СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р2 - 7471

В. Гарчински

О ГРАНИЧНЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА

1973

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P2 - 7471

В. Гарчински*

О ГРАНИЧНЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА

* Постоянный адрес: Институт теоретической физики Вроцлавского университета, Вроцлав, ПНР.

I. Введение

Целью настоящей работы является обсуждение возможных граничных условий и соответствующих граничных задач для уравнений Шредингера, кратко намеченных раньше автором [I] . Рассмотрение ведется с позиции теории так называемых квантовых случайных процессов или, короче, случайных псевдопроцессов [2] – [7] .

Заметим, что встречающиеся спорадически в физике разные граничные задачи для уравнений Шредингера не изучены до сих пор сколь-нибудь систематически, в отличие от таких задач для классических уравнений математической физики, имеющих обширную специальную литературу.

Напомним, что в простейшем случае движения одной нерелятивистской бесспиновой частицы в области $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^3$ марковский псевдопроцесс задается комплексной функцией $(s,y;t,x)$, понимаемой как плотность амплитуды вероятности обнаружения частицы в точке $x \in \mathcal{X}$ в момент времени t , если известно, что в момент времени $s \leq t$ частица находилась в точке $y \in \mathcal{X}$. На функцию $(s,y;t,x)$, называемую дальше амплитудой перехода, накладываются следующие требования [2]:

(i) $$(s,y;t,x)=(t,x;s,y)^*$$

обратимость псевдопроцесса,

(ii) $$\lim_{t\downarrow s}(s,y;t,x)=\delta(y-x)$$

временная непрерывность,

(iii) $$\int_{\mathcal{X}} dz\,(s,y;\tau,z)(s,x;\tau,z)^*=\delta(y-x)$$

унитарность,

(iv) $$\int_{\mathcal{X}} dz\,(s,y;\tau,z)(\tau,z;t,x)=(s,y;t,x)\ ,\quad s\le\tau\le t$$

марковость,

(v) $$\lim_{x'\to x}(s,y;t,x')=(s,y;t,x)$$

пространственная непрерывность.

Условия (ii), (iv) и (v) выполняются в теории марковских процессов, которые естественно также называть классическими марковскими процессами, так как они формулируются на языке неотрицательных вероятностей переходов, а не амплитуд [8]. Заметим, что перечисленные условия на амплитуду перехода следуют из ее представления в виде фейнмановского интеграла по путям, но там они играют лишь роль интересных соотношений [9]. Мы меняем точку зрения, постулируя перечисленные свойства амплитуды, определяющие новый математический объект – марковский псевдопроцесс – и тем самым получаем возможность по-новому взглянуть на сами интегралы Фейнмана.

Отметим, что сходные идеи построения вероятностной схемы в терминах амплитуды перехода выдвигались и раньше [10] – [12].

Уместно будет здесь подчеркнуть отличие концепции псевдопроцессов от многочисленных попыток сведения квантовой механики к теории классических марковских процессов (см. по этому поводу статьи [13], [14] и цитируемые там более ранние работы).

Дополняя условия (i)-(v) требованиями диффузионности псевдопроцесса, которые формулируются в терминах амплитуды точно так же, как соответствующие условия в классической теории [15], получаем дифференциальные уравнения Колмогорова – Шредингера на амплитуду перехода

$$\left[\partial_s + \frac{1}{2} b_{kj}(s,y)\partial_y^k\partial_y^j + a_k(s,y)\partial_y^k + c(s,y)\right](s,y;t,x) = 0 \tag{1.1}$$

$$\left[-\partial_t + \frac{1}{2}\partial_x^k\partial_x^j b_{kj}(t,x) - \partial_x^k a_k(t,x) + c(t,x)\right](s,y;t,x) = 0. \tag{1.2}$$

В соответствии с номенклатурой, принятой по отношению к уравнениям Колмогорова, мы назовем первое уравнение обратным уравнением Шредингера, а второе – прямым. Условие обратимости (i) налагает ограничения на коэффициентные функции. Они должны иметь вид [2]:

$$\begin{aligned} b_{kj} &= i\beta_{kj} = b_{jk} \\ a_k &= \xi_k + \frac{i}{2}\partial^j\beta_{kj} \\ c &= \frac{1}{2}\partial^k\xi_k + i\eta \qquad k,j = 1,2,3, \end{aligned} \tag{1.3}$$

где β_{kj}, ξ_k, η — независимые вещественные функции.

В простейшем случае, соответствующем свободной частице с массой m, полагаем $\eta = \xi_k = 0$, $\beta_{kj} = \frac{\hbar}{m}\delta_{kj}$, что приводит к хорошо известной амплитуде перехода

$$(s,y;t,x) = \left[2\pi\lambda(t-s)\right]^{-3/2} \exp\left\{-\frac{(x-y)^2}{2\lambda(t-s)}\right\} \qquad (1.4)$$

$$\lambda = i\frac{\hbar}{m}.$$

Эта же функция при $\lambda > 0$ является плотностью вероятности перехода частицы, совершающей свободные блуждания в среде с коэффициентом диффузии $D = \frac{\lambda}{2}$. По этой функции восстанавливается основное вероятностное пространство $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), P)$ и процесс $\{w(t,\omega): t \geq 0, \omega \in \Omega\}$ как измеримое отображение множества Ω элементарных событий ω в множество возможных состояний, которое в данном случае является трехмерным евклидовым пространством $\mathbb{R}^3$. Мера P, заданная на σ-алгебре $\mathcal{B}(\Omega)$ подмножеств Ω, является известной мерой Винера, по которой можно определить соответствующий континуальный интеграл [16], [17]. Более подробное объяснение этих понятий дано в следующем разделе.

