

И. А. Соловьев

**АППАРАТ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ
И КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ**



Москва — 2010

УДК 530.1
ББК 22.3
С60

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, профессор *И. М. Петрушко*;
доктор физико-математических наук, профессор *В. В. Шевелев*

Соловьев Игорь Алексеевич

С60 Аппарат конечных разностей и корпускулярно-волновой дуализм : монография / И. А. Соловьев. — М.: Вега-Инфо, 2010. — 80 с.

ISBN 978-5-91590-006-5

Изложена теория волн вероятностей применительно к исследованию поведения стохастических векторных величин, средние значения компонент которых подчиняются обыкновенным разностным и дифференциальным 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.

Для научных работников, специализирующихся в области квантовой механики, математической и теоретической физики, аспирантов, преподавателей и студентов вузов, обучающихся по физико-математическим и техническим специальностям.

ББК 22.3

ISBN 978-5-91590-006-5

© Соловьев И. А., 2010
© ООО «Вега-Инфо», 2010

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	5
ГЛАВА 1. Дискретные и непрерывные одномерные модели	10
§ 1.1. Постановки разностных задач	10
§ 1.2. Некоторые решения начальной задачи третьего рода.....	13
§ 1.3. Построение семейства производных разностных систем	17
§ 1.4. Разностные уравнения Гамильтона, порождаемые системой обыкновенных разностных уравнений первого порядка	18
§ 1.5. Некоторые решения разностной системы уравнений Гамильтона.....	23
ГЛАВА 2. Использование волновых представлений при описании случайных процессов с помощью дифференциальных уравнений для волн вероятностей	25
§ 2.1. Понятие локального среднего значения	25
§ 2.2. Трактовка уравнения Ланжевена с позиций гипотезы локальных средних значений	27
§ 2.3. Вывод волновых уравнений для случайных процессов, средние значения которых описываются явной и неявной разностными схемами	30
ГЛАВА 3. Исследование уравнений для случайных процессов, средние значения которых описываются дифференциальными уравнениями, для волн вероятностей	36
§ 3.1. Определение волн вероятности и формулировка условий их существования для дифференциальных моделей	36
§ 3.2. Теоремы о поведении средних значений и дисперсий для дифференциальных моделей	40
§ 3.3. Соотношение неопределенностей и способ задания \hbar_q	44
ГЛАВА 4. Описание поведения случайных величин, средние значения которых подчиняются системе разностных уравнений, с помощью волн вероятности	47
§ 4.1. Волны вероятности в разностном описании и некоторые их свойства.....	47

§ 4.2. Теоремы о поведении средних значений и дисперсий.....	55
§ 4.3. Алгоритм решения разностных уравнений для явной модели в одномерном случае	58
§ 4.4. Алгоритм решения разностных уравнений для неявной модели в одномерном случае	61
§ 4.5. Реализация алгоритмов для простейших эволюционных уравнений	63
ГЛАВА 5. Моделирование прохождения броуновской частицы через потенциальный барьер	66
§ 5.1. Пример описания поведения заряженной броуновской частицы в электростатическом поле.....	66
§ 5.2. Прохождение броуновской частицы через потенциальный барьер	67
§ 5.3. Использование метода падающих прямоугольников для вычисления аналога постоянной Планка на основе соотношения неопределенностей Гейзенберга ..	72
Список литературы.....	76

ВВЕДЕНИЕ

Анализируя историю развития математического моделирования естественно-научных явлений, можно условно выделить шесть аспектов, которые отражают этапы формирования математического аппарата.

Первый аспект определяется выбором экспериментальной методики измерения количественных характеристик явления.

На первоначальных этапах исследования он, как правило, основывается на измерениях в двух или нескольких пространственных областях или временных интервалах, размеры которых много меньше оцениваемых геометрических размеров объекта или временных протяженностей действия участков.

В итоге на этом этапе происходит выбор геометрии пространства-времени. Чаще всего выбирается евклидова геометрия: области, где находились измерительные приборы, превращаются в точки — узлы сетки, а результаты измерений записываются в конечно-разрядной арифметике в виде конечных разностей.

В результате статистической обработки экспериментальных данных создается простейший класс математических моделей — описательные модели в виде таблиц, номограмм, кривых, гистограмм и т. д.

Этот класс не претендует на раскрытие механизма исследуемого явления, поэтому описательные модели имеют ограниченную точность и предсказуемость. Однако замечено, что о смене режима поведения динамических моде-

лей можно судить с помощью исследования энтропии или производства энтропии.

Следует также отметить, что разработанные к настоящему времени способы построения гистограмм и вычисления энтропии требуют значительного количества экспериментальных данных и не позволяют исследовать начальную стадию случайного процесса, тем самым их нельзя признать эффективными.

Второй аспект заключается в том, что для формирования устойчивых закономерных связей между полученными конечными разностями их приходится «очищать» от погрешностей, связанных с влиянием приборов на измеряемые объекты, несущественных (на первый взгляд) внешних воздействий, шумов, обусловленных глубинными внутренними факторами. В результате, как правило, получаются линейные уравнения в конечных разностях или с запаздывающим аргументом.

Третий аспект состоит в создании на основе уравнений, полученных на предыдущих этапах, их аппроксимирующих аналогов, удобных для широкого практического использования.

Рассмотрим более подробно реализацию этого этапа на примере истории механики. Ньютоно-Лейбницевский метод копирования процессов видимого мира можно сравнить с современной киносъемкой, когда фиксируется серия мгновений, разделенных сравнительно небольшими промежутками времени.

Поскольку ньютоновская механика стремилась, главным образом, описывать видимые и медленно меняющиеся явления, в ее математическом аппарате оказывались лишними «межкадровые изменения» (в терминах рассмотренной аналогии с киносъемкой), относящиеся к скрытым случайным микропроцессам.

Именно поэтому в ньютоновской механике естественным оказался переход в количественных формулировках физических законов от конечных разностей к дифференциалам и производным, а от конечных сумм — к интегралам и рядам.

Этот переход привел к тому, что значительно сузился круг описываемых моделями физических аспектов. В частности, использование в математических моделях дифференциалов вместо конечных разностей привело к усечению класса используемых функций. За пределами формализма остаются, например, непрерывные, но всюду недифференцируемые кривые (кривые Больцано — Вейерштрасса).

В основном первоначально полученные модели приводили к линейным дифференциальным или интегральным уравнениям, с помощью которых можно воспроизводить поведение средних характеристик, но нельзя учитывать влияние случайных факторов.

Качественные свойства решений этих уравнений исследовались в работах С. А. Ковалевской, Р. Куранта, Д. Гильберта, И. Г. Петровского, О. А. Олейник, А. Н. Тихонова, В. А. Садовниченко и др.

Переход от линейных задач к нелинейным привел к понятию динамического хаоса. В результате возник новый класс моделей, которые в настоящее время объединены под названием «модели синергетики». Среди пионеров этого направления следует упомянуть И. Р. Пригожина, Г. Хакена, К. В. Гардинера, Г. Николаса. В основном модели этого класса до недавнего времени строились без привлечения понятий случайного процесса и случайного поля, поэтому актуальной остается проблема развития синергетики на основе этих понятий.

Четвертый аспект заключается в необходимости учета и исследования случайных факторов, определяющих поведение описываемого объекта. Проявление этого аспекта стало возможным в результате создания новых приборов, регистрирующих шумы, а также создания новых статистических методов обработки экспериментальных данных. В результате в XX в. бурно развивалась теория случайных процессов и полей. Если для случайных процессов усилиями Л. Бachelье, Л. Больцмана, П. Ланжевена, А. Эйнштейна, М. Планка, А. Д. Фоккера, А. А. Маркова, А. Н. Колмогорова, Р. Л. Стратоновича, К. Ито, С. Ватанабэ, Дж. Дуба, И. Г. Журбенко, В. С. Королюка, И. И. Гихмана,

А. А. Скорохода и других исследователей получена стройная теория, то проблема описания случайных полей требует дальнейшего развития.

Пятый аспект, начало которого положено в статистической интерпретации квантовых явлений, заключается в построении таких стохастических математических моделей, которые учитывали бы волновой характер случайных проявлений описываемых процессов.

Для этого вновь пришлось обращаться к дискретному (в частности, разностному) способу моделирования. Дело в том, что решения разностных уравнений формируются с помощью функций, структура и смысл которых двойственны. Подобная двойственность отражает объективно существующую связь видимых и скрытых движений материи.

Если видимые движения описываются с помощью детерминированных функций (средних значений), то функции, соответствующие скрытым движениям, имеют вероятностную природу.

В двадцатом столетии бурно развивалась теория случайных процессов. К настоящему времени существует два способа описания случайных процессов:

- уравнения Ито — Стратоновича и уравнения Колмогорова — Фоккера — Планка, которые предназначены для описания широкого класса явлений с помощью диффузионных представлений о распространении функции плотности распределения вероятностей;
- уравнения Шредингера, дающие корпускулярно-волновую трактовку квантомеханических экспериментов.

До недавнего времени считалось, что волновой характер присущ только явлениям микромира, однако в последние годы появились работы [1—3], в которых замечено, что гистограммы, построенные для случайных процессов различной природы, периодически повторяют во времени и пространстве свою тонкую структуру.

Все это свидетельствует об актуальности создания для случайных явлений произвольной природы таких мо-

делей, которые бы подобно квантомеханическим, описывали волновые свойства этих явлений.

Наконец, шестой аспект обязан своим возникновением появлению современных мощных компьютеров и развитию компьютерных технологий, в результате которого возникло новое направление имитационного моделирования, в основе которого лежит вычислительный эксперимент.

Одно из направлений имитационного моделирования тесно связано с использованием обратных задач и проведения вычислительных экспериментов на основе феноменологических моделей.

К настоящему моменту в работах А. Н. Тихонова, А. А. Самарского, Ю. Н. Днестровского, Д. П. Костомарова, В. Я. Арсенина, В. А. Винокурова, В. Б. Гласко, А. В. Гончарского, А. С. Леонова, А. Г. Яголы, М. М. Лавретьева, В. К. Иванова, В. А. Морозова, О. М. Алифанова и других авторов создана стройная теория обратных задач и разработана эффективная методика проведения вычислительных экспериментов.

Однако актуальной остается проблема создания эффективных алгоритмов обратного моделирования случайных процессов и полей при управлении сложными производственными процессами. Прежде всего, это относится к учету выхода контролируемых параметров за пределы стандартов.

ГЛАВА 1. ДИСКРЕТНЫЕ И НЕПРЕРЫВНЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ

§ 1.1. ПОСТАНОВКИ РАЗНОСТНЫХ ЗАДАЧ

Определение 1. Функциональное уравнение

$$\Phi(t, q(t), q(t + \tau_1), \dots, q(t + \tau_n)) = 0, \quad (1.1.1)$$

в которое неизвестная функция $q(t)$ одной независимой переменной входит при различных действительных значениях аргумента t , причем

$$t_0 \leq t \leq t_1, \quad 0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n,$$

где

$$|t_1 - t_0| > (n+1) \min_{k=1, 2, \dots, n} \tau_k,$$

а функция $\Phi(t, q(t), q(t + \tau_1), \dots, q(t + \tau_n))$ определена и непрерывна при всех $t \in [t_0; t_1]$, называется *обыкновенным разностным уравнением*.

Замечание 1. Иногда (см., например, [1]) уравнения вида (1.1.1) называют *уравнениями с запаздывающим аргументом*.

Замечание 2. В дальнейшем будем рассматривать случай, когда $\tau_k = kt$, $k = 1, 2, \dots, n$.

Определение 2. *Решением разностного уравнения (1.1.1) называется такая функция $q(t)$, которая, будучи подставлена в это уравнение, обращает его в тождество при всех $t \in [t_0; t_1]$.*

Замечание. В ряде случаев под решением уравнения (1.1.1) будем понимать функцию $q(t)$, которая обращает данное уравнение в тождество во всех точках отрезка $[t_0; t_1]$, за исключением конечного их числа.

Определение 3. Порядком разностного уравнения (1.1.1) называется число n , равное количеству различных приращений независимого аргумента в данном уравнении.

Постановка дискретной начальной задачи первого рода. Исходя из уравнения (1.1.1) и известных дискретных значений функции $q(t)$:

$$q(t_0) = C_1, \quad q(t_0 + \tau) = C_2, \quad q(t_0 + 2\tau) = C_3, \quad \dots, \quad q(t_0 + (n-1)\tau) = C_n,$$

требуется найти счетный набор значений

$$q(t_0 + k\tau), \quad k = n, n+1, n+2, \dots$$

Постановка непрерывной начальной задачи второго рода. Исходя из уравнения (1.1.1), требуется найти на участке $t \in [t_0 + (n-1)\tau, +\infty)$ функцию $q(t)$, совпадающую с известной непрерывной функцией на начальном отрезке:

$$q(t) = A(t), \quad t \in [t_0 + (n-1)\tau, +\infty).$$

Постановка непрерывной начальной задачи третьего рода. Требуется найти непрерывную функцию $q(t)$, при всех $t \in [t_0; +\infty)$ подчиняющуюся уравнению (1.1.1) и совпадающую с заданными дискретными значениями в начальных точках:

$$q(t_0) = C_1, \quad q(t_0 + \tau) = C_2, \quad q(t_0 + 2\tau) = C_3, \quad \dots, \quad q(t_0 + (n-1)\tau) = C_n.$$

Постановка дискретной краевой задачи первого рода. Исходя из уравнения (1.1.1) и известных краевых значений функции $q(t)$:

$$q(t_0) = C_1, \quad q(t_0 + N\tau) = C_{N+1},$$

требуется найти дискретный набор значений

$$q(t_0 + k\tau), \quad k = 1, 2, \dots, N-1.$$

Постановка непрерывной начальной задачи второго рода. Исходя из уравнения (1.1.1) и известных краевых непрерывных функций:

$$q(t) = \begin{cases} C_0(t), & t \in [t_0; t_0 + \tau); \\ C_N(t), & t \in (t_0 + (N-1)\tau; t_0 + N\tau], \end{cases}$$

требуется найти функцию $q(t)$ на отрезке $[t_0 + \tau; t_0 + (N-1)\tau]$.

Постановка непрерывной краевой задачи третьего рода. Требуется найти функцию $q(t)$ при всех $t \in [t_0; t_0 + N\tau]$, исходя из уравнения (1.1.1) и двух дискретных краевых условий, заданных на концах отрезка:

$$q(t_0) = C_1 = \text{const}, \quad q(t_0 + N\tau) = C_{N+1} = \text{const}.$$

Если перейти к явной форме записи уравнения первого порядка

$$\frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} = f(q, t), \quad t \in (0; +\infty), \quad (1.1.2)$$

то можно отметить одну особенность решений поставленных задач.

Пусть функция $f(q, t)$ непрерывна при любых $q \in (-\infty; +\infty)$, $t \in [0; +\infty)$, тогда решения начальных задач первого и второго рода для (1.1.2) существуют и единственны, в то же время решения задач третьего рода не являются единственными.

Поясним сказанное на примере. Рассмотрим простейшую начальную задачу третьего рода для обыкновенного разностного уравнения:

$$\begin{cases} \frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} = C, & t \in [0; +\infty); \\ q(t_0) = q_0 = \text{const}. \end{cases} \quad (1.1.3)$$

Решением этой задачи на дискретной сетке $t_k = k\tau$, $k = 0, 1, \dots, N, \dots$ является дискретная функция $q(t_k) = \Gamma(t_k) = q_0 + Ct_k$.

Решением аналогичной задачи третьего рода при непрерывном изменении аргумента $t \in [0; +\infty)$ является множество функций вида

$$q(t) = M(t)\Gamma(t) + A(t) = M(t)(q_0 + Ct) + A(t),$$

где мультипликативная $M(t)$ и аддитивная $A(t)$ составляющие есть периодические функции своего аргумента:

$$M(t + \tau) = M(t) = 1, \quad A(t + \tau) = A(t) = 0.$$

Постановка начальных и краевых задач третьего рода в силу своей неопределенности ближе всего к стохастическим задачам.

Если рассмотреть стохастический аналог уравнения (1.1.3) для случайной функции $\xi(t)$:

$$\begin{cases} \frac{\langle \xi(t + \tau) \rangle - \langle \xi(t) \rangle}{\tau} = C, & t \in [0; +\infty); \\ \langle \xi(t_0) \rangle = q_0 = \text{const}, \end{cases}$$

где угловыми скобками обозначены средние значения, то составляющая $\Gamma(t) = q_0 + Ct$ может трактоваться как среднее значение

$$\langle \xi(t) \rangle = \Gamma(t) = q_0 + Ct,$$

а две другие компоненты $M(t)$ и $A(t)$ — как случайный мультипликативный и аддитивный шум соответственно.

Выбор величины τ при физическом моделировании определяется возможностями измерительного прибора. Если речь идет об измерении времени, например, с помощью секундомера, то $\tau = 1$ с.

§ 1.2. НЕКОТОРЫЕ РЕШЕНИЯ НАЧАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ТРЕТЬЕГО РОДА

Уравнение вида

$$\frac{q(t + \tau) - q(t)}{\tau} = f(t), \quad t \in [0; +\infty) \quad (1.2.1)$$

имеет особую важность, так как к нему могут быть сведены другие более сложные уравнения.

Определение 4. Уравнение (1.2.1) будем называть *основным обыкновенным непрерывным разностным уравнением первого порядка*.

Физический смысл уравнения (1.2.1) состоит в задании разностной производной по двум близким значениям функции $q(t)$.

Теорема 1.2.1. *Общее решение для основного обыкновенного разностного уравнения (1.2.1) складывается из какого-то его частного решения и общего решения соответствующего уравнения с нулевой правой частью*

$$\frac{q(t+\tau)-q(t)}{\tau} = 0, \quad t \in [0; +\infty). \quad (1.2.2)$$

Доказательство. Обозначим $q_{\text{ч.}}(t)$ частное решение уравнения (1.2.1), а $q_{\text{одн.}}(t)$ — общее решение уравнения с нулевой правой частью.

