УДК 517.955.4 DOI: 10.18698/1812-3368-2017-1-26-42

О НОВОЙ ФОРМЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА НА ПРЯМОЙ

Д.В. Гришин[1] grishind@yandex.ru
Я.Ю. Павловский[1] pvlvsk-yan@rambler.ru
И.Д. Ремизов[1, 2] ivremizov@yandex.ru
Е.С. Рожкова[1] rse.elena.rus@gmail.com
Д.А. Самсонов[1] blitzar90@gmail.com

[1] **МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация**
[2] **Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского (ННГУ), Нижний Новгород, Российская Федерация**

Аннотация

Рассмотрена задача Коши для одномерного уравнения Шредингера $\psi_t'(t,x)=iH\psi(t,x)$ с гамильтонианом $-H$ вида $-Hf=-\frac{1}{2}f''+Vf$, где потенциал V — вещественная дифференцируемая функция, ограниченная вместе со своей производной. Это уравнение изучали со времен создания квантовой механики и до сих пор оно является хорошим модельным примером для демонстрации различных методов решения уравнений в частных производных. Исследован вопрос о представимости решения задачи Коши в виде квазифейнмановской формулы, и на него дан утвердительный ответ. Построенная квазифейнмановская формула — родственное формулам Фейнмана выражение нового типа, содержащее кратные интегралы бесконечно растущей кратности. Такие формулы легче доказывать (по сравнению с фейнмановскими формулами), но они дают более длинное выражение для решения

Ключевые слова

Уравнение Шредингера, задача Коши, квазифейнмановская формула, уравнение теплопроводности, касание по Чернову, кратный интеграл, полугруппа операторов

Поступила в редакцию 10.05.2016

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 14-41-00044) в ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Уравнение Шредингера и квантовая механика. Уравнение Шредингера — одно из основных уравнений квантовой механики [1], которое описывает эволюцию замкнутой квантовой системы, т. е. изменение системы во времени при условии того, что система не взаимодействует ни с какими внешними для нее частицами или полями. Если квантовая система получена путем квантования некоторой классической системы, то под чистым состоянием квантовой системы понимают имеющий единичную норму вектор комплексного гильбертова пространства $L^2(Q)$, где Q — конфигурационное пространство исходной классической системы. В процессе эволюции замкнутой системы чистые состояния переходят в чистые состояния.

Поэтому эволюцию системы из начального состояния $\psi(0)=\psi_0\in L^2(Q)$ в состояние $\psi(t)\in L^2(Q)$ можно описать как результат действия некоторого унитарного оператора $U(t)$ на состояние ψ_0, т. е. $\psi(t)=U(t)\psi_0$. Оператор эволюции $U(t)$ связан с гамильтонианом системы соотношением $U(t)=e^{-it\mathcal{H}}$, где $\mathcal{H}$ — гамильтониан системы, описывающий состояние $\psi(t)$ с помощью задачи Коши для уравнения Шредингера $i\psi_t'(t)=\mathcal{H}\psi(t)$, $\psi(0)=\psi_0$. В общем случае гамильтониан $\mathcal{H}$ представляет собой самосопряженный оператор в пространстве $L^2(Q)$, имеющий плотную область определения. Таким образом, для однозначного задания эволюции системы необходимо знать или гамильтониан $\mathcal{H}$, или (при каждом $t\in\mathbb{R}$) оператор эволюции $U(t)$. Обычно гамильтониан известен, а оператор эволюции нет. К сожалению, формула $U(t)=e^{-it\mathcal{H}}$ непригодна для непосредственного вычисления $U(t)$ при известном гамильтониане $\mathcal{H}$ в случае, если оператор $\mathcal{H}$ неограничен, а в содержательных примерах это именно так. Поэтому выражение $U(t)=e^{-it\mathcal{H}}$ через гамильтониан $\mathcal{H}$ равносильно решению для каждого $\psi_0\in L^2(Q)$ задачи Коши $i\psi_t'(t)=\mathcal{H}\psi(t)$, $\psi(0)=\psi_0$. Известно несколько случаев, когда гамильтониан $\mathcal{H}$ системы так прост, что решение задачи Коши можно описать небольшой явной формулой, например, для атома водорода. В общем случае такие формулы не известны.

Однако, если удалось построить сильно непрерывное семейство ограниченных самосопряженных операторов, касательное по Чернову к оператору $\mathcal{H}$, то можно применить приводимую в настоящей работе теорему 3 и получить оператор $U(t)$ в виде квазифейнмановской формулы. Это и сделано для простого модельного случая.

Фейнмановские и квазифейнмановские формулы. *Фейнмановская формула (формула Фейнмана)* представляет собой равенство следующего вида: слева стоит определяемая равенством функция, а справа — предел кратного интеграла при стремящейся к бесконечности кратности. Такое определение было впервые введено О.Г. Смоляновым [2] и восходит к пионерским работам Р.Ф. Фейнмана [3, 4], который впервые использовал равенства такого вида на физическом уровне строгости. Подробнее фейнмановские формулы рассмотрены в работах [5–7].

Научной группой О.Г. Смолянова в 2002–2015 годах в виде фейнмановских формул были построены решения задачи Коши для многих уравнений вида $u_t'(t,x)=Lu(t,x)$, называемых эволюционными уравнениями (или уравнениями эволюции, уравнениями эволюционного типа). К этому типу также относят уравнение теплопроводности (простой одномерный пример такого уравнения $u_t'(t,x)=u_{xx}''(t,x)-V(x)u(t,x)$, $L=\partial^2/\partial x^2-V$) и уравнение Шредингера (простой одномерный пример уравнения $\psi_t'(t,x)=-i\psi_{xx}''(t,x)+iV(x)u(t,x)$, $L=-i(\partial^2/\partial x^2-V)$).

Ключевым моментом указанного построения было использование теоремы Чернова, а также построение для каждого уравнения специального семейства операторов. Требовалось предъявить семейство линейных ограниченных операторов, эквивалентное по Чернову C_0-полугруппе с генератором L.

Известно, что строить такие семейства для уравнения Шредингера гораздо труднее, чем для уравнения теплопроводности. Приведем два примера. В 2012–2013 годах для уравнений теплопроводности и Шредингера с $x \in \mathbb{R}^n$ фейнмановские формулы были построены А.С. Пляшечником, причем в рассмотренном им случае коэффициенты уравнений могли зависеть от времени; решение уравнения Шредингера потребовало регуляризации с помощью малого параметра ε [8, 9]. Для не зависящей от времени правой части И.Д. Ремизовым было получено решение уравнения теплопроводности с бесконечномерным гильбертовым пространством координат в виде фейнмановской формулы [10, 11], а для соответствующего уравнения Шредингера сделать этого не удалось в связи с бесконечномерной спецификой задачи. Тогда была предпринята попытка найти какие-либо пути решения бесконечномерного уравнения Шредингера, для которых бесконечномерность не была бы центральным местом.

