НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Департамент программной инженерии
Курсовая работа

Программная реализация алгоритма построения правил квантования для метрических графов

Выполнил студент группы БПИ152 Соловьев Егор Александрович

Научный руководитель:
доцент департамента математики на факультете экономических наук,
к.ф.-м.н. Чернышев Всеволод Леонидович

Предметная область

Одной из типичных задач математической физики является нахождение собственных значений (спектра) и собственных функций некоторых дифференциальных операторов.

В квантовой механике для нахождения квазиклассических спектральных серий оператора Шрёдингера могут использоваться правила квантования Бора-Зоммерфельда. Обычно они представляют собой равенство некоторых выражений (чаще всего это некоторые интегралы), зависящих от искомых собственных значений, целым неотрицательным числам, что позволяет находить спектр.

Уравнения математической физики на геометрических графах (одномерных клеточных комплексах) и других гибридных пространствах активно изучаются в последние тридцать лет.

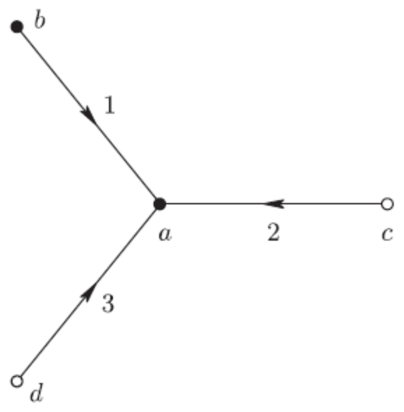
Геометрический граф

Геометрический граф состоит из рёбер и вершин (точек). Рассматриваются только конечные графы. Каждое ребро является регулярной кривой. Каждое ребро имеет длину и направление.

На графе задана непрерывная функция (потенциал) V(x).

Вершина поворота

Точка, где $V(x)=\lambda$ (λ – задаваемый параметр).



Граф с двумя новыми вершинами, то есть точками поворота

Неформальная постановка задачи

На вход подаётся геометрический граф и потенциал.

Реализация алгоритма подразумевает следующее:

- Геометрический граф преобразуется, часть графа вырезается, появляются новые вершины (точки поворота). Преобразование определяется потенциалом на ребрах.
- Формально выписываются квазиклассические решения уравнения Шредингера на рёбрах (они бывают разных типов)
- Выписывается система линейных алгебраических уравнений для склейки решений на рёбрах, которая определяется граничными условиями в вершинах.
- Записывается условие существования нетривиального решения этой системы с помощью определителя матрицы коэффициентов данной СЛАУ, т.е. применяется известная теорема из линейной алгебры. Условие равенства нулю определителя и дает искомые правила квантования.

Анализ существующих решений

Теоретическое решение (алгоритм) задачи построения правил квантования для метрических графов описано в статье В. Л. Чернышева и А. И. Шафаревича «Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе» (Мат. заметки. — 2007. — Т. 82 (№4, 2007). — С. 606-620).

Тем не менее, не существовало программного решения, позволяющего задавать граф с непрерывной функцией на нём и выписывать для него правила квантования. Такой инструмент может быть полезен исследователям, работающим в разных областях математической физики.

Обоснование актуальности работы

Данная работа потенциально может использоваться учёными, занимающимися распространением волн на объектах мезоскопической физики, вычислительной химии и т.д.

Актуальность работы обусловлена отсутствием программных решений, позволяющих строить правила квантования графов, которые, в свою очередь, помогают изучать квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на графах.

Дальнейшая разработка системы позволит создать инструмент, обрабатывающий большие графы, полученные экспериментально, что сократит временные и материальные затраты на анализ подобных систем.

Цель работы:

Разработать графическое Windows-приложение, позволяющее применить к задаваемому графу алгоритм построения правил квантования.

Задачи

- Разработать интерфейс для задания графа.
- Разработать формат хранения графа в компьютере.
- В процессе применения алгоритма необходимо решать системы неравенств различной сложности, вычислять определённые интегралы и определитель матрицы с переменными коэффициентами – целесообразно использовать математический пакет Maple и разработать интерфейс (библиотеку) для взаимодействия с ним.

