазиупорядка на множестве  $S^*$ . При этом, в соответствии со свойствами 4) и 5), события  $\emptyset$  и  $\Omega$  являются минимальным и максимальным элементами квазиупорядоченного множества  $\langle S^*; \rightarrow \rangle$ . Аналогичным образом, в соответствии со свойствами 6) - 8), отношение  $\equiv$  - равносильности является отношением эквивалентности.

Условие б) определения пространства элементарных событий  $\Omega_S$  позволяет для каждого события  $A \in S^*$  выделить подмножество  $\Omega_S(A)$  множества  $\Omega_S$ , включающее в себя те и только те элементарные события, следствием которых является событие  $A$ , т.е.  $\Omega_S(A) = \{\omega / (\omega \in \Omega_S) \& (\omega \rightarrow A)\}$ .

Замкнутость множества  $S^*$  относительно теоретико-вероятностных операций позволяет ввести в рассмотрение алгебру

$$\mathbf{S}^* = \langle S^*; +; \cdot; \bar{\phantom{x}}; \emptyset; \Omega \rangle \quad (1)$$

которая называется алгеброй событий. Нетрудно видеть, что отношение  $\equiv$  - равносильности является (как бинарное отношение эквивалентности на  $S^*$ ) стабильным относительно основных операций алгебры (1), т.е. является отношением конгруэнтности. Это дает возможность построить фактор-алгебру

$$(\mathbf{S}^*/\equiv) = \{[A]_{\equiv} / A \in S^*\}; +; \cdot; \bar{\phantom{x}}; [\emptyset]_{\equiv}; [\Omega] \quad (2)$$

Алгебру (2) можно считать алгеброй событий «в чистом виде» в том смысле, что равносильные, т.е. не равные (в общем случае) события в этой алгебре отождествляются и каждая совокупность всех попарно равносильных событий представляет один элемент.

**3.** Обозначим через  $B(\Omega_S)$  множество всех подмножеств множества  $\Omega_S$ . Множество  $B(\Omega_S)$  замкнуто относительно бинарных теоретико-множественных операций  $\cup$  - объединения,  $\cap$  - пересечения и  $\setminus$  - разности множеств. Полагая  $\bar{X} = \Omega_S \setminus X$ , для любого  $X \in B(\Omega_S)$ , получаем, что  $X \setminus Y = X \cap \bar{Y}$  для любого  $Y \in \Omega_S$ .

Множество  $B(\Omega_S)$  относительно операций  $\cup$ ;  $\cap$ ; и  $\bar{\phantom{x}}$  представляет собой булеву алгебру

$$\mathbf{B}(\Omega_S) = \langle B(\Omega_S); \cup; \cap; \bar{\phantom{x}}; \emptyset; \Omega_S \rangle,$$

при этом подмножества  $\emptyset$  и  $\Omega_S$  являются, соответственно, нулем и единицей этой алгебры.

Определим теперь отображение  $\varphi: S^* \rightarrow B(\Omega_S)$  по следующему правилу:

$$(\forall A \in S^*)(\varphi(A) = \Omega_S(A)).$$

Нетрудно проверить, что отображение  $\varphi$  является сюръективным и удовлетворяет условиям:

- |  |                                       |
|--|---------------------------------------|
| 1) $\varphi(A + B) = \varphi(A) \cup \varphi(B)$ ;     | 4) $\varphi(\emptyset) = \emptyset$ ; |
| 2) $\varphi(A \cdot B) = \varphi(A) \cap \varphi(B)$ ; | 5) $\varphi(\Omega) = \Omega_S$ .     |

$$3) \varphi(\bar{A}) = \Omega_S \setminus \Omega_S(A);$$

Т.к. отображение  $\varphi$ , являясь отображением носителя  $S^*$  алгебры  $S^*$  на носитель  $B(\Omega_S)$  алгебры  $B(\Omega_S)$ , «сохраняет», согласно равенствам 1) - 5), их основные операции, то это отображение является гомоморфным отображением первой из этих алгебр на вторую. Отсюда, на основании 1-ой теоремы о гомоморфизмах алгебр [2,121с], получаем, что фактор-алгебра  $S^*/\equiv$  изоморфна алгебре  $B(\Omega_S)$ . Таким образом, имеет место следующее утверждение.

**Предложение 1.** Если  $S$  – опыт, охватываемый классической схемой, то

$$(S^*/\equiv) \cong B(\Omega_S).$$

Наличие этого изоморфизма говорит о том, что фактор-алгебра  $S^*/\equiv$  является булевой алгеброй.

**4.** Представляет интерес непосредственная проверка того, что аксиомы, определяющие класс булевых алгебр [2, 190с], выполняются на фактор-алгебре  $S^*/\equiv$ .

Эти аксиомы трансформируются в следующие соотношения алгебры  $S^*/\equiv$ :

$$\begin{array}{ll} 1) [x + y]_{\equiv} = [y + x]_{\equiv}; & 4) [\overline{x + y}]_{\equiv} = [\bar{x} \cdot \bar{y}]_{\equiv}; \\ 2) [(x + y) + z]_{\equiv} = [x + (y + z)]_{\equiv}; & 5) [(x \cdot \bar{x}) + y]_{\equiv} = [y]_{\equiv}; \\ 3) [(x + y) \cdot z]_{\equiv} = [x \cdot z + y \cdot z]_{\equiv}; & 6) [x + x]_{\equiv} = [x]_{\equiv}; \\ 7) [\overline{(\bar{x})}]_{\equiv} = [x]_{\equiv}; & 8) [x + \bar{x}]_{\equiv} = [\emptyset]_{\equiv}; & 9) [x \cdot \bar{x}]_{\equiv} = [\Omega_S]_{\equiv}, \end{array}$$

в которых  $x; y; z$  – произвольные события из  $S^*$ .

Для непосредственного доказательства того, что алгебра  $S^*/\equiv$  является булевой нужно доказать, что соотношения 1) – 9) являются тождествами на этой алгебре.

С учетом того, что бинарное отношение « $\equiv$ » – равносильности является отношением конгруэнтности на алгебре  $S^*$ , для этого достаточно показать, что на  $S^*$  имеют место равносильности, соответствующие соотношениям 1) – 9), т.е. равносильности:

$$\begin{array}{ll} 1') x + y \equiv y + x; & 4') \overline{x + y} \equiv \bar{x} \cdot \bar{y}; \\ 2') (x + y) + z \equiv x + (y + z); & 5') (x \cdot \bar{x}) + y \equiv y; \\ 3') (x + y) \cdot z \equiv x \cdot z + y \cdot z; & 6') x + x = x; \\ 7') \overline{(\bar{x})} \equiv x; & 8') x + \bar{x} \equiv \emptyset; & 9') x \cdot \bar{x} \equiv \Omega_S. \end{array}$$

Покажем, для примера, что равносильность 4') имеет место, т.е. преаологается, что событие, стоящее в одной из частей этой равносильности, произошло, убедимся в том, что и событие, стоящее в другой его части также должно произойти.

Действительно, пусть событие  $\overline{x + y}$  произошло. Это означает, что событие  $x + y$  не произошло. Следовательно, не произошло событие  $x$  и не произошло событие  $y$ , т.е. события  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  произошли одновременно. Но это и означает, что событие  $\bar{x} \cdot \bar{y}$  произошло. Заметим, что в этой цепочке рассуждений использовались только определения операций над событиями. Аналогичным образом получаем доказательство равносильности 4') и в обратную сторону.

Представляет также интерес прямая проверка того, что вероятности событий, стоящих в левой и правой частях равносильностей 1') - 9'), совпадают. Прделаем это для той же равносильности 4'). В процессе этой проверки будет использоваться следующее утверждение.

**Лемма 1.** Пусть  $S$  - опыт, охватываемый классической схемой. Если  $A; B \in S^*$ , то:

$$а) P(A/\bar{B}) + P(\bar{A}/\bar{B}) = 1;$$

$$б) P(A/\bar{B}) = \frac{P(A) - P(B) \cdot P(A/B)}{P(\bar{B})}.$$

**Доказательство.** Равенство а) достаточно очевидно.

Доказывая соотношение б), будем исходить из равносильности  $A \equiv A \cdot B + A \cdot \bar{B}$ .

Таким образом:

$$\begin{aligned} P(A) &= P(A \cdot B + A \cdot \bar{B}) = P(A \cdot B) + P(A \cdot \bar{B}) - P(A \cdot B \cdot A \cdot \bar{B}) = \\ &= P(A \cdot B) + P(A \cdot \bar{B}) = P(B) \cdot P(A/B) + P(\bar{B}) \cdot P(A/\bar{B}). \end{aligned} \quad (3)$$

Из цепочки равенств (3) получаем равенство

$$P(\bar{B}) \cdot P(A/\bar{B}) = P(A) - P(B) \cdot P(A/B),$$

из которого и следует утверждение б).