Имеем:

$$\frac{q_{\text{ч.}}(t+\tau)-q_{\text{ч.}}(t)}{\tau} = f(t), \quad \frac{q_{\text{одн.}}(t+\tau)-q_{\text{одн.}}(t)}{\tau} = 0, \quad t \in [0; +\infty).$$

Сложив эти уравнения:

$$\frac{(q_{\text{ч.}}(t+\tau)+q_{\text{одн.}}(t+\tau))-(q_{\text{ч.}}(t)+q_{\text{одн.}}(t))}{\tau} = f(t), \quad t \in [0; +\infty)$$

и образовав функцию $q(t) = q_{\text{ч.}}(t) + q_{\text{одн.}}(t)$, получим, что $q(t)$ удовлетворяет уравнению (1.2.1). Теорема доказана. \square

Определение 5. Уравнение вида

$$\frac{u(t+\tau)+u(t)}{\tau} = \eta(t), \quad t \in [0; +\infty) \quad (1.2.3)$$

будем называть *основным обыкновенным непрерывным аддитивным уравнением первого порядка*.

Физический смысл уравнения (1.2.3) состоит в определении среднего значения двух близких значений функции $u(t)$.

Если ввести обозначения

$$q(t) = (-1)^{\lfloor t/\tau \rfloor} u(t), \quad f(t) = (-1)^{\lfloor t/\tau \rfloor} \eta(t),$$

где квадратными скобками обозначена целая часть, то уравнение (1.2.3) сведется к уравнению (1.2.1).

В табл. 1.2.1, 1.2.2 представлены решения начальной задачи третьего рода для уравнений (1.2.1) и (1.2.3) при различных правых частях.

Таблица 1.2.1

Некоторые общие решения начальной задачи третьего рода для основного разностного уравнения (1.2.1)

<i>Правая часть $f(t)$</i>	<i>Решение $q(t)$</i>
$C = \text{const}$	$CtM(t) + A(t)$
t	$(t - \tau/2)^2 M(t) + A(t)$
t^2	$\frac{(4(t - \tau/2)^3 - \tau^2)M(t)}{12\tau} + A(t)$
a^t	$\frac{a^t M(t)}{a^{\tau/2} - 1} + A(t)$
$\sin(\alpha t), \alpha \neq 2\pi k, k \in \mathbb{Z}$	$\frac{\cos(\alpha(t - \tau/2))M(t)}{2\sin(\alpha\tau/2)} + A(t)$
$\sin(2\pi kt), k \in \mathbb{Z}$	$\frac{t \sin(2\pi kt / \tau)M(t)}{\tau} + A(t)$
$\cos(\alpha t), \alpha \neq 2\pi k, k \in \mathbb{Z}$	$\frac{\text{ctg}(\alpha\tau/2)\sin(\alpha\tau) - 2\cos(\alpha\tau)}{2} M(t) + A(t)$
$\cos(2\pi kt), k \in \mathbb{Z}$	$\frac{t \cos(2\pi kt / \tau)M(t)}{\tau} + A(t)$
$f(t)$ — периодическая функция с периодом τ	$\frac{tf(t)M(t)}{\tau} + A(t)$
$f(t)$ — периодическая функция с периодом $T > \tau$, представляемая сходящимся рядом Фурье $f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{2\pi nt}{\tau} + b_n \sin \frac{2\pi nt}{\tau} \right)$	$\left(\frac{a_0 t}{\tau} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(a_n \text{ctg} \frac{2\pi n t \tau}{T} - b_n \right) \sin(2\pi n \tau) + b_n \text{ctg} \frac{\pi n \tau}{T} \cos \frac{2\pi n t}{\tau} \right) \right) \frac{M(t)}{2} + A(t)$
$f(t) = f(\{t/\tau\})$ (фигурными скобками обозначена дробная часть)	$\frac{tf(\{t/\tau\})M(t)}{\tau} + A(t)$

Если правая часть $f(t)$ не соответствует ни одной из приведенных функций в таблице 1.2.1, то решение уравнения (1.2.1) может быть получено с помощью непосредственного суммирования:

$$q(t) = M(t) \sum_{n=0}^{\infty} (f(t - n\tau) - f(t)) + A(t).$$

Таблица 1.2.2

Некоторые общие решения начальной задачи третьего рода для основного обыкновенного непрерывного аддитивного разностного уравнения (1.2.3)

<i>Правая часть $\eta(t)$</i>	<i>Решение $u(t)$</i>
$C = \text{const}$	$CM(t)/2 + A(t)$
t	$(t - \tau/2)M(t)/2 + A(t)$
t^2	$\frac{8(t - \tau/2)^2 - \tau^2}{16}M(t) + A(t)$
a^t	$\frac{a^t M(t)}{a^\tau + 1} + A(t)$
$\sin(\alpha t), \alpha \neq 2\pi k, k \in \mathbb{Z}$	$\frac{\sin(\alpha(t - \tau/2))M(t)}{2\cos(\alpha\tau/2)} + A(t)$
$\sin(2\pi kt), k \in \mathbb{Z}$	$\frac{M(t)\sin(2\pi kt/\tau)}{2} + A(t)$
$\cos(\alpha t), \alpha \neq 2\pi k, k \in \mathbb{Z}$	$\frac{\cos(\alpha(t - \tau/2))\cos(\alpha\tau/2)M(t)}{2} + A(t)$
$\cos(2\pi kt), k \in \mathbb{Z}$	$\frac{t \cos(2\pi kt/\tau)M(t)}{\tau} + A(t)$
$f(t)$ — периодическая функция с периодом τ	$\frac{f(t)M(t)}{2\tau} + A(t)$
$f(t)$ — периодическая функция с периодом $T > \tau$, представимая сходящимся рядом Фурье $f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{2\pi n t}{\tau} + b_n \sin \frac{2\pi n t}{\tau} \right)$	$\left(a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{\pi n \tau (2t - 1)}{T} + b_n \frac{\sin(\pi n (2t - \tau)/T)}{\cos(\pi n \tau/T)} \right) \right) \frac{M(t)}{2} + A(t)$
$f(t) = f(\{t/\tau\})$ (фигурными скобками обозначена дробная часть)	$\frac{t f(\{t/\tau\})M(t)}{\tau} + A(t)$

Если правая часть $\eta(t)$ такова, что для нее не удается получить аналитическое решение в виде известной функции, то следует воспользоваться непосредственным суммированием:

$$u(t) = -M(t) \sum_{k=\lceil t/\tau \rceil}^{\lfloor t/\tau \rfloor} ((-1)^k f(t - k\tau) + f(t)) + A(t).$$

§ 1.3. ПОСТРОЕНИЕ СЕМЕЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ РАЗНОСТНЫХ СИСТЕМ

Рассмотрим начальную задачу третьего рода для системы разностных уравнений

$$\begin{cases} \frac{q_i(t+\tau) - q_i(t)}{\tau} = f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t), & t \in [0; +\infty), \quad i = 1, 2, \dots, n; \\ q_i(t=0) = q_{i0}, & i = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (1.3.1)$$

В отличие от соответствующих дифференциальных уравнений, каждое разностное уравнение (1.3.1) порождает счетное множество производных. В самом деле, обозначим

$$\begin{aligned} \Phi_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t) &\triangleq q_i(t+\tau) \equiv q_i(t) + \tau f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t), \\ \mathbf{q} &\triangleq (q_1, q_2, \dots, q_n), \\ \Phi &\triangleq (\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n), \end{aligned}$$

тогда переходя от приращения τ к $2\tau, 3\tau, 4\tau$ и т. д., получим для каждого уравнения системы следующую цепочку уравнений:

$$\begin{aligned} q_i(t+2\tau) &= \Phi_i(\Phi(\mathbf{q}, t+\tau)), & q_i(t+3\tau) &= \Phi_i(\Phi(\mathbf{q}, t+2\tau)), \\ q_i(t+4\tau) &= \Phi_i(\Phi(\mathbf{q}, t+3\tau)), \dots \end{aligned}$$

Особенно простой вид производная система приобретает в случае, когда правые части не зависят явно от аналога времени t :

$$\begin{aligned} q_i(t+\tau) &= q_i(t) + \tau f_i(q_1, q_2, \dots, q_n) = \Phi_i(q_1, q_2, \dots, q_n), \\ & i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

Для приращения $k\tau$ получим следующую систему разностных уравнений:

$$\begin{aligned} q_i(t+k\tau) &= \Phi_i(\Phi(\Phi(\dots\Phi(\mathbf{q}(t))\dots))), & i = 1, 2, \dots, n, \\ & k = 1, 2, \dots, k_c, \dots \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Определение 6. Назовем *семейством* порядка k_c множество систем (1.3.3), порождаемых уравнением (1.3.2) при фиксированном $k = k_c$.

Определение 7. *Стационарной точкой* семейства порядка k_c называется вектор $\mathbf{q}^* = (q_1^*, q_2^*, \dots, q_n^*)$, удовлетворяющий уравнениям

$$q_i^* = \varphi_i \left(\varphi \left(\varphi \left(\dots \varphi \left(\mathbf{q}^* \right) \dots \right) \right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1.3.4)$$

последней системы данного семейства порядка k_c .

Теорема 1.3.1. *Стационарные точки последней системы семейства порядка k_c , удовлетворяющие условиям устойчивости*

$$\left. \frac{\partial \varphi_k(\varphi(\mathbf{q}))}{\partial q_i} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}^*} = \alpha_i$$

или

$$\varphi_k(\varphi(\mathbf{q}^* + \Delta \mathbf{q})) - \varphi_k(\varphi(\mathbf{q}^*)) < \alpha_i \Delta q$$

(где $\alpha_i = \text{const} < 1$, $i = 1, 2, \dots, n$, $k = k_c$), принадлежат притягивающему множеству решений семейств производных систем любого порядка до k_c включительно.

§ 1.4. РАЗНОСТНЫЕ УРАВНЕНИЯ ГАМИЛЬТОНА, Порождаемые системой обыкновенных разностных уравнений первого порядка

Подобно тому, как в механике происходил переход от кинематических уравнений к уравнениям Ньютона, Лагранжа и Гамильтона, можно построить соответствующие аналоги, основанные на разностных уравнениях. При этом появляется возможность использовать известные преимущества динамического подхода при исследовании разностных моделей.

Начиная с 1834 г., когда У. Гамильтон вывел систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial p_k}, & k = 1, 2, \dots, n, \\ \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial q_k}, & k = 1, 2, \dots, n, \end{cases}$$

для описания механических процессов, гамильтонов формализм был обобщен в целях описания явлений различной природы.

Развитие идей Гамильтона дает неограниченные возможности как для развития математического аппарата, так и для новых открытий в отраслях науки, использующих математическое моделирование. Особую эффективность введение функции Гамильтона приобрело в задачах оптимального управления [1].

Гамильтонов формализм может быть распространен и на разностные модели, в частности, на стохастические. С целью подготовки к применению этого формализма для описания случайных процессов получим и исследуем систему уравнений Гамильтона, соответствующую системе обыкновенных разностных уравнений первого порядка с непрерывным изменением аргумента.

Определение 8. Назовем *гамильтонианом* функцию

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{k=1}^n p_k f_k(\mathbf{q}, t) + U(\mathbf{q}, t), \quad (1.4.1)$$

где $U(\mathbf{q}, t)$ — аналог *потенциальной энергии* или просто *потенциальная энергия*.

Теорема 1.4.1. *Решения системы уравнений*

$$\frac{q_i(t+\tau) - q_i(t)}{\tau} = f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

в пространстве непрерывного изменения аргумента $t \in [0; +\infty)$ *совпадают с решениями гамильтоновой системы*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{q_k(t+\tau) - q_k(t)}{\tau} = \frac{H(\mathbf{q}, p_1, p_2, \dots, p_k + \Delta p_k, \dots, p_n, t)}{\Delta p_k}, \\ \qquad \qquad \qquad k = 1, 2, \dots, n, \\ \frac{p_k(t+\tau) - p_k(t)}{\tau} = -\frac{H(q_1, q_2, \dots, q_k + \Delta q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t)}{\Delta q_k}, \\ \qquad \qquad \qquad k = 1, 2, \dots, n. \end{array} \right. \quad (1.4.2)$$

Доказательство. Имеем:

$$\begin{aligned}
& \frac{H(\mathbf{q}, p_1, p_2, \dots, p_k + \Delta p_k, \dots, p_n, t) - H(\mathbf{q}, p_1, p_2, \dots, p_k, \dots, p_n, t)}{\Delta p_k} = \\
& = \left(\left(\sum_{j=1}^{k-1} p_j f_j(\mathbf{q}, t) + (p_k + \Delta p_k) f_k(\mathbf{q}, t) + \sum_{j=k+1}^n p_j f_j(\mathbf{q}, t) + U(\mathbf{q}, t) \right) - \right. \\
& \left. - \left(\sum_{j=1}^{k-1} p_j f_j(\mathbf{q}, t) + p_k f_k(\mathbf{q}, t) + \sum_{j=k+1}^n p_j f_j(\mathbf{q}, t) + U(\mathbf{q}, t) \right) \right) / \Delta p_k = f_k(\mathbf{q}, t) = \frac{q_k(t + \tau) - q_k(t)}{\tau}; \\
& \frac{H(q_1, q_2, \dots, q_k + \Delta q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t) - H(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t)}{\Delta q_k} = \\
& = - \left(\sum_{j=1}^n p_j f_j(q_1, q_2, \dots, q_k + \Delta q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t) + U(q_1, q_2, \dots, q_k + \Delta q_k, \dots, q_n, t) - \right. \\
& \left. - \sum_{j=1}^n p_j f_j(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t) - U(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_n, t) \right) / \Delta q_k = \\
& = - \sum_{j=1}^n p_j \frac{f_j(q_1, q_2, \dots, q_k + \Delta q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t) - f_j(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_n, \mathbf{p}, t)}{\Delta q_k} = \\
& \frac{U(q_1, q_2, \dots, q_k + \Delta q_k, \dots, q_n, t) - U(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_n, t)}{\Delta q_k} = \frac{p_k(t + \tau) - p_k(t)}{\tau}.
\end{aligned}$$

Теорема доказана. \square

Замечание. Поскольку каждая система

$$\frac{q_i(t + \tau) - q_i(t)}{\tau} = f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

порождает счетное множество производных систем, исходный гамильтониан порождает множество гамильтонианов, соответствующих каждому элементу семейства систем данного порядка.

Определение 9. Назовем *фазовым пространством* для данной системы разностных уравнений $2n$ -мерное пространство (\mathbf{q}, \mathbf{p}) .

Выявим теперь условия, когда для автономных систем, то есть систем, в которых функции

$$U(\mathbf{q}, t) \equiv U(\mathbf{q}), \quad f_k(\mathbf{q}, t) \equiv f_k(\mathbf{q})$$

явно не зависят от времени, соблюдается закон сохранения энергии, то есть гамильтониан $H(\bar{q}, \bar{p}, t)$ не изменяется со временем.

Теорема 1.4.2. Если первое уравнение гамильтоновой системы явное, а второе — неявное, с правой частью, которая задана в точке $t + \tau$ для \mathbf{p} , и функции $f_k(\mathbf{q})$ и $U(\mathbf{q})$ явно не зависят от времени t :

$$\left\{ \begin{aligned}
& \frac{q_k(t+\tau) - q_k(t)}{\tau} = \\
& = \frac{H(\mathbf{q}(t), \dots, p_k(t) + \Delta p_k(t), \dots) - H(\mathbf{q}(t), \dots, p_k(t), \dots)}{\Delta p_k(t)} = \\
& = f_k(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)), \quad k=1, 2, \dots, n; \\
& \frac{p_k(t+\tau) - p_k(t)}{\tau} = \\
& = - \frac{H(\dots, q_k(t) + \Delta q_k(t), \dots, \mathbf{p}(t+\tau)) - H(\dots, q_k(t), \dots, \mathbf{p}(t+\tau))}{\Delta q_k(t)} = \\
& = - \sum_{j=1}^n p_j(t+\tau) \frac{f_j(\dots, q_k(t) + \Delta q_k(t), \dots) - f_j(\dots, q_k(t), \dots)}{\Delta q_k(t)} - \\
& \frac{U(\dots, q_k(t) + \Delta q_k(t), \dots) - U_j(\dots, q_k(t), \dots)}{\Delta q_k(t)},
\end{aligned} \right.$$

то гамильтониан сохраняет такое же значение при $t = t_0 + k\tau$, $k=1, 2, \dots, K$, какое он имел в момент $t = t_0$.

