ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

doi: https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.01.003
УДК 519.624.2

В.Л. Макаров, академік НАН України

Інститут математики НАН України, Київ
E-mail: makarov@imath.kiev.ua

Точні розв'язки однієї спектральної задачі з диференціальним оператором Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом у $\mathbf{R}^2$

Вперше розглянуто суттєво двовимірний випадок оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом. За допомогою FD-методу та системи комп'ютерної алгебри Maple знайдено чотири точні власні значення для потенціалу конкретного вигляду з шести найменших.

Ключові слова: *спектральні задачі, точні власні значення, оператор Шрьодінгера, експоненціально збіжний метод, поліноми Ерміта.*

Проблемі знаходження точних розв'язків спектральних задач для оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом присвячено багато робіт (див. [1—4] і цитовану там літературу). Але у всіх цих роботах автори розглядали або одновимірний випадок, або такі випадки, які за рахунок симетрії зводилися до звичайного диференціального оператора [4]. У нашій роботі вперше розглянуто суттєво двовимірний випадок оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом. За допомогою FD-методу (варіанту методу гомотопій) та системи комп'ютерної алгебри Maple знайдено чотири точних власних значення для потенціалу конкретного вигляду з шести найменших.

Розглянемо спектральну задачу

$$\begin{gathered}\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2}+(\lambda - x^2 - y^2 - q\,(x,y))u(x,y)=0\,,\ \ (x,y)\in\mathbf{R}^2,\\ \iint\limits_{\mathbf{R}^2} u^2(x,y)\,dx\,dy<\infty.\end{gathered} \tag{1}$$

При $q(x, y) = 0$ розв'язок задачі (1) має вигляд

$$u_n(x,y)=\exp\left(-\frac{x^2}{2}-\frac{y^2}{2}\right)H_{n_1}(x)\,H_{n_2}(y)\,,\ \ \lambda_n=2n+2\,,\ \ n_1+n_2=n\,,$$

і власні функції містять частковий випадок поліномів Ерміта від двох змінних (див. [5], с. 273, формула (10)).

Ми досліджуватимемо задачу (1) за умови

$$q(x,y)=xy\,, \tag{2}$$

і для знаходження її точного розв'язку будемо застосовувати найпростіший варіант FD-методу [6, 7] (метод гомотопій) у поєднанні з аналітикою, пов'язаною з початковою задачею (1). Зауважимо, що розгляд потенціалу вигляду (2) обумовлений тим, що саме для нього вдалося строго довести збіжність FD-методу і граничним переходом отримати точні аналітичні вирази чотирьох із шести найменших власних значень. Для інших типів поліноміальних потенціалів можна узагальнити техніку роботи [1] на двовимірний випадок для одержання точних розв'язків задачі (1), що і буде зроблено у наступних публікаціях.

Базову задачу виберемо у такий спосіб:

$$\frac{\partial^2 u_n^{(0)}(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u_n^{(0)}(x,y)}{\partial y^2}+(\lambda_n^{(0)}-x^2-y^2)u_n^{(0)}(x,y)=0,\ \ (x,y)\in\mathbf{R}^2. \tag{3}$$

Її власні функції запишемо через поліноми Ерміта

$$u_n^{(0)}(x,y)=\exp\left(-\frac{x^2}{2}-\frac{y^2}{2}\right)H_{n_1}(x)H_{n_2}(y)\equiv h_{n_1,n_2}(x,y)\,,\ n_1+n_2=n\,,$$

з відповідними власними значеннями

$$\lambda_n^0=2(n_1+n_2)+2\,.$$

Тоді рекурентна схема FD-методу матиме вигляд

$$\frac{\partial^2 u_n^{(j+1)}(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u_n^{(j+1)}(x,y)}{\partial y^2}+(\lambda_n^{(0)}-x^2-y^2)u_n^{(j+1)}(x,y)=$$

$$=-\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j+1-p)}u_n^{(p)}(x,y)+x\,y\,u_n^{(j)}(x,y)\equiv F_n^{(j+1)}(x,y), \tag{4}$$

$$(x,y)\in\mathbf{R}^2,\quad j=0,1,\,\ldots$$

Використавши рекурентне співвідношення для поліномів Ерміта [5]

$$xH_n(x)=\frac{1}{2}H_{n+1}(x)+nH_{n-1}(x)\,,$$

одержимо твердження про зображення розв'язку кожної із задач (4).

