

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

11-2004-15

На правах рукописи  
УДК 004.421.2:512.714+  
519.615.5:530.145.61

**ЯНОВИЧ**  
Денис Александрович

**АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ  
ИНВОЛЮТИВНЫХ БАЗИСОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ  
ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ  
АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ**

Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна 2004

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор Гердт В. П.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Абрамов С. А., ВЦ РАН

кандидат физико-математических наук  
Васильев Н. Н., ПОМИ РАН


Ведущая организация: Научно-исследовательский институт ядерной  
физики им. Д.В.Скобельцына Московского  
государственного университета им. М.В. Ло-  
моносова

Защита состоится "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 2004 г. в \_\_\_\_ ч. \_\_\_\_ мин на заседа-  
нии диссертационного совета Д720.001.04 в Объединенном институте ядер-  
ных исследований (Лаборатория информационных технологий), г. Дубна,  
Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного инсти-  
тута ядерных исследований.

Автореферат разослан "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 2004 г.

Учёный секретарь диссертационного совета  
кандидат физико-математических наук

 З.М. Иванченко

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

## Актуальность проблемы

Системы нелинейных алгебраических полиномиальных уравнений часто возникают в различных областях науки и техники: в приближенном решении систем уравнений путем представления входящих в них функций отрезками степенных рядов, при вычислении пересечения поверхностей в геометрии, в обратной кинематической задаче робототехники, в различных задачах теоретической физики и т.д.

Численное решение систем полиномиальных уравнений сопряжено с некоторыми проблемами, такими, например, как:

- погрешности решения
- невозможность распознать и тем более решить недоопределенные системы
- возможная потеря корней

и т.п.

Этих проблем можно избежать, если использовать символьные или гибридные численно-символьные методы решения.

## Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является анализ применимости инволютивных базисов Жане для решения полиномиальных систем уравнений вместо редуцированных базисов Грёбнера, специальные программные модули для вычисления которых встроены во все современные системы компьютерной алгебры общематематического назначения.

В соответствии с целью исследования были рассмотрены следующие конкретные задачи:

1. Разработка алгоритма вычисления инволютивных базисов Жане с целью достижения максимально возможной скорости вычислений;
2. Исследование поведения алгоритма на различных тестовых примерах и прикладных задачах;
3. Разработка параллельной версии алгоритма и исследование ее особенностей;

1. На многочисленных тестовых примерах и в сравнении со специализированными системами компьютерной алгебры *Singular*<sup>1</sup> и *Magma*<sup>2</sup>, обладающими самыми быстрыми реализациями классического алгоритма Бухбергера<sup>3</sup> вычисления базисов Грёбнера выявлены преимущества базисов Жане по скорости вычислений и по потребляемой памяти.
2. Показана естественная параллелизуемость с высокой степенью масштабируемости алгоритма вычисления базисов Жане.
3. Создан эффективный комплекс программ для символьно-численного нахождения корней полиномиальных систем основанный на вычислении инволютивных базисов Жане.
4. С помощью разработанного комплекса найдены условия аналитической разрешимости уравнений Шредингера с полиномиальным потенциалом при достаточно больших значениях размерности пространства.

Практическая ценность

В диссертации создан комплекс программ позволяющий эффективно решать сложные нелинейные системы алгебраических уравнений со многими неизвестными, которые возникают в различных научных и технических приложениях.

Отдельный модуль для вычисления инволютивных полиномиальных базисов Жане встроен в специализированную систему компьютерной алгебры *Singular*, созданную в университете Кайзерслаутерна, ФРГ и являющуюся ведущей из специализированных систем, ориентированных на задачи коммутативной алгебры и алгебраической геометрии.

---

<sup>1</sup> Greuel G.-M., Pfister G. A Singular Introduction to Commutative Algebra. Springer-Verlag, Berlin, 2002. <http://www.singular.uni-kl.de>.

<sup>2</sup> Bosma W., Cannon J., Playoust C.: The Magma algebra system I: The user language. *J. Symb. Comp.*, 24(3/4):235-265, 1997.

<sup>3</sup> Бухбергер Б.: Базисы Гребнера. Алгоритмический метод в теории полиномиальных идеалов. *Компьютерная алгебра. Символьные и алгебраические вычисления*. М., Мир, с.331-372, 1986.

