Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Н. Орлов, В. Ж. Сакбаев, О. Г. Смолянов, Скорость сходимости фейнмановских аппроксимаций полугрупп, порождаемых гамильтонианом осциллятора, *ТМФ*, 2012, том 172, номер 1, 122–137

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6936>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.164.48.24

26 апреля 2023 г., 10:18:06

© 2012 г. Ю. Н. Орлов*, В. Ж. Сакбаев†, О. Г. Смолянов‡

СКОРОСТЬ СХОДИМОСТИ ФЕЙНМАНОВСКИХ АППРОКСИМАЦИЙ ПОЛУГРУПП, ПОРОЖДАЕМЫХ ГАМИЛЬТОНИАНОМ ОСЦИЛЛЯТОРА

Определена скорость сходимости конечнократных аппроксимаций в формуле Фейнмана к точному выражению для равновесного оператора плотности гармонического осциллятора при линейном τ -квантовании. Получено явное аналитическое выражение для конечнократного приближения равновесного оператора плотности и связанной с ним функции Вигнера. Показано, что в классе τ -квантований равновесная функция Вигнера гармонического осциллятора положительно определена только для квантования Вейля.

Ключевые слова: конечнократные аппроксимации, формулы Фейнмана, теорема Чернова, линейное квантование, гармонический осциллятор, функция Вигнера.

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена исследованию формул Фейнмана с использованием теоремы Чернова [1]. Формулами Фейнмана называют представление полугруппы Шредингера $e^{-it\mathbf{H}}$, $t \geq 0$, или группы Шредингера $e^{it\mathbf{H}}$, $t \in \mathbb{R}$, с помощью пределов конечнократных интегралов по декартовым степеням конфигурационного или фазового пространства (при стремлении к бесконечной кратности) классической гамильтоновой системы, при квантовании которой получается оператор Гамильтона $\mathbf{H}$ (это означает, что $\mathbf{H}$ – самосопряженный оператор, сопоставленный функции Гамильтона H классической системы; в частности, $\mathbf{H}$ может быть псевдодифференциальным оператором (ПДО), символом которого является функция Гамильтона H). В случае, когда используются интегралы по произведениям конфигурационного пространства, говорят о лагранжевых формулах Фейнмана, а при использовании интегралов по произведениям фазового пространства – о гамильтоновых формулах Фейнмана.

*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Москва, Россия.
E-mail: orlmath@keldysh.ru

†Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Московская обл., Россия.
E-mail: fumi2003@mail.ru

‡Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия.
E-mail: Smolyanov@yandex.ru

Изучаются также аппроксимации функции Вигнера, представляющей эволюционирующие состояния квантовой системы.

Формулы Фейнмана являются одним из возможных подходов к получению представлений решения задачи Коши для уравнения Шредингера с помощью интеграла (по псевдомере, называемой псевдомерой Фейнмана) по пространству $\mathcal{M}$ отображений временного промежутка в конфигурационное или фазовое пространство классической системы, которые называются формулами Фейнмана–Каца (в первом случае – лагранжевыми, а во втором – гамильтоновыми). При таком подходе формулы Фейнмана позволяют аппроксимировать меру на алгебре цилиндрических подмножеств в пространстве отображений $\mathcal{M}$.

Впервые представить группу или полугруппу Шредингера в виде предела конечнократных интегралов по декартовым степеням конфигурационного или фазового пространства предложил Фейнман; случай конфигурационного пространства был рассмотрен им в 1948 г. [2], а случай фазового – в 1951 г. [3]. При этом как в лагранжевой, так и в гамильтоновой формах представления (см. работы [3], [4]) подынтегральная функция в конечнократных интегралах представляет собой экспоненту от аппроксимаций функционала действия в лагранжевой или гамильтоновой формах.

Математически строгое обоснование применимости подхода Фейнмана в лагранжевой форме было впервые получено Нельсоном в 1964 г. с помощью формулы Троттера [5]. Гамильтонова форма подхода Фейнмана, сформулированная им в 1951 г., впервые была рассмотрена на математическом уровне в 2002 г. в работе [4] с помощью теоремы Чернова. Именно в этой работе было впервые отмечено, что полученная в 1968 г. формула Чернова является одним из наиболее эффективных подходов к получению аппроксимаций групп и полугрупп, возникающих в квантовой механике (по поводу применения формулы Чернова в задачах стохастического анализа см. монографию [6]).

В настоящее время имеется также обширная литература, посвященная обсуждению альтернативных подходов к получению формул типа Фейнмана–Каца; обсуждение этих подходов можно найти в книгах [7]–[10] (см. также библиографию в них).

Близкое направление исследований, связанное с представлением решений начально-краевых задач для прямого и обратного уравнений Колмогорова (первое из них называется также уравнением Фоккера–Планка) с помощью интегралов по вероятностным мерам на бесконечномерных пространствах функций, развивается в работах [11]–[14]; фактически термин “формула Фейнмана–Каца” первоначально относился именно к таким представлениям.

Наиболее близкий к используемому в настоящей работе подход к получению представлений начально-краевых задач для уравнений Шредингера обсуждается в работе [15] (термин “формула Фейнмана” в ней не встречается; по-видимому, он впервые был использован в работе [4]).

В работе Березина [15] была отмечена связь между выбором квантования классического гамильтониана, выбором меры в формуле Фейнмана–Каца и выбором аппроксимаций функционала действия в формуле Фейнмана. В частности, был поставлен вопрос о том, каким образом мера в интеграле Фейнмана–Каца и конечнократные аппроксимации в формуле Фейнмана зависят от выбора квантования. Результаты недавних работ [16]–[20] фактически содержат ответ на этот вопрос.

В этих работах для каждого самосопряженного расширения квантового гамильтониана с заданным классическим символом получена соответствующая формула Фейнмана, т. е. найдена явная зависимость конечнократных аппроксимаций в формулах Фейнмана от выбора самосопряженного расширения.

В работах [15] и [21] линейное квантование классической системы определяется с помощью зависящего от вещественного параметра (параметра квантования) отображения $\mathcal{P}$ классических символов, определяемых как функции на фазовом пространстве, в множество операторов в гильбертовом пространстве, заданных матричными элементами в координатном представлении. В частности, в статье [21] исследована зависимость квантовых динамических уравнений (для наблюдаемых), полученных с помощью того или иного квантования классических уравнений Гамильтона, от выбора квантования. Далее результат применения выбранного квантования $\mathcal{P}$ к функции H будет обозначаться так же, как и ПДО с символом H .

