Квазифейнмановские формулы дают решение многомерного уравнения Шредингера с неограниченным потенциалом

Article in Математические заметки · January 2018

DOI: 10.4213/mzm12176

Ivan Remizov
National Research University Higher School of Economics - Nizhny Novgorod Campus (Russia)

И. Д. Ремизов, М. Ф. Стародубцева, Квазифейнмановские формулы дают решение многомерного уравнения Шредингера с неограниченным потенциалом, *Матем. заметки*, 2018, том 104, выпуск 5, 790–795

DOI: https://doi.org/10.4213/mzm12176

Квазифейнмановские формулы дают решение многомерного уравнения Шредингера с неограниченным потенциалом

И. Д. Ремизов, М. Ф. Стародубцева

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, неограниченный потенциал, решение задачи Коши, дающая решение формула.

DOI: https://doi.org/10.4213/mzm12176

В настоящей работе изучается (при произвольном фиксированном $d \in \mathbb{N}$) задача Коши для уравнения Шредингера в пространстве $L_2(\mathbb{R}^d)$ над полем $\mathbb{C}$

$$\begin{cases} \psi'_t(t,x) = \dfrac{1}{2} i\biggl(\displaystyle\sum_{m=1}^{d} \psi''_{x_m x_m}(t,x)\biggr) - iV(x)\psi(t,x) = iH\psi(t,x), \qquad t \in \mathbb{R}^1, \quad x \in \mathbb{R}^d, \\ \psi(0,x) = \psi_0(x), \qquad x \in \mathbb{R}^d. \end{cases} \tag{1}$$

Предполагается, что функция $V\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ измерима и обладает локально интегрируемой второй степенью; в том числе предлагаемая техника применима к потенциалам квантового гармонического ($V(x) = \|x\|^2$) и квантового ангармонического ($V(x) = \|x\|^4$, $V(x) = \|x\|^2 + \|x\|^4$) осцилляторов. Мы также налагаем на V следующее условие: гамильтониан уравнения (1) на пространстве всех финитных гладких функций самосопряжен в существенном в $L_2(\mathbb{R}^d)$; это так, например, когда функция V неотрицательна.

В настоящее время известно сравнительно небольшое число ситуаций, в которых удается явно выразить решение дифференциального уравнения с переменными коэффициентами через эти коэффициенты. Более того, часто формулы для решения, полученные при одних ограничениях на коэффициенты, оказываются непригодными при других, более слабых ограничениях. Выражается это обычно в том, что ранее сходившиеся ряды и интегралы оказываются расходящимися. Обычно эти трудности стараются преодолеть при помощи регуляризаций, позволяющих употреблять прежние формулы, понимая их по-новому. В настоящем сообщении регуляризаций в этом смысле не используется, а доказываются формулы качественно нового вида, дающие решение задачи Коши для уравнения Шредингера со сколь угодно быстро растущим на бесконечности неотрицательным потенциалом.

Формулой Фейнмана называется представление решения задачи Коши для эволюционного уравнения в виде предела кратного интеграла растущей кратности. Впервые эти формулы для решения уравнения Шредингера были написаны Р. Фейнманом в 1948–1951 годах для построения (на физическом уровне строгости) принадлежащей ему конструкции, известной сейчас как интеграл Фейнмана по траекториям. Математическое обоснование этой конструкции заняло более полувека; см. [1] и ссылки там. Поворотным моментом стало начало использования с 2002 года принадлежащей Смолянову техники [2], основанной на теореме Чернова, так как техника оказалась пригодной к применению в более широком классе ситуаций, чем при построениях на основе теоремы Троттера [4]. В 2016 г. область применимости этой техники была еще более расширена [3] и было введено следующее определение: квазифейнмановская формула – это представление функции в виде выражения, *содержащего* кратные интегралы сколь угодно большой кратности. В отличие от фейнмановских (в них присутствует ровно один кратный интеграл растущей к бесконечности кратности), квазифейнмановские формулы могут включать в себя суммы кратных интегралов

Работа поддержана грантом РНФ (№ 14-41-00044) в ННГУ им. Н. И. Лобачевского и грантом EPSRC номер EP/PO26001/1.

различной кратности. Это понятие оказалось весьма продуктивным [5], [6] и позволило, в частности, получить [7] ранее неизвестное решение уравнения Шредингера с бесконечномерным пространством координат. Основной результат настоящей работы выражается теоремой 2 и замечанием 1, при этом ключевыми оказываются следующие определение 1 и теорема 1.

Опеределение 1 [3]. Говорят, что операторнозначная функция G *касается по Чернову* (*Chernoff tangent*) оператора L, если верны следующие утверждения.