Попытка перенесения упомянутой конструкции на случай комплексного λ встречается с трудностью, так как соответствующая комплекснозначная функция множеств не имеет ограниченной вариации и, стало быть, не проходит классическая конструкция интеграла по ней [18] - [21]. Можно, однако, попытаться построить вероятностную схему прямо в терминах комплекснозначных операций усреднения Q, действующих на некотором множестве функций от случайных параметров. Соответствующая псевдомера (как в конструкции интеграла Даниеля) определяется как значение операции усреднения на индикаторе данного события:

$$M\{A\} = Q\{\chi_A\}, A \in \mathcal{B}(\Omega).$$

Существование операции усреднения Q с нужными свойствами, или, что эквивалентно, существование мсевдомеры M является основным предположением развиваемой нами схемы. Полученные до сих пор результаты можно рассматривать как некоторое уточнение результатов, полученных раньше с помощью континуального интеграла Фейнмана. Так, например, решения задачи Коши для уравнений Колмогорова – Шредингера записываются в виде, аналогичном формуле Фейнмана-Каца, [22] (см. также [7]).

$$\phi(s,y) = Q_{s,y}\{f[t,z(t)]\exp F\} = \int_{\mathbb{R}^3}(s,y;t,x)f(t,x)\,dx \tag{I.5}$$

$$\psi(t,x) = Q^{t,x}\{g[s,z(s)]\exp F\} = \int_{\mathbb{R}^3} g(s,y)(s,y;t,x)\,dy \tag{I.6}$$

$$F = \int_s^t C[\tau,z(\tau)]\,d\tau + \frac{iq}{\hbar c}\int_s^t \sigma_k^j[\tau,z(\tau)].A^k[\tau,z(\tau)]\,dz_j(\tau) \tag{I.7}$$

$$C(\tau,z) = \left(-\frac{i}{\hbar}V - \frac{iq}{\hbar}\varphi + \frac{iq}{\hbar c}\,a_k A^k\right)(\tau,z) \tag{I.8}$$

$$b_{kj}(\tau,z) = \frac{i\hbar}{m}\sum_{\ell=1}^{3}\sigma_k^\ell(\tau,z)\,\sigma_j^\ell(\tau,z) \tag{I.9}$$

φ , A_k – суть потенциалы внешнего электромагнитного поля, q – заряд частицы. Стохастические интегралы по псевдопроцессам Винера $z_j(\tau)$, $j=1,2,3$ понимаются здесь как интегралы типа Стратоновича [23] . Заметим, что интегралы эти определяются по отношению к заданным условным операциям усреднения $Q_{s,y}$, $Q^{t,x}$ и поэтому правильнее было бы называть их псевдоинтегралами. Именно наличие этих интегралов приводит к эффекту зависимости результата вычисления средних Q (фактически интегралов Фейнмана) от способа построения конечнократных аппроксимаций. На операторном языке разные конечнократные аппроксимации отвечают различным способам расстановки операторов p, q в гамильтониане [24]. Интересно, что, как это следует из (I.7), а также из аналога формулы Итô, зависимость интегралов Фейнмана от способа построения конечнократных аппроксимаций исчезает при поперечной калибровке потенциалов A_k, [25].

Концепция псевдопроцессов позволяет, таким образом, перенести ряд результатов теории марковских процессов на квантовый случай, продолжая известную формальную аналогию между теорией диффузии и квантовой механикой. Следует, однако, заметить, что в свете результатов по строгому определению понятия псевдомеры, соответствующей простейшему случаю винеровского псевдопроцесса $z(t)$, рисуется возможность подведения прочного математического фундамента под рассуждения, которые, будучи своего рода рекогносцировкой, указывают на те интересные классы функций, которые должны быть интегрируемыми [26], [27]. Это существенно, так как от соответствующего определения интеграла Фейнмана или отвечающей ему псевдомеры требуется, кроме строгости, также и физическая плодотворность, выражающаяся в широте класса интегрируемых функций, заданных на траекториях, т.е., функционалов, от псевдопроцессов реализации которых совпадают с этими траекториями.

В настоящей работе указывается на интересные функционалы, встречающиеся в попытке перенесения результатов Феллера и Дынкина по граничным задачам для уравнений Колмогорова [28], [30] на квантовый случай. Отметим, что, кроме серии граничных условий, совпадающих по форме с условиями Дынкина, получается дополнительная серия условий, изложенная в разделе 3.

2. Строго марковские псевдопроцессы с условием в начальный момент времени и граничные условия для обратного уравнения Шредингера

Пусть $\mathcal{X}$ означает область трехмерного пространства, доступную частице, $\mathcal{B}(\mathcal{X})$, σ- алгебру борелевских подмножеств $\mathcal{X}$. Пусть, как и прежде, Ω означает множество элементарных событий, которые приводятся во взаимно однозначное соответствие с возможными траекториями частицы. Если определить функцию $x(t,\omega)$ со значениями из $\mathcal{X}$ на множестве пар (t,ω), где $t\in T$ – временной параметр, а $\omega\in\Omega$, такую что

$$\{\omega;\ x(t,\omega)\in A\}\in\mathcal{B}(\Omega) \tag{2.1}$$

для любого $A\in\mathcal{B}(\mathcal{X})$ и всех $t\in T$, то каждому элементарному событию ω можно сопоставить траекторию в $\mathcal{X}$ как годограф векторной функции $x(t,\omega)$ параметра t

$$\pi\omega=\{x(t,\omega);\ t\in T\}. \tag{2.2}$$

Предполагается, что отображение π обратимо, так что по заданной траектории восстанавливается случайный параметр ω.
В теории случайных процессов, где и встречаются такого рода конструкции, принято не выписывать явно случайный параметр ω. Случайный процесс понимается при этом как набор $\{x(t);\ t\in T\}$ случайных величин $x(t)$, каждая из которых является функцией параметра ω. В зависимости от того, задана ли вероятностная мера или комплексная псевдомера на $\mathcal{B}(\Omega)$, будем говорить, что задан случайный процесс или соответственно - псевдопроцесс. Псевдомеру задаем посредством задания операции усреднения, а точнее, целого их семейства $\{Q_y;\ y\in\mathcal{X}\}$, причем $Q_y\{f\circ x(t)\}$ понимается, как линейный, однородный функционал класса Υ интегрируемых комплексных функций $f(x)$, $x\in\mathcal{X}$. Символом $f\circ g$