В 2014 г. И.Д. Ремизов установил, что, если несколько расширить класс допустимых представлений решения, то семейства, построенные для уравнения теплопроводности, можно использовать после некоторой модификации для решения уравнения Шредингера [12]. Так было сформулировано приведенное ниже определение.

Квазифейнмановская формула — равенство, в котором слева стоит определяемая равенством функция, а справа — выражение, содержащее кратные интегралы сколь угодно большой кратности. В отличие от фейнмановских, квазифейнмановские формулы в правой части могут содержать суммирование или другие операции.

Предложенный метод модификации семейств оказался достаточно общим и гибким, чтобы применять его не только для той задачи, для решения которой он был разработан. Метод работает на уровне полугрупп операторов, поэтому решаемое уравнение Шредингера может иметь произвольный самосопряженный гамильтониан и произвольное конфигурационное пространство, лишь бы существовали семейства для соответствующего уравнения теплопроводности.

Постановка задачи и ее решение. Главная задача работы — доказательство того, что задача Коши для уравнения Шредингера на прямой

$$\begin{gathered} \frac{i}{a}\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(t,x) + V(x)\psi(t,x); \\ \psi(0,x) = \psi_0(x) \end{gathered} \tag{1}$$

имеет единственное решение в пространстве $L^2(\mathbb{R})$, задаваемое справедливым для почти всех $x \in \mathbb{R}$ равенством (квазифейнмановской формулой)

$$\psi(t,x) = \lim_{n\to\infty}\lim_{k\to\infty}\sum_{m=0}^{k}\sum_{q=0}^{m}\frac{(-1)^{m-q} i^m a^m n^m (\operatorname{sign}(t))^m}{q!(m-q)!}\left(\frac{n}{2\pi|t|}\right)^{q/2} \times$$

$$\times \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \ldots \int_{\mathbb{R}}}_{q} \exp\left\{-\frac{|t|}{n}\left[\frac{1}{2}V(x)+\sum_{p=2}^{q}V\left(x+\sum_{j=p}^{q}y_j\right)+\frac{1}{2}V\left(x+\sum_{j=1}^{q}y_j\right)\right]-\frac{n}{2|t|}\sum_{j=1}^{q}y_j^2\right\}\times$$

$$\times\psi_0\left(x+\sum_{j=1}^{q}y_j\right)\prod_{p=1}^{q}dy_p, \qquad (2)$$

где $0 \neq a \in \mathbb{R}$, $x, t \in \mathbb{R}$, $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ и функция $V:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ ограничена и имеет ограниченную первую производную.

Актуальность поставленной задачи и метод ее решения. В общем случае задача о выражении решения дифференциального уравнения через его коэффициенты сложна. В зависимости от уравнения и того, что понимается под словами «выразить решение уравнения через его коэффициенты», эта задача либо полностью решена (простые случаи изучают в университетском курсе дифференциальных уравнений), либо неразрешима, либо до сих пор привлекает внимание ученых. В связи с этим для каждого важного дифференциального уравнения представляет большой интерес каждая новая нетривиальная формула, дающая решение к нему.

В зависимости от выбора потенциала V одномерное уравнение Шредингера может описывать многие квантовые системы, например, квантовый гармонический осциллятор или частицу в кулоновском поле. Рассматриваемый гладкий ограниченный потенциал V возникает в задаче о преодолении гладкого ограниченного потенциального барьера, а также в задачах, связанных с квантовыми свойствами кристаллов, поскольку потенциал может быть периодическим $(V(x)=\sin(kx))$, лишь бы он вместе со своей первой производной был ограничен.

Вопрос о соответствующих уравнению физических системах здесь умышленно не рассмотрен. Главное достоинство этого уравнения заключается не в области его физических применений, а в том, что с математической точки зрения задача свободна от специфических деталей и сравнительно проста. Она решалась и решается многими методами, каждый из которых имеет свои сильные и слабые стороны, которые часто бывают видны на примере этого модельного уравнения.

Цель настоящей работы — привести пример применения нового подхода, возникшего в 2014 г. и основанного на теореме 3 (см. работу [12]). Поясним, почему есть смысл уделять внимание этой теореме. Во-первых, выводить и доказывать фейнмановские формулы заведомо сложнее, чем получать квазифейнмановские формулы описываемым здесь методом. Во-вторых, этот метод может обеспечить более высокую скорость сходимости к решению, чем дает обычно фейнмановская формула. В-третьих, возможно, с помощью этого метода можно находить решения для более широкого класса потенциалов V.

В приведенном выше уравнении Шредингера потенциал V зависит только от переменной x, поэтому решение временного уравнения Шредингера сводят к решению стационарного уравнения Шредингера, это стандартный подход для такого рода задач. Авторы настоящей работы хотят продемонстрировать альтернативный метод, позволяющий находить решение задачи Коши (т. е. неизвестную волновую функцию ψ) без решения задачи о собственных функциях и собственных числах или сведения к другой проблеме.

Следует отметить, что настоящее сообщение носит теоретический характер и написано скорее с точки зрения математика, чем физика, что и объясняет выбор методов. Здесь не рассмотрен физический смысл коэффициента a, не найден энергетический спектр частицы, не решены связанные с исследуемым уравнением физические задачи.

При нормировке волновой функции использован стандартный квантово-механический подход. Оператор $U(t)$ унитарный, поэтому при каждом t справедливо равенство $\|\psi_0\| = \|U(t)\psi_0\| = \|\psi(t,\cdot)\|$, однако один содержательный вопрос может быть поставлен: неизвестно, имеет ли место для стоящих под знаком предела выражений это же свойство.

Основной результат работы — доказанная теорема 4.

Уравнение Шредингера в виде $\psi'_t = L\psi$. Перепишем условия задачи Коши (1) в виде, удобном для дальнейших построений

$$\begin{aligned} &\psi'_t = iaH\psi; \\ &\psi(0) = \psi_0, \end{aligned} \tag{3}$$

где $(Hf)(x) = \frac{1}{2} f''(x) - V(x) f(x)$. Это позволит свести нахождение решения изучаемой задачи Коши к нахождению полугруппы с генератором iaH, поскольку в пространстве $L^2(\mathbb{R})$ справедливо равенство $\psi(t,x) = \left(e^{iatH}\psi_0\right)(x)$. Подробнее возможность такого представления рассмотрена в работе [12].

Сильно непрерывные (полу)группы операторов. Приведем минимальный набор сведений о сильно непрерывных (полу)группах, или C_0-(полу)группах операторов, необходимый для понимания их роли в теории эволюционных уравнений с частными производными. Все классические определения и утверждения могут быть найдены, например, в работах [13–15]. Из неклассических фактов изложена только теорема 3, предложенная И.Д. Ремизовым в 2014 г., а также понятие касания по Чернову и формулировка теоремы Чернова, опирающаяся на это понятие.