Алгоритм построения правил квантования для метрических графов

Программный продукт в целом реализует алгоритм, описанный в статье В. Л. Чернышева и А. И. Шафаревича «Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе».

Другие алгоритмы

- Использован алгоритм обхода графа в глубину для поиска компонент слабой связности.

Описание алгоритма построения правил квантования

Входные данные

Геометрический граф (E,Q,L) (Q – множество вершин) с заданной на нём непрерывной функцией V(x), параметр λ – действительное число.

Выходные данные

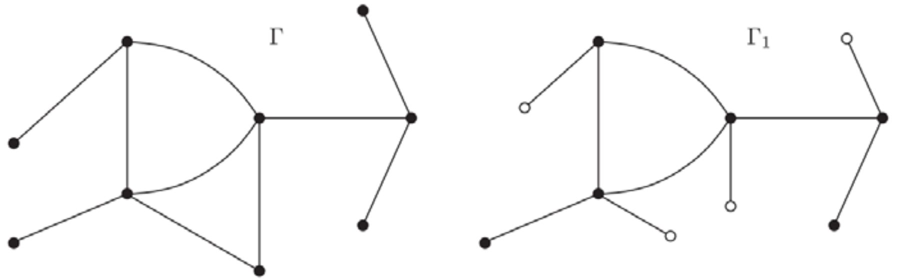
Текстовый файл, описывающий правила квантования графа.

Шаг 1

Находятся и отмечаются на графе новые вершины - точки, где V(x)=λ (вершины поворота).

Шаг 2

Из полученного графа удаляются участки, где V(x)>λ (деформация графа).



Пример деформации графа.

Шаг 3

В деформированном графе изменяется ориентация некоторых рёбер: все вершины степени один считаются начальными точками.

Шаг 4

Для каждой компоненты связности полученного после шага 3 графа составляется однородная СЛАУ связывающая квазиклассические решения (трех разных типов) на рёбрах графа.

$$\begin{bmatrix} 2\,I\sin(\phi_1) & -\sin\left(\phi_2+\frac{1}{4}\pi\right) & 0 \\ 2\,I\sin(\phi_1) & 0 & -\sin\left(\phi_3+\frac{1}{4}\pi\right) \\ 2\,\alpha_{1,1}\cos(\phi_1) & -I\,\alpha_{1,2}\cos\left(\phi_2+\frac{1}{4}\pi\right) & -I\,\alpha_{1,3}\cos\left(\phi_3+\frac{1}{4}\pi\right) \end{bmatrix}$$

Пример матрицы однородной СЛАУ

Шаг 5

Определитель матрицы каждой СЛАУ приравнивается к нулю – эти равенства нулю по известной теореме линейной алгебры и дают правила квантования.

Вычислительная сложность алгоритма

Шаги 2-4 работают за время O(E+R), где E – число рёбер графа, R – число корней уравнения V(x)=λ. Время работы шагов 1 и 5 трудно определить алгоритмически, поскольку решение уравнений и вычисление определителя производится системой Maple.

Примечание

В случае, если какая-либо компонента связности состоит из двух вершин, соединённых одним ребром, шаг 4 алгоритма не может быть применён. Эти случаи разобраны отдельно – для них правила квантования выписываются сразу.

Простейшие случаи.

Пример правил квантования

Если граф представляет из себя дерево на трёх вершинах, рассматриваемая система уравнений будет иметь матрицу:

$$\begin{pmatrix} \sin\varphi_1 & -\sin\varphi_2 \\ \alpha_1\cos\varphi_1 & \alpha_2\cos\varphi_2 \end{pmatrix}$$

Правило квантования для него выглядит следующим образом:

$$\sin(\varphi_1-\varphi_2)\,(\alpha_1-\alpha_2) - \sin(\varphi_1+\varphi_2)\,(\alpha_1+\alpha_2) = 0.$$

Здесь $\varphi_j = \frac{1}{h}\int_a^b \sqrt{\lambda - V_j(x)}\,dx$ - интеграл берётся по ребру.

