

И.39
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ АН СССР
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Ф.М. Израйлев, Б.В. Чириков, Д.Л. Шепелянский

ПЕРЕХОДНАЯ СТОХАСТИЧНОСТЬ
В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

ПРЕПРИНТ 80 - 210



ПЕРЕХОДНАЯ СТОХАСТИЧНОСТЬ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Ф.М.Израйлев, Б.В.Чириков, Д.Л.Шепелянский

А Н Н О Т А Ц И Я

В работе рассмотрены последние результаты исследований стохастического движения в квантовых динамических системах. Подробно обсуждается явление переходной, или временной стохастичности в квантовой механике. Приведены результаты численного моделирования этого явления. Даны оценки квантовых эффектов в квазиклассической области. Обсуждается простая классическая модель квантовой стохастичности.

I. В в е д е н и е

В работе /1/ была рассмотрена так называемая "динамическая стохастичность", возникающая при определенных условиях в классической механике. Этот термин подчеркивает, что речь идет о некотором специальном случае движения полностью детерминированной (динамической) системы. То, что движение в этом случае оказывается крайне нерегулярным, сложным и непредсказуемым, определяется исключительно внутренней ^{динамикой} системы и никак не связано с каким-либо влиянием внешних случайных возмущений. Такой тип динамического движения получил название стохастического, или хаотического — термины, неопределенность которых отражает огромное разнообразие различных частных случаев такого движения.

Все возрастающий интерес к изучению стохастического движения определяется, в основном, двумя факторами. Во-первых, в различных областях физики, техники и других наук появляется все больше и больше конкретных задач, для решения которых необходима хорошо развитая теория стохастического движения. Во-вторых, этот необычный (нетривиальный) режим движения перебрасывает мостик между считавшимися когда-то противоположными динамическими и статистическими законами физики и дает возможность понять и вывести последние из первых.

С прикладной точки зрения стохастическое движение представляет наиболее распространенную (и опасную) неустойчивость нелинейных колебаний, которая приводит к диффузии системы в фазовом пространстве и другим неприятным последствиям. Примером могут служить потери заряженных частиц в ускорителях /2/, плазменных ловушках /3,4/ или радиационных поясах Земли /5/. Впрочем, иногда та же стохастическая неустойчивость может оказаться и полезной, например, для нагрева плазмы высокочастотным полем (см., например, /6/) или для реализации стохастического метода ускорения заряженных частиц (см./7/).

В рамках приложения теории стохастичности наибольший интерес представляют две проблемы:

1. Нахождение границы, или условий возникновения стохастической неустойчивости движения.

2. Выяснение стохастических свойств стохастического движения,

и, в первую очередь, скорости диффузии системы в фазовом пространстве.

С точки зрения более фундаментальной проблемы соотношения динамических и статистических законов физики наиболее "острым" является вопрос: может ли строго детерминированное движение (динамической системы) быть в то же время случайным (в интуитивном смысле этого слова)? Сколько-нибудь детальное обсуждение этой (отчасти философской) проблемы выходит за рамки настоящей статьи. Однако мы хотели бы сделать несколько кратких замечаний, поскольку нам кажется важным способствовать преодолению все еще существующего психологического барьера, воздвигнутого многовековой традицией противопоставления детерминированного и случайного. Развитие современной эргодической теории, а также алгоритмической теории сложности Колмогорова достигла в последнее время такого уровня, что на поставленный выше вопрос можно дать вполне утвердительный ответ, а именно, существуют такие динамические (полностью детерминированные) системы, движение которых принципиально неотличимо от "случайного", какое бы содержание мы ни вкладывали в последний термин. Справедливость такого "глобального" утверждения связана с одной интересной (частной) особенностью движения случайной динамической системы: на языке символической динамики множество ее траекторий является полным, т.е. содержит вообще все возможные траектории. Мы еще вернемся к этому интересному вопросу ниже, в разделе 4.2. Систематическое и относительно доступное изложение этого круга вопросов можно найти, например, в обзорах /8-10/. Вполне реальным примером такой случайной динамики являются упругие столкновения шариков в бильярде как это было показано в классических работах Синая (см./10/). Поэтому сегодня образцом настоящего случайного процесса является не традиционная монетка и не рулетка в Монте-Карло, а шарики "Спортлото"!

Такие системы называются в эргодической теории бернуллиевскими, мы будем называть их просто случайными. Напомним, что такие системы могут быть очень простыми, в частности, для случайной динамики достаточно всего двух степеней свободы (см., например, /10/).

В работе /1/ рассматривались только гамильтоновы (недиссипативные) системы. Такие системы называют иногда консервативными,

однако, этот термин представляется нам неудачным, так как возникает путаница с сохранением энергии. В действительности, энергия гамильтоновой системы может и не сохраняться, если гамильтониан явно зависит от времени. Существенно, однако, что и в этом случае сохраняется фазовая плотность (теорема Лиувилля). Это значительно упрощает статистический анализ стохастического движения гамильтоновых систем, так как они обладают простой и известной заранее инвариантной мерой.

До недавнего времени считалось, что включение диссипации упрощает динамику, поскольку казалось, что все траектории системы асимптотически приближаются при этом либо к устойчивому равновесию, либо к устойчивому периодическому решению (предельный цикл) — простейшие примеры аттракторов в диссипативной системе. Сейчас мы знаем, что это далеко не всегда так. Первый пример нетривиального (стохастического) аттрактора был исследован в классической работе Лоренца /11/. Нетривиальность аттрактора Лоренца связана как с тем, что движение на нем является стохастическим, так и с тем, что его геометрическая структура в динамическом пространстве системы является весьма сингулярной (канторовой). Следует отметить, что такая структура стохастического аттрактора является типичной для так называемых систем Аносова /12/ с диссипацией, которые также оказываются бернуллиевскими. Один из видов стохастического аттрактора был подробно исследован Смейлом /13/. Поэтому популярность в последнее время термина "странный аттрактор" вызывает удивление (странный — для кого?).

Основная трудность теоретического анализа движения на стохастическом аттракторе связана с тем, что необходимо предварительно найти инвариантную меру, которая может оказаться очень сингулярной в исходном динамическом пространстве. Заметим, однако, что в случае системы Аносова со слабой диссипацией можно приблизительно использовать простую инвариантную меру соответствующей системы без диссипации, например, фазовую плотность близкой гамильтоновой системы. Это следует из того факта, что все системы Аносова являются грубыми /12/. Здесь возникает, однако, другая трудность, связанная с тем, что во многих практически интересных случаях приходится иметь дело с более общими системами, которые, в частности, не являются грубыми. Для таких систем слабая диссипация приводит, как правило, к вырождению стохастического движения в периодическое /14/. Это вырождение, правда, снимается с

ростом диссипации, однако, при этом инвариантная мера может оказаться уже достаточно сложной.

Следует отметить, что диссипативная система не является, строго говоря, чисто динамической, во всяком случае, если речь идет о реальной физической системе. Действительно, диссипация отражает (в очень упрощенном виде) некоторый стохастический процесс на молекулярном уровне и потому неминуемо сопровождается флуктуациями, т.е. некоторым внешним по отношению к динамической системе случайным возмущением, которое вообще говоря необходимо также принимать во внимание. Прекрасный обзор работ по диссипативной стохастичности можно найти, например, в статьях /15/.

Отметим также, что в некоторых простейших случаях полное и строгое исследование стохастического движения возможно на основе современной эргодической теории. Это, например, уже упоминавшиеся системы Аносова. Однако такой класс динамических систем оказывается слишком узким с точки зрения приложений. В последнее время здесь достигнуты некоторые успехи в направлении расширения класса динамических систем, допускающих строгий математический анализ /16/.

Основным содержанием настоящей работы являются некоторые последние результаты физической теории стохастичности, которая опирается на модельные представления, различные приближения и оценки и подкрепляется численным моделированием. Мы рассмотрим ниже поведение квантовых систем, стохастических в классическом пределе. Значение этой проблемы с точки зрения физики, состоит в том, что квантовая механика дает более точное описание реальных физических систем. Поэтому возникает вопрос: в какой мере необычные свойства стохастического движения классической системы сохраняются в квантовой теории? В принципе, ответ на этот вопрос давно известен (см., например, /17/), хотя некоторым он и может показаться неожиданным: в квантовой динамике стохастичность вообще невозможна, точнее, временная эволюция волновой функции (или матрицы плотности) ограниченной в фазовом пространстве замкнутой квантовой системы всегда оказывается почти-периодической, т.е. ее частотный спектр является дискретным. В классической механике движение рассматривается как прямая противоположность стохастичности, например, движение полностью интег-

рируемой системы.

В настоящей статье предпринята попытка разрешить это кажущееся противоречие с помощью представления о переходной, или временной стохастичности. Этот подход основан на введении разных масштабов времени таким образом, что различные статистические свойства классической динамики проявляются на некоторых конечных интервалах времени квантового движения.

Если теперь перенести такой подход назад в классическую механику, мы приходим к любопытному выводу, что и здесь почти-периодическое движение, например, движение полностью интегрируемой системы, может, при определенных условиях, имитировать стохастический процесс на конечном интервале времени. Подобная имитация фактически давно известна и, более того, является основным приемом при исследовании статистических свойств макросистем (в частности, при выводе кинетических уравнений) в статистической физике. Насколько нам известно, такой подход бы использован впервые Боголюбовым /18/, который исследовал статистические свойства большого числа $N \rightarrow \infty$ несвязанных линейных осцилляторов, и в некотором смысле закончен в работе /19/, где строго доказана бернуллиевость (случайность) классического идеального газа, также при $N \rightarrow \infty$.

Новая постановка задачи, естественно возникающая в классической механике из анализа квантовой динамики, состоит в следующем: при фиксированном (и необязательно большом) числе степеней свободы классической полностью интегрируемой системы найти условия и масштабы времени, для которых имеет место имитация стохастического движения. В частности, такая задача возникает при численном моделировании классической стохастичности. В силу дискретного представления чисел в компьютере все траектории любой динамической системы оказываются при этом просто периодическими. Учитывая широкое распространение численного моделирования при исследовании различных динамических систем, оценка точности и пределов такого моделирования представляется весьма важной. Этот круг вопросов будет обсуждаться в разделе 4.

Пользуемся случаем выразить нашу искреннюю благодарность Г.М.Заславскому, Д.Казати, Я.Г.Синаю, В.В.Соколову, Дж.Форду и С.А.Хейфецу за полезные обсуждения ряда вопросов, затронутых в настоящем обзоре.

2. Стохастичность в квантовой динамике

Несмотря на кажущуюся парадоксальность сейчас уже можно считать строго доказанным, что движение некоторых простых полностью детермированных динамических систем классической механики приводит к случайному (без кавычек) процессу. Более того, можно, по-видимому, считать, что само понятие случайности наиболее естественно определить теперь через стохастическое движение динамических систем классической механики как некоторый крайний случай детермированного процесса.

Понятен и механизм возникновения такого чрезвычайно сложного и многообразного процесса, связанный с сильной локальной неустойчивостью движения. В частности, можно считать, что такая неустойчивость как бы "развертывает" во времени ту сложность и своеобразие каждой конкретной реализации случайного процесса, которая уже заложена в точно заданных начальных условиях классического движения /20/. В этой связи следует подчеркнуть, что статистические свойства классического движения не связаны с "практической неопределенностью начальных условий", как это иногда считается, и проявляются также и на отдельной траектории.

С другой стороны, та же самая локальная неустойчивость приводит к сильной зависимости динамической картины движения не только от начальных условий, но и от различных малых возмущений системы, в том числе и от различных приближений как в каждой конкретной задаче, так и во всей схеме классической механики. Возникает важный вопрос, в какой мере все эти приближения могут изменить статистические свойства классической системы?

На первый взгляд может показаться, что эта проблема решается с помощью понятия грубости динамической системы. Действительно, многие стохастические системы, например, все системы Аносова, являются грубыми и, следовательно, хотя отдельные траектории таких систем и весьма чувствительны к малым возмущениям, общая структура движения и, в частности, его статистические свойства изменяются лишь незначительно. Однако математическая теория грубости динамических систем несмотря на ее кажущуюся общность имеет свои ограничения даже и в области классической динамики (см. раздел 4.2 ниже). Тем более совершенно неочевидно заранее влияние хотя и очень малых в некотором

смысле, но весьма фундаментальных по своей природе квантовых эффектов. Иначе говоря, возникает проблема изучения квантовомеханического поведения динамических систем, стохастических в классическом пределе.

Этой проблеме посвящено уже довольно большое число работ. Здесь возможны самые различные подходы, которые, грубо говоря, можно разделить на два основных направления. В первом из них авторы исходят из фундаментального отличия квантовой динамики от классической, связанного с дискретностью спектра энергий (и частот) квантового движения. Мы обсудим эту проблему в разделе 3.1. На этом основании некоторые авторы просто отказываются от рассмотрения проблемы квантовой стохастичности /21/. Другие придерживаются более конструктивной позиции: принимая, явно или неявно, отмеченное выше фундаментальное различие между классической и квантовой динамикой, они ставят вопрос иначе (см., например, /22-27/): каковы особенности квантовой динамики тех систем, которые в классическом пределе являются стохастическими?