Перейдем теперь к доказательству равенства вероятностей событий, стоящих в левой и правой частях равносильности 4'), при  $x = A$  и  $y = B$ ,  $A; B \in S^*$ :

$$P(\overline{A+B}) = 1 - P(A+B) = 1 - (P(A) + P(B) - P(A \cdot B)) = 1 - P(A) - P(B) + P(A \cdot B) \quad (4)$$

$$\begin{aligned} P(\overline{A} \cdot \overline{B}) &= P(\overline{B}) \cdot P(\overline{A} \cdot \overline{B}) \stackrel{\textcircled{1}}{=} P(\overline{B}) \cdot (1 - P(A/\overline{B})) \stackrel{\textcircled{2}}{=} \\ &\stackrel{\textcircled{2}}{=} P(\overline{B}) \cdot \left(1 - \frac{P(A) - P(B) \cdot P(A/B)}{P(\overline{B})}\right) = P(\overline{B}) \cdot \left(\frac{P(\overline{B}) - P(A) + P(B) \cdot P(A/B)}{P(\overline{B})}\right) = \\ &= P(\overline{B}) - P(A) + P(B) \cdot P(A/B) = 1 - P(B) - P(A) + P(B) \cdot P(A/B). \end{aligned} \quad (5)$$

Отметим, что в цепочке равенств (5) переход  $\textcircled{1}$  осуществлен на основании равенства  $P(\overline{A}/\overline{B}) = 1 - P(A/\overline{B})$ , получаемого из утверждения а) леммы 1, а переход  $\textcircled{2}$  осуществлен в этой цепочке равенств на основании утверждения б) той же леммы.

Так как правые части цепочек равенств (4) и (5) совпадают, то совпадают и левые их части, т.е.

$$P(\overline{A+B}) = P(\overline{A} \cdot \overline{B}).$$

Аналогичным образом проводится прямая проверка и для равносильностей 1) – 3) и 5) – 9).

**5.** Согласно предложению 1, алгебру  $\mathcal{S}$  «с точностью до отношения  $\equiv$  - равносильности» можно рассматривать, как булеву алгебру. Рассмотрим теоретико-вероятностную специфику проявления принципа двойственности [3,82с] применительно к этой булевой алгебре и выявим возможности использования этого принципа в прикладном аспекте.

Известная теорема сложения вероятностей:

$P(A+B) = P(A) + P(B) - P(A \cdot B)$ , позволяющая выражать вероятность события  $A+B$  через вероятности событий  $A; B$  и  $A \cdot B$ , в случае даже трех слагаемых выглядит достаточно громоздко:

$$P(A+B+C) = P(A) + P(B) + P(C) - P(A \cdot B) - P(A \cdot C) - P(B \cdot C) + P(A \cdot B \cdot C).$$

В случае же  $n$  ( $n > 3$ ) слагаемых [4, 331с]:

$$P(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = \sum_{1 \leq i \leq n} P(A_i) - \sum_{1 \leq i < j \leq n} P(A_i \cdot A_j) + \dots + (-1)^{t-1} \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_t \leq n} P(A_{i_1} \cdot A_{i_2} \cdot \dots \cdot A_{i_t}) + \dots + (-1)^{n-1} P(A_1 \cdot A_2 \cdot \dots \cdot A_n),$$

эта теорема становится практически неприменимой.

В связи с этим, при нахождении вероятности события  $A_1 + A_2 + \dots + A_n$  значительно проще перейти к противоположному событию  $\overline{A_1 + A_2 + \dots + A_n}$  и воспользоваться соотношением

$$P(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = 1 - P(\overline{A_1 + A_2 + \dots + A_n}). \quad (6)$$

С использованием обобщенных законов де Моргана, имеющих место в любой булевой алгебре, от события  $\overline{A_1 + A_2 + \dots + A_n}$  равносильным образом можно перейти к событию  $\overline{A_1} \cdot \overline{A_2} \cdot \dots \cdot \overline{A_n}$ , т.е. соотношение (6) может быть записано в следующей форме:

$$P(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = 1 - P(\overline{A_1} \cdot \overline{A_2} \cdot \dots \cdot \overline{A_n}). \quad (7)$$

Если события  $A_1; A_2; \dots; A_n$  - независимы, то равенство (7) примет вид:

$$P(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = 1 - P(\overline{A_1}) \cdot P(\overline{A_2}) \cdot \dots \cdot P(\overline{A_n}) \quad (8)$$

Если же вероятности этих независимых событий равны, т.е.

$$P(A_1) = P(A_2) = \dots = P(A_n) = p,$$

то равенство (8) преобразуется к виду:

$$P(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = 1 - (1 - p)^n.$$

Покажем, что возможность осуществления переходов (6) – (8) обусловлена двойственным характером вероятностных закономерностей, свойственных массовым однородным системам случайных событий.

Наиболее полное абстрактное отражение двойственности этих вероятностных характеристик находит в принципе двойственности для булевой алгебры событий, т.е. для алгебры  $\mathcal{S}^*$ .

Если через  $\mathbf{S}_d^*$  обозначить булеву алгебру, дуальную к алгебре  $\mathbf{S}^*$ , [2, 193с], то указанные переходы осуществляются посредством изоморфизма  $\varphi: \mathbf{S}^* \rightarrow \mathbf{S}_d^*$ , который определяется по правилу:

$$(\forall A \in \mathbf{S}^*)(\varphi(A) = \bar{A}).$$

Рассматривая булевы алгебры  $\mathbf{S}^*$  и  $\mathbf{S}_d^*$  с теоретико-вероятностной точки зрения, можно отметить, что «событийно-вероятностный мир» алгебры  $\mathbf{S}^*$  диаметрально противоположен «событийно-вероятностному миру» алгебры  $\mathbf{S}_d^*$ : если в первом мире происходит событие  $A$ , то во втором мире происходит событие  $\bar{A}$ ; если в первом мире достоверным является событие  $\Omega_S$ , то во втором мире – событие  $\emptyset$  и наоборот; если в первом мире вероятность события  $A$  равна  $P(A)$ , то во втором вероятностность события  $\bar{A}$  равна  $1 - P(A)$  и т.п.

Заметим, что отображение  $\varphi$ , как изоморфизм алгебры  $\mathbf{S}^*$  на алгебру  $\mathbf{S}_d^*$ , «сохраняет» операции, т.е., в частности,

$$\varphi(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = \varphi(A_1) \cdot \varphi(A_2) \cdot \dots \cdot \varphi(A_n) = \bar{A}_1 \cdot \bar{A}_2 \cdot \dots \cdot \bar{A}_n,$$

так как при изоморфизме  $\varphi$  операцией, соответствующей операции  $+$  алгебры  $\mathbf{S}^*$ , является операция  $\cdot$  алгебры  $\mathbf{S}_d^*$ . Другими словами, события  $A_1 + A_2 + \dots + A_n$  и  $\bar{A}_1 \cdot \bar{A}_2 \cdot \dots \cdot \bar{A}_n$ , как формулы алгебры событий являются двойственными с точностью до отображения  $\varphi$ .

В связи с вышеизложенным, следует отметить, что равенство

$P(A_1 + A_2 + \dots + A_n) = 1 - P(\bar{A}_1) \cdot P(\bar{A}_2) \cdot \dots \cdot P(\bar{A}_n)$  и ему подобные соотношения являются конкретными примерами непосредственного проявления закона двойственности для булевой алгебры событий.

### Список литературы

- [1] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Том 2.- М.: Мир, 1967.
- [2] Гончаров С.С., Дроботун Б.Н., Никитин А.А. Методические аспекты изучения алгебраических систем в высшем учебном заведении. Новосибирск: НГУ, 2007.
- [3] Дроботун Б.Н., Садыкова Р.С. Принцип двойственности в булевых алгебрах. Вестник ПГУ. Серия физико-математическая, №1 – Павлодар, 2013. – стр. 79 – 89.
- [4] Гончаров С.С., Дроботун Б.Н., Никитин А.А. Алгебраические и алгоритмические свойства логических исчислений. Часть II. Моногр.- Новосибирск: изд-во НГУ, 2008. – 376с.

## МОДЕЛЬ АВТОМАТИЧЕСКОЙ КЛАССИФИКАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА ATLAS

Р.В. Трусов

В данной работе приводятся методы и результаты исследования набора данных об экспериментах, предложенного исследователями CERN на открытом конкурсе Higgs Boson Challenge. Показано, как инструменты машинного обучения позволяют искать новые частицы, а также проведен сравнительный анализ значимости показаний датчиков в такой классификации. Модель, выделяющая области пространства наблюдений, представляющий наибольший интерес, попала в 10% лучших среди тысяч представленных на конкурсе.

**Ключевые слова:** машинное обучение, классификация наблюдений, статистика.

### 1. Введение

В эксперименте ATLAS производятся столкновения пучков протонов с регистрацией столкновений отдельных частиц в виде набора показаний датчиков. Объем генерируемой информации исчисляется петабайтами в год. Задача автоматической классификации наблюдений, которые не объясняются существующими законами, позволяет существенно сузить область поиска новых элементарных частиц.

С появлением установок, способных производить сотни миллионов столкновений частиц в секунду, появилась потребность в автоматизированной обработке получаемых данных, в частности – в определении, представляет ли отдельное наблюдение научный интерес. Проведение большого количества экспериментов с участием экспертов позволило сформулировать эту задачу в более простой форме с использованием симуляции, основанной на человеческой экспертной оценке большого числа наблюдений в прошлом.

