Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

И. А. Соловьев, Описание с помощью волн вероятности поведения стохастических величин, средние значения которых подчиняются системе разностных уравнений, *ТМФ*, 1998, том 115, номер 1, 56–76

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf857>

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: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 12:13:28

© 1998 г.

И. А. Соловьев*

ОПИСАНИЕ С ПОМОЩЬЮ ВОЛН ВЕРОЯТНОСТИ ПОВЕДЕНИЯ СТОХАСТИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН, СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ КОТОРЫХ ПОДЧИНЯЮТСЯ СИСТЕМЕ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Изложена теория волн вероятностей применительно к исследованию поведения стохастических векторных величин, средние значения компонент которых подчиняются обыкновенным разностным уравнениям первого порядка. Приведены разностно-дифференциальные уравнения для волн вероятности, соответствующие разностной модели для средних величин. Доказаны аналоги теорем Лиувилля и Эренфеста. Получено разностное уравнение первого порядка для изменения дисперсии компоненты случайной векторной величины. Предложен алгоритм решения волновых уравнений. Приведены результаты анализа некоторых решений уравнений для волн вероятности. Обсуждается проблема связи аппарата конечных разностей с проявлениями корпускулярно-волнового дуализма.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование поведения сложных динамических систем, моделируемых с помощью разностных уравнений, в последние годы приобрело особую актуальность в связи с многочисленными приложениями к различным областям физики, химии, биологии, медицины, экологии, социологии и экономики [1–5]. Наличие нерегулярных хаотических режимов поведения характеристик, описывающих те или иные явления, делает предпочтительным использование наряду с традиционными детерминистическими и стохастическими представлениями.

В настоящее время описание марковских процессов для случайных величин чаще всего производится с помощью уравнения Чепмена–Колмогорова и его модификаций [2]. Применение этого уравнения позволяет количественно анализировать многочисленные характеристики исследуемых стохастических явлений. В то же время существуют такие аспекты поведения случайных величин, которые не описываются уравнением Чеп-

*Московский энергетический институт (технический университет), Москва, Россия

мена–Колмогорова. В этой связи следует прежде всего отметить наличие волновых решений разностных уравнений. В самом деле, даже у простейшей разностной задачи для некоторой случайной величины $q(t)$

$$\frac{\langle q(t+\tau) \rangle - \langle q(t) \rangle}{\tau} = C = \text{const}, \quad \langle q(0) \rangle = q_0, \quad t = 0, \tau, 2\tau, \dots, m\tau, \dots, \quad (1)$$

помимо решения $\langle q(t) \rangle = q_0 + ct/\tau$ на дискретной сетке $t = 0, \tau, 2\tau, \dots, m\tau, \dots$, существует совпадающее с ним на этой сетке решение с аддитивной $A(t) = A(t+\tau) = 0$ и мультипликативной $B(t) = B(t+\tau) = 1$ периодическими функциями:

$$\langle q(t) \rangle = A(t) + \left(q_0 + \frac{Ct}{\tau} \right) B(t).$$

Простейшая явная разностная схема для усредненного значения температуры $\langle T(q, t) \rangle$:

$$C\rho \frac{\langle T(q, t+\tau) \rangle - \langle T(q, t) \rangle}{\tau} = \lambda \frac{\langle T(q+s, t) \rangle - 2\langle T(q, t) \rangle + \langle T(q-s, t) \rangle}{s^2}, \quad (2)$$

$$\langle T(q, 0) \rangle = \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{q/s}, \quad q = ms, \quad t = n\tau, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad n \in \mathbb{N},$$

имеет решение

$$\langle T(q, t) \rangle = A(q, t) + B(q, t)\Gamma(q, t) = A(q, t) + B(q, t) \left(1 + \frac{\tau}{C\rho} \right)^{t/\tau} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{q/s},$$

в состав которого входят сеточное решение в общепринятом смысле $\Gamma(q, t)$, аддитивная $A(q, t)$ и мультипликативная $B(q, t)$ компоненты, представляющие собой волны:

$$A(q \pm ms, t + n\tau) = A\left(\frac{q \pm ms}{s} \pm \frac{t + n\tau}{\tau} \right) = A(q, t) = 0,$$

$$B(q \pm ms, t + n\tau) = B\left(\frac{q \pm ms}{s} \pm \frac{t + n\tau}{\tau} \right) = B(q, t) = 1,$$

$$q = ms, \quad t = n\tau, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Поскольку при построении модели любого явления используются прежде всего измеряемые и наблюдаемые величины, то чаще всего на первоначальных стадиях рассмотрения случайного процесса конструируются разностные уравнения для усредненных значений случайной величины и усредненных значений функций от этой случайной величины. Так, уравнение (1) может рассматриваться как усреднение стохастического разностного уравнения

$$\frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} = f(q(t))$$

при не зависящих от q аргументах t и $t + \tau$, при которых производились и должны производиться в будущем измерения при экспериментальных проверках.

Периодические (волновые) компоненты решений $A(q, t)$ и $B(q, t)$ разностных задач для средних значений случайной величины могут интерпретироваться как отражение реально существующих скрытых волновых характеристик описываемой случайной величины. Соответственно обычные сеточные компоненты $\Gamma(q, t)$ могут рассматриваться как характеристики, которые появляются в результате усреднения при измерении и являются детерминированными и наблюдаемыми.

Для изучения волновых аспектов случайных процессов микромира вот уже почти столетие успешно используется аппарат квантовой физики. Однако в силу определенных трудностей, обсуждение которых приведено в [6], такой аппарат не был разработан для произвольных случайных величин необязательно квантовой природы.

В настоящей работе для описания волновых свойств стохастических величин, подчиняющихся разностным уравнениям, развивается подход, который предложен в статьях [6–9].

Рассмотрение проводится для таких стохастических векторных величин $\bar{q}(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t))$, средние значения компонент которых подчиняются либо явным обыкновенным разностным уравнениям первого порядка

$$\frac{\langle q_j(t + \tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} = \langle f_j(\bar{q}(t), t) \rangle, \quad j = \overline{1, n}, \quad (3)$$

либо неявным уравнениям вида

$$\frac{\langle q_j(t + \tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} = \langle f_j(\bar{q}(t + \tau), t + \tau) \rangle, \quad j = \overline{1, n}. \quad (4)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ – математическое ожидание (среднее значение) случайной величины $q_j(t)$. Для полного описания требуется еще задать начальные математические ожидания $\langle q_j(0) \rangle = q_{j0}$, ненулевые и ограниченные начальные значения дисперсий $\sigma_{q_j}^2(t = 0) = \sigma_{q_{j0}}^2 \neq 0$, которые неявно содержатся в начальном значении плотности вероятности $P(\bar{q}, 0)$, а также функцию $U(\bar{q}, t)$, определяющую волновые (в дебройлевском смысле [6, 10]) свойства величины $\bar{q}$.

1. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ВОЛН ВЕРОЯТНОСТИ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Уравнения

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi^*(\bar{q}, t + \tau) + \Psi^*(\bar{q}, t)) \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t)}{\tau} + \\ & + \Psi^*(\bar{q}, t) \sum_{k=1}^n \left(i\hbar f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi(\bar{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar \Psi(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right) - \\ & - \Psi^*(\bar{q}, t) U(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad \bar{q} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (5)$$

и

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi(\bar{q}, t + \tau) + \Psi(\bar{q}, t)) \frac{\Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} + \\ & + \Psi(\bar{q}, t) \sum_{k=1}^n \left(i\hbar f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\bar{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right) + \\ & + \Psi^*(\bar{q}, t) U(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad \bar{q} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (6)$$

называются уравнениями для волн вероятности, отвечающими векторным стохастическим величинам со средними значениями, подчиняющимися уравнениям (3).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Уравнения

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi^*(\bar{q}, t + \tau) + \Psi^*(\bar{q}, t)) \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t)}{\tau} + \\ & + \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) \sum_{k=1}^n \left(i\hbar f_k(\bar{q}, t + \tau) \frac{\partial \Psi(\bar{q}, t + \tau)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar \Psi(\bar{q}, t + \tau) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t + \tau)}{\partial q_k} \right) - \\ & - U(\bar{q}, t + \tau) \Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) = 0, \quad t \geq 0, \quad \bar{q} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (7)$$

и

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi(\bar{q}, t + \tau) + \Psi(\bar{q}, t)) \frac{\Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} + \\ & + \Psi(\bar{q}, t + \tau) \sum_{k=1}^n \left(i\hbar f_k(\bar{q}, t + \tau) \frac{\partial \Psi^*(\bar{q}, t + \tau)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t + \tau)}{\partial q_k} \right) + \\ & + U(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) \Psi(\bar{q}, t + \tau) = 0, \quad t \geq 0, \quad \bar{q} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (8)$$

называются уравнениями для волн вероятности, отвечающими векторным стохастическим величинам со средними значениями, которые подчиняются уравнениям (4).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Нетривиальные решения

$$\Psi(\bar{q}, t) = a(\bar{q}, t) + ib(\bar{q}, t) \neq 0, \quad \Psi^*(\bar{q}, t) = a(\bar{q}, t) - ib(\bar{q}, t) \neq 0$$

уравнений (5) и (6) (или (7) и (8)) называются волнами вероятности для случайного вектора $\bar{q}(t)$, компоненты которого удовлетворяют уравнениям (3) или (4). Произведение $P(\bar{q}, t) = \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)$ называется плотностью вероятности.

Величина $\hbar$ в уравнениях (5)–(8) определяется начальными значениями дисперсии случайной величины $\bar{q}$ следующим образом:

$$\hbar = 2 \min_{j=1,2,\dots,n} \{ \sigma_{q_j}(t=0) \}.$$

Величину $U(\bar{q}, t)$ назовем функцией частотного спектра стохастических векторных величин $\bar{q}$. В ряде случаев из физических соображений можно предполагать, что $U(\bar{q}, t) \in \mathbb{C}[\mathbb{R}^{n+1}]$, в частности $U(\bar{q}, t) = \text{const}$.

Все предлагаемые здесь теоремы будут сформулированы как для явной, так и для неявной моделей, однако, если это не будет специально оговорено, доказательства проводятся только для явного случая, т.к. для неявного случая оно аналогично.

ТЕОРЕМА 1. Если Ψ и Ψ^* – нетривиальные решения уравнений (5) и (6) (или (7) и (8)) и выполняется равенство

$$\lim_{q_i \rightarrow \pm\infty} f_j(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) = 0 \quad \forall t \geq 0, \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, n},$$

в частности, если $|f_j(\bar{q}, t)| = M = \text{const}$ при $a_i \leq q_i \leq b_i$, $i = \overline{1, n}$, $M > 0$ и $f_j(\bar{q}, t) \equiv 0$ при $q_i \notin [a_i, b_i]$, а также

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, 0) \Psi^*(\bar{q}, 0) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1, \quad (9)$$

то для всех $t = k\tau$, $k \in \mathbb{N}$

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1. \quad (10)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Сложим уравнения (5) и (6) и воспользуемся результатами леммы из приложения. Имеем

$$i\hbar \left(\frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial q_j} (\Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) f_j(\bar{q}, t)) \right) = 0.$$

Проинтегрировав обе части двух последних соотношений по q_j и воспользовавшись условием теоремы, получим следующую цепочку равенств. Для первого уравнения найдем

$$i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n +$$

$$+ i\hbar \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial q_j} (\Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) f_j(\bar{q}, t)) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 0$$

$$\forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N},$$

$$i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n +$$

$$+ i\hbar \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\substack{a_j \rightarrow -\infty \\ b_j \rightarrow \infty}} f_j(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) \times$$

$$\times \Psi^*(\bar{q}, t) \Big|_{q_j=a_j}^{q_j=b_j} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_n = 0$$

$$\forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n = 0$$

$$\forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Вследствие сходимости несобственного интеграла (9) заключаем, что $\forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}$ интеграл (10) сходится:

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1 \quad \forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Отметим, что $J(t = 0) \neq 0$, т.к. в противном случае $\Psi(\bar{q}, t)$ и $\Psi^*(\bar{q}, t)$ были бы тривиальными решениями уравнений (5) и (6). Если $J(t = 0) \neq 1$, то путем деления каждой функции Ψ и Ψ^* на $\sqrt{J}$ получим новые выражения для волн вероятности, удовлетворяющие условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1 \quad \forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}. \quad \square \quad (11)$$