## Апробация работы

Основные результаты и положения диссертационной работы доложены и обсуждены на:

- научных семинарах ЛИТ ОИЯИ;
- семинарах по компьютерной алгебре ВМК МГУ;
- научном семинаре в университете Кайзерслаутерна;
- VI международной конференции по применению компьютерной алгебры АСА'2000, Ст.-Петербург, июнь 2000;
- 2й международной конференции «Современные тенденции в вычислительной физике», Дубна, июль 2000;
- IV международной конференции по компьютерной алгебре в научных вычислениях CASC'2001, Констанц, ФРГ, 2001;
- международной конференции по компьютерной алгебре и ее применению в физике, СААР'2001, Дубна, июнь 2001;
- международной конференция «Недоопределенные и переопределенные системы алгебраических и дифференциальных уравнений», Карлсруе, ФРГ, март 2002;
- V международном конгрессе по математическому моделированию, Дубна, сентябрь-октябрь 2002;
- V международной конференции «Симметрии в нелинейной математической физике», Киев, июнь 2003;
- VI Международной конференции по компьютерной алгебре в научных вычислениях CASC'2003, Пассау, ФРГ, сентябрь, 2003;

По теме диссертации опубликовано 8 работ.

## Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, приложения и списка литературы. Диссертация содержит 111 страниц, 4 таблицы, 4 рисунка. Список литературы содержит 78 работ, из них 5 на русском, 73 на иностранных языках.

# СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель и задачи диссертационной работы, перечислены полученные в диссертации новые результаты, их практическая ценность, описана структура диссертации. В разделе 1.1 приведены широко используемые в настоящее время методы решения систем полиномиальных уравнений, которые можно рассматривать в качестве альтернативы для метода, изложенного в диссертации. Также приведено несколько конкретных примеров из различных областей науки и техники, в которых требуется решать алгебраические системы.

В разделе 1.1.3 описывается метод решения систем уравнений, основанный на использовании базисов Грёбнера<sup>4</sup> и состоящий из трех этапов:

1. Проверка совместности системы и конечности числа решений.
2. Получение лексикографического<sup>5</sup> базиса Грёбнера, который имеет следующую структуру для переменных  $x_1 \succ \dots \succ x_n$ : единственный полином  $f(x_n) = 0$ , несколько полиномов  $f(x_{n-1}, x_n) = 0$  и т.д. Его форма чрезвычайно удобна для вычисления корней системы.
3. Собственно вычисление корней аналогично обратному ходу метода Гаусса.

Из-за высокой сложности вычисления лексикографического базиса Грёбнера напрямую, обычно выполняют следующую операцию: строят базис в случае более подходящего упорядочения (например по полной степени, затем по обратной лексикографии), а потом преобразовывают его в лексикографический. Также стоит заметить, что первый этап обычно совмещен со вторым – для проверки совместности системы достаточно проверить не содержит ли базис Грёбнера константу, а конечность или бесконечность числа решений легко установить, исходя из структуры старших членов базиса в любом упорядочении.

Но и этот способ, как показывают наши вычислительные эксперименты, не позволяет достичь высокой скорости расчетов. Альтернативный метод получения базиса Грёбнера для заданной системы, описываемый во второй главе, позволяет достичь лучших результатов.

<sup>4</sup> Cox D., Little J., O'Shea D.: Using Algebraic Geometry. Springer-Verlag, pp.24–51, 1998.

<sup>5</sup> Robbiano, L.: On the theory of graded structures, *J. Symb. Comp.* 2 (1986) 139–170

Вторая глава посвящена изложению символьно-численного метода решения систем уравнений на основе инволютивных базисов, которые являются в общем случае нередуцированными базисами Грёбнера<sup>6</sup>, но имеют более низкую сложность вычисления.

В разделе 2.1 даны основные определения и теоремы, приведены алгоритмы вычисления инволютивных базисов систем уравнений – в частности базисов Жана, с помощью которых в программном комплексе, описываемом в диссертации, производится получение базисов Грёбнера. С помощью вычислительных экспериментов показана более высокая скорость вычислений по сравнению с лучшими реализациями классического алгоритма Бухбергера.

В разделе 2.2 рассмотрена внутренняя параллелизуемость алгоритма вычисления инволютивных базисов и приводится параллельный вариант алгоритма.

Если рассмотреть инволютивный алгоритм с точки зрения разбиения его на некоторые элементарные действия, то мы получим следующую последовательность шагов главного цикла:

1. Выбор минимального по упорядочению элемента  $p$  множества полиномов  $Q$ .
2. Вычисление его инволютивной нормальной формы –  $NF_L(p, T)$ .
3. Занесение его в промежуточный базис  $T$  и затем занесение его продолжений в  $Q$ .