Задачи, которые ставятся в этой работе:

1. Построить модель, классифицирующую вектор, описывающий столкновение частицы как новый (далее – «сигнал») и известный (далее – «фон»).
2. Показать сравнительный информационный вклад различных переменных в описании столкновения.

### 2. Описание данных

Данные представляют собой два набора векторов, разделенные на тренировочную и тестовую выборку. Тренировочная выборка содержит векторы в пространстве  $R^{30}$ , где  $R$  – множество вещественных чисел, соответствующие им метки  $\{s, b\}$ , означающие «сигнал» и «фон» соответственно, а также веса наблюдений. Тестовая выборка не содержит весов и меток и используется внутренней системой проверки решений, предоставленной CERN.

### 3. Формальное описание проблемы

Данная проблема относится к классу широко встречающихся задач многомерной бинарной классификации:  $R^m \rightarrow \{-1, 1\}$ , или, в нашем случае,  $\{s, b\}$ .

Пусть  $D = \{(x_1, y_1, w_1), \dots, (x_n, y_n, w_n)\}$  – тренировочное множество, где  $x_i \in R^m$ ,  $y_i \in R$ ,  $w_i \in R$  – неотрицательный вес наблюдения. Зададим множества индексов  $S = \{i: y_i = s\}$ ,  $B = \{i: y_i = b\}$  сигналов и фоновых событий в тренировочной выборке соответственно.



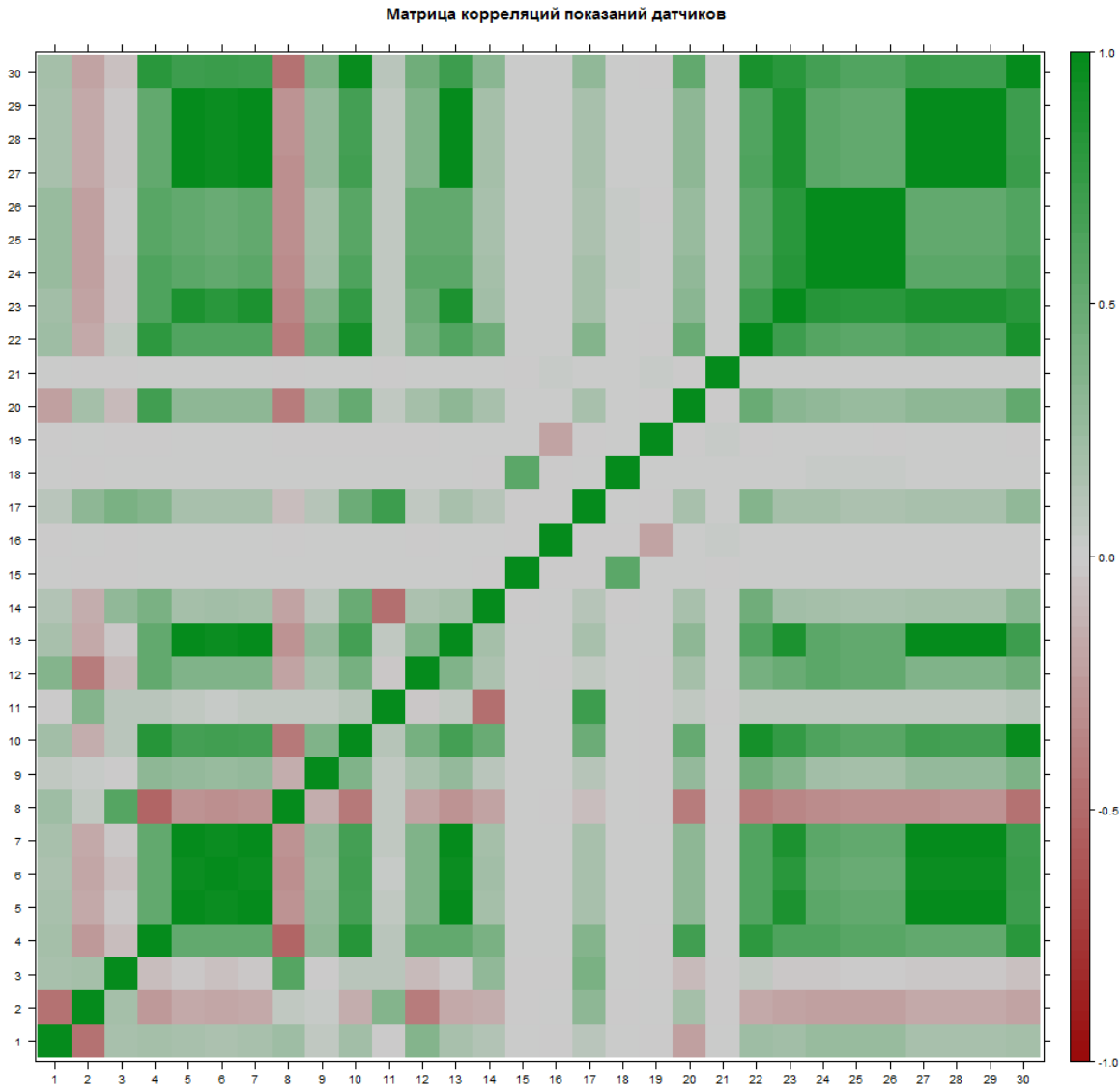
Определим класс функций оценки решения  $F: (Y_{pr}, Y_l, W) \rightarrow R$ , где  $Y_{pr}$  – прогнозы классификатора  $H: R^m \rightarrow \{s, b\}$  для некоторой тестовой выборки  $S, Y_l$  – набор меток для  $S, W$  – набор неотрицательных весов для  $S$ .

Построение классификатора – скорее инженерная задача, поскольку решения описанной выше задачи в общем виде не существует. Обычным подходом здесь является поиск оптимальных параметров  $\{q_j\}$  алгоритма  $A(q_j, F): D \rightarrow G$ , который порождает классификатор, являющийся оптимальным в смысле предоставленной ему функции оценки.

#### 4. Методы и инструменты

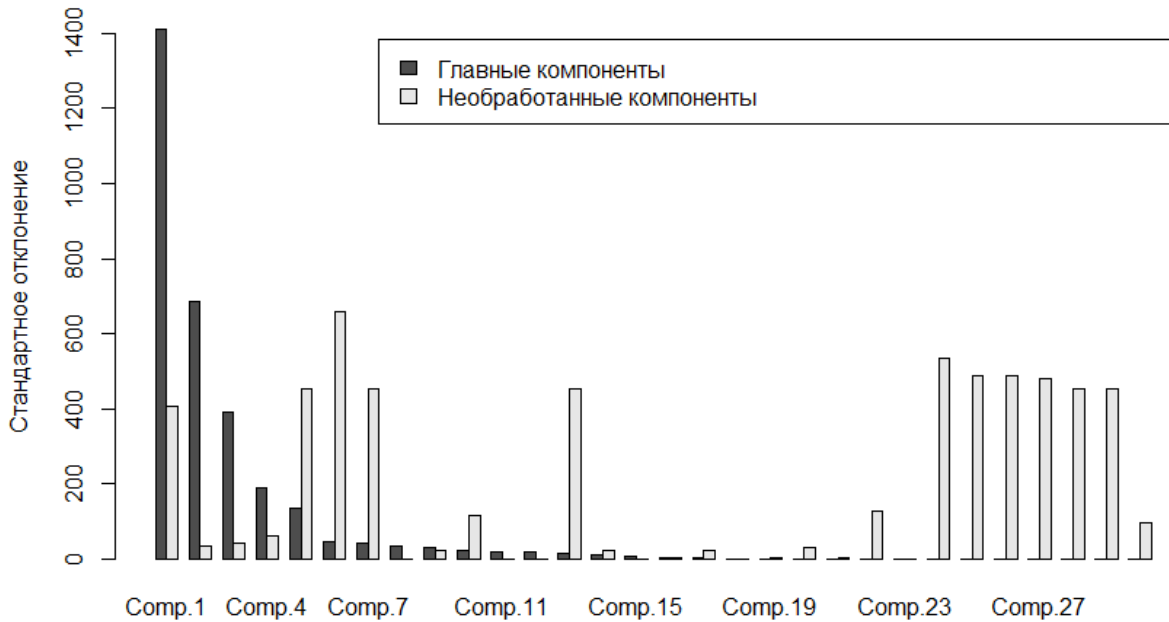
Для выбора алгоритма машинного обучения очень важно иметь хотя бы приблизительное представление о том, насколько сильно переменные зависят друг от друга. При полностью независимых переменных вполне допустимо применять Naïve Bayes Classifier, который выигрывает по вычислительной сложности у любого из современных алгоритмов.

Рассмотрим корреляционную матрицу для переменных, входящих в тренировочное множество:



Большое количество слабо коррелирующих переменных, тем не менее, не дает оснований полагать, что закономерность, стоящая за этими данными, имеет хотя бы линейный характер. В таких случаях бывает полезно обратиться к проекционным методам для проверки:

**Стандартные отклонения при трансформации методом главных компонент**



В качестве алгоритма для порождения классификатора был выбран Gradient Boosting Machine (GBM) и его реализация в библиотеке scikit-learn на Python. Данный метод принадлежит к классу «ансамблей» классификаторов, поскольку итеративно комбинирует более простые модели в одну.

