УДК 519.622.1

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ КВАНТОВЫХ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Попов Н.Н., Башлаков А.М., Есенков А.С.
Учреждение Российской академии наук
Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, г. Москва

Поступила в редакцию 23.07.2009, после переработки 10.09.2009.

В работе рассматриваются квантовые переходные вероятности. Доказывается, что их вычисление сводится к решению системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Описывается метод их вычисления и обсуждается применение для построения имитационных моделей эволюции.

Quantum transitive probabilities are considered. It is proved that their calculation is reduced to the decision of the first order linear differential equations system. The method of their calculation is described and application for construction of simulation models of evolution is discussed.

Ключевые слова: квантовая переходная вероятность, направленность, линейное дифференциальное уравнение, имитационные модели эволюции.
Keywords: quantum transitional probability, direction, linear differential equation, imitating evolution models.

1. Введение

В предлагаемой заметке приводится алгоритм нахождения квантовой переходной вероятности в случае, когда число состояний квантовой системы не более чем счетно. Показывается, что вычисление переходных вероятностей, по существу, сводится к решению, вообще говоря, счетной системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка. В случае, когда рассматриваются квантовые вероятности переходов из одного состояния в другое на интервале времени (τ, t) при условии невыхода процесса из заданного конечного множества состояний $\mathbf{A}$ на (τ, t), показывается, что применим тот же метод расчета. При этом, нахождение квантовых условных вероятностей сводится к решению конечной системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка.

2. Квантовые переходные вероятности со счетными множествами

Пусть $\mathbf{H}$ — сепарабельное гильбертово пространство и $\{\psi_j\}$ $j = 1, 2, \dots$ — ортонормированный базис в $\mathbf{H}$. Множество $\Omega = \{1, 2, \dots\}$ образует счетное множество элементарных событий. Введем на Ω проекторозначную меру $\hat{E}$, действующую в $\mathbf{H}$, то есть для каждого $j \in \Omega$, $\hat{E}(j)$ — ортогональный проектор: $\hat{E}(j)\psi_j = \psi_j$, $\hat{E}(\Omega) = I$, где I – операторная единица.

Введем статистический оператор $\hat{\rho} = \sum\limits_{k\in\Omega} w_k\hat{\rho}_k$, где $\hat{\rho}_k = \hat{E}(k)$, $\sum\limits_{k\in\Omega} w_k = 1$, $w_k \geq 0$, $k \in \Omega$. Каждый статистический оператор $\hat{\rho}$ соответствует некоторому состоянию квантовой системы ρ. Состояние ρ называется чистым, если соответствующий ему статистический оператор имеет вид $\hat{\rho} = \hat{E}(k)$, то есть $\hat{\rho} = \hat{\rho}_k$. Собственный вектор ψ_k оператора ρ_k называется вектором, индуцирующим состояние ρ.

Пусть $\hat{H}$ самосопряженный оператор в $\mathbf{H}$, с областью определения $D(\hat{H})$. Положим $\hat{E}_t(j) = e^{it\hat{H}}\hat{E}(j)e^{-it\hat{H}}$. Согласно Фон Нейману, стационарная квантовая вероятность переход из состояния $\mathbf{r}$ в момент τ, в состояние $\mathbf{j}$ в момент $\mathbf{t}$, в случае, когда система в начальный момент находится в чистом состоянии ρ, находится по формуле [1]:

$$P_\rho(t, j \mid \tau, r) = \mathrm{tr}(\hat{E}_{t-\tau}(j)\hat{\rho}_r),$$

где $r, j \in \Omega$, $\hat{\rho}_r = \hat{E}(r)$, $\mathrm{tr}(\hat{E}_t(j)\hat{\rho}_r) = \langle\psi_r, \hat{E}_t(j)\psi_r\rangle$, $\langle\ \rangle$ — скалярное произведение в $\mathbf{H}$.

Будем говорить, что $\psi \in H$ есть циклический вектор в $\mathbf{H}$ относительно меры $\hat{E}$, если для любого $\phi \in H$, $\phi = \sum\limits_{k\in\Omega} \alpha_k\hat{E}(k)\psi$, где α_k – комплексные числа. Положим $H_{kj} = \langle\psi_k, \hat{H}\psi_j\rangle$, $k, j \in \Omega$.

Имеет место следующий результат.