Определение 1. *Пусть $\mathcal{F}$ — банахово пространство над полем $\mathbb{C}$, $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ — пространство всех линейных ограниченных операторов в пространстве $\mathcal{F}$. Пусть дано отображение*

$$W : [0, +\infty) \to \mathcal{L}(\mathcal{F}),$$

т. е. если $t \geq 0$ фиксировано, то $W(t)$ — линейный ограниченный оператор, отображающий $\mathcal{F}$ в $\mathcal{F}$. Отображение W называется C_0-полугруппой, или сильно непрерывной однопараметрической полугруппой операторов, если оно удовлетворяет трем условиям:

1) отображение $W(0)$ *— тождественный оператор* I, $\forall\varphi\in\mathcal{F}: W(0)\varphi=\varphi$;

2) отображение W *сопоставляет сложению чисел в* $[0,+\infty)$ *композицию операторов в* $\mathcal{L}(\mathcal{F})$, $\forall t\geq 0, \forall s\geq 0: W(t+s)=W(t)\circ W(s)$, *где использовано обозначение* $(A\circ B)(\varphi)=A(B(\varphi))$ *для каждого* $\varphi\in\mathcal{F}$;

3) отображение W *непрерывно при наделении пространства* $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *сильной операторной топологией,* $\forall\varphi\in\mathcal{F}$ *функция* $t\mapsto W(t)\varphi$ *непрерывна как отображение* $[0,+\infty)\to\mathcal{F}$.

Определение C_0-группы получают заменой $[0,+\infty)$ пространством $\mathbb{R}$.

Если $(W(t))_{t\geq 0}$ — C_0-полугруппа в банаховом пространстве $\mathcal{F}$, то множество

$$\left\{\varphi\in\mathcal{F}:\exists\lim_{t\to+0}\frac{W(t)\varphi-\varphi}{t}\right\}\overset{\text{denote}}{=}\mathrm{Dom}(L)$$

плотно в пространстве $\mathcal{F}$. Оператор L, определенный на $\mathrm{Dom}(L)$ равенством

$$L\varphi=\lim_{t\to+0}\frac{W(t)\varphi-\varphi}{t},$$

называется инфинитезимальным генератором (генератором) C_0-полугруппы $(V(t))_{t\geq 0}$. Генератор является замкнутым линейным оператором, который однозначно определяет C_0-полугруппу, и обозначается как $W(t)=e^{tL}$. Если L — ограниченный оператор, и $\mathrm{Dom}(L)=\mathcal{F}$, то оператор e^{tL} представляет собой экспоненту, определяемую степенным рядом $e^{tL}=\sum\limits_{k=0}^{\infty}\frac{t^k L^k}{k!}$, сходящимся по норме в пространстве $\mathcal{L}(\mathcal{F})$. В более интересных и актуальных для приложений случаях генератор представляет собой неограниченный дифференциальный оператор, например, лапласиан Δ.

Одна из причин для изучения C_0-полугрупп — их связь с дифференциальными уравнениями. Если Q — множество, то функцию $u:[0,+\infty)\times Q\to\mathbb{C}$, $u:(t,x)\mapsto u(t,x)$ двух переменных t,x можно представить в виде функции $u:t\mapsto[x\mapsto u(t,x)]$ одной переменной t со значениями в пространстве функций переменной x. Если $u(t,\cdot)\in\mathcal{F}$, то можно определить $Lu(t,x)=(Lu(t,\cdot))(x)$. Если существует C_0-полугруппа $(e^{tL})_{t\geq 0}$, то задача Коши

$$\begin{aligned}&u'_t(t,x)=Lu(t,x) \text{ для } t>0, x\in Q;\\ &u(0,x)=u_0(x) \quad \text{ для } x\in Q\end{aligned}$$

имеет единственное (в смысле $\mathcal{F}$, где $u(t,\cdot)\in\mathcal{F}$ для каждого $t\geq 0$) решение $u(t,x)=(e^{tL}u_0)(x)$, непрерывно зависящее от u_0. При существовании сильно непрерывной группы $(e^{tL})_{t\in\mathbb{R}}$ в задаче Коши уравнение $u'_t(t,x)=Lu(t,x)$ можно рассматривать не только для $t>0$, но и для $t\in\mathbb{R}$, и решение представляют той же формулой $u(t,x)=(e^{tL}u_0)(x)$. Подробнее полугруппы и их связи с дифференциальными уравнениями рассмотрены в работах [13, 14].

Теорема 1 (Теорема Чернова) [16, 17]. *Пусть* $\mathcal{F}$ *— банахово пространство и* $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *— пространство всех линейных ограниченных операторов в* $\mathcal{F}$. *Пусть дана функция* $G:[0,+\infty)\to\mathcal{L}(\mathcal{F})$, *непрерывная на каждом векторе,* $G(0)=I$, $\|G(t)\|\le e^{\omega t}$ *с некоторой постоянной* $\omega\in\mathbb{R}$. *Пусть есть такое плотное подпространство* $\mathcal{D}\subset\mathcal{F}$, *что при всех* $f\in\mathcal{D}$ *существует предел* $\lim\limits_{t\to 0}t^{-1}(G(t)f-f)$, *значение которого обозначим* $G'(0)f$. *Предположим, что* $G'(0)$ *на* $\mathcal{D}$ *обладает замыканием* C, *и что* C *является генератором сильно непрерывной полугруппы* $(W_t)_{t\ge 0}$. *Тогда для всякого* $f\in\mathcal{F}$ *имеем* $G(t/n)^n f\to W_t f$ *при* $n\to\infty$ *равномерно по* t *из каждого отрезка* $[0,t_0]$ *при каждом* $t_0>0$.

Изложим теорему Чернова в удобной для дальнейшего применения форме [12]. Содержание теоремы остается тем же, но условия теоремы разбиваются на блоки: (E)xistence — существование полугруппы; (C)hernoff (T)angency — касание по Чернову; (N)orm bound — оценка сверху на рост нормы. Сперва приведем определение касания по Чернову.

Определение 2. *Пусть* $\mathcal{F}$ *— банахово пространство и* $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *— пространство всех линейных ограниченных операторов в* $\mathcal{F}$. *Пусть даны функция* $G:[0,+\infty)\to\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *(или семейство* $(G(t))_{t\ge 0}$*) и замкнутый линейный оператор* $L:\mathrm{Dom}(L)\to\mathcal{F}$ *с областью определения* $\mathrm{Dom}(L)\subset\mathcal{F}$. *Будем утверждать, что функция* G *касается по Чернову оператора* L, *если выполняются следующие условия:*

CT1) функция G *сильно непрерывна (непрерывна при наделении* $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *сильной операторной топологией), т. е. отображение* $t\mapsto G(t)f\in\mathcal{F}$ *непрерывно на отрезке* $[0,+\infty)$ *для каждого* $f\in\mathcal{F}$;

CT2) $G(0)=I$, *т. е.* $G(0)f=f$ *для каждого* $f\in\mathcal{F}$;

CT3) существует такое плотное в пространстве $\mathcal{F}$ *линейное подпространство* $\mathcal{D}\subset\mathcal{F}$, *что при всех* $f\in\mathcal{D}$ *существует предел* $\lim_{t\to 0}\big((G(t)f-f)/t\big)$, *значение которого обозначим через* $G'(0)f$;

CT4) замыкание оператора $(G'(0),\mathcal{D})$ *существует и равно* $(L,\mathrm{Dom}(L))$.