Как установлено в работах [4], [22] с помощью теоремы Чернова, имеет место следующее представление полугруппы с помощью гамильтоновой формулы Фейнмана:

$$e^{-t\mathbf{H}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\mathbf{f}\left(\frac{t}{n}\right) \right)^n, \quad (1.1)$$

где $\mathbf{f}(t)$ обозначает ПДО, классическим символом которого является функция $e^{-tH(p,q)}$, $(p, q) \in \mathbb{R}^2$ (оператор $\mathbf{f}(t)$ мы будем называть результатом квантования, или просто квантованием этого символа), а предельный переход осуществляется в сильной операторной топологии. Существование различных ПДО с одним и тем же символом является одной из причин неоднозначности квантования.

Предельный переход в гамильтоновой формуле Фейнмана (1.1) и зависимость предела от выбора конечнократных аппроксимаций лагранжиана (или самосопряженных расширений гамильтониана) исследованы в работах [19], [23] для гамильтониана с ограниченным потенциалом. Однако нам не известны публикации, посвященные исследованию этого вопроса для гамильтонианов с неограниченными потенциалами.

В настоящей работе получено представление полугруппы $e^{-t\mathbf{H}}$, $t \geq 0$, порожденной квантовым гамильтонианом осциллятора, посредством формулы Фейнмана (1.1). Несмотря на то что гамильтониан квантового осциллятора не зависит от выбора квантования $\mathcal{P}$, результат квантования функции $e^{-(t/2)(q^2+p^2)}$ является оператором, нетривиально зависящим от такого выбора. Можно сказать, что различие в формулах Фейнмана для полугруппы зависит от различия в выборе квантования $\mathcal{P}$ функции $e^{-(t/2)(q^2+p^2)}$. Обсуждению такого подхода к получению формул Фейнмана и изучению их свойств и посвящена настоящая работа.

Следует подчеркнуть, что непосредственное вычисление предела (1.1) даже для такого простого гамильтониана, как гамильтониан гармонического осциллятора, представляет значительные технические трудности. Отметим, что в работе [15] справедливость формулы (1.1) для гамильтониана $H = (q^2 + p^2)/2$ считалась очевидной, и оценка скорости сходимости в формуле Фейнмана и зависимость этой скорости от выбора квантования не были исследованы. В настоящей работе этот пробел восполнен. Нами получено точное выражение для главной части отклонения предельного оператора (1.1) от его конечнократной аппроксимации в случае гармонического осциллятора и построены функции Вигнера, отвечающие конечнократным аппроксимациям равновесного оператора плотности.

Аналогичные результаты можно получить и для более общих функций Гамильтона, представляющих собой сумму кинетической и потенциальной энергий.

2. ЛИНЕЙНОЕ τ -КВАНТОВАНИЕ

Пусть E – некоторое вещественное евклидово пространство (на протяжении всей работы при изучении одномерного гармонического осциллятора будем предполагать, что $E = \mathbb{R}$). Пусть $\Gamma = Q \times P$, $Q = P = E$, – фазовое пространство классической гамильтоновой системы. Через K обозначим линейное пространство вещественнозначных функций на Γ .

В квантовой механике вводится комплексное гильбертово пространство $\mathcal{L}$ комплекснозначных функций на Q . Самосопряженные операторы $\mathbf{A}$ в пространстве $\mathcal{L}$ называются наблюдаемыми. Положительные линейные операторы ρ с единичным следом называются состояниями. Элемент $\psi \in \mathcal{L}$ называется волновой функцией и является аналогом точки в классической механике.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. *Квантованием* называется инъективное отображение $\mathcal{P}$ пространства K в пространство самосопряженных операторов, действующих в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}$; при этом функция A называется *символом* оператора $\mathbf{A} = \mathcal{P}(A)$.

Тот факт, что $\mathbf{A} \in \mathcal{P}(K)$ и $\mathbf{A} = \mathcal{P}(A)$, будем обозначать символом $\mathbf{A} \leftrightarrow A$.

Концепция линейного квантования была сформулирована в работе [24], где показано, в частности, что соответствие между операторами и символами операторов полностью определяется формулами, выражающими символы операторов $\mathbf{pA}$, $\mathbf{Ap}$, $\mathbf{qA}$, $\mathbf{Aq}$ через символ оператора $\mathbf{A}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Квантование называется *линейным*, если символы операторов $\mathbf{pA}$, $\mathbf{Ap}$, $\mathbf{qA}$, $\mathbf{Aq}$ выражаются через символ A оператора $\mathbf{A}$ как линейные комбинации функций qA , pA , $\partial A/\partial q$, $\partial A/\partial p$ с некоторыми коэффициентами, например:

$$\mathbf{A} \leftrightarrow A, \quad \mathbf{Aq} \leftrightarrow \left(\alpha q + \beta p + \mu \frac{\partial}{\partial q} + \lambda \frac{\partial}{\partial p} \right) A.$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Таким образом, отображение $\mathcal{P}$, определяющее линейное квантование, является линейным отображением, но не всякое линейное отображение $\mathcal{P}$ определяет линейное квантование.

Обозначим через $\tilde{A}(x, y)$ ядро оператора $\mathbf{A}$, так что

$$\mathbf{A}\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \tilde{A}(x, y)\psi(y) dy, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.1)$$

Предполагается, что ядро $\tilde{A}(x, y)$ связано с символом $A(q, p)$ линейным интегральным преобразованием с ядром $K(q, p \mid x, y)$, называемым ядром квантования:

$$\tilde{A}(x, y) = \int_{\mathbb{R}} A(q, p)K(q, p \mid x, y) dq dp. \quad (2.2)$$

Будем рассматривать ядра $K(q, p \mid x, y)$, являющиеся обобщенными функциями с точечными носителями, т. е. считать, что ядра K и $\tilde{A}$ представимы в виде конечной линейной комбинации δ -функции и ее производных с коэффициентами, гладко зависящими от x .

