Формализм Гельфанда-Яглома

На прошлом семинаре мы столкнулись с необходимостью вычисления функциональных детерминантов операторов типа Шрёдингера. Для его вычисления нам потребовалось найти собственные значения дискретного, и волновые функции непрерывного спектра, а затем вычислять бесконечные произведения. В задаче прошлого семинара мы смогли с этим справиться из-за наличия точного решения потенциала в терминах гипергеометрической функции. С другой стороны, в более сложных приложениях такого решения может не существовать, и возможно, детерминант придётся находить численно — и достаточно очевидно, что изложенный выше способ непригоден для численного анализа. В данном семинаре будет изложен альтернативный и достаточно красивый способ, который позволяет найти ответ значительно проще.

Дискретная формулировка и доказательство

Допустим, мы хотим найти «характеристический многочлен» $f(\lambda) = \det(\hat{H} - \lambda)$, где $\hat{H} = -\partial_x^2 + U(\hat{x})$ — какой-то квантомеханический гамильтониан (забудем пока на время о бесконечных нормировочных константа и что сам детерминант, вообще говоря, определён плохо). Чтобы определить задачу полностью, помимо оператора, нам также необходимо задать класс функций, на которых он действует — например, функции, заданные на отрезке с бесконечными стенками $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Дискретизуем пространство с шагом ϵ; матрицу $\hat{H}$ в таком случае можно задать совершенно явно ($x_k = k \cdot \epsilon$, $\epsilon = \frac{L}{N}$, $\psi_0 = 0$):

$$\hat{H}_N \psi = -\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\epsilon^2} + U(x_n)\psi_n, \quad \hat{H}_N = \frac{1}{\epsilon^2} \begin{pmatrix} 2+\epsilon^2 U(x_1) & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2+\epsilon^2 U(x_2) & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2+\epsilon^2 U(x_3) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2+\epsilon^2 U(x_N) \end{pmatrix} \tag{1}$$

(и задача становится хорошо определённой). Обозначим $f_N(\lambda) = \det(\hat{H}_N - \lambda)$; чуть удобнее будет вынести ϵ^{-2}, как на формуле выше, вычислить определитель оставшейся матрицы $g_N(\lambda) = \epsilon^{2N} f_N(\lambda)$. Не мудрствуя лукаво, давайте распишем оставшийся определитель по последней строчке; тем самым он свяжется с определителями подматрицы на один и два размера меньше рекуррентным соотношением[1]:

$$g_{N+1} = (2 + \epsilon^2(U(x_{N+1}) - \lambda))g_N - (-1)(-1)g_{N-1} \Rightarrow -\frac{g_{N+1} - 2g_N + g_{N-1}}{\epsilon^2} + (U(x_{N+1}) - \lambda)g_N = 0 \tag{2}$$

Возвращаясь к непрерывному пределу $g_N(\lambda) = g(x = N\epsilon|\lambda)$, мы немедленно видим нетривиальный факт — *сам определитель удовлетворяет такому уравнению Шрёдингера*! В этом — суть теоремы Гельфанда-Яглома, и это уже хороший рецепт нахождения определителя — осталось лишь добавить начальные условия. В дискретном представлении они следующие:

$$g_1(\lambda) = 2 + \epsilon^2 U(x_1) \approx 2, \quad g_2(\lambda) = (2 + \epsilon^2 U(x_1))(2 + \epsilon^2 U(x_2)) - 1 \approx 3, \tag{3}$$

что означает, что в непрерывном пределе функция $\psi(x|\lambda) = \epsilon g(x|\lambda)$ имеет хорошо определённые граничеые условия. Тем самым, в пределе $\epsilon \to 0$ задача решается следующим образом:

$$\boxed{\det(\hat{H}_N - \lambda) = \frac{1}{\epsilon^{2N-1}}\psi(L = N\epsilon|\lambda), \quad \hat{H}\psi(x|\lambda) = \lambda\psi(x|\lambda), \quad \psi(0|\lambda) = 0, \quad \partial_x\psi(0|\lambda) = 1} \tag{4}$$

Вместо нахождения *всех* решений краевой задачи $\psi(0) = \psi(L) = 0$, нам необходимо решить одну единственную эволюционную задачу (как в «методе стрельбы») — это существенное упрощение. Как обычно, чтобы кроме того избавиться от всевозможных бесконечных нормировочных констант, связанных с дискретизацией, мы можем рассмотреть отношение двух детерминантов — которое уже определено хорошо:

[1] Составлять такого рода рекуррентные соотношения — стандартный способ вычисления определителей трёхдиагональных матриц

$$\frac{\det(\hat{H}_1 - \lambda)}{\det(\hat{H}_2 - \lambda)} = \frac{\psi_1(L|\lambda)}{\psi_2(L|\lambda)} \tag{5}$$

