Университет ИТМО

Естественно-научный факультет Кафедра высшей математики

Герасимов Дмитрий Александрович

Исследование полноты резонансных состояний оператора Шредингера для модели квантовых графов

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры ВМ И. Ю. Попов

 ${
m Cahkt-}\Pi$ етербург 2016

Содержание

Введен	ше				5
Глава	1. Предвај	рительные сведения			8
1.1	Различны	ле обозначения			8
1.2	Уравнение Шредингера				8
1.3	S-матрица				9
1.4	Квантовые графы				10
1.5	Преобразование Кэли				10
1.6	Теория Лакса-Филипса				11
1.7	Критерий сходимости				12
Глава	2. Описан	ие реализованного подхода			14
2.1	Модель р	резонатора типа «пучок»			14
		дель исследования			14
		ичисление S -матрицы			15
	2.1.3 Дон	казательство полноты резонансных состояни	йπ	ри	
	a =	a=b=0			15
	2.1.3.1	Оценка $\int g(t) ^2$			16
	2.1.3.2				17
	2.1.3.3				17
	2.1.3.4	Случай 1: $C-R \leq y \leq Z$			19
	2.1.3.5	$C - R \le y < \frac{V}{4} \dots \dots \dots$			20
	2.1.3.6	$\frac{V}{4} \le y < Z$			21
	2.1.3.7	$\hat{ ext{C}}$ лучай 2: $y>Z$			22
	2.1.3.8	$Z \leq y < Z + \frac{1}{R}$			23
	2.1.3.9	1			24
	2.1.3.10	$C \le y \le C + R$			24
	2.1.3.11	Оценка $\int f(t) ^2$: итог			25
2.2		оезонатора типа «кольцо»			26
		дель исследования			26
		тчисление S-матрицы			27

2.2.3	Доказательство неполноты резонансных состояний			
	при $a=0$	27		
2.2.4	Исследование полноты при $a \neq 0$	28		
Заключение		31		
Список литературы				
Приложения		34		

Введение

Постановка задачи и обоснованность исследования

Исследования резонансов и резонансных состояний различных физических систем проводились давно, начиная с классической работы лорда Рэлея [1], и по наши дни. Однако, строгое математическое обоснование и формализм этим явлениям были даны во второй половине XX века. Теперь известно, что резонансы являются собственными числами, а резонансные состояние — собственными функциями некого диссипативного оператора [2, 3].

Одним из интересных как с математической, так и физической точек зрения вопросов является вопрос о полноте резонансных состояний. Рассмотрим некий конечный резонатор Г с граничным условием Дирихле или Неймана. Как хорошо известно из теории операторов и рассеяния [4], оператор Шредингера в такой области будет обладать чисто дискретным спектром и полной системой собственных функций в $\mathcal{L}^2(\Gamma)$. Теперь применим к резонатору возмущение, соединив его через небольшое отверстие с волноводом. После этого, у системы будет непрерывный спектр, а собственные значения исходной системы превращаются в резонансы и «смещаются» в комплексную плоскость. Резонансные состояния формально удовлетворяют уравнению Шредингера и граничным условиям, однако не квадратично интегрируемы, так как их волновые функции не уходят в ноль на бесконечности, то есть не являются собственными функциями оператора Шредингера на новом домене. Однако, при сужении этих резонансных состояний на конечный домен Ω , они вновь становятся интегрируемыми и принадлежат пространству $\mathcal{L}_2(\Omega)$. Интересным является вопрос о полноте этих

суженных состояний на домене Ω , и соответственно, вопрос о поиске такого поддомена квантовой системы, на котором его резонансные состояния будут полны. Существует гипотеза о том, что таким поддоменом является выпуклая оболочка рассеивателя.

ЦЕЛИ РАБОТЫ

Целью данной работы является исследование нескольких моделей квантовых графов и анализ их резонансных состояний на предмет их полноты на области резонатора.

Степень разработанности темы и научная новизна

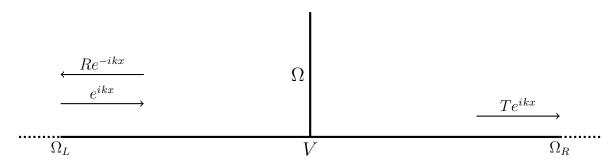


Рис. А: Одномерный резонатор-отрезок с условием Дирихле на краю резонатора.

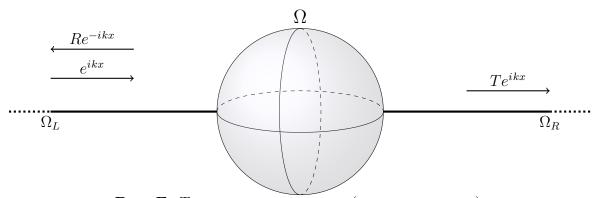


Рис. Б: Трехмерный резонатор (квантовая точка).

В работе [5] была показана полнота резонансных функций на графе с резонатором, состоящим из отрезка (рис. А), и резонатором в виде квантовой точки (рис. В), других исследований в данном направлении автору

не известно.

Положения, выносимые на защиту

В разд. 2.1 исследована сложная квантовая система с резонатором типа «пучок» и строго аналитически доказана полнота системы резонансных состояний для произвольного количества проводов.

В разд. 2.2 исследуется квантовая система с резонатором типа «кольцо». Анализируются различные граничные условия и показывается отсутствие полноты при a=0 (разд. 2.2.3), и наличие полноты системы резонансных состояний при a>0 (разд. 2.2.4).

Глава 1. Предварительные сведения

1.1. Различные обозначения

- \mathbb{C} комплексная плоскость, $\mathbb{C} = \{x + iy \mid x, y \in \mathbb{R}\}$
- \mathbb{H} верхняя комплексная полуплоскость (англ. upper half-plane), $\mathbb{H} = \{x+iy \mid y>0, x,y \in \mathbb{R}\}$
- ullet $\mathbb{D}-$ комплексный единичный круг (англ. unit disk), $\mathbb{D}=\{z\mid |z|<1\}$
- \mathbb{T} комплексная единичная окружность (англ. unit circle), $\mathbb{T} = \partial \mathbb{D} = \{z \mid |z| = 1\}$
- z используется в качестве переменной, обозначающей точку в верхней комплексной полуплоскости Н
- ζ используется в качестве переменной, обозначающей точку на комплексном единичном диске $\mathbb D$

1.2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера описывает временную эволюцию чистых состояний квантовых систем во времени, и выглядит как:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H \Psi(t)$$

, \hbar — приведенная постоянная Планка, H — гамильтониан, оператор полной энергии системы. Спектром гамильтониана является множество возможных значений энергии квантовой системы, которые можно получить при ее измерении.