Заметим, что условие нормировки можно сформулировать с помощью собственных интегралов в виде так называемой нормировки “в ящике”:

$$\int_{-\frac{L_1}{2}}^{\frac{L_1}{2}} \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \dots \int_{-\frac{L_n}{2}}^{\frac{L_n}{2}} \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1 \quad \forall t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (12)$$

Для выполнения условий (11), (12) потребуем, чтобы функции Ψ и Ψ^* искались среди решений уравнений (5) и (6) (или (7) и (8)), принадлежащих (как функции от $\bar{q}$) пространству $\mathbb{L}_2$:

$$\Psi(\bar{q}, t) \in \mathbb{L}_2[\mathbb{R}^n], \quad \Psi^*(\bar{q}, t) \in \mathbb{L}_2[\mathbb{R}^n].$$

Кроме того, функции Ψ и Ψ^* должны удовлетворять начальным условиям вида

$$\begin{aligned} \Psi(\bar{q}, 0) &= \varphi(\bar{q}, \hbar) = \sqrt{\alpha(\bar{q})P(\bar{q}, \hbar, 0)} + \sqrt{(1 - \alpha(\bar{q}))P(\bar{q}, \hbar, 0)} \cdot i, \\ \Psi^*(\bar{q}, 0) &= \varphi^*(\bar{q}, \hbar) = \sqrt{\alpha(\bar{q})P(\bar{q}, \hbar, 0)} - \sqrt{(1 - \alpha(\bar{q}))P(\bar{q}, \hbar, 0)} \cdot i, \end{aligned} \quad (13)$$

где $0 \leq \alpha(\bar{q}) \leq 1$ – функция весов действительной и мнимой частей начального распределения волновой функции таких, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\bar{q}, \hbar) \varphi^*(\bar{q}, \hbar) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1 \quad (14)$$

или

$$\int_{-\frac{L_1}{2}}^{\frac{L_1}{2}} \int_{-\frac{L_2}{2}}^{\frac{L_2}{2}} \cdots \int_{-\frac{L_n}{2}}^{\frac{L_n}{2}} \varphi(\bar{q}, \hbar) \varphi^*(\bar{q}, \hbar) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1. \quad (15)$$

Дополнительно к (13) функции Ψ и Ψ^* должны удовлетворять либо граничным условиям на бесконечности

$$\lim_{q_j \rightarrow \pm\infty} \Psi(\bar{q}, t) q_j^2 f_j(\bar{q}, t) = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (16)$$

$$\lim_{q_j \rightarrow \pm\infty} \Psi^*(\bar{q}, t) q_j^2 f_j(\bar{q}, t) = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (17)$$

либо условиям на границах “ящика”

$$\begin{aligned} \Psi \left(q_1, q_2, \dots, q_{j-1}, q_j = \frac{L_j}{2}, q_{j+1}, \dots, q_n, t \right) = \\ = \Psi \left(q_1, q_2, \dots, q_{j-1}, q_j = -\frac{L_j}{2}, q_{j+1}, \dots, q_n, t \right) = 0, \quad j = \overline{1, n}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \Psi^* \left(q_1, q_2, \dots, q_{j-1}, q_j = \frac{L_j}{2}, q_{j+1}, \dots, q_n, t \right) = \\ = \Psi^* \left(q_1, q_2, \dots, q_{j-1}, q_j = -\frac{L_j}{2}, q_{j+1}, \dots, q_n, t \right) = 0, \quad j = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (19)$$

Если случайный процесс таков, что $a_j \leq q_j(t) \leq b_j$, то граничные условия принимают вид

$$\begin{aligned} \Psi(q_1, q_2, \dots, q_{j-1}, q_j = b_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = \\ = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_{j-1}, q_j = a_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = 0, \quad q_j \in [a_j, b_j], \\ \Psi(\bar{q}, t) = 0, \quad q_j \notin [a_j, b_j]. \end{aligned}$$

При доказательстве теоремы 1 фактически была установлена справедливость следующего утверждения.

ТЕОРЕМА 2. *Плотность вероятности $P(\bar{q}, t) = \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)$, где функции Ψ и Ψ^* подчиняются уравнениям (5) и (6), удовлетворяет аналогу уравнения Лиувилля (ср. с [2])*

$$\frac{P(\bar{q}, t + \tau) - P(\bar{q}, t)}{\tau} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial q_k} (f_k(\bar{q}, t) P(\bar{q}, t)) = 0. \quad (20)$$

Если функции Ψ и Ψ^ подчиняются уравнениям (7) и (8), то плотность вероятности $P(\bar{q}, t) = \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)$ удовлетворяет такому аналогу уравнения Лиувилля:*

$$\frac{P(\bar{q}, t + \tau) - P(\bar{q}, t)}{\tau} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial q_k} (f_k(\bar{q}, t + \tau) P(\bar{q}, t + \tau)) = 0.$$

2. ТЕОРЕМЫ О ПОВЕДЕНИИ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ И ДИСПЕРСИИ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 4. Средним значением $\langle f(\bar{q}(t), t) \rangle$ скалярной функции, зависящей от компонент вектора $\bar{q} = (q_1, \dots, q_n)^T$, назовем следующую величину:

$$\langle f(\bar{q}(t), t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, t) f(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n, \quad (21)$$

в частности, среднее значение $\langle q_j(t) \rangle$ для компоненты $q_j(t)$ имеет вид

$$\langle q_j(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, t) q_j \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n. \quad (22)$$

Докажем аналоги теоремы Эренфеста [11].

ТЕОРЕМА 3. Среднее значение $\langle q_j(t) \rangle$ j -й компоненты случайного вектора, поведение которого описывается нетривиальными решениями уравнений (5), (6) (уравнений (7) и (8)) и условий (11)–(19), подчиняется уравнениям (3) (уравнениям (4)).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Найдем разностную производную по t от среднего значения $\langle q_j(t) \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{\langle q_j(t + \tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n. \end{aligned}$$

Воспользуемся тем же приемом в представлении разностной производной от $\Psi\Psi^*$, что и при доказательстве теоремы 1, а затем заменим частные разностные производные по t от волновых функций с помощью их выражений из (5) и (6). Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\langle q(t + \tau) \rangle - \langle q(t) \rangle}{\tau} &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\bar{q}, t + \tau) \Psi^*(\bar{q}, t + \tau) - \Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left(- \sum_{k=1}^n \left(f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi(\bar{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{iU(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t)}{\hbar} \right) q_j \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n - \\
&\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{q}, t) q_j \left(- \sum_{k=1}^n \left(f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\bar{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \frac{iU(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\hbar} \right) dq_1 dq_2 \dots dq_n = \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\bar{q}, t)}{\partial q_k} q_j \Psi(\bar{q}, t) + \right. \\
&\quad \left. + \Psi^*(\bar{q}, t) q_j f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi(\bar{q}, t)}{\partial q_k} + \Psi(\bar{q}, t) q_j \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right) dq_1 dq_2 \dots dq_n = \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{k=1}^n f_k(\bar{q}, t) q_j \frac{\partial}{\partial q_k} (\Psi^*(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t)) + \right. \\
&\quad \left. + \Psi(\bar{q}, t) q_j \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right\} dq_1 dq_2 \dots dq_n. \tag{23}
\end{aligned}$$

Интеграл от первого слагаемого в фигурных скобках можно взять по частям по q_k .