Представителя класса линейных квантований, задаваемого ядром (см. [18])

$$K(q, p | x, y) = \frac{1}{2\pi} \delta(q - \tau x - (1 - \tau)y) e^{ip(x-y)}, \quad \tau \in [0, 1], \quad (2.3)$$

будем называть τ -квантованием. Обратное преобразование, связывающее ядро квантового оператора с символом, отвечающим этому оператору при τ -квантовании, имеет вид

$$K^*(q, p | x, y) = \delta(q - \tau x - (1 - \tau)y) e^{-ip(x-y)}, \quad \tau \in [0, 1]. \quad (2.4)$$

Из соотношения (2.2) следует, что для квантования (2.3) связь между ядрами операторов и их символами дается формулами

$$\begin{aligned} \tilde{A}(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} A(\tau x + (1 - \tau)y, p) e^{ip(x-y)} dp, \\ A(q, p) &= \int_{\mathbb{R}} \tilde{A}(q - (1 - \tau)\xi, q + \tau\xi) e^{ip\xi} d\xi. \end{aligned} \quad (2.5)$$

В частности, символу в виде монома $A(q, p) = q^n p^m$ отвечает при τ -квантовании оператор

$$\mathbf{A} = (-i)^m \sum_{k=0}^m \frac{m! n!}{k! (n - k)! (m - k)!} (1 - \tau)^k x^{n-k} \frac{\partial^{m-k}}{\partial x^{m-k}}, \quad (2.6)$$

ядро которого имеет вид

$$\tilde{A}(x, y) = (i)^m (\tau x + (1 - \tau)y)^n \frac{\partial^m}{\partial y^m} \delta(x - y). \quad (2.7)$$

При $\tau = 1/2$ формула (2.3) определяет эрмитово квантование, называемое квантованием Вейля. Другие варианты линейных эрмитовых квантований можно получить, например, с помощью линейной комбинации ядер вида (2.3), как это сделано в работе [18]. В настоящей работе мы ограничимся только рассмотрением τ -квантования.

3. КВАНТОВЫЙ РАВНОВЕСНЫЙ ОПЕРАТОР ПЛОТНОСТИ

Пусть H – классический гамильтониан одномерного гармонического осциллятора, т. е.

$$H(q, p) = \frac{1}{2}(q^2 + p^2). \quad (3.1)$$

При любом линейном квантовании ему отвечает оператор Гамильтона

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{q}^2 + \mathbf{p}^2), \quad (3.2)$$

где операторы $\mathbf{q}^2$ и $\mathbf{p}^2$ определяются в соответствии с формулой (2.6), т. е. имеют вид x^2 и $-\partial^2/\partial x^2$.

Известно (см., например, монографию [21]), что собственными значениями E_n этого гамильтониана являются полуцелые положительные числа, а собственными функциями ψ_n – функции Эрмита

$$E_n = n + \frac{1}{2}, \quad \psi_n = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} H_n(\sqrt{2}x) e^{-x^2/2}, \quad n \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (3.3)$$

Оператором Гиббса гармонического осциллятора при температуре $T = 1/\beta$, $\beta \in (0, +\infty)$, называется ядерный оператор $\rho(\beta) = e^{-\beta \mathbf{H}}$; равновесным оператором плотности гармонического осциллятора при температуре $T = 1/\beta$ называется неотрицательный ядерный оператор с единичным следом $\mathbf{D}(\beta) = (\text{Tr}(e^{-\beta \mathbf{H}}))^{-1} e^{-\beta \mathbf{H}}$ (нормированный оператор Гиббса). Ядро $\rho(\beta; x, y)$ оператора оператора Гиббса $e^{-\beta H}$, описывающего равновесное состояние гармонического осциллятора при температуре $T = 1/\beta$, определяется равенством

$$\rho(\beta; x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \psi_n^*(x) \psi_n(y). \quad (3.4)$$

Тогда ядро оператора Гиббса имеет вид

$$\rho(\beta; x, y) = (\pi)^{-1/2} e^{-(x^2+y^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} e^{-\beta(n+1/2)} H_n(\sqrt{2}x) H_n(\sqrt{2}y). \quad (3.5)$$

Здесь суммирование осуществляется с помощью производящей функции многочленов Эрмита по формуле Мелера (см. работу [22], формула (22)):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{2^n n!} e^{-\beta(n+1/2)} H_n(x) H_n(y) = (1 - z^2)^{-1/2} \exp\left(\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1 - z^2}\right). \quad (3.6)$$

Выполняя суммирование в выражении (3.5) с использованием соотношения (3.6), получаем, что ядро оператора Гиббса (3.4) имеет вид

$$\rho(\beta; x, y) = (2\pi \operatorname{sh} \beta)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2 \operatorname{sh}(\beta)} ((x^2 + y^2) \operatorname{ch} \beta - 2xy)\right). \quad (3.7)$$

След оператора Гиббса с ядром (3.7) определяется равенством

$$\text{Tr}(\rho(\beta)) = \int_{\mathbb{R}} \rho(\beta; x, x) dx = \frac{1}{2 \operatorname{sh}(\beta/2)}.$$

Таким образом, ядро оператора плотности $\mathbf{D}(\beta)$ (нормированного оператора Гиббса) имеет вид

$$D(\beta; x, y) = \left(\frac{1}{\pi} \operatorname{th}\left(\frac{\beta}{2}\right)\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2 \operatorname{sh} \beta} ((x^2 + y^2) \operatorname{ch} \beta - 2xy)\right). \quad (3.8)$$

Статистическая интерпретация равенства (3.8) заключается в том, что оператор плотности представляет собой вероятностную смесь проекторов на собственные состояния гамильтониана с весами $e^{-\beta E_n} / \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta E_k}$. Мы напомним формулу для ядра оператора плотности (3.8) гармонического осциллятора с тем, чтобы впоследствии использовать ее для доказательства теоремы (см. теорему 1 и замечание 2 ниже) о том, что статистическое смешивание операторов плотности n -го состояния с весами Гиббса $p_n(\beta) = e^{-\beta E_n}$ соответствует предельному переходу (1.1), следующему из теоремы Чернова [1].

В терминах ядер операторов формула Фейнмана (1.1) для оператора Гиббса имеет вид

$$\begin{aligned} \rho(\beta; x, y) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(\beta; x, y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} G\left(\frac{\beta}{n}, x, z_1\right) \int_{\mathbb{R}} G\left(\frac{\beta}{n}, z_1, z_2\right) \dots \\ &\dots \int_{\mathbb{R}} G\left(\frac{\beta}{n}, z_{n-1}, y\right) dz_1 dz_2 \dots dz_{n-1}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

где введено обозначение

$$G(\beta, x, y) = \int_{\mathbb{R}^2} K(q, p \mid x, y) e^{-\beta H(q, p)} dq dp. \quad (3.10)$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Предоператором n -го порядка оператора Гиббса $\rho(\beta)$ назовем оператор $\rho_n(\beta)$, ядро которого имеет вид

$$\rho_n(\beta; x, y) = \int_{\mathbb{R}} G\left(\frac{\beta}{n}, x, z_1\right) \int_{\mathbb{R}} G\left(\frac{\beta}{n}, z_1, z_2\right) \dots \int_{\mathbb{R}} G\left(\frac{\beta}{n}, z_{n-1}, y\right) dz_1 dz_2 \dots dz_{n-1}. \quad (3.11)$$

Предоператором n -го порядка оператора плотности $\mathbf{D}(\beta)$ назовем оператор $\mathbf{D}_n(\beta) = \text{Tr}^{-1} \rho(\beta) \cdot \rho_n(\beta)$.