Мы установили, что данную последовательность действий, без ущерба для алгоритма, можно переписать в следующем виде:

1. Выполнение полной редукции старших мономов для всех полиномов, входящих в  $Q$ .
2. Выбор минимального по упорядочению элемента  $p$  множества полиномов  $Q$ .
3. Полная инволютивная редукция  $p$ .
4. Занесение его в базис и затем занесение его продолжений в  $Q$ .

---

<sup>6</sup> Gerdt V.P., Blinkov Yu.A.: Involutive Bases of Polynomial Ideals *Math. Comp. Sim.* 1998, 45. P.519-542.

Необходимо отметить, что у нас обычно имеется неоднозначность в выборе полинома для занесения в  $T$ , поскольку после редукции по старшим мономам в  $Q$  чаще всего образуется несколько полиномов с одинаковыми лидирующими мономами – и мы можем выбирать любой из них.

---

**Алгоритм 1** ParallelJanetBasis( $F, \prec, J_{MP}$ )

---

**Input:**  $F \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , конечное полиномиальное множество;

$\prec$ , допустимое упорядочение;

$J_{MP}$  - число одновременных редукций

**Output:**  $G$ , минимальный базис Жане  $Id(F)$

```

1: choose  $f \in F$  с минимальным  $lm(g)$  по  $\succ$ 
2:  $p := \{f, lm(f)\}$     $T := \{p\}$ 
3:  $Q := \{\{q, lm(q)\} \mid q \in F \setminus \{f\}\}$ 
4: InvolutiveReduction( $Q, T, J_{MP}$ )
5: while  $Q \neq \emptyset$  do
6:   choose  $p \in Q$  у которого  $lm(pol(p))$  не имеет делителя в
       $\{lm(pol(q)) \mid q \in Q \setminus \{p\}\}$ 
7:   if  $lm(pol(p)) = 1$  then
8:     return  $\{1\}$ 
9:   else
10:     $Q := Q \setminus \{p\}$ 
11:     $pol(p) := NF_J(pol(p), \{pol(f) \mid f \in T\})$ 
12:    if  $lm(pol(p)) = anc(p)$  then
13:      for all  $\{f \in T \mid lm(pol(f)) \succ lm(pol(p))\}$  do
14:         $Q := Q \cup \{f\}$     $T := T \setminus \{f\}$ 
15:      od
16:    fi
17:  fi
18:   $T := T \cup p$     $Q := Q \cup \{p \cdot x, x \in NM_J(p, T)\}$ 
19:  InvolutiveReduction( $Q, T, J_{MP}$ )
20: od
21:  $G := \{pol(f) \mid f \in T\}$ 

```

---

Есть несколько возможностей распараллеливания этого алгоритма:

- Распараллеливание инволютивной редукции старших мономов множества  $Q$  по  $T$  (строки **4,19**) – именно этот пункт и позволяет получить существенный прирост производительности.
- «Заглядывание вперед» при выборе полинома для очередного занесения в  $T$ : мы можем выбрать несколько кандидатов, подсчитать их полные инволютивные нормальные формы (строка **11**) и выбрать ту, которая нам больше подходит.



Проведенные вычислительные эксперименты с реализацией этого алгоритма показали, что с ростом сложности вычисления инволютивного базиса эффективность параллельного алгоритма возрастает. В отличие от многочисленных и недостаточно успешных параллельных реализаций алгоритма Бухбергера (о которых известно автору), не наблюдается стохастического поведения времени вычисления базиса<sup>7</sup> – при нескольких прогонах инволютивной параллельной программы времена исполнения отличаются в пределах погрешности таймера компьютера.

Раздел 2.3 посвящен решению исходной системы путем символического (если это возможно) или численного нахождения корней лексикографического базиса Грёбнера. Процесс этот напоминает обратный ход метода Гаусса: сначала получаем корни полинома от одной переменной (который всегда единственен в лексикографическом базисе); затем подставляем полученные значения в систему и опять получаем полином от одной переменной и т.д. Есть два пути нахождения корней полинома:

1. Универсальный численный (но тут нас опять ждут трудности с погрешностями).
2. Аналитический (путем символических вычислений), применимый в отдельных, описанных ниже, случаях.

Если полином факторизуется, и степени факторов не превосходят 4 – для нахождения корней используется программа на языке системы *Reduce*<sup>8</sup> и корни выводятся в аналитическом виде. Иначе, при помощи написанного автором на основе библиотеки научных вычислений *PARF*<sup>9</sup> компонента программного комплекса *ROOTS*, производится численное вычисление корней полинома и соответственно системы уравнений.