Доказательство. Не ограничивая общности с целью упрощения выкладок, проведем доказательство для того случая, когда порождающая система состоит всего из одного уравнения $(q(t+\tau) - q(t))/\tau = f(q)$. Данному уравнению соответствует гамильтониан $H(q, p) = pf(q) + U(q)$, а система Гамильтона с первым явным и вторым неявным уравнениями имеет следующий вид:

$$\frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} = \frac{H(q, p(t+\tau)) - H(q, p)}{\Delta p} = f(q); \quad (1.4.3)$$

$$\begin{aligned}
\frac{p(t+\tau) - p(t)}{\tau} &= - \frac{H(q(t+\tau), p(t+\tau)) - H(q(t), p(t+\tau))}{\Delta q} = \\
&= -p(t+\tau) \frac{f(q(t+\tau)) - f(q(t))}{\Delta q(t)} - \frac{U(q(t+\tau)) - U(q(t))}{\Delta q(t)}.
\end{aligned} \quad (1.4.4)$$

Рассмотрим полное приращение гамильтониана во времени на решении гамильтоновой системы $q(t)$ и $p(t)$:

$$\begin{aligned}
\Delta_t H(q, p) &= H(q(t+\tau), p(t+\tau)) - H(q(t), p(t)) = \\
&= H(q(t+\tau), p(t+\tau)) - H(q(t), p(t+\tau)) + H(q(t), p(t+\tau)) - H(q(t), p(t)) = \\
&= \frac{H(q(t+\tau), p(t+\tau)) - H(q(t), p(t+\tau))}{q(t+\tau) - q(t)} \frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{H(q(t), p(t+\tau)) - H(q(t), p(t))}{p(t+\tau) - p(t)} \frac{p(t+\tau) - p(t)}{\tau} \tau = \\
& = - \frac{p(t+\tau) - p(t)}{\tau} \frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} \tau + \frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} \frac{p(t+\tau) - p(t)}{\tau} \tau = 0.
\end{aligned}$$

Теорема доказана. \square

Замечание. Из теоремы 1.4.2 следует, что

$$\left. \frac{\partial f(q)}{\partial q} \right|_{q=q^*} = \alpha = \text{const} > 1 \quad \text{или} \quad f(q^* + \Delta q^*) - f(q^*) > \alpha \Delta q^*.$$

Теорема 1.4.3. Если точка q^* является неустойчивой стационарной точкой первого уравнения гамильтоновой системы

$$\frac{q(t+\tau) - q(t)}{\tau} = \frac{\Delta_p H}{\Delta p} = f(q),$$

то соответствующая стационарная точка p^* второго уравнения

$$\frac{p(t+\tau) - p(t)}{\tau} = - \frac{\Delta_q H}{\Delta q} = -p(t+\tau) \frac{\Delta f(q)}{\Delta q} - \frac{\Delta U(q)}{\Delta q}$$

устойчива при выполнении следующих условий:

$$\forall k \in \mathbb{N} \quad f(q(t+k\tau)) > 0, \quad f(q^* + \Delta q^*) - f(q^*) > \alpha \Delta q^*, \quad \alpha = \text{const} > 1.$$

Доказательство. Рассмотрим решение второго уравнения гамильтоновой системы:

$$p(t+\tau) = \frac{p(t) - \frac{\Delta U(q)}{\Delta q} \tau}{1 + \frac{\Delta f(q)}{\Delta q} \tau}$$

или (с учетом первого уравнения)

$$\begin{aligned}
& p(t+\tau) = \\
& = \frac{p(t) - \frac{U(q(t+\tau)) - U(q(t))}{q(t+\tau) - q(t)} \tau}{1 + \frac{f(q(t+\tau)) - f(q(t))}{q(t+\tau) - q(t)} \tau} = \frac{p(t)(q(t+\tau) - q(t)) - \tau(U(q(t+\tau)) - U(q(t)))}{q(t+\tau) - q(t) + \tau(f(q(t+\tau)) - f(q(t)))} = \\
& = \frac{p(t)f(q(t)) - U(q(t+\tau)) + U(q(t))}{f(q(t+\tau))}.
\end{aligned}$$

Если $U(q(t+\tau))=U(q(t))$, то $p(t+\tau)=p(t)f(q(t))/f(q(t+\tau))$. Поскольку $f(q^*(t+\tau))=1+\alpha\tau f(q^*(t))$, то

$$p(t+\tau)=p(t)\frac{f(q^*(t))}{1+\alpha\tau f(q^*(t))},$$

и при $f(q(t))\geq 0$ величина $p(t+k\tau)$, где $k\in\mathbb{N}$, убывает с ростом $t+k\tau$. Это означает, что при любых малых возмущениях начальных данных для $p(t)$ величина погрешности для $p(t+\tau)$ будет стремиться к нулю при $t+k\tau\rightarrow+\infty$. Таким образом, решение $p(t)$ устойчиво по начальным данным, что и требовалось доказать. \square

§ 1.5. НЕКОТОРЫЕ РЕШЕНИЯ РАЗНОСТНОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ГАМИЛЬТОНА

В дальнейшем нам понадобятся некоторые частные решения гамильтоновой системы.

Задача 1. Выясним, при каких $U(q)$ одно из решений эволюционной системы Гамильтона (1.4.3)—(1.4.4) с гамильтонианом $H(q,p)=kqp+U(q)$ и начальными условиями $q(0)=q_0$, $p(0)=0$ тождественно равно нулю:

$$p(t)\equiv 0, \quad t\in[0,k\tau], k\in\mathbb{N}.$$

Решение. Из уравнения (1.4.3) получаем $q(t)=M(t)q_0(1+k\tau)^{t/\tau}+A(t)$. Из уравнения (1.4.4) с учетом требования $p(t+\tau)=p(0)\equiv 0$, $t\in[0,k\tau], k\in\mathbb{N}$ получим, что $(U(q(t+\tau))-U(q(t)))/\Delta q(t)=0$. Отсюда следует, что $U(q(t+\tau))=U(q(t))=\text{const}$.

Задача 2. Пусть дана четная функция $P(q,t)\geq 0$, для которой $\int_{-\infty}^{+\infty} P(q,t)dq=1$ при любых $t\in[0,\infty)$. Выясним, при каких $U(q)$ на решении начальной задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} qP(q,t+\tau)dq - \int_{-\infty}^{+\infty} qP(q,t)dq}{\tau} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(q)P(q,t)dq, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} qP(q,t=0)dq = q_0 \neq 0 \end{cases}$$

ВЫПОЛНЯЮТСЯ УСЛОВИЯ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_0 - U(q)}{f(q)} P(q, t) dq = 0; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{H_0 - U(q)}{f(q)} \right)^2 P(q, t) dq = \sigma_p \neq 0,$$

$$t \in [0, k\tau], k \in \mathbb{N},$$

где $H_0 = \text{const} > 0$.

Решение. В силу четности функции $P(q, t)$ интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_0 - U(q)}{f(q)} P(q, t) dq = 0, \quad t \in [0, k\tau], k \in \mathbb{N}$$

при любой нечетной функции

$$\frac{H_0 - U(-q)}{f(-q)} = -\frac{H_0 - U(q)}{f(q)}, \quad t \in [0, k\tau], k \in \mathbb{N}. \quad (1.5.1)$$

Если функция $f(q)$ нечетная: $f(-q) = -f(q)$, то соотношение (1.5.1) приводит к равенству $\forall t \in [0, k\tau], k \in \mathbb{N} \quad U(-q) = -U(q)$, т. е. и $U(q)$ — нечетная функция.

Если же $f(q)$ четная: $f(-q) = f(q)$, то соотношению (1.5.1) приводит к равенству $\forall t \in [0, k\tau], k \in \mathbb{N} \quad U(-q) = U(q)$, т. е. и $U(q)$ — четная функция.

Замечание. Величина $(H_0 - U(q))/f(q)$ при постоянном гамильтониане $H(q, p) = f(q)p + U(q) \equiv H_0 = \text{const}$ представляет собой выражение для обобщенного импульса $p = (H_0 - U(q))/f(q)$.

ГЛАВА 2. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ПРИ ОПИСАНИИ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ С ПОМОЩЬЮ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ВОЛН ВЕРОЯТНОСТЕЙ

§ 2.1. ПОНЯТИЕ ЛОКАЛЬНОГО СРЕДНЕГО ЗНАЧЕНИЯ

Семейства реализаций случайных процессов являются, как известно, основным экспериментальным материалом, на основе которого можно рассчитать средние значения и дисперсию. Поскольку гипотезы о связи средних значений, как правило, формулируются на основании ограниченного количества опытных данных, то естественно предположить проявление закономерных связей и между членами суммы произведения значений случайной величины на соответствующие вероятности. Эти элементы указанной суммы нами названы локальными средними значениями. Установленная связь между локальными средними значениями сечений того или иного случайного процесса в различные моменты времени естественным образом должна содержать погрешность. В настоящей работе стохастическая трактовка структуры этой погрешности осуществляется на основе феноменологических представлений.

Запросы современной науки, особенно таких ее областей, как биология, медицина и экология, приводит к созданию моделей стохастических процессов, которые описывают вероятностное поведение объектов на клеточном уровне. Подобная дискретизация в конечном итоге должна приводить к разностным уравнениям, решения которых,

как показано в первой главе, содержат волновые случайные компоненты. Другая причина введения волновых представлений при описании случайных процессов заключается в тонкой пространственно-временной структуре гистограмм, наблюдаемой в разных опытах.

В данной главе для моделирования случайных процессов развивается подход, который был применен в свое время для описания квантово-механических явлений. Основная идея этого подхода состоит в расщеплении функции плотности распределения вероятности (ФПРВ) на произведение двух комплексно сопряженных функций и получении для них уравнений, подобных уравнению Шредингера. При этом возникает проблема трактовки аналога постоянной Планка. Здесь предлагается рассматривать эту константу с помощью удвоенного произведения начальных значений средних квадратических отклонений характеристики случайного процесса и связанного с ней шума. Это позволяет по-новому посмотреть на условия устойчивости эволюционных задач: в частности, область устойчивости, найденная с помощью предложенных здесь стохастических уравнений, является более узкой, чем в соответствующих детерминированных моделях.

Рассмотрим вероятностное пространство $(\Omega, \Sigma, \mathbf{P})$, где Ω — пространство элементарных событий с борелевской σ -алгеброй событий Σ и определенной на Σ вероятностной мерой \mathbf{P} . Пусть $Y_n(\omega)$ — дискретная случайная величина, заданная на пространстве элементарных событий $\omega \in \Omega$.

Определение 10. *Локальными средними значениями (или локальными моментами первого порядка) дискретной случайной величины $Y(\omega)$, заданной своим рядом распределения вероятностей*

$$\begin{array}{c|cccc} Y & y_1 & y_2 & \cdots & y_N \\ \hline p & p_1 & p_2 & \cdots & p_N \end{array}, \quad (2.1.1)$$

называются величины

$$\text{Lok}_{1,k} \langle Y(\omega) \rangle = y_k p_k, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (2.1.2)$$

Определение 11. Локальными средними значениями (или локальными моментами первого порядка) непрерывной случайной величины $Y(\omega)$, заданной ФПРВ $p(y)$, называются величины $\text{Lok}_1 \langle Y(\omega) \rangle = \int y p(y) dy$.

Определение 12. Локальными средними значениями (или локальными моментами первого порядка) случайного процесса $Y(t_j, \omega)$ с дискретным временем $t_j \in \{t_0, t_1, \dots, t_J\}$, заданного условными вероятностями

$$P\{Y(t_j, \omega) = y_j \mid Y(t_{j-1}, \omega) = y_{j-1}, \dots, Y(t_0, \omega) = y_0\} = P_j,$$

называются величины

$$\text{Lok}_{1,j} \langle Y(t_j, \omega) \rangle = y_j P_j, \quad j=1, 2, \dots, J. \quad (2.1.3)$$

Определение 13. Локальными средними значениями (или локальными моментами первого порядка) марковского случайного процесса $Y(t, \omega)$ с известной функцией плотности переходной вероятности $p(s, y; t, x)$ называются величины

$$\text{Lok}_1 \langle Y(t, \omega) \rangle = \int y p(s, y; t, x) dy. \quad (2.1.4)$$

Определение 14. Локальными моментами n -го порядка дискретной случайной величины $Y(\omega)$, заданной рядом распределения (2.1.1), называются величины $\text{Lok}_{n,k} \langle Y_k(\omega) \rangle = y_k p_k$, $k=1, 2, \dots, N$.

§ 2.2. ТРАКТОВКА УРАВНЕНИЯ ЛАНЖЕВЕНА С ПОЗИЦИЙ ГИПОТЕЗЫ ЛОКАЛЬНЫХ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ

Физические законы, как правило, формулируются в виде связи локальных средних значений в разные моменты времени и в разных пространственных точках. Это можно объяснить тем, что при экспериментальных измерениях приборы выдают ограниченный набор разностных характеристик исследуемого процесса, причем в силу инерционных свойств приборов эти характеристики сглаживают и усредняют оригиналы.

Возможны два способа записи результатов измерений случайных дискретных величин. Первый способ используется после получения всей серии значений x_i и вычисления среднего значения $\langle \hat{X} \rangle$, тогда запись результата измерения прибором какого-то одного из значений случайной величины \hat{X} имеет следующий вид: $x_i = \langle \hat{X} \rangle + \Delta x_i$, здесь x_i — полученное значение случайной величины, а Δx_i — погрешность (т. е. отклонение x_i от $\langle \hat{X} \rangle$).

Второй способ используется, когда известен лишь некоторый фрагмент закона распределения вероятностей и среднее значение неизвестно, но локальное среднее вычисляется, тогда выражение x_i можно записать так: $x_i = \text{Lok}_i \langle \hat{X} \rangle + \tilde{\Delta} x_i$ или $x_i = p_i x_i + \tilde{\Delta} x_i$. Здесь $\tilde{\Delta} x_i$ — погрешность данного измеренного значения случайной величины x_i , равная произведению случайного значения x_i на «противоположную» вероятность $\bar{p}_i = 1 - p_i$: $\tilde{\Delta} x_i = x_i(1 - p_i) = x_i \bar{p}_i$. Чем меньше p_i , тем больше $\tilde{\Delta} x_i$. Другими словами, данная конкретная реализация x_i случайной величины \hat{X} равна сумме локального среднего значения данной реализации и локального среднего значения этой реализации с противоположной вероятностью: $x_i = p_i x_i + x_i(1 - p_i)$.

Заметим, что представление случайной реализации x_i с помощью суммы локального среднего значения и погрешности получается проще, чем аналог, выраженный с помощью обычного среднего значения. Именно поэтому при создании математических моделей первоначально составляются уравнения в терминах локальных средних значений, а уже затем после накопления достаточно большого объема экспериментального материала осуществляется переход к уравнениям для обычных средних.

Пусть в результате анализа сравнительно небольшого по объему экспериментальных данных высказана гипотеза о связи локальных средних значений в виде стохастического дифференциального уравнения первого порядка:

$$\frac{\partial(xp(x,t)dx)}{\partial t} = f(x,t)p(x,t)dx + \delta.$$

Здесь $p(x, t)$ — ФПРВ, δ — погрешность.

Поскольку $\partial_x(xf(x, t)p(x, t)) = x\partial_x(f(x, t)p(x, t)) + f(x, t)p(x, t)$, то предыдущее равенство можно переписать так:

$$\frac{x\partial_t(p(x, t)dx)}{\partial t} = -x\partial_x(f(x, t)p(x, t)) + \partial_x(xf(x, t)p(x, t)) + \delta.$$

С учетом того, что все члены последнего уравнения, кроме погрешности, записаны с помощью дифференциалов, то и погрешность также должна представлять собой дифференциал: $\delta = \partial_x(\Delta(x, t))$ и стохастическое дифференциальное уравнение можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{x\partial_t(p(x, t)dx)}{\partial t} = \\ = -x\partial_x(f(x, t)p(x, t)) + \partial_x(xf(x, t)p(x, t)) + \frac{\partial_x(\Delta(x, t))}{\partial x} dx. \end{aligned}$$

Поскольку должны выполняться условия

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial_x(\Delta(x, t))}{\partial x} dx = 1, \quad \frac{\partial_t \int_{-\infty}^{+\infty} xp(x, t) dx}{\partial t} = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, t)p(x, t) dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{\partial_x(f(x, t)p(x, t))}{\partial x} + \frac{1}{x} \frac{\partial_x(xf(x, t)p(x, t))}{\partial x} \right) dx + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x} \frac{\partial_x(\Delta(x, t))}{\partial x} dx = 0, \quad t \geq 0, \quad f(x, t) \in C^1 \geq 0, \end{aligned}$$

то слагаемое, выражающее погрешность, может быть представлено так:

$$\frac{\partial_x(\Delta(x, t))}{\partial x} = -\frac{\partial_x(xf(x, t)p(x, t))}{\partial x} + x \sum_{i=1}^n \frac{\partial_x^i(B_i(x, t)p(x, t))}{\partial_x x^i},$$

уравнение для плотности вероятности приобретает тогда следующий вид:

$$\frac{\partial_t p(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial_x(f(x, t)p(x, t))}{\partial x} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial_x^i(B_i(x, t)p(x, t))}{\partial_x x^i}. \quad (2.2.1)$$

Заметим, что полная постановка задачи для уравнения (2.2.1) должна содержать начальное условие $p(x, 0) = \varphi(x)$, $x \in \mathbb{R}$, краевые условия $p(-\infty, t) = p(\infty, t) = 0$, $t \geq 0$ и условие нормировки $\int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t) dT = 1$, $x \in \mathbb{R}$, $t \geq 0$.

В зависимости от вероятностной трактовки погрешности получаются различные уравнения для функции плотности распределения вероятностей стохастических процессов, однако средние значения удовлетворяют одной и той же задаче Коши:

$$\begin{cases} \frac{\partial \langle \hat{X} \rangle}{\partial t} = \langle f(\hat{X}, t) \rangle, \\ \langle \hat{X}(t=0) \rangle = \langle \varphi(\hat{X}) \rangle. \end{cases}$$

§ 2.3. ВЫВОД ВОЛНОВЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ, СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ КОТОРЫХ ОПИСЫВАЮТСЯ ЯВНОЙ И НЕЯВНОЙ РАЗНОСТНЫМИ СХЕМАМИ

Введем понятие волны вероятности для произвольного случайного процесса.

Определение 15. Две комплексно-сопряженные функции: $\Psi(\mathbf{q}, t) = a(\mathbf{q}, t) + ib(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t) = a(\mathbf{q}, t) - ib(\mathbf{q}, t)$, произведение которых равно плотности вероятности некоторого случайного процесса $p(\mathbf{q}, t) = \Psi(\mathbf{q}, t)\Psi^*(\mathbf{q}, t)$, называются *волнами вероятности*.

Определение 16. Локальными средними значениями случайной функции $\beta(\mathbf{q}, t)$ и случайного оператора $\hat{\xi}(\mathbf{q}, t)$ называются соответственно величины

$$\begin{aligned} \text{Lok} \langle \beta(\mathbf{q}, t) \rangle &\triangleq \Psi(\mathbf{q}, t) \beta(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \\ \text{Lok} \langle \hat{\xi}(\mathbf{q}, t) \rangle &\triangleq \Psi(\mathbf{q}, t) \hat{\xi}(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q} \end{aligned}$$

(здесь $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ — волны вероятности).