Авторы второго направления пытаются, наоборот, обобщить все свойства и понятия классической стохастичности на квантовые системы в очевидном противоречии с философией первого направления (см., например, /28-31/). Следует сразу отметить, что с точки зрения физики имеются серьезные аргументы в пользу второго направления, опирающиеся на принцип соответствия, согласно которому при больших квантовых числах должен существовать какой-то переход к классической механике, в том числе и для стохастического движения. Эти общие соображения можно дополнить ссылкой на хорошо известную теорему Эрнфеста, из которой следует, что достаточно узкий квантовый пакет движется по классической траектории, в том числе и по стохастической траектории (см. раздел 3.3).

По-видимому, первая попытка разрешения описанного выше противоречия принадлежала Крылову /17/, который попытался обобщить принцип дополнительности на соотношение между микро- и макроописанием квантовой системы. Этот интересный подход пока не получил, однако, дальнейшего развития. Ниже мы рассмотрим другой подход, основанный на введении различных временных масштабов квантового движения.

3.1. Почти-периодичность квантовой эволюции

Мы начнем обсуждение с проблемы дискретности квантового спектра, которая существенно ограничивает возможные статистические свойства квантового движения и, в частности, полностью исключает стохастичность в классическом понимании этого слова (см./1/). По-видимому, впервые на эту трудность обратил внимание Крылов /17/ и затем она обсуждалась в ряде других работ (см., например, /32-33, 21/). Действительно, дискретность спектра влечет за собой почти-периодическую эволюцию во времени как волновой функции системы, так и ее матрицы плотности (или функции Вигнера). В классической механике такой тип движения рассматривается обычно как противоположный стохастичности предельный случай, характерный для полностью интегрируемых систем. Заметим, что для удобства сравнения с квантовой механикой полезно перейти от обычной картины движения отдельной классической системы по траектории к эволюции некоторой функции фазового пространства системы (например, но не обязательно, функции распределения ансамбля систем) согласно уравнению Лиувилля. Спектр последнего может быть как дискретным (регулярное движение), так и непрерывным (стохастичность).

Ввиду важности спектральных характеристик движения попробуем ответить на вопрос, насколько общим является утверждение о дискретности квантового спектра. Поскольку это касается простейших квантовых задач, описываемых уравнением Шредингера, дискретность спектра является строгим математическим результатом при дополнительном условии ограниченности системы в фазовом пространстве (в том числе и по энергии, т.е. для замкнутых систем). Спектр незамкнутых систем с несохраняющейся энергией может быть и непрерывным (см. раздел 3.2). Заметим, однако, что, как и в классической механике, незамкнутая система — это всего лишь упрощенная модель какой-то более сложной замкнутой системы. Поэтому особенности динамики незамкнутых систем не являются столь принципиальными.

Более существенным является вопрос о спектре других квантовых уравнений, например, уравнений квантовой теории поля и их существующих и будущих обобщений, в том числе и нелинейных. Не

может ли оказаться, что уравнение Шредингера, которое лишь приближенно описывает простейшие квантовые системы, является исключительным в этом отношении, и что какое-то нелинейное обобщение полевых уравнений уже привело или приведет в будущем к непрерывному спектру и классической стохастичности в квантовой динамике?

Мы хотели бы высказать здесь некоторые простые физические аргументы в пользу того, что дискретность спектра ограниченной квантовой системы является весьма фундаментальной особенностью квантовой механики. Наши аргументы базируются на одном из основных статистических свойств классической динамики — так называемом перемешивании. С одной стороны, это свойство непосредственно приводит к диффузии системы в фазовом пространстве, а с другой оно связано с непрерывным спектром движения, или оператора Лиувилля. Следует, пожалуй, отметить здесь некоторую математическую тонкость: непрерывный спектр эквивалентен несколько более слабому статистическому свойству, которое так и называется — слабое перемешивание. Мы, однако, не будем входить здесь в эти детали.

Непрерывный спектр движения ^{означает}, что в системе происходит какой-то апериодический процесс, хотя само движение является стационарным. Таким апериодическим процессом является необратимая релаксация функции распределения к равновесной (константе). Если разложить начальную функцию распределения в ограниченной области, например, в ряд Фурье, то процесс релаксации означает "исчезновение" всех Фурье-компонент кроме константы. Но поскольку как классическая, так и квантовая механика обратима, то это "исчезновение" может объясняться лишь тем, что ненулевые волновые вектора Фурье-компонент будут неограниченно (апериодически) возрастать, т.е. будут "исчезать" на бесконечности. В классической механике волновой вектор функции распределения есть чисто кинематическое понятие, и никаких принципиальных ограничений на его изменение не существует. В противоположность этому, в квантовой механике волновой вектор ψ — функции или матрицы плотности связан с импульсом, а, следовательно, и с энергией системы. Поэтому для замкнутой квантовой системы описанный выше апериодический процесс невозможен, что и приводит к дискретному спектру частот (и энергий). Это ограничение представляется нам весьма фунда-

ментальным и не связанным с конкретными квантовыми уравнениями. Последнее утверждение надо понимать в том смысле, что для описания квантовой системы ^{логично} только такие уравнения, линейные или нелинейные, которые автоматически обеспечивают дискретность квантового спектра. Весьма вероятно, что все эти (нелинейные) уравнения являются полностью интегрируемыми.

Таким образом, нам представляется, что одной из принципиальных особенностей квантовой динамики является дискретность квантового спектра и, следовательно, почти-периодичность квантовой эволюции. Но это означает, что по крайней мере асимптотически по времени ($t \rightarrow \infty$) стохастическое движение квантовой системы действительно невозможно. Единственное, и самое слабое, статистическое свойство, которое может иметь место в этом пределе квантового движения, это эргодичность (см. /26-27/, а также раздел 3.4). Имеются две основные проблемы, связанные с квантовой эргодичностью. Это, во-первых, исследование распределения квантовых уровней /22-24/ и, во-вторых, эргодические свойства собственных функций.

С другой стороны, для квантовой системы, стохастической в классическом пределе, узкий волновой пакет все-таки движется по стохастической траектории (теорема Эренфеста)! Правда, пакеты, как известно, расплываются. Однако скорость этого расплывания можно сделать сколь-угодно малой, если уйти достаточно далеко в квазиклассическую область. Поэтому, по крайней мере в течение некоторого времени, квантовое движение будет столь же стохастическим, в частности, случайным, как и классическое. Это наводит на мысль, что для разрешения кажущегося противоречия между дискретностью квантового спектра и принципом соответствия следует ввести различные масштабы времени квантового движения. Фактически мы уже знаем два таких масштаба. Один из них $t \geq T_d$ можно назвать дискретным, на нем в полной мере проявляется характерная для квантовых систем дискретность спектра. В обратном пределе $t \leq T_r$, который мы будем называть случайным, квантовое движение близко к классическому пределу, правда, при дополнительном ограничении на начальное состояние квантовой системы, волновая функция которого должна иметь вид узкого пакета. На этом и только на этом масштабе времени, как мы увидим ниже, квантовая система может быть полностью стохастической, или слу-

чайной.

Нашей основной задачей является выяснение следующего вопроса: совпадают ли (по порядку величины) обе границы (T_r , T_d) и если нет, то какой характер имеет движение между ними? Эта проблема исследовалась в работе /34/ путем численного моделирования простой квантовой системы, правда, не в такой ясной постановке вопроса как мы имеем возможность это сделать сейчас. В следующем разделе мы даем краткое описание и анализ результатов этой работы.

3.2. Простая модель "квантовой стохастичности"

В качестве простейшей модели квантовой системы в работе /34/ был выбран квантовый аналог стандартного отображения /1/. Эта модель была выбрана по следующим соображениям. Во-первых, ее динамика в классическом пределе была уже подробно изучена /35/. Во-вторых, в классической механике к стандартному отображению приводятся многие конкретные задачи. Наконец, в третьих, эта модель является незамкнутой системой (отображение эквивалентно физически некоторому внешнему периодическому возмущению), в которой, в принципе, непрерывный спектр квазиэнергий не исключен как в замкнутой системе.

Рассматриваемая модель представляет из себя ротатор во внешнем поле с гамильтонианом:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \tilde{k} \cos \theta \delta_{\tilde{T}}(\tau) \quad (3.2.1)$$

где θ - угловая переменная, \tilde{k} - параметр, характеризующий величину возмущения, $\delta_{\tilde{T}}(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - n\tilde{T})$ - периодическая дельта-функция.

Соответствующая классическая задача имеет гамильтониан:

$$H = \frac{p^2}{2} + \tilde{k} \cos \theta \delta_{\tilde{T}}(\tau) \quad (3.2.2)$$

и ввиду периодичности возмущения движение ротатора можно описывать отображением:

$$\bar{p} = p + \tilde{k} \sin \theta \quad (3.2.3)$$

$$\bar{\theta} = \theta + \tilde{T} \bar{p}$$

которое сводится к стандартному отображению с параметром $K = \tilde{k} \tilde{T}$.

Решение квантовой задачи выразим через собственные функции свободного ротатора:

$$\Psi(\theta, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n(\tau) \frac{e^{in\theta}}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.2.4)$$

в форме отображения для амплитуд A_n через период возмущения /34/:

$$\bar{A}_n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} F_{nm} A_m \quad (3.2.5)$$

где $F_{nm} = (-i)^{n-m} \exp(-i \frac{Tm^2}{2}) J_{n-m}(k)$; $J_e(k)$ - функция Бесселя; $k = \bar{k}/\hbar$; $T = t \bar{T}$. Из свойств функций Бесселя; следует, что один толчок захватывает с экспоненциальной точностью $\approx 2k$ уровней и поэтому сумма в (3.2.5) фактически содержит $\approx 2k$ членов, что и было использовано при численном исследовании модели (3.2.1).

Проведенные численные эксперименты показали, что движение квантовой системы (3.2.1) обладает следующей интересной особенностью. При $kT > 1$ и $k > 1$ в квантовой системе, как и в классической, происходит диффузия по импульсу p со скоростью

$$D_p = \frac{\Delta \langle p^2 \rangle}{\Delta t} = 2 \frac{\Delta E}{\Delta t} \approx \frac{k^2}{2} \quad (3.2.6)$$

где

$$E = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{n^2}{2} |A_n|^2 \quad (3.2.7)$$

средняя энергия ротатора. Однако скорость диффузии остается близкой к классической только в течение некоторого времени t^* . При $t > t^*$ скорость диффузии существенно падает (см. рис.1) и на очень больших временах диффузия практически прекращается. Время t^* растет с ростом k . Здесь и далее t - целое.

При $t > t^*$ распределение по уровням в нормированных координатах $X = n^2/k^2 t$, $f_N(n) = |A_n|^2 / \sum |A_n|^2$ также существенно отличается от классического: $f_N = e^{-X}$ (см. рис.2). При счете использовались различные начальные условия: возбуждение только нулевого уровня ($n_0 = 0$, равномерное по θ); возбуждение до 100 нижних уровней со случайными амплитудами; гауссовское распределение с шириной $10 \leq \Delta n \leq 200$ вблизи уровня $n_0 = 0, 500, 1000$ (полное число уровней в модели достигало 4001). Существенной зависимости движения от начальных условий не наблюдалось.

Дополнительные численные эксперименты /36/ показали, что на временах $t < t^*$ характеристики движения квантовой системы

близки к классическим. Так, было проведено сравнение зависимости скорости диффузии D_p от параметра kT (для классической системы этот вопрос изучался в /35/). Результаты экспериментов указывают на хорошее согласие этой зависимости в классическом и квантовом случаях: для квантовой задачи наблюдаются такие же осцилляции D_p и с тем же периодом, что и для классической (см. рис.3).

В области параметров $kT < 1$, $k > 1$ изменение энергии, как и в классическом пределе, оказывается ограниченным. То же самое имеет место и при $k \leq 1$, $kT > 1$, что указывает на существование квантовой границы устойчивости, предсказанной в /29/. В рассматриваемом случае механизм этой квантовой устойчивости вполне понятен из выражения (3.2.5). Действительно, для $k \ll 1$ все F_{nm} пренебрежимо малы за исключением $F_{nn} \approx 1$. Это значит, что переходы между невозмущенными уровнями практически отсутствуют. Можно предположить, что квантовая граница устойчивости грубо соответствует условию $k \sim 1$.

Существует еще один своеобразный тип движения рассматриваемой системы, который был обнаружен в /34/ и назван квантовым резонансом. Он имеет место при $T = 4\pi m$, где m - любое целое число. При точном резонансе средняя энергия ротатора растет пропорционально t^2 . Такое же поведение было обнаружено численно и при некоторых дробных резонансах $T = 4\pi p/q$, тогда как для полупривольного резонанса $T = 2\pi$ движение оказалось строго периодическим.