Замечание 1. В определении касания по Чернову семейство $(G(t))_{t\ge 0}$ не обязано быть полугруппой. Однако каждая C_0-полугруппа касается по Чернову своего генератора.

Используя определение касания по Чернову, сформулируем теорему Чернова.

Теорема 2. *Пусть* $\mathcal{F}$ *— банахово пространство и* $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *— пространство всех линейных ограниченных операторов в* $\mathcal{F}$, *наделенное операторной нормой, даны функция* $G:[0,+\infty)\to\mathcal{L}(\mathcal{F})$ *(или семейство* $(G(t))_{t\ge 0}$*) и замкнутый линейный оператор* $L:\mathrm{Dom}(L)\to\mathcal{F}$ *с областью определения* $\mathrm{Dom}(L)\subset\mathcal{F}$. *Пусть выполнены условия:*

E) полугруппа $(e^{tL})_{t\ge 0}$ *существует, обладает свойством сильной непрерывности, и ее генератор* $(L,\mathrm{Dom}(L))$;

CT) функция G касается по Чернову оператора L;

N) существует такое число $\omega \in \mathbb{R}$, что $\|G(t)\| \le e^{\omega t}$ при всех $t \ge 0$.

Тогда для каждого $f \in \mathcal{F}$ справедливо, что $\left(G\left(\frac{t}{n}\right)\right)^n f \to e^{tL} f$ при $n \to \infty$, где предел равномерен по $t \in [0, t_0]$ при каждом фиксированном $t_0 > 0$.

Определение 3. *Пусть $\mathcal{F}$ — банахово пространство и $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ — пространство всех линейных ограниченных операторов в $\mathcal{F}$, наделенное операторной нормой. Две определенные на $[0, +\infty)$ (или на $\mathbb{R}$) функции G_1 и G_2 со значениями в $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ называют эквивалентными по Чернову [18], если $G_1(0) = G_2(0) = I$ и при всех $f \in \mathcal{F}$ и всех $T > 0$*

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{\substack{t\in[0,T] \\ (\text{соответственно } t\in[-T,T])}} \left\| \left(G_1\left(\frac{t}{n}\right)\right)^n f - \left(G_2\left(\frac{t}{n}\right)\right)^n f \right\| = 0.$$

Замечание 2. Существует несколько близких определений эквивалентности по Чернову [7, 18, 19]. Не углубляясь в их сравнение, следуем определению, приведенному в работе [18]. Единственное, что необходимо от этого определения, заключается в следующем: если функция G_1 и оператор L удовлетворяют условиям теоремы Чернова, то функция G_1 эквивалентна по Чернову функции $G_2(t) = e^{tL}$. Другими словами, предел выражения $(G_1(t/n))^n$ при $n \to \infty$ дает сильно непрерывную полугруппу $(e^{tL})_{t\ge 0}$ (или группу $(e^{tL})_{t\in\mathbb{R}}$).

Замечание 3. В случае, когда при каждом t оператор $G(t)$ интегральный, равенство $e^{tL} f = \lim_{n\to\infty} \left(G(t/n)\right)^n f$ является фейнмановской формулой. Действительно, $\left(G(t/2)\right)^2 f$ — двойной интеграл, $\left(G(t/3)\right)^3 f$ — тройной и т. д.

Теорема 3 [12]. *Пусть $\mathcal{F}$ — комплексное гильбертово пространство, а $\mathrm{Dom}(H) \subset \mathcal{F}$ — его плотное линейное подпространство. Пусть оператор $H : \mathrm{Dom}(H) \to \mathcal{F}$ линеен и самосопряжен, ненулевое число $a \in \mathbb{R}$ (положительное или отрицательное) фиксировано, функция S касается по Чернову оператора H, и $(S(t))^* = S(t)$ для каждого $t \ge 0$. Для каждого $t \in \mathbb{R}$ примем $R(t) = \exp[ia(S(|t|) - I)\mathrm{sign}(t)]$ [1]. Тогда функция R эквивалентна по Чернову группе $(e^{iatH})_{t\in\mathbb{R}}$ и для каждого фиксированного $f \in \mathcal{F}$ верны равенства*

$$e^{iatH} f = \left(\lim_{n\to\infty} \left(e^{ia(S(|t/n|)-I)\mathrm{sign}(t)}\right)^n\right) f, \quad e^{iatH} f = \left(\lim_{n\to\infty} e^{ian(S(|t/n|)-I)\mathrm{sign}(t)}\right) f; \tag{4}$$

$$e^{iatH} f = \left(\lim_{n\to\infty}\lim_{k\to\infty} \sum_{m=0}^{k} \frac{(ian\,\mathrm{sign}(t))^m}{m!} (S(|t/n|) - I)^m\right) f; \tag{5}$$

$$e^{iatH} f = \left(\lim_{n\to\infty}\lim_{k\to\infty} \sum_{m=0}^{k}\sum_{q=0}^{m} \frac{(-1)^{m-q}(ian\,\mathrm{sign}(t))^m}{q!(m-q)!} (S(|t/n|))^q\right) f; \tag{6}$$

---

[1] Такое определение корректно, поскольку при каждом $t \in \mathbb{R}$ в показателе экспоненты стоят линейные ограниченные операторы в пространстве $\mathcal{F}$.

$$e^{iatH}f=\left(\lim_{n\to\infty}\lim_{k\to\infty}\left[\left(1-\frac{ian\,\mathrm{sign}(t)}{k}\right)I+\frac{ian\,\mathrm{sign}(t)}{k}S(|t/n|)\right]^k\right)f; \tag{7}$$

$$e^{iatH}f=\left(\lim_{n\to\infty}\lim_{k\to\infty}\sum_{q=0}^{k}\frac{k![k-ian\,\mathrm{sign}(t)]^{k-q}[ian\,\mathrm{sign}(t)]^q}{q!(k-q)!k^k}(S(|t/n|))^q\right)f; \tag{8}$$

$$e^{iatH}f=\left(\lim_{n\to\infty}\lim_{k\to\infty}\sum_{m=0}^{k}\sum_{q=0}^{k-m}\frac{(-1)^{k-m-q}k!(ian\,\mathrm{sign}(t))^{k-q}}{m!q!(k-m-q)!k^{k-q}}(S(|t/n|))^m\right)f. \tag{9}$$

Пределы в (4)–(9) существуют по норме в пространстве $\mathcal{F}$.