С учетом замечаний относительно выбора погрешности Δ , сделанных в § 2.2, стохастическое дифференциальное уравнение для локальных средних значений

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\Psi(q, t)q\Psi^*(q, t)dq)}{\partial t} = \\ & = \Psi(q, t)f(q, t)\Psi^*(q, t)dq + \Delta(f(q, t), \Psi(q, t), \Psi^*(q, t), q, t)dq, \end{aligned}$$

определяемое только моментной функцией первого порядка, может быть переписано так:

$$\frac{\partial(\Psi(q, t)q\Psi^*(q, t)dq)}{\partial t} = -q \frac{\partial(\Psi(q, t)f(q, t)\Psi^*(q, t))}{\partial q} dq. \quad (2.3.1)$$

Отсюда получаем:

$$\frac{\partial(\Psi(q, t)\Psi^*(q, t))}{\partial t} = - \frac{\partial(\Psi(q, t)f(q, t)\Psi^*(q, t))}{\partial q} \quad (2.3.2)$$

или

$$\begin{aligned} & \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \quad (2.3.3) \\ & = -f \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial q} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial q} \right) - \left(\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial q} \Psi \Psi^* + \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial q} \Psi^* \Psi \right) + \frac{U}{i\hbar_q} \Psi^* \Psi - \frac{U}{i\hbar_q} \Psi^* \Psi. \end{aligned}$$

Здесь появилась новая функция $U(q, t)$ и параметр \hbar_q , которых не было в исходном уравнении. Последнее уравнение распадается на два следующих:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -f(q, t) \frac{\partial \Psi}{\partial q} - \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial q} \Psi(q, t) + \frac{U(q, t)}{i\hbar_q} \Psi(q, t); \quad (2.3.4)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -f(q, t) \frac{\partial \Psi^*}{\partial q} - \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial q} \Psi^*(q, t) - \frac{U(q, t)}{i\hbar_q} \Psi^*(q, t). \quad (2.3.5)$$

Величина $U(q, t)/(i\hbar_q)$ пропадает после приведения уравнений (2.3.4)—(2.3.5) к виду (2.3.3). Для того чтобы выяснить смысл этой функции $U(q, t)$ и параметра \hbar_q , приведем другой вывод уравнений (2.3.4)—(2.3.5), основанный на физических принципах построения стохастических уравнений

для волн вероятностей при помощи разностного уравнения Гамильтона — Якоби.

Первый принцип заключается в том, что для случайной функции $Q(t, \omega)$, локальные средние значения которой подчиняются уравнению (2.3.1), вводится понятие действия $A(q, t)$, описываемого с помощью следующего аналога уравнения Гамильтона — Якоби:

$$\frac{\partial A(q, t)}{\partial t} = -f(q, t) \frac{\partial A(q, t)}{\partial q} - \frac{1}{2} \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} A(q, t) - U(q, t). \quad (2.3.6)$$

Второй принцип состоит в выборе фундаментальных единиц, кратно которым могут изменяться величины, считающиеся фундаментальными. Любая конструкция из этих величин, построенная с помощью каких-либо операторов, также фундаментальна. В настоящей работе постулируется фундаментальность обобщенного действия для произвольной величины q . Квант действия для q обозначается \hbar_q .

Третий принцип состоит в том, что при разностном описании допустимы лишь такие приращения обобщенного действия, при которых невозможны беспричинно растущие решения соответствующего уравнения Гамильтона — Якоби, когда аналог действия меняется кратно \hbar_q . Третий принцип выражается в виде принципа неопределенности и, таким образом, тесно связан с условием устойчивости явной разностной схемы для уравнения Гамильтона — Якоби.

Четвертый принцип, названный Луи де Бройлем принципом согласования фаз, выражает собой одну из форм связи детерминированных дискретных и кусочно-непрерывных и волновых стохастических решений разностных уравнений. Суть его состоит в том, что период и длина волн функций, описывающих волновые стохастические компоненты решений, связаны де Бройлевскими соотношениями с соответствующими аналогами энергии и импульса. По этому принципу внутри каждой сеточной ячейки аргументов уравнения Гамильтона — Якоби волновые компоненты представляют собой экспоненциальную комплексно-

значную волну с единичной амплитудой и единичным квадратом модуля. Фаза этой волны определяется количеством квантов \hbar_q аналога действия $A(q, t)$, когда \hbar_q и t изменяются на свои приращения Δq и τ . Таким образом, волновая компонента в простейшем случае представляется следующими интерференционными равенствами:

$$\Psi(q, t) = \sum_{k=\lfloor q/\Delta_q \rfloor = -\infty}^{\infty} \sum_{n=\lfloor t/\tau \rfloor = 0}^{\infty} \delta_{nk} \left(k = \left\lfloor \frac{t}{\tau} \right\rfloor, n = \left\lfloor \frac{q}{\Delta_q} \right\rfloor \right) \times \quad (2.3.7)$$

$$\times \exp \left\{ i \left[\frac{1}{\hbar_q} \frac{\partial A(q, t)}{\partial t} \right]_{q=k\Delta_q, t=n\tau} t \right\} \exp \left\{ i \left[\frac{1}{\hbar_q} \frac{\partial A(q, t)}{\partial q} \right]_{q=k\Delta_q, t=n\tau} q \right\}.$$

Здесь квадратными скобками обозначены целые части; δ — символ Кронекера, а $\lfloor q/\Delta_q \rfloor, \lfloor t/\tau \rfloor$ — величины из соответствующих сеточных ячеек.

Пятый принцип заключается в том, что из уравнений для волновых компонент должно получаться уравнение Гамильтона — Якоби, уравнение для локальных средних и средних случайной функции $Q(q, \omega)$.

Внутри каждой сеточной ячейки $q \in [k\Delta q, (k+1)\Delta q)$, $t \in [n\tau, (n+1)\tau)$, $k \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{N}$ продифференцируем соотношение (2.3.7):

$$\frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial t} = i \left(\frac{A(k\Delta q, (n+1)\tau) - A(k\Delta q, n\tau)}{\hbar_q \tau} \right) \Psi(q, t); \quad (2.3.8)$$

$$\frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial q} = i \left(\frac{A((k+1)\Delta q, n\tau) - A(k\Delta q, n\tau)}{\hbar_q \Delta q} \right) \Psi(q, t); \quad (2.3.9)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(q, t)}{\partial q^2} = - \left(\frac{A((k+1)\Delta q, n\tau) - A(k\Delta q, n\tau)}{\hbar_q \Delta q} \right)^2 \Psi(q, t). \quad (2.3.10)$$

Из уравнения (2.3.6) с помощью формул (2.3.8) и (2.3.9) получим уравнения (2.3.4) и (2.3.5).

Если рассматривается случайная функция, локальные средние которой подчиняются разностному уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\Psi(q, t + \tau)q\Psi^*(q, t + \tau)dq - \Psi(q, t + \tau)q\Psi^*(q, t + \tau)dq}{\tau} = & \quad (2.3.11) \\ = -q \frac{\partial(\Psi(q, t)f(q, t)q\Psi^*(q, t))}{\partial q} dq. \end{aligned}$$

то ему соответствует такое уравнение для плотности вероятности:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi(q, t + \tau)\Psi^*(q, t + \tau) - \Psi(q, t)\Psi^*(q, t + \tau)}{\tau} = \\ = -f(q, t) \left(\Psi(q, t) \frac{\partial\Psi(q, t)}{\partial q} + \Psi^*(q, t) \frac{\partial\Psi(q, t)}{\partial q} \right) - \Psi(q, t)\Psi^*(q, t) \frac{\partial f(q, t)}{\partial q}. \end{aligned}$$

Расщепление его на два симметричных уравнения приводит к следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi^*(q, t + \tau) + \Psi^*(q, t)}{2\Psi^*(q, t)} \frac{\Psi(q, t + \tau) - \Psi(q, t + \tau)}{\tau} = & \quad (2.3.12) \\ = -f(q, t) \frac{\partial\Psi(q, t)}{\partial q} - \frac{1}{2} \Psi(q, t) \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} - \frac{U(q, t)}{i\hbar_q} \Psi(q, t); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\Psi(q, t + \tau) + \Psi(q, t)}{2\Psi(q, t)} \frac{\Psi^*(q, t + \tau) - \Psi^*(q, t + \tau)}{\tau} = & \quad (2.3.13) \\ = -f(q, t) \frac{\partial\Psi^*(q, t)}{\partial q} - \frac{1}{2} \Psi^*(q, t) \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} + \frac{U(q, t)}{i\hbar_q} \Psi^*(q, t). \end{aligned}$$

Заметим, что уравнения (2.3.12) и (2.3.13) при $\tau \rightarrow 0$ переходят в уравнения (2.3.4) и (2.3.5).

Если стохастическое дифференциальное уравнение для локальных средних значений определяется только моментными функциями первого порядка и второго порядка, то оно имеет такой вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\Psi(q, t)q\Psi^*(q, t)dq)}{\partial t} = & \quad (2.3.14) \\ = -q \frac{\partial(\Psi(q, t)f(q, t)\Psi^*(q, t))}{\partial q} dq + \frac{1}{2} q \frac{\partial^2(\Psi(q, t)B(q, t)\Psi^*(q, t))}{\partial q^2} dq. \end{aligned}$$

Выпишем аналог уравнения Гамильтона — Якоби для (2.3.14):

$$\begin{aligned} \frac{\partial A(q, t)}{\partial t} + f(q, t) \frac{\partial A(q, t)}{\partial q} + \frac{1}{2} \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} A(q, t) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} \left(B(q, t) \frac{\partial A(q, t)}{\partial q} \right) + U(q, t) = 0. \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

С помощью формул (2.3.8)—(2.3.10) из (2.3.14) можно получить следующий аналог уравнения Шредингера:

$$\begin{aligned} i\hbar_q \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial t} = -i\hbar_q f(q, t) \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial q} - \frac{i\hbar_q}{2} \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} \Psi(q, t) - \\ - \frac{\hbar_q^2}{2} \frac{\partial}{\partial q} \left(B(q, t) \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial q} \right) - U(q, t) \Psi(q, t). \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ, СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ КОТОРЫХ ОПИСЫВАЮТСЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМИ УРАВНЕНИЯМИ ДЛЯ ВОЛН ВЕРОЯТНОСТЕЙ

§ 3.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛН ВЕРОЯТНОСТИ И ФОРМУЛИРОВКА УСЛОВИЙ ИХ СУЩЕСТВОВАНИЯ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ

Дифференциальные уравнения для стохастических величин привлекли внимание после появления известных работ, посвященных броуновскому движению. Простейшим случаем таких уравнений является уравнение Ланжевена, которое может быть представлено в виде

$$\frac{1}{2}m \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} - m \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle^2 + 3\pi\eta a \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \langle xX \rangle,$$

где угловыми скобками обозначены средние значения, m — масса частицы, a — ее диаметр, η — вязкость жидкости, в которой находится частица, X — флуктуационная сила, обусловленная толчками молекул жидкости, x — положение частицы, t — время.

В последние годы многие ставшие уже классическими дифференциальные модели физики, химии, биологии, медицины, экологии, социологии, использовавшиеся ранее для получения детерминированных решений, начинают преобразовываться в стохастические. Среди таких трансформаций отметим систему уравнений Вольтерра — Лотки, первоначально

предназначенную для описания в детерминированном приближении широкого класса явлений, моделирующих процессы рождения и гибели в терминах численности «жертв» (x) и «хищников» (y):

$$\begin{cases} \frac{d\langle x \rangle}{dt} = a\langle x \rangle - \alpha\langle x \rangle\langle y \rangle, \\ \frac{d\langle y \rangle}{dt} = \alpha\langle x \rangle\langle y \rangle - b\langle y \rangle. \end{cases}$$

В реальности величины численностей «жертв» и «хищников» флуктуируют около своих средних значений $\langle x \rangle$ и $\langle y \rangle$. Учет флуктуаций можно произвести, например, с помощью распределения вероятностей $P(x, y, t)$ численностей особей в данный момент времени t , удовлетворяющего уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & a(x-1)P(x-1, y, t) + \alpha(x+1)(y-1)P(x+1, y-1, t) + \\ & + b(y+1)P(x, y+1, t) - (ax + \alpha xy + by)P(x, y, t). \end{aligned}$$

Отметим, что это не единственный способ учета случайности процесса взаимодействия популяций.

В данной главе исследуются стохастические векторные величины, $\mathbf{q}(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t))^T$, средние значения компонент которых подчиняются обыкновенным дифференциальным уравнениям первого порядка

$$\frac{d\langle q_j \rangle}{dt} = \langle f_j(q_1, \dots, q_n, t) \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.1.1)$$

Условимся называть q_j j -й обобщенной координатой абстрактной материальной частицы, а t — обобщенным временем. Если реальные значения $t \in [a, +\infty)$, то преобразованием $t' = t - a$ область изменения этой величины можно привести к виду $[0, +\infty)$.

Определение 17. Волнами вероятности для случайного вектора $\mathbf{q}(t)$, компоненты которого удовлетворяют уравнениям (3.1.1), называются две комплексно-сопряженные

функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$, являющиеся нетривиальными ($\Psi \neq 0, \Psi^* \neq 0$) решениями уравнений

$$i\hbar_q i\hbar_q + \sum_{k=1}^n \left(i\hbar_q f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} + \frac{1}{2} i\hbar_q \Psi \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) + U(\mathbf{q}, t) \Psi = 0; \quad (3.1.2)$$

$$i\hbar_q \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \sum_{k=1}^n \left(i\hbar_q f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} + \frac{1}{2} i\hbar_q \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) + U(\mathbf{q}, t) \Psi^* = 0. \quad (3.1.3)$$

Здесь $t > 0$, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$, $a\hbar_q$ — некоторый параметр, равный кванту аналога действия, построенного с помощью $\mathbf{q}(t)$. Связь \hbar_q с начальной дисперсией величины $\mathbf{q}(t)$ будет обсуждаться ниже. Функция $U(\mathbf{q}, t)$ — аналог потенциальной энергии — в данной постановке может быть выбрана произвольно среди функций, для которых существуют решения уравнений (3.1.2) и (3.1.3), отвечающие волновым характеристикам обобщенной частицы. В ряде случаев удобно считать, что $U(\mathbf{q}, t) \in C^\infty[\mathbb{R}^{n+1}]$, в частности, можно взять $U(\mathbf{q}, t) = \text{const}$.

Определение 18. Произведение $\Psi(\mathbf{q}, t)$, $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ называется *плотностью вероятности* и обозначается $P(\mathbf{q}, t)$.

Поскольку «частица», описываемая случайным вектором $\mathbf{q}(t)$, в каждый момент t обязательно находится где-то в обобщенном пространстве \mathbb{R}^n , то вероятность ее обнаружения не должна зависеть от t и обязана равняться единице. Таким образом, несобственный интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = 1 \quad (3.1.4)$$

должен сходиться и не должен зависеть от обобщенного времени t . Достаточные для этого условия сформулированы в теореме 3.1.1.

Теорема 3.1.1. Если Ψ и Ψ^* — нетривиальные решения уравнений (3.1.2) и (3.1.3) и для любых $t \geq 0$, $j = 1, 2, \dots, n$ выполняется равенство

$$\lim_{\substack{q_i \rightarrow \pm\infty \\ i=1, 2, \dots, n}} f_j(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) = 0,$$

в частности, если $|f_j(\mathbf{q}, t)| \leq M = \text{const} > 0$ при $\mathbf{a} \leq \mathbf{q} \leq \mathbf{b}$ и $f_j(\mathbf{q}, t) \equiv 0$ при $\mathbf{q} < \mathbf{a}$ и $\mathbf{q} < \mathbf{b}$, то интеграл в (3.1.4) сходится и не зависит от обобщенного времени t .

Доказательство. Умножим уравнения (3.1.2) и (3.1.3) соответственно на Ψ^* и Ψ и сложим полученные равенства. Имеем

$$i\hbar_q \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} + \sum_{k=1}^n i\hbar_q \frac{\partial(\Psi\Psi^* f_k(\bar{q}, t))}{\partial q_j} = 0.$$

Проинтегрировав обе части последнего соотношения по q_j и воспользовавшись условием теоремы, получим следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} i\hbar_q \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} dq_1 \dots dq_n + i\hbar_q \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(f_j(\mathbf{q}, t)\Psi\Psi^*)}{\partial q_j} dq_1 \dots dq_i \dots dq_n = \\ = i\hbar_q \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} dq_1 \dots dq_n + \\ + i\hbar_q \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \lim_{\substack{b_j \rightarrow \pm\infty \\ a_j \rightarrow -\infty}} f_j(q_1, \dots, q_j, \dots, q_n, t) \Psi\Psi^* \Big|_{a_j}^{b_j} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_n = \\ = i\hbar_q \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} dq_1 \dots dq_n = 0. \end{aligned}$$

В силу теоремы о равномерной сходимости несобственного интеграла, зависящего от параметра, заключаем, что для всех $t \geq 0$ интеграл сходится:

$$J = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi\Psi^* \dots dq_1 \dots dq_n.$$

Отметим, что $J \neq 0$, так как в противном случае Ψ и Ψ^* были бы тривиальными решениями уравнений (3.1.2) и (3.1.3). Если $J \neq 0$, то, разделив Ψ и Ψ^* на \sqrt{J} , получим новые выражения для волн вероятности, которые удовлетворяют условию нормировки (3.1.4). \square

Условие нормировки можно сформулировать и с помощью собственных интегралов в виде так называемой «нормировки в ящике»:

$$\int_{-L_1/2}^{L_1/2} \dots \int_{-L_n/2}^{L_n/2} \Psi(\mathbf{q}, t)\Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = 1. \quad (3.1.5)$$

Для выполнения условий (3.1.4) и (3.1.5) будем искать функции Ψ и Ψ^* среди таких решений уравнений (3.1.2) и

(3.1.3), которые как функции от \mathbf{q} принадлежат пространству $L_2[\mathbb{R}^n]$ и удовлетворяют начальным условиям

$$\Psi(\mathbf{q}, 0) = \varphi(\mathbf{q}, \hbar_q), \quad \Psi^*(\mathbf{q}, 0) = \varphi^*(\mathbf{q}, \hbar_q), \quad (3.1.6)$$

где

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\mathbf{q}, \hbar_q) \varphi^*(\mathbf{q}, \hbar_q) dq_1 \cdots dq_n = 1$$

или

$$\int_{-L_1/2}^{L_1/2} \cdots \int_{-L_n/2}^{L_n/2} \varphi(\mathbf{q}, \hbar_q) \varphi^*(\mathbf{q}, \hbar_q) dq_1 \cdots dq_n = 1.$$

Кроме того, $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ должны удовлетворять либо граничным условиям на бесконечности:

$$\begin{cases} \lim_{q_j \rightarrow \pm\infty} \Psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_n, t) q_j^2 f_j(q_1, \dots, q_j, \dots, q_n, t) = 0, \\ \lim_{q_j \rightarrow \pm\infty} \Psi^*(q_1, \dots, q_j, \dots, q_n, t) q_j^2 f_j(q_1, \dots, q_j, \dots, q_n, t) = 0, \end{cases} \quad (3.1.7)$$

либо периодическим граничным условиям:

$$\begin{cases} \Psi(q_1, \dots, q_j = -L_j/2, \dots, q_n, t) = \Psi(q_1, \dots, q_j = L_j/2, \dots, q_n, t) = 0, \\ \Psi^*(q_1, \dots, q_j = -L_j/2, \dots, q_n, t) = \Psi^*(q_1, \dots, q_j = L_j/2, \dots, q_n, t) = 0. \end{cases} \quad (3.1.8)$$

В процессе доказательства теоремы 3.1.1 получено уравнение Лиувилля. Таким образом, справедлива следующая теорема.