Подробное исследование квантового резонанса было проведено в /37/. Было показано, что при любых целых p, q кроме $p/q = 1/2$ асимптотически по времени энергия растет пропорционально t^2 при любом k . Это означает, что в резонансе отсутствует квантовая граница устойчивости ($k \sim 1$). Важно отметить также, что отсутствует и классическая граница устойчивости ($kT \approx 1$), хотя при этом система может находиться глубоко в квазиклассической области.

Полная система квантовых резонансов является всюду плотной (по T), а спектр квазиэнергий в резонансе оказывается непрерывным. Вместе с тем в /37/ было показано, что для иррациональных значений T/π (мера которых равна единице) влияние резонансов оказывается несущественным и поэтому явление замед-

ления диффузии требует отдельного исследования.

Результаты исследований, приведенные в этом разделе, указывают на существенное отличие в поведении квантовой системы по сравнению с классической на достаточно больших временах ($t > t^*$). Специальные численные эксперименты показали, что этот масштаб времени (t^*) значительно больше, чем время распыления пакетов, которое в условиях экспериментов составляло всего один-два толчка. Таким образом результаты численного моделирования указывают на то, что введение в разделе 3.1 масштабы T_r и T_d существенно различаются ($T_r \ll T_d$), а движение системы при $t \leq T_d$ характеризуется классической диффузией. Ниже мы еще вернемся к этому вопросу. Косвенным подтверждением значительного различия этих масштабов служит отсутствие каких-либо признаков локальной неустойчивости квантового движения согласно результатам работы /34/.

3.3. Квазиклассическое приближение

Численные эксперименты, описанные в разделе 3.2 показали, что в квазиклассической области ($k \gg 1$, $T \ll 1$, $kT = \text{const}$) при $kT > 1$ по крайней мере в течение некоторого времени отдельные статистические характеристики квантовой системы оказываются близкими к классическим. Покажем, что этот результат может быть получен в квазиклассическом приближении. Для этого воспользуемся хорошо известным квазиклассическим представлением для волновой функции (см., например, /38/):

$$\Psi(x, \tau) = \sum_{\ell=1}^N |J_{\ell}|^{-1/2} \exp(i S_{\ell}(x)/\hbar - i \frac{\pi}{2} \mu_{\ell}) \cdot \varphi_{\ell}(x_0^{\ell}(x, \tau)) + O(k^{-1}) \quad (3.3.1)$$

Сумма по ℓ представляет основной член квазиклассического разложения, который, как правило, только и рассматривается большинством авторов. Суммирование проводится по всем классическим траекториям, приходящим в точку X в момент времени τ и удовлетворяющим начальным условиям

$$x_0(x, \tau) = x_0^{\ell}, \quad p_0(x_0^{\ell}) = \left. \frac{\partial S_0(x_0)}{\partial x_0} \right|_{x_0=x_0^{\ell}} \quad (3.3.2)$$

Начальная волновая функция имеет вид:

$$\Psi(x_0, 0) = \varphi_0(x_0) \exp(i \frac{S_0(x_0)}{\hbar})$$

якобиан классической траектории $J_{\ell}(x, \tau) = \left. \frac{\partial X(x_0, \tau)}{\partial x_0} \right|_{x_0=x_0^{\ell}}$; $S_{\ell}(x, \tau)$ - действие вдоль классической траектории, соединяющей точки x_0^{ℓ} , x , а μ_{ℓ} - индекс Морса этой траектории. Квантовые поправки представлены в (3.3.1) членом $O(k^{-1})$. Обычно они оказываются малыми, хотя, как будет показано в разделе 3.5, со временем их величина растет и на больших временах их вклад в (3.3.1) становится существенным.

Для стохастических систем в силу локальной неустойчивости траекторий число членов в сумме (3.3.1) N и якобиан $J_{\ell}(x, \tau) = \frac{\partial X^{\ell}(x_0, \tau)}{\partial x_0}$ растут экспоненциально со временем: $N \sim \exp(h\tau)$, $J_{\ell} \sim \exp(h\tau)$, где h - КС - энтропия.

Стохастичность классической системы приводит также к экспоненциально быстрому распылению квазиклассического пакета. На примере модели (3.2.3) ($\hbar = 1$) рассмотрим этот вопрос подробнее, поскольку распыление пакета определяет введенный в разделе 3.1 масштаб времени T_r , на котором квантовое движение может быть полностью случайным. Для оценки этого масштаба заметим, что физический смысл основного члена квазиклассического разложения (3.3.1) состоит в том, что начальное квантовое состояние $\varphi_0(x_0)$ распространяется по классическим траекториям. Следовательно, распыление квантового пакета можно грубо оценить как расхождение пучка классических траекторий (при этом интерференционными членами можно пренебречь как будет показано ниже в этом разделе). Скорость распыления пакета определяется при этом классической КС-энтропией системы h , однако, полное время распыления t_s зависит от начальных размеров пакета: $\Delta\theta_0$ - по фазе и Δp_0 - по импульсу (квантовому числу ротатора). Можно считать, что пакет полностью расплылся, когда его конечный размер $\Delta\theta \sim 1$ или когда $\Delta p \sim 1/T = k/\chi$, где $\chi = kT$ - классический параметр устойчивости системы (3.2.3). Условие на Δp вытекает из второго уравнения (3.2.3), так как при $\Delta p \cdot T \gg 1$ размер $\Delta\theta$ становится ≥ 1 на одном периоде возмущения. Учитывая, что из соотношения неопределенности $\Delta\theta_0 \geq 1/\Delta p_0$, а $\Delta p_0 \geq 1$, найдем время полного распыления по фазе $t_s^{(\theta)} \leq \ln(\Delta p_0)/h$ и по импульсу $t_s^{(p)} \leq \ln(k/\chi \Delta p_0)/h$. Фактически время распыления пакета будет порядка наименьшего из $t_s^{(\theta)}$; $t_s^{(p)}$. Из условия $t_s^{(\theta)} \sim t_s^{(p)}$ найдем $\Delta p_0 \sim \sqrt{k/\chi}$, соответствующее наибольшему

$$t_s \sim \frac{\ln(k/K)}{2h} \quad (3.3.3)$$

Для типичных значений параметров модели ($k=40$; $K=5$) $t_s \sim 1$ в соответствии с результатами численных экспериментов (раздел 3.2).

Масштаб (3.3.3) вообще говоря, очень мал и слабо зависит от параметра квазиклассического приближения k . Тем не менее условием применимости (3.3.1) является малость следующих членов разложения в (3.3.1) ($O(k^{-1})$), которая приводит к временам, значительно превышающим t_s (см. раздел 3.5).

Из (3.3.1) видно, что квазиклассическое разложение несправедливо вблизи вырожденных стационарных точек, в которых $J_l(x) = 0$. В этих точках волновая функция имеет каустическую структуру. Если имеется q траекторий с каустиками, то в сумме (3.3.1) тем не менее остается $N-q$ квазиклассических членов (без сингулярности). Со временем число q , так же как и N , растет экспоненциально, но так как размер каустики конечен и мал ($\sim k^{-2/3}$, [38]) и каустики распределены по θ более или менее равномерно, то $q \sim k^{-2/3} N \ll N$. Отметим также, что высота пика Ψ — функции вблизи каустики экспоненциально уменьшается со временем $\sim k^{1/6} \exp(-ht)$. На основе сказанного, в отличие от [25], приходим к выводу о том, что влияние каустик на всех временах является малым и им можно пренебречь. Этот результат подтверждается проведенными в [36] численными экспериментами.

Считая квантовые поправки к основному квазиклассическому члену (3.3.1) малыми, найдем зависимость энергии ротатора от времени

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left| \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right|^2 dx \quad (3.3.4)$$

Основной вклад дает дифференцирование действия в экспоненте. Дифференцирование предэкспоненты и сдвига в фазе μ_l дает не нарастающие со временем поправочные члены порядка k^{-1} от основного вклада:

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} dx \left\{ \sum_{l,l_1=1}^N P_l(x) P_{l_1}(x) |J_l J_{l_1}|^{-1/2} \cdot \exp[i(S_l(x) - S_{l_1}(x) - \frac{\pi}{2}(\mu_l - \mu_{l_1}))] \cdot \Psi_0(x_0^l(x,t)) \Psi_0(x_0^{l_1}(x,t)) \right\} \quad (3.3.5)$$

где $P_l(x) = \frac{\partial S_l(x)}{\partial x}$ — классический импульс вдоль l -ой траектории, приходящей в точку X ; $x_0^l(x,t)$ — начальная точка l -ой траектории как функция конечной.

Оценим вклад от интерференционных членов с $l \neq l_1$. Их число $N_{int} \sim N^2$, а величина каждого члена

$$R \sim \int_0^{2\pi} dx \exp(i(S_l(x) - S_{l_1}(x))) \sim \exp(-2ht) \sim N^{-2}$$

Входящий в R интеграл является типичной корреляционной функцией, экспоненциально затухающей со временем из-за стохастичности классического движения. Таким образом мы имеем сумму N_{int} случайных величин с амплитудой $R \sim N^{-2}$, которая равна $\sum_{int} \sim N_{int} R \sim N^0$. В отсутствие стохастичности классического движения эта оценка становится неприменимой. Однако интерференционными членами можно пренебречь и в этом случае. Это следует из универсальной оценки, справедливой как для стохастического, так и для регулярного движения в классическом пределе [39]. Поэтому интерференционные члены с $l \neq l_1$ в (3.3.5) можно пренебречь и остается только сумма по $l = l_1$, дающая классическое значение энергии.

Таким образом основной член квазиклассического приближения (3.3.1) не объясняет наблюдаемого уменьшения или даже прекращения диффузии в квантовой системе. Последнее связано очевидно с квантовыми поправками, которые хотя и малы в квазиклассической области, но могут нарастать со временем. Этот вопрос будет рассмотрен в разделе 3.5. Предварительно в следующем разделе мы получим простые оценки квантовых эффектов в квазиклассической области.

3.4. Наглядная картина переходной стохастичности

Возможное объяснение явления ограничения диффузии, описанного в разделе 3.2, состоит в том, что спектр квазиэнергий в этой незамкнутой системе, который в принципе может быть непрерывным, на самом деле оказывается дискретным. Эта гипотеза до известной степени подтверждается произведенным нами прямым численным определением спектра квазиэнергий в этой модели. Полученный спектр явно содержит сильную дискретную компоненту, хотя, конечно, результаты не позволяют гарантировать отсутствие непрерывной компоненты. Предположим, однако, что спектр чисто

дискретный со средним расстоянием Δ между соседними линиями. Из соотношения неопределенности между частотой и временем следует, что дискретность такого спектра будет проявляться только для $t \geq 1/\Delta$, тогда как при $t \leq 1/\Delta$ спектр можно считать квазинепрерывным, т.е. временная эволюция квантового состояния будет такой же, или близкой, как и при непрерывном спектре. Но непрерывный спектр движения означает, в частности, перемешивание и диффузию. Поэтому можно попробовать отождествить по порядку величины границу дискретного режима T_d , введенную в разделе 3.1, с диффузионным масштабом времени t^* для квантовой модели (3.2.1):

$$T_d \sim t^* \sim 1/\Delta \quad (3.4.1)$$

Фактически сходная идея была высказана еще в работе /34/, однако, величина Δ связывалась там с невозмущенным спектром энергии ротатора. На самом деле Δ характеризует дискретность спектра квазиэнергий, который устанавливается в системе под действием возмущения.

Так как все уровни квазиэнергии расположены на ограниченном интервале (2π в нашем случае), то $1/\Delta \sim N_\psi$, где N_ψ — эффективное число собственных функций возмущенной системы, определяющих эволюцию заданного начального состояния $\psi(\theta, 0)$. Поясним, что полное число собственных функций, а, следовательно, и полное число уровней квазиэнергии, бесконечно (если отвлечься от маловероятного бесконечного вырождения уровней). Однако каждое заданное состояние системы может эффективно представляться некоторым конечным числом собственных функций N_ψ .

Верхнюю границу для N_ψ можно оценить следующим образом. Согласно численным данным в разделе 3.2 диффузия резко замедляется при $t > t^*$. Предположим, что диффузия в конце концов полностью прекращается. Это означает, что возмущение, действующее на свободный ротатор, связывает конечное число невозмущенных состояний, а именно такое число состояний, которое попадает в интервал диффузии $\Delta\rho(t^*)$ за время t^* (по порядку величины). Ясно, что таким же, по порядку величины, будет и максимальное число собственных функций, представляющих состояние системы в этом интервале $\Delta\rho$. Отсюда

$$N_\psi \sim \Delta\rho(t^*) \sim k\sqrt{t^*} \quad (3.4.2)$$

Подставляя эту оценку в (3.4.1), получим:

$$t^* \sim k^2 \sim D_p^{(cl)} \quad (3.4.3)$$

Эта оценка, повидимому, не противоречит численным экспериментам, согласно которым среднее значение $\langle t^*/k^2 \rangle \approx 0.07$ (см. раздел 3.6).