С учетом того, что на бесконечности выполняются условия (16), (17), получим

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n f_k(\bar{q}, t) q_j \frac{\partial}{\partial q_k} (\Psi^*(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t)) dq_1 dq_2 \dots dq_n = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\substack{a \rightarrow -\infty \\ b \rightarrow \infty}} \sum_{k=1}^n (\Psi(\bar{q}, t) q_k f_k(\bar{q}, t) \times \\
&\quad \times \Psi^*(\bar{q}, t)) \Big|_{q_k=a}^{q_k=b} dq_1 \dots dq_{k-1} dq_{k+1} \dots dq_n - \\
&\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial q_k} (q_j f_k(\bar{q}, t)) \Psi^*(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \Psi^*(\bar{q}, t) q_j \Psi(\bar{q}, t) + \right. \\
&\quad \left. + \Psi^*(\bar{q}, t) f_j(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) \right) dq_1 dq_2 \dots dq_n.
\end{aligned}$$

Подставив последнее выражение в соотношение (23), приходим к уравнению (3). $\square$

Теорема 3 потребует, чтобы получить уравнения для дисперсии j -й компоненты случайного вектора.

ТЕОРЕМА 4. Дисперсия $\sigma_j^2(t) = \langle q_j^2(t) \rangle - (\langle q_j(t) \rangle)^2$ решения j -го уравнения системы (3) подчиняется следующему разностному уравнению:

$$\frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = 2\langle f_j(\bar{q}, t) q_j \rangle - \tau (\langle f_j(\bar{q}, t) \rangle)^2 - 2\langle q_j(t) \rangle \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle. \quad (24)$$

Дисперсия $\sigma_j^2(t) = \langle q_j^2(t) \rangle - (\langle q_j(t) \rangle)^2$ решения j -го уравнения системы (4) подчиняется следующему разностному уравнению:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = & 2\langle f_j(\bar{q}(t+\tau), t+\tau) q_j(t+\tau) \rangle - \\ & - \tau (\langle f_j(\bar{q}(t+\tau), t+\tau) \rangle)^2 - 2\langle q_j(t+\tau) \rangle \langle f_j(\bar{q}(t+\tau), t+\tau) \rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = & \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi^*(\bar{q}, t+\tau) q_j^2 \Psi(\bar{q}, t) - \Psi^*(\bar{q}, t) q_j^2 \Psi(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n - \\ & - \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi^*(\bar{q}, t+\tau) q_j \Psi(\bar{q}, t+\tau) - \Psi^*(\bar{q}, t) q_j \Psi(\bar{q}, t)}{\tau} dq_1 dq_2 \dots dq_n \right)^2. \end{aligned}$$

Заменим частные разностные производные по времени от функций $\Psi(\bar{q}, t)$ и $\Psi^*(\bar{q}, t)$ при помощи уравнений (5) и (6):

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = & \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n \left(-f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi(\bar{q}, t)}{\partial q_k} - \frac{1}{2} \Psi(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} - \frac{iU(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t)}{\hbar} \right) \times \\ & \times q_j^2 \Psi^*(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n \left(-f_k(\bar{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\bar{q}, t)}{\partial q_k} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} i\hbar \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{iU(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)}{\hbar} \right) q_j \Psi(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n - \\ & - \frac{\langle q_j(t+\tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} (\langle q_j(t+\tau) \rangle + \langle q_j(t) \rangle) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n \left\{ f_k(\bar{q}, t) q_j^2 \frac{\partial}{\partial q_k} (\Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)) + \right. \\
&\quad \left. + \Psi(\bar{q}, t) q_j^2 \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right\} dq_1 dq_2 \dots dq_n - \\
&\quad - \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle (\langle q_j(t + \tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle + 2 \langle q_j(t) \rangle) = \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^n \left\{ f_k(\bar{q}, t) q_j^2 \frac{\partial}{\partial q_k} (\Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)) + \right. \\
&\quad \left. + \Psi(\bar{q}, t) q_j^2 \Psi^*(\bar{q}, t) \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \right\} dq_1 dq_2 \dots dq_n - \\
&\quad - \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle (\tau \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle + 2 \langle q_j(t) \rangle). \tag{26}
\end{aligned}$$

Интеграл от первого слагаемого в фигурных скобках можно взять по частям по q_k . С учетом того, что на бесконечности выполняются условия (16), (17), получим

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f_k(\bar{q}, t) q_j^2 \frac{\partial}{\partial q_k} (\Psi(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t)) dq_1 dq_2 \dots dq_n = \\
&= \left(\Psi(\bar{q}, t) q_j^2 f_k(\bar{q}, t) \Psi^*(\bar{q}, t) \right) \Big|_{q_k=-\infty}^{q_k=\infty} - \\
&\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial q_k} (q_j^2 f_k(\bar{q}, t)) \Psi^*(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f_k(\bar{q}, t)}{\partial q_k} \Psi^*(\bar{q}, t) q_j^2 \Psi(\bar{q}, t) + \\
&\quad + 2 \Psi^*(\bar{q}, t) q_j f_k(\bar{q}, t) \Psi(\bar{q}, t) dq_1 dq_2 \dots dq_n. \tag{27}
\end{aligned}$$

Подставив (27) в (26), приходим к уравнению (24). $\square$

ЗАМЕЧАНИЕ. Устремив τ к 0, из уравнений (24) и (25) получим уравнение

$$\frac{d\sigma_j^2(t)}{dt} = 2 \langle f_j(\bar{q}, t) q_j(t) \rangle - 2 \langle q_j(t) \rangle \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle \tag{28}$$