обозначается сложная функция $f[g]$. Предполагается, что $1 \in \gamma$ и $Q_y\{1\} = 1$, т.е., что операции усреднения нормированы.

Для дальнейшего нам понадобится семейство неубывающих σ - алгебр, связанных с псевдопроцессом в том смысле, что $\mathcal{F}_t$ содержит все подмножества Ω вида $\{\omega; x(s,\omega) \in A\}$, $0 \le s \le t$, $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$. Ясно, что $\mathcal{F}_t \subset \mathcal{F}_{t'}$, когда $t \le t'$.
В дальнейшем полагаем, что за множество T значений временного параметра взята положительная полуось $T = [0, \infty)$, это удобно для стационарных псевдопроцессов, которыми сейчас займемся.

Предполагаем, что для каждой σ - алгебры $\mathcal{F}_s$ существует случайная величина $Q_y\{f \circ x(s+t) | \mathcal{F}_s\}(\omega)$, такая, что, во-первых,

$$\left(Q_y\{f \circ x(s+t) | \mathcal{F}_s\} = c\right) \in \mathcal{F}_s \tag{2.3}$$

для любого комплексного числа c, произвольной функции $f \in \gamma$ и для любого $y \in \mathcal{X}$ и $t \ge 0$, т.е., что эта случайная величина $\mathcal{F}_s$ - измерима, и, во-вторых, выполняется равенство

$$Q_y\left(g \cdot Q_y\{f \circ x(s+t) | \mathcal{F}_s\}\right) = Q_y\left(g \cdot f \circ x(s+t)\right) \tag{2.4}$$

при любой ограниченной $\mathcal{F}_s$ - измеримой функции g. Такая случайная величина называется условным средним $f \circ x(s+t)$ по отношению к σ - алгебре $\mathcal{F}_s$. Смысл нижнего индекса y при операции усреднения состоит в том, что эта операция производится лишь по траекториям, начинающимся в начальный момент времени $t = 0$ в точке y. Этот факт проявляется в связи с операцией Q_y с амплитудой перехода

$$Q_y\{\chi_A \circ x(t)\} = M_y\{x(t) \in A\} = \int_A (t; y, x)\, dx \,, \tag{2.5}$$

где стационарная амплитуда перехода $(t; y, x)$ совпадает с

$(\tau, y; \tau+t, x)$ в прежних обозначениях. Стационарность процесса понимается как независимость амплитуды перехода от τ. Нетрудно убедиться, что условие I.(iv) будет выполняться, если потребовать выполнения условия марковости псевдопроцесса в виде

$$Q_y\{f \circ x(s+t) | \mathcal{F}_s\} = Q_{x(s)}\{f \circ x(t)\} \qquad (2.6)$$

при любой функции $f \in \gamma$ и любых $s, t \geq 0$, [·].

Следуя Дынкину [8], введем операцию сдвига C_s в множестве траекторий

$$C_s^{-1} x(t, \omega) = x(t-s, \omega). \qquad (2.7)$$

Можно считать, что траектория $C_s^{-1} x(t,\omega)$ отвечает частице, запаздывающей в своем движении на время s по отношению к частице, описываемой $x(t,\omega)$. Отображение C_s^{-1} индуцирует преобразование θ_s в множестве Ω параметров, характеризующих траектории,

$$\theta_s = \pi^{-1} C_s^{-1} \pi \quad , \quad \theta_s \omega = \omega', \qquad (2.8)$$

где отображение π задано формулой (2.2). Дальше, отображение θ_s индуцирует преобразование в множестве функций, измеримых относительно σ-алгебры $\mathcal{F}_\infty$, порождаемой множествами вида $\{x(t) \in A;\ t \geq 0, A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})\}$.

Как известно, такие функции имеют вид

$$\xi = \tilde{\xi} \circ \pi, \qquad (2.9)$$

где $\tilde{\xi}$ есть некая функция от траектории т.е., функционал от процесса. Индуцированное преобразование имеет вид

$$\hat{\theta}_s \xi = \xi \circ \theta_s^{-1} = \tilde{\xi} \circ C_s \circ \pi. \qquad (2.10)$$

Можно обобщить понятие введенных операторов на случай, когда параметр замедления s зависит от ω, т.е., от траектории. Именно, если $\tau(\omega)$ есть неотрицательная функция на Ω, то можно ввести отображение θ_τ:

$$\theta_\tau\{x(t)\in A\}=\{x(t+\tau)\in A\}=\{\omega; x[t+\tau(\omega),\omega]\in A\} \tag{2.11}$$