Последняя оценка в (3.4.3) подчеркивает связь статистических характеристик квантового движения (в данном случае диффузионного масштаба t^*) со стохастичностью в классическом пределе, где скорость диффузии $D_p^{(cl)} \approx k^2/2$.

Сравнивая оценку для $t^* \sim T_d$ (3.4.3) с оценкой для масштаба расщепления $t_s \sim T_r$ (3.3.3), мы видим, что в квазиклассической области ($k \gg 1$) оба масштаба имеют, действительно, совершенно разный порядок ($T_r \ll T_d$), что подтверждает численные результаты (раздел 3.2). Вопрос, насколько этот вывод является общим в квантовой динамике, остается, конечно, открытым.

Более серьезный вопрос связан с ролью начальных условий в рассматриваемой задаче. Действительно, уже сам факт уменьшения скорости диффузии со временем показывает, что эта скорость, вообще говоря, зависит от начального состояния системы. С другой стороны среди нескольких сот начальных состояний, которые фактически использовались в численных экспериментах, не было ни одного со значительно меньшей, чем классическая, начальной скоростью диффузии. Это показывает, что начальные состояния с пониженной скоростью диффузии весьма специфичны. К такому же выводу можно прийти и по-другому. Оценка (3.4.2) дает полное число состояний в интервале $\Delta\rho(t^*)$. Тот факт, что наблюдаемое значение диффузионного масштаба t^* всегда более или менее соответствует этой оценке, показывает, что для широкого класса начальных условий действительно возбуждаются большинство из собственных функций. Это означает, в свою очередь, что собственные функции обладают некоторым свойством, напоминающим эргодичность: проекции почти любого ψ — вектора состояния на каждую из собственных функций близки по величине. Ясно, что это не может быть справедливо для любой квантовой системы. Естественно связать такую эргодичность собственных функций со стохастичностью движения в классическом пределе. Повидимому, впервые такой подход был использован в работе /26/ (см. также /27/).

Эти же соображения позволяют понять характер и специфику недиффузионных начальных состояний в стохастической области ($kT > 1$). Ясно, что такие состояния должны быть суперпозицией небольшого числа собственных функций (в пределе — одна единственная собственная функция). Отсюда следует также, что такое начальное состояние является очень специальной суперпозицией большого числа ($\sim \Delta p(t^*) \sim k^2$) состояний свободного ротатора.

Описанные представления о переходной (временной) стохастичности можно проверить с помощью видоизменения квантовой модели. В частности, можно поставить вопрос, нельзя ли выбрать такую (незамкнутую) квантовую систему, чтобы вообще избавиться от ограничения диффузии ($t^* \rightarrow \infty$). Оказывается, это действительно возможно! Чтобы понять, как надо изменить исходную квантовую модель, обратим внимание на следующую особенность механизма ограничения диффузии. Из сравнения (3.4.1) и (3.4.2) видно, что ограничение диффузии происходит вследствие того, что число состояний в интервале диффузии $\Delta p(t) \sim k\sqrt{t}$ растет медленнее, чем диффузионный масштаб $T_d \sim t$. Отсюда естественно возникает идея сделать параметр возмущения k переменным, растущим со временем таким образом, чтобы $\Delta p(t)$ возрастало быстрее t . Правда, при этом возмущение ротатора становится аperiodическим и понятие квазиэнергии, строго говоря, теряет смысл. Однако мы можем рассматривать модель с переменным $k(t)$ как упрощенное представление модели с $k(n)$, зависящим от номера уровня свободного ротатора и растущим со временем вследствие диффузии. Такая ситуация является, по видимому, типичной для квантовой системы и связана с уменьшением среднего расстояния между уровнями энергии с ростом квантовых чисел (см. разделы 3.5 и 3.6).

Пусть, например:

$$k(t) = k_0 t^\alpha \quad (3.4.4)$$

где α — некоторая постоянная. Тогда

$$\Delta p(t) \sim k_0 t^{\alpha+1/2} \quad (3.4.5)$$

и можно высказать предположение, что при $\alpha \geq 1/2$ диффузия будет продолжаться неограниченно. При $0 < \alpha < 1/2$ диффузионный масштаб также возрастает. Из (3.4.5) и (3.4.1) находим аналогично предыдущему

$$t^* \sim k_0^{-1/(1/2 - \alpha)} \quad (3.4.6)$$

Результаты предварительных численных экспериментов с переменным $k(t)$, описанные ниже в разделе 3.6, действительно указывают на подобный эффект.

Другой более общий и более строгий метод оценки диффузионного масштаба T_d состоит в использовании квазиклассического приближения для расчета временной эволюции квантового состояния. Поскольку основной член этого приближения не объясняет наблюдаемого ограничения диффузии (раздел 3.3) и, следовательно, не отражает дискретности квантовой системы, интересующий нас эффект заключен, очевидно, в квантовых поправках квазиклассического приближения, в оценке которых мы и переходим.

3.5. Квантовые эффекты в квазиклассической области

Используя результаты Маслова /38-39/, определим масштаб времени, на котором применимо квазиклассическое приближение для квантовых систем, стохастических в классическом пределе. (Подробнее рассмотрение этого вопроса проведено в /36/).

Пусть классическая система описывается гамильтонианом $H = H_0(I) + \varepsilon V(I, \theta, \tau)$ где I, θ — действие и фаза невозмущенной задачи, $\varepsilon \ll 1$. В этом случае для исследования квантовых поправок достаточно ограничиться разложением H вблизи начального I_0 вплоть до членов $(\Delta I)^2$. При $I_0/\hbar \gg 1$ стандартное квантование /29,40/ приводит к гамильтониану:

$$\hat{H} = \omega \hat{I} + \gamma \hat{I}^2 + \varepsilon [V(I_0, \theta, \tau) + \frac{1}{2}(\hat{I} V_1(\theta, \tau) + V_2(\theta, \tau) \hat{I}) + \frac{1}{2} \hat{I} V_2(\theta, \tau) \hat{I}] \quad (3.5.1)$$

где

$$\omega = \left. \frac{dH_0}{dI} \right|_{I=I_0}, \quad \gamma = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 H_0}{dI^2} \right|_{I=I_0}$$

$$V_1 = \left. \frac{dV}{dI} \right|_{I=I_0}, \quad V_2 = \left. \frac{d^2 V}{dI^2} \right|_{I=I_0}, \quad \hat{I} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Следуя /38-39/, получим асимптотическое квазиклассическое разложение для волновой функции, удовлетворяющей уравнению Шредингера с гамильтонианом (3.5.1) и начальным условием $\Psi(\theta, \tau=0) = \Psi_0(\theta) \exp(i S_0(\theta)/\hbar)$:

$$\Psi(\theta, \tau) = \sum_{l=1}^{\infty} |l|^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_l(\theta, \tau) - i \frac{\pi}{2} \mu_l\right) \cdot \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} [\hat{L}_e^m \Psi_0(\theta_0)] \Big|_{\theta_0 = \theta_0^l(\theta, \tau)} \right\} \quad (3.5.2)$$

где суммирование по l проводится по всем классическим траекториям, приходящим в точку θ в момент времени τ и удовлетворяющим начальным условиям:

$$\theta_0(\theta, \tau) = \theta_0^l, \quad I_0(\theta_0) = \frac{\partial S}{\partial \theta_0} \Big|_{\theta_0 = \theta_0^l}$$

$$J_0 = \frac{\partial \theta(\theta_0, \tau)}{\partial \theta_0} \Big|_{\theta_0 = \theta_0^l}$$

$S_e(\theta, \tau)$ — действие вдоль классической траектории, соединяющей θ_0^l и θ ; μ_e — индекс Морса, а оператор \hat{L}_e определяется посредством

$$\hat{L}_e \varphi_0(\theta_0) = i\hbar \int_0^\tau \left\{ \left(\gamma + \frac{\varepsilon}{2} V_2 \right) |J_e|^{1/2} \left(J_e^{-1} \frac{\partial}{\partial \theta_0} \right)^2 \left(|J_e|^{-1/2} \varphi_0 \right) + \frac{\varepsilon}{2} |J_e|^{-3/2} \frac{\partial V_2}{\partial \theta_0} \left(|J_e|^{-1/2} \varphi_0 \right) \right\} d\tau \quad (3.5.3)$$

Сумма по m есть фактически разложенные по степеням \hbar . Основная квантовая поправка дается членом с $m = 1$, т.е. выражением (3.5.3). С точностью до членов, не нарастающих со временем, для ее вычисления достаточно дифференцировать только якобиан $J_e(\theta_0)$. Определим квантовую поправку $\delta_1^{(l)}$ равенством: $\hat{L}_e \varphi_0 \approx \delta_1^{(l)} \varphi_0$. Тогда из (3.5.3) находим

$$|\delta_1^{(l)}| = |i\hbar \int_0^\tau \left\{ \left(\gamma + \frac{\varepsilon}{2} V_2 \right) \left[\frac{5}{4} J_e^{-4} \left(\frac{\partial J_e}{\partial \theta_0} \right)^2 - \frac{1}{2} J_e^{-3} \frac{\partial^2 J_e}{\partial \theta_0^2} \right] - \frac{\varepsilon}{4} J_e^{-3} \frac{\partial V_2}{\partial \theta_0} \frac{\partial J_e}{\partial \theta_0} \right\} d\tau| \ll 1 \quad (3.5.4)$$

Последнее неравенство и есть условие применимости квазиклассического приближения. При этом интеграл по времени в (3.5.4) следует понимать в смысле разности первообразных в моменты времени τ и 0 . Так как в промежуточные моменты времени J_e может обращаться в ноль (прохождение каустики), то результат интегрирования не является знакоопределенным. Поскольку $J_e \sim \exp(h\tau)$; $\frac{\partial J_e}{\partial \theta_0} \sim \exp(2h\tau)$, $\frac{\partial^2 J_e}{\partial \theta_0^2} \sim \exp(3h\tau)$, то δ_1 растет не быстрее τ и таким образом квазиклассическое приближение применимо на временах $t_0 \ll 1/h$.

Рассмотрим теперь специальный вид возмущения:

$\varepsilon V(I, \theta) g(\tau)$, где $g(\tau)$ имеет вид толчков, действующих в течение времени T_0 и следующих друг за другом с интервалом T ($T \gg T_0$). Пусть изменение действия за время толчка равно ΔI и выполнен критерий стохастичности $\mathcal{K} \approx \gamma T \Delta I \gg 1/35, 30, 41$. Разбивая интеграл в (3.5.4) на сумму интегралов по интервалам $T + T_0$ и учитывая, что члены суммы статистически независимы из-за стохастичности классической системы, а $J(Tt + T_0 + \tau) \sim J(Tt + T_0)(1 + \mathcal{K} \tau/T)$; $\frac{\partial^n J}{\partial \theta_0^n} \sim J^{n+1}(Tt + T_0) \cdot (1 + \mathcal{K} \tau/T)$,

получим, что $\delta_1^{(l)}$ в среднем растет по закону

$$\langle |\delta_1^{(l)}|^2 \rangle \sim \hbar^2 \sum_{j=0}^{\pm} \left(\frac{1}{\Delta I_e(j)} + \gamma^{(l)} T_0 \right)^2 \quad (3.5.5)$$

где $\Delta I_e(j) = \langle (\Delta I_e(j))^2 \rangle^{1/2}$ — изменение действия за толчок, усредненное по случайной фазе θ . Так как $\Delta I \sim \varepsilon$, то членами εV_2 в (3.5.4) можно пренебречь.

Вычислим, в качестве примера, квантовую поправку для системы (3.2.1), используя (3.5.4). Согласно (3.2.2), (3.2.3) получаем выражение для $p(\tau)$, $\theta(\tau)$ на интервале между соседними толчками ($\hbar = 1$):

$$p(\tau) = p_t + k \sin \theta_t$$

$$\theta(\tau) = \theta_t + p_t \tau + k \tau \sin \theta_t \quad (3.5.6)$$

где p_t , θ_t — значение переменных непосредственно перед последним толчком. Из (3.2.3) следует соотношение:

$$\frac{\partial \theta_t}{\partial \theta_0} = (kT)^{t-1} \cos \theta_{t-1} \cos \theta_{t-2} \dots \cos \theta_0 + O(1/kT)$$

согласно которому имеем

$$\frac{\partial \theta(\tau)}{\partial \theta_0} = \frac{\partial \theta_t}{\partial \theta_0} (1 + k \tau \cos \theta_t) + O(1/kT)$$

$$\frac{\partial^2 \theta(\tau)}{\partial \theta_0^2} = - \left(\frac{\partial \theta_t}{\partial \theta_0} \right)^2 k \tau \sin \theta_t + O(1/kT)$$

$$\frac{\partial^3 \theta(\tau)}{\partial \theta_0^3} = - \left(\frac{\partial \theta_t}{\partial \theta_0} \right)^3 k \tau \cos \theta_t + O(1/kT)$$

Разбивая интеграл в (3.5.4) на сумму интегралов от t до $t+1$ получим

$$\delta_1^{(l)} = \frac{i}{2} \sum_{j=0}^{\pm} \int_0^T \left\{ \frac{5}{4} \frac{(k\tau)^2 \sin^2 \theta_j^e}{(1 + k\tau \cos \theta_j^e)^2} + \frac{1}{2} \frac{k\tau \cos \theta_j^e}{(1 + k\tau \cos \theta_j^e)^3} \right\} d\tau + O(1/kT)$$

После интегрирования находим выражение для $\delta_1^{(l)}$:

$$\delta_1^{(l)} = \frac{i}{8} \sum_{j=0}^{\pm} \frac{3 \cos^2 \theta_j^e + 5 \sin^2 \theta_j^e}{k \cos^3 \theta_j^e} \quad (3.5.7)$$

В силу стохастичности классической траектории сумма по j растет как $t^{1/2}$ и, следовательно, в среднем по времени:

$$\delta_1 \sim i t^{1/2} / k \quad (3.5.8)$$

Таким образом на временах

$$t \leq t_0 \sim k^2 \quad (3.5.9)$$

квантовые поправки малы и характеристики квантовой системы совпадают с классическими с точностью до $O(k^{-4})$.