для дисперсии векторной стохастической величины $\bar{q}(t)$, средние значения компонент которой подчиняются дифференциальным уравнениям [6]

$$\frac{d\langle q_j(t) \rangle}{dt} = \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle, \quad j = \overline{1, n}.$$

3. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ЯВНОЙ МОДЕЛИ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Представим в соответствии с определением 3 волны вероятности в виде суммы действительной и чисто мнимой частей

$$\Psi(\bar{q}, t) = a(\bar{q}, t) + ib(\bar{q}, t), \quad \Psi^*(\bar{q}, t) = a(\bar{q}, t) - ib(\bar{q}, t). \quad (29)$$

Подставим выражение (29) в уравнения (5) и (6), соответствующие однокомпонентному вектору q , и выпишем получаемые при этом уравнения для реальной и мнимой частей. Для действительной части получим

$$\begin{aligned} & a^2(q, t + \tau) - a(q, t + \tau)a(q, t) + b^2(q, t + \tau) - b(q, t + \tau)b(q, t) + \\ & + a(q, t + \tau)a(q, t) - a^2(q, t) + b(q, t)b(q, t + \tau) - b^2(q, t) + \\ & + 2\tau \left\{ f(q, t) \left(a(q, t) \frac{\partial a(q, t)}{\partial q} + b(q, t) \frac{\partial b(q, t)}{\partial q} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \right\} = 0. \end{aligned}$$

Для мнимой части имеем

$$\begin{aligned} & a(q, t + \tau)b(q, t + \tau) - a(q, t + \tau)b(q, t) - a(q, t + \tau)b(q, t + \tau) + \\ & + a(q, t)b(q, t + \tau) + a(q, t)b(q, t + \tau) - a(q, t)b(q, t) - a(q, t + \tau)b(q, t) + \\ & + a(q, t)b(q, t) + 2\tau \left\{ f(q, t)a(q, t) \frac{\partial b(q, t)}{\partial q} + \frac{1}{2} \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} a(q, t)b(q, t) + \right. \\ & + \frac{a^2(q, t)U(q, t)}{\hbar} - f(q, t)b(q, t) \frac{\partial a(q, t)}{\partial q} - \\ & \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} a(q, t)b(q, t) + \frac{b^2(q, t)U(q, t)}{\hbar} \right\} = 0. \end{aligned}$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned} \alpha(q, t) &= a^2(q, t) + b^2(q, t) - \\ & - \tau \left\{ f(q, t) \frac{\partial}{\partial q} (a^2(q, t) + b^2(q, t)) + \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \right\} = \\ & = a^2(q, t) + b^2(q, t) - \tau \frac{\partial}{\partial q} \left(f(q, t) (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \right), \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \beta(q, t) &= -\tau \left\{ f(q, t) \left(a(q, t) \frac{\partial b(q, t)}{\partial q} - b(q, t) \frac{\partial a(q, t)}{\partial q} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{(a^2(q, t) + b^2(q, t))U(q, t)}{\hbar} \right\}, \end{aligned} \quad (31)$$

то полученную систему уравнений второй степени относительно $a(q, t + \tau)$ и $b(q, t + \tau)$ можно переписать так:

$$a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau) = \alpha(q, t), \quad (32)$$

$$a(q, t)b(q, t + \tau) - b(q, t)a(q, t + \tau) = \beta(q, t). \quad (33)$$

Решение этой системы имеет следующий вид:

$$a(q, t + \tau) = \frac{-\beta(q, t)b(q, t) \pm a(q, t)\sqrt{\alpha(q, t)(a^2(q, t) + b^2(q, t)) - \beta^2(q, t)}}{(a^2(q, t) + b^2(q, t))}, \quad (34)$$

$$b(q, t + \tau) = \text{sign}(a(q, t)) \times \frac{-\beta(q, t)|a(q, t)| \pm b(q, t)\sqrt{\alpha(q, t)(a^2(q, t) + b^2(q, t)) - \beta^2(q, t)}}{(a^2(q, t) + b^2(q, t))}. \quad (35)$$

Рассмотрим реализацию алгоритма для решения простейшей эволюционной задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\langle q(t + \tau) \rangle - \langle q(t) \rangle}{\tau} &= -k \langle q(t) \rangle, \quad t = 0, \tau, 2\tau, \dots, n\tau, \dots, \\ \langle q(0) \rangle &= q_0, \\ \sigma^2(0) &= \frac{\hbar}{2}, \\ \Psi(q, 0) &= \sqrt{\frac{1}{2} J_0^2 q^{2n} (1 - q)^{2n}} + i \sqrt{\frac{1}{2} J_0^2 q^{2n} (1 - q)^{2n}}, \quad q \in [0, 1], \\ \Psi(q, 0) &\equiv 0, \quad q \notin [0, 1]. \end{aligned} \quad (36)$$

Имеем

$$\begin{aligned} \langle q(t) \rangle &= \langle q(0) \rangle (1 - k\tau)^{\lfloor \frac{t}{\tau} \rfloor}, \\ \sigma^2(t) &= (1 - 2k)^{\lfloor \frac{t}{\tau} \rfloor} \left(\sigma^2(0) + (\langle q(0) \rangle)^2 \right) - (\langle q(0) \rangle)^2 (1 - 2k\tau + k^2\tau^2)^{\lfloor \frac{t}{\tau} \rfloor}, \end{aligned}$$

здесь $\lfloor \dots \rfloor$ обозначает целую часть.

Если

$$\tau < \frac{1}{k \left(1 + \frac{(\langle q(0) \rangle)^2}{\sigma^2(0)} \right)}, \quad (37)$$

то дисперсия положительна и убывает.

В отличие от условия убывания дисперсии соответствующей задачи для стохастического дифференциального уравнения [6] $-\infty < k_1 \leq f(q) \leq k_2 < 0$ для убывания дисперсии рассматриваемой здесь стохастической величины $q(t)$, подчиняющейся разностному уравнению (36), требуется выполнение неравенства, которое связывает приращение независимого аргумента с параметрами функции $f(q)$ и начальными значениями

“обобщенной” координаты и ее дисперсии. Чем больше по модулю начальное значение “обобщенной” координаты или чем меньше начальная дисперсия, тем верхняя граница для τ ближе к нулю.