В разделе 2.4 описывается алгоритм быстрого поиска делителя Жане, существенно использующего внутренние свойства деления, причем поиск осуществляется с использованием специальной структуры данных - дерева Жане.

Рассмотрим множество полиномов с лидирующими мономами, образующими множество  $U = \{x^2y, xz, y^2, yz, z^2\}$  ( $x \succ y \succ z$ ). и отобразим его в виде дерева Жане, как показано на следующем рисунке.

---

<sup>7</sup>Amrhein B., Gloor O., Küchlin W. A Case Study of Multi-Threaded Gröbner Basis Completion. *Proceedings of ISSAC'96* (1996) 95-102.

<sup>8</sup><http://www.uni-koeln.de/REDUCE/>

<sup>9</sup><http://www.parigp-home.de>

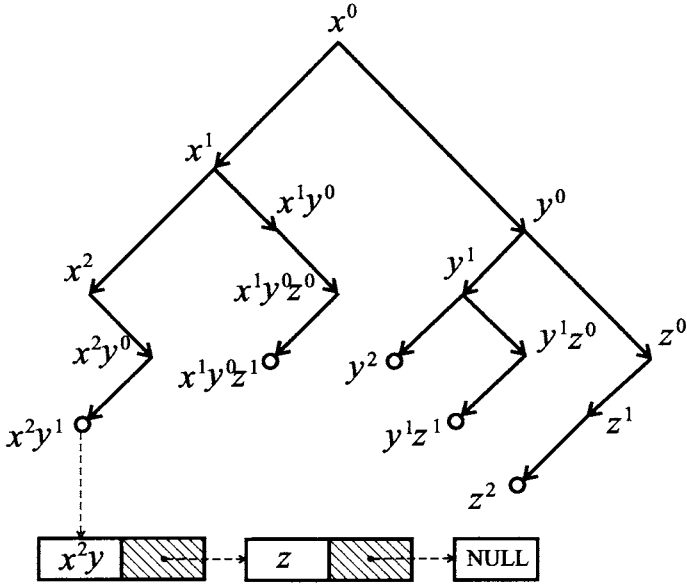


Рис. 1: Дерево Жане

На данном рисунке листья дерева соответствуют мономам рассматриваемого множества. Левому потомку соответствует моном с увеличенной на единицу степенью текущей переменной. Правый потомок указывает на последующую переменную согласно выбранному упорядочению.

Рассмотрим теперь структуру бинарного дерева Жане (*Janet Tree*, сокращенно *JT*) общего вида, как множества вершин и листьев  $JT = \cup\{\nu\}$ , сопоставляемого непустому множеству мономов. Каждой элементу дерева  $\nu$  будем сопоставлять множество из четырех элементов  $\nu = \{d, u, nd, nv\}$  со следующей структурой:

- $Deg(\nu) = d$  — степень переменной,
- $Mon(\nu) = u$  — моном, сопоставляемый данной вершине,
- $Ndg(\nu) = nd$  — указатель на следующую по степени вершину,
- $Nvr(\nu) = nv$  — указатель на следующую по переменной вершину.

При отсутствии следующей вершины, указателю на нее будем приписывать значение *nil*. Там где это не вызывает недоразумения, мы будем, для простоты, отождествлять указатели *nd* и *nv* с соответствующими им вершинами.

Корню дерева, который обозначим  $\nu_o$ , мы сопоставим нулевую степень текущей переменной и единичный моном  $u = 1$ . Вершины и листья дерева  $JT$  обладают состояниями:

Вершина:  $Nvr(\nu) \neq nil \vee (Ndg(\nu) \neq nil \wedge Deg(\nu) < Deg(Ndg(\nu)))$   
 Лист:  $Nvr(\nu) = nil \wedge Ndg(\nu) = nil$

Для быстрого поиска делителя Жане монома  $w \neq 1$  в заданном дереве, соответствующем мономиальному множеству  $U \neq \{1\}$ , мы использовали алгоритм **JanetDivisor** приведенный ниже.

---

**Алгоритм 2** JanetDivisor( $JT, w$ )

---

**Input:**  $JT$  – дерево Жане,  $w$  – моном

**Output:** моном  $u \mid_J w$  листа  $JT$  или  $nil$  в противном случае

```

1:  $d := deg(w)$ 
2:  $i := 1$ 
3:  $\nu := \nu_o$ 
4: while  $d > 0$  do
5:   while  $Deg(\nu) < deg_i(w)$  and  $Ndg(\nu)$  do
6:      $\nu := Ndg(\nu)$ 
7:   od
8:   if  $Nvr(\nu)$  then
9:      $d := d - deg_i(w)$ 
10:     $i := i + 1$ 
11:     $\nu := Nvr(\nu)$ 
12:   elif  $Ndg(\nu)$  then
13:     return  $nil$ 
14:   else
15:     return  $Mon(\nu)$ 
16:   fi
17: od

```

---

Следующая теорема показывает, что временная сложность данного алгоритма поиска делителя Жане ниже чем у классического алгоритма бинарного поиска такого делителя в лексикографически упорядоченном множестве мономов.