На временах $t \sim t_0$ поправка $\delta_2 \sim 1$ (поправки более высокого порядка \hbar также ~ 1) и квазиклассическое приближение становится полностью неприменимым. Таким образом естественно ожидать, что для $t \geq t_0$ характеристики квантовой задачи, например, энергии ротатора, будут существенно отклоняться от своих классических значений. Исходя из этого можно дать оценку для времени t^* , начиная с которого происходит замедление диффузии по энергии, наблюдавшееся в /34/:

$$t^* \sim t_0 \sim k^2 \quad (3.5.10)$$

Эта оценка совпадает с оценкой (3.4.3), полученной выше другим методом.

Отметим, что в рассматриваемой системе (3.2.1) параметры квазиклассического приближения k , T не зависят от номера уровня n , и поэтому диффузия вверх по уровням не улучшает квазиклассического приближения. Вместе с тем во многих системах с увеличением n это приближение улучшается (см. ниже). Можно поэтому ожидать, что при достаточно быстрой диффузии квантовые поправки в таких системах будут нарастать значительно медленнее, чем в (3.2.1).

В качестве примера рассмотрим систему с гамильтонианом (3.2.1), в котором k степенным образом зависит от времени: $k(t) = k_0 t^\alpha$ (см. раздел 3.4). Как правило, k является растущей функцией действия $k = k(I)$, а следовательно и времени, так как при наличии стохастичности I растет со временем, что и отражено в выбранной модели, удобной также для численного исследования. Тем не менее надо отметить, что в системах с $k = k(I)$ ситуация оказывается более сложной (см. раздел 3.6) и поэтому эту модель следует рассматривать лишь как грубый пример.

При $k_0 T > 1$ переменная θ уже после нескольких толчков становится случайной и среднее изменение p за один толчок равно

$$\langle |\Delta p(t)|^2 \rangle = k_0^2 t^{2\alpha} \langle \sin^2 \theta(t) \rangle = \frac{k_0^2 t^{2\alpha}}{2}$$

Отсюда находим закон диффузионного роста энергии ($\langle \Delta p \rangle = 0$):

$$E(t) \approx \frac{k_0^2}{4(1+2\alpha)} t^{1+2\alpha} + E(0) \quad (3.5.11)$$

Выражение для δ_2 получается таким же как и (3.5.7), но теперь уже с $k = k(j)$. В среднем $|\delta_2|^2$ растет как

$$\langle |\delta_2|^2 \rangle \sim \sum_{j=0}^t \frac{1}{k^2(j)} \approx \frac{t^{1-2\alpha}}{k_0^2(1-2\alpha)} \quad (3.5.12)$$

Из (3.5.12) следует, что при $\alpha > 1/2$ поправки всегда малы и зависимость энергии от времени описывается (3.5.11) на всех временах, что также совпадает с выводом, полученным в разделе 3.4. Граничным значением является $\alpha = 1/2$. В этом случае диффузионный масштаб $t_0 \sim \exp(k_0^2)$. При $0 \leq \alpha < 1/2$ квазиклассическое приближение справедливо для

$$t \leq t_0 \sim [k_0^2(1-2\alpha)]^{1/(1-2\alpha)} \quad (3.5.13)$$

и в течение этого времени происходит рост энергии по классическому закону. Последняя оценка отличается от оценки (3.4.6) множителем $(1-2\alpha)$, который, однако, является существенным только для $\alpha \approx 1/2$.

Можно показать, что и для непрерывной классической системы сохраняются соотношения $\frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \theta_0} \sim \mathcal{I}^2$; $\frac{\partial^2 \mathcal{I}}{\partial \theta_0^2} \sim \mathcal{I}^{n+1}$. Тогда интеграл в (3.2.4) можно разбить на сумму интегралов по интервалам времени $\Delta \tau \sim 1/h$, которые уже будут статистически независимыми, и таким образом получим

$$|\delta_2^{(l)}|^2 \sim \hbar^2 \int_0^t (\gamma^{(l)}/h)^2 h d\tau \ll 1 \quad (3.2.14)$$

При $\gamma = \text{const}$ (3.2.14) дает $\delta_2 \sim \frac{\hbar \gamma}{h} (ht)^{1/2}$. Так, например, если

$$H = \gamma \frac{I^2}{2} + k \sum_{m=1}^M \cos(\theta + m\Omega t + \varphi_m),$$

где φ_m - набор случайных фаз и $M \gg s = (k\gamma)^{1/2}/\Omega \gg 1$, то $h \sim \Omega s^{4/3} / 42$ (см. также /1/) и диффузионный масштаб $t_0 \sim h/\hbar^2 \gamma^2$.

Таким образом для широкого класса систем удается выяснить условия применимости квазиклассического приближения (3.3.1). Вместе с тем задача об особенностях квантовой динамики на больших временах требует дальнейшего исследования.

3.6. Другие модели

Для проверки теоретических предсказаний, изложенных в разделах 3.4 и 3.5, был проведен ряд дополнительных численных экспериментов /36/ для модели ротатора (3.2.1) с $k = \text{const}$ и $k(t) = k_0 t^\alpha$, а также для модели нелинейного осциллятора с внешним возмущением, которая исследовалась в /30/ теоретически.

По численным данным определялось время t^* , в течение которого диффузия близка к классической. При этом за значение t^* принимался такой момент времени, начиная с которого энергия квантового ротатора отличалась на 25% от значения энергии в классическом пределе.

Для проверки функциональной зависимости (3.5.13) вычислялась величина

$$\delta = \left[\frac{(t^*)^{1-2\alpha}}{k_0^2 (1-2\alpha)} \right]^{1/2}$$

Экспериментальные результаты для среднего значения $\langle \delta \rangle$, среднеквадратичного отклонения σ_δ и диапазонов изменения параметров приведены в таблице I. Эти результаты показывают, что в согласии с теоретическими предсказаниями при увеличении k и с ростом α время t^* резко возрастает. К сожалению, более точной проверки функциональной зависимости (3.5.13) провести не удастся из-за ограниченности числа уровней модели и резкого возрастания времени ^{счета} при увеличении k и α . Замедление роста энергии удается отчетливо наблюдать лишь для $\alpha < 0,35$ (см. рис. 4,5). Важно отметить, что при $\alpha \geq 0,35$ не только закон диффузии совпадает с классическим, но и функция распределения системы по уровням близка к классическому гауссову распределению.

Рассмотрим теперь нелинейный осциллятор с внешним возмущением, описываемый гамильтонианом:

$$\hat{H} = \omega_0 \hat{n} + \gamma \hat{n}^2 + \tilde{g}_0 (\hat{a}^+ + \hat{a}) \delta_{\tilde{f}}(\tau) \quad (3.6.1)$$

где $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$; \hat{a}^+ , \hat{a} — операторы рождения и уничтожения с коммутатором $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hbar$, γ — нелинейность; \tilde{g}_0 — параметр, характеризующий возмущение. При $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 0$ (3.6.1) описывает классический осциллятор, а a^+ и a — становятся классическими каноническими переменными, динамику которых можно задать отображением:

$$\bar{a} = e^{-i\omega \tilde{T}} a - \tilde{g}_0 \quad (3.6.2)$$

где $\omega = \omega_0 + 2\gamma I$; $I = |a|^2$, $a = \sqrt{I} e^{i\theta}$.
Критерий стохастичности имеет вид:

$$\mathcal{K} = 2\gamma \tilde{T} \tilde{g}_0 \sqrt{I_0} \gg 1 \quad (3.6.3)$$

и тогда /30/:

$$\begin{aligned} I(t) &= I_0 + \tilde{g}_0^2 t \\ (I - I_0)^2 &= 2\tilde{g}_0^2 I_0 t + 2\tilde{g}_0^4 t^2 \end{aligned} \quad (3.6.4)$$

В случае, когда система (3.6.1) является квантовой, удобно описывать ее динамику через амплитуды A_n невозмущенных состояний (см. раздел 3.2):

$$\begin{aligned} i \dot{A}_n &= (\omega_0 n + \hbar \gamma n^2) A_n + \\ &+ g_0 (\sqrt{n+1} A_{n+1} + \sqrt{n} A_{n-1}) \delta_{\tilde{f}}(\tau) \end{aligned} \quad (3.6.5)$$

где $g_0 = \tilde{g}_0 / \hbar$; $n = I / \hbar$ — номер уровня невозмущенной системы. Примем далее $\hbar = 1$.

Проведенные численные эксперименты показали, что качественно динамика системы (3.6.1) похожа на (3.2.1). Как и для квантового ротатора с некоторого момента времени t^* начинается замедление диффузионного роста величин I и $(I - I_0)^2$. Значения t^* для некоторых параметров представлены в таблице 2.

Используя (3.5.5) при $g_0^2 \ll n_0$ (n_0 — начальный уровень) и соотношение $\Delta I \approx 2g_0 \sqrt{I} \cos \theta$, получим грубую оценку для t^* :

$$t^* \sim g_0^2 n_0 \quad (3.6.6)$$

Для более точной оценки надо учесть, что ΔI зависит от I и поэтому при вычислении δ_1 по (3.5.5) вдоль траектории надо учитывать, что классическая частица за счет флуктуаций попадает в область с $I < I_0$, в которой δ_1 растет значительно быстрее. Поэтому для проверки (3.5.5) рассматривалась следующая классическая модель квантовой системы. Решались классические уравнения движения (3.6.2) для $N_0 \approx 1000$ частиц, соответствующих начальному распределению квантовой системы (например, $I = I_0$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$). Вдоль каждой траектории каждой частицы вычислялась квантовая поправка (3.5.5) (с $\Delta I = g_0 I_e^{1/2}$) и если $\delta_1^{(t)}$ становилась больше некоторого $\delta_{cr} \sim 1$, то данная час-

тица "замораживалась", т.е. ее действие I_e в дальнейшем оставалось постоянным. Среднее действие I вычислялось по всем N_0 частицам, включая "замороженные". "Замораживание" частиц в классической системе (3.6.2) соответствует тому эмпирическому факту, что в случае, когда квантовые поправки велики ($\delta_1^{(e)} \gg 1$) скорость диффузии резко падает (мы приняли, что эта скорость падает до нуля). Возможность представления квантового состояния в виде пучка классических траекторий вытекает из малости интерференционных членов при $|\delta_1| \lesssim 1$ (см. раздел 3.3).

Критическое значение δ_{cr} определялось из того условия, чтобы I , вычисленное в модели "замороженных частиц" было близко к своему квантовому значению. Оказалось, что варьируя этот единственный параметр (см. табл.2) в небольшом интервале, можно добиться хорошего совпадения квантовых характеристик с характеристиками модели "замороженных частиц" (см. рис.6) для широкого набора параметров n_0, g_0 (см. табл.2). Это указывает на справедливость оценки (3.5.5), а также на то, что с помощью предложенной классической модели ^{сложно} описывать квантовую динамику системы (3.6.1) на временах, значительно превышающих t^* .

4. Дискретность динамического пространства и квантовые эффекты

В предыдущих разделах мы выяснили, что за исключением некоторых особых случаев в квантовой системе может иметь место только переходная, или временная стохастичность движения, что находит естественное объяснение на основе дискретности квантового спектра. Можно, однако, подойти к этому вопросу с другой стороны и обратить внимание на еще более фундаментальную и также хорошо известную особенность квантовой динамики — дискретность фазового пространства квантовой системы. В частности, в переменных действие-фаза это проявляется в дискретности переменных действия (при произвольных фазах). Разумеется, все особенности квантовой динамики не сводятся только к этой дискретности, однако, можно поставить вопрос о ее влиянии на движение динамической системы. Более конкретно вопрос можно поставить так: как изменится стохастическое движение классической системы, если переменные действия будут принимать только дискретные значения (при непрерывных фазах)? Некоторые результаты

численного исследования этого вопроса приведены в разделе 4.1. К нашему немалому удивлению простая дискретизация действия классической динамической системы качественно воспроизводит квантовое ограничение диффузии!