Интересно сравнить также условие (37) с условием

$$\tau \leq 2/k \quad (38)$$

устойчивости разностной задачи Коши для уравнения (36) [12]. В формуле (38) верхняя граница для τ при $(\langle q(0) \rangle) \ll 1$ или $\sigma^2(0) \gg 1$ почти в четыре раза больше верхней границы, которая определяется неравенством (37) и не зависит от начальных значений “обобщенной” координаты и дисперсии.

Приведем выражения для действительной и мнимой частей волновой функции на примере выражений для них в момент $t = \tau$, который следует за начальным моментом:

$$\begin{aligned} a(q, t) &= \frac{\tau J_0 q^n (1-q)^n \sqrt{2}}{2\hbar} \pm \\ &\pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{J_0^2 q^{2n-1} (1-q)^{2n-1} q (1 + (2n+1)k\tau) - q^2 \left((1 + (4n+1)k\tau) - \frac{\tau^2 U^2(q, t)}{\hbar^2} \right)}, \\ &q \in [0, 1], \\ a(q, t) &\equiv 0, \quad q \notin [0, 1], \\ b(q, t) &= -\frac{\tau J_0 q^n (1-q)^n \sqrt{2}}{2\hbar} \pm \\ &\pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{J_0^2 q^{2n-1} (1-q)^{2n-1} q (1 + (2n+1)k\tau) - q^2 \left((1 + (4n+1)k\tau) - \frac{\tau^2 U^2(q, t)}{\hbar^2} \right)}, \\ &q \in [0, 1], \\ b(q, t) &\equiv 0, \quad q \notin [0, 1]. \end{aligned}$$

Из этих формул следует, что только для таких сочетаний $\tau, \hbar, U, k, J_0$, которые удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} U(q, t) &\leq \frac{\hbar}{\tau \sqrt{2}} \sqrt{J_0^2 q^{2n-1} (1-q)^{2n-1} \left(q (1 + (2n+1)k\tau) - q^2 (1 + (4n+1)k\tau) \right)}, \\ &q \in [0, 1], \\ U(q, t) &\equiv 0, \quad q \notin [0, 1], \end{aligned} \quad (39)$$

подкоренное выражение будет неотрицательным и решение задачи будет иметь смысл. Отсюда можно сделать вывод, что величина $q(t)$ при сделанном выборе начальной волновой функции $\Psi(q, 0)$ и функции $U(q, t)$, удовлетворяющей неравенству (39), никогда не

выйдет за пределы области $[0, 1]$, где начальное значение плотности вероятности было отлично от нуля.

4. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ НЕЯВНОЙ МОДЕЛИ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Вновь подставим волны вероятности в виде суммы действительной и чисто мнимой частей в уравнения (7) и (8), соответствующие однокомпонентному вектору q , и выпишем получаемые при этом уравнения для реальной и мнимой частей. Для реальной части получим

$$\begin{aligned} & a^2(q, t + \tau) - a(q, t + \tau)a(q, t) + b^2(q, t + \tau) - b(q, t + \tau)b(q, t) + \\ & + a(q, t + \tau)a(q, t) - a^2(q, t) + b(q, t)b(q, t + \tau) - b^2(q, t) + \\ & + 2\tau \left\{ \frac{1}{2}f(q, t + \tau) \frac{\partial}{\partial q} (a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial f(q, t + \tau)}{\partial q} (a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)) \right\} = 0. \end{aligned}$$

Для мнимой части имеем

$$\begin{aligned} & a(q, t + \tau)b(q, t + \tau) - a(q, t + \tau)b(q, t) - a(q, t + \tau)b(q, t + \tau) + a(q, t)b(q, t + \tau) + \\ & + a(q, t)b(q, t + \tau) - a(q, t)b(q, t) - a(q, t + \tau)b(q, t) + a(q, t)b(q, t) + \\ & + 2\tau \left\{ f(q, t + \tau) \left(a(q, t + \tau) \frac{\partial b(q, t + \tau)}{\partial q} - b(q, t + \tau) \frac{\partial a(q, t + \tau)}{\partial q} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)U(q, t + \tau)}{\hbar} \right\} = 0. \end{aligned}$$

После приведения подобных членов полученную систему удобно переписать так:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial q} (a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)) + \\ & + \frac{1}{\tau f(q, t + \tau)} \frac{\partial f(q, t + \tau)}{\partial q} (a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)) = \frac{a^2(q, t) + b^2(q, t)}{\tau f(q, t + \tau)}, \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & a(q, t)b(q, t + \tau) - b(q, t)a(q, t + \tau) + \\ & + \tau \left\{ f(q, t + \tau) \left(a(q, t + \tau) \frac{\partial b(q, t + \tau)}{\partial q} - b(q, t + \tau) \frac{\partial a(q, t + \tau)}{\partial q} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{(a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau))U(q, t + \tau)}{\hbar} \right\} = 0. \quad (41) \end{aligned}$$

Если решить задачу Коши для первого дифференциального уравнения (40) системы относительно плотности вероятности

$$P(q, t + \tau) = a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau),$$

взяв в качестве условия для определения константы интегрирования условие нормировки, то получится следующее выражение:

$$P(q, t + \tau) = a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau) = \exp\left\{-\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right\} \left(\int_0^q (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq + C \right), \quad (42)$$

где

$$C = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) \int_0^q (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq}. \quad (43)$$

Систему уравнений относительно $a(q, t + \tau)$ и $b(q, t + \tau)$ теперь можно переписать так:

$$\begin{aligned} P(q, t + \tau) &= a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau) = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) \left(\int_0^q (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) \int_0^q (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq} \right), \quad (44) \\ a(q, t + \tau) &\left(a(q, t) \frac{b(q, t + \tau)}{a(q, t + \tau)} - b(q, t) \right) + \\ &+ \tau \left\{ f(q, t + \tau) a^2(q, t + \tau) \frac{\partial \left(\frac{b(q, t + \tau)}{a(q, t + \tau)} \right)}{\partial q} + \frac{P(q, t + \tau) U(q, t + \tau)}{\hbar} \right\} = 0. \end{aligned}$$