Теперь давайте обсудим полученный результат. Во-первых, выбрать граничное условие $\partial_x \psi$ можно *любым* — лишь бы для обоих волновых функций $\psi_{1,2}$ оно было выбрано одинаковым. Во-вторых, полученный результат непосредственно обобщается и на более сложные операторы, например, на уравнение Шрёдингера в двух или трёх измерениях (где оператор, задающий уравнение волновую функцию устроено не буквально как $-\partial_x^2 + U(x)$). Предложенные тут правдоподобные рассуждения как вариант доказательства теоремы Гельфанда-Яглома не единственные — вообще говоря, к тому же результату можно было бы прийти иначе. А именно, можно заметить, что если $\psi(0|\lambda) = 0$, то $\psi(L|\lambda) = 0$ тогда и только тогда, когда λ является собственным числом оператора $\hat{H}$ — а это, в свою очередь, означает, что нули функций $\det(\hat{H} - \lambda)$ и $\psi(L|\lambda)$ как функции переменной λ совпадают. Из ТФКП известно, что эти функции в таком случае могут отличаться лишь на какую-то целую функцию — и эта целая функция для числителя и знаменателя оказывается одинаковой, если выбраны одинаковые граничные условия задачи «стрельбы» $\partial_x \psi(0|\lambda)$. Поэтому полученная тут связь совершенно неудивительна, и её стоило бы ожидать.

Пример: осциллятор

Давайте рассмотрим в качестве примера простой гармонический осциллятор (мнимом времени), $\hat{H}_1 = -\partial_\tau^2 + \omega^2$; а в качестве знаменателя возьмём свободную частицу, $\hat{H}_2 = -\partial_\tau^2$; положим $\lambda = 0$ (такую задачу в реальном времени мы решали два семинара назад, когда только учились брать гауссовы интегралы). Решения соответствующих эволюционных задач записываются совершенно устно:

$$(-\partial_\tau^2 + \omega^2)\psi_1(x) = 0 \Rightarrow \psi_1(\tau) = \frac{\sinh \omega\tau}{\omega} \tag{6}$$

$$-\partial_\tau^2 \psi_2(x) = 0 \Rightarrow \psi_2(\tau) = \tau, \tag{7}$$

и значит, для функций, заданных на отрезке длины β, отношение определителей равно:

$$\frac{\det \hat{H}_1}{\det \hat{H}_2} = \frac{\sinh \omega\beta}{\omega\beta} \tag{8}$$

Тот же результат получался и ранее с нахождением спектра, но гораздо сложнее.

Пример: флуктуации вблизи инстантона

Теперь давайте перейдём к примеру сложнее — а именно, рассмотрим оператор $\hat{H}_s = -\partial_x^2 - \frac{s(s+1)}{\cosh^2 x}$. Именно с таким оператором ($s = 2$) мы имели дело на прошлом семинаре. Обозначим также $\lambda = -\kappa^2$. Нам нужно решать задачу стрельбы; сразу заметим, что поскольку $\lambda < 0$, то уравнение Шрёдингера решается на отрицательных энергиях, поэтому решения непременно будут экспоненциально растущими. Нормировать мы будем на осциллятор — такой же оператор, но с $s = 0$. Наконец, поскольку мы рассматриваем задачу на отрезке $(-L, L)$, то удобно воспользоваться симметрией задачи относительно инверсии. Как мы знаем, эта симметрия означает, что все собственные волновые функции можно выбрать либо чётными, либо нечётными — а значит, и в определитель будет вклад как от чётных, так и от нечётных мод, и эти вклады разделяются[2]. Поэтому и мы тоже можем искать отдельно отношение определителей, вычисленных по чётным и по нечётным состояниям — для этого можно «стрелять» не из $x = -\beta/2$, а из нуля $x = 0$, и решать следующие две задачи («+» и «-» соответствуют чётным и нечётным решениям):

$$\begin{cases} \psi^{(+)}(0) & = 1 \\ \partial_x \psi^{(+)}(0) & = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \psi^{(-)}(0) & = 0 \\ \partial_x \psi^{(-)}(0) & = 1 \end{cases} \tag{9}$$

Давайте теперь решать уравнение Шрёдингера. Конечно, без гипергеометрической функции не обойтись — УШ ведь получается таким же. Для поиска чётных и нечётных решений удобно воспользоваться заменой переменных $y = \cosh^2 x$, которая приводит УШ к следующему виду:

$$y(1-y)\psi''(y) + \left(\frac{1}{2} - y\right)\psi'(y) - \left(\frac{s(s+1)}{4y} - \frac{\kappa^2}{4}\right)\psi(y) = 0 \tag{10}$$

