На правах рукописи

ФЛОРИНСКИЙ Вячеслав Владимирович

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В КЛАССИЧЕСКОМ И КВАНТОВОМ ПОДХОДАХ

05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Белгород 2009

Работа выполнена в Белгородском государственном университете

Научный руководитель	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник **Чеканов Николай Александрович**
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор **Брусенцев Александр Григорьевич** доктор физико-математических наук, профессор **Блажевич Сергей Владимирович**
Ведущая организация	**Российский университет дружбы народов**

Защита состоится 19 марта в 16.00 часов на заседании диссертационного совета Д. 212.015.04 при Белгородском государственном университете, по адресу: 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14, ауд. 322.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Белгородского государственного университета

Автореферат разослан «   » февраля 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат физико-математических наук, доцент В.А. Беленко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Многие задачи квантовой механики, прикладной математики, техники приводят к уравнениям, в которых требуется найти собственные значения и собственные функции различных линейных операторов. К таким уравнениям относится, в первую очередь, нерелятивистское уравнение Шрёдингера.

В данной работе предложены новые способы решения задачи на собственные значения некоторых дифференциальных операторов, описывающих одномерные ангармонические осцилляторы. Ангармонический осциллятор – это колебательная система, в которой присутствует внешняя сила. Такие модели широко используются, например, в квантовой механике (задача о поведении частицы во внешнем поле), в химии (исследование периодических реакций, управление химическими реакциями с заданным выходом реагента), в технике (управление хаосом в микросистемах и др.).

В этих и других приложениях важнейшее значение имеет спектр и собственные функции дифференциального оператора, являющегося моделью исследуемой системы. Они определяют некоторые инвариантные характеристики системы, сохраняющиеся (за исключением масштабирования) при изменении входных параметров. В частности, спектр оператора, входящего в уравнение Шрёдингера, определяет все возможные значения полной энергии системы, а его собственные функции являются волновыми функциями исследуемой системы. Поэтому нахождение собственных значений и собственных функций, в том числе, операторов ангармонических осцилляторов, т.е. решение уравнения Шрёдингера, является важной задачей.

В большинстве случаев невозможно найти аналитическое решение уравнения Шрёдингера, представимое в явном виде, что наиболее целесообразно. Решения, полученные в неявном виде или выраженные через специальные функции, зачастую оказываются неудобными для использования в конкретных практических расчетах. Поэтому в таких случаях применяются различные приближенные методы, как численные, так и аналитические.

К наиболее разработанным из таких методов относится метод диагонализации. Однако для достижения достаточной точности этот метод приводит к необходимости диагонализации матриц очень большой размерности, что требует увеличения вычислительных возможностей ЭВМ и влечет рост времени вычислений. Кроме того, точность рассчитываемых собственных значений сильно падает при усложнении потенциальной функции и при наличии неустойчивости решений в исследуемой динамической системе.

Указанные недостатки можно частично устранить, если использовать аналитически-численные методы, в которых сначала выполняются аналитические преобразования исследуемой модели, а затем на основе полученных формул производятся численные расчеты. Для выполнения как аналитических, так и численных этапов решения задачи целесообразно использовать пакеты символьных преобразований – системы компьютерной алгебры (Maple, Reduce, Mathematica и др.).

Таким образом, разработка новых методов, в особенности аналитически-численных, реализация этих методов в виде программ с использованием современных систем компьютерной алгебры, и их дальнейшее применение для исследования ряда практически важных математических моделей классической и квантовой механики, является актуальной проблемой математического моделирования динамических систем.

В диссертационной работе предложены новые методы решения задачи на собственные значения для дифференциальных операторов, являющихся математическими моделями квантовых одномерных ангармонических осцилляторов с нелинейностью полиномиального типа. Разработаны алгоритмы, реализованные в виде программ в средах Maple и Reduce, с помощью которых проведены исследования конкретных моделей указанных динамических систем с заданными потенциальными функциями.

Цель диссертационной работы состоит в разработке эффективных аналитически-численных методов, алгоритмов и программ для вычисления спектров и собственных функций дифференциальных операторов одномерных ангармонических осцилляторов на основе получения для них аналитических соотношений с использованием современных средств компьютерной алгебры, а также проведение с помощью разработанных методов и программ численных исследований ряда математических моделей классической и квантовой механики.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе сформулированы и решены следующие **задачи**.

1. Разработка методов получения аналитических соотношений для собственных значений дифференциальных операторов одномерных ангармонических осцилляторов с одним и двумя минимумами в потенциальной функции в удобной для вычислений форме на основе:

а) полуклассического подхода с использованием метода Линдштедта-Пуанкаре и правила Бора-Зоммерфельда;

б) метода классических и квантовых нормальных форм Деприт-Хори и правила Вейля;

в) непосредственного интегрирования уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов.

2. Разработка программно-алгоритмической поддержки символьных преобразований и вычислений в соответствии с указанными методами на основе средств компьютерной алгебры.

3. Провести апробацию разработанных методов и программ путем решения следующих задач:

а) нахождение классических траекторий одномерных ангармонических осцилляторов, потенциальная функция которых имеет один минимум и различные степени нелинейности, на основе метода Линдштедта-Пуанкаре;

б) получение приближенной аналитической формулы спектра указанных динамических моделей с использованием найденных классических траекторий и правила Бора-Зоммерфельда;

в) приведение классического аналога исследуемого оператора к квантовой нормальной форме Деприт-Хори на основе классической нормальной формы;

г) получение приближенной аналитической формулы спектра операторов одномерных ангармонических осцилляторов с одним и двумя симметричными минимумами в потенциальной функции на основе найденной квантовой нормальной формы Деприт-Хори и правила Вейля;

д) получение спектров и собственных функций указанных систем путем непосредственного интегрирования уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов.

Методы исследований: преобразование математических моделей, методы теории дифференциальных операторов, теории обыкновенных дифференциальных уравнений, математического анализа, методы теоретической и математической физики, метод нормальных форм, методы компьютерной алгебры и вычислительной математики.

Научную новизну работы составляют:

1) методы аналитических преобразований в задаче вычисления собственных значений дифференциальных операторов для уравнения Шрёдингера на основе метода Линдштедта-Пуанкаре, метода нормальных форм, правила Бора-Зоммерфельда, правила Вейля и непосредственного интегрирования уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов;

2) алгоритмы символьных преобразований и вычисления собственных значений и собственных функций операторов одномерных ангармонических осцилляторов с полиномиальной потенциальной функцией, имеющей один или два симметричных минимума, на основе средств компьютерной алгебры;

3) результаты применения предложенных методов:

а) на основе метода Линдштедта-Пуанкаре найдено представление для решения уравнения

$$y'' + p(x,\alpha)y' + q(x,\alpha)y = 0,$$

где $q(x,\alpha)$ – некоторый полином относительно x, а α – малый параметр;

б) с помощью правила Бора-Зоммерфельда и найденных указанным методом классических траекторий ангармонических осцилляторов с потенциалами четвертой, шестой и восьмой степенями нелинейности получены формулы для их спектров в явном виде;

в) с помощью метода нормальных форм Деприт-Хори и при помощи степенных рядов решены одномерные уравнения Шрёдингера для ангармонических осцилляторов с четвертой, шестой и восьмой степенями нелинейности, включая симметричный ангармонический осциллятор с двумя локальными минимумами.