Так как в этой работе нам интересна математическая задача рассеяния, и качественное поведение системы, а не конкретные значения энергий, далее мы будем игнорировать постоянную Планка и примем ее равной 1; а так система статична, и гамильтониан не зависит от времени, можно пе-

рейти к стационарному уравнению Шредингера:

$$H\Psi = E\Psi$$

При этом решения уравнения разделяются на два класса: связанные состояния (англ. bound states) — те, которые соответствуют дискретной части спектра и чью собственные функции являются квадратично интегрируемыми, и состояния рассеяния (англ. scattering states), которые являются лишь формальными решениями, и соответствуют непрерывной части спектра. Такие решения не лежат не являются квадратично интегрируемыми, и в них мы будем заинтересованы в данной работе.

1.3. S-МАТРИЦА

Рассмотрим локализованный одномерный потенциальный барьер или резонатор. Пусть на барьер слева и справа направлены частицы с волновым вектором k (который будет скаляром в одномерном случае). Слева и справа от резонатора частицы ведут себя как свободные, соответственно, в общем виде их волновые функции имеют следующий вид:

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

$$\psi_R(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$$
(1.1)

S-матрица, или матрица рассеяния (англ. scattering matrix) выражает зависимость исходящего состояния от входящего:

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$
(1.2)

, и полностью характеризует рассеивающие свойства потенциального барьера.

S-матрица обладает рядом интересных свойств [6, стр. 75], позволяющих анализировать рассеяние в квантовой системе: к примеру, S-матрица как функция комплексного аргумента, аналитична в верхней комплексной полуплоскости, а ее полюса соответствуют связным состояниям или резонансам.

1.4. КВАНТОВЫЕ ГРАФЫ

Квантовый граф (англ. quantum graph) — широко используемая модель наносистемы [7—9]. Квантовый граф представляет из себя набор вершин и линейных, одномерных ребер, их соединяющих, или уходящих на бесконечность (можно обратиться к рис. А в качестве простейшего примера). При этом на ребрах графа действует дифференциальный оператор, к примеру, оператор Шредингера свободной частицы: $-\frac{d^2\psi}{dx^2}$, а в вершинах графа установлено граничное условие, связывающее волновые функции на смежных ребрах.

1.5. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КЭЛИ

Прямое преобразование Кэли (англ. Cayley transform) конформно отображает \mathbb{H} в \mathbb{D} :

$$W(z) = \frac{z-i}{z+i} \tag{1.3}$$

, обратное преобразование Кэли аналогично отображает D в H:

$$w(\zeta) = i\frac{1+\zeta}{1-\zeta} \tag{1.4}$$

Важным свойством преобразование Кэли является инъективное отображение $\mathbb R$ в единичную окружность $\mathbb T$.

Так как преобразование Кэли является трансформацией Мебиуса, оно сохраняет окружности. В частности, окружность с радиусом r в нуле, под действием обратного преобразование Кэли перейдет в окружность с центром в C(r) и радиусом R(r), где:

$$C(r) = \operatorname{Im} \frac{w(r) + w(-r)}{2}$$

$$R(r) = \operatorname{Im} \frac{w(r) - w(-r)}{2}$$
(1.5)

Легко заметить, что при стремлении r к 1, R(r) стремится к бесконечности, а C(r) стремится к R(r), что естественно так как в пределе комплексная единичная окружность отображается в вещественную ось.

1.6. ТЕОРИЯ ЛАКСА-ФИЛИПСА

Мы рассматриваем рассеяние в подходе Лакса-Филипса, кратко опишем его (подробно с ним можно ознакомиться в работах [2, 10]).

Рассмотрим задачу Коши для волнового уравнения в области Г:

$$u''_{tt} = Hu$$
 $u(x,0) = u_0(x)$ (1.6)
 $u'_t(x,0) = u_1(x)$.

Пусть \mathcal{E} — гильбертово пространство двухкомпонентных функций с конечной энергией (u_0, u_1) на графе Γ :

$$\|(u_0, u_1)\|_{\mathcal{E}}^2 = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} (|u_0'|^2 + |u_1|^2) dx$$

, где пара (u_0,u_1) называется данными Коши (англ. Cauchy data), а оператор U(t), дающий решение этой задаче: $U(t)(u_0,u_1)=(u(x,t),u_t'(x,t))$, порождает унитарную группу $\{U(t)\mid t\in\mathbb{R}\}$. Данная группа содержит два ортогональных подпространства: D_- — входящее подпространство, и D_+ — исходящее.

В теории рассеяния установлено, что существуют отображения $T_{\pm}:\mathcal{R}\to\mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{C}^2)$, такие что $T_{\pm}U(t)=e^{iktT_{\pm}}$, которые называются исходящим (соответственно, входящим) спектральным представлением унитарной группы U(t). Обозначим $K=\mathcal{E}\ominus(D_+\oplus D_-)$, и рассмотрим полугруппу $Z(t)=\mathcal{P}_KU(t)|_K, t>0$, где \mathcal{P}_K — оператор проецирования на K. Пусть B — генератор Z(t), то есть $Z(t)=e^{iBt}$, тогда собственные вектора этого оператора и будут резонансными состояниями, а $T_-T_+^{-1}$ называется оператором рассеяния. Оператор рассеяния действует как умножения на матрично-значную функцию S(k), и являющейся матрицей рассеяния (см. разд. 1.3).

Теорема 1.1 ([11, стр. 95]). Пусть S — внутренняя функция, тогда следущие утверждения эквивалентны:

ullet Onepamop Z полный.

ullet S-nроизведение Бляшке-Потапова.

Теорема 1.2 ([11, стр. 99]). Пусть вспомогательное пространство конечномерно. Тогда, следующие утверждения эквивалентны:

ullet S — произведение Бляшке-Потапова.

•

$$\lim_{r=1} \int_{\mathbb{T}} \log|\det S(r\zeta)| dm(\zeta) = 0$$
 (1.7)

Непосредственно применяя эти теоремы, и пользуясь тем, что нашим вспомогательным пространством является \mathbb{C}^2 , получаем, что мы можем воспользоваться данным упрощенным критерием для доказательства полноты резонансных состояний в квантовом графе.