Замечание 4. Если оператор $S(t)$ — интегральный, то равенства (5)–(9) — квазифейнмановские формулы.

Основные результаты. Рассмотрим предложенный А.С. Пляшечником модельный пример, который показывает, какие конкретно квазифейнмановские формулы получаются в результате использования теоремы 3. В качестве гильбертова пространства $\mathcal{F}$ взято пространство $L^2(\mathbb{R})=L^2(\mathbb{R},\mathbb{C},\mu_L)$ — пространство всех квадратично интегрируемых по Лебегу функций, определенных на $\mathbb{R}$ и принимающих значения в $\mathbb{C}$, факторизованное по отношению равенства функций почти всюду относительно меры Лебега. Рассмотрим пространство $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))=L_b(L^2(\mathbb{R}),L^2(\mathbb{R}))$ всех линейных ограниченных операторов, действующих из $L^2(\mathbb{R})$ в $L^2(\mathbb{R})$. В качестве оператора H принимаем оператор следующего вида (оператор Гамильтона с обратным знаком):

$$(Hf)(x)=\frac{1}{2}f''(x)-V(x)f(x),$$

где $V\in C_b^1(\mathbb{R},\mathbb{R})$ — вещественнозначная ограниченная функция с непрерывной ограниченной производной.

Функцию S строим в два этапа. Сперва определим функцию $F:[0,+\infty)\to\to\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ равенством

$$(F(t)f)(x)=\exp\left[-\frac{t}{2}V(x)\right]f(x),$$

а функцию $B:[0,+\infty)\to\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ — равенством

$$\big(B(t)f\big)(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2\pi t}}\displaystyle\int_{\mathbb{R}}\exp\left[\dfrac{-(x-y)^2}{2t}\right]f(y)dy, & \text{если } t>0;\\ f(x), & \text{если } t=0.\end{cases}$$

Затем определим функцию $S:[0,+\infty)\to\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ через функции F и B:

$$S(t)=F(t)\circ B(t)\circ F(t). \tag{10}$$

Обратим внимание на то, что композиция в формуле (10) рассмотрена как композиция линейных операторов из пространства $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$:

$$\left(S(t)f\right)(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2\pi t}}\displaystyle\int_{\mathbb{R}}\exp\left[-\dfrac{t(V(x)+V(x+y))}{2}-\dfrac{y^2}{2t}\right]f(x+y)dy, & \text{если } t>0;\\ f(x), & \text{если } t=0.\end{cases} \qquad (11)$$

Предложение 1. *Функция* $S:[0,+\infty)\to\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ *определена корректно, т. е. она действительно отображает полуинтервал* $[0,+\infty)$ *в пространство* $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ *всех линейных ограниченных операторов, действующих из* $L^2(\mathbb{R})$ *в* $L^2(\mathbb{R})$.

◀1. Оператор $F(t)$ ограничен при каждом $t\geq 0$, поскольку представляет собой оператор умножения на ограниченную функцию $x\mapsto\exp[-tV(x)/2]$.

2. Оператор $B(t)$ также является ограниченным $\forall t\geq 0$, что следует из неравенства

$$\int_{\mathbb{R}}\left|\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\int_{\mathbb{R}}e^{\frac{-(x-y)^2}{2t}}f(y)dy\right|^2dx\leq\int_{\mathbb{R}}\left|f(x)\right|^2dx<\infty.$$

Докажем это неравенство в несколько шагов с помощью эквивалентных преобразований, оценки интеграла, теоремы Фубини и теоремы Тонелли. Из неравенства видно, что $\|B(t)\|\leq 1$.

3. Поскольку для любого $t\in[0,+\infty)$ операторы $F(t)$ и $B(t)$ ограничены, то ограничен и оператор $S(t)=F(t)\circ B(t)\circ F(t)$. Из ограниченности оператора $S(t)$ следует, что для любой функции $f\in L^2(\mathbb{R})$ ее образ $S(t)f$ также принадлежит пространству $L^2(\mathbb{R})$.

4. Линейность оператора $S(t)$ для каждого $t\in[0,+\infty)$ очевидна в силу линейности интеграла Лебега. ▶

Предложение 2. *Для каждого* $t>0$ *оператор* $S(t)$ *самосопряжен.*

◀ 1. Оператор $F(t)$ самосопряжен для каждого $t\geq 0$, поскольку он является оператором умножения на вещественнозначную функцию.

2. Самосопряженность оператора $B(t)$ для каждого $t\geq 0$ показывается эквивалентными преобразованиями и использованием теоремы Фубини и теоремы Тонелли, либо с помощью свойств унитарного преобразования Фурье и теоремы о свертке.

3. Самосопряженность оператора $S(t)$ следует из самосопряженности операторов $B(t)$ и $F(t)$ и того, что $S(t)$ — их симметричная композиция:

$$\left\langle S(t)f,g\right\rangle=\langle F(t)\circ B(t)\circ F(t)f,g\rangle=\langle B(t)\circ F(t)f,F(t)g\rangle=$$
$$=\langle F(t)f,B(t)\circ F(t)g\rangle=\langle f,F(t)\circ B(t)\circ F(t)g\rangle=\langle f,S(t)g\rangle. \blacktriangleright$$

Предложение 3. *Семейство операторов* $(S(t))_{t\geq 0}$ *удовлетворяет первому условию касания по Чернову оператора* H, *т. е. для любого фиксированного* $f\in L^2(\mathbb{R})$ *функция* $t\mapsto S(t)f$ *непрерывна на полуинтервале* $[0,+\infty)$.

◀В целях установления для некоторого семейства операторов $\left\{(\mathcal{A}(t))[\cdot]:L^2(\mathbb{R})\to L^2(\mathbb{R})\right\}_{t\geq 0}$ непрерывности функции $t\mapsto\mathcal{A}(t)f$ достаточно проверить эквивалентную ей секвенциальную непрерывность: $\forall t_0 \in [0,+\infty)$ из $t_n \geq 0, t_n \to t_0$ следует, что $\mathcal{A}(t_n)f \to \mathcal{A}(t_0)f$ в $L^2(\mathbb{R})$. Доказательство состоит из пяти шагов, каждый из которых заключается в проверке непрерывности:

1) функции $t \mapsto F(t)f$ на полуинтервале $[0,+\infty)$ при фиксированном $f \in L^2(\mathbb{R})$;

2) функции $t \mapsto B(t)f$ на интервале $(0,+\infty)$ при фиксированном $f \in L^2(\mathbb{R})$;

3) функции $t \mapsto B(t)\varphi$ в нуле при фиксированном $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$;

4) функции $t \mapsto B(t)f$ в нуле при фиксированном $f \in L^2(\mathbb{R})$;

5) функции $t \mapsto S(t)f$ на полуинтервале $[0,+\infty)$ при фиксированно $f \in L^2(\mathbb{R})$, при уже доказанной непрерывности функций $t \mapsto F(t)f$ и $t \mapsto B(t)f$. ►

Предложение 4. *Семейство операторов* $S(t)_{t\geq 0}$ *удовлетворяет второму условию касания по Чернову оператора* H, *т. е.* $S(0) = I$.