Практическая значимость результатов. Результаты данного исследования могут быть использованы для исследования динамики нелинейных классических гамильтоновых систем и для нахождения спектра и собственных функций их квантовых аналогов. Практическую полезность составляют программные реализации предложенных методов в среде Maple. Они могут применяться для получения приближенного решения обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений с малым параметром методом Линдштедта-Пуанкаре и последующего нахождения приближенной аналитической формулы спектра соответствующего оператора по правилу Бора-Зоммерфельда. Результаты диссертационной работы можно использовать для получения квантовых нормальных форм Деприт-Хори и спектров одномерного уравнения Шрёдингера в случае различных полиномиальных потенциалов и для решения задачи на собственные значения и нахождения волновых функций в виде степенных рядов, а также в учебном процессе при выполнении курсовых и дипломных работ.

Положения, выносимые на защиту:

1. Новый метод символьно-численного решения одномерного уравнения Шрёдингера с полиномиальными потенциальными функциями, имеющими один локальный минимум на основе метода Линдштедта-Пуанкаре и правила Бора-Зоммерфельда.

2. Способ приближенного решения уравнения Шрёдингера на основе классических нормальных форм Деприт-Хори и полученные этим способом аналитические формулы для спектров ангармонических осцилляторов с потенциальными функциями четвертой, шестой и восьмой степени нелинейности.

3. Приближенные аналитические формулы спектра одномерных ангармонических осцилляторов, имеющих потенциальную функцию с двумя локальными минимумами, полученные с помощью разработанных символьно-численных программ на основе метода нормальных форм Деприт-Хори, а также на основе непосредственного решения уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов.

Обоснованность и достоверность полученных результатов обусловлена непротиворечивостью полученных результатов теоремам и положениям теории дифференциальных уравнений и операторов, корректностью математических выкладок, воспроизведением известных результатов, полученных другими методами и другими авторами.

Апробация результатов. Основные результаты диссертационной работы докладывались на конференциях: объединенный семинар по вычислительной и прикладной математике ЛИТ и по компьютерной алгебре ВМК и НИИЯФ МГУ, (Дубна, 23-24 мая, 2006); «VIII Международная конференция по математическому моделированию» (Феодосия, 12-16 сентября 2006); «Гагаринские чтения 2006» (Москва, 8-11 апреля 2006); «Современные проблемы математики и её приложения в естественных науках и информационных технологиях» (Харьков, 23-25 марта 2007); IV Международный семинар «Физико-математическое моделирование систем» (Воронеж, 26-27 ноября 2007); Всероссийская конференция по проблемам математики, информатики, физики и химии (Москва, РУДН, 21-25 апреля 2008); Международная конференция по математическому моделированию, МКММ – 2008 (15-20 сентября 2008 года, Херсон, Украина, Херсонский национальный технический университет), а также на семинарах кафедры математического анализа БелГУ.

Связь с научными программами, планами и темами. Диссертационная работа выполнена в рамках индивидуального плана подготовки аспиранта по направлению «Нелинейные явления в динамических системах и их физические приложения», утвержденного Ученым советом БелГУ от 3.11.2000 и в соответствии с планами НИР кафедры математического анализа БелГУ, а также в рамках проекта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 03-02-16263).

Личный вклад соискателя. Все представленные в диссертационной работе результаты получены либо лично соискателем, либо при его непосредственном участии.

Публикации. Основное содержание диссертационной работы отражено в 12 публикациях в виде статей (из которых две в журналах из списка ВАК РФ) в специализированных журналах, в сборниках трудов всероссийских и международных конференций. Программа LINDA по теме диссертационного исследования зарегистрирована в Отраслевом Фонде Алгоритмов и Программ.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы из 120 наименований, 12 таблиц, 7 рисунков и пяти приложений. Содержание работы изложено на 130 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность, сформулированы цели и задачи диссертационной работы, а также методы исследования. Приведены основные положения, выносимые на защиту, раскрыта научная новизна и практическая значимость работы, отмечена апробация результатов.

Первая глава посвящена новому методу нахождения спектра одномерных гамильтоновых систем на основе метода Линдштедта-Пуанкаре (А. Найфэ, 1976).

В разделе 1.1 изложены общие основы метода Линдштедта-Пуанкаре. Данный метод представляет собой модификацию метода малого параметра, впервые предложенного Пуанкаре. Суть его состоит в том, что решение дифференциального уравнения

$$\ddot{x}+\omega^2 x=\varepsilon f(x,\dot{x})$$

ищется в виде степенных разложений

$$x\equiv x(t,\varepsilon)=\sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon^k x_k(t),$$

$$t=\tau(1+\varepsilon\omega_1+\varepsilon^2\omega_2+\ldots), \qquad (1)$$

где ε – малый параметр ($0<\varepsilon \ll 1$), неизвестная функция $x=x(t)$ зависит от временной переменной t, $f(x,\dot{x})$ – непрерывная функция своих аргументов, а $\omega_1,\omega_2,\ldots$ – постоянные, соответствующим выбором которых можно избавиться от секулярных (т.е. неограниченно растущих со временем) членов ряда.

Данный ряд необходимо подставить в решаемое уравнение и, приравняв коэффициенты при одинаковых степенях ε, получить систему рекуррентных дифференциальных уравнений, из которой находятся неизвестные функции $x_k(t)$. Уравнение, получаемое заменой (1), решается методом малого параметра, причем коэффициенты при секулярных членах приравниваются к нулю, и из этих условий находятся значения $\omega_1,\omega_2,\ldots$.

Раздел 1.2 посвящен решению уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}_\mu\psi(x)=E\psi(x), \qquad (2)$$

в котором оператор $\hat{H}_\mu$ определен формулой

$$\hat{H}_\mu=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}x^2+\alpha x^\mu, \qquad (3)$$

где $0<\alpha \ll 1$ – параметр, x – пространственная координата, зависящая от новой переменной τ (1), $\mu=4,6,8$ – степень нелинейности.