Технологии и инструменты реализации

При разработке были использованы следующие технологии и инструменты:

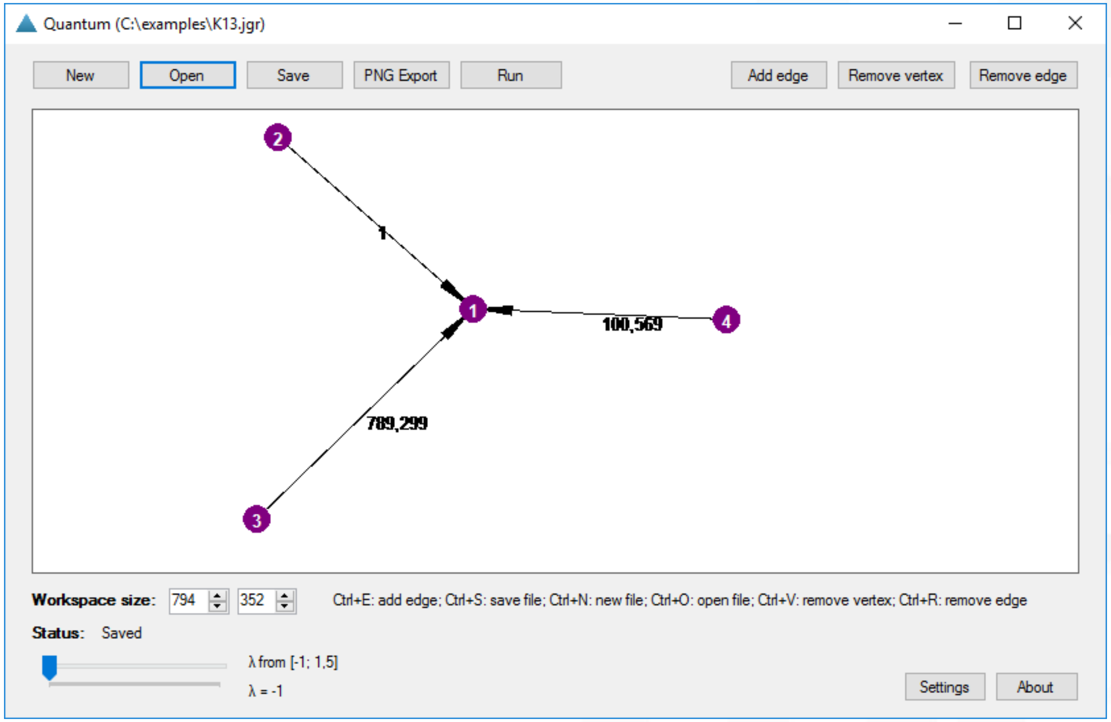
- C# 6.0
- Microsoft Visual Studio 2015
- .NET Framework 4.5.2
- Система компьютерной алгебры Maple 18/2015.

Выбор данных технологий обоснован:

- удобством C# при разработке Windows-приложений
- удобством использования и широкой распространённостью системы Maple, которая фактически является одним из стандартных средств для научных расчетов.

Основные результаты работы

1. Разработано Windows-приложение для задания геометрического графа и построения по нему правил квантования.
2. Разработана интерфейс для взаимодействия программы с математическим пакетом Maple. Его можно использовать при решении других задач прикладной математики.



Выводы по работе

- Работа носит преимущественно практический характер, но её результаты могут быть полезны в теоретических исследованиях.

- Разработанная программа представляет собой удобный инструмент для построения правил квантования для задаваемых графов.

Пути дальнейшей работы

- разработать консольную версию приложения, более удобную для анализа экспериментально полученных графов больших размеров.

- доработать DLL-библиотеку для взаимодействия Windows-программ с Maple.

Список использованных источников

1. В. Л. Чернышев Квазиклассический спектр оператора Шрёдингера на геометрическом графе / В. Л. Чернышев, А. И. Шафаревич // Матем. заметки, 82:4 (2007), 606–620.

2. Справочник по C# [Электронный ресурс] URL: https://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/618ayhy6.aspx (дата обращения: 20.04.2016, режим доступа: свободный).

3. Maple User Manual [Электронный ресурс] URL: http://www.maplesoft.com/documentation_center/maple18/UserManual.pdf (дата обращения: 20.04.2016, режим доступа: свободный).

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Спасибо за внимание!

Соловьев Егор Александрович
easolovev@edu.hse.ru

Москва, 2016