◄Поскольку $B(0) = I$ и $F(0) = I$, $S(0) = F(0) \circ B(0) \circ F(0) = I$. ►

Предложение 5. *Семейство операторов* $S(t)_{t\geq 0}$ *удовлетворяет третьему условию касания по Чернову оператора* H, *т. е. для любого* $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ *существует* $S'(0) := \lim\limits_{t\to 0} \dfrac{S(t)\varphi - \varphi}{t}$.

◄Оператор $S(t)$ допускает представление в виде

$$(S(t)\varphi)(x) = \varphi(x) + t\underbrace{\left(\frac{1}{2}\varphi''(x) - V(x)\varphi(x)\right)}_{=(H\varphi)(x)} + A(t,x),$$

где $A(t,x) = o(t)$ в $L^2(\mathbb{R})$. Такое представление обосновывается за три шага. Сначала в интегральном представлении (11) для $(S(t)\varphi)(x)$ заменим все участвующие функции их приближениями многочленами по формуле Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа. Затем раскроем скобки и сгруппируем члены при одинаковых степенях t. Далее часть получившихся определенных интегралов вычислим, а часть — оценим, используя ограниченность производных и представление остаточных членов в форме Лагранжа.►

Предложение 6. *Оператор* $H : f \mapsto \dfrac{1}{2}f'' - Vf$ *отображает пространство* $W_2^2(\mathbb{R})$ *в пространство* $L^2(\mathbb{R})$.

◄Утверждаемый факт следует из определения пространства Соболева $W_2^2(\mathbb{R})$ и ограниченности функции V. ►

Предложение 7. *Семейство операторов* $(S(t))_{t\geq 0}$ *удовлетворяет четвертому условию касания по Чернову оператора* H, *т. е. оператор* $(S'(0), C_0^\infty(\mathbb{R}))$ *замыкают и* $\overline{(S'(0), C_0^\infty(\mathbb{R}))} = (H, W_2^2)$.

◄1. В доказательстве третьего условия касания по Чернову было установлено, что $S'(0)\varphi = \dfrac{1}{2}\varphi'' - V\varphi = H\varphi$ для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$.

2. Показано, что оператор $(H, C_0^\infty(\mathbb{R}))$ симметричен на своей плотной в пространстве $L^2(\mathbb{R})$ области определения, следовательно, он допускает замыкание.

3. Оператор $Lf := Vf$ ограничен (как оператор умножения на ограниченную функцию), и поэтому оператор $\overline{(H, C_0^\infty(\mathbb{R}))}$ имеет ту же область определения, что и оператор $\overline{(H_0, C_0^\infty(\mathbb{R}))}$, где $H_0 f = \dfrac{1}{2} f''$.

4. Из определения пространства $W_2^2(\mathbb{R})$ следует, что область определения оператора $\overline{(H_0, C_0^\infty(\mathbb{R}))}$ есть $W_2^2(\mathbb{R})$. ►

Предложение 8. *Оператор* $(H, W_2^2(\mathbb{R}))$ *самосопряжен.*

◄1. Согласно определению пространства $W_2^2(\mathbb{R})$, определению сопряженного оператора и того, что равенство $\int\limits_{\mathbb{R}} f''(x) g(x) dx = \int\limits_{\mathbb{R}} f(x) g''(x) dx$ справедливо для всех $f,\ g \in W_2^2(\mathbb{R})$, оператор $(H_0,\ W_2^2(\mathbb{R}))$ самосопряжен, где $H_0 f = \dfrac{1}{2} f''$.

2. Оператор $\varphi \mapsto -V\varphi$ определен всюду в пространстве $L^2(\mathbb{R})$ и самосопряжен, так как функция V ограничена и принимает лишь вещественные значения.

3. Оператор H является суммой операторов, полученных в пп. 1 и 2. ►

Теорема 4. *Пусть* $0 \neq a \in \mathbb{R}$, $x, t \in \mathbb{R}$, $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ *и функция* $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *ограничена и имеет ограниченную первую производную. Тогда задача Коши (1) имеет единственное в пространстве* $L^2(\mathbb{R})$ *решение, представимое в виде равенства (2), которое справедливо для почти всех* $x \in \mathbb{R}$.

◄Объединяя все доказанное выше, получаем, что для функции S и оператора H выполняется предполагающая часть теоремы 3, т. е. функция S касается по Чернову оператора H, и $\forall t \geq 0$ операторы $S(t)$ и H — самосопряженные линейные операторы. Это позволяет применить теорему 3 к рассматриваемому случаю и получить квазифейнмановские формулы для e^{itaH}. По теореме 3 решение задачи Коши (3) единственно в пространстве $L^2(\mathbb{R})$ и согласно (6) может быть представлено в виде

$$\psi(t,x) = \lim_{n\to\infty} \lim_{k\to\infty} \sum_{m=0}^{k} \sum_{q=0}^{m} \frac{(-1)^{m-q} i^m a^m n^m (\operatorname{sign}(t))^m}{q!(m-q)!} S(|t/n|)^q. \tag{12}$$

Распишем подробнее $S(|t/n|)^q$. Для $q = 2$ имеем

$$(S(|t/n|) \circ S(|t/n|) f)(x) = \sqrt{\frac{n}{2\pi|t|}} \int\limits_{\mathbb{R}} \exp\left[-\frac{|t|(V(x) + V(x+y_1))}{2n} - \frac{n y_1^2}{2|t|} \right] \sqrt{\frac{n}{2\pi|t|}} \times$$

$$\times \int\limits_{\mathbb{R}} \exp\left[-\frac{|t|(V(x+y_1) + V(x+y_1+y_2))}{2n} - \frac{n y_2^2}{2|t|} \right] f(x+y_1+y_2) dy_2 dy_1 =$$

$$= \frac{n}{2\pi|t|}\int\limits_{\mathbb{R}}\int\limits_{\mathbb{R}} \exp\left[-\frac{|t|(V(x)+2V(x+y_2)+V(x+y_1+y_2))}{2n}\right]\times$$
$$\times \exp\left[-\frac{n(y_1^2+y_2^2)}{2|t|}\right] f(x+y_1+y_2)dy_1dy_2.$$