Теорема 1. Пусть $P_\rho(t, j \mid \tau, r)$, $r, j \in \Omega$, $0 \leq \tau < t < \infty$ – переходная вероятность стационарного квантового процесса со счетным множеством элементарных событий, ρ – чистое состояние. Если ψ – циклический вектор в $\mathbf{H}$, относительно $\hat{E}$ принадлежит $D(\hat{H})$, то

$$P_\rho(t, j \mid \tau, r) = |y_{rj}(t-\tau)|^2,$$

где $y_{rj}(t) = \langle\psi_j, \psi_j(t)\rangle$ – непрерывно дифференцируема по параметру $t \in (-\infty, +\infty)$, для любых $r, j \in \Omega$ и удовлетворяет одновременно двум системам линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt}y_{rj}(t) = \sum_{k\in\Omega} H_{rk}y_{kj}(t),$$

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt}y_{rj}(t) = \sum_{k\in\Omega} y_{rk}(t)H_{kj},$$

$$y_{rj}(0) = \delta_{rj}, \quad r, j \in \Omega.$$

Доказательство. По определению квантовой переходной вероятности

$$P_\rho(t, j \mid \tau, r) = \mathrm{tr}(\hat{E}_{t-\tau}(j)\hat{\rho}_r) = \langle\psi_r, \hat{E}_t(j)\psi_r\rangle.$$

В силу условия теоремы ψ – есть циклический вектор, следовательно, $\hat{E}(r)\psi \neq 0$ для $\forall r \in \Omega$. Покажем, что $\hat{E}(r)\psi \in D(\hat{H})$. Допустим противное, то есть, $\hat{E}(r)\psi \notin D(\hat{H})$, но тогда и $\hat{E}(\Omega\backslash r)\psi \notin D(\hat{H})$, так как в силу условия теоремы $\psi \in D(\hat{H})$ и $\psi = \hat{E}(r)\psi + \hat{E}(\Omega\backslash r)\psi$.

Из условия $\hat{E}(r)\psi$, $\hat{E}(\Omega\backslash r)\psi \neq 0$, получаем, что два ортогональных вектора не принадлежат области $D(\hat{H})$, которая всюду плотна в $\mathbf{H}$. То есть пришли к противоречию. Итак, $\hat{E}(r)\psi \in D(\hat{H})$ для $\forall r \in \Omega$. Следовательно, $\psi_j = E(j)\psi/\|E(j)\psi\| \in D(\hat{H}), j \in \Omega$.

Пусть, $y_{rj}(t) = \langle \psi_r, \psi_j(t)\rangle$, где $\psi_j(t) = e^{-itH}\psi_j$. Тогда $y_{rj}(0) = \delta_{rj}$ и

$$P_\rho(t, j \mid \tau, r) = \langle \psi_r, \psi_j(t-\tau)\rangle\langle \psi_j(t-\tau), \psi_r\rangle = |y_{rj}(t-\tau)|^2.$$

В силу того, что $\psi_j \in D(\hat{H})$ для $\forall r,\, j \in \Omega$, функция $y_{rj}(t)$ непрерывно дифференцируема по параметру $t \in (-\infty, +\infty)$ и

$$\frac{d}{dt} y_{rj}(t) = i\langle \psi_r, \hat{H}\psi_j(t)\rangle.$$

Учитывая, что $\langle \psi_r, \hat{H}\psi_j(t)\rangle = \sum\limits_{k\in\Omega} \langle \hat{H}\psi_r, \psi_k\rangle\langle \psi_k, \psi_j(t)\rangle = \sum\limits_{k\in\Omega} H_{rk} y_{kj}(t)$, получаем первую систему линейных дифференциальных уравнений (ЛДУ) с постоянными коэффициентами. Аналогично, учитывая, что $\langle \psi_k(t), \hat{H}\psi_j(t)\rangle = \langle \psi_k, \hat{H}\psi_j\rangle$ для $\forall t \in (-\infty, +\infty)$ и $\langle \psi_r, \hat{H}\psi_j(t)\rangle = \sum\limits_{k\in\Omega} \langle \psi_r, \psi_k(t)\rangle\langle \psi_k(t), \hat{H}\psi_j(t)\rangle = \sum\limits_{k\in\Omega} y_{rk}(t) H_{kj}$, получаем вторую систему ЛДУ. Теорема доказана.

В качестве примера рассмотрим квантовую систему, которая может находиться в двух состояниях $\{1\}$ и $\{2\}$. Тогда, решая систему ЛДУ

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt} y_{rj}(t) = H_{jj} y_{rj}(t) + y_{rr}(t) H_{rj}, \quad j,\, r = 1, 2,$$

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt} y_{rj}(t) = y_{rj}(t) H_{jr} + y_{rr}(t) H_{rr}, \quad j \neq r,$$

получаем для квантовых переходных вероятностей следующие формулы:

$$P_\rho(t, j \mid \tau, r) = (4H_{rj}H_{jr}/\kappa)\sin^2\left(1/2\sqrt{\kappa}(t-\tau)\right),$$

$$P_\rho(t, r \mid \tau, r) = 1 - P_\rho(t, j \mid \tau, r), \quad j,\, r = 1, 2, j \neq r,$$

где $\kappa = (H_{jj} - H_{rr})^2 + 4H_{rj}H_{jr}$.

3. Квантовые вероятности ... невыхода процесса из ...

Для более детального изучения поведения квантовых процессов можно ввести в рассмотрение квантовые вероятности перехода из одного состояния в другое, при условии невыхода процесса из заданного множества состояний на некотором отрезке времени.