В тех областях, где значения $a(q, t + \tau)$ отличны от нуля, можно последнее уравнение преобразовать к уравнению для отношения $z(q, t + \tau) = b(q, t + \tau)/a(q, t + \tau)$:

$$\begin{aligned} &\sqrt{\frac{P(q, t + \tau)}{1 + z^2(q, t + \tau)}} (a(q, t) z(q, t + \tau) - b(q, t)) + \\ &+ \tau \left\{ f(q, t + \tau) \frac{P(q, t + \tau)}{1 + z^2(q, t + \tau)} \frac{\partial z(q, t + \tau)}{\partial q} + \frac{P(q, t + \tau) U(q, t + \tau)}{\hbar} \right\} = 0. \quad (45) \end{aligned}$$

Если перейти к переменной $y = \arctg z(q, t + \tau)$, то уравнение (45) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} &\sqrt{P(q, t + \tau)} (a(q, t) \sin y(q, t + \tau) - b(q, t) \cos y(q, t + \tau)) + \\ &+ \tau \left(f(q, t + \tau) P(q, t + \tau) \frac{\partial y(q, t + \tau)}{\partial q} + \frac{P(q, t + \tau) U(q, t + \tau)}{\hbar} \right) = 0. \quad (46) \end{aligned}$$

Рассмотрим случай, когда $f(q, t + \tau) = f(q)$ и известна точка $q = Q$, где функция $f(Q) = 0$. Из уравнения (46) в этой точке получим начальное условие для задачи Коши с уравнением (45)

$$y(Q, t + \tau) = \arccos \left(\frac{a(Q, t)}{\sqrt{a^2(Q, t) + b^2(Q, t)}} \right) - \arcsin \left(\frac{\sqrt{P(Q, t + \tau)} U(Q, t + \tau) \tau}{\hbar \sqrt{a^2(Q, t) + b^2(Q, t)}} \right).$$

Решить эту задачу можно численно с помощью метода Рунге–Кутты [13].

После нахождения величин

$$\begin{aligned} P(q, t + \tau) &= a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau), \\ z(q, t + \tau) &= \frac{b(q, t + \tau)}{a(q, t + \tau)} \end{aligned}$$

легко найти искомые $a(q, t + \tau)$ и $b(q, t + \tau)$:

$$\begin{aligned} a(q, t + \tau) &= \pm \sqrt{\frac{P(q, t + \tau)}{1 + z^2(q, t + \tau)}}, \\ b(q, t + \tau) &= \pm z(q, t + \tau) \sqrt{\frac{P(q, t + \tau)}{1 + z^2(q, t + \tau)}}, \\ a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau) &= P(q, t + \tau). \end{aligned}$$

Рассмотрим реализацию алгоритма для решения простейшей эволюционной задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\langle q(t + \tau) \rangle - \langle q(t) \rangle}{\tau} &= \pm k \langle q(t + \tau) \rangle, \quad t = 0, \tau, \dots, n\tau, \dots, \\ \langle q(0) \rangle &= q_0, \quad \sigma(0) = \frac{\hbar}{2}, \\ \Psi(q, 0) &= \sqrt{\frac{1}{2} J_0^2 q^{2n} (1 - q)^{2n}} + i \sqrt{\frac{1}{2} J_0^2 q^{2n} (1 - q)^{2n}}, \quad q \in [0, 1], \\ \Psi(q, 0) &\equiv 0, \quad q \notin [0, 1]. \end{aligned} \tag{47}$$

Имеем

$$\begin{aligned} \langle q(t) \rangle &= \langle q(0) \rangle \left(\frac{1}{1 \mp k\tau} \right)^{\left[\frac{t}{\tau} \right]}, \\ \sigma^2(t) &= \left(\frac{1}{1 \mp 2k\tau} \right)^{\left[\frac{t}{\tau} \right]} \left(\sigma^2(0) + \langle q(0) \rangle^2 \right) - (\langle q(0) \rangle)^2 \left(\frac{1}{1 \mp 2k\tau + k^2\tau^2} \right)^{\left[\frac{t}{\tau} \right]}. \end{aligned} \tag{48}$$

Из соотношений (48) следует, что при $f = -kq$ дисперсия убывает при любых $\tau > 0$. Если же $f(q) = kq$, то дисперсия возрастает и положительна лишь в области пересечения неравенств

$$\left(\tau < \frac{1}{2k}\right) \cap \left(0 < \tau < \frac{1 - \theta - \sqrt{(1 - \theta)^2 - (1 - \theta)}}{k}\right) \cap \\ \cap \left(\frac{1 - \theta + \sqrt{(1 - \theta)^2 - (1 - \theta)}}{k} < \tau < \infty\right),$$

где

$$\theta = \frac{(\langle q(0) \rangle)^2}{\sigma^2(0) + (\langle q(0) \rangle)^2}, \quad 0 \leq \theta \leq 1.$$

В отличие от условия возрастания дисперсии соответствующей задачи для стохастического дифференциального уравнения [6] $0 < k_3 \leq f(q) \leq k_4 < \infty$ для возрастания дисперсии рассматриваемой здесь стохастической величины $q(t)$, подчиняющейся разностному уравнению (47), требуется выполнение неравенства, которое связывает приращение независимого аргумента τ с начальными значениями дисперсии “обобщенной” координаты и параметром k у функции $f(q) = kq$.

Для явной и неявной моделей допустимые значения τ зависят от начальных значений дисперсии и “обобщенной” координаты. Чем ближе величина θ к единице, тем верхняя граница для τ ближе к нулю. При убывании θ к нулевому значению верхней границей для τ становится величина $1/2k$.

В этом проявляется отличие описания стохастических величин, средние значения которых подчиняются рассматриваемому здесь явному разностному уравнению, от условий неограниченного роста вычислительных погрешностей (условий устойчивости) для детерминированных разностных моделей [12].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Цель проведенного здесь рассмотрения заключалась в установлении связи между аппаратом конечных разностей и дискретно-волновым характером проявления характеристик случайных процессов. В качестве резюмирующих положений отметим следующие.

1. Для наиболее полного отражения корпускулярно-волнового дуализма при описании широкого класса случайных процессов, по-видимому, предпочтительнее использовать разностные, а не дифференциальные стохастические уравнения.

2. Предложенные здесь разностно-дифференциальные уравнения (5)–(8), как и порождающие их разностные уравнения (3) и (4), нелинейны. Это значительно осложняет описание волновых свойств моделируемых явлений, поскольку принцип суперпозиции решений, свойственный уравнениям с линейными операторами, здесь не выполняется.