**Теорема 1** Пусть  $d$  наибольшая полная степень мономов от  $n$  переменных из мономиального множества  $U$ . Тогда временная сложность алгоритма **JanetDivisor** и алгоритма бинарного поиска делителя Жане ограничены соответственно

$$t_{\text{JanetDivisor}(U)} = O(d + n),$$

$$t_{\text{BinarySearch}(U)} = O(n((d + n) \log(d + n) - n \log(n) - d \log(d))).$$

В третьей главе рассматриваются вопросы практической реализации описанных выше алгоритмов с целью построения программного комплекса для решения систем алгебраических полиномиальных уравнений.

В разделе 3.1 описывается представления данных, которые позволили эффективно реализовать алгоритмы, предложенные в диссертации. Как известно<sup>10</sup>, в вычислениях с полиномами над полем целых чисел (которые доминируют в нашем комплексе) очень важны два фактора: быстрые операции над коэффициентами и мономами. Для операций над целыми произвольной длины мы использовали библиотеку *GMP*<sup>11</sup>, которая является одной из быстрых в мире. Все вычисления, производящиеся в нашем программном комплексе над мономами, можно разбить на несколько классов: вычисление полной степени монома  $deg(u)$ ; проверка делимости, обычной и инволютивной; умножение мономов; сравнение двух мономов по выбранному упорядочению; умножение монома на переменную.

После предварительных исследований, было выяснено, что процедуры сравнения и умножения мономов являются наиболее быстрыми для случая лексикографического упорядочения переменных. Как известно<sup>12</sup> любое упорядочение при помощи соответствующей невырожденной матрицы преобразования можно свести к лексикографическому:

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \dots & c_{nn} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} i_1 \\ i_2 \\ \vdots \\ i_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ \vdots \\ j_n \end{pmatrix},$$

где  $(i_1, \dots, i_n)^T$  – вектор степеней монома в исходном упорядочении  $\prec_1$ ,  $M_{\prec_1}^{\prec_2} = \{c_{kl} \mid k = \overline{1, n}, l = \overline{1, n}\}$  – матрица преобразования,  $(j_1, \dots, j_n)^T$  – вектор степеней монома в лексикографическом упорядочении  $\prec_2$ . То есть, для максимально быстрых операций с мономами следует действовать по такой схеме:

1. Кодируем все мономы входного набора в нужное нам упорядочение.
2. Проводим все необходимые операции.
3. Перед выводом результатов декодируем опять же весь набор.

<sup>10</sup>Кнут Д. Искусство программирования на ЭВМ. М., Мир, т 2, с.354-384, 1977.

<sup>11</sup><http://www.swox.com/gmp>

<sup>12</sup>Robbiano, L.: On the theory of graded structures, *J. Symb. Comp.* **2** (1986) 139–170.

Раздел 3.2 посвящен описанию форматов входных файлов комплекса и схемы его работы (см. рис. 2). Комплекс состоит из трех, функционально различных, программ:

1. JB, вычисляющей инволютивный базис Жане и базис Грёбнера исходной системы уравнений, а также подсчитывающей число корней путем вычисления размерности пространства решений.
2. FGLM, конвертирующей<sup>13</sup> базис Грёбнера в исходном упорядочении в базис Грёбнера в лексикографическом упорядочении.
3. ROOTS, вычисляющей символьным (если возможна факторизация полинома до факторов не более 4-го порядка) или численным методом корни полученного базиса, а следовательно и исходной системы.

Четвертая глава посвящена нахождению с помощью описываемого программного комплекса алгебраической системы Магьяри, решение которой эквивалентно решению уравнения Шредингера с центральным полиномиальным потенциалом при достаточно большой пространственной размерности.

Раздел 4.1 содержит постановку задачи о решении уравнения Шредингера с центральным полиномиальным потенциалом

$$V^{[q]}(r) = g_0 r^2 + g_1 r^4 + \dots + g_{2q} r^{4q+2}, \quad g_{2q} = \gamma^2 > 0, \quad (1)$$

и размерностью пространства  $D$ . Тогда, при большой значении  $D$ , уравнение Шредингера становится точно разрешимым, причем только если константы  $g_j$  удовлетворяют определенным условиям, образующим систему полиномиальных уравнений.