Для решения задачи на собственные значения оператора (3) в работе используется так называемый полуклассический подход. Вначале рассматривается классическая система, соответствующая квантовому оператору $\hat{H}_\mu$, которая описывается гамильтоновой функцией

$$H_\mu(x,\ p)=\frac{p^2}{2}+\frac{x^2}{2}+\alpha x^\mu. \qquad (4)$$

Классические траектории системы (4) находятся из системы уравнений движения Гамильтона, которая сводится к одному дифференциальному уравнению второго порядка (известному как уравнение Дюффинга) и интегрируется методом Линдштедта-Пуанкаре. Для решения этой задачи составлена программа LINDA в среде Maple. Входными данными для нее являются степень нелинейности μ потенциальной функции (4) и N – порядок искомого решения по малому параметру. Например, для случая $\mu=4$ и $N=7$ решение имеет вид

$$x_{\mu=4}(t)=A\cos(t-t_0)+\alpha\left(A\cos(t-t_0)+\frac{1}{8}A^3\cos(3(t-t_0))\right)+$$

$$+\alpha^2\left(A\cos(t-t_0)+\left(-\frac{21}{64}A^5+\frac{3}{8}A^3\right)\cos(3(t-t_0))+\frac{1}{64}A^5\cos(5(t-t_0))\right)+$$

$$+\alpha^3\left(A\cos(t-t_0)+\left(\frac{417}{512}A^7-\frac{105}{64}A^5+\frac{3}{4}A^3\right)\cos(3(t-t_0))+\right.$$

$$\left.+\left(-\frac{43}{512}A^7+\frac{5}{64}A^5\right)\cos(5(t-t_0))+\frac{1}{512}A^7\cos(7(t-t_0))\right)+$$

$$+\alpha^4\left(\left(\frac{7}{512}A^7-\frac{65}{4096}A^9\right)\cos(7(t-t_0))+\frac{1}{4096}A^9\cos(9(t-t_0))+\right.$$

$$+A\cos(t-t_0)+\left(\frac{2919}{512}A^7-\frac{7797}{4096}A^9+\frac{5}{4}A^3-\frac{315}{64}A^5\right)\cos(3(t-t_0))+$$

$$\left.+\left(\frac{15}{64}A^5-\frac{301}{512}A^7+\frac{335}{1024}A^9\right)\cos(5(t-t_0))\right)+\alpha^5\left(\frac{1}{32768}A^{11}\cos(11(t-t_0))+\right.$$

$$+\left(\frac{7}{128}A^7-\frac{585}{4096}A^9+\frac{2747}{32768}A^{11}\right)\cos(7(t-t_0))+\frac{1}{4096}A^9\cos(9(t-t_0))+A\cos(t-t_0)+$$

$$+\left(\frac{2919}{128}A^7-\frac{70173}{4096}A^9+\frac{15}{8}A^3-\frac{735}{64}A^5+\frac{136113}{32768}A^{11}\right)\cos(3(t-t_0))$$

$$\left.+\left(\frac{35}{64}A^5-\frac{301}{128}A^7+\frac{3015}{1024}A^9-\frac{35853}{32768}A^{11}\right)\cos(5(t-t_0))\right)+\ldots,$$

где A и t_0 – постоянные интегрирования.

Результаты для других значений μ более подробно приведены в диссертационной работе.

В разделе 1.3 описано решение задачи на собственные значения оператора (3) на основе полученных классических траекторий по известному правилу квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\frac{1}{2\pi}\oint p\,dx=n+\frac{m}{4}, \tag{5}$$

где p – классический импульс ($p=\dot{x}$), $n=0,1,2,\ldots$, m – индекс Маслова, который в рассматриваемой задаче равен двум. После возвращения к старой переменной τ по формуле (1) данное условие квантования примет вид:

$$\frac{2}{\pi}\int_0^{\frac{T}{4}}\left(x'(\tau)\right)^2 d\tau=n+\frac{1}{2},\qquad n=0;1;2;\ldots,$$

где T – период колебаний. Левая часть этого выражения представляет собой полином относительно E – полной энергии системы. Чтобы получить указанный полином в явном виде, необходимо найденное классическое решение выразить через E. Для этого воспользуемся физическим смыслом постоянных интегрирования A и t_0: положим начальную фазу t_0 равной 0, а амплитуду колебаний A выразим через полную энергию системы. В точках поворота кинетическая составляющая энергии равна нулю, поэтому полная энергия системы будет равна потенциальной

$$\frac{x^2(0)}{2}+\alpha\, x^{\mu}(0)=E\ .$$

Подставив в это выражение полученные классические траектории, разрешим его относительно A методом итераций. Для случая $\mu=4$ первые члены разложения квадрата амплитуды имеют вид

$$A^2=2E-\alpha\left(4E+9E^2\right)+\alpha^2\left(2E+18E^2+\frac{623}{8}E^3\right)-\alpha^3\left(9E^2+\frac{623}{4}E^3+\frac{6609}{8}E^4\right)\ldots.$$

Подставляя полученное выражение и классические траектории в условие Бора-Зоммерфельда (5), получим уравнение относительно энергии системы E. Это выражение не приводится в силу его громоздкости. Разрешая полученное уравнение итерационным способом, получим приближенную аналитическую формулу для спектра исходного оператора. В случае $\mu=4$ она имеет вид

$$\begin{aligned}
E_n^{(\mu=4)}&=n+\frac{1}{2}+\frac{3}{2}\alpha\left(n^2+n+\frac{1}{4}\right)-\frac{51}{8}\alpha^2\left(\frac{3}{2}n^3+n^2+\frac{1}{2}n+\frac{3}{4}\right)+\\
&+\frac{375}{16}\alpha^3\left(n^4+2n^3+\frac{1}{2}n+\frac{1}{16}\right)-\frac{10689}{2048}\alpha^4\left(32n^5+48n^4+48n^3+24n^2+6n+1\right)+\\
&\alpha^5\left(\frac{87549}{64}n^6+\frac{262647}{64}n^5+\frac{1313235}{256}n^4+\frac{437745}{128}n^3+\frac{1313235}{1024}n^2+\right.\\
&\left.+\frac{262647}{1024}n+\frac{87549}{4096}\right)-\alpha^6\left(\frac{3132399}{256}n^7+\frac{21926793}{512}n^6+\frac{65780379}{1024}n^5+\right.\\
&\left.+\frac{109633965}{2048}n^4+\frac{109633965}{4096}n^3+\frac{65780379}{8192}n^2+\frac{21926793}{16384}n+\frac{3132399}{32768}\right)+\\
&+\alpha^7\left(\frac{238225977}{2048}n^8+\frac{238225977}{512}n^7+\frac{1667581839}{2048}n^6+\frac{16677581839}{2048}n^5+\right.\\
&+\frac{8337909195}{16384}n^4+\frac{1667581839}{8192}n^3+\frac{16677581839}{32768}n^2+\\
&\left.+\frac{238225977}{32768}n+\frac{238225977}{524288}\right),
\end{aligned}$$

где $n=0,1,2,\ldots$ – квантовое число. Аналогичные выражения для случаев $\mu=6$ и $\mu=8$ приведены в диссертационной работе.

В разделе 1.4 производится сравнение полученных результатов с известными ранее. Получено хорошее согласие с работами других авторов, по крайней мере, для нижайших уровней и умеренных значений степени нелинейности. Формула для $\mu=4$ совпадает с формулой, полученной в работе Ali M.K., Wood R.W., Devitt J.S. J. Math. Phys., 1986.