Пусть $L(ab)$ направленное множество всевозможных упорядоченных конечных последовательностей $\{t_1, t_2, \ldots, t_n\}$, таких что $a < t_1 < t_2 < \ldots < t_n < b$. Пусть $\{\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n\}$ и $\{t_1, t_2, \ldots, t_n\} \in L(ab)$, и все элементы $\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n$ содержатся среди элементов $t_1, t_2, \ldots, t_n$, тогда будем говорить, что, $\{\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n\}$ и $\{t_1, t_2, \ldots, t_n\}$ связаны отношением порядка и писать

$$\{\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n\} \succ \{t_1, t_2, \ldots, t_n\}.$$

Для любого $A \subset \Omega$ и $\{t_1, t_2, \ldots, t_n\} \in L(ab)$ положим

$$\hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A) = \hat{E}_{t_n}(A)\ldots\hat{E}_{t_1}(A).$$

При каждом фиксированном $A \subset \Omega$ направленность $\{\hat{E}_{t_1}(A), \ldots, \hat{E}_{t_n}(A)\}$ $\{t_1, t_2, \ldots, t_n\} \in L(ab)$ отображает $L(ab)$ в W^* алгебру Фон-Неймана ограниченных операторов, действующих в гильбертовом пространстве $\mathbf{H}$.

Определение. Будем говорить, что направленность

$$\{\hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A)\}_{(t_1,t_2,\ldots,t_n)\in L(ab)}, \quad A \subset \Omega,$$

сильно равномерно непрерывна по совокупности переменных $t_1, t_2, \ldots, t_n$ относительно $\mathbf{n}$, если для $\forall \phi \in H$ и $\forall \varepsilon > 0$ найдется такое $\delta > 0$, что $\|(\hat{E}_{t_1,\ldots,t_n}(A) - \hat{E}_{t'_1,\ldots,t'_n}(A))\phi\| < \varepsilon$ равномерно по n, как только $\max\limits_{1\le k\le n} |t_k - t'_k| < \delta$.

В $L(ab)$ выделим линейно упорядоченное множество $\mathbf{M}$ последовательностей $\{t_1^{(k)}, \ldots, t_n^{(k)}\}$, $a < t_1^{(k)} < \ldots < t_n^{(k)} < b$, $k = 0, 1, \ldots$, такое что

$$\{t_1^{(m)}, \ldots, t_m^{(m)}\} \succ \{t_1^{(n)}, \ldots, t_n^{(n)}\},$$

если $n < m$ и $\max\limits_{1\le k\le n} |t_k^{(n)} - t_{k-1}^{(n)}| \to 0$ при $n \to \infty$.

Лемма. Пусть направленность $\{\hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A)\}_{(t_1,t_2,\ldots,t_n)\in L(ab)}$, $A \subset \Omega$ сильно равномерно непрерывна по совокупности переменных $t_1, t_2, \ldots, t_n$ относительно n и поднаправленность $\{\hat{E}_{t_1^{(n)},t_2^{(n)},\ldots,t_n^{(n)}}(A)\}, (t_1^{(n)}, t_2^{(n)}, \ldots, t_n^{(n)}) \in M$ сходится в сильном смысле при $n \to \infty$. Положим

$$s - \lim_{n\to\infty} \hat{E}_{t_1^{(n)},t_2^{(n)},\ldots,t_n^{(n)}}(A) = \hat{E}_{(ab)}(A).$$

Тогда направленность $\{\hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A)\}_{(t_1,t_2,\ldots,t_n)\in L(ab)}$ сильно сходится, если

$$\lim_{n\to\infty} \max_{1\le k\le n} (t_k - t_{k-1}) = 0$$

и

$$s - \lim_{n\to\infty} \hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A) = \hat{E}_{(ab)}(A).$$

Доказательство. Фиксируем $\phi \in H$ и $\varepsilon > 0$. Из сходимости поднаправленности следует, что найдется такое $N > 0$, что для всех $n > N$

$$\|(\hat{E}_{t_1^{(n)},t_2^{(n)},\ldots,t_n^{(n)}}(A) - \hat{E}_{(ab)}(A))\phi\| < \varepsilon.$$

В силу сильной равномерной непрерывности направленности по совокупности переменных $t_1, t_2, \ldots, t_n$, относительно n найдется $\delta(\varepsilon)$, такое, что для любого $n > 0$

$$\|(\hat{E}_{t_1,\ldots,t_n}(A) - \hat{E}_{t_1^{(n)},t_2^{(n)},\ldots,t_n^{(n)}}(A))\phi\| < \varepsilon,$$

как только $\max_{1\le k\le n} |t_k - t_k^{(n)}| < \delta(\varepsilon)$.

Выберем $\{t_1, t_2, \ldots, t_r\} \in L(ab)$, так, чтобы $\max\limits_{1\le k\le r} |t_k - t_{k-1}| < \delta(\varepsilon)$. С другой стороны выберем $l > N$ таким образом, чтобы $\max\limits_{1\le k\le r} (t_k^{(l)} - t_{k-1}^{(l)}) < \delta(\varepsilon)$.

