汉密尔顿修订版：
初值问题的作用量原理

W. A. Horowitz*

开普敦大学物理系，私人信箱 *X3*，龙德博斯 *7701*，南非 新墨西哥州立大学物理系，新墨西哥州 拉斯克鲁塞斯，*88003*，美国以及理论科学访问计划，

冲绳科学技术大学院大学，恩纳村，*904-0495*，日本

A. Rothkopf†

大韩民国首尔*02841*高丽大学物理系（日期：2026年3月4日）

arXiv:2603.02350v1 [physics.class-ph] 2 Mar 2026

摘要

我们介绍了经典保守力质点力学中初值问题的变分作用量原理。通过对量子力学中算符期望值时间依赖性的 Schwinger-Keldysh 表达式取经典极限，我们严格推导出这一表述。我们阐明了在运用哈密顿原理推导欧拉-拉格朗日方程时，粒子的位置变分与速度变分之间的联系。我们表明，凯尔迪什正向路径和反向路径（分别为正向/反向路径的平均值与差值）都有经典路径和涨落——这与一种普遍看法相反：该看法认为，反向路径只描述围绕正向路径给出的单一经典解的涨落。我们还表明，两条路径的涨落对于经典极限的正确归一化至关重要。经典极限为反向路径导出“初始条件”和运动方程，使其唯一的经典解恒为零；有趣的是，反向路径的解会随时间反向传播。因此，在对 Schwinger-Keldysh 形式取经典极限时，无需手动将反向路径设为零。我们还指出，这些结果对非完整约束的经典力学与量子力学，以及规范依赖于场的导数的量子场论均有启示。

* wa.horowitz@uct.ac.za

† akrothkopf@korea.ac.kr

一、引言

经典点粒子力学致力于根据特定的物理设置，确定性地预测粒子未来的位置。通常，这种设置会给出粒子的初始位置和速度，并提供作用于粒子的一些力的信息。原则上，经典力学已得到充分理解：牛顿第二定律 [1]

$$\sum_i \vec{F}_i(t) = m \left.\frac{d^2x}{dt^2}\right|_t \tag{1}$$

给出了关于质量为m 、受外力 $\vec{F}_i(t)$作用的粒子的位置 $x(t)$的时间二阶微分方程。给定初始位置 $x(t_i) = x_0$ 和初始速度$\frac{dx}{dt}\big|_{t_i} = v_0$，皮卡—林德勒夫定理 [2] 保证该二阶微分方程存在唯一解。

尽管牛顿第二定律享有当之无愧的盛名且十分实用，但它也有一些缺点。经过几个世纪的研究，人们认识到，在许多方面，经典点粒子力学有一种好得多的表述方式，即哈密顿极值作用量原理 [3, 4], ：经典质点的路径 $x_{cl}(t)$满足

$$\delta S|_{x_{cl}(t)} = 0, \tag{2}$$

其中作用量

$$S \equiv \int dt\, L \tag{3}$$

定义为拉格朗日量的函数

$$L \equiv T - V, \tag{4}$$

其中， T 是动能， V 是势能，而 δS 是作用量的一阶变分。与牛顿表述 [5, 6]相比，哈密顿表述具有巨大优势。这些优势中一部分包括

- 通过诺特定理清晰揭示对称性的作用 [7]
- 用标量而非矢量来表述问题
- 便于使用广义坐标

- 可轻松纳入约束（无需事先知道其显式作用力）

- 轻松推广至质量的连续分布和场

- 从而得到具有辛结构的相空间流形，为通往量子力学铺就一条“康庄大道”

- 从而能够求得经典路径的全局解，而非局部解 [8]

尽管哈密顿表述具有这些巨大优势，且经过了 ~ 200多年的研究，仍有若干与哈密顿表述相关的概念性和实践性未解问题。为理解这些概念问题，我们先简要回顾通常如何从哈密顿原理 [5, 9] 推导欧拉–拉格朗日方程。我们从一个拉格朗日量 $L[\vec{q}(t)\ \dot{\vec{q}}(t)]$ 开始，它取决于粒子在广义坐标 $\vec{q}(t)$中的路径，以及广义坐标的时间导数 $\dot{\vec{q}}(t) \equiv \frac{d\vec{q}}{dt}\Big|_t$。于是，作用量变分给出

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta \dot{q}^i(t)\right]. \tag{5}$$

对于进行无约束运动的粒子，有转置规则 [10]

$$\delta \dot{q}^i(t) = \frac{d}{dt}\big[\delta q^i(t)\big]. \tag{6}$$

然后进行分部积分，得到

$$\delta S = \delta q^i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\bigg|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} dt\, \delta q^i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right]. \tag{7}$$

假设路径的端点固定，此时 $\delta q^i(t_i) = \delta q^i(t_f) = 0$，边界项恒为 0。然后，由于路径中的变分 $\delta q^i(t)$彼此独立且任意，要使变分恒为零，根据变分法基本定理，我们必须有 [11] 欧拉-拉格朗日方程：

$$\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = 0. \tag{8}$$

然后将欧拉-拉格朗日方程作为初值问题求解，其中 $q^i(t_i) = q_0^i$ 且 $\dot{q}^i(t_i) = \dot{q}_0^i$。

我们想强调上述推导中有两个主要的概念性问题。第一个概念性问题是在

路径在初始时刻和最终时刻的变分， $\delta q^i(t_i) = \delta q^i(t_f) = 0$ 这一条件被用于推导欧拉-拉格朗日方程，而后又将这些方程作为初值问题提出并求解，以确定粒子路径$q^i(t)$。让我们进一步阐述这一点。上述推导中的哈密顿原理提出了这样的问题：如果我们知道质点在初始时刻的初始位置，并且先验地知道粒子在所关注的最终时刻的位置，那么粒子会沿着怎样的路径运动？相比之下，一般而言，在现实实验中，我们只知道初始时刻的初始位置和初始速度这两个初始条件。若知道粒子在未来某个时刻的位置 t_f ，就意味着掌握了逆因果的信息，这从根本上违反了爱因斯坦的狭义相对论 [12]。此外，与初值问题不同（初值问题是适定的，因为皮卡-林德洛夫定理¨保证解的存在性与唯一性）， [2] 边值问题可能有一个、零个或多个解， [2], 这与我们的预期和经验相悖：实验测量可以进行，而且能够重复 [13]。

第二个概念上的问题如下。我们知道，粒子的速度与粒子的位置通过对时间求导相关联，

$$\dot{q}^i(t) = \frac{d}{dt}\big[q^i(t)\big]. \tag{9}$$

那么，在推导欧拉-拉格朗日方程时，为什么我们把粒子速度的变分 $\delta\dot{q}^i(t)$ 视为独立于粒子路径的变分 $\delta q^i(t)$？同样，在从哈密顿原理推导哈密顿方程时，人们会把动量的变分 $\delta p_i(t)$视为独立于路径的变分 $\delta q^i(t)$，尽管动量的定义

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \tag{10}$$

意味着动量是路径和速度的函数， $p_i\big(q^i(t)\ \dot{q}^i(t)\big)$。

与第二个概念问题相关的，是关于哈密顿表述中如何处理约束的困惑和悬而未决的问题。完整约束 $f_k\big(q^i(t)\ t\big) = 0$，例如限制粒子沿圆周运动 $x^2(t)+y^2(t)-R^2 = 0$，只取决于坐标 $q^i(t)$。在这种情况下，哈密顿原理需要作相应修改，使路径的变分必须满足约束方程， $f_k\big(q^i(t) + \delta q^i(t)\ t\big) = 0$。这些变分并非全部相互独立且任意，但仍然可以求得问题的解。特别是，转置规则式 6 保持不变。然而，对于非完整约束