В разделе 4.2 приведен вывод системы Магьяри (решение которой эквивалентно решению исходной задачи). Рассмотрим уравнение Шредингера в радиальной форме

$$\left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \omega^2 r^2 \right] \psi(r) = E \psi(r) \quad (2)$$

с потенциалом вида (1). Рассмотрим представления

$$V^{(q)}(r) = U^{(q)}(r) + r^2 [W^{(q)}(r)]^2, \quad U^{(q)}(r) = G_0 r^2 + G_1 r^4 + \dots + G_{q-1} r^{2q},$$

<sup>13</sup> *Faugère J.C., Gianni P., Lazard D. and Mora T.: Efficient Computation of Zero-dimensional Gröbner Bases by Change of Ordering, J. Symb. Comp. 16 (1993) 329-344.*

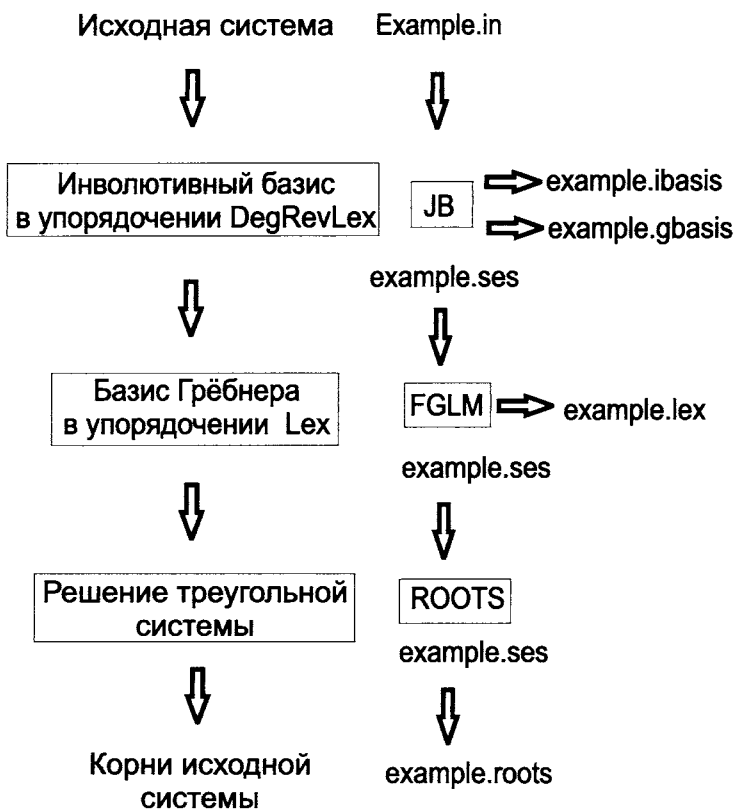


Рис. 2: Схема программного комплекса

$$W^{(q)}(r) = \alpha_0 + \alpha_1 r^2 + \dots + \alpha_q r^{2q} \quad (3)$$

Эти формулы дают репараметризацию полинома (1), как функции от  $r$  и приводят к однозначному соотношению между двумя наборами констант взаимодействия

$$\{g_0, \dots, g_{2q}\} \iff \{G_0, \dots, G_{q-1}, \alpha_0, \dots, \alpha_q\}$$

где  $g_{2q} = \alpha_q^2$ ,  $g_{2q-1} = g_{2q-1}(\alpha_q, \alpha_{q-1}) = 2\alpha_{q-1}\alpha_q, \dots$  или  $\alpha_q = \sqrt{g_{2q}} \equiv \gamma > 0$ ,  $\alpha_{q-1} = g_{2q-1}/(2\alpha_q)$  и т.д.

Для всех  $q = 1, 2, \dots$ , запишем

$$\lambda^{(q)}(r) = \frac{1}{2}\alpha_0 r^2 + \frac{1}{4}\alpha_1 r^4 + \dots + \frac{1}{2q+2}\alpha_q r^{2q+2}. \quad (4)$$



состояния гармонического осциллятора. При  $q = 1$  мы приходим к модели осциллятора шестой степени по  $r$ . При этом "выпадающая" последняя строка фиксирует одну из констант связи и мы получаем диагональную матрицу  $N \times N$  которая определяет  $N$ -плет вещественных энергий. При  $q > 1$  ситуация намного сложнее. Подсчет числа параметров и уравнений показывает, что лишь малая часть мультиплетов связанных состояний может быть получена в замкнутой форме<sup>14</sup>.