В следующей таблице представлено сравнение полученных результатов с результатами, полученными в работе Бенерджи (Banerjee K., Bhatnagar S.P., Choudhry V., Kanval S.S. Proc. R. Soc. Lond., 1978) для $\mu = 4$ при $\alpha = 10^{-3}$.

Таблица 1

Сравнение результатов, полученных по программе LINDA с результатами, полученными Бенерджи

№	LINDA	Banerjee	Отклонение в %
0	1,0007489	1,0007486	0,00003
1	3,00336	3,00337	0,0002
2	5,00934	5,00971	0,007
3	7,0182	7,0186	0,005
4	9,0301	9,0305	0,004
5	11,04502	11,0453	0,003
6	13,0628	13,0631	0,003
7	15,0834	15,0835	0,0006
8	17,10709	17,1074	0,0021
9	19,1335	19,1339	0,0019
10	21,1629	21,163	0,0017

Во **второй главе** вычислены энергетические уровни ангармонических осцилляторов, рассмотренных в первой главе, но методом квантовых нормальных форм Деприт-Хори (Джакалья Г.Е.О. 1979, Маркеев А.П. 1978).

В разделе 2.1 поставлена задача на собственные значения, аналогичная той, которая решена в первой главе.

В разделе 2.2 излагается метод классических и квантовых нормальных форм Деприт-Хори, в котором классическая гамильтонова функция

$$H_\mu(x,p)=\frac{p^2}{2}+\frac{x^2}{2}+\alpha x^\mu$$

представляется в виде ряда

$$H_\mu(x,p)=\frac{1}{2}\left(x^2+p^2\right)+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}H_k(x,p), \tag{6}$$

$$H_k(x,p)=\sum_{l+m=k+2}h_{lm}x^l p^m$$

и вычисляется ее нормальная форма.

Нормальной формой классической гамильтоновой функции $H_\mu(x,p)$ называется функция $\Gamma(\xi,\eta)$, удовлетворяющая условию

$$\left\{\frac{1}{2}\left(\xi^2+\eta^2\right),\,\Gamma(\xi,\eta)\right\}=0, \tag{7}$$

где $\{f,g\}$ – скобка Пуассона. Производящую функцию $W(x,p)$ канонического преобразования $(x,p)\to(\xi,\eta)$ и саму нормальную форму $\Gamma(\xi,\eta)$ будем искать в виде степенных рядов

$$W(x,p)=\sum_{k=0}\frac{1}{k!}W_{k+1}(x,p), \qquad \Gamma(\xi,\eta)=\sum_{k=0}\frac{1}{k!}\Gamma_k(\xi,\eta).$$

Неизвестные величины $W_k(x,p)$ и $\Gamma_k(\xi,\eta)$ удовлетворяют следующему основному уравнению

$$\{H_0, W_k\}=-H_k+\Gamma_k-T_k, \qquad k=0,1,2,\ldots, \tag{8}$$

где H_0 и H_k – компоненты классической гамильтоновой функции (6), а величины T_k определяются выражением

$$T_k=\sum_{j=1}^{k-1}(C_{k-1}^{j-1}L_jH_{k-j}+C_{k-1}^{j}K_{j,\,k-j}), \qquad K_{j,\,i}=L_j\Gamma_i-\sum_{m=1}^{j-1}(C_{j-1}^{m-1}L_mK_{j-m,i}),$$

где C_n^k – биномиальные коэффициенты, L_j – оператор Ли, который определяется через скобки Пуассона по формуле $L_j f\equiv\{f,W_j\}$.

Чтобы найти неизвестные компоненты W_k и Γ_k, основное уравнение (8) дополним условием (7), которое определяет нормальную форму. Полученный в результате полином H_k+T_k представим в виде суммы двух однородных полиномов N_k+R_k, удовлетворяющих условиям $\{H_0,N_k\}=0$, $\{H_0,R_k\}\neq 0$. Тогда из основного уравнения (8) с учетом условия (7) неизвестные компоненты производящей функции W_k и нормальной формы Γ_k можно определить следующим образом: $\Gamma_k=N_k$, $\{H_0,W_k\}=-R_k$.

Для решения поставленной задачи (2), (3) на собственные значения удобно ввести новые комплексные канонически сопряжённые переменные

$$z=\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta+i\xi), \qquad z^*=\frac{1}{\sqrt{2}}(\eta-i\xi) \tag{9}$$

и переписать классическую нормальную форму Деприт-Хори в виде $\Gamma(z,z^*)=\sum_{l=1}^{s}\left(zz^*\right)^{2l}$.

В предлагаемом подходе классические нормальные формы Деприт-Хори для функции (6) вычислены с помощью программы LINA в среде Reduce, которая позволяет получить классическую нормальную форму в любом заданном порядке s по степеням выражения $\xi^2+\eta^2$, ограничиваясь возможностями компьютера. Например, при $s=22$ и $\mu=4$ классическая нормальная форма гамильтоновой функции (6) имеет вид

$$\Gamma^{\mu=4}(\xi,\eta)=\frac{1}{2}\left(\xi^2+\eta^2\right)^2+\frac{3}{16}\alpha\left(\xi^2+\eta^2\right)^4-\frac{17}{128}\alpha^2\left(\xi^2+\eta^2\right)^6+\frac{375}{2048}\alpha^3\left(\xi^2+\eta^2\right)^8-$$
$$-\frac{10689}{32768}\alpha^4\left(\xi^2+\eta^2\right)^{10}+\frac{87549}{131072}\alpha^5\left(\xi^2+\eta^2\right)^{12}-\frac{3132399}{2097152}\alpha^6\left(\xi^2+\eta^2\right)^{14}+$$
$$+\frac{238225977}{67108864}\alpha^7\left(\xi^2+\eta^2\right)^{16}-\frac{18945961925}{2147483648}\alpha^8\left(\xi^2+\eta^2\right)^{18}+$$
$$+\frac{194904116847}{8589934592}\alpha^9\left(\xi^2+\eta^2\right)^{20}-\frac{8240234242929}{137438953472}\alpha^{10}\left(\xi^2+\eta^2\right)^{22}.$$

Аналогичные выражения для случаев $\mu = 6$ и $\mu = 8$ приведены в диссертационной работе.