Положим $N_0 = \max(l, r)$, тогда для любого $\{t'_1, \ldots, t'_n\} \succ \{t_1, \ldots, t_r\}, n > N_0$ имеем

$$\max_{1\le k\le r} |t_k^{(1)} - t_k^{(n)}| < \delta(\varepsilon)$$

и

$$\|(\hat{E}_{t'_1,t'_2,\ldots,t'_n}(A) - \hat{E}_{(ab)}(A))\phi\| \le \|(\hat{E}_{t'_1,t'_2,\ldots,t'_n}(A) - E_{t_1^{(n)},t_2^{(n)},\ldots,t_n^{(n)}}(A))\phi\| +$$

$$+ \|(E_{t_1^{(n)},t_2^{(n)},\ldots,t_n^{(n)}}(A) - \hat{E}_{(ab)}(A))\phi\| \le 2\varepsilon.$$

Лемма доказана.

Если $\hat{E}_{(t,\tau)}(A)$ существует, то можно ввести квантовую вероятность $P_\rho(t, j, (t, \tau), A \mid \tau, r)$, то есть вероятность того, что если в момент τ система находилась в состоянии $\{r\}$, то в момент t система окажется в состоянии $\{j\}$ и на интервале (t, τ) квантовая система не выйдет из множества $A \subset \Omega, r, j \in A$.

Введем оператор $\hat{E}_{(t,\tau)}(r, A, j) = \hat{E}_t(j)\hat{E}_{(t,\tau)}(A)\hat{E}_\tau(r)$ и положим по определению,

$$P_\rho(t, j, (t, \tau), A \mid \tau, r) = \|\hat{E}_{(t,\tau)}(r, A, j)\psi_\rho\|^2 / \|\hat{E}_\tau(r)\psi_\rho\|^2,$$

где ψ_ρ – вектор, индуцирующий состояние ρ. Имеет место следующий результат.

Теорема 2. Пусть $P_\rho(t, j, (\tau, t), A \mid \tau, r)$, $r, j \in A$, $A \subset \Omega$, $0 \le \tau < t < \infty$ переходная вероятность стационарного квантового процесса со счетным множеством элементарных событий, A – конечное множество элементарных событий, ρ – чистое состояние, ψ – циклический вектор в $\mathbf{H}$, относительно $\hat{E}$.

Если $\psi \in D(\hat{H})$, то $P_\rho(t, j, (\tau, t), A \mid \tau, r) = |y_{rj}^{(A)}(t-\tau)|^2$, где $y_{rj}^{(A)}(t-\tau)$ непрерывно дифференцируема по параметру $t \in [0, \infty)$, для любых $r, j \in A$ и удовлетворяет одновременно двум системам ЛДУ с постоянными коэффициентами.

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt} y_{rj}^{(A)}(t) = \sum_{k\in\Omega} H_{rk} y_{kj}^{(A)}(t),$$

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt} y_{rj}^{(A)}(t) = \sum_{k\in\Omega} y_{rk}^{(A)}(t) H_{kj},$$

$$y_{rj}^{(A)}(0) = \delta_{rj}, r, j \in A,$$

кроме того $\sum\limits_{j\in A} P_\rho(t, j, (\tau, t), A \mid \tau, r) = 1$ для $\forall A \subset \Omega$.

Доказательство. Непосредственной проверкой убеждаемся, что условие леммы для направленности $\{\hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A)\}_{(t_1,t_2,\ldots,t_n)\in L(ab)}$, где

$$\hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A) = e^{it_n\hat{H}}\hat{E}(A)e^{i(t_{n-1}-t_n)\hat{H}} \ldots e^{i(t_1-t_2)\hat{H}}\hat{E}(A)e^{-it_1\hat{H}}$$

выполнены.

Следовательно, если $\lim\limits_{n\to\infty} \max\limits_{1\le k\le n} (t_k - t_{k-1}) = 0$, то $s - \lim\limits_{n\to\infty} \hat{E}_{t_1,t_2,\ldots,t_n}(A) = \hat{E}_{(\tau t)}(A)$ существует. Тогда существует и $\hat{E}_{(\tau,t)}(r, A, j) = \hat{E}_t(j)\hat{E}_{(\tau,t)}(A)\hat{E}_\tau(r)$.

Пусть $\psi_j = \hat{E}(j)\psi / \|\hat{E}(j)\psi\|$, $\psi_j(t) = e^{-it\hat{H}}\psi_j$, $r = r_0$.

Покажем, что справедливо

$$\hat{E}_{(\tau,t)}(r,A,j)\psi_\rho/\langle\psi_\rho,\psi_r(\tau)\rangle = \psi_j(t)\int\limits_0^{t-\tau} e^{i\tau_0 H_{rr}} iH_{rj} e^{i(t-\tau_0)H_{jj}}\,d\tau_0 +$$

$$+\sum_{\kappa=2}^{\infty}\sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\dots,\kappa-1}}\int\limits_0^{t-\tau}\int\limits_0^{\tau_{\kappa-1}}\dots\int\limits_0^{\tau_1} F(r_0,\dots,r_{\kappa-1},\tau_0,\dots,\tau_{\kappa-1})\,d\tau,$$

где $d\tau = d\tau_0 d\tau_1\dots d\tau_{\kappa-1}$,

$F(r_0,\dots,r_{\kappa-1},\tau_0,\dots,\tau_{\kappa-1}) = e^{iH_{r_0r_0}\tau_0} iH_{r_0r_1} e^{iH_{r_1r_1}(\tau_1-\tau_0)}\dots iH_{r_{\kappa-1,j}} e^{i(t-\tau-\tau_{\kappa-1})H_{jj}}$,

если $r\neq j$.