(CT0) Пусть $\mathscr{F}$ – банахово пространство и $\mathscr{L}(\mathscr{F})$ – пространство всех линейных ограниченных операторов в $\mathscr{F}$. Пусть дано отображение $G\colon [0,+\infty) \to \mathscr{L}(\mathscr{F})$ или, иначе говоря, семейство линейных ограниченных операторов $(G(t))_{t\geqslant 0}$. Пусть замкнутый линейный оператор $L\colon \operatorname{Dom}(L) \to \mathscr{F}$ имеет плотную в $\mathscr{F}$ область определения $\operatorname{Dom}(L) \subset \mathscr{F}$.

(CT1) Семейство G сильно непрерывно (=непрерывно в сильной операторной топологии пространства $\mathscr{L}(\mathscr{F})$), т.е. отображение $t \mapsto G(t)f \in \mathscr{F}$ непрерывно на $[0,+\infty)$ для каждого $f \in \mathscr{F}$.

(CT2) Выполнено равенство $G(0)=I$, т.е. $G(0)f=f$ для каждого $f\in\mathscr{F}$.

(CT3) Существует такое плотное в $\mathscr{F}$ линейное подпространство $\mathscr{D}\subset\mathscr{F}$, что при всех $f\in\mathscr{D}$ существует предел $\lim_{t\to 0}(G(t)f-f)/t$, значение которого обозначим $G'(0)f$.

(CT4) Замыкание оператора $(G'(0),\mathscr{D})$ существует и равно $(L,\operatorname{Dom}(L))$.

Теорема 1 (переформулировка теоремы 3.1 из [3]). *Пусть $\mathscr{F}$ – комплексное гильбертово пространство, а $\operatorname{Dom}(H)\subset\mathscr{F}$ – его плотное линейное подпространство. Пусть оператор $H\colon \operatorname{Dom}(H)\to\mathscr{F}$ линеен и самосопряжен, а вещественное число a не равно нулю. Пусть семейство действующих в $\mathscr{F}$ линейных ограниченных операторов $(W(t)+I)_{t\geqslant 0}$ касается по Чернову оператора H, и $(W(t))^*=W(t)$ для каждого $t\geqslant 0$. Положим $R(t)=\exp[iaW(t)]$. (Такое определение корректно, потому что при каждом $t\geqslant 0$ в показателе экспоненты стоят линейные ограниченные операторы в $\mathscr{F}$.)*

Тогда

1) *существует C_0-группа $(e^{iatH})_{t\in\mathbb{R}}$ линейных ограниченных унитарных операторов в $\mathscr{F}$;*

2) *для каждых $f\in\mathscr{F}$ и $t\geqslant 0$ выполнено*

$$e^{iatH}f=\lim_{n\to+\infty}R\left(\frac{t}{n}\right)^n f=\lim_{n\to+\infty}\exp\left[ianW\left(\frac{t}{n}\right)\right]f;$$

3) *для каждых $f\in\mathscr{F}$ и $t_0>0$ верны следующие равенства, где пределы по $j\to+\infty$ существуют по норме в $\mathscr{F}$:*

$$\lim_{n\to+\infty}\sup_{t\in[0,t_0]}\left\|e^{iatH}f-\lim_{j\to+\infty}\sum_{k=0}^{j}\frac{(ian)^k}{k!}W\left(\frac{t}{n}\right)^k f\right\|_{\mathscr{F}}=0, \tag{2}$$

$$\lim_{n\to+\infty}\sup_{t\in[0,t_0]}\left\|e^{iatH}f-\lim_{j\to+\infty}\sum_{k=0}^{j}\frac{j!\,(ian)^k}{k!\,(j-k)!}W\left(\frac{t}{n}\right)^k f\right\|_{\mathscr{F}}=0. \tag{3}$$

Теперь сформулируем основной результат работы и укажем основные моменты в доказательстве, насколько это возможно в рамках краткого сообщения.