Используя тренировочный набор данных  $D = \{(x_i, y_i)\}$  векторов  $x_i$  и соответствующих им меток  $y_i$ , GBM ищет такую аппроксимирующую функцию  $F(x)$  для неизвестной функции  $F^*(x)$ , которая минимизирует значение функции ошибки.  $L(y, F(x))$ :

$$F^* = \arg \min M[L(y, F(x))],$$

где  $M[L(y, F(x))]$  – математическое ожидание функции ошибки по всем  $x, y$ .

В реализации, используемой здесь, алгоритм выглядит следующим образом:

На каждой итерации  $i$  обновляется распределение весов  $D_i$ , которое соответствует вкладу каждого объекта обучающей выборки. Инициализация в нашем случае происходит явным заданием весов, которые включены в выборку.

На каждом шаге алгоритма  $t = 1, \dots, T$ :

1. Находим базовый классификатор  $h_t: X \rightarrow \{-1, 1\}$ , который минимизирует взвешенную ошибку классификации.  $h_t = \arg \min E_j, E_j = \sum_{i=1}^M D_t(i)(y_i \neq h_j(x))$  с минимизацией по  $h_j$ . Условием останова является  $E_j \geq 0.5$ .
2. Вычисляем коэффициенты  $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{1-E_j}{E_j}\right)$
3. Обновляем веса  $D_{t+1}(i) = \frac{D_t(i)e^{-\alpha_t y_i h_t(x_i)}}{Z_t}$ , где  $Z_t$  – нормализующий параметр, такой, что  $\sum_{i=1}^M D_{t+1}(i) = 1$  ( $D_{t+1}$  должно являться распределением вероятностей).

Результирующий классификатор:

$$H(x) = \text{sign}\left(\sum_{t=1}^T \alpha_t h_t(x)\right)$$

В качестве базовых классификаторов  $h_t$  используются деревья принятия решений, максимизирующие уменьшение энтропии. Гиперпараметрами для GBM в случае являются число базовых классификаторов  $T$  и регуляризационные параметры базовых классификаторов.

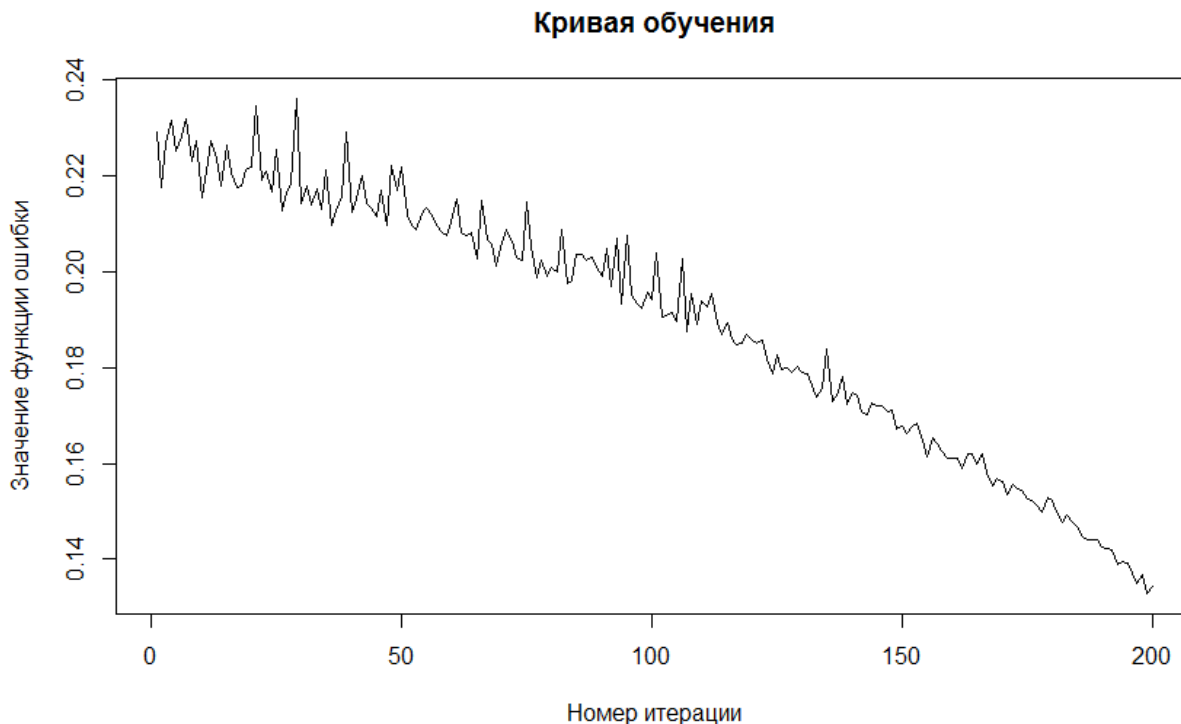
Рассмотрев график главных компонент, можно сделать вывод о том, что основной вклад вносят 5-6 переменных, что является разумным ограничением на глубину дерева и с чисто инженерной точки зрения.

## 5. Метод оптимизации гиперпараметров

Для поиска наилучшей конфигурации следует определить границы возможного изменения для каждого параметра. Подготовка к этому процессу выглядит следующим образом:

1. Перемешать тренировочную выборку
2. Выбрать 20% данных – эти данные не будут использоваться для обучения модели, назовем их валидационной выборкой и будем использовать для контроля переобучения.

Учитывая регуляризационное ограничение на деревья решений, их общее число не может быть слишком большим – единственным негативным эффектом ошибки в выборе числа деревьев будет возрастающее время работы алгоритма. Срабатывает эмпирическое правило  $T = d \times M$ , где  $d$  – глубина дерева,  $M$  – общее число переменных:

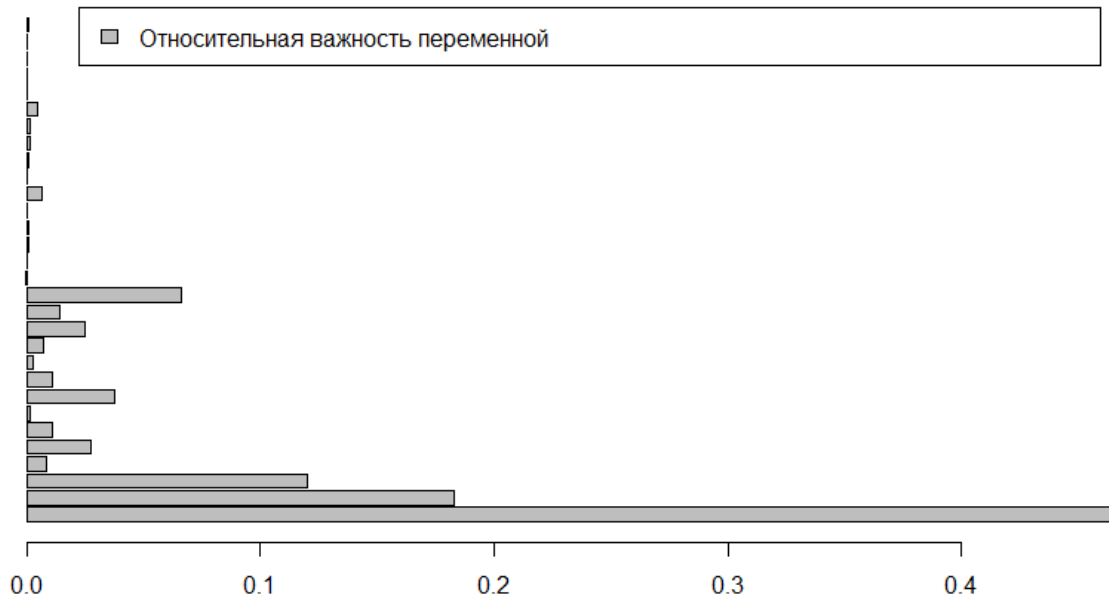


На графике выше видно, как ведет себя функция ошибки в ходе обучения ансамбля из 200 деревьев.