Заметим, что след предоператора плотности n -го порядка (существование которого следует из теоремы 2, см. ниже) может быть отличен от единицы.

Целью последующего анализа является выяснение скорости сходимости последовательности ядер (3.11) к предельному выражению (3.7). Заметим также, что оператор Гиббса гармонического осциллятора, разумеется, не зависит от правила квантования, т.е. от выбора значения τ в ядре (2.3). Поэтому зависимость от параметра τ , присутствующая в предоператоре Гиббса в соответствии с формулой (3.10), в процессе взятия предела в (3.9) должна исчезнуть. Ниже (см. теорему 1) мы найдем скорость исчезновения этой зависимости.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРЕДОПЕРАТОРА n -ГО ПОРЯДКА ДЛЯ ОПЕРАТОРА ГИББСА

Найдем ядро оператора, отвечающего τ -квантованию классического равновесного распределения, представляемое формулой (3.10):

$$\begin{aligned} G(\beta; x, y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \exp\left(-\frac{\beta}{2}(q^2 + p^2)\right) \delta(q - \tau x - (1 - \tau)y) e^{ip(x-y)} dq dp = \\ &= (2\pi\beta)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\beta}{2}\left[\left(\tau^2 + \frac{1}{\beta^2}\right)x^2 + \left((1 - \tau)^2 + \frac{1}{\beta^2}\right)y^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2xy\left(\tau(1 - \tau) - \frac{1}{\beta^2}\right)\right]\right). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Определим теперь ядро n -й степени оператора с символом $e^{-\beta H(p, q)}$:

$$G_n(\beta; x, y) = \int K(q_1, p_1 \mid x, z_1) \dots K(q_n, p_n \mid z_{n-1}, y) \exp\left(-\beta \sum_{k=1}^n H(q_k, p_k)\right) dq dp dz. \quad (4.2)$$

Здесь интегрирование проводится по $(2n)$ -мерному фазовому пространству переменных (p, q) и $(n-1)$ -мерному пространству переменной z . В этих обозначениях ядро предоператора Гиббса n -го порядка (3.11) определяется так:

$$\rho_n(\beta; x, y) = G_n\left(\frac{\beta}{n}; x, y\right). \quad (4.3)$$

Нашей первой задачей будет вычисление ядра $G_n(\beta; x, y)$.

Подставляя в формулу (4.2) гамильтониан гармонического осциллятора (3.1) и используя ядро квантования в виде (2.3), получаем после интегрирования по dq и dp $(n-1)$ -мерный интеграл гауссовского типа, берущийся в явном виде:

$$G_n(\beta; x, y) = (2\pi\beta)^{-n/2} \int e^{(-\mathbf{z}, A\mathbf{z}) + 2(\mathbf{r}, \mathbf{z}) + c} d\mathbf{z} = (2\beta)^{-n/2} (\pi A_{n-1})^{-1/2} e^{-B_n/A_{n-1}}, \quad (4.4)$$

где A_{n-1} есть определитель трехдиагональной матрицы порядка $n-1$, в которой элементы главной диагонали равны a , а элементы каждой из двух побочных диагоналей равны b ,

$$a = \frac{1}{\beta} + \frac{\beta}{2}(\tau^2 + (1-\tau)^2), \quad b = -\frac{1}{2\beta} + \frac{\beta}{2}\tau(1-\tau). \quad (4.5)$$

Вектор $\mathbf{r}$ в формуле (4.4), записанный в виде вектор-строки, и число c имеют вид

$$\mathbf{r}^T = -b(x, 0, \dots, 0, y), \quad c = -\frac{\beta}{2}(\tau^2 x^2 + (1-\tau)^2 y^2) - \frac{1}{2\beta}(x^2 + y^2), \quad (4.6)$$

а B_n – определитель блочной матрицы B порядка n :

$$B = \begin{pmatrix} A & \mathbf{r} \\ \mathbf{r}^T & -c \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Определитель A_{n-1} матрицы A в формуле (4.5) является многочленом по a и b порядка $n-1$. Этот определитель может быть представлен в виде, удобном для осуществления предельного перехода в выражении (3.9):

$$A_{n-1} = \frac{(a + (a^2 - 4b^2)^{1/2})^n - (a - (a^2 - 4b^2)^{1/2})^n}{2^n(a^2 - 4b^2)^{1/2}}. \quad (4.8)$$

Определитель же матрицы B равен

$$B_n = -cA_{n-1} - b^2(x^2 + y^2)A_{n-2} + (-1)^{n-1}2b^n xy. \quad (4.9)$$

В результате ядро $G_n(\beta; x, y)$ имеет вид

$$G_n(\beta; x, y) = (\pi(2\beta)^n A_{n-1})^{-1/2} \exp\left(c + b^2(x^2 + y^2)\frac{A_{n-2}}{A_{n-1}} + 2xy\frac{(-1)^n b^n}{A_{n-1}}\right). \quad (4.10)$$

Полученная формула (4.10) совместно с (4.3) определяет явный вид ядра предоператора Гиббса для гармонического осциллятора.

5. ГЛАВНАЯ ЧАСТЬ ЯДРА ПРЕДОПЕРАТОРА ГИББСА

В этом разделе будет найдено асимптотическое разложение предоператора плотности (3.11), полученное заменой β на β/n в формулах (4.5)–(4.9). Проанализируем множитель перед экспонентой в выражении (4.10). Имеем

$$a^2 - 4b^2 = \frac{\beta^2}{4}(1 - 2\tau)^2 + 1. \quad (5.1)$$

Тогда подкоренное выражение $(2\beta)^n A_{n-1}$ в (4.10) после замены β на β/n имеет вид

$$\begin{aligned} & \left(\frac{2\beta}{n}\right)^n A_{n-1} \left(\frac{\beta}{n}\right) = \\ & = \left(1 + \frac{\beta^2}{4n^2}(1 - 2\tau)^2\right)^{-1/2} \left[1 + \frac{\beta^2}{2n^2}(\tau^2 + (1 - \tau)^2) + \frac{\beta}{n} \left(1 + \frac{\beta^2}{4n^2}(1 - 2\tau)^2\right)^{1/2}\right]^n - \\ & - \left(1 + \frac{\beta^2}{4n^2}(1 - 2\tau)^2\right)^{-1/2} \left[1 + \frac{\beta^2}{2n^2}(\tau^2 + (1 - \tau)^2) - \frac{\beta}{n} \left(1 + \frac{\beta^2}{4n^2}(1 - 2\tau)^2\right)^{1/2}\right]^n. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Отсюда следует, что влияние квантования на нормировку в первом приближении по $1/n$ исчезает при qp - и pq -квантованиях, т. е. при $\tau = 0, 1$, чем и вызвано удержание в формуле (5.2) членов более высокого порядка по $1/n$: в отдельных случаях определяющим может стать член порядка $1/n^2$.