1.7. КРИТЕРИЙ СХОДИМОСТИ

Так как $\det S$ является скалярной внутренней функцией [11], мы можем воспользоваться критерием 1.7 для исследования полноты системы резонансных состояний. В пространстве единичного диска он будем выглядеть как:

$$\lim_{r=1} \int_{|\zeta|=r} \log|\det S(\zeta)| d\zeta = 0 \tag{1.8}$$

Так как S-матрица естественным образом определена на комплексной плоскости, иногда бывает удобнее работать с этим признаком в верхней полуплоскости \mathbb{H} , а не на единичном диске. Заменим в (1.8) переменную, применив к интегралу преобразование Кэли (1.3) к дифференциалу и области интегрирования, получив:

$$\lim_{r \to 1} \int_{C_r} \ln|\det S(k)| \frac{2i}{(k+i)^2} dk = 0$$
 (1.9)

, где C_r — образ $|\zeta|=r$ относительно обратного преобразования Кэли. Для удобства вычислений параметризуем C_r как $C_r=\{R(r)e^{it}+iC(r)\mid t\in[0,2\pi)\}$ (см. 1.5). Для краткости, обозначим:

$$s(k) = |\det S(k)|$$

, и, откинув константы, не влияющие на сходимость/расходимость интеграла, получаем финальную форму критерия, которой и будем пользоваться в дальнейшем:

$$\lim_{r \to 1} \int_{0}^{2\pi} \ln s(R(r)e^{it} + iC(r)) \frac{R}{(R(r)e^{it} + iC(r) + i)^2} dt = 0$$
 (1.10)

Глава 2. Описание реализованного подхода

2.1. Модель резонатора типа «пучок»

2.1.1. Модель исследования

Рассмотрим систему на рис. 2.1. Оператор Шредингера действует как $-\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}$ на ребрах, а в вершинах V_a и V_b находятся δ -образные потенциальные ямы, порождающие граничные условия:

$$\forall i : \psi_i(0) = \psi_L(0)$$

$$\forall i : \psi_i(1) = \psi_R(0)$$

$$\psi'_L(0) - \sum_{i=1}^W \psi'_i(0) = a\psi_L(0)$$

$$-\psi'_R(0) + \sum_{i=1}^W \psi'_i(1) = b\psi_R(0)$$
(2.1)

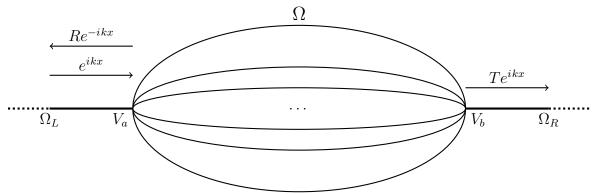


Рис. 2.1: Квантовый граф Γ , состоящий из полубесконечных ребер Ω_L, Ω_R и рассеивателя Ω , представляющего из себя W идентичных ребер длины 1. В вершинах V_a, V_b находятся δ -образные потенциальные ямы глубины a и b соответственно.

2.1.2. Вычисление S-матрицы

После решения системы уравнений 2.1 в сочетании с 1.1, мы получаем:

$$\det S(k) = \frac{W(a+b)k\cos(k) + 2iWk^2\cos(k) + (ia+ib)k\sin(k) - ((W^2+1)k^2 - ab)\sin(k)}{W(a+b)k\cos(k) - 2iWk^2\cos(k) - (ia+ib)k\sin(k) - ((W^2+1)k^2 - ab)\sin(k)}$$

2.1.3. Доказательство полноты резонансных состояний при a=b=0

Для простоты, рассмотрим случай a=0,b=0. После подстановки, получим

$$s(k) = |\det S(k)| = \left| \frac{2i W \cos(k) - (W^2 + 1) \sin(k)}{2i W \cos(k) + (W^2 + 1) \sin(k)} \right|$$
(2.2)

Зафиксируем r, и далее, для улучшения читаемости, определим $C=C(r),\,R=R(r).$ Для каждого такого r, оценим интеграл и покажем, что последовательность оценок стремится к нулю.

Воспользуемся неравенством Коши-Буняковского:

$$\left| \langle u, v \rangle \right| \le \|u\| \, \|v\|$$

, а если точнее, его специализацией на $\mathcal{L}^{2}[a,b]$:

$$\left| \int_{t=a}^{b} f(t)g^{*}(t)dt \right|^{2} \leq \int_{t=a}^{b} |f(t)|^{2}dt \int_{t=a}^{b} |g(t)|^{2}dt$$

Чтобы воспользоваться неравенством, разделим подынтегральное выражение в (1.10) на $f(t)g^*(t)$ следующим образом:

$$a = 0$$

$$b = 2\pi$$

$$f(t) = \ln s(Re^{it} + iC) \frac{\sqrt{R}}{Re^{it} + iC + i}$$

$$g^*(t) = \frac{\sqrt{R}}{Re^{it} + iC + i}$$
(2.3)

Далее будет показано, что $\int |g(t)|^2$ ограничено сверху константой, не зависящей от r, а $\int |f(t)|^2$ стремится к нулю, из чего будет немедленно следовать сходимость интеграла (1.10).

2.1.3.1. Оценка $\int |g(t)|^2$

$$|g(t)|^{2} = |g^{*}(t)|^{2} = \frac{\sqrt{R}^{2}}{|R\cos t + iR\sin t + iC + i|^{2}}$$

$$= \frac{R}{R^{2}\cos^{2}t + (R\sin t + C + 1)^{2}}$$

$$= \frac{R}{R^{2}\cos^{2}t + R^{2}\sin^{2}t + (C + 1)^{2} + 2R(C + 1)\sin t}$$

$$= \frac{1}{R + \frac{(C+1)^{2}}{R} + 2(C + 1)\sin t}$$

Заметим, что:

$$R+\frac{(C+1)^2}{R}-2(C+1)=\frac{R^2+C^2+2C+1-2RC-2R}{R}$$

$$=\frac{(R-C)^2+2(C-R)+1}{R}$$
 > 0 ,так как $C>R$

Интеграл такого типа хорошо известен, и его первообразная при a>b (где $a=R+\frac{(C+1)^2}{R},\ b=2(C+1))$:

$$\int \frac{dx}{a+b\sin x} = \frac{2}{\sqrt{a^2 - b^2}} \operatorname{atan} \frac{a \tan \frac{x}{2} + b}{\sqrt{a^2 - b^2}}$$

Далее, рассмотрим:

$$a^2 - b^2 = (R + \frac{(C+1)^2}{R})^2 - (2(C+1))^2$$

$$= R^2 + \frac{(C+1)^4}{R^2} + 2(C+1)^2 - 4(C+1)^2$$

$$= (R - \frac{(C+1)^2}{R})^2 \qquad ,$$
так как $C > R$

$$\geq (R - \frac{(R+1)^2}{R})^2$$

$$\geq (2 + \frac{1}{R})^2$$

$$\geq 4$$

Чтобы избежать разрыва первообразной в точке π (из-за неопределенности $\tan \pi$), изменим интервал интегрирования на $(-\pi,\pi)$, на котором первообразная непрерывна. Таким образом, можно применить формулу Ньютона-Лейбница, в частности, тот факт, что $\begin{vmatrix} x_2 \\ x_1 \end{vmatrix} f(x) dx \le |F(x_2) - F(x_1)| \le |F(x_1)| + |F(x_2)|.$

Итого, так как $\frac{2}{\sqrt{a^2-b^2}} \leq \frac{2}{2} = 1$, а $|atan\,x|$ ограничен сверху как $\frac{\pi}{2}$, непосредственно применяя вышеупомянутый факт, получаем что весь интеграл ограничен сверху константой π .