Аналогично для произвольного q:

$$(S(|t/n|)f)^q f(x) = \left(\frac{n}{2\pi|t|}\right)^{q/2} \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}}\ldots\int\limits_{\mathbb{R}}}_{q} \exp\left(-\frac{|t|}{n}[V(x)/2+V(x+y_q)+V(x+y_{q-1}+y_q)+\right.$$
$$\left.+\ldots+V(x+y_1+y_2+\ldots+y_{q-1}+y_q)/2]\right)\exp\left(-\frac{1}{2|t|}(y_1^2+y_2^2+\ldots+y_{q-1}^2+y_q^2)\right)\times$$
$$\times\ f(x+y_1+y_2+\ldots+y_{q-1}+y_q)dy_1dy_2\ldots dy_{q-1}dy_q,$$

что эквивалентно

$$(S(|t/n|)f)^q f(x) =$$
$$= \left(\frac{n}{2\pi|t|}\right)^{q/2} \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}}\ldots\int\limits_{\mathbb{R}}}_{q} \exp\left\{-\frac{|t|}{n}\left[\frac{1}{2}V(x)+\sum_{p=1}^{q}V\left(x+\sum_{j=p}^{q}y_j\right)\right]-\frac{1}{2|t|}\sum_{j=1}^{q}y_j^2\right\}\times$$
$$\times\ f\left(x+\sum_{j=1}^{q}y_j\right)\prod_{p=1}^{q}dy_p.$$

Исходя из этого, формула (12) примет вид (4). ►

Замечание 5. Используя (8) вместо (6), можно получить еще одно представление решения задачи Коши (1), отличающееся от приведенного в той части формулы, которая идет до $(S(|t/n|))^q$.

Заключение. Построены квазифейнмановские формулы, позволяющие получить решение задачи Коши для уравнения Шредингера на прямой. Это уравнение служит первым, наиболее простым примером применения метода, предложенного в работе [12]. В качестве возможных направлений дальнейших исследований отметим следующие. Во-первых, сделать дающие решение задачи Коши формулы проще за счет построения других семейств $(S(t))_{t\geq 0}$. Во-вторых, предложить алгоритмы вычисления функции $\psi(t,x)$ на ЭВМ по доказанным формулам с учетом их специфики. Кроме того, актуальна задача поиска квазифейнмановских формул для более сложных уравнений Шредингера в многомерном пространстве; на искривленных поверхностях; на разветвленных поверхностях и др.

Авторы благодарят А.С. Пляшечника за помощь в выборе модельного примера, А.В. Смирнова и П.С. Клочкова за помощь в поиске ошибок в ранней версии черновика настоящей статьи, а также рецензентов за сделанные замечания к рукописи, Т.А. Гайдину, С.Х. Кадырова, К.А. Семина за помощь в поиске опечаток.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Березин Ф.А., Шубин М.А.* Уравнение Шредингера. М.: Изд-во МГУ, 1983. 392 с.

2. *Smolyanov O.G., Tokarev A.G., Truman A.* Hamiltonian Feynman path integrals via the Chernoff formula // J. Math. Phys. 2002. Vol. 43. Iss. 10. P. 5161–5171.

3. *Feynman R.P.* Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics // Reviews of Modern Physics. 1948. Vol. 20. Iss. 2. P. 367–387.

4. *Feynman R.P.* An operation calculus having applications in quantum electrodynamics // Phys. Rev. 1951. Vol. 84. P. 108–128.

5. *Smolyanov O.G.* Feynman formulae for evolutionary equations. Trends in stochastic analysis // London Mathematical Society Lecture Notes Series. 2009. Vol. 353.

6. *Smolyanov O.G.* Schrödinger type semigroups via Feynman formulae and all that // Proceedings of the Quantum Bio-Informatics V. Tokyo University of Science, Japan, 7–12 March 2011. World Sc. 2013.

7. *Бутко Я.А.* Формулы Фейнмана для эволюционных полугрупп // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2014. № 3. DOI: 10.7463/0314.0701581 URL: http://technomag.bmstu.ru/doc/701581.html

8. *Plyashecnik A.S.* Feynman formula for Schrödinger-Type equations with time- and space-dependent coefficients // Russian Journal of Mathematical Physics. 2012. Vol. 19. No. 3. P. 340–359.

9. *Plyashecnik A.S.* Feynman formulas for second-order parabolic equations with variable coefficients // Russian Journal of Mathematical Physics. 2013. Vol. 20. No. 3. P. 377–379.

10. *Remizov I.D.* Solution of a Cauchy problem for a diffusion equation in a Hilbert space by a Feynman formula // Russian Journal of Mathematical Physics. 2012. Vol. 19. No. 3. P. 360–372.

11. *Remizov I.D.* Solution to a parabolic differential equation in Hilbert space via Feynman formula-I // Модел. и анализ информ. систем. 2015. Т. 22. № 3. С. 337–355.

12. *Remizov I.D.* Quasi-Feynman formulas — a method of obtaining the evolution operator for the Schrödinger equation // Journal of Functional Analysis. 2016. Vol. 270. P. 4540–4557.

13. *Pazy A.* Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations. New York: Springer-Verlag, 1983. 277 p.

14. *Engel K.-J., Nagel R.* One-parameter semigroups for linear evolution equations. New York: Springer, 2000. 586 p.

15. *Engel K.-J., Nagel R.* A short course on operator semigroups. New York: Springer Science + Business Media, 2006. 243 p.

16. *Chernoff Paul R.* Note on product formulas for operator semigroups // Journal of Functional Analysis. 1968. Vol. 2. Iss. 2. P. 238–242.

17. *Богачев В.И., Смолянов О.Г.* Действительный и функциональный анализ: университетский курс. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотичная динамика», 2009. 724 с.

18. *Orlov Yu.N., Sakbaev V.Zh., Smolyanov O.G.* Feynman formulas as a method of averaging random Hamiltonians // Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. August 2014. Vol. 285. Iss. 1. P. 222–232.

19. *Smolyanov O.G., Weizs H. Väcker, Wittich O.* Chernoff's theorem and discrete time approximations of Brownian motion on manifolds // Potential Analysis. February 2007. Vol. 26. Iss. 1. P. 1–29.

20. *Соболев С.Л.* Некоторые применения функционального анализа в математической физике. М.: Наука, 1988. 336 с.

21. *Павлова М.Ф., Тимербаев М.Р.* Пространства Соболева (теоремы вложения). Казань: КФУ, 2010. 123 с.

Гришин Денис Валерьевич — студент кафедры «Теоретическая информатика и компьютерные технологии» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Павловский Ян Юрьевич — ассистент кафедры «Математическое моделирование» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Ремизов Иван Дмитриевич — ассистент кафедры «Математическое моделирование» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5), младший научный сотрудник Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского (ННГУ) (Российская Федерация, 603950, Нижний Новгород, пр-т Гагарина, д. 23).