Коэффициент при xy в показателе экспоненты в формуле (4.10) вычисляется аналогично:

$$(-1)^n \frac{2b^n}{A_{n-1}} = \frac{2(1 - \beta^2\tau(1 - \tau)/n^2)^n}{(2\beta/n)^n A_{n-1}(\beta/n)} = \frac{1}{\operatorname{sh} \beta} \left(1 + \frac{\beta^3 \operatorname{cth} \beta}{24n^2}(1 - 12\tau + 12\tau^2) + o\left(\frac{1}{n^2}\right)\right). \quad (5.3)$$

Отметим, что зависимость этого коэффициента от квантования при любом τ проявляется во втором, а не в первом порядке по $1/n$.

При вычислении коэффициента при $x^2 + y^2$ в экспоненте формулы (4.10) следует учитывать, что и A_{n-1} , и A_{n-2} являются функциями одинакового аргумента β/n . Кроме того, необходимо учесть и выражение (4.6) для коэффициента c , где также содержится зависимость от $x^2 + y^2$. В результате выделения главной части получаем, что в этом коэффициенте зависимость от квантования проявляется уже в первом порядке по $1/n$:

$$\begin{aligned} c + b^2(x^2 + y^2) \frac{A_{n-2}}{A_{n-1}} &= -\frac{1}{2}(x^2 + y^2) \left(\operatorname{cth} \beta + \frac{\beta}{n} (\operatorname{cth}^2 \beta - 1 - 3\tau(1 - \tau)) \right) + \\ &+ \frac{\beta}{2n} (\tau^2 x^2 + (1 - \tau)^2 y^2) + r_n(x, y), \end{aligned} \quad (5.4)$$

где остаточный член $r_n(x, y)$ допускает оценку $|r_n(x, y)| \leq (x^2 + y^2)(\alpha_n/n)$ с зависящей от параметров β и τ , но не зависящей от переменных (x, y) бесконечно малой последовательностью α_n . Второе слагаемое в правой части формулы (5.4) отражает влияние несимметричности τ -квантования при $\tau \neq 1/2$. Все остальные фрагменты предоператора симметричны относительно замены x на y .

Объединяя результаты формул (5.2)–(5.4), получаем, что ядро предоператора Гиббса в первом порядке по $1/n$ может быть записано в виде

$$\frac{\rho_n(\beta; x, y)}{\rho(\beta; x, y)} = 1 + \frac{\beta}{2n} (\beta\tau(1-\tau) + (x^2 + y^2)(1 + 3\tau(1-\tau) - \operatorname{cth}^2 \beta) + \tau^2 x^2 + (1-\tau)^2 y^2) + \epsilon_n(x, y), \quad (5.5)$$

где остаточный член $\epsilon_n(x, y)$ на основании формулы Тейлора допускает оценку

$$|\epsilon_n(x, y)| \leq (x^2 + y^2)^2 \frac{c}{n} \alpha_n e^{\alpha_n(x^2 + y^2)/n} \quad (5.6)$$

с не зависящими от переменных (x, y) бесконечно малой последовательностью α_n и константой c . Следовательно, справедлива оценка $|\rho_n(\beta; x, y) - \rho(\beta; x, y)| \leq (x^2 + y^2)^2 (c/n) \alpha_n e^{\alpha_n(x^2 + y^2)/n} \rho(\beta; x, y)$. Поскольку $\alpha_n/n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, а функция $\rho(\beta, x, y)$ является гауссовой экспонентой с отрицательно определенной квадратичной формой в показателе (см. формулу (3.11)), то тогда для любого числа $q > 1$ имеет место оценка $|\rho_n(\beta; x, y) - \rho(\beta; x, y)| \leq (C(\beta, \tau, q)/n) \alpha_n \rho(\beta; x/q, y/q)$ с не зависящей от переменных n и (x, y) постоянной $C(\beta, \tau, q)$. Таким образом, доказана следующая теорема.

ТЕОРЕМА 1. *При любом $\beta > 0$ последовательность ядер предоператоров Гиббса n -го порядка сходится к ядру оператора Гиббса (3.7) равномерно на плоскости $\mathbb{R}^2$ по переменным (x, y) . При любом $q > 1$ скорость сходимости допускает оценку*

$$|\rho_n(\beta; x, y) - \rho(\beta; x, y)| \leq \frac{C(\beta, \tau, q)}{n} \rho\left(\beta, \frac{x}{q}, \frac{y}{q}\right) \quad (5.7)$$

с константой $C(\beta, \tau, q)$, не зависящей от n .

Из равенства (5.5) и абсолютной сходимости интеграла

$$\int_{\mathbb{R}^2} (x^2 + y^2)^2 e^{\alpha_n(x^2 + y^2)/n} \rho(\beta; x, y) dx dy$$

при всех достаточно больших n следует сходимость последовательности операторов плотности $\{\mathbf{D}_n(\beta)\}$ к оператору плотности $\mathbf{D}(\beta)$ по норме пространства ядерных операторов. Более того, из оценки (5.7) следует операторная оценка отклонения значения n -го элемента последовательности от ее предела.