2.1.3.2. Оценка $\int |f(t)|^2$

Функция s(k) (2.2) слишком сложна для прямого аналитического доказательства сходимости. Однако, так как s(k) — модуль определителя S-матрицы, в верхней комплексной полуплоскости $0 \le s(k) \le 1$. Это означает, что s(k) может быть заменена на некую оценку снизу l(k), такую что $0 \le l(k) \le s(k)$. После этого, если будет доказана сходимость к нулю для этой нижней оценки, то так как $s(k) \le 1$, $\ln l(k) \le \ln s(k) \le 0$, мы будем иметь $\ln^2 s(k) \le \ln^2 l(k)$, и, следовательно, так как подынтегральное выражение неотрицательно, сходимость искомого интеграла. Мы часто будем опираться на этот факт и проводить подобные замены под знаком логарифма, заменяя сложные функции на кусочно-линейные, и используя известные оценки для логарифма чтобы оценить исходный интеграл.

${f 2.1.3.3.}$ Упрощение функции s(k)

Сначала мы дадим простую оценку для s(k) по всей верней комплексной полуплоскости и сделаем ее независимой от вещественной части аргумента.

Легко видеть, что s(k) периодична относительно вещественной части аргумента при неизменной комплексной части.

У функции s(k) есть счетное число нулей, и для всех ${\rm Im}\, k = {\rm atanh}\, \frac{2W}{W^2+1}.$ Для краткости, дадим обозначения:

$$V = \frac{2W}{W^2 + 1}$$
$$Z = \operatorname{atanh} V$$

Далее, заметим что для любого x, $s(x+iy) \leq s(iy)$. После всех вышеупомянутых замечаний, для s(x+iy) можно дать довольно простую нижнюю оценку:

$$\begin{split} l(x+iy) &= \left| \frac{(W^2+1)\sinh y - 2W\cosh y}{(W^2+1)\sinh y + 2W\cosh y} \right| \\ &= \left| \frac{\tanh y - V}{\tanh y + V} \right| &\qquad \qquad \text{(так как $\cosh y \geq 1\text{)}} \end{split}$$$

Легко понять, что у функции l(k) будут нули вдоль линии $\operatorname{Im} k = Z$, что значит, что вдоль этой линии у функции $\ln l(k)$ будет несчетное множество особенностей. Интуитивно, это не должно испортить сходимость, так как контур интегрирования все равно мог пересечь сингулярность функции $\ln s(k)$. Действительно, далее мы покажем, что даже такое загрубление функции позволяет доказать сходимость. Далее, для краткости записи, будем опускать вещественную часть аргумента и обозначим l(y) = l(x+iy), где x может быть любым, так как l от него все равно не зависит.

После построения нижней оценки можно упростить интеграл, который мы исследуем:

$$\int_{t=0}^{2\pi} |f(t)|^2 dt = \int_{t=0}^{2\pi} \ln^2 l(Re^{it} + iC) \frac{R}{\|Re^{it} + iC + i\|^2} dt$$
$$= \int_{t=0}^{2\pi} \ln^2 l(R\sin t + C) \frac{R}{R^2 \cos^2 t + (R\sin t + C + 1)^2} dt$$

Во-первых, заметим, что:

$$\sin(-\pi/2 + t) = \sin(-\pi/2 - t) = -\cos t$$
$$\cos^2(-\pi/2 + t) = \cos^2(-\pi/2 = t) = \sin^2 t$$

 $\cos^2(-\pi/2+t)=\cos^2(-\pi/2=t)=\sin^2t$, то есть подынтегральное выражение симметрично относительно оси y, и, следовательно, достаточно доказать сходимость интеграла на отрезке $-\pi/2 \le t \le \pi/2$.

Далее, заменим переменную интегрирования:

$$y = R \sin t + C$$

$$t = a \sin \frac{y - C}{R}$$

$$dt = \frac{1}{\sqrt{R^2 - (C - y)^2}} dy$$

$$\cos t = \frac{\sqrt{R^2 - (C - y)^2}}{R}$$

$$y(-\pi/2) = C - R$$

$$y(\pi/2) = C + R$$

, что после подстановки дает:

$$\int_{y=C-R}^{C+R} \ln^2 f(y) \frac{R}{R^2 \cos^2 t + (R \sin t + C + 1)^2} dy$$

$$= \int_{y=C-R}^{C+R} \ln^2 f(y) \frac{R}{R^2 - (C - y)^2 + (y + 1)^2} \frac{1}{\sqrt{R^2 - (C - y)^2}} dy$$

$$= \int_{y=C-R}^{C+R} \ln^2 f(y) \frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C + 1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R + C - y}} \frac{1}{\sqrt{R - C + y}} dy$$
(2.4)

На пути интегрирования присутствуют особенности при y=C-R, $y=Z,\,y=C+R$, и подынтегральное выражение все еще достаточно сложно для непосредственной оценки. Разделим интеграл на несколько сегментов и оценим каждый.

2.1.3.4. Случай **1**:
$$C - R \le y \le Z$$

Очень важным свойством s(k) является ее стремление к 1 при $\operatorname{Im} k$ стремящемся к нулю. Благодаря этому $\ln s(k)$ стремится к нулю, что в свою очередь необходимо чтобы компенсировать сингулярность функции $\frac{1}{R-C+y}$ при y=C-R. Интуитивно, контур интегрирования становится все ближе и ближе к $\mathbb R$ при увеличении радиуса и если бы $\ln s(k)$ не занулялась, сходимость бы пропала. Таким образом, разумная нижняя оценка на s(k) также должна удовлетворять свойству сходимости к 1 при $\operatorname{Im} k$ стремящемся к 0.