и дальше оператор $\hat{\theta}_\tau$ с помощью формулы (2.10). Ясно, что для постоянного τ получаем прежние отображения. Если неотрицательная функция τ удовлетворяет дополнительно условию

$$\{\tau\le t\}\in \mathcal{F}_t \tag{2.12}$$

при всех $t\geqslant 0$, то говорят, что это марковский момент, не зависящий от будущего. Соответственно для такого момента определяется σ - алгебра $\mathcal{F}_\tau$ условием

$$A\in\mathcal{F}_\tau, \text{если } A\cap\{\tau\le t\}\in\mathcal{F}_t \text{ при всех } t\geqslant 0 \tag{2.13}$$

Имея этот аппарат, можно определить понятие строго марковского псевдопроцесса. Именно, псевдопроцесс $\{x(t); t\geqslant 0\}$ называется строго марковским, когда

$$Q_y\left\{\prod_{j=1}^{n} f_j\circ x(\tau+t_j)\,|\,\mathcal{F}_\tau\right\}=Q_{x(\tau)}\left\{\prod_{j=1}^{m} f_j\circ x(t_j)\right\} \tag{2.14}$$

для всякого марковского момента $\tau(\omega)$, не зависящего от будущего, произвольных чисел $0\le t_1\le\dots\le t_m$ и произвольных непрерывных функций $f_j\in\mathcal{C}$. В более общем виде это условие можно записать, аналогично марковским процессам [29],

$$Q_y\left(\xi\,\hat{\theta}_\tau\eta\right)=Q_y\left(\xi\, Q_{x(\tau)}\{\eta\}\right) \tag{2.15}$$

для всякой ограниченной функции ξ, измеримой относительно $\mathcal{F}_\tau$ и ограниченной $\mathcal{F}_\infty$- измеримой функции η.

Основным оператором, связанным с данным псевдопроцессом, является его генератор, определяемый равенством

$$(Af)(y)=\lim_{t\downarrow 0} t^{-1}\left[Q_y\{f\circ x(t)\}-f(y)\right], \tag{2.16}$$

и резольвента

$$\mathcal{R}_\lambda f(y) = (\lambda - A)^{-1} f(y) = \int_0^\infty dt\, e^{-\lambda t} Q_y\{f \circ x(t)\},\ \lambda > 0 \qquad (2.17)$$

Следуя Дынкину [8], и используя оператор $\hat{\theta}_\tau$, представляем функцию $\mathcal{R}_\lambda f(y)$ в виде

$$\mathcal{R}_\lambda f(y) = Q_y\left\{\int_0^\tau dt\, e^{-\lambda t} f \circ x(t)\right\} + Q_y\left\{\int_0^\infty dt\, e^{-\lambda(t+\tau)} f \circ x(t+\tau)\right\} = \qquad (2.18)$$

$$= Q_y\left\{\int_0^\tau dt\, e^{-\lambda t} f \circ x(t)\right\} + Q_y\left\{e^{-\lambda\tau}\hat{\theta}_\tau \int_0^\infty dt\, e^{-\lambda t} f \circ x(t)\right\}.$$

Далее, поскольку функция $e^{-\lambda\tau}$ является $\mathcal{F}_\tau$ - измеримой, а функция $\int_0^\infty dt\, e^{-\lambda t} f \circ x(t)$ - измеримой относительно $\mathcal{F}_\infty$, имеем, на основании формулы (2.15) и определения резольвенты

$$\mathcal{R}_\lambda f(y) = Q_y\left\{\int_0^\tau dt\, e^{-\lambda t} f \circ x(t)\right\} + Q_y\left\{e^{-\lambda\tau}\mathcal{R}_\lambda f \circ x(\tau)\right\} \qquad (2.19)$$

Переобозначая $\mathcal{R}_\lambda f \to f$ и полагая $\lambda = 0$ получаем основную формулу

$$Q_y\{f \circ x(\tau)\} - f(y) = Q_y\left\{\int_0^\tau dt\, Af \circ x(t)\right\}, \qquad (2.20)$$

справедливую для любого марковского момента, не зависящего от будущего. Подставляя вместо τ время первого выхода τ_U из открытой окрестности U точки y, которое является марковским моментом, не зависящим от будущего, приходим к формуле для инфинитезимального генератора псевдопроцесса

$$Af(y) = \lim_{U \to \{y\}} \frac{Q_y\{f \circ x(\tau_U)\} - f(y)}{Q_y\{\tau_U\}}. \qquad (2.21)$$

При этом предполагается, что предел отношения

$$\frac{Q_y\left\{\int\limits_0^{\tau_U} dt\, Af\circ x(t)\right\}}{Q_y\{\tau_U\}} \qquad (2.22)$$

существует, когда окрестность U сжимается в точку y, и равен $Af(y)$. При этом, конечно, предполагается, что окрестность U принадлежат к некоторой топологии, заданной в $\mathfrak{X}$.

Заметим, что знаменатель в последних формулах стремится к квантовому среднему значению момента первого выхода псевдопроцесса из точки y, которой обозначим $\tau(y,\omega)$,

$$\tau(y,\omega) = \inf\{t;\, x(t,\omega) \neq y\}. \qquad (2.23)$$

Можно показать с помощью рассуждений, вполне аналогичных случаю марковских процессов [8], что амплитуда вероятности события, состоящего в том, что частица будет находиться в точке y в течение промежутка времени, большего, чем t, имеет экспоненциальный вид

$$M_y\{\tau(y) > t\} = \exp\{-a(y)t\}, \qquad (2.24)$$

где $a(y) = \alpha(y) + i\beta(y)$, $\alpha(y) \geqslant 0$.

В зависимости от значения параметра $a(y)$ совокупность состояний частицы можно разделить на следующие типы:

1° Проходящие, $\alpha(y) = \infty$, $M_y\{\tau(y) = 0\} = 1$,

2° задерживающие, $0 < \alpha(y) < \infty$, $M_y\{\tau(y) > 0\} = 1$,

3° поглощающие, $\alpha(y) = \beta(y) = 0$, $M_y\{\tau(y) = \infty\} = 1$.