Среднеквадратичная ошибка, равна 0.14 в задаче бинарной классификации вполне допустима в качестве итогового результата, поскольку порогом активации является функция

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0.5 \\ 0, & x < 0.5 \end{cases}$$

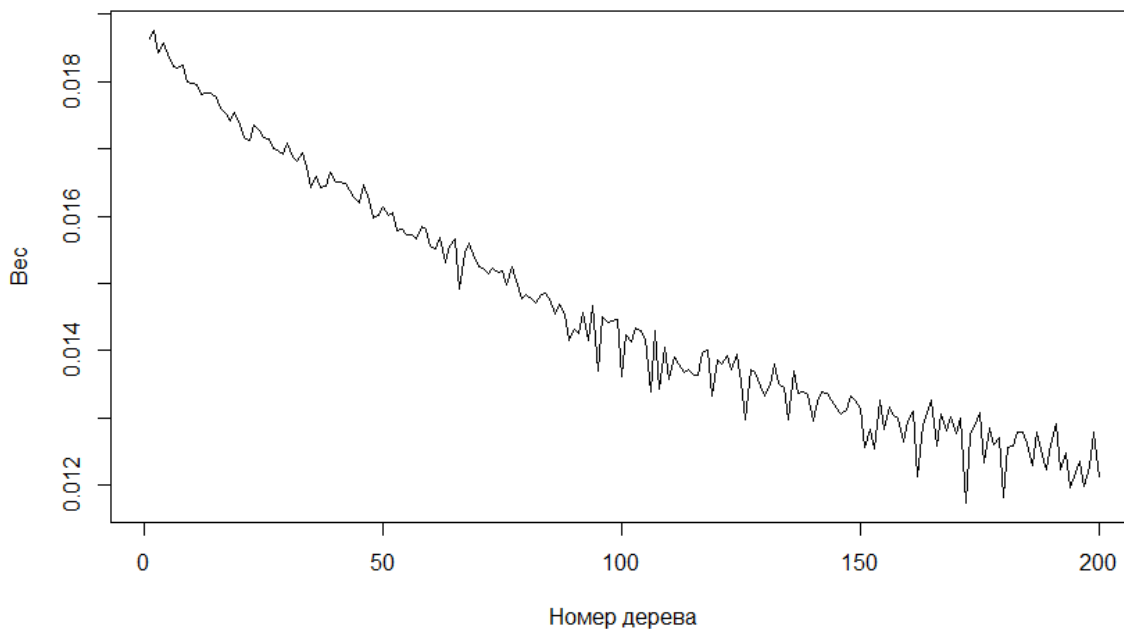
Проверим, насколько верны выводы о количестве значимых переменных:



Относительно большой вклад среди переменных вносят не более шести переменных, как и было предсказано проекционным методом в начале исследования.

Вызывает некоторые сомнения утверждение, что в дальнейшем процесс обучения действительно не покажет каких-то резко контрастирующих результатов. Посмотрим, как изменяется вес вклада каждого дерева в общее решение в зависимости от порядка его появления:

### Вес каждого дерева в конечном решении



Обратите внимание, насколько нестабильной становится ломаная после 50 дерева, по сравнению с начальным состоянием.

## 6. Результаты

Решение, построенное в конечном итоге, состояло из 400 деревьев (поскольку протестированная модель была обучена на полном множестве тренировочных данных). Остальные гиперпараметры не претерпели никаких изменений. Код на языке R, реализующий модель, может быть использован двумя способами:

- 1) Автоматическая классификация результатов эксперимента, фильтрация «интересных» случаев.
- 2) Теоретическая интерпретация распределения важности переменных с использованием описания, приведенного в статье [5].

## Список литературы

- [1] Friedman, J. H. Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine. IMS 1999 Reitz Lecture, Stanford, 39 стр, <http://statweb.stanford.edu/~jhf/ftp/trebst.pdf>
- [2] Friedman, J. H. Stochastic Gradient Boosting. Computational Statistics and Data Analysis, 1999, 10 стр, <http://statweb.stanford.edu/~jhf/ftp/stobst.pdf>
- [3] C.M.Bishop. Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2007, 738 стр
- [4] <http://www.kaggle.com/c/higgs-boson>
- [5] C. Adam-Bourdarios, G. Cowan, C. Germain, I. Guyon, B. Kegl, D. Rousseau “Learning to discover: the Higgs boson machine learning challenge”, 2014, 16 стр [https://higgsm1.lal.in2p3.fr/files/2014/04/documentation\\_v1.8.pdf](https://higgsm1.lal.in2p3.fr/files/2014/04/documentation_v1.8.pdf)

## ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВНОЙ ЭВОЛЮЦИИ ВАКУУМНОГО СОСТОЯНИЯ В ДИНАМИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ КАЗИМИРА ПРИ НЕПРЯМОМ ПРОТОКОЛЕ ФОТОДЕТЕКТИРОВАНИЯ

**В.О. Шереметьев**

В настоящей работе проводится аналитическое и численное исследование эволюции вакуумного состояния в динамическом эффекте Казимира при непрямом протоколе фотодетектирования. В рассматриваемой модели используется параметрическое усиление вакуумных флуктуаций.

### 1. Эффект Казимира

На понятии вакуумных флуктуаций в квантовой оптике основано несколько фундаментальных эффектов – например, излучение Хокинга, эффект Унру, статический, а также динамический эффект Казимира.

Для произвольного вектора поля среднее значение оператора поля на вакуумном состоянии, как и средние значения операторов рождения и уничтожения, обращается в ноль. Среднее значение же квадрата оператора поля в ноль уже не обращается; значит, даже при наименьших значениях энергии электромагнитное поле флуктуирует – в вакууме постоянно рождаются и уничтожаются пары виртуальных частиц и античастиц.

Одно из наиболее известных явлений, причиной которого являются вакуумные флуктуации – статический эффект Казимира. Суть эффекта заключается в наличии силы притяжения между двумя незаряженными, параллельными, проводящими пластинами в вакууме. Внутри резонатора могут существовать волны только определенных длин; вследствие этого давление виртуальных фотонов внутри резонатора оказывается меньше, чем снаружи; соответственно, проявляется эффект притяжения между пластинами [1].

Динамический эффект Казимира – это процесс рождения фотонов из вакуума вследствие движения границ полости или из-за изменения материальных параметров среды (например, диэлектрической постоянной). В данной работе используется параметрическое усиление вакуумных флуктуаций.

Началом исследований в данной области можно считать 20-е годы прошлого столетия, когда были получены первые решения классических уравнений Максвелла в одномерной полости с одной движущейся без ускорения границей ([9],[10],[11]). В дальнейшем эффект рассматривался в рамках сначала классической, а потом и квантовой электродинамики (см., например, [7],[12]). В конце 80-х годов начали активно разрабатываться теоретические основы возможного экспериментального подтверждения эффекта. Наиболее характерные работы в этом направлении – [13],[14],[15],[16],[17]. В 90-х годах прошлого столетия начала разрабатываться теория усиления эффекта посредством параметрического резонанса – например, [18]. В 2005 году была предложена концепция первой реальной экспериментальной установки [5]; в 2011 – первые экспериментальные результаты [19].

Сегодня известны несколько возможностей экспериментальной проверки динамического эффекта Казимира, например, [19] – основана на сверхпроводящей схеме, [5] – основана на облучении слоя полупроводника пульсирующим лазером.

### 2. Математическая модель

Рассмотрим свободное вещественное безмассовое скалярное поле в пространстве Минковского с граничными условиями Дирихле [6]  $\Phi = 0$  на границе области  $\partial G(t)$  и  $\Phi = 0$  в области  $G(t)$ . Область  $G(t)$  испытывает небольшие геометрические изменения в течение временного интервала  $T$ :

$$G(t < 0) = G(t > T) = G_0. \quad (1)$$

Рассмотрим плотность функции Лагранжа ( $\hbar=c=1$ ):

$$l = \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi \quad (2)$$

и разложим потенциал  $\Phi$  по собственным функциям  $f_\alpha(\vec{r}, t)$  так, чтобы выполнялось  $f_\alpha = 0$  на границе  $\partial G(t)$ :

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum_\alpha q_\alpha(t) f_\alpha(\vec{r}, t). \quad (3)$$

После этого выпишем лагранжиан, используя следующие свойства (мы должны предоставить полный набор вещественных и ортонормированных собственных функций оператора Лапласа, удовлетворив граничным условиям Дирихле  $f_\alpha = 0$  на границе  $\partial G(t)$ ):

$$\int_{G(t)} dV f_\alpha f_\beta = \delta(\alpha, \beta), \quad (4)$$

$$\int_{G(t)} dV (\nabla f_\alpha) (\nabla f_\beta) = [\omega_\alpha(t)]^2 \delta(\alpha, \beta), \quad (5)$$

$$\sum_\alpha f_\alpha(\vec{r}) f_\alpha(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (6)$$

в  $G(t)$ , где  $\omega_\alpha(t)$  - собственная частота моды поля с номером  $\alpha$ . Таким образом (в дальнейшем будет использовано немое суммирование),

$$L = \int_{G(t)} dV l = \frac{1}{2} \dot{q}_\alpha^2 - \frac{1}{2} \omega_\alpha^2(t) q_\alpha^2 + q_\alpha M_{\alpha\beta}(t) \dot{q}_\beta + \frac{1}{2} q_\alpha M_{\alpha\gamma}(t) M_{\beta\gamma}(t) q_\beta. \quad (7)$$

где матрица

$$M_{\alpha\beta}(t) = \int_{G(t)} dV \frac{\partial f_\alpha(\vec{r}, t)}{\partial t} f_\beta(\vec{r}, t). \quad (8)$$

Уравнения на собственные значения [6]:

$$\nabla^2 f_\alpha(\vec{r}, t) = -\omega_\alpha^2(t) f_\alpha(\vec{r}, t). \quad (9)$$

Ввиду ортогональности и нормированности функций  $f_\alpha$  (см. (4);  $dG = dV$ ;  $d\dot{G} = \vec{v} d\vec{A}$ ) и наложенных граничных условий матрица  $M_{\alpha\beta}$  антисимметрична:

$$M_{\alpha\beta}(t) + M_{\beta\alpha}(t) = \int_{G(t)} dG \frac{\partial}{\partial t} [f_\alpha(\vec{r}, t) f_\beta(\vec{r}, t)] = \frac{\partial}{\partial t} \delta(\alpha, \beta) - \int_{\partial G(t)} d\dot{G} f_\alpha(\vec{r}, t) f_\beta(\vec{r}, t) = 0. \quad (10)$$