Так как l выпукла при $0 \le y \le Z$, она может быть оценена снизу с помощью первой производной в 0. Однако, этого недостаточно, так как это нарушит неотрицательность выражения под знаком логарифма, следовательно, надо быть аккуратнее и оценить снизу функцию в точке Z в том числа, после чего склеить эти две оценки в некой точке Z_0 :

$$f(y) = \begin{cases} l'(0)y + 1 & , 0 \le y < Z_0 \\ l'(Z)(y - Z) & , Z_0 \le y < Z \end{cases}$$
$$= \begin{cases} \frac{-2}{V}y + 1 & , 0 \le y < Z_0 \\ \frac{1}{2V}(V^2 - 1)(y - Z) & , Z_0 \le y < Z \end{cases}$$

Заметим, что в качестве Z_0 можно взять любое число в полуинтервале [C-R,Z) (оценка снизу не обязана быть непрерывной функцией), главное чтобы f(y) была неотрицательно определенной. Для простоты вычислений нам подойдет $Z_0 = \frac{V}{4}$.

Далее, отдельно рассматриваем интегралы на участках $[C-R, \frac{V}{4})$ и $[\frac{V}{4}, Z).$

2.1.3.5.
$$C - R \le y < \frac{V}{4}$$

Посчитаем верхнюю оценку на подынтегральное выражение (2.4). Заметим, что при $C-R \leq y \leq \frac{V}{4}$:

$$\ln^{2} l(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+y}}$$

$$\leq \ln^{2} (1 - \frac{2}{V}y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-Z}} \frac{1}{\sqrt{R-C+y}}$$

,воспользуемся неравенством $\frac{x}{1+x} \leq \ln(1+x)$ для x > -1, где $x = -\frac{2}{V}y$. Так как выражение под логарифмом меньше единицы, получим что

$$\ln^2(1+x) \le \frac{x^2}{(1+x)^2}$$
:

. . .

$$\leq \frac{\frac{4}{V^2}y^2}{(1 - \frac{2}{V}y)^2} \frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R + C - Z}} \frac{1}{\sqrt{R - C + y}}$$

$$\leq \frac{\frac{4}{V^2}y^2}{(1 - \frac{2}{V}\frac{V}{4})^2} \frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R + C - Z}} \frac{1}{\sqrt{R - C + y}}$$

Заметим, что подынтегральное выражение теперь имеет вид $\frac{y^2}{a+by}$, где $a=R^2-C^2+1, b=2(C+1)$, и при достаточно больших R и C, a>0 и b>0. Заметим, что при этом $\frac{y^2}{a+by}$ неотрицательно при y>0, и строго возрастает:

$$\left(\frac{y^2}{a+by}\right)' = \frac{2y}{a+by} + y^2 \frac{-b}{(a+by)^2} = \frac{2y(a+by) - by^2}{(a+by)^2} = \frac{y(2a+by)}{(a+by)^2} \ge 0$$

Следовательно, функцию можно оценить сверху ее значением на правом конце интервала в точке $\frac{V}{4}$, и легко видеть, что:

$$\frac{y^2}{a+by} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{R}\right)$$

Оставшаяся часть интеграла имеет вид:

$$\int_{C-R}^{\frac{V}{4}} \frac{1}{\sqrt{R-C+y}} = 2\sqrt{\frac{V}{4} - C + R} = \mathcal{O}(1)$$

, и в итоге весь интеграл на участке $[C-R,rac{V}{4})$ имеет порядок $\mathcal{O}\left(rac{1}{R}
ight)$.

2.1.3.6.
$$\frac{V}{4} \le y < Z$$

Оценим сверху подынтегральное выражение (2.4). Заметим, что для $\frac{V}{4} \leq y < Z$:

$$\ln^{2} f(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+y}}$$

$$\leq \ln^{2} f(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)\frac{V}{4} + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-Z}} \frac{1}{\sqrt{R-C+\frac{V}{4}}}$$

$$\leq \ln^{2} \left(\frac{1}{2V}(V^{2} - 1)(y - Z)\right) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)\frac{V}{4} + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-Z}} \frac{1}{\sqrt{R-C+\frac{V}{4}}}$$

Функция $\ln^2(x)$ интегрируема в окрестности x=0, и известно что:

$$\int_{x=x_0}^{b} \ln^2(a(x-b))dx = (b-x_0)(\ln^2(a(x_0-b)) - 2\ln(a(x_0-b)) + 2)$$

В нашем случае: $x_0 = \frac{V}{4}$, b = Z, следовательно, $x_0 - b \neq 0$ и определенный интеграл ограничен постоянной, не зависящей от R и C. Таким образом, поведение интеграла зависит только от поведения множителя:

$$\frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C+1)\frac{V}{4} + 1} \frac{1}{\sqrt{R - C + \frac{V}{4}}} \frac{1}{\sqrt{R + C - Z}}$$

Очевидно, что при $r \to \infty$, $R \to \infty$, $C \to \infty$, $R - C \to 0$, и можно легко видеть, что выражение выше принадлежит классу $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{R}})$, и, следовательно, в пределе будет зануляться.

2.1.3.7. Случай 2: y > Z

При y > Z,

$$l(x+iy) = \frac{\tanh y - V}{\tanh y + V} = 1 - 2\frac{V}{\tanh y + V}$$

Так как l вогнута, строго возрастает, и для фиксированного r, нас интересуют только $y \leq C + R$, мы можем оценить функцию линейной:

$$f(y) = \frac{l(C+R)}{C+R-Z}(y-Z)$$

Заметим, что в точке C+R, для начиная с достаточно большого r, функция l(y) с зажата константами, не зависящими от C и R. Это легко понять так как $\tanh y$ на бесконечности уходит к 1, соответственно, l(y) в пределе будет равно $1-\frac{2V}{V+1}$. Это является довольно важным свойством данного квантового графа, если бы l на бесконечности устремлялась к нулю, эта часть доказательства не могла бы быть проведена (см. разд. 2.2).

В начале заметим, что на всем участке $Z \leq y \leq R + C$ у функции $\frac{1}{\sqrt{R-C+y}}$ нет сингулярности, и подынтегральное выражение (2.4) можно оце-

нить как:

$$\ln^{2} f(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+y}} \\
\leq \ln^{2} f(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}} \tag{2.5}$$

Чтобы оценить это выражение, разделим интеграл на интервалы $[Z,Z+\frac{1}{R}),\,[Z+\frac{1}{R},C),\,[C,C+R].$

2.1.3.8.
$$Z \le y < Z + \frac{1}{R}$$

Оценим сверху выражение (2.5):

$$\ln^2 f(y) \frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}}$$

$$\leq \ln^2 f(y) \frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C+1)Z + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-(Z+\frac{1}{R})}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}}$$

 $\int\limits_{Z}^{Z+rac{1}{R}} \ln^2 f(y) dy$ легко вычислить явно, используя:

$$\int_{b}^{b+c} \ln^2(a(x-b))dx = c(\ln^2(ac) - 2\ln(ac) + 2)$$

Таким образом, $\int\limits_{Z}^{Z+\frac{1}{R}} \ln^2 f(y) dy = \frac{1}{R} (\ln^2 (\frac{l(C+R)}{C+R-Z} \frac{1}{R}) - 2 \ln \left(\frac{l(C+R)}{C+R-Z} \frac{1}{R}\right) + 2).$ Так как l(C+R) ограничена константами, не зависящими от r, раскрывая

логарифмы, легко можно понять что выражение принадлежит классу $\mathcal{O}(\frac{\ln^2 R}{R})$. Учитывая что коэффициент перед интегралом:

$$\frac{R}{R^2 - C^2 + 2(C+1)Z + 1} \frac{1}{\sqrt{R + C - (Z + \frac{1}{R})}} \frac{1}{\sqrt{R - C + Z}}$$

, очевидно, имеет порядок $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{R}}\right)$, очевидно что интеграл на данном интервале стремится к нулю при $R,C\to\infty$.