На первый взгляд это действительно кажется странным, поскольку на языке вычислительной математики дискретизация действия называется округлением этой величины, что обычно рассматривается как более или менее случайные ошибки счета. Казалось бы поэтому, что скорость диффузии может только увеличиваться. Чтобы качественно понять эффект ограничения диффузии, представим себе, что мы округляем не только переменные действия, но и фазы, т.е. все динамические переменные. Тогда вместо непрерывной классической траектории мы получим последовательность переходов на конечной решетке округленных значений. Каков бы ни был закон этих переходов, рано или поздно мы попадаем в один из предыдущих узлов решетки и тогда, в силу детерминированности системы, все последующие точки будут в точности повторяться. Но это означает, что все траектории любой динамической системы на конечной решетке будут периодическими, что, разумеется, полностью исключает диффузию при $t \rightarrow \infty$. А теперь вспомним, что при численном моделировании динамической системы на цифровой вычислительной машине мы всегда имеем как раз такую ситуацию — конечную числовую решетку вместо непрерывного динамического пространства моделируемой системы. Отсюда, в частности, вытекает, что численное моделирование может дать лишь переходную стохастичность. Учитывая большую и все возрастающую роль численных экспериментов в исследовании различных динамических систем, мы приходим к серьезной проблеме — насколько такое моделирование адекватно реальным физическим системам? Эта проблема обсуждается в разделе 4.2.

4.1. Классическая модель "квантовой стохастичности"

В этом разделе мы приведем и обсудим некоторые результаты численного моделирования влияния дискретности фазового пространства на классическую динамику. В качестве простейшей модели такой "дискретной динамики" выберем отображение:

$$\begin{aligned} \bar{p} &= p + [k \sin x] \\ \bar{x} &= x + \tau \bar{p} \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

где квадратные скобки обозначают взятие целой части. Без этой операции система (4.1.1) была бы эквивалентна стандартному отображению с параметром $K = kT$, свойства которого описаны в работах [35, I]. Взятие целой части в (4.1.1) придает этой системе некоторое сходство с квантованным стандартным отображением, а именно, действие p пробегает при этом только целочисленные значения ($\hbar = 1$), а параметр k в (4.1.1), так же как и в квантовой системе (раздел 3.2), характеризует максимальное число "квантов", переданных системе за один "толчок" внешнего возмущения. Отметим, что система (4.1.1) также имеет "квантовую" границу устойчивости $|k| < 1$ (см. раздел 3.2), если только целая часть отрицательного числа берется по соотношению: $[y] = -[|y|]$ ($y < 0$).

На рис. 1 кружками отмечена зависимость от времени энергии системы (4.1.1) усредненной по 400 траекториям с различными начальными условиями (p_0, x_0) , причем распределение по фазе было принято равномерным. Ясно видно существенное отличие от непрерывной классической модели. В результате можно сделать интересный вывод, что дискретность, введенная для импульса p , приводит к значительному замедлению диффузии, хотя квантовая динамика и оказывается несколько более устойчивой, чем "дискретная". Такой же результат получается и для зависящего от времени $k = k_0 t^d$ (см. раздел 3.6 и рис. 4, 5).

Для сравнения была рассмотрена также классическая дискретная модель квантового нелинейного осциллятора, движение которого описывается отображением (3.6.2). Дискретность вводилась аналогично предыдущему случаю путем взятия целой части от изменения действия в результате толчка:

$$\bar{I} = I + [A I] = I + [(a + a^+) g_0 + g_0^2] \quad (4.1.2)$$

Затем, по полученному целому значению \bar{I} , пересчитывались величины a, a^+ , и вычислялся поворот, не меняющий действие.

Результаты численных экспериментов с такой дискретной моделью и в этом случае показали (см. рис. 6) заметное замедление диффузии по сравнению с классической моделью. Следует подчеркнуть, что это свойство оказывается общим для всех дискрет-

ных моделей и не зависит, в частности, от выбора начального распределения (p_0, x_0) для пакета траекторий. Так, например, вместо равномерного распределения по фазе x_0 , задавалось случайное распределение в том же интервале ($0 \leq x_0 \leq 2\pi$). Однако результаты оставались примерно такими же (в пределах флуктуаций). Аналогично этому, результат не зависел от числа траекторий N_0 , по которым определялась средняя энергия, если N_0 выбиралось достаточно большим ($N_0 \geq 300$).

4.2. Численное моделирование динамической стохастичности

В предыдущем разделе 4.1 было показано, что простая дискретизация переменной действия классической динамической системы воспроизводит качественно квантовый эффект ограничения диффузии этой системы в стохастической области. Этот результат имеет, как нам кажется, двойное значение. В квантовой механике он открывает возможность имитации некоторых квантовых эффектов с помощью "классических" моделей, анализ движения которых так же как и их численное моделирование много проще. С другой стороны, упомянутый результат ставит очень серьезный вопрос об адекватности численного моделирования классической стохастичности. Ниже мы кратко обсудим эти вопросы.

Будем для определенности рассматривать двумерное отображение, например, стандартное [35, I] или эквивалентное ему (3.2.3). Пусть число разрядов мантииссы в компьютере равно m . Тогда на единичном интервале любая величина может иметь $M = 2^m$ разных значений, а область фазовой плоскости с площадью S в рассматриваемом примере будет состоять из $S M^2$ точек. Максимальный период движения по этой области будет очевидно $T_{max} = S M^2$ итераций отображения. Однако при "случайном" блуждании по решетке средний период движения оказывается значительно меньше: $\langle T \rangle \sim M \sqrt{S}$, поскольку с увеличением времени движения по траектории растет и вероятность возврата на одну из ее предыдущих точек ^{ж)}. По аналогии с рассуждениями в разделе 3.4. можно заключить, что величина $\langle T \rangle$ и определяет наибольший масштаб времени, на котором спектр движения еще можно считать непрерывным и

^{ж)} Наша оценка для $\langle T \rangle$ отличается от результата работы [43], поскольку в последней предполагалась взаимная однозначность дискретного отображения, что в общем случае не имеет места.

на котором, следовательно, еще продолжается диффузия. Режим движения при $t \gg \langle T \rangle$ естественно назвать, как и в квантовой динамике, дискретным. Здесь в полной мере проявляется дискретность фазового пространства динамической системы, а движение является периодическим. Границу этого интервала для двумерного отображения можно записать в виде

$$T_d \sim M \sqrt{S} \quad (4.2.1)$$

Для типичного компьютера этот масштаб довольно большой ($M \sim 10^{15}$) и он легко может быть увеличен на много порядков, если перейти к счету с двойной точностью. Таким образом, дискретный режим движения не представляет, вообще говоря, серьезной угрозы при численном моделировании. Исключение составляют такие особые случаи, когда по каким-либо причинам S очень мала, т.е. движение происходит фактически на очень небольшом участке фазовой плоскости. Это возможно, например, если в какой-то области скорость диффузии достаточно мала (см./I/). В этом случае фактически занимаемая траекторией площадь

$S \sim |\Delta p| \sim \sqrt{Dt}$, где t — время движения. Отсюда: $\langle T \rangle \sim MS^2 \sim M(Dt)^{1/2}$. Последнее неравенство есть условие диффузионного режима движения. Ограничение на время движения принимает теперь вид $t < M^{2/3} D^{1/3}$. Если область с низкой скоростью диффузии имеет размер $\sim \Delta p_0 \ll 1$, то условие ее прохождения можно записать в виде:

$$D \geq \frac{(\Delta p_0)^{3/2}}{M} \quad (4.2.2)$$

Прекращение диффузии из-за перехода в дискретный режим движения, по видимому, наблюдалось в некоторых численных экспериментах #44-45/ (см. также /I/).

Влияние дискретности динамических переменных ("ошибки округления") представляет характерный пример очень малого возмущения, которое тем не менее полностью изменяет динамику системы за достаточно большое время, даже если эта система грубая, например, система Аносова. Причина, по которой общая теорема о грубости здесь неприменима, связана с сингулярностью возмущения.

Для классической модели квантовой стохастичности (4.1.1) аналогичные оценки можно провести следующим образом. Так как

"квант" импульса равен \hbar , то число различных значений p за время t равно просто диффузионному изменению $|\Delta p| \sim k \sqrt{t}$ (ср. раздел 3.4). Хотя фаза X может иметь любые значения, она изменяется также "квантами" $\sim \rho$. Поэтому число различных значений X за то же время можно очень грубо оценить как $k \times \sqrt{t} \sim t$, где $|\Delta x| \sim |\rho| t$ — диффузионное изменение X за время t . Отсюда масштаб дискретности $T_d \sim \sqrt{|\Delta p| t} \sim k^{1/2} t^{3/4} \geq t$. Последнее неравенство и определяет порядок величины времени, в течение которого происходит диффузия в модели (4.1.1): $t \leq k^2$, что совпадает с оценками для квантовой системы в разделах 3.4 и 3.5. Аналогичным образом можно получить оценки и для переменного $k(t)$.

Непрерывный спектр и диффузия являются важными статистическими свойствами динамической системы. Поэтому диффузионный режим (при $t \leq T_d$) квантовой динамики и численного моделирования можно рассматривать как частный (специальный) случай стохастического движения. Это тем более справедливо, что в этом режиме имеет место не только средняя диффузия, но и флуктуации диффузии, распределенные по закону Гаусса (см. например, /35,34/ и рис.2), что является уже значительно более тонким статистическим свойством. В теории вероятностей это свойство составляет содержание центральной предельной теоремы. И все же это далеко не все. Более сильным статистическим свойством является так называемое бернуллиевское свойство, связанное с экспоненциальной неустойчивостью близких траекторий. Именно такая неустойчивость и приводит к тому, что динамическая система ведет себя как случайная.

При численном моделировании масштаб времени t_s , на котором имеет место экспоненциальная расходимость близких траекторий, ограничен минимальным начальным расстоянием между траекториями $\sim M^{-1}$, откуда

$$t_s \sim \frac{\ln M}{h} \sim m \quad (4.2.3)$$

где h — энтропия динамической системы. Для типичного (хорошего) компьютера число разрядов $m \sim 100$ и не может быть существенно увеличено. Масштаб t_s , таким образом, оказывается недопустимо коротким. В связи с этим возникает важный вопрос, какие статистические свойства теряются при численном моделировании на времени $t \gg t_s$?

Несомненно, что моделирование на таком интервале не полностью адекватно непрерывной системе. Например, мы можем проследить локальную неустойчивость движения только для $t \leq t_s$.

При вычислении КС-энтропии эту трудность удается обойти с помощью стандартного приема - усреднения по многим коротким отрезкам разных траекторий. Однако с точки зрения статистических свойств движения это вовсе не одно и то же.

Например, одним из простых следствий бернуллиевского свойства динамической системы является полнота ее символических траекторий (см. /1/). Даже если взять минимальное разбиение фазовой плоскости всего на две ячейки, то полное число символических траекторий за время (число итераций) t будет равно $N_r = 2^t$. Но максимальное число различных начальных условий есть $N_c \sim M^2$, так что они могут обеспечить полноту системы только на интервале $t_r \sim \ln M \sim m$. Этот масштаб того же порядка, что и t_s (4.2.3) и его можно принять по аналогии с квантовой динамикой за масштаб случайности движения:

$$T_r \sim m \quad (4.2.4)$$

Хотя для $t \gg T_r$ число всех траекторий в компьютере много меньше полного числа символических траекторий моделируемой системы, оно все же так велико ($\sim M^2 \sim 10^{30}$!), что явная неполнота моделирования практически не наблюдаема. В связи с этим поставленный выше вопрос можно переформулировать следующим образом: теряем ли мы что-нибудь практически при модулировании стохастичности на всем диффузионном интервале ($t \leq T_d$)?

Аналогичные вопросы возникают и в квантовой динамике, поскольку масштаб случайности T_r , который можно отождествить с масштабом расплывания пакетов t_s (3.3.3), также оказывается относительно коротким:

$$T_r \sim \frac{\ln(k)}{h} \quad (4.2.5)$$

где k - параметр квазиклассического приближения.