Последние состояния можно также называть состояниями абсорбции.

С помощью амплитуды распределения случайной величины можно найти ее среднее значение, которое оказывается равным

$$Q_y\{\tau(y)\} = a^{-1}(y). \qquad (2.25)$$

Отсюда следует, что для проходящих состояний это среднее исчезает, а для поглощающих бесконечно велико. В случае задерживающих состояний формула (21) для инфинитезимального генератора псевдопроцесса принимает более простой вид

$$Af(y) = a(y)\left(Q_y\{f\circ X[\tau(y)+0]\} - f(y)\right). \tag{2.26}$$

Отсюда видно, что в случае поглощающего состояния y, $Af(y)=C$.
В общем случае формулу (21) для генератора можно представить в виде

$$Af(y) = \lim_{U\to\{y\}} Q_y^{-1}\{\tau_U\}\int_{\mathcal{X}}[f(x)-f(y)]M_y\{X(\tau_U)\in[x,dx]\} + C(y)f(y), \tag{2.27}$$

где

$$C(y) = \lim_{U\to\{y\}} Q_y^{-1}\{\tau_U\}\left(M_y\{X(\tau_U)\in\mathcal{X}\} - 1\right). \tag{2.28}$$

Отсюда, пользуясь формулой Тейлора

$$f(x) = f(y) + \Delta_j(x)\partial^j f(y) + \frac{1}{2}\Delta_j(x)\Delta_k(x)\partial^j\partial^k f(y) + \tag{2.29}$$

$$+ \frac{1}{2}\int_0^1 (1-\alpha)^2\partial_\alpha^3 f[\alpha x + (1-\alpha)y]d\alpha,$$

где обозначено $\Delta_j(x) = x_j - y_j$,
получаем для генератора выражение

$$Af(y) = [a_j(y)\partial^j + \frac{1}{2}b_{kj}(y)\partial^k\partial^j + C(y)]f(y) + \varkappa(f,y), \tag{2.30}$$

где $\varkappa(f,y)$ обусловлено вкладом остатка. Псевдопроцесс является диффузионным, когда $\varkappa(f,y)$ исчезает. Достаточным условием для этого является

$$0 = \lim_{U\to\{y\}} Q_y^{-1}\{\tau_U\}\int_{\mathcal{X}}\partial_\alpha^3 f[\alpha x + (1-\alpha)y]M_y\{X(\tau_U)\in[x,dx]\} \tag{2.31}$$

равномерно относительно $\alpha\in[0,1]$.

Из основной формулы (2.21) для генератора следуют граничные условия, понимаемые как дополнительные условия, определяющие поведение траекторий псевдопроцесса в момент достижения ими точек границы области $\mathcal{X}$. Условия эти в точности совпадают с граничными условиями, известными из теории марковских процессов [26]-[37] . В следующем разделе приведем дополнительную серию граничных условий, отвечающую процессам с условием на конечные состояния.

Как уже отмечалось, в случае, когда точка r границы является поглощающей, имеем

$$\lim_{y\to r} Af(y)=0. \tag{2.32}$$

В этом случае частица "замирает" в точке r , ее движение останавливается.

Может случиться, что после достижения граничной точки частица мгновенно отпрыгивает во внутреннюю точку x , из которой дальше начинает двигаться. Этот случай может быть рассмотрен как предельный по отношению к случаю, когда частица задерживается на границе некоторое случайное время ξ с распределением амплитуды

$$M_r\{\xi>t\}=e^{-\gamma(r)t}. \tag{2.33}$$

Интересующий нас случай получится предельным переходом $\mathrm{Re}\,\gamma(r)\to\infty$. Отметим, что время первого выхода τ_U из малой окрестности граничной точки r совпадает с ξ . Имеем соотношения

$$f\circ x(\tau_U)=f\circ x(\xi)=f(x) \tag{2.34}$$

$$Q_r\{\xi\}=\gamma^{-1}(r),$$

откуда для генератора получаем формулу

$$Af(r)=\gamma(r)\left[f(x)-f(r)\right]. \tag{2.35}$$

Для сохранения конечной величины левой части равенства в пределе $\operatorname{Re}\gamma(r)\to\infty$ нужно потребовать, чтобы

б. $$f(x)-f(r)=0.\qquad(2.36)$$

Если отскок имеет место в случайную точку с распределением амплитуды Π_r, то имеем

$$Q_r\{f\circ x(\xi)\}=\int_{\mathcal{X}} f(x)\Pi_r(dx)\qquad(2.37)$$

и вместо граничного условия (2.36) получаем

в. $$\int_{\mathcal{X}} f(x)\Pi_r(dx)-f(r)=0.\qquad(2.38)$$

Возможно, что частица, достигнув граничной точки r, исчезает из области $\mathcal{X}$. Это равносильно скачку в точку, не принадлежащую $\mathcal{X}$. Полагая при этом амплитуду Π_r равной нулю, получаем граничное условие

г. $$f(r)=0.\qquad(2.39)$$

Возможно, конечно, мгновенное отражение от граничной точки в заданном направлении. Соответствующее граничное условие можно получить из условия отскока на небольшое расстояние h в заданном направлении в пределе, когда h стремится к нулю. Полагая, что отражение в точке r происходит в направлении орта e_k, получаем граничное условие.

д. $$\partial^k f(r)=\lim_{h\to 0}\frac{f(r+he_k)-f(r)}{h}=0,\qquad(2.40)$$

так как числитель равен нулю.