2.1.3.9.
$$Z + \frac{1}{R} \le y < C$$

Оценим сверху выражение (2.5):

$$\ln^{2} f(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}}$$

$$\leq \ln^{2} f(Z+\frac{1}{R}) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-C}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}}$$

Первообразная для функции подобного вида широко известна:

$$\int \frac{1}{ax+b} = \frac{\ln(ax+b)}{a}$$

, где в нашем случае $a=2(C+1),\,b=R^2-C^2+1.$ Применяя формулу Ньютона-Лейбница для интервала $(Z+\frac{1}{R},C),$ получим:

$$\frac{\ln \frac{2(C+1)C+R^2-C^2+1}{2(C+1)(Z+\frac{1}{R})+R^2-C^2+1}}{2(C+1)} = \mathcal{O}\left(\frac{\ln R}{R}\right)$$

При стремлении R к бесконечности, $\ln^2 f(Z+\frac{1}{R})$ будет также стремиться к бесконечности, поэтому необходимо оценить порядок особенности. Так как $\ln f(Z+\frac{1}{R}) = \ln \left(\frac{l(C+R)}{C+R-Z}\frac{1}{R}\right) = \ln l(C+R) - \ln(C+R-Z) - \ln R$, легко видеть что $\ln^2 f(Z+\frac{1}{R}) = \mathcal{O}(\ln^2 R)$.

В результате, комбинируя все оценки, получаем: $\mathcal{O}(\ln^2 R)\mathcal{O}\left(\frac{\ln R}{R}\right)\frac{R}{\sqrt{R}}\frac{1}{\sqrt{R-C+Z}} = \mathcal{O}\left(\frac{\ln^3 R}{\sqrt{R}}\right), \text{ что означает что интеграл на этом участке стремится к 0 с увеличением } r.$

2.1.3.10.
$$C \le y \le C + R$$

Оценим сверху выражение (2.5):

$$\ln^{2} f(y) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)y + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}}$$

$$\leq \ln^{2} f(C) \frac{R}{R^{2} - C^{2} + 2(C+1)C + 1} \frac{1}{\sqrt{R+C-y}} \frac{1}{\sqrt{R-C+Z}}$$

Интеграл $\frac{1}{\sqrt{R+C-y}}$ от C до C+R тривиален и равен $2\sqrt{R}$. Функция f в точке C ограничена константами не зависящими от R и C, следовательно, и квадрат ее логарифма. Очевидно, что в результате получим выражение $\mathcal{O}\left(\frac{1}{R}\right)\sqrt{R}=\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{R}}\right)$.

2.1.3.11. Оценка $\int \left| f(t) \right|^2$: итог

Итого, мы разбили интегрирование на пять различных участков, и в итоге имеем порядок интеграла:

$$\mathcal{O}\left(\frac{1}{R}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{R}}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{R}}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{\ln^3 R}{\sqrt{R}}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{R}}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\ln^3 R}{\sqrt{R}}\right)$$

, что означает, что весь интеграл уходит в 0 при стремлении r к 1 (соответственно, R к бесконечности), что и требовалось доказать.

2.2. МОДЕЛЬ РЕЗОНАТОРА ТИПА «КОЛЬЦО»

2.2.1. Модель исследования

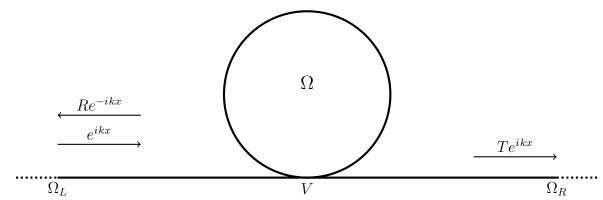


Рис. 2.2: Квантовый граф Γ , состоящий из полубесконечных ребер Ω_L, Ω_R и рассеивателя Ω , представляющего из себя окружность длиной 1. В вершине V установлена δ -образная потенциальная яма глубиной a.

Мы рассматриваем случай рассеяния волны с волновым вектором k, приходящей слева направо. Таким образом, волновые функции на различных частях графа принимают следующий вид:

$$\psi_L(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$\psi_R(x) = Te^{ikx}$$

$$\psi_{\Omega}(x) = P\sin(kx) + Q\cos(kx)$$
(2.6)

, где R и T — коэффициенты отражения и прохождения волны. Так как граф симметричен, его матрица рассеяния принимает вид $S(k) = \begin{pmatrix} R(k) & T(k) \\ T(k) & R(k) \end{pmatrix}.$

В вершине V мы ставим δ -образную потенциальную яму высотой a, которая порождает следущие граничные условия:

$$\psi_L(0) = \psi_R(0) = \psi_{\Omega}(0) = \psi_{\Omega}(1)$$

$$-\psi'_L(0) + \psi'_{\Omega}(0) - \psi'_{\Omega}(1) + \psi'_R(0) = a\psi_L(0)$$
(2.7)

2.2.2. Вычисление S-матрицы

Определим коэффициенты прохождения и отражения, подставив функции (2.6) в (2.7) и решив систему линейных уравнений:

$$1 + R = T$$

$$1 + R = Q$$

$$Q \cos k + P \sin k = T$$

$$-Pk \cos k + Qk \sin k + Pk + iRk + iTk - ik = Ta$$

Решив систему, получаем:

$$R(k) = -\frac{2k\cos(k) + a\sin(k) - 2k}{2k\cos(k) + (a - 2ik)\sin(k) - 2k}$$
$$T(k) = -\frac{2ik\sin(k)}{2k\cos(k) + (a - 2ik)\sin(k) - 2k}$$