Л и т е р а т у р а

1. Ф.М. Израйлев, Б.В. Чириков, Д.Л. Шепелянский. Динамическая стохастичность в классической механике. Препринт ИЯФ СО АН СССР, 80-209, г. Новосибирск, 1980.
2. Ф.М. Izrailev, Nearly linear mappings and their applications, Physica D, 1980 (in print).
3. Д.Д. Рютов, Г.В. Ступаков. Письма в ЖЭТФ 26 (1977) 186.
4. Б.В. Чириков. Физика плазмы 4:3 (1978) 527; 5:4 (1979) 880.
5. В.Д. Ильин, А.Н. Ильина. ЖЭТФ 72:3 (1977) 983.
6. А.К. Nekrasov, Nucl. Fusion 10 (1970) 387; Б.Ф. Jaeger, A.J. Lichtenberg, M.A. Lieberman, Plasma Physics 14 (1972) 1073.
7. Г.М. Заславский, Б.В. Чириков, УФН 105:1 (1971) 3.
8. В.М. Алексеев, М.В. Якобсон, Символическая динамика и гиперболические динамические системы, добавление в кн. Р. Боуэн, Методы символической динамики, Мир, Москва, 1979.
9. А.К. Звонкин, Л.А. Левин, УМН, 25:6 (1970) 85.
10. Я.Г. Синай, УМН 25:2 (1970) 141;
11. Е.Н. Lorenz, J. Atmosph. Sci. 20 (1963) 130.
12. Д.В. Аносов. Геодезические потоки на замкнутых римановых многообразиях отрицательной кривизны. Тр. матем. инст. им. Стеклова, 90, 1967.
13. S. Smale, Bull. Amer. Math. Soc. 73 (1967) 747.
14. B.V. Chirikov, F.M. Izrailev, Some Numerical Experiments with a nonlinear mapping: stochastic component, Colloques Internationaux du C.N.R.S. No 229 Transformations Ponctuelles et leurs Applications (Toulouse, 10-14 Sept. 1973), CNRS, Paris (1976) p. 409; Degeneration of Turbulence in Simple Systems, Physics Reports, 1980 (in print).
15. М.И. Рабинович, УФН 125 : I (1978) 123.
16. Л.А. Бунимович, ДАН СССР 211:5 (1973) 1024.
Я.Б. Песин, УМН 32:4 (1977) 55;
L.A. Bunimovich, Commun. Math. Phys. 65 (1979) 295.

17. Н.С.Крылов, Работы по обоснованию статистической физики, АН СССР, М., 1950 (Engl. transl. N.S.Krylov, Foundations of Statistical Mechanics, Princeton, 1979).
18. Н.Н.Боголюбов, О некоторых статистических методах в математической физике, АН УССР, 1945.
19. M.Aizenman, S.Goldstein, J.L.Lebowitz, Commun. Math. Phys., 39, (1975), 289.
20. B.V.Chirikov, Wiss. Zs. Humboldt-Universität zu Berlin, Ges.-Sprachw. 24 (1975) 215;
Б.В.Чириков, Природа статистических законов классической механики, Препринт ИЯФ 78-66, Новосибирск, 1978.
21. J.L.Lebowitz, O.Penrose, Physics Today, Feb. 1973, p. 23.
22. F.J.Dyson, J. Math. Phys. 3:1 (1962) 140.
23. Г.М.Заславский, УФН 129:2 (1979) 211.
24. I.C.Percival, Regular and Irregular Spectra in Molecules, Lecture Notes in Physics, 93, Springer, 1979, p. 259.
25. M.V.Berry et al., Ann. Phys. 122 (1979) 26.
26. А.И.Шнирельман, УМН, 29:6 (1974) 181.
27. K.S.Nordholm, S.A.Rice, J. Chem. Phys. 61:1 (1974) 203.
28. Н.М.Пухов, Д.С.Чернавский, Теор.мат.физ. 7:2 (1971) 219.
29. Э.В.Шуряк, ЖЭТФ 71, (1976) 2039.
30. G.P.Berman, G.M.Zaslavsky, Physica 91A (1978) 450; 97A (1979) 367.
31. M.D.Srinivas, J. Math. Phys. 19:9 (1978) 1952.
32. P.Bocchieri, A.Loinger, Phys. Rev. 107:2 (1957) 337.
33. I.C.Percival, J.Math. Phys. 2:2 (1961) 235.
34. G.Casati, B.V.Chirikov, J. Ford and F.M.Izrailev, Lecture Notes in Physics, v. 93 ed. G.Casati and J.Ford, Springer New York, 1979, p. 334.
35. B.V.Chirikov, Physics Reports 52:5 (1979) 265.
36. Д.Л.Шепелянский, Квазиклассическое приближение для стохастических квантовых систем. Препринт ИЯФ СО АН СССР, 80-132, Новосибирск, 1980.
37. Ф.М.Израйлев, Д.Л.Шепелянский, ДАН СССР 249 (1979) 1103; ТМФ 43 (1980) 417.
38. В.П.Маслов, М.В.Федорук, Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики, "Наука" М., 1976.

39. В.П.Маслов. Журнал вычислительной математики и ма.физики, I:4 (1961) 638.
40. В.В.Соколов, Нелинейный резонанс квантового осциллятора, Препринт ИЯФ СО АН СССР, 78-50, 1978.
41. Г.М.Заславский, Статистическая необратимость в нелинейных системах, "Наука", М., 1970.
42. Б.В.Чириков. Исследования по теории нелинейного резонанса и стохастичности, препринт 267, ИЯФ СО АН СССР, Новосибирск, 1969. (CERN Transl. 71-40, Geneva, 1971).
43. F.Rannou, Astron. & Astroph. 31 (1974) 289.
44. B.V.Chirikov, E.Keil, A.M.Sessler, J.Statist. Phys. 3 (1971) 307.
45. Б.В.Чириков, Взаимодействие нелинейных резонансов, Новосибирск, НГУ, 1978.
46. P.Brumer, M.Shapiro, Chem. Phys. Lett. 72, 528 (1980).

Таблица 1

kT	k	α	t^*	δ	$\langle \delta \rangle$	$\overline{\delta} / \langle \delta \rangle$
5-36	5-80	0	5-320	0,14-0,50	0,27	0,32
5-10	5-10	0,1-0,35	40-500	0,53-1,7	1,1	0,31

Таблица 2 $\omega_0 T = 1000$; $\gamma T = 1$

g_0	n_0	t^*	δ_{cr}
I	0	29	2,45
I	15	30	1,32
I	31	55	1,22
I	63	51	0,87
I	83	70	-
1,5	0	15	1,12
2	0	40	I

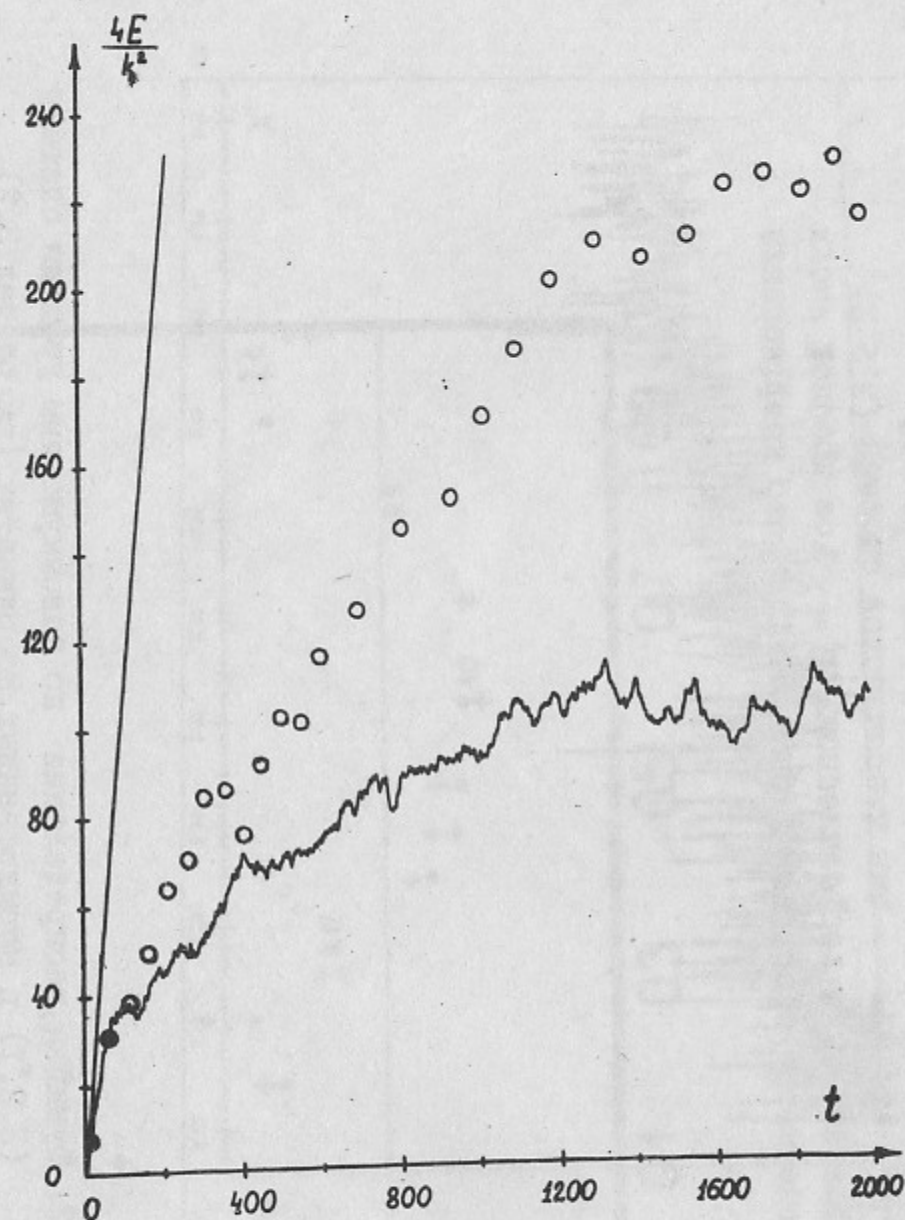


Рис. I. Зависимость энергии ротатора E от времени для системы (3.2.1) с $k = 20$; $T = 0,25$; $t = 2000$.
 Прямая линия соответствует классической диффузии;
 \circ - классическая модель квантовой стохастичности (4.1.1), ломанная линия - численный результат для (3.2.1).

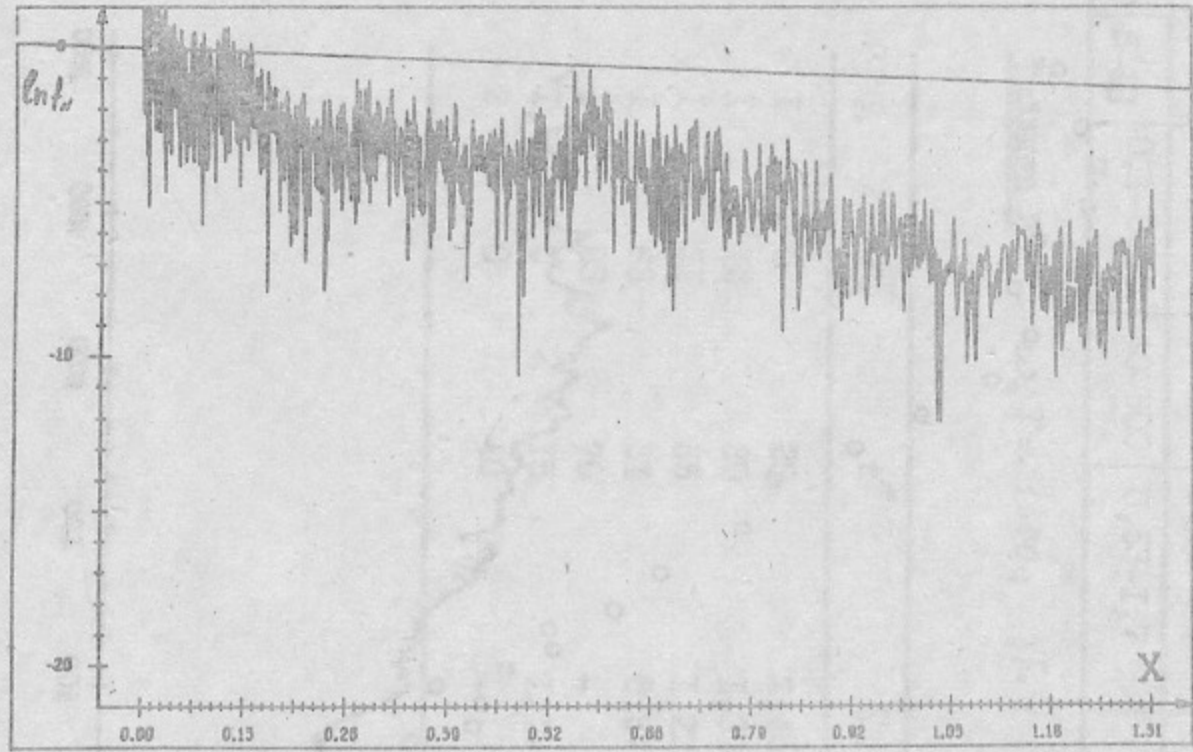


Рис.2. Функция распределения по невозмущенным уровням системы (3.2.1) в нормированных координатах (см. раздел 3.2). Прямая соответствует классической функции распределения; ломаная линия - численный результат.