Через $\mathbf{S}_q$ обозначим оператор сжатия аргумента, действующий на произвольный элемент ψ пространства H по правилу $\mathbf{S}_q \psi(x) = \psi(x/q)$, $x \in \mathbb{R}$, а через $\mathbf{S}_q^*$ – сопряженный оператор. Тогда оператор $\mathbf{S}_q \mathbf{D}(\beta) \mathbf{S}_q^*$ есть неотрицательный следовый оператор, ядром которого является функция $\rho(\beta, x/q, y/q)$. Следовательно, из теоремы 1 и оценки (5.7) вытекает

ТЕОРЕМА 2. *При любом $\beta > 0$ последовательность $\mathbf{D}_n(\beta)$ предоператоров плотности n -го порядка сходится к равновесному оператору плотности $\mathbf{D}(\beta)$ по норме пространства ядерных операторов, причем для любого $q > 1$ неотрицательный ядерный оператор $(C(\beta, \tau, q)/n) \mathbf{S}_q \mathbf{D}(\beta) \mathbf{S}_q^*$ мажорирует отклонение предоператоров плотности n -го порядка от равновесного оператора плотности.*

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Установленный результат служит обоснованием того факта, что статистическое смешивание операторов Гиббса n -го состояния с весами Гиббса соответствует предельному переходу (1.1), ибо равновесный оператор Гиббса $e^{-\beta \mathbf{H}}$ может быть определен и как результат статистического смешивания (3.4) операторов плотности n -го состояния с весами Гиббса $p_n(\beta) = e^{-\beta E_n}$, $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$, в соответствии со спектральной теоремой, и как предел (1.1) последовательности $\{\mathcal{P}(e^{-\beta H/n})^n\}$ фейнмановских аппроксимаций оператора $e^{-\beta \mathbf{H}}$ в соответствии с теоремой Чернова [1].

6. ФУНКЦИЯ ВИГНЕРА И СХОДИМОСТЬ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ ОПЕРАТОРОВ

Если использовать конечнократный интеграл для приближенного вычисления средних значений операторов наблюдаемых, то важно найти также скорость сходимости моментов предоператора плотности к своим предельным значениям. Для этой цели следует использовать нормированный оператор плотности $\mathbf{D}(\beta)$ с ядром $D(\beta; x, y)$, определенным формулой (3.8), а также провести нормировку предоператора Гиббса $\rho_n(\beta)$, ядро которого задано формулой (5.5). Ядро соответствующего нормированного с точностью $o(1/n)$ предоператора плотности будем обозначать $D_n(\beta; x, y)$. Из выражений (3.8) и (5.5) следует, что

$$D_n(\beta; x, y) = D(\beta; x, y) \left[1 + \frac{\beta}{2n} \left(x^2 + y^2 - \frac{1}{\text{th}(\beta/2)} \right) (1 + 3\tau(1 - \tau) - \text{cth}^2 \beta) + \right. \\ \left. + \frac{\beta}{2n} \left(\tau^2 \left(x^2 - \frac{1}{2\text{th}(\beta/2)} \right) + (1 - \tau)^2 \left(y^2 - \frac{1}{2\text{th}(\beta/2)} \right) \right) + \epsilon_n(x, y) \right]. \quad (6.1)$$

В частности, для эрмитова квантования, получающегося из выражения (2.3) при $\tau = 1/2$ (квантование Вейля), имеем

$$D_n(\beta; x, y)|_{\tau=1/2} = D(\beta; x, y) \left(1 + \frac{\beta}{2n} (2 - \text{cth}^2 \beta) \left(x^2 + y^2 - \frac{1}{\text{th}(\beta/2)} \right) + \epsilon_n(x, y) \right). \quad (6.2)$$

Среднее значение оператора $\mathbf{A}$ в равновесном состоянии, задаваемом оператором плотности с ядром (3.8), определяется формулой

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \text{Tr}(\mathbf{D}\mathbf{A}) = \int_{\mathbb{R}^2} D(\beta; x, y) \tilde{A}(y, x) dx dy. \quad (6.3)$$

Непосредственно проводить вычисления в этой формуле для операторов, например, вида (2.6) не особенно удобно. Если же использовать для ядра оператора $\mathbf{A}$ представление (2.2), то среднее значение оператора можно получить, интегрируя его классический символ:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} W(\beta; q, p) A(q, p) dq dp. \quad (6.4)$$

Аналогом классического распределения в формуле (6.4) является функция Вигнера $W(\beta; q, p)$ [23] оператора плотности $\mathbf{D}(\beta)$, которая представляет собой, как это

следует из выражений (2.2) и (6.4), специальное преобразование ядра оператора плотности:

$$W(\beta; q, p) = \int_{\mathbb{R}^2} D(\beta; x, y) K(q, p | y, x) dx dy = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} D(\beta; q - \tau\xi, q + (1 - \tau)\xi) e^{ip\xi} d\xi. \quad (6.5)$$

Аналогично определяется функция Вигнера $W_n(\beta; q, p)$ предоператора $D_n(\beta; q, p)$ и вычисляется среднее значение $\langle \mathbf{A} \rangle_n$:

$$W_n(\beta; q, p) = \int_{\mathbb{R}^2} D_n(\beta; x, y) K(q, p | y, x) dx dy, \quad (6.6)$$

$$\langle \mathbf{A} \rangle_n = \int_{\mathbb{R}^2} W_n(\beta; q, p) A(q, p) dq dp. \quad (6.7)$$

Подчеркнем, что в отличие от ядра оператора плотности, функция Вигнера зависит от правила квантования (2.3) даже в том случае, если оператор Гамильтона системы от него не зависит.

Для операторов плотности с ядрами (3.8) и (6.1) можно получить явные выражения соответствующих функций Вигнера. Введем для сокращения записей величину

$$C(\beta, \tau) = \frac{1}{2} \operatorname{cth} \beta - \tau(1 - \tau) \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \right). \quad (6.8)$$

Тогда из преобразования (6.5) получаем

$$\begin{aligned} W(\beta; q, p) &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\operatorname{th}(\beta/2)}{C(\beta, \tau)} \right)^{1/2} \exp \left(-ipq \frac{(1 - 2\tau) \operatorname{th}(\beta/2)}{2C(\beta, \tau)} \right) \times \\ &\times \exp \left(-q^2 \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \right) \left(1 - \frac{(1 - 2\tau)^2 \operatorname{th}(\beta/2)}{4C(\beta, \tau)} \right) e^{-p^2/4C(\beta, \tau)} \right). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Видно, что если квантование не эрмитово, то функция Вигнера оказывается комплекснозначной. Отметим, что коэффициент при $-q^2$ в экспоненте положителен при любом $\tau \in [0, 1]$.