Теорема 2. *Пусть функция $V\colon\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ лежит в пространстве $L_2^{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d)$, т.е. V измерима и*

$$\int_{\|x\|\leqslant R}V(x)^2dx<\infty \qquad \text{для любого} \quad R>0,$$

где $\|x\| = (x_1^2 + \dots + x_d^2)^{1/2}$. *Пусть функция* $w\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *ограничена* (*обозначим* $M = \sup_{x\in\mathbb{R}} |w(x)|$), *непрерывна и дифференцируема в нуле, причем* $w(0) = 0$, $w'(0) = 1$; *например, можно взять*

$$w(x) = \sin(x), \qquad w(x) = \operatorname{arctg}(x), \qquad w(x) = \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

и тому подобное. Пусть для каждого $j = 1, \dots, d$ *вектор* $e_j \in \mathbb{R}^d$ *имеет* 1 *на позиции* j *и* 0 *на остальных* $d-1$ *позициях. Для каждой* $f \in L_2(\mathbb{R}^d)$, *каждой финитной гладкой* $\varphi\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ *и каждых* $x \in \mathbb{R}$, $t \geqslant 0$ *положим*

$$(W(t)f)(x) = \frac{1}{2d} \sum_{j=1}^{d} (f(x + \sqrt{d}\sqrt{t}e_j) + f(x - \sqrt{d}\sqrt{t}e_j) - 2f(x)) + w(-tV(x))f(x), \tag{4}$$

$$(H\varphi)(x) = \frac{1}{2}\,\Delta\varphi''(x) - V(x)\varphi(x). \tag{5}$$

Пусть, сверх того, выполняется любое из следующих условий:

А) *замыкание оператора* H, *заданного на множестве всех бесконечногладких финитных функций* $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, *является самосопряженным оператором в* $L_2(\mathbb{R}^d)$;

Б) $V(x) \geqslant 0$ *при всех* $x \in \mathbb{R}^d$.

Тогда:

1) *при каждом* $t \geqslant 0$ *верно* $\|W(t)\| \leqslant 2 + M$;
2) *при каждом* $t \geqslant 0$ *верно* $W(t) = W(t)^*$;
3) $W + I$ *черновски касается оператора* H;
4) *существует* C_0-*группа* $(e^{itH})_{t\in\mathbb{R}}$ *линейных ограниченных унитарных операторов в* $L_2(\mathbb{R}^d)$;
5) *задача Коши* (1) *для уравнения Шредингера* (*гамильтониан равен* $-H$) *имеет при каждом* $t \geqslant 0$ *и* $\psi_0 \in L_2(\mathbb{R}^d)$ *единственное в* $L_2(\mathbb{R}^d)$ *решение* $\psi(t,x) = (e^{itH}\psi_0)(x)$, *непрерывно по норме* $L_2(\mathbb{R}^d)$ *зависящее* (*при фиксированном* t) *от* ψ_0 *и задаваемое при почти всех* $x \in \mathbb{R}^d$ *формулами*

$$\psi(t,x) = \biggl(\lim_{n\to+\infty} \lim_{j\to+\infty} \sum_{k=0}^{j} \frac{(in)^k}{k!}\, W\Bigl(\frac{t}{n}\Bigr)^k \psi_0\biggr)(x), \tag{6}$$

$$\psi(t,x) = \biggl(\lim_{n\to+\infty} \lim_{j\to+\infty} \sum_{k=0}^{j} \frac{j!\,(in)^k}{k!\,(j-k)!}\, W\Bigl(\frac{t}{n}\Bigr)^k \psi_0\biggr)(x), \tag{7}$$

где $W(t/n)$ *получается заменой* t *на* t/n *в* (4), *а* $W(t/n)^k$ – *это композиция* k *копий линейного ограниченного оператора* $W(t/n)$.

Схема доказательства. Покажем сперва, что условие А) следует из более легко проверяемого условия Б), для этого воспользуемся следующей леммой.

Лемма 1 (теорема X.28 в [8]). *Пусть функция* $v\colon \mathbb{R}^d \to [0, +\infty)$ *измерима и ее квадрат является интегрируемым на каждом шаре* ($v \in L_2^{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d)$). *Тогда заданный на множестве всех комплекснозначных финитных бесконечногладких функций* $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ *оператор* $-\Delta + v$ *самосопряжен в существенном в* $L_2(\mathbb{R}^d)$.

В самом деле, если $V(x) \geqslant 0$, то функция $v(x) = 2V(x)$ удовлетворяет условиям леммы 1, поэтому заданный на $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ оператор $-\Delta + v$ обладает самосопряженным замыканием в $L_2(\mathbb{R}^d)$. Следовательно, самосопряженным замыканием обладает и оператор

$$H = -\frac{1}{2}(-\Delta + v).$$

Укажем теперь основные шаги в доказательстве теоремы 2.