Подстановка $\psi(y) = y^{(s+1)/2}\chi(y)$ приводит его к гипергеометрическому виду:

$$y(1-y)\chi''(y) + \left[(s + \frac{3}{2}) - y(s+2)\right]\chi'(y) - \left(\frac{(s+1)^2 - \kappa^2}{4}\right)\chi(y) = 0, \tag{11}$$

однако чуть проще оно записывается для переменной $z = 1 - y = -\sinh^2 x$:

[2] Даже сама матрица гамильтониана, если уж на то пошло, в таком случае имеет блочно-диагональный вид

$$z(1-z)\chi''(z) + \left[\frac{1}{2} - z(s+2)\right]\chi'(z) - \left(\frac{(s+1)^2-\kappa^2}{4}\right)\chi(z) = 0. \tag{12}$$

Сравнивая полученное уравнение с уравнением для гипергеометрической функции, мы немедленно получаем следующие значения параметров:

$$a = \frac{s+1+\kappa}{2}, \quad b = \frac{s+1-\kappa}{2}, \quad c = \frac{1}{2}, \tag{13}$$

а также общий вид решения в виде линейной комбинации ${}_2F_1(a,b;c;z)$ и $z^{1-c} \cdot {}_2F_1(b-c+1, a-c+1; 2-c; z)$; для исходных функций решения имеют следующий вид:

$$\boxed{\begin{cases} \psi^{(+)}(x) & = \cosh^{s+1} x \cdot {}_2F_1\left(\frac{s+1+\kappa}{2}, \frac{s+1-\kappa}{2}; \frac{1}{2}; -\sinh^2 x\right) \\ \psi^{(-)}(x) & = \sinh x \cdot \cosh^{s+1} x \cdot {}_2F_1\left(\frac{s-\kappa+2}{2}, \frac{s+\kappa+2}{2}; \frac{3}{2}; -\sinh^2 x\right) \end{cases}} \tag{14}$$

Выбранные таким образом, они удовлетворяют необходимым граничным условиям: $\psi^{(+)}(x \ll 1) \approx 1$ и $\psi^{(-)}(x \ll 1) \approx x$.

Асимптотики (бесконечность)

Мы хотим найти определитель для системы со стенками, расположенными достаточно далеко $\kappa L \gg 1$, поэтому нам необходимо найти далёкие асимптотики функций $\psi^{(\pm)}(x \to \infty)$ (которые, напомним, должны быть экспоненциально возрастающими, поскольку мы имеем дело с движением на отрицательной энергии). Для того, чтобы найти асимптотику гипергеометрической функции, нам необходимо воспользоваться одной из многих формул преобразования аргумента — в данном случае, $z \mapsto \frac{1}{z}$ (который переводит ∞ в 0, а асимптотика в нуле уже хорошо известна). Преобразование имеет следующий вид:

$${}_2F_1(a,b;c;z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}\frac{1}{(-z)^a} \cdot {}_2F_1(a, 1-c+a; 1-b+a; \frac{1}{z}) + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}\frac{1}{(-z)^b} \cdot {}_2F_1(b, 1-c+b; 1-a+b; \frac{1}{z}) \tag{15}$$

Сами гипергеометрические функции дают асимптотику ${}_2F_1(\ldots, 0) \approx 1$; для функции $\psi^{(+)}$ значение $a > b$, из-за чего важнее оказывается второе слагаемое; а для $\psi^{(-)}$ — наоборот, первое. Асимптотики получаются следующими:

$$\begin{cases} \psi^{(+)}(x) & \approx \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\kappa)}{\Gamma(\frac{s+1+\kappa}{2})\Gamma(\frac{\kappa-s}{2})} \coth^{s+1} x \cdot \sinh^\kappa x \approx \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\kappa)}{2^\kappa\Gamma(\frac{1+s+\kappa}{2})\Gamma(\frac{\kappa-s}{2})} e^{\kappa x} \\ \psi^{(-)}(x) & \approx \frac{\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(\kappa)}{\Gamma(\frac{s+\kappa+2}{2})\Gamma(\frac{1-s+\kappa}{2})} \coth^{s+1} x \sinh^\kappa x = \frac{\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(\kappa)}{2^\kappa\Gamma(\frac{s+\kappa+2}{2})\Gamma(\frac{1-s+\kappa}{2})} e^{\kappa x} \end{cases} \tag{16}$$