Однако при $\tau \rightarrow 0$ уравнения (5)–(8) принимают вид соответствующего дифференциального линейного уравнения для волн вероятности [6], которые построены для задач, основанных на обыкновенных дифференциальных стохастических уравнениях первого порядка.

3. При существующей практике исследования динамических разностных моделей [1] наряду с основным разностным уравнением, например $q(t + \tau) = f(q(t))$, рассматривается счетное множество производных от него уравнений, которые выражают связь $q(t + n\tau)$ с $q(t)$:

$$q(t + n\tau) = f(\underbrace{f(\dots f(q(t))\dots)}_{n \text{ скобок}}), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Для полноты описания случайной величины, чье поведение моделируется уравнениями (3), (5), (6), необходимо к этим уравнениям присовокупить соответствующие уравнения волн вероятности при приращениях t , кратных $n\tau$.

4. Сеточные характеристики могут быть и непостоянны, предлагаемые здесь алгоритмы могут быть распространены и на случай переменных приращений независимого аргумента.

5. Предложенный здесь подход не ограничен только явными и неявными разностными схемами, но может быть легко распространен и на другие виды разностных уравнений. Рассмотрение именно явной и неявной моделей в настоящей работе обусловлено тем, что эти модели наиболее часто используются на практике, поскольку экспериментальные измерения чаще всего двухточечны и обобщенные скорости изменения средних значений соотносятся либо с начальной точкой, либо с конечной точкой обобщенного времени.

6. Предложенным в настоящей работе алгоритмам решения разностно-дифференциальных волновых уравнений свойственны две особенности, которые необходимо учитывать на практике:

А. При переходе от $a(q, t)$ и $b(q, t)$ к $a(q, t + \tau)$ и $b(q, t + \tau)$ могут возникнуть ситуации, когда на отдельных отрезках либо величина

$$\alpha(q, t + \tau) = P(q, t + \tau) = a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)$$

в формулах (30) и (32) начинает принимать отрицательные значения, либо подкоренное выражение в формулах (34) и (35) становится отрицательным. Во избежание потери смысла такого решения на данных отрезках следует положить волновую функцию тождественно равной нулю и произвести ее перенормировку с учетом новой области определения.

Б. Существуют области, где либо теряется устойчивость алгоритма, либо резко возрастает дисперсия, либо появляются точки, в которых функции $f_k(\bar{q}, t)$ или их производные обращаются в бесконечность. В некоторых случаях подобные ситуации можно обойти с помощью перехода в импульсное представление [14].

С учетом сделанных замечаний описанные здесь алгоритмы пригодны не только для численного решения разностно-дифференциальных уравнений для волн вероятности, отвечающих стохастическим разностным схемам. При очевидных упрощениях эти алгоритмы могут быть использованы и при решении дифференциальных уравнений волн вероятности, составленных на основе стохастических дифференциальных уравнений [6].

ПРИЛОЖЕНИЕ

ЛЕММА. *Справедливо следующее равенство для приращения произведения двух величин:*

$$\begin{aligned} A(t+\tau)B(t+\tau) - A(t)B(t) &= \\ &= \frac{1}{2}(A(t+\tau) + A(t))(B(t+\tau) - B(t)) + \frac{1}{2}(B(t+\tau) + B(t))(A(t+\tau) - A(t)). \end{aligned}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Имеем

$$\begin{aligned} A(t+\tau)B(t+\tau) - A(t)B(t) &= A(t+\tau)B(t+\tau) + A(t)B(t+\tau) - \\ &- A(t)B(t+\tau) - A(t)B(t) = B(t+\tau)(A(t+\tau) - A(t)) + A(t)(B(t+\tau) - B(t)), \\ A(t+\tau)B(t+\tau) - A(t)B(t) &= A(t+\tau)B(t+\tau) + B(t)A(t+\tau) - \\ &- B(t)A(t+\tau) - A(t)B(t) = A(t+\tau)(B(t+\tau) - B(t)) + B(t)(A(t+\tau) - A(t)). \end{aligned}$$

Сложим эти два равенства:

$$\begin{aligned} 2(A(t+\tau)B(t+\tau) - A(t)B(t)) &= \\ &= (B(t+\tau) + B(t))(A(t+\tau) - A(t)) + (A(t+\tau) + A(t))(B(t+\tau) - B(t)). \end{aligned}$$

Разделив обе части последнего соотношения на 2, получим равенство, заявленное в условии леммы. $\square$

Список литературы

- [1] Г. Николис, И. Пригожин. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979.
- [2] К. В. Гардинер. Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986.
- [3] Г. Хакен. Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985.
- [4] Л. Глас, М. Мэки. От часов к хаосу. Ритмы жизни. М.: Мир, 1991.
- [5] Г. Ю. Ризниченко, А. Б. Рубин. Математические модели биологических продукционных процессов. М.: Изд-во МГУ, 1993.

- [6] *И. А. Соловьев*. ТМФ. 1997. Т. 111. № 3. С. 356–368.
- [7] *И. А. Соловьев*. Вестн. МЭИ. 1995. № 6. С. 109–118.
- [8] *И. А. Соловьев*. О волновых решениях разностных уравнений в пространстве непрерывного изменения независимых аргументов. В сб.: Методы и алгоритмы параметрического анализа линейных и нелинейных моделей переноса. Сб. научн. тр. МГОПИ. № 12, 1996. С. 81–82.
- [9] *И. А. Соловьев*. Волновые стохастические компоненты решений разностных уравнений переноса теплоты и массы. Вычислительный эксперимент в задачах теплообмена и теплопередачи. В сб.: Труды 3-го Минского Международного форума по тепломассообмену (20–24 мая 1996 г.). Т. 9. Часть 1. Минск: АНК ИТМО АНБ, 1996. С. 209–213.
- [10] *Л. де Бройль*. Соотношение неопределенностей Гейзенберга и вероятностная интерпретация волновой механики. М.: Мир, 1986.
- [11] *Л. Шифф*. Квантовая механика. М.: ИИЛ, 1959.
- [12] *А. А. Самарский, Е. С. Николаев*. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
- [13] *Ю. П. Боголаев*. Вычислительная математика и программирование. М.: Высшая школа, 1990.
- [14] *В. П. Маслов*. Асимптотические методы и теория возмущений. М.: Наука, 1988.

Поступила в редакцию 15.XII.1997 г.