По определению

$$\hat{E}_t(j)\hat{E}_{t_{n-1}}(A)\dots\hat{E}_{t_1}(A)\hat{E}_\tau(r)\psi_\rho = \psi_j(t)\langle\psi_\rho,\psi_r(\tau)\rangle\prod_{k=0}^{n-1}\langle\psi_{r_k}(t_k),\psi_{r_{k+1}}(t_{k+1})\rangle,$$

где $r_n = j$, $r_0 = r$, $t_0=\tau$, $t_n = t$.

Положим $t_k = \tau + (t-\tau)k/n$. Тогда произведение сомножителей в последнем соотношении можно представить в виде

$$\prod_{k=0}^{n-1}\langle\psi_{r_k}(t_k),\psi_{r_{k+1}}(t_{k+1})\rangle = \sum_{\kappa=1}^{n}\sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\dots,\kappa-1}}\sum_{k_0+\dots+k_\kappa=n-\kappa}\left\langle\psi_{r_0},\psi_{r_0}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_0}\times$$

$$\times\left\langle\psi_{r_0},\psi_{r_1}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle\left\langle\psi_{r_1},\psi_{r_1}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_1}\dots$$

$$\dots\left\langle\psi_{r_{\kappa-1}},\psi_{r_j}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_\kappa}\left\langle\psi_j,\psi_j\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_\kappa}.$$

Учитывая, что $\langle\psi_r,\psi_k(t)\rangle$ непрерывно дифференцируема по t, $t\in(-\infty,+\infty)$, для $\forall r$, $k\in\Omega$, и в окрестности нуля $\langle\psi_r,\psi_k(t)\rangle = iH_{rk}t + o(t)$, при $\kappa=1$, получаем

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k_0+k_1=n-1}\left\langle\psi_r,\psi_r\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_0}\left\langle\psi_r,\psi_j\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle\left\langle\psi_j,\psi_j\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_1} =$$

$$= \int\limits_0^{t-\tau} e^{i\tau_0 H_{rr}} iH_{rj} e^{i(t-\tau-\tau_0)H_{jj}}\,d\tau_0, \quad (2)$$

при фиксированном $\kappa>1$ имеем

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k_0+\dots+k_\kappa=n-1}\left\langle\psi_{r_0},\psi_{r_0}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_0}\prod_{l=1}^{\kappa}\left\langle\psi_{r_{l-1}},\psi_{r_l}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle\left\langle\psi_{r_l},\psi_{r_l}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_l} =$$

$$= \int\limits_0^{t-\tau}\int\limits_0^{\tau_{\kappa-1}}\dots\int\limits_0^{\tau_1} e^{i\tau_0 H_{r_0r_0}} iH_{r_0r_1} e^{i(\tau_1-\tau_0)H_{r_1r_1}}\dots iH_{r_{\kappa-1}r_\kappa} e^{i(\tau_\kappa-\tau_{\kappa-1})H_{r_\kappa r_\kappa}}\,d\tau, \quad (3)$$

где $r = r_0, j = r_\kappa$.

Введем обозначение

$$\alpha_\kappa(n) = \sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\ldots,\kappa-1}} \sum_{k_0+\ldots+k_\kappa=n-\kappa} \left\langle \psi_{r_0}, \psi_{r_0}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_0} \ldots \left\langle \psi_{r_\kappa}, \psi_{r_\kappa}\left(\frac{t-\tau}{n}\right)\right\rangle^{k_\kappa}.$$

Из соотношений (2), (3) следует, что $\lim\limits_{n\to\infty} \alpha_\kappa(n)$, $\kappa \geq 1$, существует. Положим $\alpha_\kappa = \lim\limits_{n\to\infty} \alpha_\kappa(n)$, $\kappa = 1, 2, \ldots$. Пусть $\alpha = \max\limits_{r,j} H_{rj}$, так как A конечно, и ψ_j, $\psi_r \in D(\hat{H})$, r, $j \in A$, то $\alpha < \infty$. Пусть N_A – число элементарных событий, входящих в множество A, то есть $N_A = \dim A$. При достаточно больших n равномерно по κ, $|\alpha_\kappa(n)| \leq b_\kappa$, где

$$b_\kappa = \sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\ldots,\kappa-1}} \int\limits_0^{t-\tau}\int\limits_0^{\tau_{\kappa-1}}\ldots\int\limits_0^{\tau_1} e^{\tau_0 H_{r_0 r_0}} \prod_{k=0}^{\kappa-1}(|H_{r_k r_{k+1}}| e^{\Delta\tau_k H_{r_{k+1} r_{k+1}}})\, d\tau,$$

где $\Delta\tau$ и $\sum\limits_{\kappa=1}^{\infty} b_\kappa \leq \sum\limits_{\kappa=1}^{\infty} \frac{1}{\kappa!}[\alpha(N_A-1)(t-\tau)]^\kappa e^{(t-\tau)\alpha} \leq e^{\alpha N_A(t-\tau)}$.