В знаменателе же стоит решение задачи в отсутствии потенциала («квантовый гармонический осциллятор» в терминах исходной задачи, или свободная частица в терминах соответствующего УШ), который мы уже выписывали ранее:

$$\begin{cases} \psi_0^{(+)}(x) & = \cosh \kappa x \approx \frac{1}{2} e^{\kappa x} \\ \psi_0^{(-)}(x) & = \frac{1}{\kappa} \sinh \kappa x \approx \frac{1}{2\kappa} e^{\kappa x} \end{cases} \tag{17}$$

Тем самым, отношение определителей принимает следующий вид:

$$\frac{\det(\hat{H}_s + \kappa^2)}{\det(\hat{H}_0 + \kappa^2)} = \frac{2\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\kappa)}{2^\kappa\Gamma(\frac{1+s+\kappa}{2})\Gamma(\frac{\kappa-s}{2})} \cdot \frac{2\kappa\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(\kappa)}{2^\kappa\Gamma(\frac{s+\kappa+2}{2})\Gamma(\frac{1-s+\kappa}{2})} = \frac{\pi\kappa\Gamma^2(\kappa)}{2^{2\kappa-1}\Gamma(\frac{1+s+\kappa}{2})\Gamma(\frac{\kappa-s}{2})\Gamma(\frac{s+\kappa+2}{2})\Gamma(\frac{1-s+\kappa}{2})} \tag{18}$$

‘Полученный ответ можно ещё упростить, используя известное соотношение для гамма-функций $\Gamma(x)\Gamma(x+\frac{1}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2x-1}}\Gamma(2x)$. Окончательно, имеем:

$$\boxed{\frac{\det(\hat{H}_s + \kappa^2)}{\det(\hat{H}_0 + \kappa^2)} = \frac{\kappa\Gamma^2(\kappa)}{\Gamma(1+s+\kappa)\Gamma(\kappa-s)}} \tag{19}$$

Применение к инстантону

На прошлом семинаре мы считали следующее отношение определителей:

$$\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2 - \frac{3\omega^2/2}{\cosh^2(\omega\tau/2)})}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}. \tag{20}$$

Напомним, штрих в числителе означал, что нужно «убрать» нулевую моду, а в знаменателе — что нужно убрать наинизшую моду. Давайте вычислим его, используя нашу общую формулу.Во-первых, чтобы привести его к нужному виду, необходимо сделать замену $x = \frac{\omega\tau}{2}$:

$$\frac{\det'\left(\frac{\omega^2}{4}\left[-\partial_x^2+4-\frac{6}{\cosh^2 x}\right]\right)}{\det'\left(\frac{\omega^2}{4}\left[-\partial_x^2+4\right]\right)}=\frac{\det'(\hat{H}_2+4)}{\det'(\hat{H}_0+4)} \tag{21}$$

Во-вторых, поскольку оба определителя «штрихованные», то константы можно сократить (собственные числа делятся друг на друга попарно и эти константы попарно же сокращаются — в противном случае, скажем, для отношения вида $\det' / \det$, такая константа могла бы «выскочить» в ответ); значит, мы немедленно получаем $s=2$ и $\kappa=2$. Если подставить эти параметры буквально в полученную выше формулу, мы получим ноль (поскольку $\Gamma(\kappa-s)$ в знаменателе обращается в бесконечность), что ожидаемо — в формуле штрихи стоят неспроста. В формализме Гельфанда-Яглома выбросить нулевую моду можно достаточно просто: давайте чуть-чуть сместим λ и рассмотрим отношение определителей $\det(\hat{H}_0+4+\epsilon)/\det(\hat{H}_0+4+\epsilon)$. В таком случае, нулевая мода станет малой и равной ϵ; остальные же моды изменятся слабо. Добавив также «выброшенную» наименьшую моду «4» в знаменателе, чтобы убрать штрих и оттуда, мы получаем:

$$\frac{\det'(\hat{H}_2+4)}{\det'(\hat{H}_0+4)}=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\frac{1}{\epsilon}\det(\hat{H}_2+4+\epsilon)}{\frac{1}{4}\det(\hat{H}_0+4+\epsilon)} \tag{22}$$

Теперь мы готовы считать. Подставляем $\kappa^2=4+\epsilon\Rightarrow\kappa=2+\epsilon/4$ и получаем:

$$\frac{\det(\hat{H}_2+4+\epsilon)}{\det(\hat{H}_0+4+\epsilon)}\underset{\epsilon\ll 1}{\approx}\frac{2\Gamma^2(2)}{\Gamma(5)\Gamma(\frac{\epsilon}{4})}=\frac{\epsilon}{48}, \tag{23}$$

и тем самым мы воспроизводим ответ, полученный ранее: $\frac{\det'(\hat{H}_2+4)}{\det'(\hat{H}_0+4)}=\frac{1}{12}$.