Лема 1. *Для розв'язку задачі (4) має місце зображення*

$$u_n^{(j)}(x,y)=\sum_{k=0}^{j+n}\sum_{s=0}^{j+n}a_{k,s}^{(j)}\,h_{k,s}(x,y)\,,\ k+s\neq n. \tag{5}$$

Нехай $n=0$. Підставивши (5) у (4), після нескладних перетворень отримаємо співвідношення

$$-\sum_{k=0}^{j+1}\sum_{s=0}^{j+1} a_{k,s}^{(j+1)}(2k+2s)h_{k,s} = -\sum_{k=0}^{j}\sum_{s=0}^{j} h_{k,s} \sum_{p=\max(k,s)}^{j} a_{k,s}^{(p)}\lambda_0^{(j+1-p)} +$$
$$+\frac{1}{4}\sum_{k=1}^{j+1}\sum_{s=1}^{j+1} a_{k-1,s-1}^{(j)} h_{k,s} + \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{j-1}\sum_{s=1}^{j+1} a_{k+1,s-1}^{(j)}(k+1)h_{k,s} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{j+1}\sum_{s=0}^{j-1} a_{k-1,s+1}^{(j)}(s+1)h_{k,s} + \sum_{k=0}^{j-1}\sum_{s=0}^{j-1} a_{k+1,s+1}^{(j)}(k+1)(s+1)h_{k,s}. \qquad (6)$$

Проаналізувавши (6), робимо висновок, що вірними є співвідношення

$$a_{2k+1,2s+1}^{(2j)} = 0, \quad k,s = 0,1,\ldots,j-1, \quad a_{2k,2s}^{(2j-1)} = 0, \quad k,s = 0,1,\ldots,j-1, \qquad (7)$$

$$\lambda_0^{(2j)} = a_{1,1}^{(2j-1)}, \quad \lambda_0^{(2j-1)} = 0, \quad j = 1,2,\ldots, \qquad (8)$$

Як наслідок, з (6)—(8) одержимо

$$-4(k+s)a_{2k,2s}^{(2j)} = -\sum_{p=\max(k,s)}^{j-1} a_{2k,2s}^{(2p)}\lambda_0^{(2j-2p)} + \frac{1}{4}a_{2k-1,\,2s-1}^{(2j-1)} +$$
$$+\frac{(2s+1)}{2}a_{2k-1,\,2s+1}^{(2j-1)} + \frac{(2k+1)}{2}a_{2k+1,2s-1}^{(2j-1)} + (2k+1)(2s+1)a_{2k+1,\,2s+1}^{(2j-1)},$$
$$k,s = \overline{1, j-1}, \qquad (9)$$
$$-4(k+s-1)a_{2k-1,2s-1}^{(2j+1)} = -\sum_{p=\max(k,s)}^{j} a_{2k-1,\,2s-1}^{(2p-1)}\lambda_0^{(2j-2p+2)} + \frac{1}{4}a_{2k-2,\,2s-2}^{(2j)} +$$
$$+ka_{2k,\,2s-2}^{(2j)} + sa_{2k-2,\,2s}^{(2j)} + 4ksa_{2k,2s}^{(2j)}, \quad k,s = 1,2,\ldots,j,$$
$$\sum_{s=1}^{j}\left[8(j+s)a_{2j+1,\,2s-1}^{(2j+1)} + \frac{1}{2}a_{2j,\,2s-2}^{(2j)} + 2s\,a_{2j,\,2s-2}^{(2j)}\right] = 0, \quad s = 1,2,\ldots$$

Експерименти із системою комп'ютерної алгебри Maple дали можливість визначити такі аналітичні формули:

$$\lambda_0^{(2j)} = a_{1,1}^{(2j-1)} = -\frac{(4j-3)!!}{(2j)!\,2^{4j-1}},$$

$$a_{2,0}^{(2j)} = a_{0,2}^{(2j)} = \frac{(4j-1)!!}{(2j+1)!\,2^{4j+2}},$$

$$a_{1,3}^{(2j+1)} = a_{3,1}^{(2j+1)} = -\frac{(4j+1)!!}{(2j+3)!}\frac{j}{2^{4j+4}}.$$