Пункт 1). Обозначим

$$(A_j(t)f)(x) = f(x + \sqrt{d}\sqrt{t}e_j), \qquad (B_j(t)f)(x) = f(x - \sqrt{d}\sqrt{t}e_j),$$
$$(C(t)f)(x) = w(-tV(x))f(x), \qquad (If)(x) = f(x).$$

Из определения нормы оператора напрямую следует, что $\|A_j(t)\| = \|B_j(t)\| = 1$, и что $\|C(t)\| \leqslant M$. Тогда

$$W(t) = \frac{1}{2d}\sum_{j=1}^{d}(A_j(t) - 2I + B_j(t)) + C(t), \tag{8}$$

поэтому при каждом $t \geqslant 0$ верна оценка

$$\|W(t)\| \leqslant \frac{1}{2d}\sum_{j=1}^{d}(\|A_j(t)\| + 2\|I\| + \|B_j(t)\|) + \|C(t)\| \leqslant \frac{1}{2d}\,d(1+2+1) + M = 2 + M.$$

Пункт 2) следует из того, что все операторы в правой части (8) ограниченные и

$$A_j(t)^* = B_j(t), \qquad B_j(t)^* = A_j(t), \qquad I^* = I, \qquad C(t)^* = C(t).$$

Пункт 3). В определении 1 положим

$$\mathscr{F} = L_2(\mathbb{R}^d), \qquad G(t) = W(t) + I, \qquad L = H, \qquad \mathscr{D} = C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$$

и проверим, что для G и H выполнены все условия черновского касания. Условие (CT0) следует из предположений доказываемой теоремы и уже доказанного пункта 1), согласно которому

$$\|G(t)\| = \|W(t) + I\| \leqslant 3 + M,$$

поэтому корректно определено отображение $G\colon [0, +\infty) \to \mathscr{L}(L_2(\mathbb{R}))$.

(CT1) Зафиксируем некоторое $f \in L_2(\mathbb{R}^d)$. Доказательство непрерывности отображений $t \mapsto A_j(t)f$ и $t \mapsto B_j(t)f$ основано на плотности $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ в $L_2(\mathbb{R}^d)$ и теореме Лебега о мажорируемой сходимости; оно полностью аналогично доказательству непрерывности отображений $t \mapsto A(t)f$ и $t \mapsto B(t)f$ в [5]. Непрерывность отображения $t \mapsto C(t)f$ следует из непрерывности и ограниченности функции w, поскольку при $t_n \to t$ к интегралу

$$\|C(t)f - C(t_n)f\|^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |w(-t_nV(x)) - w(-tV(x))|^2 |f(x)|^2\,dx$$

можно применить теорему Лебега о мажорированной сходимости. Поэтому непрерывна (как линейная комбинация непрерывных A_j, B_j, C) и функция $t \mapsto G(t)f$, и условие (CT1) доказано.

(CT2) проверятется подстановкой $t = 0$ в (4), откуда $G(0) = W(0) + I = 0 + I = I$.

(CT3) Будем проверять, зафиксировав произвольную функцию $f \in \mathscr{D} = C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$; пусть $R > 0$ таково, что $f(x) = 0$ при всех $x \notin B_R = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x\| \leqslant R\}$.

(i) Сперва исследуем первое слагаемое в (4). Для $A_j(t)f(x)$ и $B_j(t)f(x)$ используем разложение по формуле Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа. Учитывая то, что функция f равна нулю вне шара B_R и имеет ограниченную третью производную, оцениваем интегралы, равные квадратам $L_2(\mathbb{R}^d)$-норм остаточных членов, суммируем по j и получаем

$$\frac{1}{2d}\sum_{j=1}^{d}(f(x + \sqrt{d}\sqrt{t}e_j) + f(x - \sqrt{d}\sqrt{t}e_j) - 2f(x)) = \frac{1}{2}\,t\Delta f(x) + o(t). \tag{9}$$

(ii) Теперь перейдем к второму слагаемому в (4). Непрерывная, ограниченная и дифференцируемая в нуле функция w, удовлетворяющая условиям $w(0)=0$, $w'(0)=1$, согласно формуле Тейлора с остаточным членом в форме Пеано представима в виде $w(z)=z+zg(z)$, где $\lim_{z\to 0} g(z)=0$, причем функция g непрерывна и ограничена. Если $t_n\to 0$, то согласно теореме Лебега о мажорируемой сходимости

$$\int_{\mathbb{R}^d} |V(x)f(x)g(-t_nV(x))|^2\,dx = \int_{B_R} |V(x)f(x)g(-t_nV(x))|^2\,dx \to 0.$$

Таким образом,

$$w(-tV(x))f(x) = -tV(x)f(x) + o(t). \tag{10}$$

(iii) Складывая (9) и (10), получаем с учетом (4) и (5), что $W(t)f = tHf + o(t)$.

(CT4) следует из условия A), область определения замыкания оператора $(H, C_0^\infty(\mathbb{R}^d))$ выступает в роли $\mathrm{Dom}(H)$ в (CT4). Тем самым пункт 3) теоремы 2 доказан.