В частном случае для квантования Вейля ($\tau = 1/2$) имеем $C(\beta, \tau) = \operatorname{cth}(\beta/2)/4$, после чего из формулы (6.8) получаем

$$W_{\text{Weyl}}(\beta; q, p) = \frac{\operatorname{th}(\beta/2)}{\pi} e^{-\operatorname{th}(\beta/2)(q^2 + p^2)}. \quad (6.10)$$

Аналогично из формулы (6.6) можно получить выражение для функции Вигнера предоператора плотности при произвольном τ -квантовании. Оно имеет весьма громоздкий вид, поэтому мы приведем здесь только выражение для случая $\tau = 1/2$, важного в практических приложениях:

$$\begin{aligned} W_n(\beta; q, p) \big|_{\tau=1/2} &= W_{\text{Weyl}}(\beta; q, p) \left(1 + \frac{\beta}{n} (2 - \operatorname{cth}^2 \beta) \left(2q^2 - 2p^2 \operatorname{th}^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \operatorname{cth} \left(\frac{\beta}{2} \right) + \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \right) \right) + \varepsilon_n(q, p) \right), \end{aligned} \quad (6.11)$$

где остаточный член $\varepsilon_n(q, p)$ допускает оценку $|\varepsilon_n(q, p)| \leq (q^4 + p^4)(C/n)\gamma_n e^{\gamma_n(q^2 + p^2)/n}$ с не зависящими от переменных (q, p) бесконечно малой последовательностью γ_n и константой C . Из равенств (6.10) и (6.11) вытекает следующее утверждение.

ТЕОРЕМА 3. Пусть $\beta > 0$ и $\tau = 1/2$. Тогда последовательность функций Вигнера предоператоров плотности n -го порядка (6.11) сходится равномерно на плоскости $\mathbb{R}^2$ изменения переменных (q, p) к функции Вигнера равновесного оператора плотности (6.10).

ЗАМЕЧАНИЕ 3. Установленные в теоремах 1 и 2 сходимости не являются равномерными на области $(0, +\infty)$ изменения параметра β .

ЗАМЕЧАНИЕ 4. Видно, что в членах порядка $1/n$ величины q^2 и p^2 входят в формулу (6.11) с разными знаками. В результате при достаточно малых значениях β среднее значение q^2 оказывается отрицательным, что не имеет смысла. Среднее же значение p^2 становится отрицательным при больших β . Это произошло в силу того, что разложение по $1/n$ в виде (6.2) аргумента экспоненты в формуле (4.10) было проведено до преобразования Фурье (6.5). Поэтому для вычисления средних значений операторов надо использовать точное выражение для конечнократной аппроксимации функции Вигнера, а не приближение (6.11), которое, хотя и имеет правильную асимптотику по $1/n$, может приводить к неверным численным значениям.

Из формул (4.5)–(4.10) следует, что точная формула для ядра предоператора плотности при $\tau = 1/2$ имеет вид

$$D_n(\beta; x, y)|_{\tau=1/2} = \left(\frac{2(\lambda_n - \mu_n)}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\lambda_n(x^2 + y^2) + 2\mu_n xy}, \quad (6.12)$$

где λ_n и μ_n – функции, зависящие от β и n :

$$\lambda_n = \frac{n}{2\beta} + \frac{\beta}{8n} - \left(\frac{n}{2\beta} - \frac{\beta}{8n} \right)^2 \frac{A_{n-2}(\beta/n)}{A_{n-1}(\beta/n)}, \quad \mu_n = \frac{1}{A_{n-1}(\beta/n)} \left(\frac{n}{2\beta} - \frac{\beta}{8n} \right)^n. \quad (6.13)$$

Тогда из выражения (6.5) находим, что функция Вигнера, отвечающая (6.12), определяется формулой

$$W_n(\beta; q, p)|_{\tau=1/2} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\lambda_n - \mu_n}{\lambda_n + \mu_n} \right)^{1/2} \exp \left(-2(\lambda_n - \mu_n)q^2 - \frac{p^2}{2(\lambda_n + \mu_n)} \right). \quad (6.14)$$

В n -м приближении функция (6.14) еще не симметрична по q и p в отличие от предельной функции (6.10). Тем не менее средние значения по ней от операторов наблюдаемых физически осмысленны при условии, что

$$\lambda_n + \mu_n > 0, \quad \lambda_n - \mu_n > 0, \quad n \in \mathbb{N}, \quad n > 1. \quad (6.15)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 5. Если условия (6.15) выполнены, то при любом $n \in \mathbb{N}$ функция Вигнера $W_n(\beta; q, p)$ является неотрицательной.

7. ВОЗМОЖНОСТЬ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ КОНЕЧНОКРАТНЫХ АППРОКСИМАЦИЙ

Покажем, что условия (6.15) выполнены для любых фиксированных значений $n > 1$ во всем диапазоне изменений β . Это означает практическую применимость конечнократных аппроксимаций для точной функции Вигнера (6.14), отвечающей ядру предоператора плотности (6.12). Обозначим для краткости

$$\nu = \frac{\beta}{n}. \quad (7.1)$$

Тогда с учетом формул (4.8) и (5.2) величины (6.13) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \lambda_n(\nu) &= \frac{1 + \nu^2}{4\nu} - \frac{(1 - \nu^2)^2}{8\nu} \frac{(1 + \nu)^{2(n-1)} - (1 - \nu)^{2(n-1)}}{(1 + \nu)^{2n} - (1 - \nu)^{2n}}, \\ \mu_n(\nu) &= \frac{2^{-n}(1 - \nu^2)^n}{(1 + \nu)^{2n} - (1 - \nu)^{2n}}, \end{aligned} \quad (7.2)$$

откуда легко получить следующие предельные соотношения:

$$\lim_{\nu \rightarrow +0} \nu(\lambda_n(\nu) - \mu_n(\nu)) = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{n-1}{2n} - \frac{1}{2^n n} \right) = \lim_{\nu \rightarrow +\infty} \frac{1}{\nu} (\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)|), \quad (7.3)$$

что доказывает положительность этих комбинаций и выполнимость условий (6.15) при всех натуральных n в обоих предельных случаях. Следовательно, если минимум по ν выражений $\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)|$ положителен, то условия (6.15) будут всегда выполнены. Заметим, что функции $\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)|$ при каждом n инвариантны относительно замены ν на $1/\nu$, поэтому достаточно рассмотреть выражения (7.2), например, при $\nu > 1$.