Для нахождения квантовой нормальной формы воспользуемся правилом Вейля

$$z^m z^{*^n} \equiv z^{*^n} z^m \to \frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m}\frac{m!}{l!(m-l)!}\hat{a}^{+^l}\hat{a}^n\hat{a}^{+^{m-l}},$$

где $\hat{a}^+ = \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)$, $\hat{a} = \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)$. Тогда собственные значения исходной задачи (2), (3) при $\mu = 4$ могут быть приближенно вычислены по формуле:

$$
\begin{aligned}
E_n^{(\mu=4)} &= n + \frac{1}{2} + \frac{3}{2}\alpha\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) - \frac{51}{16}\alpha^2\left(\frac{4}{3}n^3 + 2n^2 + \frac{8}{3}n + 1\right) + \\
&+ \frac{375}{16}\alpha^3\left(n^4 + 2n^3 + 5n^2 + 4n + \frac{3}{2}\right) - \frac{10689}{256}\alpha^4\left(4n^5 + 10n^4 + 40n^3 + 50n^2 + 46n + 15\right) + \\
&+ \frac{87549}{64}\alpha^5\left(n^6 + 3n^5 + \frac{35}{2}n^4 + 30n^3 + 49n^2 + \frac{69}{2}n + \frac{45}{4}\right) - \\
&- \frac{3132399}{256}\alpha^6\left(n^7 + \frac{7}{2}n^6 + 28n^5 + \frac{245}{4}n^4 + 154n^3 + \frac{343}{2}n^2 + 132n + \frac{315}{8}\right) + \\
&+ \frac{97434424593}{1024}\alpha^7\left(\frac{1}{818}n^8 + \frac{2}{409}n^7 + \frac{21}{409}n^6 + \frac{56}{409}n^5 + \frac{399}{818}n^4 + \frac{308}{409}n^3 + \right. \\
&\left. + n^2 + \frac{264}{409}n + \frac{315}{1636}\right) - \frac{18945961925}{16384}\alpha^8\left(n^9 + \frac{9}{2}n^8 + 60n^7 + 189n^6 + \right. \\
&\left. + 903n^5 + \frac{3591}{2}n^4 + 3590n^3 + 3681n^2 + \frac{5067}{2}n + \frac{2835}{4}\right) + \\
&+ \frac{194904116847}{32768}\alpha^9\left(2n^{10} + 10n^9 + 165n^8 + 600n^7 + 3696n^6 + 9030n^5 + \right. \\
&\left. + 25135n^4 + 35900n^3 + 41877n^2 + 25335n + \frac{7087}{2}\right) - \\
&- \frac{8240234242929}{65536}\alpha^{10}\left(n^{11} + \frac{11}{2}n^{10} + 110n^9 + \frac{1815}{4}n^8 + 3498n^7 + 10164n^6 + \right. \\
&\left. + 37400n^5 + \frac{276485}{4}n^4 + \frac{239327}{2}n^3 + \frac{460647}{4}n^2 + 73215n + \frac{155925}{8}\right) + \ldots
\end{aligned}
$$

Аналогичные выражения для случаев $\mu = 6$ и $\mu = 8$ приведены в диссертационной работе. Для получения квантовых нормальных форм составлена программа QuantaWeyl в среде Maple.

В разделе 2.3 метод нормальных форм Деприт-Хори применяется для решения задачи с потенциальной функцией, имеющей два локальных минимума

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\left(x^2 - a^2\right)^2\right]\psi(x) = E\psi(x), \tag{10}$$

где x – пространственная координата, $\alpha > 0$ – параметр, $\psi(x)$ – волновая функция, a – действительное число, определяющее положения двух минимумов потенциальной функции, E – энергия. В соответствии с методом классических и квантовых нормальных форм преобразуем классический аналог уравнения Шрёдингера (10), перенеся начало координат в левый минимум, с помощью замены $x \to \dfrac{x}{\sqrt{\omega_0}}$, $p \to p\sqrt{\omega_0}$, где $\omega_0 \equiv 2a\sqrt{2\alpha}$, и разделив на ω_0. В результате получим классическую гамильтонову функцию

$$H(x,p) = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) - \frac{4\alpha a}{\omega_0^2\sqrt{\omega_0}}x^3 + \frac{\alpha}{\omega_0^3}x^4,$$

которую представим в виде

$$H(x,p) = \frac{1}{2}\left(x^2 + p^2\right) + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}H_k(x,p), \qquad (11)$$

где $H_k(x,p)$ – однородные полиномы степени k: $H_k(x,p) = \sum\limits_{l+m=k+2} h_{lm}x^l p^m$, а числовые коэффициенты h_{lm} известны. Применяя к ней метод нормализации Деприи-Хори, описанный в разделе 2.2, получим классическую нормальную форму гамильтоновой функции (11), которая в десятом порядке по малому параметру имеет вид:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{10}(\xi,\eta) &= \frac{\omega_0}{2}\left(\xi^2+\eta^2\right) + \frac{3}{8\omega_0^2}\left(\xi^2+\eta^2\right)^2\alpha - \left(\frac{17^3}{32\omega_0^5} + \frac{15a^2}{\omega_0^4}\left(\xi^2+\eta^2\right)^2\right)\alpha^2 + \\
&+ \left(\frac{375}{256\omega_0^8}\left(\xi^2+\eta^2\right)^4 + \frac{225a^2}{2\omega_0^7}\left(\xi^2+\eta^2\right)^3\right)\alpha^3 - \\
&- \left(\frac{10689}{2048\omega_0^{11}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^5 + \frac{24945a^2}{32\omega_0^{10}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^4 + \frac{1410a^4}{\omega_0^9}\left(\xi^2+\eta^2\right)^3\right)\alpha^4 + \\
&+ \left(\frac{87549}{4096\omega_0^{14}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^6 + \frac{338625a^2}{64\omega_0^{13}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^5 + \frac{116325a^4}{4\omega_0^{12}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^4\right)\alpha^5 - \\
&- \left(\frac{18237765a^2}{512\omega_0^{16}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^6 + \frac{6383475a^4}{16\omega_0^{15}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^5 + \frac{231510a^6}{\omega_0^{14}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^4\right)\alpha^6 + \\
&+ \left(\frac{145625865a^4}{32\omega_0^{18}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^6 + \frac{8163729a^6}{\omega_0^{17}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^5\right)\alpha^7 - \\
&- \left(\frac{687587901a^6}{4\omega_0^{20}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^6 + \frac{47936322a^8}{\omega_0^{19}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^5\right)\alpha^8 + \\
&+ \frac{2424834657a^8}{\omega_0^{22}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^6\alpha^9 - \frac{11299284360a^{10}}{\omega_0^{24}}\left(\xi^2+\eta^2\right)^6\alpha^{10}.
\end{aligned}$$