Ряд $\sum\limits_{\kappa=1}^{\infty} \alpha_\kappa$ абсолютно сходится, так как $|\alpha_\kappa| \leq b_\kappa$.

Таким образом, $\sup\limits_n \sum\limits_{\kappa=1}^{\infty} |\alpha_\kappa(n)| < \infty$, $\sum\limits_{\kappa=1}^{\infty} |\alpha_\kappa| < \infty$ и $\lim\limits_{n\to\infty} \alpha_\kappa(n) = \alpha_\kappa$. Покажем$<$ что $\lim\limits_{n\to\infty} \sum\limits_{\kappa=1}^{n} \alpha_\kappa(n) = \sum\limits_{\kappa=1}^{\infty} \alpha_\kappa$. Действительно для $\forall\varepsilon > 0$, $\exists N_1 > 0$ такое, что для $\forall n > N_1$ $\sum\limits_{\kappa=N_1}^{n} |\alpha_\kappa(n)| < \varepsilon$. Отсюда $\sup\limits_{n>N_1} \sum\limits_{\kappa=N_1}^{n} |\alpha_\kappa(n)| < \varepsilon$. Далее, $\exists N_2 > 0$ такое, что $\sum\limits_{\kappa=N_2}^{\infty} |\alpha_\kappa| < \varepsilon$. Пусть $N = \max(N_1, N_2)$, тогда найдется такое $N_0 > N$, что $\sum\limits_{\kappa=1}^{N} |\alpha_\kappa(n) - \alpha_\kappa| < \varepsilon$, для $\forall n > N_0$. Итак, для $\forall\varepsilon > 0$, $\exists N_0 > 0$, такое, что для всех $n > N_0$

$$\left|\sum_{\kappa=1}^{n}\alpha_\kappa(n) - \sum_{\kappa=1}^{\infty}\alpha_\kappa\right| \leq \sum_{\kappa=1}^{N}|\alpha_\kappa(n)-\alpha_\kappa| + \sum_{\kappa=N+1}^{n}|\alpha_\kappa(n)| + \sum_{\kappa=N+1}^{n}|\alpha_\kappa| \leq 3\varepsilon.$$

Отсюда непосредственно следует соотношение (2).

Положим

$$y_{rj}^{(A)}(t) = \int\limits_0^t e^{i\tau_0 H_{rr}} iH_{rj} e^{i(t-\tau_0)H_{jj}}\, d\tau_0 +$$
$$+\sum_{\kappa=2}^{\infty}\sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\ldots,\kappa-1}} \int\limits_0^t\int\limits_0^{\tau_{\kappa-1}}\ldots\int\limits_0^{\tau_1} e^{i\tau_0 H_{r_0 r_0}} iH_{r_0 r_1}\ldots iH_{r_{\kappa-1} j} e^{i(t-\tau_{\kappa-1})H_{jj}}\, d\tau. \quad (4)$$

Из соотношений (2), (4) следует, что

$$P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) = |y_{rj}^{(A)}(t-\tau)|^2, \quad \text{при} \quad r \neq j.$$

Каждый член ряда (4) непрерывно дифференцируем по параметру t, $t \in [0,\infty)$ и ряд производных абсолютно сходится для $\forall t \in [0,\infty)$. Следовательно, ряд в соотношении (4) можно дифференцировать почленно.

Точно также можно показать, что

$$\hat{E}_{(\tau,t)}(r,A,r)\psi_\rho/\langle\psi_\rho,\psi_r(\tau)\rangle = \psi_r(t)\Bigg[e^{i(t-\tau)H_{rr}} +$$

$$+\sum_{\kappa=2}^{\infty}\sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\dots,\kappa-1}}\int\limits_0^{t-\tau}\int\limits_0^{\tau_{\kappa-1}}\dots\int\limits_0^{\tau_1} e^{i\tau_0 H_{rr}} iH_{rr_1}e^{i\Delta\tau_1 H_{r_1r_1}}\dots iH_{r_{\kappa-1}r}e^{i(t-\tau-\tau_{\kappa-1})H_{rr}}\,d\tau\Bigg].$$

Далее, $P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) = |y_{rj}^{(A)}(t-\tau)|^2$, где

$$y_{rr}^{(A)}(t) = e^{itH_{rr}} + \sum_{\kappa=2}^{\infty}\sum_{\substack{r_k\in A\setminus r_{k-1}\\ k=1,\dots,\kappa-1}}\int_0^t\int\limits_0^{\tau_{\kappa-1}}\dots\int\limits_0^{\tau_1} e^{i\tau_0 H_{rr}} iH_{rr_1}\dots iH_{r_{\kappa-1}r}e^{i(t-\tau_{\kappa-1})H_{rr}}d\tau, \tag{5}$$

причем $y_{rr}^{(A)}(t)$ непрерывно дифференцируема по параметру $t \in [0,\infty)$, и ряд в правой части соотношения (5) дифференцируем почленно.