Повернемося до задачі (1), (2). Її розв'язок будемо шукати у вигляді

$$u(x,y) = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty} a_{k,s}h_{k,s}(x,y), \quad a_{0,0} = 1. \qquad (10)$$

Проведені експерименти свідчать про те, що FD-метод є збіжним і збігається до подвійного ряду (10), тому

$$\lambda_0 = a_{1,1} = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_0^{(2j)} = 2 + \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,1}^{(2j-1)} = 2 - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j-3)!!}{(2j)!\ 2^{4j-1}} = \frac{\sqrt{2}+\sqrt{6}}{2},$$

$$a_{2,0} = a_{0,2} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{2,0}^{(2j)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j-1)!!}{(2j+1)!\ 2^{4j+2}} = \frac{1}{4}(-1-\sqrt{2}+\sqrt{6}), \tag{11}$$

$$a_{1,3} = a_{3,1} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,3}^{(2j-1)} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{3,1}^{(2j-1)} = -\sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j+1)!!}{(2j+3)!} \frac{(2j-1)!!}{(2j-1)!} \frac{j!}{2^{3j+5}} = \frac{1}{8}(8+3\sqrt{2}-5\sqrt{6}).$$

Значення нескінченних сум у (11) знайдено за допомогою Maple.

Покладемо у (9) $k = s = 1$, тоді отримаємо

$$a_{2,2}^{(2j)} = \frac{1}{4}\left(-4a_{1,1}^{(2j+1)} + \sum_{p=1}^{j} a_{1,1}^{(2p-1)} \lambda_0^{(2j-2p+2)} - a_{2,0}^{(2j)} - a_{0,2}^{(2j)}\right)$$

або, з урахуванням (11),

$$a_{2,2}^{(2j-2)} = -\frac{(4j-5)!!}{(2j-1)!\,2^{4j-1}} + \frac{(4j-3)!!}{(2j)!\,2^{4j-2}} - \frac{(2[j/2]j+1)!!}{(2j)!!\,2^{4j+1}}, \quad j = 2, 3, \ldots$$

Звідси за допомогою Maple знаходимо

$$a_{2,2} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{2,2}^{(2j)} = \frac{1}{16}(57-14\sqrt{2}-18\sqrt{6+}4\sqrt{3}).$$

Теорема 1. *FD-метод для задачі (1) стосовно власної пари (λ_0, $u_0(x, y)$) є збіжним, а стосовно власного значення λ_0 — суперекспоненціально збіжним, і граничний перехід визначає точне власне значення*

$$\lambda_0 = \frac{\sqrt{2}+\sqrt{6}}{2}$$

з оцінкою точності

$$|\lambda_0 - \sum_{j=1}^{m} \lambda_0^{(2j)}| \leqslant \frac{e^2}{3\sqrt{2\pi}} \frac{1}{4^m \sqrt{m+1}}.$$

Нехай $n = 1$. У цьому випадку для базової задачі (3) власне значення $\lambda_1^{(0)} = 4$ є двократним, і йому відповідає власна функція вигляду

$$u_1^{(0)}(x,y) = a_{1,0}^{(0)}\ h_{1,0}(x,y) + a_{0,1}^{(0)}\ h_{0,1}(x,y).$$

Тут сталі $\lambda_1^{(1)}$, $a_{1,0}^{(0)}$, $a_{0,1}^{(0)}$ визначаються при виконанні першого кроку FD-методу, тобто під час символьного розв'язування задачі (4) при $j = 0$, з відповідної однорідної лінійної системи другого порядку і мають вигляд

$$\lambda_{\pm 1}^{(1)} = \pm\frac{1}{2}, \quad a_{1,0}^{(0)} = 1, \quad a_{0,1}^{(0)} = \pm 1.$$

Зауважимо, що кратність власних значень базової задачі при побудові та дослідженні традиційного алгоритму FD-методу для задачі Штурма—Ліувілля на скінченному проміжку досліджувалася в роботах [8, 9]. У випадку, що розглядається, з точки зору алгоритму все відбувається значно простіше та прозоріше. Знаходимо

$$\lambda_1^{(2j-1)} = \lambda_{-1}^{(2j-1)} = -\frac{(4j-5)!!}{(2j-1)!\,2^{4j-3}}, \quad \lambda_1^{(2j)} = \lambda_{-1}^{(2j)} = -\frac{(4j-3)!!}{(2j)!\,2^{4j-2}},$$

$$\lambda_2^{(2j-1)} = \lambda_{+1}^{(2j-1)} = \frac{(4j-5)!!}{(2j-1)!\,2^{4j-3}}, \quad \lambda_2^{(2j)} = \lambda_{+1}^{(2j)} = -\frac{(4j-3)!!}{(2j)!\,2^{4j-2}}.$$