Определим канонические сопряженные импульсы

$$p_\alpha(t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = \dot{q}_\alpha + q_\beta M_{\beta\alpha}(t) \quad (11)$$

и выполним преобразование Лежандра. Тогда функция Гамильтона выглядит следующим образом:

$$H(t) = \frac{1}{2} p_\alpha^2 + \frac{1}{2} \omega_\alpha^2(t) q_\alpha^2 + p_\alpha M_{\alpha\beta}(t) q_\beta. \quad (12)$$

### 3. Эффективный гамильтониан

Произведем каноническое квантование, приняв следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{q}_\alpha(t), \hat{q}_\beta(t)] = [\hat{p}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)] = 0, \quad (13)$$

$$[\hat{q}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)] = i\delta(\alpha, \beta). \quad (14)$$

Представим набор операторов рождения и уничтожения, соответствующий гамильтониану  $\hat{H}_0 = \hat{H}(t < 0) = \hat{H}(t > T) = \hat{E}_0$  согласно

$$\hat{a}_\alpha(t) = (2\omega_\alpha^0)^{-1/2} [\omega_\alpha^0 \hat{q}_\alpha(t) + i\hat{p}_\alpha(t)], \quad (15)$$

вместе со статической частотой  $\omega_\alpha^0 = \omega_\alpha(t < 0) = \omega_\alpha(t > T)$ . Они подчиняются уравнению движения

$$\frac{\partial \hat{a}_\alpha}{\partial t} = i[\hat{H}_0, \hat{a}_\alpha] = -i\omega_\alpha^0 \hat{a}_\alpha \quad (16)$$

и коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_\alpha(t), \hat{a}_\beta^\dagger(t)] = \delta(\alpha, \beta). \quad (17)$$

Определим оператор числа частиц следующим образом:

$$\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^\dagger(t) \hat{a}_\alpha(t). \quad (18)$$

После того, как была произведена процедура канонического квантования (введены коммутационные соотношения между каноническими импульсами и координатами, коммутационные соотношения между операторами рождения и уничтожения), можно написать гамильтониан, соответствующий функции Гамильтона (12):

$$\hat{H}_{eff} = \sum_\alpha \omega_\alpha(t) \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha + \sum_\alpha \chi_\alpha(t) (\hat{a}_\alpha^{\dagger 2} - \hat{a}_\alpha^2) + \frac{i}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \mu_{\alpha,\beta}(t) (\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger + \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta - \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha - \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha), \quad (19)$$

где

$$\chi_\alpha(t) = \frac{M_{\alpha,\alpha}(t)}{2} + \frac{1}{4\omega_\alpha(t)} \frac{\partial \omega_\alpha(t)}{\partial t} \quad (20)$$

и

$$\mu_{\alpha,\beta}(t) = \left( \frac{\omega_\alpha(t)}{\omega_\beta(t)} \right)^{1/2} M_{\alpha,\beta}(t). \quad (21)$$

Основываясь на (12), отметим два эффекта, которые приводят к нестационарному вакууму: нестационарные собственные частоты  $\omega_\alpha(t)$  вследствие динамического изменения формы области  $G(t)$  - этот эффект обычно называют «сжатием» вакуума - и дополнительная  $q_\alpha - p_\beta$  связь, описываемая матрицей  $M_{\alpha\beta}$  и указывающая на движение границ - эффект ускорения.

#### 4. Одномодовый гамильтониан

В настоящей работе рассматривается резонатор, заполненный электронейтральной средой, с осциллирующей по известному закону стенкой (зеркалом). Эта система была подробно рассмотрена в [7]. В том случае, когда среда, заполняющая полость, является однородной, но зависит от времени, и зеркало при этом покоится, все коэффициенты  $M_{\alpha\beta}(t)$  обращаются в ноль. Тогда гамильтониан, описывающий эту систему, выглядит следующим образом:

$$H_{00} = \omega(t) \hat{n} + i\chi(t) (\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2), \quad (22)$$

$$\chi(t) = [4\omega(t)]^{-1} d\omega/dt.$$

#### 5. Протокол фотодетектирования

Опишем процедуру фотодетектирования (Рис.). Одна из простейших моделей детектора - двухуровневый атом, который может находиться в двух состояниях: основном и возбужденном. Известно, что переход из основного состояния в возбужденное сопровождается поглощением атомом фотона. Переход из возбужденного состояния в основное сопровождается рождением фотона. Атом приготавливается в основном состоянии, после чего запускается в резонатор; происходит взаимодействие атома с полем. В резонаторе в результате движения зеркала происходит рождение фотонов парами; на это тратится механическая энергия движения зеркала. В некоторый момент время фиксируется, и с помощью детектора выясняется, в каком состоянии находится атом. Можно значительно увеличить число фотонов, рождающихся в резонаторе, с помощью периодического движения зеркала при определенных условиях резонанса [4],[6],[18],[21],[22].



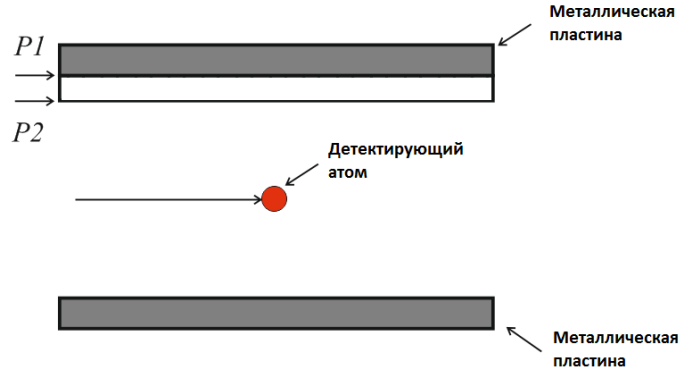


Рис.1 Детектирование созданных фотонов внутри полости с помощью двухуровневого атома

В случае взаимодействия к эффективному гамильтониану (22) доабвляется также гамильтониан свободного атома  $H_a = \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_z$  (где  $\Omega$  – атомная частота перехода) и взаимодействия

$$H_R = g(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-),$$

где  $\hat{\sigma}_- = |g\rangle\langle e|$ ,  $\hat{\sigma}_+ = |e\rangle\langle g|$ ,  $\hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ ,  $|g\rangle$  и  $|e\rangle$  – основное и возбужденное состояния атома. Таким образом, полный гамильтониан системы запишется в виде:

$$H_0 = x\hat{n} + i\chi(t)(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2) + \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_z + g(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-), \quad (23)$$

где  $\omega(t) = \omega_0(1 + \varepsilon \sin(\eta t))$  – мгновенная частота выделенной резонаторной моды, принятая в гармонической форме;  $\chi(t) = [4\omega(t)]^{-1} d\omega/dt \approx (\varepsilon\eta/4)\cos(\eta t)$ ;  $\varepsilon \ll 1$  – амплитуда модуляции;  $\eta = 2(\omega_0 + x)$  – частота модуляции,  $x = \omega_0 - \nu$ ,  $\nu = \eta/2$ .

## 6. Представление взаимодействия

Получим гамильтониан (23) в представлении взаимодействия с помощью унитарного преобразования  $|\Psi(t)\rangle = \hat{V}(t)|\psi(t)\rangle$ , где  $\hat{V}(t) = \exp[-it(\eta/2)(\hat{n} + \hat{\sigma}_z/2)]$ . Тогда гамильтониан в новом представлении  $\hat{H} = \hat{V}^\dagger(t)\hat{H}_0\hat{V}(t) - i\hat{V}^\dagger(t)\dot{\hat{V}}(t)$ . Получим итоговую результат:

при  $\hat{\sigma}_z$ :

$$\frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_z - \frac{\eta}{2}(\hat{n} + \hat{\sigma}_z/2) = -\hat{\sigma}_z \frac{\Delta + x}{2} + \dots, \quad (24)$$

где на месте многоточия стоят члены без  $\hat{\sigma}_z$ ;

при  $\hat{n}$ :

$$\hat{n} - \frac{\eta}{2}(\hat{n} + \hat{\sigma}_z/2) = -x\hat{n} + \dots, \quad (25)$$

где на месте многоточия стоят члены без  $\hat{n}$ . Таким образом:

$$\hat{H} = g(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-) + i\chi(t)(e^{2i(\eta/2)t}\hat{a}^{\dagger 2} - e^{-2i(\eta/2)t}\hat{a}^2) + \hat{\sigma}_z \frac{\Delta + x}{2} + x\hat{n}, \quad (26)$$

где  $\Delta = \Omega - \omega_0$ . Применим ко второму слагаемому приближение вращающейся волны (RWA):

$$\chi(t) = (\varepsilon\eta/4)\cos(\eta t) = \frac{\varepsilon\eta}{4} \frac{e^{i\eta t} + e^{-i\eta t}}{2};$$

$$i\chi(t)(e^{2it(\eta/2)\hat{a}^\dagger 2} - e^{-2it(\eta/2)\hat{a}^2}) = i\frac{\varepsilon\eta}{4}(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2).$$

Гамильтониан после преобразований выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = g(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-) + i\frac{\varepsilon\eta}{4}(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2) + \hat{\sigma}_z \frac{\Delta + x}{2} + x\hat{n}. \quad (27)$$