Теорема 3.1.2. *Плотность вероятности $P(\mathbf{q}, t) = \Psi(\mathbf{q}, t) \times \Psi^*(\mathbf{q}, t)$, где функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ подчиняются уравнениям (3.1.2) и (3.1.3), удовлетворяет уравнению Лиувилля:*

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

§ 3.2. ТЕОРЕМЫ О ПОВЕДЕНИИ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ И ДИСПЕРСИЙ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ

Определение 19. *Средним значением $\langle f(\mathbf{q}, t) \rangle$ скалярной функции, зависящей от компонент вектора $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$, называется величина*

$$\langle f(\mathbf{q}(t), t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \cdots dq_n.$$

В частности, среднее значение $\langle q_i(t) \rangle$ для компоненты $q_i(t)$ имеет вид

$$\langle q_k(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) q_k \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \cdots dq_n.$$

Определение 20. Средними значениями операторов «обобщенной энергии» $i\hbar_q \partial / \partial t$ и « j -й компоненты обобщенного импульса» $-i\hbar_q \partial / \partial q_j$ называются соответственно следующие величины:

$$\begin{aligned} \left\langle i\hbar_q \frac{\partial}{\partial t} \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{q}, t) \left(i\hbar_q \frac{\partial \Psi(\bar{q}, t)}{\partial t} \right) dq_1 \cdots dq_n, \\ \left\langle -i\hbar_q \frac{\partial}{\partial q_k} \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{q}, t) \left(-i\hbar_q \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} \right) dq_1 \cdots dq_n. \end{aligned}$$

Теорема 3.2.1. Среднее значение $\langle q_j(t) \rangle$ j -й компоненты, случайного вектора $\mathbf{q}(t)$, поведение которого моделируется с помощью нетривиальных решений уравнений (3.1.2), (3.1.3) и условий (3.1.4), (3.1.6), (3.1.7), подчиняется уравнению (3.1.1).

Доказательство. Найдем

$$\begin{aligned} \frac{d\langle q_j(t) \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) q_j \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \cdots dq_n \right) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d(\Psi(\mathbf{q}, t) q_j \Psi^*(\mathbf{q}, t))}{dt} dq_1 \cdots dq_n = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d(\Psi(\mathbf{q}, t) q_j \Psi^*(\mathbf{q}, t))}{dt} dq_1 \cdots dq_n + \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi(\mathbf{q}, t) q_j \frac{d\Psi^*(\mathbf{q}, t)}{dt} \right) dq_1 \cdots dq_n. \end{aligned}$$

После учета (3.1.2) и (3.1.3) получим:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle q_j(t) \rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi \frac{\partial f_k}{\partial q_k} + \frac{i}{\hbar_q} U \Psi \right) q_j \Psi^* dq_1 \cdots dq_n - \\ &- \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi q_j \left(\sum_{k=1}^n f_k \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} + \frac{i}{\hbar_q} U \Psi^* \right) dq_1 \cdots dq_n = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} q_j \Psi + \Psi^* q_j f_k \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} + \Psi q_j \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) dq_1 \cdots dq_n = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k q_j \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial q_k} + \Psi q_j \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) dq_1 \cdots dq_n.
\end{aligned}$$

Первое слагаемое в скобках можно проинтегрировать по частям по q_k . С учетом (3.1.7) получим:

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

Теорема 3.2.2. Дисперсия $\sigma_j^2 = \langle q_j^2(t) \rangle - \langle q_j(t) \rangle^2$ решения j -го уравнения системы (3.1.1) подчиняется дифференциальному уравнению

$$\frac{d\sigma_j^2}{dt} = 2 \left(\langle f_j(\mathbf{q}, t) q_j \rangle - \langle q_j \rangle \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle \right). \quad (3.2.1)$$

Доказательство. Имеем:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma_j^2}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{q}, t) q_j^2 \Psi(\mathbf{q}, t) dq_1 \cdots dq_n \right) - 2 \langle q_j(t) \rangle \frac{d \langle q_j(t) \rangle}{dt} = \quad (3.2.2) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} q_j^2 \Psi dq_1 \cdots dq_n + \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial (q_j^2 \Psi)}{\partial t} dq_1 \cdots dq_n - 2 \langle q_j(t) \rangle \frac{d \langle q_j(t) \rangle}{dt} = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} q_j^2 \Psi dq_1 \cdots dq_n + \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* q_j^2 \frac{\partial \Psi}{\partial t} dq_1 \cdots dq_n + \\
&+ \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial q_j^2}{\partial t} \Psi dq_1 \cdots dq_n - 2 \langle q_j(t) \rangle \frac{d \langle q_j(t) \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} q_j^2 \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial t} dq_1 \cdots dq_n + \\
&+ 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* q_j \frac{\partial q_j}{\partial t} \Psi dq_1 \cdots dq_n - 2 \langle q_j(t) \rangle \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle.
\end{aligned}$$

Учитывая (3.1.2) и (3.1.3), имеем:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^n \left(-f_k \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} - \frac{1}{2} \Psi \frac{\partial f_k}{\partial q_k} + \frac{i}{\hbar_q} U \Psi \right) q_j^2 \Psi^* dq_1 \cdots dq_n + \\
&+ \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi q_j^2 \left(\sum_{k=1}^n \left(-f_k \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} - \frac{1}{2} \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} + \frac{i}{\hbar_q} U \Psi^* \right) \right) dq_1 \cdots dq_n =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} q_j^2 \Psi^* + \Psi^* q_j^2 f_k \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} + \Psi q_j^2 \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) dq_1 \dots dq_n = \\
&\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^n \left(f_k q_j^2 \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial q_k} + \Psi q_j^2 \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) dq_1 \dots dq_n.
\end{aligned}$$

Интегрируя по частям, получаем:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} q_j^2 f_k \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial q_k} dq_1 \dots dq_n = \left(q_j^2 f_k \Psi \Psi^* \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi \frac{\partial (q_j^2 f_k)}{\partial q_k} dq_1 \dots dq_n,$$

и с учетом (3.1.7):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} q_j^2 f_k \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial q_k} dq_1 \dots dq_n = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f_k}{\partial q_k} \Psi^* q_j^2 \Psi + 2 \Psi^* q_j f_k \Psi \right) dq_1 \dots dq_n.$$

Подставляя полученное выражение в (3.2.2), приходим к уравнению (3.2.1). \square

Теорема 3.2.3. Среднее значение j -й компоненты обобщенного импульса удовлетворяет уравнению

$$\frac{d \langle p_j(t) \rangle}{dt} = \left\langle - \sum_{k=1}^n p_k \frac{\partial f_k}{\partial q_j} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial U}{\partial q_j} \right\rangle.$$

Доказательство. Найдем производную от среднего значения j -й компоненты случайного вектора обобщенного импульса и воспользуемся уравнениями (3.1.2) и (3.1.3):

$$\begin{aligned}
\frac{d \langle p_j(t) \rangle}{dt} &= -i \hbar_q \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} dq_1 \dots dq_n \right) = \\
&= -i \hbar_q \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} + \Psi^* \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \right) dq_1 \dots dq_n = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(i \hbar_q \sum_{k=1}^n \left(f_k \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) + \Psi^* U \right) \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} dq_1 \dots dq_n + \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial}{\partial q_j} \left(i \hbar_q \sum_{k=1}^n \left(f_k \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \right) - \Psi U \right) dq_1 \dots dq_n = \\
&= i \hbar_q \sum_{k=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ f_k \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \right) \right\} dq_1 \dots dq_n + \\
&\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* U \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \Psi U \right) dq_1 \dots dq_n.
\end{aligned}$$

Легко показать, что

$$\begin{aligned}
\langle p_j \rangle &= \left\langle -i\hbar_q \frac{\partial}{\partial q_j} \right\rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar_q \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \right) dq_1 \cdots dq_n, \\
i\hbar_q \sum_{k=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(f_k \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial f_k}{\partial q_k} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \right) \right) dq_1 \cdots dq_n &= \\
= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar_q \left(\Psi^* \frac{\partial f_k}{\partial q_j} \frac{\partial \Psi}{\partial q_k} - \frac{\partial f_k}{\partial q_j} \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_k} \Psi \right) \right) dq_1 \cdots dq_n &= - \left\langle \sum_{k=1}^n p_k \frac{\partial f_k}{\partial q_j} \right\rangle, \\
\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} - \Psi \frac{\partial (\Psi U)}{\partial q_j} \right) dq_1 \cdots dq_n - \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial U}{\partial q_j} \Psi dq_1 \cdots dq_n &.
\end{aligned}$$

В итоге получаем:

$$\frac{d \langle p_j(t) \rangle}{dt} = - \left\langle \sum_{k=1}^n p_k \frac{\partial f_k}{\partial q_j} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial U}{\partial q_j} \right\rangle. \quad \square$$

§ 3.3. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ И СПОСОБ ЗАДАНИЯ \hbar_q

Введем обозначения для дисперсий взаимно сопряженных компонент обобщенной координаты q_j и обобщенного импульса p_j :

$$\begin{aligned}
\sigma_{q_j}^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(q_j - \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* q_j \Psi dq_1 \cdots dq_n \right)^2 \Psi dq_1 \cdots dq_n, \quad \sigma_{p_j}^2 = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-i\hbar_q \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \right) - \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-i\hbar_q \frac{\partial}{\partial q_j} \right) \Psi dq_1 \cdots dq_n \right)^2 \Psi dq_1 \cdots dq_n.
\end{aligned}$$

Теорема 3.3.1. Произведение дисперсий взаимно сопряженных компонент обобщенных координаты и импульса не меньше величины \hbar_q : $\sigma_{q_j}^2 \sigma_{p_j}^2 \geq \hbar_q^2 / 4$.

Из этой теоремы можно получить важное соотношение, позволяющее задать \hbar_q , если известна начальная дисперсия $\sigma_{q_j}^2(t=0)$.

Определение 21. Пусть известны начальные значения дисперсий взаимно сопряженных компонент обобщенных ко-

ординаты и импульса: $\sigma_{q_j}^2(t=0) = \sigma_{q_{j0}}^2 \neq 0$, $\sigma_{p_j}^2(t=0) = \sigma_{p_{j0}}^2 \neq 0$.
 Определим \hbar_q следующим образом:

$$\hbar_q = 2 \min_{j=1,2,\dots,n} (\sigma_{q_{j0}} \sigma_{p_{j0}}).$$

В частности, если положить $\sigma_{p_{j0}} = 1$, получим

$$\hbar_q = 2 \min_{j=1,2,\dots,n} \sigma_{q_{j0}}.$$

Рассмотрим линеаризованную систему (3.1.1):

$$\frac{d\langle p_j(t) \rangle}{dt} = \left\langle \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_k(\langle q_1(t) \rangle, \dots, \langle q_n(t) \rangle, t)}{\partial q_k} (q_k - \langle q_k(t) \rangle) \right\rangle, \quad j=1, 2, \dots, n.$$

Обозначим $a_{ij} = \partial f_j(\langle q_1(t) \rangle, \dots, \langle q_n(t) \rangle, t) / \partial q_i$. Будем считать, что все собственные векторы матрицы (a_{ij}) линейно независимы. Тогда с помощью замены переменных, которая является переходом к базису из собственных векторов, матрица (a_{ij}) может быть приведена к диагональному виду. Без ограничения общности вместо линеаризованной системы (3.1.1) рассмотрим систему вида

$$\frac{d\langle p_j(t) \rangle}{dt} = \lambda_j \langle q_j \rangle, \quad j=1, 2, \dots, n,$$

где λ_j — собственные значения матрицы (a_{ij}) .

Следующая теорема дает условие устойчивости волновых пакетов в линейном приближении.

Теорема 3.3.2. Если $\lambda_j < 0$, то $\lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \hbar_q \rightarrow \infty}} \sigma_{q_j}^2(t) = 0$. Если же

$\lambda_j > 0$, то $\lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \hbar_q \rightarrow \infty}} \sigma_{q_j}^2(t) = \infty$.

Доказательство. Докажем первую часть:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{q_j}^2}{dt} &= 2(\langle f_j(\mathbf{q}, t) q_j \rangle - \langle q_j \rangle \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* q_j \lambda_j \Psi dq_1 \dots dq_n - \\ &- 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* q_j \Psi dq_1 \dots dq_n \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \lambda_j q_j \Psi dq_1 \dots dq_n = 2\lambda_j \sigma_{q_j}^2, \end{aligned}$$

поэтому

$$\sigma_{q_j}^2 \leq \sigma_{q_j}^2(0) \exp(-2|\lambda_{2j}|t) = \frac{\hbar_q^2}{4} \exp(-|\lambda_{2j}|t) \xrightarrow[\hbar_q \rightarrow \infty]{t \rightarrow \infty} 0.$$

Вторая часть доказывается аналогично. \square

Следствие. Если

$$-\infty < \underline{\lambda}_j \leq \frac{\partial f_j}{\partial q_k} \leq \bar{\lambda}_j < 0, \quad q_j \in \mathbb{R}, \quad k=1, 2, \dots, n, \quad j=1, 2, \dots, n,$$

$$m\text{o} \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \hbar_q \rightarrow \infty}} \sigma_{q_j}^2(t) = 0.$$

Если же

$$0 < \underline{\lambda}_j \leq \frac{\partial f_j}{\partial q_k} \leq \bar{\lambda}_j < +\infty, \quad q_j \in \mathbb{R}, \quad k=1, 2, \dots, n, \quad j=1, 2, \dots, n,$$

$$m\text{o} \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \hbar_q \rightarrow \infty}} \sigma_{q_j}^2(t) = \infty.$$

ГЛАВА 4. ОПИСАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН, СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ КОТОРЫХ ПОДЧИНЯЮТСЯ СИСТЕМЕ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ, С ПОМОЩЬЮ ВОЛН ВЕРОЯТНОСТИ

§ 4.1. Волны вероятности в разностном описании и некоторые их свойства

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. Наличие нерегулярных хаотических режимов поведения характеристик, описывающих те или иные явления, делает предпочтительным использование, наряду с традиционными детерминистическими, и стохастических представлений.

В настоящее время описание марковских процессов для случайных величин чаще всего производится с помощью уравнения Колмогорова — Чепмена и его модификаций. С помощью этого уравнения можно количественно анализировать многие характеристики исследуемых стохастических явлений.

В то же время существуют такие аспекты поведения случайных величин, которые находятся вне интерпретационной области уравнения Колмогорова — Чепмена. Среди таких аспектов следует, прежде всего, отметить наличие

волновых решений разностных уравнений, тесно связанных с наблюдаемыми средними характеристиками. В самом деле, даже у простейшей разностной задачи для средних значений $\langle q(t) \rangle$ некоторой случайной величины Q

$$\begin{cases} \langle q(t+\tau) \rangle - \langle q(t) \rangle = \langle f(q(t)) \rangle; \\ \langle f(q) \rangle = C = \text{const}; \\ \langle q(0) \rangle = q_0, \quad t = 0, \tau, 2\tau, \dots, m\tau. \end{cases} \quad (4.1.1)$$

помимо решения $\Gamma(t) = q_0 + Ct/\tau$ на дискретной сетке $t = 0, \tau, 2\tau, \dots, m\tau$, 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: $\langle q(t) \rangle = A(t) + B(t)\Gamma(t) = A(t) + (q_0 + Ct/\tau)B(t)$. Простейшая явная разностная схема для усредненного значения температуры $\langle T(q, t) \rangle$

$$\begin{cases} \text{Cp} \frac{\langle T(q, t+\tau) \rangle - \langle T(q, t) \rangle}{\tau} = \lambda \frac{\langle T(q+s, t) \rangle - 2\langle T(q, t) \rangle + \langle T(q-s, t) \rangle}{s^2}, \\ \langle T(q, 0) \rangle = (1 + 1/\sqrt{\lambda})^{q/s}, \quad q = ms, \quad t = n\tau, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad n \in \mathbb{N}, \end{cases} \quad (4.1.2)$$

имеет решение

$$\begin{aligned} \langle T(q, t) \rangle &= A(q, t) + B(q, t)\Gamma(q, t) = \\ &= A(q, t) + B(q, t)(1 + \tau/\text{Cp})^{t/\tau} (1 + 1/\sqrt{\lambda})^{q/s}, \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} A(q \pm ms, t + n\tau) &= A((q \pm ms)/s \pm (t + n\tau)/\tau) = A(q, t) = 0; \\ B(q \pm ms, t + n\tau) &= B((q \pm ms)/s \pm (t + n\tau)/\tau) = B(q, t) = 1; \\ q &= ms, \quad t = n\tau, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

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 (4.1.1) может рассматриваться как усреднение стохастического разностного уравнения

$$q(t + \tau) - q(t) = f(q(t))$$

при независимых от q аргументах t и $t + \tau$, при которых производились и должны производиться при будущих экспериментальных проверках измерения. Отметим, что при таком пути построения модели уравнение усредняется целиком, а не строится уравнение $\langle q(t + \tau) \rangle - \langle q(t) \rangle = f(\langle q(t) \rangle)$ для средних значений.