Как и в случае одного минимума в потенциальной функции, введем новые комплексные канонически сопряжённые переменные (9) и воспользуемся правилом Вейля. В результате получим квантовую нормальную форму

$$\hat{\Gamma} = \omega_0\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) + \frac{3}{2\omega_0^2}\left(\hat{N}^2 + \hat{N} + \frac{1}{2}\right)\alpha -$$

$$-\frac{1}{4\omega_0^5}\Bigg(17\left(\hat N^3+\frac{3}{2}\hat N^2+2\hat N+\frac{3}{4}\right)+240\left(\hat N^2+\hat N+\frac{1}{2}\right)a^2\omega_0\Bigg)\alpha^2+$$

$$+\frac{1}{16\omega_0^8}\Bigg(375\left(\hat N^4+2\hat N^3+5\hat N^2+4\hat N+\frac{3}{2}\right)+3600\left(4\hat N^3+6\hat N^2+8\hat N+3\right)\omega_0 a^2\Bigg)\alpha^3-$$

$$-\frac{1}{128\,\omega_0^{11}}\Bigg(10689\left(2\hat N^5+5\hat N^4+20\hat N^3+25\hat N^2+23\hat N+\frac{15}{2}\right)+$$

$$+1596480\left(\hat N^4+2\hat N^3+5\hat N^2+4\hat N+\frac{3}{2}\right)\omega_0 a^2+721920\left(2\hat N^3+3\hat N^2+4\hat N+\frac{3}{2}\right)\omega_0^2 a^4\Bigg)\alpha^4+$$

$$+\frac{1}{128\,\omega_0^{14}}\Bigg(87549\left(2\hat N^6+6\hat N^5+35\hat N^4+60\hat N^3+98\hat N^2+69\hat N+\frac{45}{2}\right)+$$

$$+10836000\left(2\hat N^5+5\hat N^4+20\hat N^3+25\hat N^2+23\hat N+\frac{15}{2}\right)\omega_0 a^2+$$

$$+59558400\left(\hat N^4+2\hat N^3+5\hat N^2+4\hat N+\frac{3}{2}\right)\omega_0^2 a^4\Bigg)\alpha^5-$$

$$-\frac{a^2}{16\omega_0^{16}}\Bigg(3647553\left(10\hat N^6+3\hat N^5+175\hat N^4+300\hat N^3+490\hat N^2+345\hat N+\frac{225}{2}\right)+$$

$$+102135600\left(2\hat N^5+5\hat N^4+20\hat N^3+25\hat N^2+23\hat N+\frac{15}{2}\right)a^2\omega_0+$$

$$+59266560\left(\hat N^4+2\hat N^3+5\hat N^2+4\hat N+\frac{3}{2}\right)a^6\omega_0^2\Bigg)\alpha^6+$$

$$+\frac{a^4}{\omega_0^{18}}\Bigg(145625865\left(2\hat N^6+5\hat N^5+35\hat N^4+60\hat N^3+98\hat N^2+69\hat N+\frac{45}{2}\right)+$$

$$+130619664\left(2\hat N^5+5\hat N^4+20\hat N^3+25\hat N^2+23\hat N+\frac{15}{2}\right)a^2\omega_0\Bigg)\alpha^7-$$

$$-\frac{8a^6}{\omega_0^{20}}\Bigg(687587901\left(2\hat N^6+6\hat N^5+35\hat N^4+60\hat N^3+98\hat N^2+69\hat N+\frac{45}{2}\right)+$$

$$+95872644\left(2\hat N^5+5\hat N^4+20\hat N^3+25\hat N^2+23\hat N+\frac{15}{2}\right)a^2\omega_0\Bigg)\alpha^8+$$

$$+\frac{775947090024a^8}{\omega_0^{22}}\left(2\hat N^6+6\hat N^5+35\hat N^4+60\hat N^3+98\hat N^2+69\hat N+\frac{45}{2}\right)\alpha^9-$$

$$-\frac{361577099520a^{10}}{\omega_0^{24}}\left(2\hat N^6+6\hat N^5+35\hat N^4+60\hat N^3+98\hat N^2+69\hat N+\frac{45}{2}\right)\alpha^{10},$$

где $\omega_0=2a\sqrt{2\alpha}$ и введен дифференциальный оператор $\hat N=\hat a^{+}\hat a$. Тогда собственные значения рассматриваемой задачи (10) могут быть найдены по полученной в диссертационной работе формуле

$$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+\ldots=\sum_{k=0}E_n^{(k)},$$

где

$$E_n^{(0)}=\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad E_n^{(1)}=\frac{3}{2\omega_0^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right),$$

$$E_n^{(2)}=-\frac{1}{4\omega_0^5}\left(17\left(n^3+\frac{3}{2}n^2+2n+\frac{3}{4}\right)+240\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)a^2\omega_0\right),$$

$$E_n^{(3)}=\frac{75}{16\omega_0^8}\left(5\left(n^4+2n^3+5n^2+4n+\frac{3}{2}\right)+48\left(4n^3+6n^2+8n+3\right)\omega_0a^2\right),$$

$$E_n^{(4)}=-\frac{3}{128\omega_0^{11}}\left(3563\left(2n^5+5n^4+20n^3+25n^2+23n+\frac{15}{2}\right)+\right.$$

$$\left.+532160\left(n^4+2n^3+5n^2+4n+\frac{3}{2}\right)\omega_0a^2+240640\left(2n^3+3n^2+4n+\frac{3}{2}\right)\omega_0^2a^4\right),$$

$$E_n^{(5)}=\frac{1}{128\omega_0^{14}}\left(87549\left(2n^6+6n^5+35n^4+60n^3+98n^2+69n+\frac{45}{2}\right)+\right.$$

$$+10836000\left(2n^5+5n^4+20n^3+25n^2+23n+\frac{15}{2}\right)\omega_0a^2+$$

$$\left.+59558400\left(n^4+2n^3+5n^2+4n+\frac{3}{2}\right)\omega_0^2a^4\right),$$

$$E_n^{(6)}=-\frac{a^2}{16\omega_0^{16}}\left(3647553\left(10n^6+3n^5+175n^4+300n^3+490n^2+345n+\frac{225}{2}\right)+\right.$$

$$+102135600\left(2n^5+5n^4+20n^3+25n^2+23n+\frac{15}{2}\right)a^2\omega_0+$$

$$\left.+59266560\left(n^4+2n^3+5n^2+4n+\frac{3}{2}\right)a^6\omega_0^2\right),$$

$$E_n^{(7)}=\frac{21a^4}{\omega_0^{18}}\left(6934565\left(2n^6+5n^5+35n^4+60n^3+98n^2+69n+\frac{45}{2}\right)+\right.$$

$$\left.+6219984\left(2n^5+5n^4+20n^3+25n^2+23n+\frac{15}{2}\right)a^2\omega_0\right),$$

$$E_n^{(8)}=-\frac{168a^6}{\omega_0^{20}}\left(32742281\left(2n^6+6n^5+35n^4+60n^3+98n^2+69n+\frac{45}{2}\right)+\right.$$

$$\left.+4565364\left(2n^5+5n^4+20n^3+25n^2+23n+\frac{15}{2}\right)a^2\omega_0\right),$$

$$E_n^{(9)}=\frac{77594709024a^8}{\omega_0^{22}}\left(2n^6+6n^5+35n^4+60n^3+98n^2+69n+\frac{45}{2}\right),$$

$$E_n^{(10)}=-\frac{361577099520a^{10}}{\omega_0^{24}}\left(2n^6+6n^5+35n^4+60n^3+98n^2+69n+\frac{45}{2}\right),$$

здесь $\omega_0=2a\sqrt{2\alpha}$, $n=0,1,2,\dots$.