Таким образом, амплитуда перехода $(t;y,x)$ стационарного диффузионного псевдопроцесса определяется, в случае конечной области $\mathcal{X}$, уравнением

$$[\partial_t - A(y)](t;y,x) = 0, \qquad (2.41)$$

начальным условием

$$\lim_{t\downarrow 0} (t;y,x) = \delta(y-x), \qquad (2.42)$$

справедливым внутри $\mathcal{X}$, и граничными условиями, выбираемыми применительно к конкретной ситуации на данном участке границы $\partial\mathcal{X}$. Возможны, конечно, более сложные граничные условия, когда исчезает линейная комбинация, составленная из левых сторон условий $a - g$. Однако вероятностная интерпретация такого рода условий не столь прозрачна, как в перечисленных случаях.

3. Строго марковские псевдопроцессы с условием в конечный момент времени и граничные условия для прямого уравнения Шредингера

Как известно, обычно при рассмотрении процесса его значения задаются в начальный момент времени. Это приводит к волновой функции типа $\phi(s,y)$, дающей вероятностное описание в прошлом и удовлетворяющей обратному уравнению Шредингера (I.I) . Практически более ценным является описание частицы с помощью волновой функции типа $\psi(t,x)$, удовлетворяющей прямому уравнению Шредингера (I.2) и дающей вероятностное описание в будущем по отношению к заданной ситуации в более ранний момент времени $s<t$. Такое описание достигается в вероятностной схеме, аналогичной во многом схеме, изложенной в предыдущем разделе с той однако разницей, что выделенным является теперь состояние в конечный момент времени. В случае рассматриваемых нами стационарных псевдопроцессов удобно выбрать отрицательную полуось $(-\infty, 0]$ в качестве множества $\mathcal{S}$ параметров псевдопроцесса. Мы будем говорить, что псевдопроцесс $\{x(s);\ s \le 0\}$ является марковским, если

выполнено условие

$$Q^{x}\{g\circ X(s+t)\mid \mathcal{G}_t\} = Q^{X(t)}\{g\circ X(s)\}, \tag{3.1}$$

где $s<t<0$, $\mathcal{G}_t$ σ-алгебра построена следующим образом

$$\mathcal{G}_t = \sigma\{X(u);\ s\le u\le 0\}, \tag{3.2}$$

а псевдосредние Q^x обозначены конечными состояниями в момент $s=0$. Связь операции Q^x с амплитудой перехода следующая:

$$Q^{x}\{g\circ X(s)\} = \int_{\mathcal{X}} g(y)[-s;y,x]dy. \tag{3.3}$$

Мы употребляем здесь прямые скобки для обозначения амплитуды, для которой известно конечное состояние в отличие от ранее рассматриваемой.

Заметим, что рассматриваемый нами случай сводится к предыдущему, при условии обращения времени. Это замечание делает излишним подробное изложение выкладок, аналогичных проделанным в предыдущем разделе, ведущих к следующим основным формулам, справедливым для строго марковских процессов

$$g(x) = Q^{x}\left\{\int_{\rho}^{0} ds\, \mathrm{B}g\circ X(s)\right\} + Q^{x}\{g\circ X(\rho)\}. \tag{3.4}$$

Здесь буквой **B** обозначен инфинитезимальный генератор псевдопроцесса

$$\mathrm{B}g(x) = \lim_{s\uparrow 0}\frac{Q^{x}\{g\circ X(s)\} - g(x)}{s}, \tag{3.5}$$

а неположительная числовая случайная функция ρ - есть марковский момент, не зависящий от прошлого; он удовлетворяет условию

$$\{\rho > s\}\in \mathcal{G}_s, \quad s\le 0. \tag{3.6}$$

Условие строгой марковости для псевдопроцесса с условием в конечной точке множества S параметров выглядит следующим образом

$$Q^{x}\left\{\prod_{j=1}^{m} g_j \circ x(\rho+s_j) \mid \mathcal{G}_\rho\right\} = Q^{x(\rho)}\left\{\prod_{j=1}^{m} g_j \circ x(s_j)\right\}, \tag{3.7}$$

где ρ - произвольный марковский момент, не зависящий от прошлого, $0 \geq s_1 \geq \dots \geq s_m$, $g_j \in \Upsilon$, а σ-алгебра $\mathcal{G}_\rho$ образована событиями $B \in \mathcal{G}_\rho$ для которых $B \cap \{\rho > s\} \in \mathcal{G}_s$ при любом $s \leq 0$. Если в формуле (3.4) в качестве ρ взять момент ρ_V последнего достижения псевдопроцессом открытого множества $V \subset \mathcal{X}$, т.е.,

$$\rho_V(\omega) = \sup\{s\,;\, x(s,\omega) \notin V\}, \tag{3.8}$$

который является марковским моментом, не зависящим от прошлого, то в пределе $V \to \{x\}$ можно получить формулу для генератора

$$Bg(x) = \lim_{V \to \{x\}} \frac{Q^{x}\{g \circ x(\rho_V)\} - g(x)}{Q^{x}\{\rho_V\}}. \tag{3.9}$$

Формула эта верна при предположении существования предела

$$\lim_{V \to \{x\}} \frac{Q^{x}\left\{\int_{\rho_V}^{0} ds\, Bg \circ x(s)\right\}}{Q^{x}\{\rho_V\}} = Bg(x) \tag{3.10}$$

в некоторой топологии, заданной в множестве состояний $\mathcal{X}$. Заметим, что момент ρ_V стремится в этом пределе к моменту $\rho(x)$ достижения конечного состояния x псевдопроцесса. Можно показать, что имеет место формула

$$M^{x}\{\rho(x) \leq s\} = \exp\{\tilde{\alpha}(x) s\} \tag{3.11}$$

$$\tilde{\alpha}(x) = \tilde{\alpha}(x) + i\tilde{\beta}(x), \quad \tilde{\alpha}(x) \geq 0.$$

Аналогично предыдущему разделу, состояния псевдопроцесса можно классифицировать согласно значению $\tilde{\alpha}(x)$. Итак, возможны случаи:

1° $\tilde{\alpha}(x)=\infty$, $M^x\{\rho(x)=0\}=1$, $M^x\{\rho(x)<0\}=0$,

состояние x называется тогда проходящим.