Поскольку $|\mu_n|$, а также дробь

$$\frac{(1 + \nu)^{2(n-1)} - (1 - \nu)^{2(n-1)}}{(1 + \nu)^{2n} - (1 - \nu)^{2n}}$$

монотонно убывают с ростом n (коэффициенты при соответствующих степенях ν в числителе дроби положительны и не превосходят коэффициентов знаменателя, а степень знаменателя выше), минимум оценки для выражения $\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)|$ достигается при $n = 2$. Для него имеем

$$\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)| \geq \frac{\nu^2 + 1}{4\nu} \left(1 - \frac{3(\nu^2 - 1)}{8(\nu^2 + 1)} \right) > 0. \quad (7.4)$$

Правая часть неравенства (7.4) монотонно растет при $\nu > 1$, минимум этого выражения достигается при $\nu = 1$ и равен $1/2$. Из выражения (7.2) видно, что значение $\nu = 1$ доставляет минимум и функциям $\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)|$, и этот минимум также равен $1/2$. Таким образом, $\min_{\nu} (\lambda_n(\nu) - |\mu_n(\nu)|) = 1/2 > 0$. Следовательно, условия (6.15) всегда выполнены, поэтому функцией Вигнера (6.14) можно пользоваться для вычисления средних значений операторов во всем диапазоне изменения β и при любых n .

ПРИМЕР 1. Подчеркнем еще раз, что приближенными выражениями вида (6.2) и (6.11) нельзя пользоваться для вычисления средних значений наблюдаемых даже при выполнении условий (6.15). Сначала необходимо получить точное выражение для среднего значения по функции Вигнера (6.14), а затем уже выделить главную асимптотику по $1/n$, если в последнем есть необходимость. В частности, на основании формулы (6.14) установлена правильная оценка средней энергии осциллятора:

$$\frac{1}{2}\langle q^2 + p^2 \rangle_n = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4(\lambda_n - \mu_n)} + \lambda_n + \mu_n \right) = \frac{1}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\beta}{2} \right) + \frac{\beta}{2n} (\operatorname{cth}^2 \beta - 2) + o \left(\frac{1}{n} \right). \quad (7.5)$$

Аналогичное вычисление по функции (6.11) дает неправильную количественно и по знаку асимптотику при $\beta \rightarrow 0$:

$$\frac{1}{2}\langle q^2 + p^2 \rangle_n = \frac{1}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\beta}{2} \right) - \frac{\beta}{2n} \frac{(\operatorname{cth}^2 \beta - 2)}{\operatorname{sh}^2(\beta/2)} + o \left(\frac{1}{n} \right). \quad (7.6)$$

То, что формулы (7.5) и (7.6) не совпадают, объясняется неравномерной сходимостью формулы Фейнмана (3.9) по β . В этом случае преобразование Фурье, выполняемое в формуле (6.5) для разложения функциональной последовательности по малому параметру $1/n$, может не совпадать с разложением по этому параметру результата преобразования Фурье точной последовательности.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе получены явные формулы для определения скорости сходимости формул Фейнмана для случая гармонического осциллятора. Показано, что зависимость от τ -квантования исчезает с увеличением числа n аппроксимаций как $c(\tau)/n$. Получено также точное выражение для функции Вигнера, отвечающей ядру предоператора плотности, и доказана корректность использования конечнократных приближений для вычисления средних значений наблюдаемых во всем диапазоне изменений параметра β .

В дальнейшем представляет интерес использование конечнократных аппроксимаций для вычисления средних значений наблюдаемых в случае более сложных гамильтонианов и проведение сравнения с результатами, получаемыми другими приближенными методами, например по теории возмущений.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-01-00724, 10-01-00395), Федеральной целевой программы “Научные и научно-педагогические кадры России” на 2009–2013 гг., а также гранта Правительства РФ, предусмотренного постановлением № 220 “О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные учреждения высшего профессионального образования” в рамках договора № 11.G34.31.0054 между Министерством образования и науки РФ и МГУ им. М. В. Ломоносова.

Список литературы

- [1] P. R. Chernoff, *J. Funct. Anal.*, **2:2** (1968), 238–242.
- [2] R. P. Feynman, *Rev. Modern Phys.*, **20:2** (1948), 367–387.
- [3] R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **84:1** (1951), 108–128.

- [4] O. G. Smolyanov, A. G. Tokarev, A. Truman, *J. Math. Phys.*, **43**:10 (2002), 5161–5171.
- [5] E. Nelson, *J. Math. Phys.*, **5**:3 (1964), 332–343.
- [6] N. Jacob, *Pseudo Differential Operators and Markov Processes*, Fourier Analysis and Semigroups, v. 1, Imperial College Press, London, 2001.
- [7] В. П. Маслов, *Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана*, Наука, М., 1976.
- [8] P. Cartier, C. De Witt-Moret, *Functional Integration: Action and Symmetries*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [9] О. Г. Смолянов, Е. Т. Шавгулидзе, *Континуальные интегралы*, Изд-во МГУ, М., 1990.
- [10] S. A. Albeverio, R. J. Nøegh-Krohn, S. Mazzucchi, *Mathematical Theory of Feynman Path Integrals*, Lecture Notes in Mathematics, **523**, Springer, Berlin, 2008.
- [11] М. Кац, *Вероятность и смежные вопросы в физике*, Мир, М., 1965.
- [12] А. Д. Вентцель, М. И. Фрейдлин, *Флуктуации в динамических системах под действием малых случайных возмущений*, Наука, М., 1979.
- [13] Е. Б. Дынкин, *Марковские процессы*, Физматгиз, М., 1963.
- [14] Ю. Л. Далецкий, С. В. Фомин, *Меры и дифференциальные уравнения в бесконечномерных пространствах*, Наука, М., 1983.
- [15] Ф. А. Березин, *ТМФ*, **6**:2 (1971), 194–212.
- [16] О. Г. Смолянов, Х. Вайцзеккер, *Докл. РАН*, **426**:2 (2009), 162–165.
- [17] М. Гадэлья, О. Г. Смолянов, *Докл. РАН*, **418**:6 (2008), 727–730.
- [18] Я. А. Бутко, О. Г. Смолянов, Р. Л. Шиллинг, *Докл. РАН*, **434**:1 (2010), 7–11.
- [19] В. Ж. Сакбаев, О. Г. Смолянов, *Докл. РАН*, **433**:3 (2010), 314–317.
- [20] D. S. Tolstyga, *Rus. J. Math. Phys.*, **18**:1 (2011), 122–131.
- [21] Ю. Н. Орлов, *Основы квантования вырожденных динамических систем*, МФТИ, М., 2004.
- [22] Я. А. Бутко, О. Г. Смолянов, *Современные проблемы математики и механики*, **6**:1 (2011), 61–75.
- [23] Я. А. Бутко, М. Гротхаус, О. Г. Смолянов, *Докл. РАН*, **421**:6 (2008), 727–732.
- [24] Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*, Наука, М., 1986.

Поступила в редакцию 9.08.2011