, подставляя полученные значения коэффициента прохождения и отражения в S-матрицу, получаем определитель S-матрицы в замкнутой форме:

$$\det S = \frac{\cos\left(k\right) + \left(\frac{a}{2k} + i\right)\sin\left(k\right) - 1}{\cos\left(k\right) + \left(\frac{a}{2k} - i\right)\sin\left(k\right) - 1} \tag{2.8}$$

2.2.3. Доказательство неполноты резонансных состояний при a=0

Рассмотрим случай a=0:

$$\det S = \frac{\cos(k) + i\sin(k) - 1}{\cos(k) - i\sin(k) - 1} = \frac{e^{ik} - 1}{e^{-ik} - 1} = -e^{ik}$$

Из выражения выше легко заметить, что подынтегральное выражение в критерии полноты (1.8) сводится к $\ln |\det S| = \ln e^{-\operatorname{Im} k} = -\operatorname{Im} k$. Вычислим интеграл в пространстве единичного диска, для этого применим обратное преобразование Кэли (1.4), к подынтегральной функции: $\operatorname{Im} k \to \operatorname{Im} \left(i \frac{1+\zeta}{1-\zeta}\right)$.

$$\lim_{r=1} \int_{|\zeta|=r} \ln|\det S(\zeta)| d\zeta = \lim_{r=1} \int_{|\zeta|=r} \operatorname{Im}\left(i\frac{1+\zeta}{1-\zeta}\right) d\zeta = \dots$$

, параметризуем контур интегрирования полярными координатами: $\zeta \to r e^{i\varphi}, d\zeta \to r i e^{i\varphi}.$

$$\cdots = \lim_{r=1} \int_{|\zeta|=r} \operatorname{Im} \left(i \frac{1 + re^{i\varphi}}{1 - re^{i\varphi}} \right) rie^{i\varphi} d\varphi$$

Комплексный интеграл складывается из сумм интегралов действительной и мнимой части подынтегрального выражения. Рассчитаем мнимую часть:

$$\begin{split} \operatorname{Im}\left(\operatorname{Im}\left(i\frac{1+re^{i\varphi}}{1-re^{i\varphi}}\right)rie^{i\varphi}\right) \\ &= r\operatorname{Re}\left(\operatorname{Re}\left(\frac{1+re^{i\varphi}}{1-re^{i\varphi}}\right)e^{i\varphi}\right) \\ &= r\operatorname{Re}\left(\frac{1+re^{i\varphi}}{1-re^{i\varphi}}\right)\operatorname{Re}\left(e^{i\varphi}\right) \\ &= r\operatorname{Re}\left(\frac{(1+re^{i\varphi})(1-re^{-i\varphi})}{(1-re^{i\varphi})(1-re^{-i\varphi})}\right)\cos\varphi \\ &= r\operatorname{Re}\left(\frac{1-r^2+2ir\sin\varphi}{1+r^2-2r\cos\varphi}\right)\cos\varphi \\ &= r\frac{1-r^2}{1+r^2-2r\cos\varphi}\cos\varphi \end{split}$$

Интегрируя, получаем $2\pi r^2$, что значит, что предел мнимой части при $r\to 1$ равен 2π , следовательно, по критерию полноты, система резонансных состояний графа Γ не является полной на кольце Ω .

2.2.4. Исследование полноты при $a \neq 0$

При $a \neq 0$, определитель S-матрицы (2.8), и его нули имеют гораздо более сложную структуру, и не выразимы аналитически, что затрудняет исследование полноты. Однако, этот случай интересен тем, что при сколь угодно малом a, система резонансных состояний будет полна, что является

качественным отличием от случая a=0, в частности, это означает что исследуя кольцо как подграф некого квантового графа, мы не можем перейти к пределу a=0, постепенно уменьшая a, ведь мы можем потерять свойство полноты.

Полнота в этом случае была исследована разбиением интеграла на две части пользуясь неравенством Коши-Буняковского, аналогично 2.3, а далее проанализирована сходимость с помощью численного интегрирования. Его результаты приведены на рис. 2.3 и рис. 2.4, а программа, проводящая интегрирование прикреплена в гл. А.

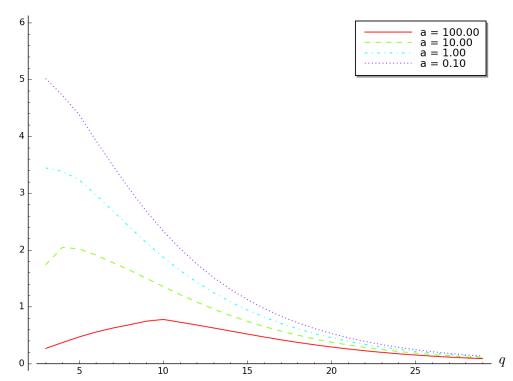


Рис. 2.3: Зависимость результата численного интегрирования выражения 2.3 при различных ненулевых a, где $r=1-2^{-q}$. Можно наблюдать тенденцию к сходимости интегралов.

Можно интуитивно обосновать, почему интеграл сходится. Рассмотрим $\det S(iy)$ при большом y, в этому случае получаем:

$$\det S(iy) = \frac{e^{iiy} + \frac{a}{2iy} \frac{e^{iiy} + e^{-iiy}}{2i} - 1}{e^{-iiy} + \frac{a}{2iy} \frac{e^{iiy} + e^{-iiy}}{2i} - 1}$$
$$= \frac{e^{-y} - \frac{a}{4y} (e^{-y} + e^{y}) - 1}{e^{y} - \frac{a}{4y} (e^{-y} + e^{y}) - 1}$$

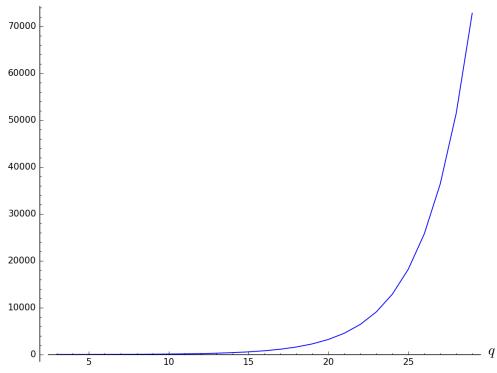


Рис. 2.4: Зависимость результата численного интегрирования выражения 2.3 при a=0, где $r=1-2^{-q}$. Можно наблюдать тенденцию к расходимости интеграла.

, так как $e^{-y} \to 0$, $ye^{-y} \to 0$, легко видеть, что выражение выше будет иметь порядок $\frac{a}{y}$, и, соответственно, его логарифм — порядок $\ln y$, что является принципиальным отличием от случая a=0, когда порядок логарифма был y (см. разд. 2.2.3). Однако, строгое обоснование данного факта требует более тщательного анализа.