В результате дифференцирования соотношений (4) и (5), а также учитывая $y_{rj}^{(A)}(0) = \delta_{rj}$, получаем первую систему ЛДУ

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt}y_{rj}^{(A)}(t) = \sum_{k\in\Omega} H_{rk}y_{kj}^{(A)}(t), \quad y_{rj}^{(A)}(0) = \delta_{rj}, \quad r,j \in A.$$

Произведя в соотношениях (4) и (5) замену переменных $\tau_0 = t - s_0$, $\tau_1 = t - s_1,\dots,\tau_{\kappa-1} = t - s_{\kappa-1}$, а затем продифференцировав по параметру t получаем вторую систему ЛДУ

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt}y_{rj}^{(A)}(t) = \sum_{k\in\Omega} y_{rk}^{(A)}(t)H_{kj}, \quad y_{rj}^{(A)}(0) = \delta_{rj}, \quad r,j \in A.$$

Далее квантовая вероятность $P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r)$, в силу своего определения, аддитивна по параметру j и

$$\sum_{j\in A} P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) = \|\hat{E}_t(A)\hat{E}_{(\tau,t)}(A)\hat{E}_\tau(r)\psi_\rho\|^2/\|\hat{E}_\tau(r)\psi_\rho\|^2,$$

где $t_k = \tau + (t-\tau)k/n$, $k = 0,1,\dots,n$.

$$\lim_{n\to\infty}\|\hat{E}_{t_0\dots t_n}(r)\psi_\rho\|^2/\|\hat{E}_{t_0}(r)\psi_\rho\|^2 =$$

$$= \lim_{n\to\infty}\left|1 + i(t-\tau)/n\langle\psi_r,\hat{H}\psi_r\rangle + o((t-\tau)/n)\right|^{2n} = 1.$$

Тогда для $\forall A \subset \Omega$ такого, что $\{r\} \subset A$, имеем

$$\hat{E}^*_{t_1\ldots t_n}(A)\hat{E}_{t_1\ldots t_n}(A) \succ \hat{E}^*_{t_1\ldots t_n}(r)\hat{E}_{t_1\ldots t_n}(r)$$

для $\forall\{t_1,\ldots,t_n\} \in L(ab)$. Следовательно,

$$1 \geq \sum_{j\in A} P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) = \lim_{n\to\infty} \|\hat{E}_{t_1\ldots t_n}(A)\hat{E}_{t_0}(r)\psi_\rho\|^2/\|\hat{E}_{t_0}(r)\psi_\rho\|^2 \geq$$

$$\geq \lim_{n\to\infty} \|\hat{E}_{t_0\ldots t_n}(r)\psi_\rho\|^2/\|\hat{E}_{t_0}(r)\psi_\rho\|^2 = 1.$$

Итак $\sum\limits_{j\in A} P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) = 1$. Теорема доказана.

Из теоремы 2 непосредственно следует $P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) \equiv 1$, если $r \subseteq A$ для $\forall A \in \Omega$. То есть, вероятность того, что квантовая система не покинет фиксированного множества A на любом интервале (t,τ), при условии, что наблюдение непрерывно ведется за системой только в этом множестве, тождественно равна единице. Впервые на этот эффект в квантовой теории было обращено внимание в работе [2].

В качестве примера, иллюстрирующего результат теоремы 2, рассмотрим квантовый линейный осциллятор, возмущаемый постоянной силой F. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2 + \frac{1}{2m}\hat{P}^2 - F\hat{X}.$$

Пусть $\{\psi_n\}$ – счетная ортонормированная система собственных векторов самосопряженного оператора $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2$, образующая базис в сепарабельном гильбертовом пространстве H: $\hat{H}_0\psi_n = \hbar\omega(n+1/2)\psi_n$, $n \in \Omega$. Зададим проекторозначную меру $\hat{E}$ на Ω, равенством $\hat{E}(n)\psi_n = \psi_n$, $n \in \Omega$. Тогда $H_{rj} = \langle\psi_r, \hat{H}\psi_j\rangle = 0$, если $j \neq r-1, r, r+1$, $H_{r,r-1} = -F\sqrt{r\hbar/(2m\omega)}$, $H_{rr} = \hbar\omega(r+1/2)$, $H_{r,r+1} = -F\sqrt{(r+1)\hbar/(2m\omega)}$, и, согласно результату теоремы 2,

$$\frac{1}{i}\frac{d}{dt}y^{(A)}_{rj}(t) = \sum\nolimits_{k=j-1}^{k=j+1} y^{(A)}_{rk}(t)H_{kj}, \quad y^{(A)}_{rj}(0) = \delta_{rj}.$$