В разделе 4.3 система Магьяри переписывается и упрощается для случая большой пространственной размерности  $D$ . При  $q > 1$  вычислительная трудность решения задачи сильно возрастает при росте  $N$ . Поэтому необходимы некоторые упрощения для рассматриваемого нами случая  $D \gg 1$ . При любом значении  $D$  последнее уравнение в (6) не связано с остальными и значит при любом  $q > 1$  оно может рассматриваться как условие на последнюю константу связи

$$g_{q-1} = -\alpha_q (4n + 2\ell + 3 - 2q) + (\alpha_0\alpha_{q-1} + \alpha_1\alpha_{q-2} + \dots + \alpha_{q-1}\alpha_0). \quad (9)$$

Подстановка этого определения константы  $g_{q-1}$  упрощает вид нижней диагонали  $\hat{Q}^{[N]}$

$$A_n^{(q)} = 4\gamma (N + q - n - 1). \quad (10)$$

Так как  $A_{N+q-1}^{(q)} = 0$  мы можем переписать (6) в более компактной форме при размере прямоугольной матрицы  $Q^{[N]}$   $(N + q - 1)$  на  $N$

$$Q^{[N]} \vec{h}^{(N)} = 0. \quad (11)$$

Пусть в исходном дифференциальном уравнении (2) значение пространственной размерности  $D$  будет достаточно большим. Преобразуем элементы старой матрицы

$$\begin{aligned} C_n &= (2n + 2)(2n + 2L + D), & B_n &= -g_{-1} - \alpha_0(4n + 2L + D), \\ A_n^{(k)} &= -g_{k-1} - \alpha_k(4n + 2L + D - 2k) + (\alpha_0\alpha_{k-1} + \dots + \alpha_{k-1}\alpha_0), \\ & k = 1, 2, \dots, q - 1, & n &= 0, 1, \dots, N + q - 2, \end{aligned} \quad (12)$$

сохраняя только доминирующие компоненты

$$C_n^{[0]} = (2n + 2)D, \quad B_n^{[0]} = -g_{-1} - \alpha_0 D, \quad A_n^{(k)[0]} = -g_{k-1} - \alpha_k D, \quad k < q$$

<sup>14</sup>Znojil, M., Leach, P. G. L.: On the elementary Schrödinger bound states and their multiplets. J. Math. Phys. 33 (1992) 2785 - 2794.





$$\begin{aligned}
p_0^{(1)} = p_1^{(1)} = p_0^{(2)} = -p_1^{(2)} &= 1, & N = 2, \\
p_0^{(1)} = p_2^{(1)} = p_0^{(2)} = -p_2^{(2)} = p_0^{(3)} = p_2^{(3)} &= 1, \\
p_1^{(1)} = -p_1^{(3)} = 2, & p_1^{(2)} = 0, & N = 3,
\end{aligned}$$

и т.д.

Записывая эти решения в компактном виде, мы получили следующую форму волновой функции

$$\psi^{(j)}(r) = r^{\ell+1} \left(1 + \frac{r^2}{\mu}\right)^{N-j} \left(1 - \frac{r^2}{\mu}\right)^{j-1} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_0 r^2 - \frac{1}{4}\alpha_1 r^4\right), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (18)$$

Значения энергии, определяемые уравнением (17) образуют регулярный мультиплет. Возникает вопрос – сохранится ли подобная регулярность при больших целых значениях  $q > 1$ ? Ответ – да, сохранится.

Для осциллятора с потенциалом десятого порядка при  $q = 2$  и для любого  $N$ , если обозначить  $s_1 = s$  и  $s_2 = t$ , то обнаруживается, что задача может быть сведена к полиномиальному уравнению с  $\binom{N+1}{2}$  комплексными корнями  $s$  при любых  $N$ , а все физические корни (значения энергии) могут быть описаны следующей формулой

$$s^{(j)} = N + 2 - 3j, \quad j = 1, 2, \dots, j_{max}, \quad j_{max} = \text{entier} \left[ \frac{N+1}{2} \right]. \quad (19)$$

После многократного применения нашего программного комплекса для решения систем при более высоких измерениях  $N$ , получается правило (19): при любых значениях измерения  $N$  существуют только такие вещественные корни, что  $s^{(j)} = t^{(j)}$ . Это означает, что для каждого значения энергии, которое «допустимо», конструируется «допустимая» константа связи  $t$ .