## 7. В рамках модели Джебейса-Каммингса

Рассмотрим оператор сжатия:

$$\hat{S} = \exp\left(\frac{1}{2}\xi^*\hat{a}^2 - \frac{1}{2}\xi\hat{a}^{\dagger 2}\right), \quad (28)$$

где  $\xi = r \cdot \exp(i\vartheta)$  - произвольное комплексное число. Тогда:

$$\hat{S}^\dagger(\xi) = \hat{S}^{-1}(\xi) = \hat{S}(-\xi) \quad (29)$$

и

$$\begin{aligned} \hat{S}^{-1}\hat{a}^\dagger\hat{S} &= \hat{a}^\dagger \cosh(r) + \hat{a}e^{-i\vartheta} \sinh(r), \\ \hat{S}^{-1}\hat{a}\hat{S} &= \hat{a} \cosh(r) + \hat{a}^\dagger e^{i\vartheta} \sinh(r). \end{aligned} \quad (30)$$

Применив оператор сжатия (28) к гамильтониану (27) почленно, выпишем множитель при  $\hat{a}^{\dagger 2}$  (множитель при  $\hat{a}^2$  будет к нему комплексно сопряжен):

$$i\frac{\varepsilon\eta}{4} \cosh^2(r) - i\frac{\varepsilon\eta}{4} e^{2i\vartheta} \sinh^2(r) - x e^{i\vartheta} \cosh(r) \sinh(r). \quad (31)$$

Приравняем (31) к нулю и найдем  $r$  и  $\vartheta$ :

$$\begin{cases} \frac{\varepsilon\eta}{4} \cosh(2r) \sin(\vartheta) - x \frac{\sinh(2r)}{2} = 0, \\ \cos(\vartheta) = 0. \end{cases} \quad (32)$$

Таким образом

$$\vartheta = \frac{\pi}{2}, \quad r = \frac{1}{2} \operatorname{arctanh}\left(\frac{\varepsilon\eta}{2x}\right). \quad (33)$$

После всех преобразований гамильтониан представляется в следующей форме:

$$\hat{H}_B = \mu\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) + \hat{\sigma}_z \frac{\alpha}{2} + g\left[\left(\hat{a} \cosh(r) - i\hat{a}^\dagger \sinh(r)\right)\hat{\sigma}_+ + \left(\hat{a}^\dagger \cosh(r) + i\hat{a} \sinh(r)\right)\hat{\sigma}_-\right], \quad (34)$$

где  $\alpha = \Delta + x$  и  $\mu = \frac{\sqrt{4x^2 - \varepsilon^2 \nu^2}}{2}$ .

Из (33) видно, что унитарное преобразование  $\hat{H}_B = \hat{S}^\dagger \hat{H} \hat{S}$  возможно только в том случае, когда  $\left|\frac{\varepsilon\eta}{2x}\right| < 1$ .

Получим гамильтониан (34) в представлении взаимодействия. Для этого сначала применим к нему последовательно операторы  $e^{i\mu(\hat{n}+1/2)t}$  и  $e^{i\alpha\frac{\hat{\sigma}_z}{2}t}$ .

После применения преобразований получаем гамильтониан в следующем виде:

$$\hat{H}_B = g\left[\cosh(r)\left(\hat{a}\hat{\sigma}_+ e^{it(\mu-\alpha)} + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_- e^{-it(\mu+\alpha)}\right) + i\sinh(r)\hat{a}\hat{\sigma}_- e^{it(\mu+\alpha)} - i\sinh(r)\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_+ e^{-it(\mu+\alpha)}\right]. \quad (35)$$

В рамках рассматриваемой задачи необходимо, чтобы основной вклад в динамику системы вносило только сжатие. Таким образом, границы применимости преобразования:  $|\mu - \alpha| \ll \mu, \alpha$ . Применим приближение вращающейся волны к гамильтониану (35) и выпишем результат:

$$\hat{H}_{J-C} = g \cosh(r) \left( \hat{a} \hat{\sigma}_+ e^{it(\mu-\alpha)} + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- e^{-it(\mu+\alpha)} \right). \quad (36)$$

Из гамильтониана (36) можно получить явное выражение для оператора условной эволюции вакуумного состояния. Разложим оператор эволюции  $U(t)$ , соответствующий решению уравнения Шрёдингера с гамильтонианом (36), по базису из атомных состояний:

$$U(t) = \sum_{p,q \in \{g,e\}} U_{pq} |q\rangle \langle p|. \quad (37)$$

Получим систему операторных дифференциальных уравнений [23]:

$$i \frac{d}{dt} U_{pq}(t) = \sum_{r \in \{g,e\}} \langle p | \hat{H}_{J-C} | r \rangle U_{rq}(t). \quad (38)$$

Данная система решается аналитически. Для случая, когда атом был подготовлен в основном состоянии и обнаружен в возбужденном, получаем

$$U_{ge}(t) = -i \frac{Ge^{-i\delta t/2}}{\sqrt{\delta^2/4 + G^2 \hat{a} \hat{a}^\dagger}} \sin\left(t \sqrt{\delta^2/4 + G^2 \hat{a} \hat{a}^\dagger}\right) \hat{a}, \quad (39)$$

где  $G = g \cosh(r)$ ,  $\delta = \mu - \alpha$ . Оператор  $U_{ge}$  отображает основное состояние поля  $|\phi(0)\rangle$  в конечное возбужденное состояние  $|\phi_e(t)\rangle$ . Однако это конечное состояние не является нормированным: после нормировки

$$|\phi_e(t)\rangle = \frac{U_{ge}(t) |\phi(0)\rangle}{P_e(t)}, \quad P_e(t) = \langle \phi_e(t) | \phi_e(t) \rangle, \quad (40)$$

где  $P_e(t)$  - вероятность обнаружить атом в возбужденном состоянии через время взаимодействия  $t$ .

## 8. Результаты численного моделирования

Используем гамильтониан (27) для моделирования динамики атомно-полевой системы в процессе детектирования поля Казимира, выбрав параметры следующим образом:

$$x = 1, \quad \varepsilon \eta = 1.7, \quad \Delta = 0.36, \quad g = 0.1. \quad (41)$$

Детектирующий атом приготавливается в основном состоянии.

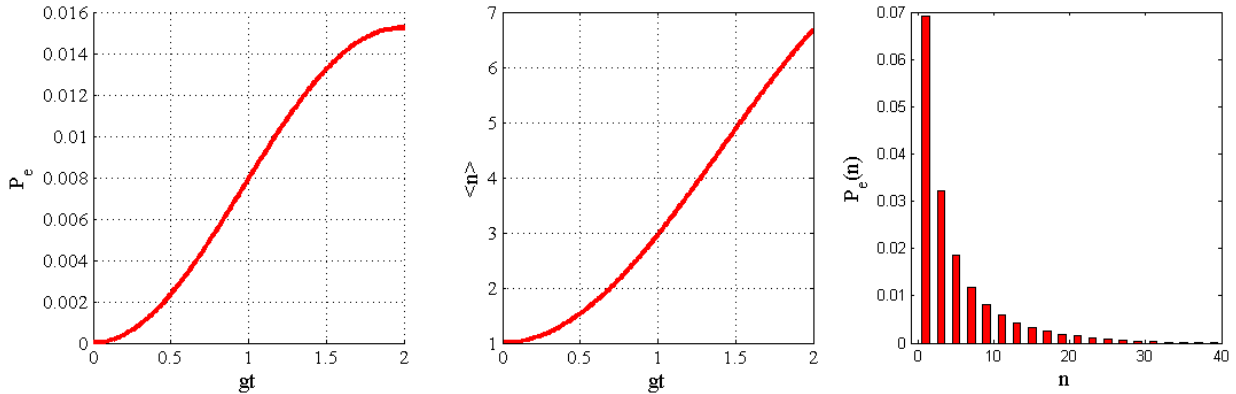


Рис.2 На графиках слева направо представлены следующие статистические характеристики:  $P_e(t)$ ,  $\langle \hat{n}(t) \rangle$ ,  $P_e(n)$ .

Вероятность обнаружить атом в возбужденном состоянии  $P_e(t) = \langle \phi_e(t) | \phi_e(t) \rangle$  показана на (Рис.2) как функция безразмерного времени (времени взаимодействия атома с полем)  $\tau = gt$ . Функция является монотонно возрастающей, достигающей значения 0.015 на интересующем нас интервале. На следующем графике показано среднее число рожденных фотонов как функция времени  $\langle \hat{n}(t) \rangle = \langle \phi_e(t) | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \phi_e(t) \rangle$ ; она достигает значения 6 при  $gt \approx 2$ .

Для этого значения представлено распределение вероятностей  $P_e(n) = \left| \langle 0 | \hat{S}^\dagger U_{ge} \hat{S} | n \rangle \right|^2$  от числа фотонов. По графику видно, что ненулевую вероятность имеют только четные числа фотонов

из-за особенностей системы: фотоны рождаются парами, при детектировании атом поглощает один фотон.