Раздел 2.4 содержит результаты численных расчетов, которые показывают хорошее согласие полученных энергетических уровней с соответствующими данными, взятыми из литературы. Сравнение результатов представлено в таблицах.

Таблица 2

Сравнение собственных значений ангармонического осциллятора с одним минимумом, полученных различными методами, при $\mu = 4$, $\alpha = 10^{-3}$

n	E_{NF}	E_{QM}	ε (%)
0	1,0007481	1,0007485	10^{-5}
1	3,00373	3,00373	0
2	5,00972	5,00973	$2\cdot 10^{-5}$
3	7,01862	7,01865	$2\cdot 10^{-5}$
4	9,03057	9,03053	$2\cdot 10^{-5}$

Таблица 3

Сравнение собственных значений ангармонического осциллятора с одним минимумом, полученных различными методами, при $\mu = 6$, $\alpha = 10^{-4}$

n	E_{NF}	E_{QM}	ε (%)
0	1,00018	1,00018	0
1	3,0013	3,0013	0
2	5,0046	5,0046	0
3	7,011	7,011	0
4	9,023	9,023	0

Таблица 4

Сравнение собственных значений ангармонического осциллятора с одним минимумом, полученных различными методами, при $\mu = 8$, $\alpha = 10^{-5}$

n	E_{NF}	E_{QM}	ε (%)
0	1,00006	1,00006	0
1	3,00058	3,00058	0
2	5,0026	5,0026	0
3	7,0083	7,0083	0
4	9,02	9,02	0

В таблицах через n обозначен номер собственного значения; E_{NF} – значения энергии, рассчитанные по полученным формулам; E_{QM} – значения энергии, полученные Беннерджи; ε (%) – относительные отклонения в процентах E_{NF} от E_{QM}. Как видно из таблиц, имеется хорошее согласие результатов при данных значениях параметров.

В разделе 2.5 приводится сравнение метода нормализации Деприи-Хори с методом, предложенным в первой главе и основанным на использовании рядов Линдштедта-Пуанкаре.

Построена потенциальная функция $V(x,\alpha)=\alpha\left(x^2+\frac{\omega}{4\alpha}\right)^2$ и соответствующая система $H(x,p)=\frac{\omega}{2}(x^2+p^2)+\alpha x^4+\frac{\omega^2}{16\alpha}$, для которой применимы как метод нормализации Деприи-Хори, так и полуклассическое квантование на основе метода Линдштедта-Пуанкаре.

В **главе 3** символьно-численный метод решения уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов применяется для различных нелинейных ангармонических осцилляторов.

В разделе 3.1 задача на собственные значения сводится к краевой задаче

$$\psi''(x)+2\big(E-V(x)\big)\psi(x)=0,\ \psi(\pm\infty)=0. \tag{12}$$

Вначале вычисляются два линейно независимых решения уравнения (12) в виде степенных рядов

$$\psi_1(x,E)=1+\sum_{k=2}^{\infty}a_k x^k,\ \psi_2(x,E)=x+\sum_{k=2}^{\infty}b_k x^k.$$

Для случая $V(x)=\alpha x^4$ первые члены разложения волновых функций имеют вид:

$$\psi_1(x,E)=1-Ex^2+\left(\frac{E^2}{6}+\frac{1}{12}\right)x^4+\left(-\frac{E^3}{90}-\frac{7E}{180}+\frac{\alpha}{15}\right)x^6+$$
$$+\left(\frac{E^4}{2520}+\frac{11E^2}{2520}-\frac{4\alpha E}{105}+\frac{1}{672}\right)x^8+$$
$$+\left(-\frac{E^5}{113400}-\frac{E^3}{4536}+\frac{43\alpha E^2}{9450}+\frac{7\alpha}{2700}-\frac{211E}{453600}\right)x^{10}+\ldots,$$

$$\psi_2(x,E)=x-\frac{E}{3}x^3+\left(\frac{E^2}{30}+\frac{1}{20}\right)x^5+\left(-\frac{E^3}{630}-\frac{13E}{1260}+\frac{\alpha}{21}\right)x^7+$$
$$+\left(\frac{E^4}{22680}+\frac{17E^2}{22680}-\frac{2\alpha E}{189}+\frac{1}{1440}\right)x^9+$$
$$+\left(-\frac{E^5}{1247400}-\frac{E^3}{35640}+\frac{83\alpha E^2}{103950}-\frac{59E}{554400}+\frac{31\alpha}{23100}\right)x^{11}\ldots$$

Для $V(x)=\alpha x^6$ и $V(x)=\alpha x^8$ аналогичные результаты приведены в диссертационной работе.

Чтобы общее решение $\psi(x)=C_1\psi_1(x)+C_2\psi_2(x)$ рассматриваемой задачи (12) удовлетворяло краевым условиям, необходимо выбрать произвольные постоянные C_1 и C_2 так, чтобы система линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} C_1\psi_1(-R,E) + C_2\psi_2(-R,E) = 0, \\ C_1\psi_1(R,E) + C_2\psi_2(R,E) = 0 \end{cases} \tag{13}$$

имела нетривиальные решения (R – параметр).

На практике область $(-\infty,+\infty)$ редуцируется в отрезок $[-R,+R]$. При этом значения параметра R варьируются так, чтобы получаемые собственные значения совпадали в возможно большем числе десятичных знаков. В частности, для нижних уровней энергии в наших расчетах $R \in [2{,}95;\,3{,}1]$.

Приравнивая к нулю определитель системы (13), получим уравнение относительно E, корни которого являются спектром задачи (12). Для каждого вычисленного корня E_n система (13) имеет единственное решение $C_1^{(n)}$ и $C_2^{(n)}$, поэтому волновая функция n-го энергетического уровня имеет вид $\psi_n(x) = C_1^{(n)}\psi_1(x) + C_2^{(n)}\psi_2(x)$.

В разделе 3.2. представлены результаты численных расчетов. Проведено сравнение аналогичных результатов, полученных с помощью нормальных форм (глава 2) и с помощью степенных рядов с квантово-механическими расчетами из работы Бенерджи. Показано удовлетворительное согласие для вычисленных нижайших уровней энергии.

В разделе 3.3 методом нормальных форм и с помощью степенных рядов решено уравнение Шрёдингера для ангармонического осциллятора четвертой степени с двумя симметричными минимумами. Проведено сравнение с результатами, полученными в разделе 2.3 для этой задачи методом нормальных форм.

В разделе 3.4 представлены результаты численных расчетов для потенциала с двумя минимумами, найденные методом степенных рядов. Приводится сравнение полученных результатов с расчетами, выполненными по методу нормальных форм. Вычислены величины расщепления для уровней, лежащих ниже высоты потенциального барьера, по формулам, взятым из литературы. Значения расщеплений, полученные в результате численного эксперимента, совпадают с теоретическими.