$g_k\big(q^i(t)\ \dot{q}^i(t)\ t\big) = 0$，例如无滑动滚动问题 [10, 14], ，直到最近，物理学家才找到哈密顿原理的一般表述 [8]。此外，对于非完整约束，转置规则式 6 似乎会发生改变 [10], ，这因此改变了相空间的辛结构 [15, 16]。改变相空间的辛结构会对具有非完整约束的系统的量子力学产生何种影响，目前尚不清楚，例如量子纳米小车 [17]以及处于 't Hooft-Veltman 规范下的规范理论 [18]。

除上述与从哈密顿原理推导欧拉-拉格朗日方程相关的概念问题之外，还有一个局限：经典力学的哈密顿表述要求力由势导出，也就是说系统必须是保守的；即耗散系统不在该处理的范围之内。在最近的一项工作中， [19], Galley 提出了一种新的经典力学表述。在 Galley 原理中，人们同样考虑作用量的变分，但有两个关键变化：第一，系统的自由度数目加倍；第二，向作用量中加入一个新项，该新项可以纳入耗散的效应。具体而言，Galley 提出应考虑一个依赖于两条路径 $\vec{q}_1(t)$ 和 $\vec{q}_2(t)$ 的作用量，以及一个项 $K\big(\vec{q}_a(t)\ \dot{\vec{q}}_a(t)\ t\big)$ ，该项依赖于两条路径 $\{\vec{q}_a\}_{a=1}^2$,

$$S_G \equiv \int dt L\big(\vec{q}_1(t), \dot{\vec{q}}_1(t)\big) - L\big(\vec{q}_2(t), \dot{\vec{q}}_2(t)\big) + K\big(\vec{q}_a(t), \dot{\vec{q}}_a(t), t\big). \tag{11}$$

利用坐标变换

$$\begin{aligned} \vec{q}_+(t) &\equiv \frac{1}{2}\big(\vec{q}_1(t) + \vec{q}_2(t)\big) \\ \vec{q}_-(t) &\equiv \vec{q}_1(t) - \vec{q}_2(t), \end{aligned} \tag{12}$$

随后，Galley 提出，经典路径是使修正后的作用量达到极值的路径

$$\delta S_G|_{\substack{\vec{q}_{+,cl}(t) \\ \vec{q}_{-,cl}(t)}} = 0, \tag{13}$$

其中，路径的变分受到如下限制：

$$\begin{aligned} \delta x_-(t_f) &= 0 \\ \delta x_-(t_i) &= 0 \\ \delta x_+(t_i) &= 0. \end{aligned} \tag{14}$$

原则上，Galley 的表述似乎同时解决了上述三个问题中的两个：它似乎能够将经典力学的变分原理表述为初值问题，并纳入耗散效应。

然而，试图在各种点粒子力学问题的数值模拟中实现 Galley 原理 [20] 却出现了两个令人困惑的特征。首先，数值上找到的使作用量取极值的轨迹在最终时间片处存在非物理的跳跃。其次，负坐标轨迹总是被精确求解为零。

与此同时，Galley 对自由度的加倍，与量子力学中算符期望值的时间依赖性在 Schwinger-Keldysh/闭合时间路径/in-in 表述中对自由度的加倍极为相似 [21, 22]。Schwinger-Keldysh 或闭合时间路径的量子力学表述被广泛应用于诸多领域，包括非平衡统计力学和量子场论 [23–25], 凝聚态系统 [26], 有限温度下的量子场论 [27–29], 宇宙学 [30, 31], 以及强耦合系统和全息理论 [32], 等。在这些研究领域的语境中，人们通常认为负自由度是系统经典路径附近的量子涨落，而经典 $\hbar \to 0$ 极限则通过（人为地）将负自由度设为零而得到。

Galley 的工作也与开放量子系统领域的研究十分相似。尽管 Feynman 和 Vernon [33] 以及 Caldeira 和 Leggett [34] 并未真正考虑 in-in 期望值，但二者之间存在明显的联系。例如，Caldeira 和 Leggett 特别是在耗散系统的背景下讨论他们的工作，并将 Morse 和 Feshbach [35] 的有效作用量解释为含有一个 K 项；按照 Galley 的约定，它是 Schwinger-Keldysh 形式中正向路径和反向路径的函数。不过，Caldeira-Leggett 似乎并未明确将他们的工作与经典变分作用量原理联系起来。

接下来，我们将完成以下工作。1）我们将严格推导非相对论点粒子量子力学的 Schwinger-Keldysh 表述的 $\hbar \to 0$ 极限，以便为经典力学中哈密顿方程和欧拉-拉格朗日方程的初值问题推导变分作用量原理。2）在如此仔细地取这个极限时，我们会发现，Galley 原理应作如下修正。我们明确指出，对于无耗散系统，待变分的作用量应当

改为哈密顿修正作用量，

$$S_{HR} \equiv \vec{p}_0 \cdot \vec{q}_-(t) + \int dt L\big(\vec{q}_1(t), \dot{\vec{q}}_1(t)\big) - L\big(\vec{q}_2(t), \dot{\vec{q}}_2(t)\big), \tag{15}$$

其中经典路径为

$$\delta S_{HR}|_{\substack{\vec{q}_{+,cl}(t) \\ \vec{q}_{-,cl}(t)}} = 0, \tag{16}$$

其中，对路径的变分受到如下限制：

$$\begin{aligned} \delta x_-(t_f) &= 0 \\ \delta x_+(t_i) &= 0 \end{aligned} \tag{17}$$

且 $\vec{p}_0$ 是粒子的初始动量。尽管我们尚未明确检验耗散系统的情形，但推测只需加入耗散项 $K\big(\vec{q}_a(t)\ \dot{\vec{q}}_a(t)\big)$，即可对上述内容作相应修改。3）接下来，我们将说明如何正确地对依赖于粒子位置 $\vec{q}(t)$和速度 $\dot{\vec{q}}(t)$的拉格朗日量进行变分。由此，我们将彻底解决前文指出的经典点粒子力学中的两个概念问题。4）在推导上述结果的过程中，我们还将看到，在取舒温格-凯尔迪什路径积分的 $\hbar \to 0$ 极限时，负自由度会全部由该 $\hbar \to 0$ 极限所诱导的运动方程置为零；也就是说，在取经典极限时，无须手动将负自由度置为零。5）我们将首先在单个笛卡尔坐标中计算上述结果。将上述结果推广到 d 维（不一定是笛卡尔坐标）时，我们将严格推导同时依赖位置和动量的量子项的特罗特分解表达式，而不依赖临时的处方，也不引入新的量子力学原理。我们相信，研究粒子位置和速度的舒温格-凯尔迪什路径积分时所发展出的技术，在未来的工作中将有助于解决一般非完整系统经典力学与量子力学中的未决问题，并使耗散系统的 $\hbar \to 0$ 极限也能够得到计算。