Теорема 2. *FD-метод для задачі (1) стосовно власних пар* $(\lambda_1, u_1(x, y))$, $(\lambda_2, u_2(x, y))$ *є збіжним, а стосовно власних значень* λ_1, λ_2 *— суперекспоненціально збіжним, і граничний перехід визначає точні власні значення*

$$\lambda_1 = \frac{3\sqrt{2}+\sqrt{6}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{\sqrt{2}+3\sqrt{6}}{2}$$

з оцінкою точності

$$|\lambda_1 - \sum_{j=1}^{2m} \lambda_{-1}^{(j)}| \leqslant 2 \sum_{j=2m+1}^{\infty} |\lambda_{-1}^{(j)}| \leqslant \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{4^m \sqrt{(m+3)^3}},$$

$$|\lambda_2 - \sum_{j=0}^{2m} \lambda_{+1}^{(j)}| \leqslant \lambda_{+1}^{(2m+1)} = \frac{(4m-1)!!}{(2m+1)!\,2^{4m+1}}.$$

Нехай $n = 2$. У цьому випадку для базової задачі власне значення $\lambda_2^{(0)} = 6$ є трикратним, і йому відповідає власна функція вигляду

$$u_2^{(0)}(x,y) = a_{2,0}^{(0)}\, h_{2,0}(x,y) + a_{1,1}^{(0)}\, h_{1,1}(x,y) + a_{0,2}^{(0)}\, h_{0,2}(x,y).$$

Тут сталі $\lambda_2^{(1)}, a_{2,0}^{(0)}, a_{1,1}^{(0)}, a_{0,2}^{(0)}$ визначаються при виконанні першого кроку FD-методу, тобто під час символьного розв'язування задачі (4) при $j = 0$ з відповідної лінійної однорідної системи третього порядку.

У результаті отримуємо

$$\lambda_3^{(1)} = -1, \quad a_{2,0}^{(0)} = 1, \quad a_{1,1}^{(0)} = -2, \quad a_{0,2}^{(0)} = 1,$$

$$\lambda_4^{(1)} = 0, \quad a_{2,0}^{(0)} = 1, \quad a_{1,1}^{(0)} = 0, \quad a_{0,2}^{(0)} = -1,$$

$$\lambda_5^{(1)} = 1, \quad a_{2,0}^{(0)} = 1, \quad a_{1,1}^{(0)} = 2, \quad a_{0,2}^{(0)} = 1.$$

Далі ми обмежимося розглядом символьного алгоритму FD-методу стосовно власної пари $(\lambda_4, u_4(x, y))$. При розгляді інших двох випадків провести до кінця аналітику нам не вдалося, хоча сам метод є збіжним. За допомогою експериментів з Maple доводимо, що...

$$\lambda_4^{(2j)} = -\frac{3(4j-3)!!}{(2j)!\,2^{4j-1}}, \quad \lambda_4^{(2j-1)} = 0, \quad j = 1, 2, \ldots$$

Теорема 3. *FD-метод для задачі (1) стосовно власної пари (λ_4, $u_4(x, y)$) є збіжним, а стосовно власного значення λ_4 — суперекспоненціально збіжним, і граничний перехід визначає точне власне значення*

$$\lambda_4 = \frac{3\sqrt{2} + 3\sqrt{6}}{2}$$

з оцінкою точності

$$|\lambda_4 - \sum_{j=1}^{m} \lambda_4^{(2j)}| = \sum_{j=m+1}^{\infty} |\lambda_4^{(2j)}| \leqslant \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{4^{m+1}\sqrt{(m+1)^3}} \left(1 + \frac{9}{16(m+1)}\right).$$

Зауваження. Застосовуючи аналітичний підхід безпосередньо до задачі (1), (2), одержуємо

$$\lambda_3 = \frac{\sqrt{6}}{2} + \frac{5\sqrt{2}}{2} - 2, \quad \lambda_5 = \frac{5\sqrt{6}}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2} - 2\,.$$