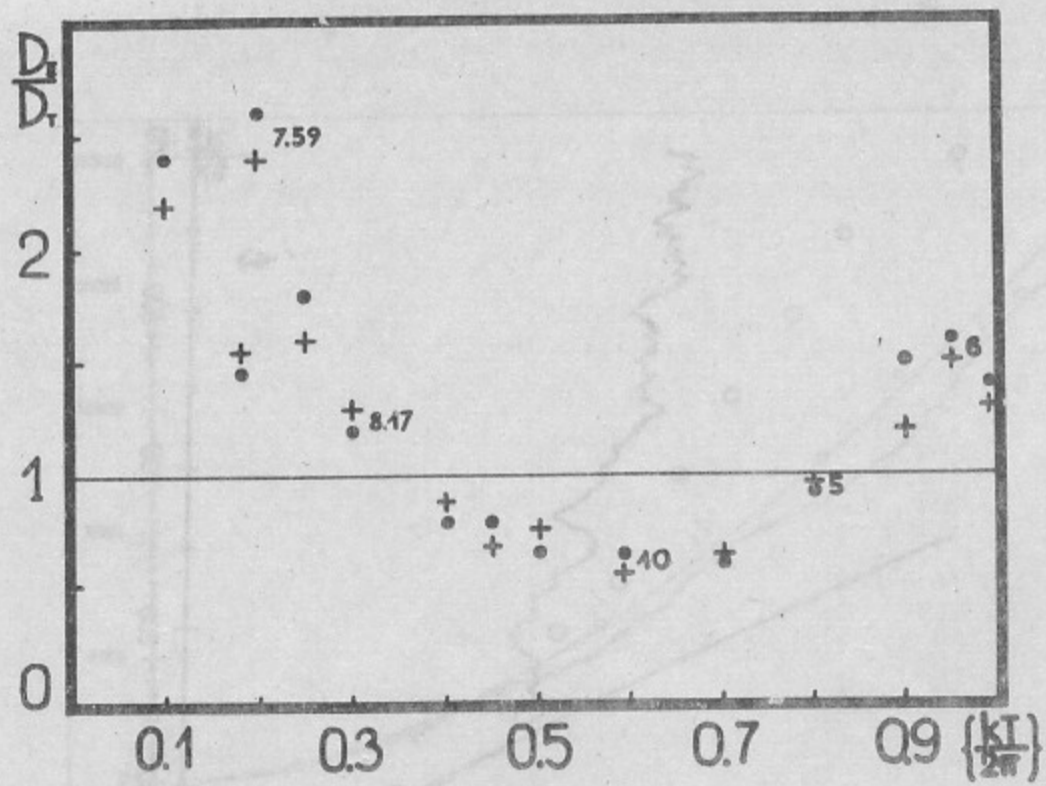


Рис.3. Зависимость отношения экспериментального коэффициента диффузии D_e к теоретическому $D_r = k^2/27$ от дробной части $\{ \frac{kT}{27} \}$: • - для классической системы (3.2.2); + - для квантовой системы (3.2.1) с $k \approx 40$. Цифры у некоторых точек - значения kT .

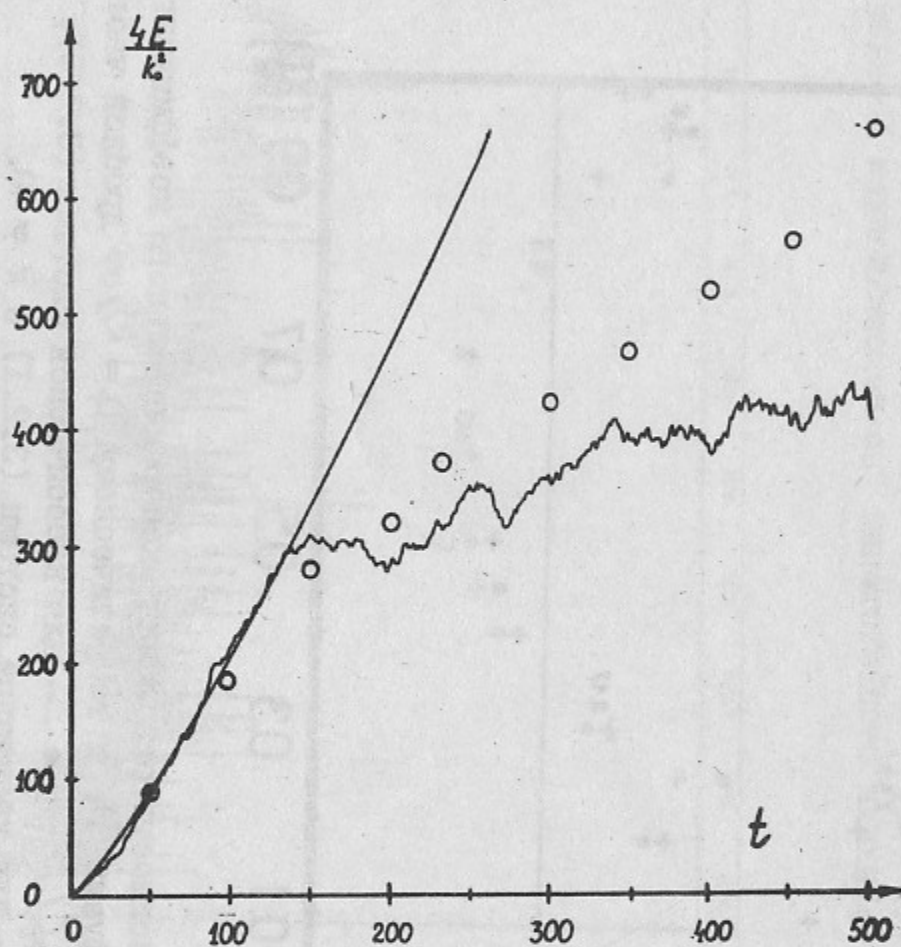


Рис.4 Зависимость энергии ротатора E от времени для системы (3.2.I) с $k(t)=k_0 t^\alpha$; $\alpha = 0.1$; $k_0 = 5$; $\Gamma = 1$, $t = 500$. Плавная линия соответствует классической диффузии (3.5.II); ломаная линия - численный результат; \circ - классическая модель квантовой стохастичности (4.I.I).

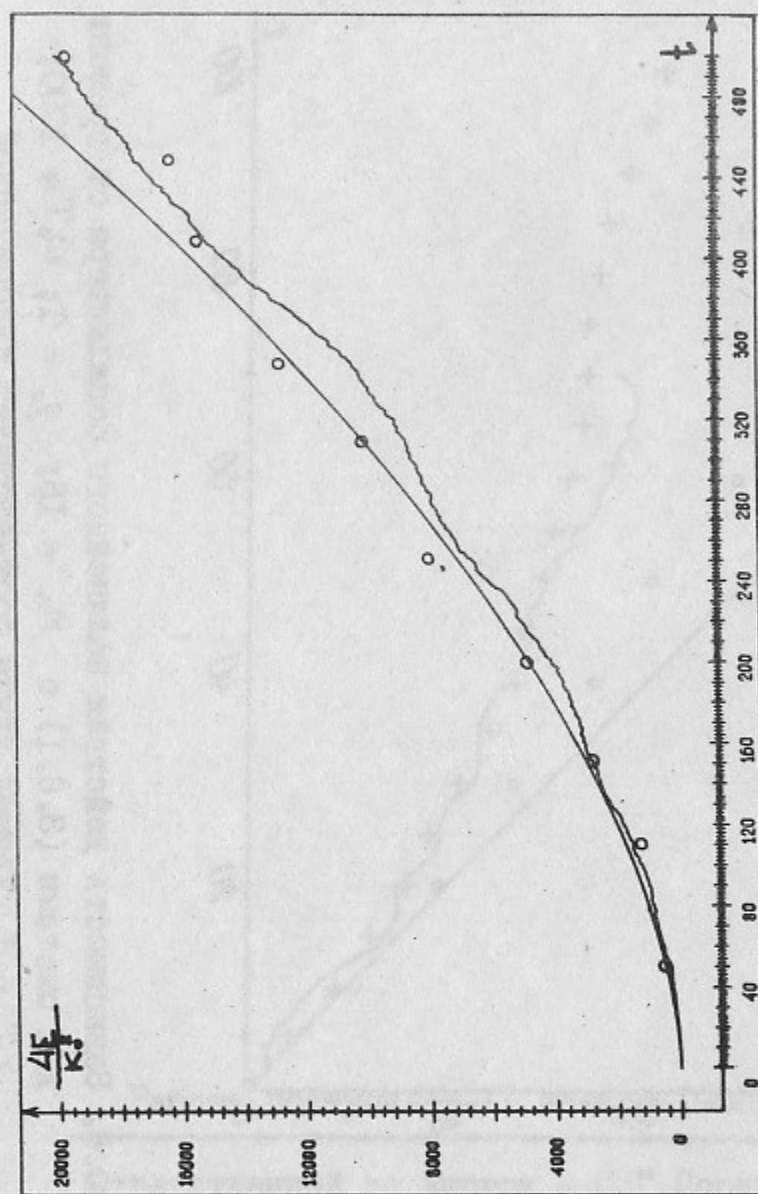


Рис.5. То же, что и на рис.4 для $\alpha = 0,35$; $k_0 = 5$; $\Gamma = 1$; $t = 500$.

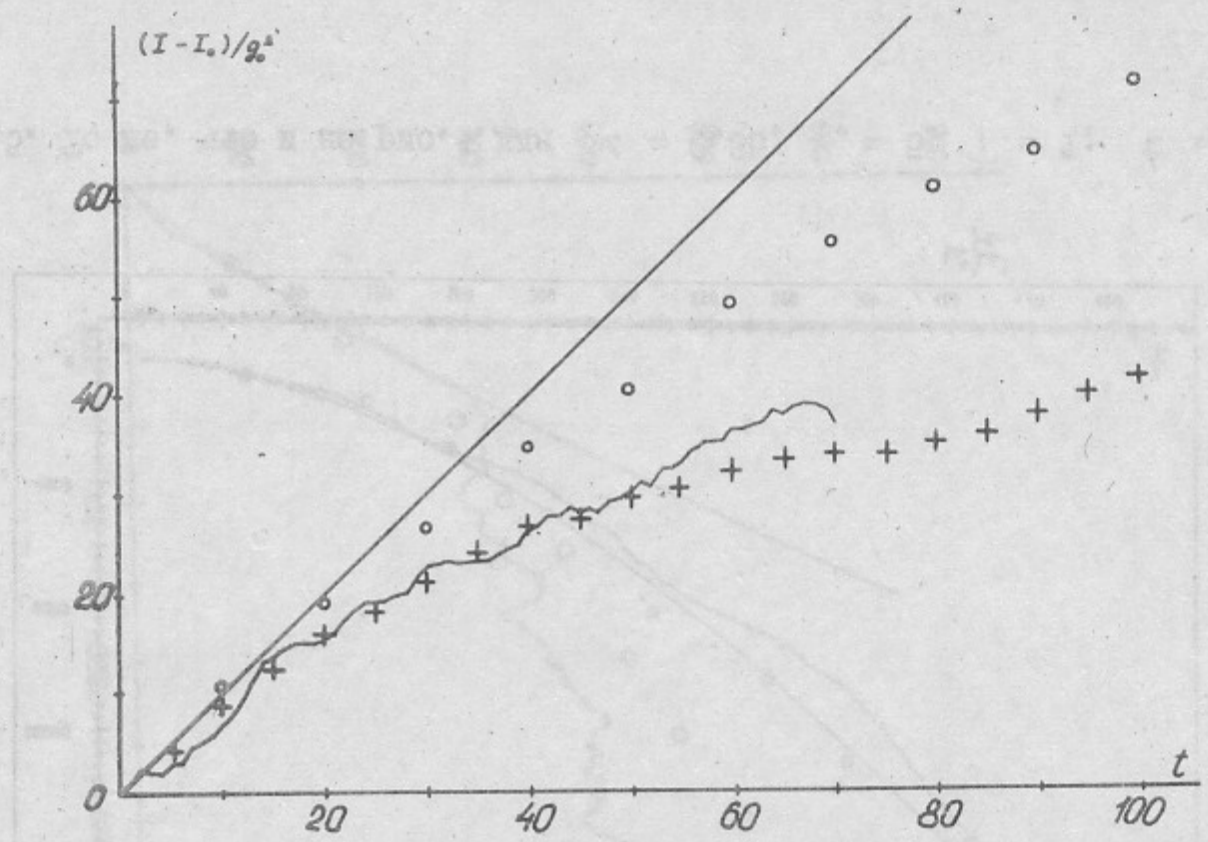


Рис. 6. Зависимость действия нелинейного осциллятора от времени для системы (3.6.1) с $n_0 = 15$; $g_0 = 1$; $\omega_0 T = 1000$; $Y T = 1$. Прямая линия соответствует классической диффузии (3.6.4), ломаная линия - численный результат; + - модель "замороженных частиц"; \circ - классическая модель квантовой стохастичности (4.1.2).

Работа поступила -11 ноября 1980г.

Ответственный за выпуск - С.Г. Попов

Подписано к печати 24. XI - 1980г. МН 13562

Усл. 2,7 печ. л., 2,2 учетно-изд. л.

Тираж 250 экз. Бесплатно

Заказ № 210.

Отпечатано на ротационной ИФД СО АН СССР