II. 记号与约定

我们的工作主要将在一个笛卡尔维度中进行，即 x。我们将把单个粒子的位置描述为时间的函数 $x(t)$。我们将取拉格朗日量为

form

$$L = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x). \tag{18}$$

该粒子对应的动量为 $p(t)$，其中粒子的动量作为时间的函数 $p(t)$，与粒子的质量以及粒子位置在时间 t 处的时间导数成正比， $p(t) = \frac{\partial L}{\partial[\frac{dx}{dt}]}\Big|_t = m\,\frac{dx}{dt}\big|_t$。

为了便于并清晰地讨论路径 $x(t)$和速度 $\dot{x}(t)$的作用量变分，我们将仔细区分在时间 t 处取值的路径的时间导数，

$$\left.\frac{dx}{dt}\right|_t = \frac{d}{dt}\big[x(t)\big] = \left.\frac{d}{dt}\big[x\big]\right|_t \tag{19}$$

与符号 $\dot{x}(t)$。我们最终将证明，在所考虑的路径积分的 $\hbar \to 0$ 极限下，

$$\dot{x}(t) = \left.\frac{dx}{dt}\right|_t, \tag{20}$$

这在现阶段或许显得有些过分讲究，但我们将看到，这样做可以使经典变分过程毫无歧义。

在经典力学中，描述路径变分的方法有很多 [9, 10]。例如， [9, 19] 采用了一种常见的表述方式，将路径视为不仅关于时间 t 、也关于小参数 $\alpha > 0$的函数，

$$x(t;\alpha) = x(t;0) + \alpha\eta(t).$$

$\eta(t)$是某个实函数，通过按 α 的阶逐阶展开所有量，并确保关于 α 的线性项消失，即可求得经典运动。

为减少符号上的繁杂，我们将沿用 [10], 的记法，其中路径 $x(t)$的变分记为 $\delta x(t)$，

$$x(t) = x_{cl}(t) + \delta x(t). \tag{21}$$

在上文中，我们将 δx 视为一个单独的函数名；也就是说，考虑 $(\delta x)(t)$。根据上下文应该可以看出，我们也会将作用量 S 的变分称为 δS。在作用量变分的情形中， δ 是作为一种运算来使用的；例如，

$$\delta S\Big[x(t), \frac{d}{dt}\big[x(t)\big]\Big] = S\Big[x(t)+\delta x(t), \frac{d}{dt}\big[x(t)+\delta x(t)\big]\Big] - S\Big[x(t), \frac{d}{dt}\big[x(t)\big]\Big]. \tag{22}$$

请注意，我们将以最终时刻 t_f来表示所有最终结果，而不是像通常那样将解表示为时间的函数 t。我们这样选择，是为了避免作用量中出现关于 t' 的积分所带来的符号繁杂问题。

为统一术语，我们说明这里将考察三类路径积分，先对离散时间切片求积分，再取连续极限：对$x_{\pm}(t)$和 $p_{\pm}(t)$求积分的相空间路径积分；对 $x_{\pm}(t)$求积分的位置空间路径积分；以及对 $x_{\pm}(t)$、 $\dot{x}_{\pm}(t)$和拉格朗日乘子函数 $\lambda_{\pm}(t)$求积分的构型空间路径积分。

III. 从 Schwinger-Keldysh 推导哈密顿方程

A. 离散情形

我们来考察这样一个物理问题：在仅依赖于位置的势能所产生的力的作用下，非相对论系统中量子波包位置的期望值如何随时间演化。

我们从时刻 t_f 的位置算符期望值的定义开始，

$$\langle \hat{x} \rangle (t_f) = \langle \psi(t_i) | \hat{U}^{\dagger}_{\hat{H}}(t_f, t_i)\, \hat{x}\, \hat{U}_{\hat{H}}(t_f, t_i) | \psi(t_0) \rangle, \tag{23}$$

ˆ其中 $U^{\hat{}}_H(t_f,\ t_i)$ 是通常的时间演化算符，

$$\hat{U}_{\hat{H}}(t_f, t_i) = e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)}. \tag{24}$$

为简便起见，我们取

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \tag{25}$$

我们将在附录中展示如何考虑与广义坐标相关的更一般的哈密顿量。A. 此外，我们进一步假设初态为纯高斯波包，

$$|\psi(t_i)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}} |x\rangle. \tag{26}$$

初始态可以取更一般的形式，例如密度矩阵。为简便起见，我们选择只考虑高斯波包。我们会发现，在这种情况下，我们的结果显得格外自然。想必任何在

位置和动量上都存在展宽、且满足最小不确定性关系的初始态，都会得出类似结果，尽管我们尚未进行任何明确的检验。

对于我们的高斯初始波包，我们可以很容易地算出

$$\begin{aligned}\langle\psi(t_i)|\psi(t_i)\rangle &= 1\\ \langle\hat{x}\rangle(t_i) &= x_0\\ \langle(\hat{x}-x_0)^2\rangle(t_i) &= \sigma_x^2\\ \langle\hat{p}\rangle(t_i) &= p_0\\ \langle(\hat{p}-p_0)^2\rangle(t_i) &= \frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2}.\end{aligned} \tag{27}$$

关键的是，式27 意味着动量中的宽度 σ_p 正比于 $\hbar$ ，并且与波包位置中的宽度成反比：

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_x}. \tag{28}$$

式28 告诉我们，在趋近经典力学时，必须谨慎安排极限的次序：我们必须首先取 $\hbar\to 0$ ，并且只有在此之后才取 $\sigma_x\to 0$。

现在让我们考虑位置期望值的时间演化，式23。为记号简便起见，我们将在计算的中间步骤中略去 $\hbar$ ，并在最后恢复 $\hbar$ ：

$$\begin{aligned}\langle x\rangle(t_f) = &\int dx_{1,0}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{ip_0x_{1,0}}e^{-\frac{(x_{1,0}-x_0)^2}{4\sigma_x^2}}\\ &\int dx_{2,0}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{-ip_0x_{2,0}}e^{-\frac{(x_{2,0}-x_0)^2}{4\sigma_x^2}}\langle x_{2,0}|e^{i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})\right)\Delta t}\,\hat{x}\,e^{-i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})\right)\Delta t}|x_{1,0}\rangle,\end{aligned} \tag{29}$$

其中 $\Delta t\equiv t_f-t_i$。定义 $\epsilon\equiv\Delta t/N$，并让我们特罗特化 [36]:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle(t_f) = \lim_{N\to\infty}&\int dx_{1,0}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{ip_0x_{1,0}}e^{-\frac{(x_{1,0}-x_0)^2}{4\sigma_x^2}}\int dx_{2,0}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{-ip_0x_{2,0}}e^{-\frac{(x_{2,0}-x_0)^2}{4\sigma_x^2}}\\ &\langle x_{2,0}|e^{iV(\hat{x})\epsilon}\int dp_{2,\frac{1}{2}}|p_{2,\frac{1}{2}}\rangle\langle p_{2,\frac{1}{2}}|e^{i\frac{\hat{p}^2}{2m}\epsilon}\int dx_{2,1}|x_{2,1}\rangle\langle x_{2,1}|\cdots\int dx_{2,N}|x_{2,N}\rangle\langle x_{2,N}|\hat{x}\\ &\int dx_{1,N}|x_{1,N}\rangle\langle x_{1,N}|\cdots\int dx_{1,1}|x_{1,1}\rangle\langle x_{1,1}|e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\epsilon}\int dp_{1,\frac{1}{2}}|p_{1,\frac{1}{2}}\rangle\langle p_{1,\frac{1}{2}}|e^{-iV(\hat{x})\epsilon}|x_{1,0}\rangle\\ &+\mathcal{O}(\epsilon^2).\end{aligned} \tag{30}$$