В частности, если A состоит из двух элементарных событий $\{r\}$ и $\{j\}$, где $j \neq r-1, r+1$, то $y^{(A)}_{rj}(t) \equiv 0$ и $P_\rho(t,j,(\tau,t),A \mid \tau,r) \equiv 1$. Если $j = r-1$, то, полагая $\kappa = 2\hbar F^2/(m\omega)$ и $v = (\hbar\omega)^2$, получим

$$P_\rho(t,r-1,(\tau,t),A|\tau,r) = \kappa r/(v+\kappa r)\sin^2(1/2\sqrt{(v+\kappa r)}(t-\tau)),$$

если $j = r+1$, то

$$P_\rho(t,r+1,(\tau,t),A|\tau,r) = \kappa(r+1)/(v+\kappa(r+1))\sin^2(1/2\sqrt{(v+\kappa(r+1))}(t-\tau)).$$

Результаты теорем 1, 2, по существу, сводят нахождение переходных квантовых вероятностей к решению линейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами.

4. Реализация метода вычисления переходных вероятностей

Метод вычисления переходных квантовых вероятностей реализован для специального случая, когда эрмитова матрица H имеет трехдиагональную форму представления. В общем случае для произвольной эрмитовой матрицы H эта матрица до применения метода предварительно должна приводиться к трехдиагональной форме.

Метод вычисления вероятности естественным образом распадается на две основные стадии:

— получение решений систему ЛДУ первого порядка с постоянными коэффициентами и с n неизвестными (совокупность n задач Коши),

— представление переходных квантовых вероятностей (в табличном или графическом виде) как функций времени с параметрами, характеризующими начальное и конечное состояние перехода.

Получение решений системы ЛДУ строится по известной схеме:

— составление характеристического полиномиального уравнения

$$\det|H - \lambda I| \;=\; 0;$$

— нахождение его корней $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$(собственных значений), которые в случае невырожденной эрмитовой матрицы H являются вещественными и различными;

— определение собственных векторов $\xi_1, \ldots, \xi_n$, из систем линейных уравнений $H\xi_k = \lambda_k \xi_k$ и $\|\xi_k\| = 1$, $\xi_k = (\xi_k^1, \xi_k^2, \ldots, \xi_k^n)$, $k = 1, \ldots, n$, разложение начальных условий r-й задачи Коши по собственным векторам $x_0^{(r)} = \sum_{k=1}^{k=n} C_k^{(r)} \xi_k$, $r = 1, \ldots, n$, (где $x_0^{(r)}$ – единичный вектор и, следовательно, ввиду ортогональности собственных векторов $C_k^{(r)} = \xi_k^{(r)}$), запись решений в виде $x^{(r)}(t) = \sum_{k=1}^{k=n} C_k^{(r)} e^{i\lambda_k t} \xi_k$, где $x^{(r)}(0) = x_0^{(r)}$.

Искомая вероятность определяется по формуле (6):

$$P(t, j \mid o, r) = \left(\sum\nolimits_{k=1}^{k=n} \xi_r^{(k)} \xi_k^{(j)} \cos(\lambda_k t)\right)^2 + \left(\sum\nolimits_{k=1}^{k=n} \xi_r^{(k)} \xi_k^{(j)} \sin(\lambda_k t)\right)^2. \qquad (6)$$

Вычисление характеристического многочлена трехдиагональной матрицы H осуществлялось по рекуррентной формуле. Несколько труднее, при больших n, было находить с высокой точностью, «большие» по величине корни этого характеристического уравнения. Для локализации корней использовался метод Лобачевского [3], а для уточнения значения корней применялся метод Ньютона. Для нахождения собственных векторов применялся метод обратной итерации [4], в котором использовались полученные приближенные собственные значения $\{\lambda_k\}$.

5. Заключение

Как показали расчеты, поведение переходных квантовых вероятностей сильно зависит от числа состояний квантовой системы, чем сильнее «осцилляция» квантовой вероятности.

Создается впечатление, что увеличение числа состояний до счетного множества должно приводить к сингулярному поведению переходных квантовых вероятностей. Однако, в силу полученных результатов, вероятность остается непрерывно-дифференцируемой функцией параметра t и для счетного числа состояний.

Полученные результаты были использованы для создания имитационной модели поведения квантового осциллятора, возмущаемого постоянной силой, в условиях проведения дискретных и непрерывных квантовых измерений. Результаты работы позволяют строить имитационные модели эволюции и для более сложных квантовых систем, учитывающие влияние квантовых измерений на поведение таких систем.

Список литературы

[1] Квантовые случайные процессы и открытые системы Сб. Математик. № 42. М.: Мир, 1988.

[2] B. Misra, E.C.G. Sudarshan. The Zeno's paradox in quantum theory J. Math. Phys. 1977. V. 18, № 4. P. 756–763.

[3] А. Анго. Математика для электро- и радиоинженеров. М.: Наука, 1967.

[4] С. Писсанецки. Технология разреженных частиц. М.: Мир, 1988.