Рожкова Елена Сергеевна — студентка кафедры «Информационные системы и телекоммуникации» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Самсонов Дмитрий Артурович — студент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Гришин Д.В., Павловский Я.Ю., Ремизов И.Д., Рожкова Е.С., Самсонов Д.А. О новой форме представления решения задачи Коши для уравнения Шредингера на прямой // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2017. № 1. С. 26–42.
DOI: 10.18698/1812-3368-2017-1-26-42

ON THE NEW FORM OF REPRESENTING CAUCHY PROBLEM FOR SCHRÖDINGER EQUATION ON THE REAL TIME

D.V. Grishin[1] grishind@yandex.ru
Ya.Yu. Pavlovskiy[1] pvlvsk-yan@rambler.ru
I.D. Remizov[1, 2] ivremizov@yandex.ru
E.S. Rozhkova[1] rse.elena.rus@gmail.com
D.A. Samsonov[1] blitzar90@gmail.com

[1] Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation
[2] Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russian Federation

Abstract

The study examines Cauchy problem for the one-dimensional Schrödinger equation $\psi'_t(t,x) = iH\psi(t,x)$ with the Hamiltonian $-H$ of the form $-Hf = -\frac{1}{2}f'' + Vf$, where potential V is a real-valued differentiable function bounded with its derivative. This equation has been studied from the creation of quantum mechanics, and it still

Keywords

Schrödinger equation, Cauchy problem, quasi-Feynman formula, heat equation, Chernoff tangency, multiple integral, operator semigroup

appears to be a good model case for various methods of solving partial differential equations. In this paper we study the problem of representability of the solution of Cauchy problem in the form of the quasi-Feynman formula, and provide a positive answer to this problem. The quasi-Feynman formula constructed in the paper is a new type of expression, similar to the Feynman formula. It includes multiple integrals of an infinitely increasing multiplicity. The quasi-Feynman formulas are easier to prove (compared to the Feynman formulas) but they provide lengthier expression for the solution. The paper may be of interest to the ones who work in the fields of functional analysis and mathematical physics

REFERENCES

[1] Berezin F.A., Shubin M.A. Uravnenie Shredingera [Shrödinger equation]. Moscow, Moscow State University Publ., 1983. 392 p.

[2] Smolyanov O.G., Tokarev A.G., Truman A. Hamiltonian Feynman path integrals via the Chernoff formula. *J. Math. Phys.*, 2002, vol. 43, iss. 10, pp. 5161–5171.

[3] Feynman R.P. Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics*, 1948, vol. 20, iss. 2, pp. 367–387.

[4] Feynman R.P. An operation calculus having applications in quantum electrodynamics. *Phys. Rev.*, 1951, vol. 84, pp. 108–128.

[5] Smolyanov O.G. Feynman formulae for evolutionary equations. Trends in stochastic analysis. *London Mathematical Society Lecture Notes Series*, 2009, vol. 353.

[6] Smolyanov O.G. Schrödinger type semigroups via Feynman formulae and all that. *Proceedings of the Quantum Bio-Informatics V*. Tokyo University of Science, Japan, 7–12 March 2011. World Sc. 2013.

[7] Butko Ya.A. Feynman formulae for evolution semigroups. *Nauka i obrazovanie. MGTU im. N.E. Baumana* [Science & Education of the Bauman MSTU. Electronic Journal], 2014, no. 3, pp. 95–132. DOI: 10.7463/0314.0701581 Available at: http://technomag.neicon.ru/en/doc/701581.html

[8] Plyashecnik A.S. Feynman formula for Schrödinger-Type equations with time- and space-dependent coefficients. *Russian Journal of Mathematical Physics*, 2012, vol. 19, no. 3, pp. 340–359.

[9] Plyashecnik A.S. Feynman formulas for second-order parabolic equations with variable coefficients. *Russian Journal of Mathematical Physics*, 2013, vol. 20, no. 3, pp. 377–379.

[10] Remizov I.D. Solution of a Cauchy problem for a diffusion equation in a Hilbert space by a Feynman formula. *Russian Journal of Mathematical Physics*, 2012, vol. 19, no. 3, pp. 360–372.

[11] Remizov I.D. Solution to a parabolic differential equation in Hilbert space via Feynman formula-I. *Model. i analiz inform. sistem* [Modelling and Analusis of Information Systems], 2015, vol. 22. no 3. pp. 337–355 (in Russ.).

[12] Remizov I.D. Quasi-Feynman formulas — a method of obtaining the evolution operator for the Schrödinger equation. *Journal of Functional Analysis*, 2016, vol. 270, pp. 4540–4557.

[13] Pazy A. Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations. N.Y., Springer-Verlag, 1983. 277 p.

[14] Engel K.-J., Nagel R. One-parameter semigroups for linear evolution equations. N.Y., Springer, 2000. 586 p.

[15] Engel K.-J., Nagel R. A short course on operator semigroups. N.Y., Springer Science + Business Media, 2006. 243 p.

[16] Chernoff Paul R. Note on product formulas for operator semigroups. *Journal of Functional Analysis*, 1968, vol. 2, iss. 2, pp. 238–242.

[17] Bogachev V.I., Smolyanov O.G. Deystvitelniy i funkcionalniy analiz: universitetskiy kurs [Real and functional analysis: University course]. Izhevsk, NIC "Regulyarnaya i haotichnaya dinamika" [National Research Center "Regular and Chaotic Dynamics"], 2009. 724 p.

[18] Orlov Yu.N., Sakbaev V.Zh., Smolyanov O.G. Feynman formulas as a method of averaging random Hamiltonians. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, August 2014, vol. 285, iss. 1, pp. 222–232.

[19] Smolyanov O.G., Weizs H. Väcker, Wittich O. Chernoff's theorem and discrete time approximations of Brownian motion on manifolds. *Potential Analysis*, February 2007, vol. 26, iss. 1, pp. 1–29.

[20] Sobolev S.L. Nekotorye primeneniya funktsional'nogo analiza v matematicheskoy fizike [Some applications of functional analysis in mathematical physics]. Moscow, Nauka Publ., 1998. 336 p.

[21] Pavlova M.F., Timerbaev M.R. Prostranstva Soboleva (teoremy vlozheniya) [Sobolev spaces (Embedding theorems)]. Kazan, Kazan Federal University Publ., 2010. 123 p.

Grishin D.V. — student of Computer Design and Technology Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Pavlovskiy Ya.Yu. — Assist. Professor of Mathematical Simulation Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Remizov I.D. — Assist. Professor of Mathematical Simulation Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation); junior researcher of Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod (Prospekt Gagarina 23, Nizhny Novgorod, 603950 Russian Federation).

Rozhkova E.S. — student of Information Systems and Communication Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Samsonov D.A. — student of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Grishin D.V., Pavlovskiy Ya.Yu., Remizov I.D., Rozhkova E.S., Samsonov D.A. On the New Form of Representing Cauchy Problem for Schrödinger Equation on the Real Time. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2017, no. 1, pp. 26–42. DOI: 10.18698/1812-3368-2017-1-26-42