请注意，我们将动量本征态插入放在位置本征态插入之间的半个时间步处。原则上，动量本征态插入在时间上的确切位置可以是相邻位置本征态时间之间的任意时刻，

包括在内。我们特意选择将动量时间步放在恰好半个时间步处，是因为我们将推导的运动方程的数值计算表明，这种选择与连续时间解相比准确得多。事实上，当通过斯特朗分裂对原始特罗特化进行 $\mathcal{O}(\epsilon^3)$处理，且势能至多关于位置呈线性时，采用这种选择，动量的离散时间步位置与连续时间解相比恰好正确。 [37]

对于正则共轭对变量，根据狄拉克量子化条件可得

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i, \tag{31}$$

that

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}. \tag{32}$$

由此可得，方程30 为

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}\rangle(t_f) = \lim_{N\to\infty} \prod_{n_x=0}^{N} \int dx_{1,n_x} dx_{2,n_x} \prod_{n_p=0}^{N-1} \int \frac{dp_{1,n_p+\frac{1}{2}}}{2\pi} \frac{dp_{2,n_p+\frac{1}{2}}}{2\pi} \\ \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{(x_{2,0}-x_0)^2}{4\sigma_x^2}} e^{-ip_0 x_{2,0}} e^{-i\epsilon \sum_{k_2=0}^{N-1} p_{2,k_2+\frac{1}{2}} \frac{x_{2,k_2+1}-x_{2,k_2}}{\epsilon} - H(p_{2,k_2+\frac{1}{2}}, x_{2,k_2})} \\ \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{(x_{1,0}-x_0)^2}{4\sigma_x^2}} e^{ip_0 x_{1,0}} e^{i\epsilon \sum_{k_1=0}^{N-1} p_{1,k_1+\frac{1}{2}} \frac{x_{1,k_1+1}-x_{1,k_1}}{\epsilon} - H(p_{1,k_1+\frac{1}{2}}, x_{1,k_1})} \\ x_{1,N}\delta(x_{1,N} - x_{2,N}) + \mathcal{O}(\epsilon^2),\end{aligned} \tag{33}$$

其中

$$H(p_{i,k_i+\frac{1}{2}}, x_{i,k_i}) \equiv \frac{p_{i,k_i+\frac{1}{2}}^2}{2m} + V(x_{i,k_i}). \tag{34}$$

注意，式 33中在最终时间片N 处，Schwinger-Keldysh 轮廓的正向（x_1）与反向（x_2）时间演化分支之间自然出现了一个连接条件，它将量子矩阵元 $\langle x_{2,N}|\hat{x}|x_{1,N}\rangle = x_{1,N}\delta(x_{1,N} - x_{2,N})$中的 $x_{1,N} = x_{2,N}$设定为相等。还要注意，动量之间没有 连接条件。最后还要注意，位置积分的数量与动量积分的数量之间存在一种不自然的 差异；随着讨论的推进，我们将看到如何消除这种不自然性。

现在，我们希望将变量从 $1/2$坐标变换为 $+/-$ 坐标，定义如下：

$$\begin{aligned} x_{+,k}(t) &\equiv \frac{1}{2}\big(x_{1,k}(t)+x_{2,k}(t)\big); \quad p_{+,k+\frac{1}{2}} \equiv \frac{1}{2}\big(p_{1,k+\frac{1}{2}}(t)+p_{2,k+\frac{1}{2}}(t)\big) \\ x_{-,k}(t) &\equiv x_{1,k}(t)-x_{2,k}(t); \qquad\quad p_{-,k+\frac{1}{2}} \equiv p_{1,k+\frac{1}{2}}(t)-p_{2,k+\frac{1}{2}}(t). \end{aligned} \tag{35}$$

这种坐标变换特别有用，而且正如我们将看到的， $+/-$坐标是我们寻求经典极限时自然应使用的坐标。人们常常写道，负坐标应被视为正坐标所遵循的经典路径周围的量子涨落。我们将看到，这种解释并不正确，因为正坐标和负坐标都包含既一条经典轨迹，也包含围绕该经典轨迹的量子涨落。我们将表明，正确的理解反而是：经典极限迫使负坐标在所有时刻都恒等于零， $x_{-}(t) = p_{-}(t) = 0$，而正坐标则作为初值问题遵循哈密顿运动方程。

请注意，不要把上文对 $+/-$ 坐标的定义（式35）——它混合了与单个正则共轭位置和动量算符对$\hat{x}$和$\hat{p}$相关联的本征态的正向和反向标签——与高能物理中常用的、混合闵可夫斯基四矢量的 t和 z 坐标的 $+/-$光锥坐标相混淆。特别地，在我们的形式体系中考虑$[\hat{x}_i, \hat{p}_j]$、 $[\hat{x}_{\pm}, \hat{p}_{\pm}]$或 $[\hat{x}_{\pm}, \hat{p}_{\mp}]$是没有意义的，因为对于在一维中运动的单个非相对论粒子，事实上只有一个$\hat{x}$ 和一个$\hat{p}$ 。

变量替换公式对应的雅可比行列式 35 为 1；因此，公式 30变为

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle (t_f) = \lim_{N\to\infty} \int & dx_{+,0} dx_{-,N} \prod_{n=0}^{N-1} dx_{+,n+1} dx_{-,n} \frac{dp_{+,n+\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \frac{dp_{-,n+\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \\ & \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/2} e^{-\frac{\left(x_{+,0}-x_0\right)^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{x_{-,0}^2}{8\sigma_x^2}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x_{-,0}} \\ & \exp\left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[p_{+,k+\frac{1}{2}} \frac{x_{-,k+1}-x_{-,k}}{\epsilon} + p_{-,k+\frac{1}{2}} \frac{x_{+,k+1}-x_{+,k}}{\epsilon} \right.\right. \\ & \left.\left. + H\left(p_{+,k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}p_{-,k+\frac{1}{2}}, x_{+,k} - \frac{1}{2}x_{-,k}\right) - H\left(p_{+,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}p_{-,k+\frac{1}{2}}, x_{+,k} + \frac{1}{2}x_{-,k}\right) \right] \right\} \\ & x_{+,N}\delta(x_{-,N}) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \tag{36}$$

可以看出，正向与反向1/2 路径的位置之间的连接条件，已转化为条件 $x_{-,N} = 0$。值得注意的是，位置积分 $dx_{\pm,n}$ 自然地与动量积分 $dp_{\pm,n+\frac{1}{2}}$ 配对，只有两个剩余的位置积分 $dx_{+,0}$ 和 $dx_{-,N}$除外。下一步，我们将了解如何将这些剩余的位置积分自然地与两个新的动量积分配对，这两个动量以拉格朗日乘子的形式出现。

在公式36中，我们恢复了 $\hbar$，以便更好地说明接下来的步骤。具体而言，我们计划采用驻相法，该方法在 $\hbar \to 0$ 极限下成立。多重积分的驻相法一般表示为 [38]