Пункт 4) следует из того, что в силу пунктов 2), 3) к W и H применима теорема 1, где нужно положить $a=1$.

Пункт 5) следует из теоремы 1 при $a=1$ и общего факта теории C_0-полугрупп [4], согласно которому задача Коши для эволюционного уравнения $U'(t)=LU(t)$, $U(0)=u_0$ имеет единственное в $\mathscr{F}$ решение $U(t)=e^{tL}u_0$ при каждом $u_0\in\mathscr{F}$, и это решение при фиксированном t зависит от u_0 непрерывно по норме в $\mathscr{F}$. Здесь $\mathscr{F}=L^2(\mathbb{R}^d)$, $L=iH$, $u_0=\psi_0$ и $U(t)=\psi(t)$.

Замечание 1. Для каждого $h\in\mathbb{R}^d$ справедливо формальное равенство

$$f(h) = \int_{\mathbb{R}^d} \delta(y-h)f(y)\,dy$$

с дельта-функцией Дирака. Поэтому

$$f(x+\sqrt{d}\sqrt{t}e_j) = \int_{\mathbb{R}^d} \delta(y-x-\sqrt{d}\sqrt{t}e_j)f(y)\,dy,$$

и после замены переменной $y=x+z$, $z=y-x$, $dy=dz$ получим

$$f(x+\sqrt{d}\sqrt{t}e_j) = \int_{\mathbb{R}^d} \delta(z-\sqrt{d}\sqrt{t}e_j)f(x+z)\,dy.$$

Так можно переписать в терминах обобщенных функций равенство (4), тогда равенство (6) принимает вид

$$\begin{aligned}\psi(t,x) = \lim_{n\to\infty}\lim_{j\to+\infty}\sum_{k=0}^{j}\frac{(in)^k}{k!}\int_{\mathbb{R}^d}\Phi\left(z_1,x,\frac{t}{n}\right)\int_{\mathbb{R}^d}\Phi\left(z_2,x+z_1,\frac{t}{n}\right)\\ \times\int_{\mathbb{R}^d}\Phi\left(z_3,x+z_1+z_2,\frac{t}{n}\right)\cdots\\ \times\int_{\mathbb{R}^d}\Phi\left(z_k,x+z_1+\dots+z_{k-1},\frac{t}{n}\right)\psi_0(x+z_1+\dots+z_k)\,dz_k\,\dots\,dz_1,\end{aligned}$$

где

$$\Phi(z,x,t) = \frac{1}{2d}\sum_{j=1}^{d}[\delta(z-\sqrt{d}\sqrt{t}e_j) - 2\delta(z) + \delta(z+\sqrt{d}\sqrt{t}e_j)] + w(-tV(x))\delta(z).$$

Представление функции ψ в таком виде является квазифейнмановской формулой с обобщенными функциями [3], [6].

Замечание 2. Уравнение Шредингера и связанные с ним операторы изучаются совершенно другими методыми в работах [9], [10].

И. Д. Ремизов признателен своему научному руководителю О. Г. Смолянову за всестороннюю поддержку и Д. В. Тураеву за полезные замечания.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

[1] O. G. Smolyanov, *Quantum Bio-Informatics V*, QP-PQ: Quantum Probab. White Noise Anal., **30**, World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2013, 301–313. **[2]** O. G. Smolyanov, A. G. Tokarev, A. Truman, *J. Math. Phys.*, **43**:10 (2002), 5161–5171. **[3]** I. D. Remizov, *J. Funct. Anal.*, **270**:12 (2016), 4540–4557. **[4]** K.-J. Engel, R. Nagel, *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*, Springer, New York, 2000. **[5]** И. Д. Ремизов, *Матем. заметки*, **100**:3 (2016), 477–480. **[6]** И. Д. Ремизов, *Докл. АН*, **476**:1 (2017), 17–21. **[7]** В. Ж. Сакбаев, *ТМФ*, **191**:3 (2017), 473–502. **[8]** M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, Vol. 2, Acabemic Press, New York, 1975. **[9]** А. Ю. Ананьева, *Матем. заметки*, **99**:5 (2016), 778–782. **[10]** Т. Р. Гадыльшин, *Матем. заметки*, **98**:6 (2015), 842–852.

И. Д. Ремизов
Национальный исследовательский
университет «Высшая школа экономики»
(Нижегородский филиал);
Национальный исследовательский
Нижегородский государственный
университет им. Н. И. Лобачевского
E-mail: ivremizov@yandex.ru

Поступило
09.09.2017

М. Ф. Стародубцева
Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики», г. Москва
E-mail: Marinafs@yandex.ru