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 уже почти столетие успешно используется аппарат квантовой физики. Однако в силу определенных трудностей такой аппарат не был разработан для произвольных случайных величин — не обязательно физической квантовой природы.

В данной главе для описания волновых свойств случайных величин, подчиняющихся разностным уравнениям, развивается подход с использованием волн вероятности.

Рассмотрение проводится для стохастических векторных величин $\mathbf{Q}(t) = (Q_1(t), Q_2(t), \dots, Q_n(t))^T$, средние значения компонент которых подчиняются либо явным обыкновенным разностным уравнениям первого порядка

$$\frac{\langle q_j(t + \tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} = \langle f_j(q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t), t) \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (4.1.3)$$

либо неявным уравнениям вида

$$\frac{\langle q_j(t+\tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} = \langle f_j(q_1(t+\tau), q_2(t+\tau), \dots, q_n(t+\tau), t+\tau) \rangle, \quad (4.1.4)$$

$$j=1, 2, \dots, n,$$

Для полного описания требуется еще задать начальные средние значения $\langle \mathbf{q}(0) \rangle = (\langle q_1(0) \rangle, \langle q_2(0) \rangle, \dots, \langle q_n(0) \rangle)^T$, ненулевые и ограниченные начальные значения дисперсий $\sigma_{q_j}^2(t=0) = \sigma_{q_{j_0}}^2 \neq 0$, которые неявно содержатся в начальном значении плотности вероятности $p(\mathbf{q}, 0)$, а также функцию $U(\mathbf{q}, t)$, определяющую волновые (в де Бройлевском смысле) свойства величины \mathbf{q} .

Определение 22. Уравнения

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau) + \Psi^*(\mathbf{q}, t))\frac{\Psi(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi(\mathbf{q}, t)}{\tau} + \quad (4.1.5) \\ & + \Psi^*(\mathbf{q}, t)\sum_{k=1}^n\left(i\hbar f_k(\mathbf{q}, t)\frac{\partial\Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar\Psi(\mathbf{q}, t)\frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k}\right) - \\ & - \Psi^*(\mathbf{q}, t)U(\mathbf{q}, t)\Psi(\mathbf{q}, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{q} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi(\mathbf{q}, t+\tau) + \Psi(\mathbf{q}, t))\frac{\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau} + \quad (4.1.6) \\ & + \Psi(\mathbf{q}, t)\sum_{k=1}^n\left(i\hbar f_k(\mathbf{q}, t)\frac{\partial\Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar\Psi^*(\mathbf{q}, t)\frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k}\right) + \\ & + \Psi^*(\mathbf{q}, t)U(\mathbf{q}, t)\Psi(\mathbf{q}, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{q} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

называются *уравнениями для волн вероятности*, отвечающими случайным векторам со средними значениями, подчиняющимися уравнениям (4.1.3).

Определение 23. Уравнения

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau) + \Psi^*(\mathbf{q}, t))\frac{\Psi(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi(\mathbf{q}, t)}{\tau} + \quad (4.1.7) \\ & + \Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau)\left(-\sum_{k=1}^n\left(i\hbar f_k(\mathbf{q}, t+\tau)\frac{\partial\Psi(\mathbf{q}, t+\tau)}{\partial q_k} + \frac{1}{2}i\hbar\Psi(\mathbf{q}, t+\tau)\frac{\partial f_k(\bar{\mathbf{q}}, t+\tau)}{\partial q_k}\right) - \right. \\ & \left. - U(\mathbf{q}, t+\tau)\Psi(\mathbf{q}, t+\tau)\right) = 0, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{q} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}i\hbar(\Psi(\mathbf{q}, t+\tau)+\Psi(\mathbf{q}, t))\frac{\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau)-\Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau}+ \quad (4.1.8) \\ & +\Psi(\mathbf{q}, t+\tau)\left(-\sum_{k=1}^n\left(i\hbar f_{k_c}(\mathbf{q}, t+\tau)\frac{\partial\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau)}{\partial q_k}+\frac{1}{2}i\hbar\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau)\frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t+\tau)}{\partial q_k}\right)+\right. \\ & \left.+U(\mathbf{q}, t+\tau)\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau)\right)=0, \quad t\geq 0, \quad \mathbf{q}\in\mathbb{R}^n \end{aligned}$$

называются *уравнениями для волн вероятности*, отвечающими случайным векторам со средними значениями, подчиняющимися уравнениям (4.1.4).

Определение 24. Нетривиальные решения $\Psi(\mathbf{q}, t) = a(\mathbf{q}, t) + ib(\mathbf{q}, t) \neq 0$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t) = a(\mathbf{q}, t) - ib(\mathbf{q}, t) \neq 0$ уравнений (4.1.5) и (4.1.6) [или (4.1.7) и (4.1.8)] называются *волнами вероятности для случайного вектора $\mathbf{Q}(t)$* , компоненты которого удовлетворяют уравнениям (4.1.3) или (4.1.4).

Определение 25. Произведение $p(\mathbf{q}, t) = \Psi(\mathbf{q}, t)\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ называется *плотностью вероятности*.

Величина \hbar в уравнениях (4.1.5), (4.1.6), (4.1.7), (4.1.8) определяется начальными значениями дисперсии случайной величины \mathbf{Q} :

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

и имеет смысл кванта обобщенного действия, построенного для \mathbf{q} и \mathbf{p} .

Величину $U(\mathbf{q}, t)$ назовем *функцией частотного спектра случайных векторов \mathbf{Q} и \mathbf{P}* . В ряде случаев из физических соображений удобно рассматривать случаи, когда $U(\mathbf{q}, t) \in C^\infty[\mathbb{R}^{n+1}]$, в частности, $U(\mathbf{q}, t) = \text{const}$.

Без ограничения общности все предлагаемые здесь теоремы будут сформулированы как для явной, так и для неявной моделей, однако, если это не будет специально оговариваться; доказательства проводятся только для явного случая — для неявного случая они аналогичны.

Теорема 4.1.1. Если Ψ и Ψ^* — нетривиальные решения уравнений (4.1.5), (4.1.6) [или (4.1.7), (4.1.8)], выполняется равенство

$$\lim_{q_i \rightarrow \pm\infty} f_j(\mathbf{q}, t) \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

(в частности, если $|f_j(\mathbf{q}, t)| \leq M = \text{const} > 0$ при $a_i \leq q_i \leq b_i$, $i = 1, 2, \dots, n$, $|f_j(\mathbf{q}, t)| \equiv 0$ при $q < a$ и $q > b$) и

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, 0) \Psi^*(\mathbf{q}, 0) dq_1 \dots dq_n = 1, \quad (4.1.9)$$

то при любых $t = k\tau$, $k \in \mathbb{N}$

$$J = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = 1. \quad (4.1.10)$$

Доказательство. Имеем:

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

Проинтегрировав первое слагаемое в скобках по q_j и воспользовавшись условием теоремы, получим следующую цепочку равенств (для произвольных положительных t):

$$\begin{aligned} & i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi(\mathbf{q}, t + \tau) \Psi^*(\mathbf{q}, t + \tau) - \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n + \\ & + i\hbar \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial (\Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) f_j(\mathbf{q}, t))}{\partial q_j} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_n = 0; \\ & i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi(\mathbf{q}, t + \tau) \Psi^*(\mathbf{q}, t + \tau) - \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n + \\ & + i\hbar \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \lim_{\substack{a_j \rightarrow -\infty \\ b_j \rightarrow +\infty}} f_j(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) \Big|_{a_j}^{b_j} \times \\ & \times \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_n = 0; \\ & i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi(\mathbf{q}, t + \tau) \Psi^*(\mathbf{q}, t + \tau) - \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n = 0. \end{aligned}$$

В силу сходимости несобственного интеграла (4.1.9), заключаем, что при $t = k\tau$, $k \in \mathbb{N}$

$$J = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = 1. \quad \square$$

Отметим, что $J(t=0) \neq 0$, так как в противном случае $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ были бы тривиальными решениями уравнений (4.1.5) и (4.1.6). Если $J(t=0) \neq 1$, то путем деления каждой функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ на \sqrt{J} получим новые выражения для волн вероятности, удовлетворяющие условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = 1, \quad t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (4.1.11)$$

Заметим, что условие нормировки можно сформулировать с помощью собственных интегралов в виде «нормировки в ящике»:

$$\int_{-L_1/2}^{L_1/2} \dots \int_{-L_n/2}^{L_n/2} \Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = 1, \quad t = k\tau, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (4.1.12)$$

Для выполнения условий (4.1.11)—(4.1.12) потребуем, чтобы функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ были решениями уравнений (4.1.5) и (4.1.6) [или (4.1.7) и (4.1.8)], принадлежащими (как функции от \mathbf{q}) пространству $L_2[\mathbb{R}^n]$.

Кроме того, функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ должны удовлетворять начальным условиям

$$\begin{cases} \Psi(\mathbf{q}, 0) = \varphi(\mathbf{q}, \hbar) = \sqrt{\alpha(\mathbf{q})P(\mathbf{q}, \hbar, 0)} + i\sqrt{(1-\alpha(\mathbf{q}))p(\mathbf{q}, \hbar, 0)}; \\ \Psi^*(\mathbf{q}, 0) = \varphi^*(\mathbf{q}, \hbar) = \sqrt{\alpha(\mathbf{q})p(\mathbf{q}, \hbar, 0)} - i\sqrt{(1-\alpha(\mathbf{q}))P(\mathbf{q}, \hbar, 0)}, \end{cases} \quad (4.1.13)$$

где $0 \leq \alpha(\mathbf{q}) \leq 1$ — функция весов действительной и мнимой частей начального распределения волновой функции,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\mathbf{q}, \hbar) \varphi^*(\mathbf{q}, \hbar) dq_1 \dots dq_n = 1 \quad (4.1.14)$$

ИЛИ

$$\int_{-L_1/2}^{L_1/2} \dots \int_{-L_n/2}^{L_n/2} \varphi(\mathbf{q}, \hbar) \varphi^*(\mathbf{q}, \hbar) dq_1 \dots dq_n = 1, \quad (4.1.15)$$

а также либо граничным условиям на бесконечности

$$\lim_{q_j \rightarrow \pm\infty} \Psi(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) q_j^2 \times \quad (4.1.16)$$

$$\times f_j(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = 0, \quad j=1, 2, \dots, n;$$

$$\lim_{q_j \rightarrow \pm\infty} \Psi^*(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) q_j^2 \times \quad (4.1.17)$$

$$\times f_j(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = 0, \quad j=1, 2, \dots, n,$$

либо условиям на границах «ящика»

$$\Psi(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j = -L_j/2, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = \quad (4.1.18)$$

$$= \Psi(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j = L_j/2, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = 0, \quad j=1, 2, \dots, n;$$

$$\Psi^*(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j = -L_j/2, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = \quad (4.1.19)$$

$$= \Psi^*(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j = L_j/2, q_{j+1}, \dots, q_n, t) = 0, \quad j=1, 2, \dots, n;$$

При доказательстве теоремы 4.1.1 фактически получены важные соотношения для плотности вероятности: она подчиняется уравнению Лиувилля. Это может быть сформулировано следующим образом.

Теорема 4.1.2. *Плотность вероятности $p(\mathbf{q}, t) = \Psi(\mathbf{q}, t)\Psi^*(\mathbf{q}, t)$, где функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ подчиняются уравнениям (4.1.5) и (4.1.6), удовлетворяют аналогу уравнения Лиувилля:*

$$\frac{p(\mathbf{q}, t + \tau) - p(\mathbf{q}, t)}{\tau} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial(f_k(\mathbf{q}, t)p(\mathbf{q}, t))}{\partial q_k} = 0. \quad (4.1.20)$$

Если функции $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ подчиняются уравнениям (4.1.7) и (4.1.8), то плотность вероятности $P(\bar{q}, t) = \Psi(\bar{q}, t)\Psi^*(\bar{q}, t)$, удовлетворяют другому аналогу уравнения Лиувилля:

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

§ 4.2. ТЕОРЕМЫ О ПОВЕДЕНИИ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ И ДИСПЕРСИЙ

Определение 26. Средним значением $\langle f(\mathbf{q}(t), t) \rangle$ скалярной функции $f(q_1, \dots, q_n, t)$, зависящей от компонент вектора $\mathbf{q}(t)$, назовем величину

$$\langle f(\mathbf{q}(t), t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n, \quad (4.2.1)$$

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

$$\langle q_j(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) q_j(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n. \quad (4.2.2)$$

Теорема 4.2.1. Среднее значение $\langle q_j(t) \rangle$ j -й компоненты случайного вектора $\mathbf{q}(t)$, поведение которого моделируется с помощью нетривиальных решений уравнений (4.1.5) и (4.1.6) [уравнений (4.1.7) и (4.1.8)] и условий (4.1.11), (4.1.19), подчиняется уравнениям (4.1.3) [уравнениям (4.1.4)].

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

$$\frac{\langle q_j(t+\tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi(\mathbf{q}, t+\tau) q_j(t+\tau) \Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi(\mathbf{q}, t) q_j(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n.$$

Воспользуемся тем же приемом в представлении разностной производной от $\Psi^* \Psi$, что и при доказательстве теоремы 4.1.1, а затем заменим частные производные от волновых функций с помощью их выражений из (4.1.5) и (4.1.6):

$$\begin{aligned} & \frac{\langle q_j(t+\tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi(\mathbf{q}, t+\tau) q_j(t+\tau) \Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi(\mathbf{q}, t) q_j(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi(\mathbf{q}, t) \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{i}{\hbar} U \Psi(\mathbf{q}, t) \right) q_j \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n - \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) q_j \left(\sum_{k=1}^n f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{1}{2} \Psi^*(\mathbf{q}, t) \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} - \frac{i}{\hbar} U \Psi^*(\mathbf{q}, t) \right) dq_1 \dots dq_n = \\ & = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{k=1}^n f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} q_j(t) \Psi(\mathbf{q}, t) + \Psi^*(\mathbf{q}, t) q_j(t) f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \right. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

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

Интеграл от первого слагаемого в фигурных скобках можно взять по частям по q_k . С учетом того, что на бесконечности выполняются условия (4.1.16), (4.1.17), получим:

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

Подставив последнее выражение в соотношение (4.2.3), приходим к уравнению (4.1.3). \square

Теорема 4.2.1 потребует для получения уравнений для дисперсии j -й компоненты случайного вектора.

Теорема 4.2.2. Дисперсия $\sigma_j^2(t) = \langle q_j^2(t) \rangle - \langle q_j(t) \rangle^2$ решения j -го уравнения системы (4.1.3) подчиняется разностному уравнению

$$\frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = 2 \langle f_j(\bar{q}, t) q_j \rangle - \tau \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle^2 - 2 \langle q_j(t) \rangle \langle f_j(\bar{q}, t) \rangle. \quad (4.2.4)$$

Дисперсия решения j -го уравнения системы (4.1.4) подчиняется разностному уравнению

$$\begin{aligned}
\frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = & 2 \langle f_j(\mathbf{q}(t+\tau), t+\tau) q_j(t+\tau) \rangle - \quad (4.2.5) \\
& - \tau \langle f_j(\mathbf{q}(t+\tau), t+\tau) \rangle^2 - 2 \langle q_j(t+\tau) \rangle \langle f_j(\mathbf{q}(t+\tau), t+\tau) \rangle
\end{aligned}$$

Доказательство. Имеем:

$$\frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau) q_j^2(t) \Psi(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi^*(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) \Psi(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n -$$

$$-\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi^*(\mathbf{q}, t+\tau)q_j(t)\Psi(\mathbf{q}, t+\tau) - \Psi^*(\mathbf{q}, t)q_j(t)\Psi(\mathbf{q}, t)}{\tau} dq_1 \dots dq_n\right)^2$$

Заменим частные разностные производные по времени от функций $\Psi(\mathbf{q}, t)$ и $\Psi^*(\mathbf{q}, t)$ при помощи уравнений (4.1.5) и (4.1.6):

$$\begin{aligned} & \frac{\sigma_j^2(t+\tau) - \sigma_j^2(t)}{\tau} = \tag{4.2.6} \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^n \left(-f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} - \frac{1}{2} \Psi(\mathbf{q}, t) \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} - \frac{i}{\hbar} U \Psi(\mathbf{q}, t) \right) q_j^2(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n + \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^n \left(-f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} - \frac{1}{2} i \hbar \Psi^*(\mathbf{q}, t) \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} + \frac{i}{\hbar} U \Psi^*(\mathbf{q}, t) \right) dq_1 \dots dq_n - \\ & \quad - \frac{\langle q_j(t+\tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle}{\tau} (\langle q_j(t+\tau) \rangle + \langle q_j(t) \rangle) = \\ & = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^n \left(f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} q_j^2(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) + \Psi(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) f_k(\mathbf{q}, t) \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} \right. \\ & \left. + \Psi(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} \right) dq_1 \dots dq_n - \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle (\langle q_j(t+\tau) \rangle - \langle q_j(t) \rangle + 2\langle q_j(t) \rangle) = \\ & = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^n \left(f_k(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) \frac{\partial (\Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t))}{\partial q_k} + \Psi(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) \Psi^*(\mathbf{q}, t) \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} \right) dq_1 \dots dq_n - \\ & \quad - \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle (\tau \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle + 2\langle q_j(t) \rangle). \end{aligned}$$

Интеграл от первого слагаемого в скобках можно взять по частям по q_k . С учетом того, что на бесконечности выполняются условия (4.1.16), (4.1.17), получим:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f_k(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) \frac{\partial (\Psi(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t))}{\partial q_k} dq_1 \dots dq_n = \tag{4.2.7} \\ & = (\Psi(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) f_k(\mathbf{q}, t) \Psi^*(\mathbf{q}, t)) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial (q_j^2(t) f_k(\mathbf{q}, t))}{\partial q_k} \Psi^*(\mathbf{q}, t) \Psi(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f_k(\mathbf{q}, t)}{\partial q_k} \Psi^*(\mathbf{q}, t) q_j^2(t) \Psi(\mathbf{q}, t) + 2\Psi^*(\mathbf{q}, t) q_j(t) f_k(\mathbf{q}, t) \Psi(\mathbf{q}, t) dq_1 \dots dq_n. \end{aligned}$$

Подставив (4.2.7) в (4.2.6), придем к уравнению (4.2.4). \square

Замечание. Устремив $\tau \rightarrow 0$, из уравнений (4.2.4) и (4.2.5) получим уравнение

$$\frac{d\sigma_j^2(t+\tau)}{dt} = 2\langle f_j(\mathbf{q}, t) q_j(t) \rangle - 2\langle q_j(t) \rangle \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle \tag{4.2.8}$$

для дисперсии случайного вектора $\mathbf{Q}(t)$, средние значения компонент которого подчиняются дифференциальным уравнениям

$$\frac{d\langle q_j(t) \rangle}{dt} = \langle f_j(\mathbf{q}, t) \rangle, \quad j=1, 2, \dots, n. \quad (4.2.9)$$

Введем понятие случайного оператора, который назовем обобщенным импульсным шумом по отношению к \mathbf{Q} .