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x\, g(x) e^{i\,\phi(x)/a} = \sum_{x_0} \left|\det\left(\mathrm{Hess}(\phi)|_{x_0}\right)\right|^{-1/2} e^{i\frac{\pi}{4}\mathrm{sgn}\left(\mathrm{Hess}(\phi)|_{x_0}\right)} (2\pi\, a)^{n/2} g(x_0) e^{i\phi(x_0)/a} + o(a^{n/2}), \quad (37)$$

其中，求和遍历所有临界点 x_0 ，满足$\nabla_x \phi|_{x_0} = 0$，而 $\mathrm{Hess}(\phi)|_{x_0}$ 是 ϕ 的二阶导数海森矩阵，在临界点 x_0处取值。这里的 sgn 表示矩阵的惯性指数，即矩阵正特征值数量与负特征值数量之差。我们想强调的是，我们并不只是考虑使作用量达到极值的路径；相反，我们是严格地利用驻相法，考虑完整路径积分的$\hbar \to 0$ 极限。驻相法严格地为我们给出了 $\hbar$ 路径积分结果的领头阶，它要求我们考虑使作用量保持驻定的路径。

因此，我们希望利用下列恒等式，用自然进入路径积分相位的对象，替换在最终时间片上强制连接条件的δ函数，以及在初始时间片上强制初始波包条件的高斯函数：

$$\begin{aligned} e^{-\alpha x^2} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-\frac{\lambda^2}{4\alpha}} e^{+i\lambda x}, \qquad \alpha > 0 \\ \delta(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-i\lambda x}. \end{aligned} \quad (38)$$

代入方程 36后，我们应将 λ 视为：1）拉格朗日乘子；2）与剩余的位置积分配对的新动量。我们将在下一组方程中对此作出精确定义。再次回想，这里的位置和动量

并非 正则共轭对；实际上，只有一个位置算符 $\hat{x}$ 和一个动量算符 $\hat{p}$，而这种配对是发生在这一对正则共轭算符的本征态的特征值之间的。

因此我们发现，方程 36变为

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = \lim_{N\to\infty} \int dx_{+,0} \frac{d\lambda_{-,0}}{2\pi\hbar} dx_{-,N} \frac{d\lambda_{+,N}}{2\pi\hbar} \prod_{n=0}^{N-1} dx_{+,n+1} dx_{-,n} \frac{dp_{+,n+\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \frac{dp_{-,n+\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar}$$
$$e^{-\frac{x_{-,0}^2}{8\sigma_x^2}} e^{-\frac{\sigma_x^2 \lambda_{-,0}^2}{2\hbar^2}} x_{+,N} e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[p_{\pm,k+\frac{1}{2}}, x_{\pm,k}, \lambda_\pm]} + \mathcal{O}(\epsilon^2), \tag{39}$$

$$S_{HR}[p_{\pm,k+\frac{1}{2}}, x_{\pm,k}, \lambda_\pm] \equiv \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\lambda_{-,0}(x_{+,0} - x_0) - \lambda_{+,N}\, x_{-,N} + p_0\, x_{-,0} \right.\right.$$
$$+ \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \left(p_{+,k+\frac{1}{2}} \frac{x_{-,k+1} - x_{-,k}}{\epsilon} + p_{-,k+\frac{1}{2}} \frac{x_{+,k+1} - x_{+,k}}{\epsilon} \right.$$
$$+ H\left(p_{+,k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} p_{-,k+\frac{1}{2}}, x_{+,k} - \frac{1}{2} x_{-,k}\right)$$
$$\left.\left.\left. - H\left(p_{+,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} p_{-,k+\frac{1}{2}}, x_{+,k} + \frac{1}{2} x_{-,k}\right) \right) \right] \right\}. \tag{40}$$

从方程 39 可以看出， $\lambda_\pm$ 充当拉格朗日乘子，用以纠正 N 积分数量与 $N-1$ 积分数量之间不自然的不平衡，其中涉及的 $x_\pm$ 和 $p_\pm$ 分别为这两类积分。（增加 $\lambda_\pm$ 积分后，这些积分数量平衡的重要性在 $\hbar$计数中表现得尤为明显；这种计数十分自然，而 $\lambda_\pm$ 充当动量。）很容易看出，狄拉克δ函数 $\delta(x_{-,N})$完全限制了$x_{-,N}$ 自由度；我们本可以将该狄拉克δ函数与$\int dx_{-,N}$合并。进一步直观地看，对于 $\sigma_x \to 0$ ，高斯函数 $\exp[-(x_{+,0}^2 - x_0)^2/2\sigma_x^2]$ 看起来就像一个以$x_{+,0} = x_0$ 为中心的狄拉克δ函数，可用来消去$\int dx_{+,0}$积分。然而，类似于 Kugo-Ojima机制 [39] ，我们会发现，更自然也更有用的做法是引入拉格朗日乘子 $\lambda_\pm$ ，将其作为新的独立自由度，以施加对 $x_{+,0}$ 和 $x_{-,N}$ 的条件，并保留对 $x_{+,0}$ 和 $x_{-,N}$ 的积分；而不是通过合并 $x_{+,0}, x_{-,N}$ 积分来减少自由度。从方程 39 中相位的结构可以清楚地看出， $\lambda_{-,0}$ 与 $x_{+,0}$ 配对，而 $\lambda_{+,N}$ 与 $x_{-,N}$ 配对。（我们马上会看到，$\lambda_{+,N}$ 是粒子在最终时间片 N 处的最终经典动量，而 $\lambda_{-,0}$ 是“最终”负动量；我们将看到，它来自负坐标的反向时间演化。）

为求完整，注意一个微妙之处。若仔细比较我们的相空间路径

积分（含拉格朗日乘子）方程 39 与一般的驻相法公式方程37，可能会发现其中存在不一致。方程37中，被积函数的非相位部分 $g(x$与小参数 a无关。然而，在我们的相空间路径积分方程 39中，被积函数的非相位部分明确依赖于 $\hbar$（事实上， $\hbar^2$）。因此，可能会让人担心一般公式方程 37不适用，或者在我们的情形下需要修正。我们将把对这一微妙之处的仔细考察留到第 VII节，但请注意，这一微妙之处不会改变我们的方法或最终结果。

将式39 中的相位定义为 S_{HR} （对于 Schwinger-Keldysh 作用量），驻相法表明，在经典 $\hbar \to 0$ 极限下，产生 $\hat{x}(t)$ 期望值的积分的领头阶贡献将来自使 S_{HR} 取极值的 $x_{\pm,\,k}$、 $p_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$ 和 $\lambda_\pm$ 的值。也就是说，我们要找出满足 $\delta S_{HR} = 0$ 的 $x_{\pm,\,k}$、 $p_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$和 的值。分别对 、 k 、 $p_\pm$ 、 $k+\frac{1}{2}$ 和 $\lambda_\pm$ 改变 S_{HR}，得到

$$
\begin{aligned}
\delta S_{HR}[p_{\pm,k+\frac{1}{2}}, x_{\pm,k}, \lambda_\pm] = {} & \delta\lambda_{-,0}(x_{+,0} - x_0) + \lambda_{-,0}\delta x_{+,0} - \delta\lambda_{+,N}x_{-,N} - \lambda_{+,N}\delta x_{-,N} + p_0\delta x_{-,0} \\
& + \epsilon\sum_{k=0}^{N-1}\Bigg[\delta p_{+,k+\frac{1}{2}}\frac{x_{-,k+1}-x_{-,k}}{\epsilon} + p_{+,k+\frac{1}{2}}\frac{\delta x_{-,k+1}-\delta x_{-,k}}{\epsilon} \\
& + \delta p_{-,k+\frac{1}{2}}\frac{x_{+,k+1}-x_{+,k}}{\epsilon} + p_{-,k+\frac{1}{2}}\frac{\delta x_{+,k+1}-\delta x_{+,k}}{\epsilon} \\
& + \frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_{-,k}\left(\delta p_{+,k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}\delta p_{-,k+\frac{1}{2}}\right) + \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{+,k}\left(\delta x_{+,k} - \frac{1}{2}\delta x_{-,k}\right) \\
& - \frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_{+,k}\left(\delta p_{+,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\delta p_{-,k+\frac{1}{2}}\right) - \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{+,k}\left(\delta x_{+,k} + \frac{1}{2}\delta x_{-,k}\right)\Bigg],
\end{aligned}
\tag{41}
$$