2° Состояние x называется задерживающим, когда
$0<\tilde{\alpha}(x)<\infty$, $M^x\{\rho(x)<0\}=1$, $M^x\{\rho(x)=-\infty\}=0$.

3° Состояние x называется состоянием эмиссии, если
$\tilde{\alpha}(x)=\tilde{\beta}(x)=0$, $M^x\{\rho(x)=-\infty\}=1$.

В этом случае частица в некоторый момент покидает точку x и начинает движение. Легко вычислить среднее от $\rho(x)$ с помощью его распределения

$$Q^x\{\rho(x)\}=-\frac{1}{\tilde{\alpha}(x)}. \qquad (3.12)$$

Отсюда видно, что для состояния эмиссии это среднее дает $-\infty$, а для проходящего оно исчезает. В случае задерживающих состояний справедлива формула

$$\mathbf{B}g(x)=-\tilde{\alpha}(x)\cdot\left[Q^x\{g\circ x[\rho(x)-0]\}-g(x)\right]. \qquad (3.13)$$

В предельном случае, когда время достижения состояния уходит на $-\infty$, получаем состояние десорбции и тогда $\tilde{a}(x)=0$, что ведет к исчезновению $\mathbf{B}g(x)$ в этой точке для любой g из области определения $\mathbf{B}$.

Псевдопроцесс является диффузионным, когда генератор имеет вид дифференциального оператора второго порядка

$$\mathbf{B}g(x)=\left[\tilde{a}_k(x)\partial^k+\tfrac{1}{2}\tilde{b}_{kj}(x)\partial^k\partial^j+\tilde{c}(x)\right]g(x). \qquad (3.14)$$

Достаточным условием для этого является

$$\lim_{V\to\{x\}}\frac{1}{Q^x\{\rho_V\}}\cdot\int_{\mathfrak{X}}\partial_\alpha^3 g[\alpha x+(1-\alpha)x]M^x\{x(\rho_V)\in[x,dx]\}=0 \qquad (3.15)$$

равномерно относительно $\alpha\in[0,1]$. Коэффициентные функции можно найти по формулам

$$\tilde{a}_k(x)=\lim_{s\to 0}\frac{1}{s}\int_{\mathcal{X}}[-s;y,x](y_k-x_k)dy$$

$$\tilde{b}_{kj}(x)=\lim_{s\to 0}\frac{1}{s}\int_{\mathcal{X}}[-s;y,x](y_k-x_k)(y_j-x_j)dy \tag{3.16}$$

$$\tilde{c}(x)=\lim_{s\to 0}\frac{1}{s}\left\{\int_{\mathcal{X}}[-s;y,x]dy-1\right\}.$$

Граничные условия, доопределяющие оператор **B** получаются из формулы (3.9) так же, как граничные условия для оператора **A**. Мы уже видели, что в случае, когда точка γ границы $\partial\mathcal{X}$ является точкой эмиссии, имеем условие

а.' $$\lim_{x\to\gamma}\mathcal{B}g(x)=0 \tag{3.17}$$

для всякой функции g из области определения оператора **B**.

Возможен прыжок из внутренней точки x в точку границы γ, от которой дальше начинается движение внутрь $\mathcal{X}$. Эта ситуация, как и все другие в этой части, получается из соответствующей ситуации предыдущего раздела путем обращения времени. Граничное условие, отвечающее рассматриваемому случаю, таково

б.' $$g(x)-g(\gamma)=0. \tag{3.18}$$

Если прыжок имеет место из случайной точки x с распределением амплитуды вероятности $\Pi'_\gamma(dx)$, то граничное условие выглядит так:

в.' $$\int_{\mathcal{X}}g(x)\Pi'_\gamma(dx)-g(\gamma)=0. \tag{3.19}$$

Если частица рождается в граничной точке γ, то это можно представить как перескок из какой-то внешней точки. В этом случае амплитуда Π_T' должна исчезать внутри $\mathcal{X}$ и мы имеем условие

г′.
$$g(r)=0 . \qquad (3.20)$$

Граничное условие для отражения при подходе частицы к граничной точке r по направлению орта e_k получается путем предельного перехода из условия перескока на границу, когда расстояние от граничной точки стремится к нулю. Имеем

д′
$$\partial^k g(r) = \lim_{h\to 0} \frac{g(r+he_k)-g(r)}{h} = 0, \qquad (3.21)$$

поскольку числитель равен нулю.