На рис. 1 представлена структура энергетических уровней симметричного двухъямного ангармонического осциллятора. Жирной линией обозначен график потенциальной функции, тонкими пунктирными линиями – уровни энергии, полученные методом нормализации, сплошными линиями – уровни с учетом расщепления.

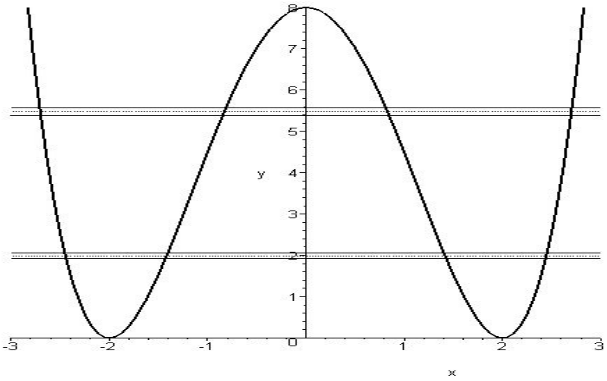

Рис. 1. Структура уровней энергии двухъямного симметричного ангармонического осциллятора

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

В **приложении А** рассмотрен вопрос сходимости рядов Линдштедта в методе Линдштедта-Пуанкаре; сформулирована и доказана теорема о достаточных условиях сходимости этих рядов.

В **приложении Б** приведен новый алгоритм оценки погрешности метода Линдштедта-Пуанкаре, учитывающий точное решение, выраженное в неявном виде.

В **приложении В** содержится листинг программы LINDA на Maple.

В **приложении Г** приведена программа квантования по правилу Вейля и формулы для спектров ангармонических осцилляторов.

В **приложении Д** представлен листинг Maple-программы для решения уравнения Шрёдингера методом степенных рядов.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

В настоящей диссертационной работе получены следующие **основные результаты:**

1. Разработаны методы получения аналитических формул для собственных значений дифференциальных операторов одномерных ангармонических осцилляторов с одним и двумя минимумами в потенциальной функции в удобной для вычислений форме на основе:

а) полуклассического подхода с использованием метода Линдштедта-Пуанкаре и правила Бора-Зоммерфельда;

б) метода классических и квантовых нормальных форм Деприт-Хори и правила Вейля;

в) непосредственного интегрирования уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов;

2. Разработана программно-алгоритмическая поддержка символьных преобразований и вычислений в соответствии с указанными методами на основе средств компьютерной алгебры;

3. Развит метод Линдштедта-Пуанкаре для решения обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений, содержащих малый параметр. Сформулированы и обоснованы условия сходимости рядов Линдштедта, а также решен вопрос о корректности представляемого ими решения;

4. С помощью разработанных методов и программ проведено исследование некоторых математических моделей ангармонических осцилляторов и решены следующие задачи:

а) нахождение классических траекторий одномерных ангармонических осцилляторов, потенциальная функция которых имеет один минимум и различные степени нелинейности, на основе метода Линдштедта-Пуанкаре;

б) получение приближенной аналитической формулы спектра указанных динамических моделей с использованием найденных классических траекторий и правила Бора-Зоммерфельда;

в) приведение классического аналога исследуемого оператора к квантовой нормальной форме Деприт-Хори на основе классической нормальной формы;

г) получение приближенной аналитической формулы спектра операторов одномерных ангармонических осцилляторов с одним и двумя симметричными минимумами в потенциальной функции на основе найденной квантовой нормальной формы Деприт-Хори и правила Вейля;

д) получение спектров и собственных функций указанных систем путем непосредственного интегрирования уравнения Шрёдингера с помощью степенных рядов.

Основные публикации по теме диссертации:

Статьи в научных изданиях, входящих в перечень рекомендованных ВАК

1. Чеканов, Н.А. Решение уравнения Шрёдингера для ангармонических осцилляторов. / Н.А. Чеканов, В.В. Флоринский // Журнал научных публикаций аспирантов и докторантов. – 2008. – №7. –С.147-151.

2. Флоринский, В.В. Полуклассическое квантование уравнения Дюффинга / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2008. – Т.4. – №9. – С.109-111.

Научные статьи в других изданиях

3. Флоринский, В.В. Квантование одномерной системы Дюффинга в полуклассическом приближении / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов Н.А. // Сборник студенческих научных работ. – Белгород: Изд-во БелГУ. – 2004. – Вып.VIII. – Ч.1. – С. 34-36.

4. Флоринский, В.В. Квантование решений одного дифференциального уравнения второго порядка / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Успехи современного естествознания. – 2004.– № 7. – С. 83-84.

5. Флоринский, В.В. Квантование уравнения Дюффинга на основе метода Линдштедта-Пуанкаре / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Тезисы док-

ладов Международной молодежной научной конференции «XXXII Гагаринские чтения». – М.: Изд-во «МАТИ», – 2006. – Т. 5. – С. 74-76.

6. Флоринский, В.В. Полуклассический спектр уравнения Дюффинга / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Современные методы физико-математических наук. Труды международной конференции. 9-14 октября 2006 г., Орел. Т. 2. – Орел: Издательство ОГУ. – 2006. – С.230.

7. Флоринский, В.В. Квантование классических осцилляторов с четвертой, шестой и восьмой степенью нелинейности / В.В. Флоринский // Сборник материалов международной научной конференции для студентов и аспирантов «Современные проблемы математики и ее приложения в естественных науках и информационных технологиях», 23-25 марта 2007 г. – Харьков: ХНУ. – 2007. – С. 160.

8. Флоринский, В.В. Собственные значения ангармонического осциллятора / В.В. Флоринский // Вестник Харьковского национального университета им. В.Н. Каразина. Серия «Математика, прикладная математика и механика». – 2007. – № 790. – С. 83-88.

9. Флоринский, В.В. Полуклассическое квантование уравнения Дюффинга / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Физико-математическое моделирование систем. Материалы IV Международного семинара (Воронеж, 26-27 ноября 2007г.), Часть I. – Воронеж. – 2007. – С. 149-154.

10. Флоринский, В.В. Квантование нелинейных одномерных осцилляторов по правилу Вейля / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // XLIV Всероссийская конференция по проблемам математики, информатики, физики и химии: Тезисы докладов. Секция физики. – М.: РУДН. – 2008. – С. 46-47.

11. Флоринский, В.В. Квантование классических ангармонических осцилляторов методом нормальных форм / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Вестник Херсонского национального технического университета. – Вып. 2 (31). – Херсон: ХНТУ, – 2008. – С. 490-494.

Официальная регистрация программ

12. Флоринский, В.В. Программа нахождения спектра слабовозмущенного осциллятора методом полуклассического квантования «LINDA» / В.В. Флоринский, Н.А. Чеканов // Зарегистрирована в Отраслевом фонде алгоритмов и программ. – М.: ВНТИЦ, 2006. – №50200602029. Свидетельство об отраслевой регистрации разработки № 7242 ОФАП – 2006.