其中

$$
\frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_{\pm,k} \equiv \frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_{p=p_{+,k+\frac{1}{2}}\pm\frac{1}{2}p_{-,k+\frac{1}{2}},\, x=x_{+,k}\pm\frac{1}{2}x_{-,k}},
\tag{42}
$$

对于 $\partial H/\partial x|_{\pm,\,k}$ 也有类似结果。

接下来，我们进行一些指标操作：

$$
\begin{aligned}
\sum_{k=0}^{N-1} p_{+,k+\frac{1}{2}}(\delta x_{-,k+1} - \delta x_{-,k}) &= \sum_{k=1}^{N} p_{+,k-1+\frac{1}{2}}\delta x_{-,k} - \sum_{k=0}^{N-1} p_{+,k+\frac{1}{2}}\delta x_{-,k} \\
&= p_{+,N-1+\frac{1}{2}}\delta x_{-,N} - p_{+,\frac{1}{2}}\delta x_{-,0} \\
&\quad + \sum_{k=1}^{N-1}(p_{+,k-1+\frac{1}{2}} - p_{+,k+\frac{1}{2}})\delta x_{-,k}.
\end{aligned}
\tag{43}
$$

在上文第二行，即式43中，我们有意保留了形式别扭的$k-1+\frac{1}{2}$作为动量 p的指标。我们保留这一形式别扭的指标，而不是使用 $k-\frac{1}{2}$，是因为当一个时间步内存在多个特征值时，例如在考虑二阶分裂的情形下，或者如下文所述，在非笛卡尔和/或非欧几里得坐标的情形下，与每个移位指标相关联的每个变量都将在 $\hbar \to 0$ 极限下按其自身的运动方程演化。例如，参见附录A，其中$p_{k+\frac{1}{4}}$的演化不同于$p_{k+\frac{3}{4}}$，因此取$p_{k-1+\frac{1}{4}} = p_{k-\frac{3}{4}}$并无意义。

因此，

$$
\begin{aligned}
\delta S_{HR}[p_{\pm,k+\frac{1}{2}}, x_{\pm,k}, \lambda_{\pm}] = {} & \delta\lambda_{-,0}[x_{+,0} - x_0] \\
& + \delta x_{-,0}\left[p_0 - p_{+,\frac{1}{2}} - \frac{\epsilon}{2}\left(\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,0} + \left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,0}\right)\right] \\
& + \sum_{k=0}^{N-1} \delta p_{-,k+\frac{1}{2}}\left[x_{+,k+1} - x_{+,k} - \frac{\epsilon}{2}\left(\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{+,k} + \left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{-,k}\right)\right] \\
& + \sum_{k=1}^{N-1} \delta x_{-,k}\left[p_{+,k-1+\frac{1}{2}} - p_{+,k+\frac{1}{2}} - \frac{\epsilon}{2}\left(\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,k} + \left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,k}\right)\right] \\
& + \delta x_{-,N}\left[-\lambda_{+,N} + p_{+,N-1+\frac{1}{2}}\right] \\
& - \delta\lambda_{+,N}[x_{-,N}] \\
& + \delta x_{+,N}\left[p_{-,N-1+\frac{1}{2}}\right] \\
& + \sum_{k=0}^{N-1} \delta p_{+,k+\frac{1}{2}}\left[x_{-,k+1} - x_{-,k} - \epsilon\left(\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{+,k} - \left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{-,k}\right)\right] \\
& + \sum_{k=1}^{N-1} \delta x_{+,k}\left[p_{-,k-1+\frac{1}{2}} - p_{-,k+\frac{1}{2}} - \epsilon\left(\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,k} - \left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,k}\right)\right] \\
& + \delta x_{+,0}\left[\lambda_{-,0} - p_{-,\frac{1}{2}} - \epsilon\left(\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,0} - \left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,0}\right)\right]. \qquad (44)
\end{aligned}
$$

由于这些变分 $\delta x_{\pm,\,k}$、 $\delta p_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$、以及 $\delta\lambda_{\pm}$彼此独立且任意，为使方程 44 恒等于零，各个方括号中的每一项都必须恒等于零。因此，我们得到离散经典 Schwinger-Keldysh 运动方程及其初始条件，均以 $+/-$ 坐标表示，所有这些结果均由此得出

由相空间路径积分的 $\hbar \to 0$ 极限（方程 39 和40）：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_{+,0} = x_0, \\ p_{+,\frac{1}{2}} = p_0 - \dfrac{\epsilon}{2}\left(\left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,0} + \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,0} \right) \end{cases} \tag{45a}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} x_{+,k+1} = x_{+,k} + \dfrac{\epsilon}{2}\left(\left.\dfrac{\partial H}{\partial p}\right|_{+,k} + \left.\dfrac{\partial H}{\partial p}\right|_{-,k} \right), \quad k = 0, \ldots, N-1, \\ p_{+,k+\frac{1}{2}} = p_{+,k-1+\frac{1}{2}} - \dfrac{\epsilon}{2}\left(\left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,k} + \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,k} \right), \quad k = 1, \ldots, N-1 \end{cases} \tag{45b}$$

拉格朗日乘子

$$\lambda_{+,N} = p_{+,N-1+\frac{1}{2}} \tag{45c}$$

“初始”条件

$$\begin{cases} x_{-\ N} = 0, \\ p_{-,N-1+\frac{1}{2}} = 0 \end{cases} \tag{45d}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} x_{-,k} = x_{-,k+1} - \epsilon\left(\left.\dfrac{\partial H}{\partial p}\right|_{+,k} - \left.\dfrac{\partial H}{\partial p}\right|_{-,k} \right), \quad k = 0, \ldots, N-1, \\ p_{-,k-1+\frac{1}{2}} = p_{-,k+\frac{1}{2}} + \epsilon\left(\left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,k} - \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,k} \right), \quad k = 1, \ldots, N-1 \end{cases} \tag{45e}$$

拉格朗日乘子

$$\lambda_{-,0} = p_{-,\frac{1}{2}} + \epsilon\left(\left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,0} - \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,0} \right) \tag{45f}$$