Определение 27. Случайный векторный оператор

$$\mathbf{p} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_n} \right)^T$$

называется *импульсным шумом* по отношению к случайному вектору $\mathbf{Q}(t) = (Q_1(t), Q_2(t), \dots, Q_n(t))^T$, подчиняющемуся уравнению (4.1.3) или (4.1.4).

Определение 28. Средним значением j -й компоненты случайного векторного оператора $p_j = -i\hbar \partial / \partial q_j$ называется величина

$$\begin{aligned} \langle p_j(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{q}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_j} \right) dq_1 \dots dq_n = \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{q}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_j} \right) dq_1 \dots dq_n = \\ &= - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^*(\mathbf{q}, t) i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial q_j} - \Psi(\mathbf{q}, t) i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{q}, t)}{\partial q_j} \right) dq_1 \dots dq_n. \end{aligned}$$

§ 4.3. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ЯВНОЙ МОДЕЛИ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Подставим (в соответствии с определением) волны вероятности в виде сумм действительной и чисто мнимой частей

$$\Psi^*(q, t) = a(q, t) - ib(q, t), \quad \Psi(q, t) = a(q, t) + ib(q, t)$$

в уравнения (4.1.5) и (4.1.6) и выпишем получаемые при этом уравнения для действительной и мнимой частей. Для действительной части получим:

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

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

Для мнимой части

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

Если ввести обозначения

$$\alpha(q, t) = a^2(q, t) + b^2(q, t) - \tag{4.3.1} \\ - \tau \left(f(q, t) \frac{\partial}{\partial q} (a^2(q, t) + b^2(q, t)) + \frac{\partial f(q, t)}{\partial q} (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \right) = \\ = a^2(q, t) + b^2(q, t) - \tau \frac{\partial (f(q, t)(a^2(q, t) + b^2(q, t)))}{\partial q}; \\ \beta(q, t) = -\tau \left(f(q, t) \left(a(q, t) \frac{\partial b(q, t)}{\partial q} - b(q, t) \frac{\partial a(q, t)}{\partial q} \right) + \right. \\ \left. + \frac{(a^2(q, t) + b^2(q, t))U(q, t)}{\hbar} \right) = 0,$$

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

$$\begin{cases} a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau) = \alpha(q, t); \\ a(q, t)b(q, t + \tau) - b(q, t)a(q, t + \tau) = \beta(q, t). \end{cases} \tag{4.3.2}$$

Решение этой системы имеет следующий вид:

$$a(q, t + \tau) = \tag{4.3.3} \\ = \frac{-\beta(q, t)b(q, t) \pm \left| a(q, t) \sqrt{\alpha(q, t)(a^2(q, t) + b^2(q, t)) - \beta^2(q, t)} \right|}{a^2(q, t) + b^2(q, t)}; \quad b(q, t + \tau) = \\ = \text{sign}(a(q, t)) \frac{(\beta(q, t)|a(q, t)| \pm b(q, t) \sqrt{\alpha(q, t)(a^2(q, t) + b^2(q, t)) - \beta^2(q, t)})}{a^2(q, t) + b^2(q, t)}.$$

Рассмотрим реализацию алгоритма для решения простейшей эволюционной задачи:

$$\begin{cases} \langle q(t+\tau) \rangle - \langle q(t) \rangle = -k \langle q(t) \rangle, & t=0, \tau, 2\tau, 1\dots, m\tau, \\ \langle q(0) \rangle = q_0, \quad \sigma^2(0) = \sigma_0, \quad \hbar = 2\sigma(0), \\ \Psi(q, 0) = \sqrt{\frac{J_0^2 q^{2n} (1-q)^{2n}}{2}} + i \sqrt{\frac{J_0^2 q^{2n} (1-q)^{2n}}{2}}. \end{cases}$$

Имеем:

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

Здесь квадратные скобки обозначают целые части.

Если $\tau < 1/(2k)$, то дисперсия положительна и убывает при любых начальных функциях для волн вероятности, при которых существует решение поставленной задачи.

При $\tau = 1/(2k)$ дисперсия «забывает» свое начальное значение.

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

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

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

$$U(q, \tau) \leq \sqrt{\frac{\hbar^2 J_0^2 q^{2n-1} (1-q)^{2n-1} (q(1+(2n+1)k\tau) - q^2(1+(4n+1)k\tau))}{2\tau^2}}, \quad q \in [0, 1],$$

$$U(q, \tau) \equiv 0, \quad q \notin [0, 1],$$

подкоренное выражение будет неотрицательным и решение задачи будет иметь смысл. Отсюда можно сделать вывод, что величина q никогда не выйдет за пределы области $[0, 1]$, где было отлично от нуля начальное значение плотности вероятности.

§ 4.4. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ НЕЯВНОЙ МОДЕЛИ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Вновь подставим волны вероятности в виде суммы действительной и чисто мнимой частей в уравнения (4.1.7) и (4.1.8), соответствующие однокомпонентному вектору q , и выпишем получаемые при этом уравнения для действительной и мнимой частей:

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

После приведения подобных членов полученную систему удобно переписать так:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial(a^2(q, t+\tau)+b^2(q, t+\tau))}{\partial q} + \tag{4.4.1} \\
& + \frac{1}{\tau f(q, t+\tau)} \frac{\partial f(q, t+\tau)}{\partial q} (a^2(q, t+\tau)+b^2(q, t+\tau)) = \frac{a^2(q, t)+b^2(q, t)}{\tau f(q, t+\tau)}; \\
& a(q, t)b(q, t+\tau)-b(q, t)a(q, t+\tau)+ \\
& + \tau \left(f(q, t+\tau) \left(a(q, t+\tau) \frac{\partial b(q, t+\tau)}{\partial q} - b(q, t+\tau) \frac{\partial a(q, t+\tau)}{\partial q} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{(a^2(q, t+\tau)+b^2(q, t+\tau))U(q, t+\tau)}{\hbar} \right) = 0.
\end{aligned}$$

Если решить задачу Коши для дифференциального уравнения (4.4.1) 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:

$$\begin{aligned}
p(q, t+\tau) &= a^2(q, t+\tau) + b^2(q, t+\tau) = \\
&= \exp\left(-\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) \left(-\int_0^q (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq + C \right),
\end{aligned}$$

где

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

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

$$\begin{aligned}
p(q, t+\tau) &= a^2(q, t+\tau) + b^2(q, t+\tau) = \\
&= \exp\left(-\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) \left(-\int_0^q (a^2(q, t) + b^2(q, t)) \exp\left(\frac{1}{\tau} \int_0^q \frac{dq}{f(q)}\right) dq + \right.
\end{aligned}$$

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

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

§ 4.5. РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ПРОСТЕЙШИХ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим задачу

$$\begin{cases}
\frac{\langle q(t+\tau) \rangle - \langle q(t) \rangle}{\tau} = -\langle kq(t) \rangle, \\
\langle q(0) \rangle = \frac{1}{\eta}, \quad \sigma^2(0) = \langle q^2(0) \rangle - \langle q(0) \rangle^2 = \frac{1}{\eta^2}, \quad U = \hbar = \frac{2}{\eta}, \\
a(q, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \eta \exp(-\eta q), \quad b(q, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \eta \exp(-\eta q), \\
p(q, 0) = a^2(q, 0) + b^2(q, 0) = \eta \exp(-\eta q), \quad q \in \mathbb{R}.
\end{cases}$$

Из формул (4.2.8) и (4.2.9) следует, что $a(q, \tau)$ и $b(q, \tau)$ существуют, когда подкоренное выражение

$$\alpha(q, 0) (a^2(q, 0) + b^2(q, 0)) - \beta^2(q, 0) = 1 + k\tau - k\tau\eta q - U^2/\hbar^2 \geq 0.$$

Таким образом, область существования волновых функций сжалась до конечного отрезка $q \in [0, 1/\eta]$, на котором необходимо произвести перенормировку $a(q, \tau)$ и $b(q, \tau)$.

Цель проведенного здесь рассмотрения заключалась в установлении связи между аппаратом конечных разно-

стей и дискретно-волновым характером проявления характеристик случайных процессов. В качестве резюмирующих положений отметим следующие.

Первое из них состоит в том, что для наиболее полного отражения корпускулярно-волнового дуализма при описании широкого класса случайных процессов, по-видимому, предпочтительнее использовать разностные, а не дифференциальные стохастические уравнения.

Во втором положении необходимо отметить, что предложенные здесь разностно-дифференциальные уравнения (4.1.5), (4.1.6), (4.1.7), (4.1.8), как и порождающие их разностные уравнения (4.1.3) и (4.1.4), нелинейны. Это значительно осложняет описание проявления волновых свойств моделируемых явлений, поскольку принцип суперпозиции решений, свойственный уравнениям с линейными операторами, здесь не выполняется. Однако при $\tau \rightarrow 0$ уравнения (4.1.5)—(4.1.8) переходят в соответствующие линейные дифференциальные уравнения для волн вероятности, которые построены для задач, основанных на обыкновенных стохастических дифференциальных уравнениях первого порядка.

Третье положение, которое здесь необходимо отметить, тесно связано с существующей практикой исследования динамических разностных моделей. Поскольку при анализе циклического или хаотического режимов поведения динамической величины 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 $q(t)$: $q(t + n\tau) = f(f(\dots f(q(t))\dots))$, $n \in \mathbb{N}$, то для полноты описания случайной величины, чье поведение моделируется уравнениями (4.1.3), (4.1.5), (4.1.6), необходимо к этим уравнениям присовокупить соответствующие уравнения при приращениях t , кратных $n\tau$.

Четвертое положение, так же как и третье, имеет отношение к сеточным характеристикам получаемых из эксперимента разностных уравнений, а именно состоит в том, что сеточные характеристики могут быть и непостоянны. Предлагаемые здесь алгоритмы можно распространить и на случай переменных приращений независимого аргумента.

В пятом положении отметим, что предложенный здесь подход не ограничен только явными и неявными разностными схемами, но может быть легко распространен и на другие виды разностных уравнений. Приоритетное же рассмотрение именно явной и неявной моделей обусловлено тем, что эти модели наиболее часто используются на практике, поскольку экспериментальные измерения чаще всего двухточечны и обобщенные скорости изменения средних значений относятся либо к начальной точке, либо к конечной точке обобщенного времени.

Шестое положение касается предложенных алгоритмов решения разностно-дифференциальных волновых уравнений. Этим алгоритмам свойственны особенности, которые необходимо учитывать на практике.

Первая особенность заключается в том, что 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 $\alpha(q, t) = p(q, t + \tau) = a^2(q, t + \tau) + b^2(q, t + \tau)$ в формулах (4.3.1) и (4.3.2) начинает принимать отрицательные значения, либо подкоренное выражение в формулах (4.3.3) становится отрицательным. Во избежании потери смысла такого решения на данных отрезках следует положить волновую функцию тождественно равной нулю и произвести ее перенормировку с учетом новой области определения.

Вторая особенность состоит в возникновении таких областей, где либо теряется устойчивость алгоритма, либо резко возрастает дисперсия, либо появляются точки, в которых функции $f_k(\mathbf{q}, t)$ или их производные обращаются в бесконечность. В некоторых случаях подобных ситуаций можно избежать путем перехода к импульсному представлению.

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.

ГЛАВА 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ БРОУНОВСКОЙ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

§ 5.1. ПРИМЕР ОПИСАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ ЗАРЯЖЕННОЙ БРОУНОВСКОЙ ЧАСТИЦЫ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Для изучения волновых аспектов случайных процессов микромира вот уже почти столетие успешно используется аппарат квантовой физики. Однако в силу определенных трудностей такой аппарат не был разработан для произвольных случайных величин — не обязательно физической квантовой природы.

Рассмотрим один важный пример, относящийся к описанию случайного одномерного процесса со стационарным гауссовским распределением

$$p(q, t) = \frac{1}{2\hbar_q \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{2(q-a)^2}{\hbar_q^2}\right).$$

Если положить $p(q, t) = \Psi(q, t)\Psi^*(q, t)$, а затем подставить $\Psi^*(q, t) = p(q, t)/\Psi(q, t)$ в уравнение для функций $\Psi(q, t)$ и $\Psi^*(q, t)$, то получим следующее решение, которое записано с точностью до нормировочного множителя:

$$\Psi(q, t) = \exp\left(-i\frac{U(t)}{\hbar_q}\right) \sqrt{\frac{1}{2\hbar_q \sqrt{2\pi}}} \exp\left(-\frac{2(q-a)^2}{\hbar_q^2}\right).$$

Найденная функция описывает колебания с частотой $\omega = U/\hbar_q$ около среднего значения $\langle q \rangle = a$. Соответственно

для полного описания поведения случайной величины q даже в случае стационарности $\langle q(t) \rangle = a = \text{const}$ наблюдаемого во времени среднего значения необходимо задание не только начальной дисперсии, но и частотной характеристики величины q , определяемой величиной $U(q)$. Таким образом, $U(q)$ задает частоту флуктуаций около среднего стационарно наблюдаемого значения случайной величины.

Подобная ситуация может иметь место в эксперименте с фиксированной в электростатическом поле броуновской частицей в середине ($q = a$) узкого сосуда с жидкостью, находящейся при постоянной температуре. Вверху и внизу сосуда расположены два более мощных заряда, одноименных с зарядом частицы. Толщина сосуда чуть больше диаметра частицы. Постоянные толчки со стороны молекул приводят к незначительным отклонениям частицы от положения равновесия, в которое она постоянно приводится фиксирующим электростатическим полем (или с помощью других воздействий, подобных упругим силам).

Среднее значение, дисперсию и частоту колебаний можно определить путем экспериментальных измерений. Заданием этих величин наблюдаемый случайный процесс будет полностью определен, и его описание предпочтительнее вести с помощью предложенного здесь подхода.

§ 5.2. ПРОХОЖДЕНИЕ БРОУНОВСКОЙ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

В предыдущем параграфе была предложена модель описания колебательного движения заряженной броуновской частицы, помещенной в тонкий сосуд, на концах которого расположены одноименные заряды. Управляющие уравнения не были основаны на уравнении Ланжевена, кроме того, не было конкретизировано значение аналога постоянной Планка. Здесь предлагается описывать броуновскую частицу с помощью уравнений шредингеровского типа для волны вероятности $\Psi(x, t)$ и комплексно-сопряженной к ней функции $\Psi^*(x, t)$:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = i \frac{\hbar_B}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi(x, t) \right) + \Psi(x, t) \frac{U(x, t)}{i\hbar_B}; \quad (5.2.1)$$

$$\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} = -i \frac{\hbar_B}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} - \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi^*(x, t) \right) - \Psi^*(x, t) \frac{U(x, t)}{i\hbar_B}. \quad (5.2.2)$$

Теорема 5.2.2. Средние значения, соответствующие уравнениям (5.2.1) и (5.2.2), подчиняются уравнению

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} + 6\pi\eta R_0 \frac{d \langle x \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \right\rangle. \quad (5.2.3)$$

Доказательство. Среднее значение координаты

$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) x \Psi^*(x, t) dx$ продифференцируем по времени t :

$$\frac{d \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) x \Psi^*(x, t) dx}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} x \Psi^*(x, t) + \Psi(x, t) x \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \right) dx.$$

Заменим производные с помощью уравнений (5.2.1) и (5.2.2):

$$\begin{aligned} \frac{d \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi x \Psi^* dx}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i \frac{\hbar_B}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi \right) + \Psi \frac{U}{i\hbar_B} \right) x \Psi^* + \\ &+ \Psi x \left(-i \frac{\hbar_B}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi^* \right) - \Psi^* \frac{U}{i\hbar_B} \right) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i \frac{\hbar_B}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} x \Psi^* - \Psi x \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) - x \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial x} + \Psi \Psi^* \right) \right) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i \frac{\hbar_B}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} x \Psi^* - \Psi x \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) - x \frac{6\pi\eta R_0}{m} \frac{\partial (x \Psi \Psi^*)}{\partial x} \right) dx. \end{aligned}$$

С помощью интегрирования по частям получаем:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial (x \Psi \Psi^*)}{\partial x} dx &= x^2 \Psi \Psi^* \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi x \Psi^* dx = \langle x \rangle; \\ \frac{d \langle x \rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} i \frac{\hbar_B}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} x \Psi^* + \Psi x \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) dx + \frac{6\pi\eta R_0}{m} \langle x \rangle; \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi dx = x \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial (x \Psi)}{\partial x} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial (x \Psi)}{\partial x} dx;$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi dx = \Psi^* \frac{\partial (x \Psi)}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 (x \Psi)}{\partial x^2} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 (x \Psi)}{\partial x^2} dx.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} i \frac{\hbar_B}{2m} \left(x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 (x \Psi)}{\partial x^2} \right) dx + \frac{6\pi\mu R_0}{m} \langle x \rangle = \\ &= -i \frac{\hbar_B}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx + \frac{6\pi\mu R_0}{m} \langle x \rangle = \frac{p}{m} + \frac{6\pi\mu R_0}{m} \langle x \rangle, \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

где

$$m \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \langle p \rangle —$$

среднее значение импульса.