Согласно определению оператора **B** и амплитуды $[t; y,x]$ имеем следующее уравнение и условия для ее определения

$$(3.22)$$

$$\{\partial_t + B(x)\}[t;y,x]=0$$

$$\lim_{t\downarrow 0}[t;y,x]=\delta(y-x)$$

$(y,x$ - внутри $\mathcal{X})$,

и граничные условия $а'$-$д'$, или их линейные комбинации, задаваемые на разных участках границы $\partial\mathcal{X}$. В случае, когда выполняется условие обратимости псевдопроцесса, т.е., когда

$$[t;y,x]^* = (-t;x,y) = (t;y,x)^*, \qquad (3.23)$$

коэффициенты операторов **A** и **B** связаны соотношениями [2]

$$\tilde{a}_k = a_k^* = a_k - \partial^j b_{kj} \qquad (3.24)$$

$$\tilde{b}_{kj} = b_{kj}^* = -b_{kj}$$

$$\tilde{c} = c^* = -c + \partial^k a_k - \frac{1}{2}\partial^k\partial^j b_{kj}$$

Здесь оператор B имеет вид

$$-B = -\partial^k a_k + \frac{1}{2}\partial^k\partial^j b_{kj} + c\,,$$

(3.25)

и амплитуду перехода можно определить либо путем решения задачи с начальными граничными условиями

$$\left[-\partial_t + a_k(y)\partial^k + \frac{1}{2}b_{kj}(y)\partial^k\partial^j + c(y)\right](t;y,x) = 0 \tag{3.26}$$

$$\lim_{t\downarrow 0}(t;y,x) = \delta(y-x)\quad,\qquad y,x\in\mathcal{X}\,,$$

плюс граничные условия, $a-q$ или их линейные комбинации, задаваемые на границе $\partial\mathcal{X}$, или же из решения следующей смешанной задачи

$$\left[-\partial_t - \partial^k a_k(x) + \frac{1}{2}\partial^k\partial^j b_{kj}(x) + c(x)\right](t;y,x) = 0$$

$$\lim_{t\downarrow 0}(t;y,x) = \delta(y-x)\qquad y,x\in\mathcal{X} \tag{3.27}$$

и линейной комбинации граничных условий $a'-q'$, на границе $\partial\mathcal{X}$.

Из вышеизложенного видно, что формализм случайных псевдопроцессов естественно ведёт к квантовомеханическим задачам в конечных областях пространства и к соответствующим граничным задачам для уравнений Шрёдингера. Точный физический смысл решений этих задач прояснится в процессе изучения их свойств. Целесообразность и даже необходимость рассмотрения граничных задач для уравнений Шрёдингера видна хотя бы из того, что фундаментальные мысленные опыты квантовой механики по интерференции волн материи предполагают наличие поглощающих или отражающих экранов, на которых должны выполняться соответствующие граничные условия.

В заключение автор желает поблагодарить В.А. Мещерякова за оказанное ему гостеприимство и Л.Г. Заставенко за дискуссии и помощь при подготовке статьи к печати.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. W.Garczyński, Acta Phys.Polon, A42, 609, (1972)
   см. также Препринт № 250, Института теор. физики Вроцлавского университета, (1972).
2. W.Garczyński, Acta Phys.Polon, 35, 479 (1969).
3. W.Garczyński, Acta Phys. Austriaca, Suppl. VI, 501 (1969).
4. W.Garczyński, Bull Acad. Polon. Sci., Ser. sci. math., astr. et phys., 17, 775 (1969).
5. W.Garczyński and B.Jancewicz, Acta Phys. Polon, B2, 341 (1971)
6. W.Garczyński and J.Peisert, Acta Phys. Polon. B3, 459 (1972)
7. W.Garczyński, Reports on Math. Phys., 4, 21 (1973).
8. Е.Б.Дынкин, Марковские процессы, Госиздат, Москва, 1962.
9. R.P.Feynman, A.R.Hibbs, Quantum Mechanics and Path. Integrals, New York 1965, Chapter 4.
   Имеется перевод на русский язык. Изд. "Мир", Москва, 1968.
10. M.Montroll, Comm.Pure Appl. Math. 5, 415 (1952).
11. M.Kac., Some Stochastic Problems in Physics and Mathematics, 1956.
12. Л.В.Прохоров, ЖЭТФ, 52, 167 (1967).
13. E.Nelson, Phys.Rev., 150, 1079 (1966).
14. L.de La Pena-Auerbach, E.Braun and L.S.Garcia Colin J.Math, Phys., 9, 668 (1968).
15. A.N.Kolmogorov, Math.Ann., 104, 415 (1931).
16. Е.Б.Дынкин, Основания теории марковских процессов, Москва 1959.
17. J.L.Doob, Stochastic Processes, Sec. Ed. D.Van Nostrand Co. Ins. 1960.
18. И.М.Гельфанд, А.М.Яглом, Усп. мат. наук, II, 77 (1956).
19. R.H.Cameron, J.Math. and Phys., 39, 126 (1960).

20. Ю.Л. Далецкий. Усп. мат. наук, 17, 3 (1962).
21. N.Dunford, J.T.Schwartz, Linear operators, Part I, Inc. Publ. New York, London, 1958.
22. W.Garczyński, Acta Phys.Polon. A40, 115 (1971).
23. Р.Л. Стратонович. Условные марковские процессы и их применение к теории оптимального управления. Изд. МГУ, 1966.
24. Ф.А. Березин. Теор. и матем. физ., 6, 194 (1971).
25. W.Garczyński, Preprint №253, JTP, University of Wrocław, 1972.
26. K.Itô, Proceedings of the fifth Berkeley symposium on mathematical statistics and probability, Univ. of California, Press, Berkeley, 1966, v.II, part I, p.145.
27. C.De Witt-Morette, Comm.math.Phys. 28,47 (1972).
28. W.Feller, Ann.Math.55, 468 (1952), 60,417 (1954).
29. Е.Б. Дынкин. Теория вероятн. и её применение I, 38 (1956).
30. Е.Б. Дынкин, А.А. Юшкевич. Теоремы и задачи о процессах Маркова, Москва, 1967.

Рукопись поступила в издательский отдел
I октября 1973 года.