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. *Magyari E.* Exact quantum-mechanical solutions for anharmonic oscillators // Phys. Lett. A. — 1981. — **81**, Iss. 2—3. — P. 116—118.
2. *Banerjee K.* General anharmonic oscillators // Proc. R. Soc. Lond. A. — 1978. — **364**. — P. 263—275.
3. *Chaudhuri R. N., Mondal M.* Improved Hill determinant method: General approach to the quantum anharmonic oscillators // Phys. Rev. A. — 1991. — **43**. — P. 32—41.
4. *Adhikari R., Dutt R., Varshni Y. P.* Exact solutions for polynomial potentials using supersymmetry inspired factorization method // Phys. Lett. A. — 1989. — **141**, Iss. 1—2. — P. 1—8.
5. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции: Т. 2. — Москва: Наука, 1974. — 296 с.
6. *Макаров В.Л.* О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма—Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами // Докл. АН СССР. — 1991. — **320**, № 1. — С. 34—39.
7. *Макаров В.Л.* FD-метод — експоненціальна швидкість збіжності // Журн. обчисл. та прикл. матем. — 1997. — № 82. — С. 69—74.
8. *Макаров В.Л., Романюк Н.М.* FD-метод для задачі на власні значення в гільбертовому просторі з кратними власними значеннями базової задачі в особливому випадку // Доп. НАН України. — 2015. — № 5. — С. 26—35.
9. *Макаров В.Л., Романюк Н.М., Лазурчак І.І.* FD-метод для задачі на власні значення з кратними власними значеннями базової задачі // Зб. праць Ін-ту математики НАН України. — 2014. — **11**, № 4. — С. 239—265.

Надійшло до редакції 23.08.2016

REFERENCES

1. *Magyari E.* Phys. Lett. A, 1981, **81**, Iss. 2—3: 116—118.
2. *Banerjee K.* Proc. R. Soc. Lond. A, 1978, **364**: 263—275.
3. *Chaudhuri R.N., Mondal M.* Phys. Rev. A, 1991, **43**: 32—41.
4. *Adhikari R., Dutt R., Varshni Y.P.* Phys. Lett. A, 1989, **141**, Iss. 1—2: 1—8.
5. *Bateman H., Erdëlyi A.* Higder transcendental functions, Vol. 2, Moscow: Nauka, 1974 (in Russian).
6. *Makarov V.L.* Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 1991, **320**, No 1: 34—39 (in Russian).
7. *Makarov V.L.* J. Comp. and Appl. Math., 1997, No 82: 69—74 (in Ukrainian).
8. *Makarov V.L., Romanyuk N.M.* Dopov. NAN Ukraine, 2015, No 5: 26—35 (in Ukrainian).
9. *Makarov V.L., Romanyuk N.M., Lazurchak I.I.* Proc. of the Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, 2014, **11**, No 4: 239—265 (in Ukrainian).

Received 23.08.2016

В. Л. Макаров

Институт математики НАН Украины, Киев
E-mail: makarov@imath.kiev.ua

ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ОДНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ
С ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ ОПЕРАТОРОМ ШРЁДИНГЕРА
С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ В $\mathbf{R}^2$

Впервые рассмотрен существенно двухмерный случай оператора Шрёдингера с полиномиальным потенциалом. С помощью FD-метода и системы компьютерной алгебры Maple найдены четыре точные собственные значения для потенциала конкретного вида из шести наименьших.

Ключевые слова: *спектральные задачи, точные собственные значения, оператор Шрёдингера, экспоненциально сходящийся метод, полиномы Эрмита.*

V. L. Makarov

Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev
E-mail: makarov@imath.kiev.ua

EXACT SOLUTIONS OF A SPECTRAL PROBLEM
FOR THE SCHRÖDINGER DIFFERENTIAL OPERATOR
WITH POLYNOMIAL POTENTIAL IN $\mathbf{R}^2$

The essentially two-dimensional case of the Schrödinger operator with polynomial potential is considered for the first time. Using the FD-method and the Maple computer algebra system, we found four of six lowest eigenvalues for a fixed form of the potential.

Keywords: *spectral problem, exact eigenvalues, Schrödinger operator, expontially convergent method, Hermite polynomials.*