Заключение

В работе исследовано поведение системы резонансных состояний различных квантовых графов, в частности, аналитически исследован вопрос полноты. Резонансные состояния таких систем сложно получить в явном виде, и соответственно, доказать полноту системы напрямую. Данная работа отличается новизной, так как ранее подобное исследование было проведено только для двух простейших моделей резонаторов [5].

В разд. 2.1 была доказана полнота резонансных состояний для квантового графа сложной формы. Выработанный подход к доказательству может быть обобщен и использован для доказательства полноты для других граничных условий и квантовых графов.

В разд. 2.2 было показано качественно различное поведение, казалось бы, похожих моделей и показано что полнота системы может быть потеряна в ходе непрерывной трансформации квантового графа и его граничных условий. Это является весьма важным свойством, которое означает что исследование полноты системы резонансных состояний сложного квантового графа не всегда может быть легко сведено к исследованию полноты для более простого квантового графа, полученного, например, стягиванием ребер исходного, и возможно, для исследования полноты произвольного квантового графа необходим некий сложный шаг индукции, если не другой подход. Также заметим, что в произвольном квантовом графе ребра могут соединять либо две разные вершины, либо быть петлей, что и является резонатором типа «кольцо», исследованным в данной работе.

Некоторые из результатов работы были опубликованы в [12] и приняты для презентации презентацию на конференции [13].

Проведенное исследование является важной подзадачей в более общей задаче нахождения пространства, в котором резонансные состояния квантового графа будут образовывать полную систему.

Естественным продолжением данной работы может являться иссле-

дование полноты системы резонансных состояний при других граничных условиях в точке соединения резонатора и волновода.

Список литературы

- 1. Rayleigh L. The theory of the Helmholtz resonator // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. 1916. No.638. Pp. 265–275.
- 2. Lax P. D., Phillips R. S. Scattering theory. Vol. 26. Academic press, 1990.
- 3. Adamjan V., Arov D. On a class of scattering operators and characteristic operator-functions of contractions / Dokl. Akad. Nauk SSSR. Vol. 160. No.1. 1965. Pp. 9–12.
- 4. Reed M., Simon B. Methods of Modern Mathematical Physics: Functional analysis. Methods of Modern Mathematical Physics no.v. 1. Academic Press, 1980. ISBN: 9780125850506.
- 5. Popov A. I. Quantum graph model of Helmholtz resonator / Spectral Theory and Applications: conference in memory of Boris Pavlov, Book of Abstracts. 2016. P. 15.
- 6. Perelomov A. M., Zel'dovich Y. B. Quantum mechanics: selected topics. World Scientific, 1998.
- 7. $Kuchment\ P.$ Graph models for waves in thin structures // Waves in Random Media. 2002. No.4. R1–R24.
- 8. Lobanov I., Trifanov A., Trifanova E. Genetic algorithm for constructing graphene nanoribbon with given electronic transport properties // Nanosystems: Phys. Chem. Math. 2013.
- 9. Brown B., Exner P., Kuchment P., Sunada T. Analysis on Graphs and its Applications // Month. 2010.
- 10. Lax P. D., Phillips R. S. A scattering theory for automorphic functions // Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique). 1976. Pp. 1–7.
- 11. Nikol'skii N. K. Treatise on the shift operator: spectral function theory. Vol. 273. Springer Science & Business Media, 2012.
- 12. *Герасимов Д. А.* Неполнота системы резонансных функций для резонатора-кольца / Труды студенческого центра прикладных математических исследований. под ред. Бойцева А. А. Попова И. Ю. Правдиной К. В. Университет ИТМО, 2016. с. 22—25.
- 13. Gerasimov D. A., Popov I. Y., Popov A. I. Resonant states for quantum ring with two infinite leads. Days on Diffraction. 2016. http://www.pdmi.ras.ru/~dd/index.php.

Приложения

Приложение А

Исходный код программы для численного интегрирования

Листинг А.1: Исходный код программы для численного интегрирования (см. разд. 2.2). Программа реализована в математическом пакете Sage версии 7.0.

```
from numpy import arange
def cvar(name):
    return var(name, domain=CC)
def rvar(name):
    return var(name, domain=RR)
def icayley(z):
    return i * (1 + z) / (1 - z)
def cayley(z):
    \texttt{return} \ (\texttt{z} \ - \ \texttt{i}) \ / \ (\texttt{z} \ + \ \texttt{i})
def my_numerical_integral(expr, x, ff, tt):
    f = fast_callable(expr, vars=[x], domain=CC)
    res, err = numerical_integral(f, ff, tt)
    if err > 0.1:
        raise RuntimeError("Error is too large")
    return res
k = cvar('k')
R, t = rvar('R'), rvar('t')
x, y = rvar('x'), rvar('y')
CCC(r) = ((icayley(r) + icayley(-r)) / 2).imag()
RRR(r) = ((icayley(r) - icayley(-r)) / 2).imag()
def plot_all(lines):
    p = sum(lines)
    p.set_legend_options(handlelength=5)
    p.axes_labels(['$q$', ''])
def test_convergence(s, color='blue', style=',', label=','):
    rs = []
ints = []
    for q in range(3, 30, 1):
        r = 1 - 2 ^ (-q)
        rr = RRR(r=r).n()
        cc = CCC(r=r).n()
        f = ln(s(k=rr * exp(i * t) + cc * i)) * sqrt(rr) / (rr * exp(i * t) + cc * i + i)
        g = sqrt(rr) / (rr * exp(i * t) + cc * i + i)
        int_f = my_numerical_integral(norm(f), t, 0, 2 * pi)
```

```
int_g = my_numerical_integral(norm(g), t, 0, 2 * pi)

rs.append(q)
    ints.append(sqrt(int_f * int_g))
    print("F_u=u" + str(int_f))

return line(zip(rs, ints), rgbcolor=color, linestyle=style, legend_label=label)

a_values = [100, 10, 1, 0.1]
a_zero = 0.0

a = rvar('a')
s = abs((cos(k) + (a / (2 * k) + i) * sin(k) - 1) / (cos(k) + (a / (2 * k) - i) * sin(k) - 1))

plots = []
for aa, color, style in zip(a_values, rainbow(len(a_values)), ['-', '--', '--', ':']):
    label = "a_u=u {:.2f}".format(float(aa))
    plots.append(test_convergence(s(a=aa), color=color, style=style, label=label))

plot_all(plots).save('plots_converging.png', ymin=0, ymax=6, dpi=150)
plot_all([test_convergence(s(a=a_zero))]).save('plots_diverging.png', ymin=0, dpi=150)
```