Далее в диссертации приведены все решения подобного вида вплоть до случая  $q = 5$  и  $N = 9$ .

Приложения к диссертации содержат таблицы времен выполнения и набор примеров, которые выступали в роли тестовых. Программный комплекс для решения систем уравнений может быть загружен с сайта автора <http://invo.jinr.ru>, там же находятся в открытом доступе ряд публикаций, связанные с тематикой диссертации.

## Заключение

В диссертации получены следующие результаты, выносимые на защиту:

1. Найдено специальное представление множества полиномов в виде бинарного дерева (дерева Жане), опирающееся на внутренние свойства инволютивного деления и обеспечивающее более высокую вычислительную эффективность поиска инволютивного делителя по сравнению с классическим бинарным поиском в сортированном списке. Данное представление значительно увеличивает скорость выполнения редукций в инволютивном алгоритме.
2. Впервые установлен внутренний параллелизм алгоритма построения инволютивных полиномиальных базисов, обеспечивающий высокую степень масштабируемости, в отличие от многочисленных и не слишком удачных попыток распараллеливания алгоритма Бухбергера для вычисления базисов Грёбнера. Эффективное распараллеливание инволютивного алгоритма подтверждено многочисленными компьютерными экспериментами по вычислению инволютивных базисов Жане.
3. На языке С разработан переносимый универсальный программный комплекс для численно-аналитического решения систем алгебраических уравнений с конечным числом корней, основанный на вычислении базиса Жане в упорядочении сначала по полной степени и затем по обратному лексикографическому порядку с последующим преобразованием этого базиса в чисто лексикографический базис Грёбнера и нахождением корней этого базиса аналитическими (где это возможно) или численными методами.
4. С помощью разработанного программного комплекса впервые найдены условия точной разрешимости уравнения Шредингера для двухпараметрического класса центральных потенциалов полиномиального типа при достаточно больших значениях пространственной размерности. При выполнении этих условий явно найдены решения переопределенной системы нелинейных уравнений (системы Магьяри), эквивалентной задаче решения уравнения Шредингера.

Основное содержание диссертационной работы изложено в публикациях:

1. *Гердт В. П., Блинков Ю.А., Янович Д.А.* Быстрый поиск делителя Жане. // Программирование.— 2001.— т. 27, № 1.— С. 22–24, Москва.
2. *Gerdt, V.P., Blinkov, Yu.A., Yanovich, D.A.* Construction of Janet Bases. I. Monomial Bases. // Computer Algebra in Scientific Computing / CASC'01, V.G.Ganzha, E.W.Mayr and E.V.Vorozhtsov (Eds.), Springer-Verlag, Berlin, 2001, pp.233-247.
3. *Gerdt, V.P., Blinkov, Yu.A., Yanovich, D.A.* Construction of Janet Bases. II. Polynomial Bases. // Computer Algebra in Scientific Computing / CASC'01, V.G.Ganzha, E.W.Mayr and E.V.Vorozhtsov (Eds.), Springer-Verlag, Berlin, 2001, pp.249-263.
4. *Gerdt, V.P., Yanovich, D.A.* Parallelism in Computing Janet Bases. // Proceedings of CAAP'01, June 28-30, 2001, Dubna, Russia.
5. *Gerdt V.P., Yanovich D.A.* Parallelization of an Algorithm for Computation of Involutive Janet Bases. // Programming and Computing Software.— 2002.— Vol. 28, № 2. — pp. 66–69, Москва.
6. *Gerdt V.P., Yanovich D.A.* Implementation of the FGLM Algorithm and Finding Roots of Polynomial Involutive Systems. // Programming and Computing Software.— 2003.— Vol. 29, № 2.— pp. 72–74, Москва.
7. *Znojil, M., Yanovich, D.A., Gerdt, V.P.* New exact solutions for polynomial oscillators in large dimensions. // J. Phys. A: Math. Gen.— 2003.— (36) pp.6531-6549 (LANL arXiv math-ph/0302046).
8. *Gerdt V.P, Yanovich D.A., Znojil M.* On Exact Solvability of Anharmonic Oscillators in Large Dimensions. // Computer Algebra in Scientific Computing / CASC 2003, V.G.Ganzha, E.W.Mayr, E.V.Vorozhtsov (Eds.). Institute of Informatics, Technical University of Munich, Garching, 2003, pp.143-162 (LANL arXiv math-ph/0310012)

Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 16.02.2004.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,12. Уч.-изд. л. 1,35. Тираж 100 экз. Заказ № 54303.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)