上述方程的解释如下：公式 45a 给出了初始时间片 $k = 0$ 上 $+$ 位置和动量坐标的初始条件（其中，初始动量 p_{+},1 2 相对于 p_0 因势能 V产生的力而发生偏移，这强调了我们实际上应当将离散化动量对应的时间切片视为相对于位置时间切片有所偏移）；公式 45b 给出了 $+$ 坐标的离散（向前）时间演化；公式 45d 给出了最终时间片 $k = N$ 上 $-$ 坐标的“初始”条件（同样，离散化动量相对于位置时间切片有所偏移）；公式 45e 给出了 $-$坐标的离散（向后）时间演化。我们强调，颇为有趣的是， $-$ 坐标的运动方程使 $-$坐标随时间反向演化。最后，公式 45c 和 45f 给出了初始和最终时间片上拉格朗日乘子 $\lambda_{\pm}$ 的值；拉格朗日乘子会自然地按需调整自身，从而使关于 $x_{\pm}$、 $p_{\pm}$ 的方程在所有时刻都得到完全满足；如果没有这些拉格朗日乘子，离散时间演化将导致坐标的演化降阶

对于 $+$ （$-$）位置，沿时间正向（反向）演化的最后一步中，演化将降阶。

我们可以通过认识到能够精确地求解以下变量的方程而取得进展： $-$坐标。其逻辑如下。 $x_{-,\,N}=0$ 以及 $p_{-,\,N-1+\frac{1}{2}}=0$ 由“初始”条件式 45d得出；若假设 $x_{-,\,N-1}=0$，则可见

$$\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{+,N-1}=\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{-,N-1}. \tag{46}$$

那么，根据式 $x_{-,\,k}$ 中 45e的动力学，我们可以自洽地得到：

$$x_{-,N-1}=0. \tag{47}$$

只要哈密顿量不存在病态，我们就可以由隐函数定理保证该解 $x_{-,\,N-1}=0$ 的唯一性，

$$\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p}\neq 1. \tag{48}$$

那么，根据式 $p_{-,\,k+\frac{1}{2}}$ 中 45e 的动力学，我们得到

$$p_{-,N-2+\frac{1}{2}}=0, \tag{49}$$

因为

$$\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{+,N-1}=\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{-,N-1}. \tag{50}$$

这一推理过程可以继续应用于 $x_{-,\,k}$ 和 $p_{-,\,k}$ 坐标，一直追溯到 $k=0$，从而得到

$$\begin{aligned} x_{-,k}&=0, \qquad k=0,\ldots,N,\\ p_{-,k+\frac{1}{2}}&=0, \qquad k=0,\ldots,N-1. \end{aligned} \tag{51}$$

可以看出， $-$ 坐标会动态地由运动方程和经典极限所唯一确定的初始条件 $\hbar\to 0$ 以及驻相法自动设为 0；我们不需要手动将 $-$ 坐标设为零 [40]。

现在我们已经求得 $-$坐标的解，可以将这些解代入 $+$ 坐标方程，即式45a 和45b。这样，我们得到离散版本

的哈密顿方程:

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_{+,0} = x_0, \\ p_{+,\frac{1}{2}} = p_0 - \epsilon \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_0 \end{cases} \tag{52a}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} x_{+,k+1} = x_{+,k} + \epsilon \left.\dfrac{\partial H}{\partial p}\right|_k, & k = 0, \ldots, N-1, \\ p_{+,k+\frac{1}{2}} = p_{+,k-1+\frac{1}{2}} - \epsilon \left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_k, & k = 1, \ldots, N-1, \end{cases} \tag{52b}$$

其中

$$\left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_k \equiv \left.\frac{\partial H}{\partial x}\right|_{p=p_{+,k+\frac{1}{2}},\, x=x_{+,k}}. \tag{53}$$

因此我们证明了，作用量 S_{HR} 的临界点存在（由构造可知），且唯一，并且给出了相空间中与初始条件 x_0 和 p_0 以及势能 $V(x)$相对应的经典路径。

确定了施温格–凯尔迪什作用量 S_{HR} 的唯一临界点处 $x_{\pm、k}$、 $p_{\pm、k+\frac{1}{2}}$和 $\lambda_{\pm}$的值后，我们现在应考察 S_{HR} 的海森矩阵，以完成驻相法公式 37 的计算，从而求出离散化相空间路径积分公式 39 和 40。可以证明，若将混合偏导数按 x_{-}、0、 p_{+}、1 2、.....、x_{-}、$_{N-1}$、 p_{+}、$_{N-1+\frac{1}{2}}$、 x_{-}、$_{N}$、 λ_{+}、$_{N}$、 x_{+}、$_{N}$、 p_{-}、$_{N-1+\frac{1}{2}}$、.....、x_{+}、1、 p_{-}、1 2、 x_{+}、0、 λ_{-}、0 的顺序取值，并在满足 $x_{-、k} = p_{-、k+\frac{1}{2}} = \lambda_{-、0} = 0$的临界点处求值，则 S_{HR} 的海森矩阵具有以下三对角形式,

$$\mathrm{Hess}(S_{HR}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & & \\ -1 & 0 & 1 & & & \\ & 1 & 0 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 0 & 1 \\ & & & & 1 & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon). \tag{54}$$

其余所有元素均为 0。

对于三对角矩阵，一般有

$$A_n \equiv \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ c_1 & a_2 & b_2 & & \\ & c_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \tag{55}$$

其行列式 $f_n \equiv \det A_n$ 由连续式递归给出

$$f_n = a_n\, f_{n-1} - c_{n-1}\, b_{n-1} f_{n-2}, \tag{56}$$

其中 $f_0 = 1$ 以及 $f_{-1} = 0$ [41]。

对于我们的海森矩阵（式54）这一情形，我们有

$$\det\big(\mathrm{Hess}(S_{HR})\big) = (-1)^{4N+4} + \mathcal{O}(\epsilon) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon). \tag{57}$$

现在来讨论海森矩阵的惯性指数。三对角矩阵的特征值所对应的特征多项式本身也是一个三对角矩阵。再次利用连续式，稍加思考便可发现，特征多项式始终是特征值 λ^2 的多项式。因此，所有特征值都会成对出现，且符号相反，惯性指数为 0，

$$\mathrm{sgn}\big(\mathrm{Hess}(S_{HR})\big) = 0. \tag{58}$$

由于 $\lambda_{-,\,0} = x_{-,\,0} = 0$ 在 S_{HR} 的临界点处，式39 中初始高斯波包遗留的指数项可以放心地取为 1，与 $\hbar$ 和 σ_x均无关，在极限 $\hbar \to 0$下成立。最后，在作用量的临界点处，可以看出 $S_{HR} = 0$，因此驻相法求值结束时不会产生整体相位。因此，我们自洽地得到，在极限 $\hbar \to 0$ 且 $N \to \infty$ 时，结果恰好为

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = x_{cl}(t_f), \tag{59}$$

其中 $x_{cl}(t)$ 是给定哈密顿量 H 并满足初始条件 $x(t_i) = x_0$ 和 $p(t_i) = p_0$时，哈密顿方程的经典解。注意，在式 59 中，测度分母里的所有 $2\pi\hbar$因子都恰好与驻相法式 中，对 S_{HR} 的临界点附近的高斯涨落进行积分所产生的 $2\pi\hbar$ 因子相消。驻相法见式37。

B. 连续情形

我们可以通过多种方式来考虑离散相空间路径积分的连续统推广。最务实的做法是直接考虑离散哈密顿方程式 $\epsilon \to 0$(用格点量子场论的术语来说，即“连续极限外推”)的连续极限，见式 52。我们也可以再往前追溯一步，考虑完整的离散经典施温格-凯尔迪什运动方程组的连续极限外推，见式 45。不过，我们希望将其与经典力学中通常的作用量连续变分处理联系起来 [9]。因此，我们希望考虑离散相空间路径积分的连续极限。同样，我们面临几种选择。式 39 最简单的连续极限外推是