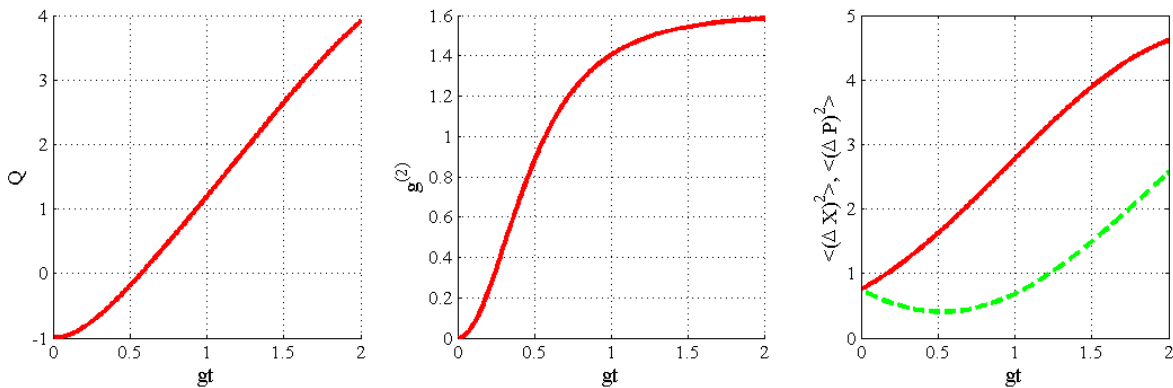


Рис.3 На графиках слева направо представлены следующие статистические характеристики:  $Q$ ,  $g^{(2)}$ ,  $\langle(\Delta\hat{X})^2\rangle$ ,  $\langle(\Delta\hat{P})^2\rangle$ .

На (Рис.3) представлены параметр Манделя  $Q = \frac{\langle(\Delta\hat{n})^2\rangle - \langle\hat{n}\rangle^2}{\langle\hat{n}\rangle}$ , функция корреляции второго порядка  $g^{(2)} = \frac{\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\rangle}{\langle\hat{n}\rangle^2}$  и квадратуры поля  $\langle(\Delta\hat{X})^2\rangle$ ,  $\langle(\Delta\hat{P})^2\rangle$ , где  $\hat{X} = \frac{\langle\hat{a}^\dagger + \hat{a}\rangle}{\sqrt{2}}$ ,  $\hat{P} = \frac{\langle\hat{a} - \hat{a}^\dagger\rangle}{i\sqrt{2}}$ . Графики демонстрируют квантовый характер взаимодействия поля с атомом. В начале взаимодействия параметр Манделя  $Q < 0$ ,  $\langle(\Delta\hat{P})^2\rangle$  убывает до значения, обусловленного сжатым состоянием; статистика поля субпуассоновская. Далее  $Q$  возрастает до значения  $gt \approx 0.5$  ( $g^{(2)} \approx 1$ ), статистика поля становится Пуассоновской. Для  $gt > 0.5$  статистика поля суперпуассоновская.

## 9. Заключение

В настоящей работе проводится аналитическое и численное исследование эволюции вакуумного состояния в динамическом эффекте Казимира.

Новизна работы заключается в следующем: удалось найти условия, при которых гамильтониан, соответствующий рассматриваемой задаче, сводится к гамильтониану в форме Джейнса-Каммингса, что позволило получить ряд аналитических результатов для статистических характеристик поля Казимира; методами операторной алгебры было получено аналитическое выражение для оператора условной эволюции.

Помимо того, что динамический эффект Казимира является фундаментальным эффектом в квантовой механике, он имеет также прикладное значение: например, посредством эффекта можно рожать пары перепутанных фотонов.

В дальнейшем возможно исследовать случай неунитарного взаимодействия поля с атомом вследствие присутствия среды, а также сравнить результаты реально проведенного эксперимента с теоретическими результатами, полученными в работе.

## Список литературы

- [1] Мандель, Л., Оптическая когерентность и квантовая оптика //Л.Мандель, Э.Вольф // -М.: ФИЗМАТЛИТ. -2000. -896 с.
- [2] Скалли, М.О., Квантовая оптика // М.О.Скалли, М.С.Зубайри // -2003. М. Физматлит. - 512с.
- [3] Люиселл, В., Излучение и шумы в квантовой электронике // В. Люиселл // -1986. Наука - 403с.

- [4] Law C.K., Effective Hamiltonian for the radiation in a cavity with a moving mirror and a time-varying dielectric medium // C K Law // -1994. Phys. Rev. A 49 433-537
- [5] Braggio C. et al, A novel experimental approach for the detection of the dynamical Casimir effect // C Braggio et all // -2005. Europhys. Lett. 70 (6) 754760
- [6] Schutzhold, R., Plunien, G., and Soff, G., Trembling cavities in the canonical approach // Schutzhold R Plunien G and Soff G // -1998. Phys. Rev. A 57 2311-2318
- [7] Moore G.T., Radiation from a Moving Mirror in Two Dimensional Space-Time: Conformal Anomaly // Moore G.T. // -1970. J. Math. Phys. 11, 2679
- [8] Castagnino, M. and Ferraro R., The radiation from moving mirrors: the creation and absorption of particles // M. Castagnino and R. Ferraro // -1984. J. Math. Ann. Phys. (N. Y.) 154, 1
- [9] Nicolai, E.L., On the transverse vibrations of a portion of a string of uniformly variable length // E. L. Nicolai // -1921. Annals Petrograd Polytechn. Inst. 28, 273
- [10] Nicolai, E.L., On a dynamical illustration of the pressure of radiation // E. L. Nicolai // -1925. Philosophical Magazine 49, 171-7
- [11] Havelock T.H., Some dynamical illustrations of the pressure of radiation and of adiabatic invariance // T. H. Havelock // -1925. Philosophical Magazine 47, 754-71
- [12] Balasz N.L., On the solutions of the wave equation with moving boundaries // N. L. Balasz // -1961. J. Math. Anal. Appl. 3, 472
- [13] Dodonov, V.V., Klimov, A.B. and Man'ko, V.I., Nonstationary Casimir effect and oscillator energy level shift // V. V. Dodonov, A. B. Klimov and V. I. Man'ko // -1989. Phys Lett. A 142, 511-3
- [14] Widom, A., Sassaroli, E. and Srivastava, Y.N.,  $(1/\omega)$  Noise and the dynamical Casimir effect // A. Widom, E. Sassaroli and Y. N. Srivastava // -1993. Can. J. Phys. 71, 168-71
- [15] Barton, G. and Eberlein, C., On quantum radiation from a moving body with finite refractive index // G. Barton and C. Eberlein // -1993. Ann. Phys.(NY) 227, 222-74
- [16] Lambrecht, A., Jaekel, M.T. and Reynaud S., Motion induced radiation from a vibrating cavity // A. Lambrecht, M. T. Jaekel and S. Reynaud // -1996. Phys. Rev. Lett. 77, 615-18
- [17] Dodonov, V.V., Klimov, A.B. and Man'ko, V.I., Generation of squeezed states in a resonator with a moving wall // V. V. Dodonov, A. B. Klimov and V. I. Man'ko // -1990. Phys. Lett. A 149, 225
- [18] Dodonov, V.V. and Klimov, A.B., Generation and detection of photons in a cavity with a resonantly oscillating boundary // V. V. Dodonov and A. B. Klimov // -1996. Phys. Rev. A 53, no.4, p.2664-2682
- [19] Wilson, C.M., Johansson, G., Pourkabirian, A., Simoen, M., Johansson, J.R., Duty, T., Nori, F., Delsing, P., Observation of the dynamical Casimir effect in a superconducting circuit // C. M. Wilson, G. Johansson, A. Pourkabirian, M. Simoen, J. R. Johansson, T. Duty, F. Nori, P. Delsing // -2011. Nature, v.479, p.376-379
- [20] Fulling, S.A. and Davies, P.C.W., Radiation from a moving mirror in two-dimensional space-time: Conformal anomaly // S. A. Fulling and P. C. W. Davies // -1976. Proc. Roy. Soc. London A 348, 393
- [21] Dodonov, V.V. and Klimov, A.B. // Dodonov, V.V. and Klimov, A.B. // -1992. Phys. Lett. A 167, 309
- [22] Croce, M., Dalvit, D.A.R., and Mazzitelli, F.D. // Croce, M., Dalvit, D.A.R., and Mazzitelli, F.D. // -2001. Phys. Rev. A 64, 013808
- [23] Трифанов, А.И., Мирошниченко, Г.П. // Трифанов, А.И., Мирошниченко, Г.П. // -2013. Nanosystems: Phys., Chem., Math. 4 (5) 635-647

«ТРУДЫ студенческого центра прикладных математических исследований» впервые был издан в 2011 году. В сборник вошли 17 студенческих научных работ. В 2012 г. был издан второй том указанных «Трудов», содержащий 20 научных работ. При поддержке НИУ ИТМО планируется сделать его регулярным ежегодным.

Научное издание

**ТРУДЫ  
студенческого центра  
прикладных математических исследований**

Под редакцией Игоря Юрьевича Попова и  
Александра Александровича Кубенского

Подписано в печать 26.01.2015

Заказ 3240 Тираж 50 экз.

**Отпечатано** в учреждении «Университетские телекоммуникации»  
Адрес: 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

ISBN 978-5-7577-0492-0



9 785757 704920



**УНИВЕРСИТЕТ ИТМО**