

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

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda - x^2 - y^2 - q(x, y))u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \mathbf{R}^2, \quad (1)$$

$$\iint_{\mathbf{R}^2} u^2(x, y) dx dy < \infty.$$

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

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

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

Ми досліджуватимемо задачу (1) за умови

$$q(x, y) = xy, \quad (2)$$

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:

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

Її власні функції запишемо через поліноми Ерміта

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

з відповідними власними значеннями

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

Тоді рекурентна схема FD-методу матиме вигляд

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 u_n^{(j+1)}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_n^{(j+1)}(x, y)}{\partial y^2} + (\lambda_n^{(0)} - x^2 - y^2) u_n^{(j+1)}(x, y) = \\ & = - \sum_{p=0}^j \lambda_n^{(j+1-p)} u_n^{(p)}(x, y) + x y u_n^{(j)}(x, y) \equiv F_n^{(j+1)}(x, y), \end{aligned} \quad (4)$$

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

Використавши рекурентне співвідношення для поліномів Ерміта [5]

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Як наслідок, з (6)–(8) одержимо

$$\begin{aligned}
-4(k+s)a_{2k,2s}^{(2j)} &= - \sum_{p=\max(k,s)}^{j-1} a_{2k,2s}^{(2p)} \lambda_0^{(2j-2p)} + \frac{1}{4} a_{2k-1,2s-1}^{(2j-1)} + \\
& + \frac{(2s+1)}{2} a_{2k-1,2s+1}^{(2j-1)} + \frac{(2k+1)}{2} a_{2k+1,2s-1}^{(2j-1)} + (2k+1)(2s+1) a_{2k+1,2s+1}^{(2j-1)}, \\
k, s &= \overline{1, j-1}, \tag{9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-4(k+s-1)a_{2k-1,2s-1}^{(2j+1)} &= - \sum_{p=\max(k,s)}^j a_{2k-1,2s-1}^{(2p-1)} \lambda_0^{(2j-2p+2)} + \frac{1}{4} a_{2k-2,2s-2}^{(2j)} + \\
& + ka_{2k,2s-2}^{(2j)} + sa_{2k-2,2s}^{(2j)} + 4ksa_{2k,2s}^{(2j)}, \quad k, s = 1, 2, \dots, j, \\
\sum_{s=1}^j \left[8(j+s)a_{2j+1,2s-1}^{(2j+1)} + \frac{1}{2} a_{2j,2s-2}^{(2j)} + 2sa_{2j,2s-2}^{(2j)} \right] &= 0, \quad s = 1, 2, \dots
\end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \lambda_0 = a_{1,1} &= \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_0^{(2j)} = 2 + \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,1}^{(2j-1)} = 2 - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j-3)!!}{(2j)! 2^{4j-1}} = \frac{\sqrt{2} + \sqrt{6}}{2}, \\ a_{2,0} = a_{0,2} &= \sum_{j=1}^{\infty} a_{2,0}^{(2j)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j-1)!!}{(2j+1)! 2^{4j+2}} = \frac{1}{4}(-1 - \sqrt{2} + \sqrt{6}), \\ a_{1,3} = a_{3,1} &= \sum_{j=1}^{\infty} a_{1,3}^{(2j-1)} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{3,1}^{(2j-1)} = - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(4j+1)!! (2j-1)!!}{(2j+3)! (2j-1)!} \frac{j!}{2^{3j+5}} = \frac{1}{8}(8 + 3\sqrt{2} - 5\sqrt{6}). \end{aligned} \quad (11)$$

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),

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

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 $(\lambda_0, u_0(x, y))$ 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

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

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 стали $\lambda_1^{(1)}$, $a_{1,0}^{(0)}$, $a_{0,1}^{(0)}$ визначаються при виконанні першого кроку FD-методу, тобто під час символного 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

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

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

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 символного 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 символного 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...

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

Теорема 3. *FD-метод для задачі (1) стосовно власної пари $(\lambda_4, u_4(x, y))$ є збіжним, а стосовно власного значення λ_4 — суперекспоненціально збіжним, і граничний перехід визначає точно власне значення*

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

з оцінкою точності

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

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., Erdelyi A.* Higher 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, exponentially convergent method, Hermite polynomials.