Вновь дифференцируя уравнение (5.2.4) по времени и дважды интегрируя по частям, получим уравнение (5.2.3). \square

Рассмотрим отдельно интегральный член. Поскольку

$$\begin{aligned} i\hbar_B \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar_B^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} - \\ &- i\hbar_B \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi(x,t) \right) + \Psi(x,t)U(x); \\ -i\hbar_B \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar_B^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x,t)}{\partial x^2} + \\ &+ i\hbar_B \frac{6\pi\eta R_0}{m} \left(x \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi^*(x,t) \right) + \Psi^*(x,t)U(x), \end{aligned}$$

то

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-\frac{\hbar_B^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi \right) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* i\hbar_B 6\pi\eta R_0 \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \Psi \right) dx + \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{\hbar_B^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U\Psi^* \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{+\infty} i\hbar_B 6\pi\eta R_0 \left(x \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} + \Psi^* \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \\ = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\partial (U\Psi)}{\partial x} - U \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx. \end{aligned}$$

Многие характеристики броуновского движения были получены с помощью уравнения Ланжевена

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 6\pi\eta R_0 \frac{dx}{dt} = F_x,$$

где впервые в детерминированную модель была включена случайная сила F_x .

Стохастическая модель поведения броуновских частиц успешно реализовывалась с помощью дифференциального уравнения Фоккера — Планка для функции плотности распределения вероятности $p(x, t)$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad (5.2.5)$$

где p — функция плотности вероятности, а D — коэффициент диффузии, равный для поступательного движения $D_{\text{пост.}} = kT / (6\pi\eta R_0)$, а для вращательного — $D_{\text{вращат.}} = kT / (8\pi\eta (R_0)^3)$.

Следует отметить, что дискретный характер перемещения броуновской частицы логичнее было бы описывать явной разностной схемой для уравнения (5.2.5):

$$\frac{p(t_i + \tau, x_j) - p(t_i, x_j)}{\tau} = D \frac{p(t_i, x_j + l) - 2p(t_i, x_j) + p(t_i, x_j - l)}{l^2}, \quad (5.2.6)$$

для которой должно выполняться условие устойчивости $l^2 / \tau > 2D$. Если обе части этого неравенства умножить на массу броуновской частицы, то получим аналог соотношения неопределенности Гейзенберга $(ml / \tau)l > 2mD$, в котором ml / τ можно трактовать как неопределенность импульса, l как неопределенность координаты, а $\hbar_B = mD / 2$ как аналог постоянной Планка. Для частицы массой $m = 5 \cdot 10^{-17}$ кг и размером $R_0 = 10^{-7}$ м, находящейся в воде при температуре $T = 293^0$ К, величина аналога постоянной Планка на четыре порядка выше фундаментальной постоянной Планка $\hbar = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с: (постоянная Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/с, коэффициент вязкости воды $\eta = 10^{-3}$ Па·с). Имеем для поступательного движения

$$\hbar_{B, \text{поступ.}} = \frac{5 \cdot 10^{-17} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 293}{2 \cdot 6 \cdot 3,14 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-7}} = 5,37 \cdot 10^{-30} \text{ Дж} \cdot \text{с},$$

для вращательного движения:

$$\hbar_{B, \text{вращат.}} = \frac{5 \cdot 10^{-17} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 293}{2 \cdot 8 \cdot 3,14 \cdot 10^{-3} \cdot (10^{-7})^3} = 4,02 \cdot 10^{-16} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Если коэффициент диффузии поваренной соли в воде при температуре $T = 293^0 \text{ К}$ принять равным $D = 1,1 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, то получим $\hbar_{B, \text{поступ.}} = 2,75 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \cdot \text{с}$, здесь уже аналог постоянной Планка на восемь порядков выше значения $\hbar = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$.

Для воздуха коэффициент динамической вязкости при давлении в 1 атм и температуре $T = 285^0 \text{ К}$ равен $\eta = 866 \cdot 10^{-8} \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$, аналог постоянной Планка для поступательного движения равен

$$\hbar_{B, \text{поступ.}} = \frac{5 \cdot 10^{-17} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 288}{2 \cdot 6 \cdot 3,14 \cdot 866 \cdot 10^{-8} \cdot 10^{-7}} = 6,09 \cdot 10^{-27} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Аналогично для водорода при $p = 0,00514 \text{ мм рт. ст.}$, $T = 20,4^0 \text{ К}$, $\eta = 11,78 \cdot 10^{-8} \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$

$$\hbar_{B, \text{поступ.}} = \frac{5 \cdot 10^{-17} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 20,4}{2 \cdot 6 \cdot 3,14 \cdot 11,78 \cdot 10^{-8} \cdot 10^{-7}} = 3,17 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Если пренебречь влиянием вязкости, т. е. членами

$$-i\hbar_B \frac{6\pi\eta R_0}{m} x \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$$

в уравнениях (5.2.1), (5.2.2), то можно воспользоваться результатами квантово-механического рассмотрения прохождения микрочастиц через потенциальный барьер. Коэффициент прозрачности барьера,

$$d = d_0 \exp\left(-\frac{2l\sqrt{2m(U_m - E)}}{\hbar_{B, \text{поступ.}}}\right),$$

где $E = mv^2/2 + U(x)$ — полная энергия броуновской частицы, U_m — высота потенциального барьера, l — длина потенциального барьера.

При скорости движения броуновской частицы $v = 500 \text{ м}/\text{с}$, массе $m = 10^{-17} \text{ кг}$, потенциальной энергии

$U = 10^{-15}$ Дж, длине потенциального барьера $l = 6 \cdot 10^{-3}$ м и его высоте $U_m = 2,25 \cdot 10^{-12}$ Дж получаем показатель степени экспоненты

$$-\frac{2 \cdot 6 \cdot 10^{-3} \sqrt{2 \cdot 10^{-17} (2,25 \cdot 10^{-12} - 1,25 \cdot 10^{-12})}}{5,37 \cdot 10^{-17}} \approx 1$$

и $d \approx 0,368d_0$. При уменьшении длины потенциального барьера на порядок, т. е. при $l = 6 \cdot 10^{-4}$ м, получим $d \approx 0,9d_0$.

§ 5.3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ПАДАЮЩИХ ПРЯМОУГОЛЬНИКОВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ АНАЛОГА ПОСТОЯННОЙ ПЛАНКА НА ОСНОВЕ СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Пусть в результате натурального или численного эксперимента получена непрерывная плоская кривая $y = \alpha(t)$, которая имеет экстремумы в точках $(t_0; y_0), (t_1; y_1), \dots, (t_m; y_m)$. Опишем алгоритм метода падающих прямоугольников для расчета информационной энтропии такой кривой.

Построим график кривой $y = \alpha(t)$. На каждом участке между двумя соседними точками описываемый процесс определяется непрерывной строго монотонной функцией, в простейшем случае — отрезком прямой (рис. 1).

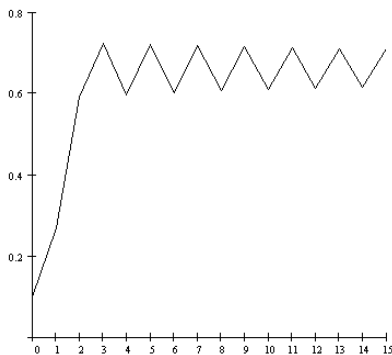


Рис. 1. Исходная непрерывная кривая, на основе которой строится гистограмма

1-й шаг. Первый участок монотонности кривой $(t_0; y_0) - (t_1; y_1)$ проецируем на ось ординат и фиксируем в памяти ЭВМ

координаты концов отрезка по оси ординат y_0, y_1 . На новом рисунке в координатах yOJ строим прямоугольник с высотой, равной единице по оси OJ , и с основаниями в точках y_0 и y_1 .

2-й шаг. Следующий участок монотонности кривой $(t_1; y_1) - (t_2; y_2)$ вновь проецируем на ось ординат и фиксируем в памяти ЭВМ числа y_1, y_2 . Над прямоугольником, полученным после первого шага, надстраиваем новый прямоугольник с высотой, равной единице. Координаты концов основания этого нового прямоугольника имеют абсциссы y_1, y_2 . Если границы абсцисс нового прямоугольника выходят за границы абсцисс старого прямоугольника, то его «надстройка» опускается вниз по оси ординат OJ на единицу длины (рис. 2).

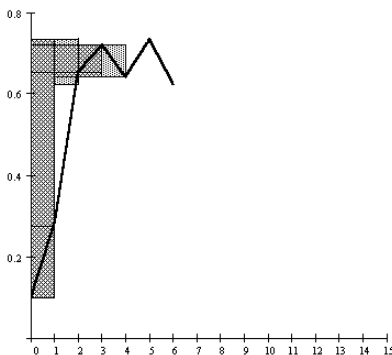


Рис. 2. Иллюстрация метода падающих прямоугольников

$(k+1)$ -й шаг. $(k+1)$ -й участок монотонности кривой $(t_k; y_k) - (t_{k+1}; y_{k+1})$ вновь проецируем на ось ординат и фиксируем в памяти ЭВМ числа y_k, y_{k+1} . Над прямоугольником, полученным после k -го шага, надстраиваем новый прямоугольник с высотой, равной единице. Координаты концов основания этого нового прямоугольника имеют абсциссы y_k, y_{k+1} . Если границы абсцисс нового прямоугольника выходят за крайние границы абсцисс всех прежде построенных прямоугольников, то его «надстройка» опускается вниз по оси ординат OJ **по правилу падающих прямоугольников**, т.е. соответствующий участок нового прямоугольника «приземляется» на верхнее основание первого попавшегося «по пути» прежнего прямоугольника, и так до тех пор, пока не будет достигнут уровень самого нижнего из прежде построенных прямоугольников (или ось абсцисс).

В результате будет получена ступенчатая фигура, образованная такими прямоугольниками. Обозначим Q_i площадь каждого i -го прямоугольника с высотой i , через a , а $Q(t_k)$ — площадь всей построенной фигуры.

Для дискретного набора точек $(t_0; y_0), (t_1; y_1), \dots, (t_m; y_m)$, полученных в результате натурального или численного эксперимента (рис. 3), можно аналогичным способом построить ступенчатую фигуру, состоящую из прямоугольников, координаты вершин которых определяются ординатами точек y_1, y_2, \dots, y_m .

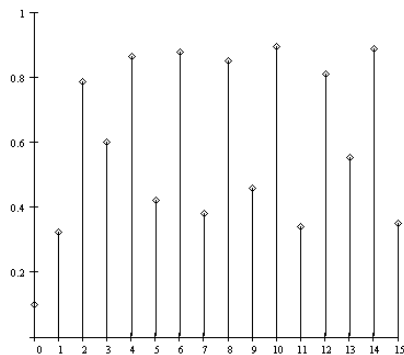


Рис. 3. Исходный дискретный набор точек, на основе которых строится гистограмма

С помощью построенной фигуры находятся относительные частоты появления измеряемого признака y как в моменты t_1, t_2, \dots, t_m , так и в промежуточные искусственно введенные моменты условного времени $t \in [t_k; t_{k+1}]$, $k = 0, 1, \dots, m - 1$. В результате появляется возможность найти значения энтропии в моменты t_1, t_2, \dots, t_m .

Для этого на плоскости, где координаты абсцисс точек есть t_i , а ординаты, соответствующие этим абсциссам, есть y_i , построим график ломаной путем соединения соседних точек. Таким образом, на каждом участке между двумя соседними точками описываемый процесс доопределяется с помощью непрерывной строго монотонной функции — отрезка прямой. После того, как получена такая непрерывная линия, можно воспользоваться описанным выше алгоритмом подсчета энтропии для континуального набора точек.

Отметим, что такой способ вычисления энтропии для дискретного набора точек оправдан тем, что в промежуточные моменты $t \in [t_k; t_{k+1}]$ на участках предполагаемой монотонности изменения y величина $S(t)$ постоянна.

Предложенный алгоритм учитывает только информационные свойства кривой, связанные с ее монотонностью, но не учитывает изменения скорости или выпуклости. Однако это можно исправить, если построить методом падающих прямоугольников три ступенчатые фигуры: одну по участкам монотонности, другую по участкам скорости и третью по участкам выпуклости. Для гладких кривых это фактически означает учет информации, обусловленной событиями, связанными с монотонностью как данной кривой, так и ее первой и второй производных. Понятно, что таким образом можно учесть информацию о монотонности любой многократно дифференцируемой функции.

Рассмотрим пример. Представим, что на синусоиду с течением времени падают случайным образом точки. Тогда гистограмма, построенная по методу падающих прямоугольников, будет при большом количестве измерений представлять из себя фигуру, близкую к прямоугольнику, поэтому дисперсия $\sigma_q^2 \approx 1$. Скорость будет описываться косинусоидой и ее гистограмма также будет близка к прямоугольнику, поэтому дисперсия скорости $\sigma_p^2 \approx 1$. Тогда аналог постоянной Планка определится из соотношения неопределенностей Гейзенберга $2\sigma_q m \sigma_p \approx h_q \approx 1$. Если неизвестен аналог массы частицы m , ее можно принять за единицу, при этом $h_q \approx 0,5$.

Данный подход позволяет определить с помощью обработки осциллирующих кривых по методу падающих прямоугольников возможность описания случайных явлений с использованием уравнений для волн вероятностей. Если получается аналог соотношения неопределенностей Гейзенберга в виде $2\sigma_q m \sigma_p \approx 0$, то процесс не относится к волнам вероятностей, если же $2\sigma_q m \sigma_p \geq \text{const} > 1$, то процесс явно аналогичен квантово-механическим.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гардинер К. В.* Стохастические методы в естественных науках. — М.: Мир, 1986.
2. *Гласс Л., Мэки М.* От часов к хаосу: Ритмы жизни. — М.: Мир, 1991.
3. *Де Бройль Л.* Соотношение неопределенностей Гейзенберга и вероятностная интерпретация волновой механики. — М.: Мир, 1986.
4. *Маслов В. П.* Асимптотические методы и теория возмущений. — М.: Наука, 1988.
5. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979.
6. *Ризниченко Г. Ю., Рубин А. Б.* Математические модели биологических продукционных процессов. — М.: Издательство МГУ, 1993.
7. *Самарский А. А., Николаев Е. С.* Методы решения сеточных уравнений. — М.: Наука, 1988.
8. *Соловьев И. А.* Аппарат конечных разностей и корпускулярно-волновой дуализм // Методы и алгоритмы параметрического анализа линейных и нелинейных моделей переноса: Сборник научных трудов. — Вып. 8(2). — М.: МГЗПИ, 1993. — С. 84—95.
9. *Соловьев И. А.* Волновые стохастические компоненты решений разностных уравнений переноса теплоты и массы // Тепло-массообмен — ММФ—96: Труды 3-го Минского Международного форума по тепло-массообмену: Минск, 20—24 мая 1996 г.). — Т. 9. Вычислительный эксперимент в задачах теплообмена и теплопередачи. — Ч. 1. — Минск: АНК ИТМО АНБ, 1996. — С. 209—213.
10. *Соловьев И. А.* О волновых решениях разностных уравнений в пространстве непрерывного изменения независимых аргументов // Методы и алгоритмы параметрического анализа линейных и нелинейных моделей переноса: Сборник научных трудов. — Вып. 12. — М.: МГОПУ, 1996. — С. 81—82.

11. Соловьев И. А. О прогнозировании дисперсии случайных тепловых полей // Известия РАН. — Энергетика. — 2002. — № 6. — С. 109—115.
12. Соловьев И. А. Описание с помощью волн вероятности поведения стохастических величин, средние значения которых подчиняются системе разностных уравнений // Теоретическая и математическая физика. — 1998. — Т. 115. — № 3. — С. 56—76.
13. Соловьев И. А. Разностные уравнения в пространстве непрерывного изменения независимых аргументов // Вестник МЭИ. — 1995. — № 6. — С. 109—118.
14. Соловьев И. А. Уравнение для волн вероятности, моделирующих поведение случайных величин, средние значения которых описываются системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка // Теоретическая и математическая физика. — 1997. — Т. 111. — № 3. — С. 356—368.
15. Хакен Г. Синергетика: Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. — М.: Мир, 1985.

И. А. Соловьев

**АППАРАТ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ
И КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ**

Монография

Редакторы *Ю. В. Добровольская, И. Г. Крейзер.*

Подписано в печать 04.03.2010. Формат 60×88 1/16. Гарнитура Журнальная.
Усл. печ. л. 5,0. Уч.-изд. л. 4,12. Тираж 1000 экз.

ООО «Вега-Инфо».
105077, Москва, Измайловский бульвар, 63/12, корп. 2.
www.vega-info.ru

Для заметок

Для заметок