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = \int \frac{d\lambda_+}{2\pi\hbar} \frac{d\lambda_-}{2\pi\hbar} e^{-\frac{\sigma_x^2 \lambda_-^2}{2\hbar^2}} \int \mathcal{D}[x_\pm(t), p_\pm(t)] e^{-\frac{x_-^2(t_i)}{8\sigma_x^2}} e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{S}_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t), \lambda_\pm]} x_+(t_f), \tag{60}$$

其中

$$\begin{aligned}
&\tilde{S}_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t), \lambda_\pm] \equiv \\
&\quad \lambda_-\big(x_+(t_i) - x_0\big) - \lambda_+ x_-(t_f) + p_0 x_-(t_i) \\
&\quad + \int_{t_i}^{t_f} dt \Big[p_+(t) \frac{d}{dt}\big[x_-(t)\big] + p_-(t) \frac{d}{dt}\big[x_+(t)\big] \\
&\qquad + H\big(p_+(t) - \tfrac{1}{2}p_-(t), x_+(t) - \tfrac{1}{2}x_-(t)\big) - H\big(p_+(t) + \tfrac{1}{2}p_-(t), x_+(t) + \tfrac{1}{2}x_-(t)\big) \Big].
\end{aligned} \tag{61}$$

注意到问题的泛函表述中已经存在一个微妙之处：有一个形式上无限大的常数 $(2\pi\hbar)^{-\infty}$ 隐藏在 $\mathcal{D}[p_\pm(t)]$ 泛函积分测度中。我们将在讨论驻相法在连续情形中的应用时，再回到这个微妙之处。还要注意，我们已将式40 中的离散时间导数替换为式61中的连续时间导数。

尽管前述关于形式上无穷大的常数 $(2\pi\hbar)^{-\infty}$这一微妙之处会困扰任何泛函路径积分表述，但式 61 仍不尽如人意。变量的配对并不均衡：对正则共轭的 $p_\pm$ 和 $x_\pm$ 函数进行泛函积分后，还剩下两个离散的拉格朗日乘子。我们可以从泛函积分中抽出两个关于 $dx_+(t_i)$ 和 $dx_-(t_f)$ 的普通积分，从而得到无量纲的 $\int \frac{d\lambda_+}{2\pi\hbar} \frac{d\lambda_-}{2\pi\hbar} dx_+(t_i) dx_-(t_f)$。然而，我们将看到，只有“初始”条件 $x_-(t_f) = 0$ 才能保证物理极限 $x_-(t) =$

——

$p_-(t) = 0$；抽出 $\int dx_-(t_f)$ 后，泛函路径积分中关于 $x_-(t)$ 的“初始”条件通常不再为零。此外，普通积分与泛函积分混合使用并不自然。

为了使相空间路径积分的表述更加自然，我们注意到，在极限 $\epsilon \to 0$ 方程 45c 和 45f 告诉我们，拉格朗日乘子 $\lambda_\pm$ 恰好就是时间端点处的动量值。

$$\begin{aligned} \lambda_{+,N} &= p_+(t_f) \\ \lambda_{-,0} &= p_-(t_i). \end{aligned} \tag{62}$$

因此，将离散相空间路径积分连续极限外推为泛函相空间路径积分，一种自然得多的方式是：

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = \int \mathcal{D}[x_\pm(t), p_\pm(t)] e^{-\frac{\sigma_x^2 p_-(t_i)^2}{2\hbar^2}} e^{-\frac{x_-^2(t_i)}{8\sigma_x^2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t)]} x_+(t_f), \tag{63}$$

其中

$$\begin{aligned} & S_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t)] \\ & \quad \equiv p_-(t_i)\big(x_+(t_i) - x_0\big) - p_+(t_f) x_-(t_f) + p_0\, x_-(t_i) \\ & \qquad + \int_{t_i}^{t_f} dt \Big[p_+(t) \frac{d}{dt}\big[x_-(t)\big] + p_-(t) \frac{d}{dt}\big[x_+(t)\big] \\ & \qquad + H\big(p_+(t) - \tfrac{1}{2} p_-(t), x_+(t) - \tfrac{1}{2} x_-(t)\big) - H\big(p_+(t) + \tfrac{1}{2} p_-(t), x_+(t) + \tfrac{1}{2} x_-(t)\big) \Big]. \end{aligned} \tag{64}$$

可以利用狄拉克δ函数将式 64中的时间端点贡献吸收到时间积分中：

$$\begin{aligned} & S_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t)] \\ & \quad = \int_{t_i}^{t_f} dt \Big\{ \big[p_-(t)\big(x_+(t) - x_0\big) + p_0\, x_-(t)\big] \delta(t - t_i) - p_+(t) x_-(t) \delta(t - t_f) \\ & \qquad + p_+(t) \frac{d}{dt}\big[x_-(t)\big] + p_-(t) \frac{d}{dt}\big[x_+(t)\big] \\ & \qquad + H\big(p_+(t) - \tfrac{1}{2} p_-(t), x_+(t) - \tfrac{1}{2} x_-(t)\big) - H\big(p_+(t) + \tfrac{1}{2} p_-(t), x_+(t) + \tfrac{1}{2} x_-(t)\big) \Big\}. \end{aligned} \tag{65}$$

通过将时间端点吸收到时间积分中，现在可以将这些项视为作用量积分中的源项。尽管式65很有意思，值得注意，但我们会发现处理式64更为方便。

为了趋近 $\hbar \to 0$ 经典极限，我们考虑现在连续的 Schwinger-Keldysh 作用量 $S_{HR}[x_\pm(t)\ p_\pm(t)]$ 式64：

$$
\begin{aligned}
\delta S_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t)] = {} & \delta p_-(t_i)\big(x_+(t_i) - x_0\big) + p_-(t_i)\delta x_+(t_i) \\
& - \delta p_+(t_f)x_-(t_f) - p_+(t_f)\delta x_-(t_f) + p_0\delta x_-(t_i) \\
& + \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\delta p_+ \frac{d}{dt}\big[x_-\big] + p_+\frac{d}{dt}\big[\delta x_-\big] + \delta p_-\frac{d}{dt}\big[x_+\big] + p_-\frac{d}{dt}\big[\delta x_+\big]\right. \\
& \quad + \left.\frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_-\big(\delta p_+ - \frac{1}{2}\delta p_-\big) + \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_-\big(\delta x_+ - \frac{1}{2}\delta x_-\big)\right. \\
& \quad - \left.\frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_+\big(\delta p_+ + \frac{1}{2}\delta p_-\big) - \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_+\big(\delta x_+ + \frac{1}{2}\delta x_-\big)\right] \\
= {} & \delta p_-(t_i)\big[x_+(t_i) - x_0\big] \\
& + \delta x_-(t_i)\left[p_+(t_i) - p_0\right] \\
& + \int_{t_i}^{t_f} dt\, \delta p_- \left[\frac{d}{dt}\big[x_+\big] - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_+ + \frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_-\right)\right] \\
& - \int_{t_i}^{t_f} dt\, \delta x_- \left[\frac{d}{dt}\big[p_+\big] + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_+ + \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_-\right)\right] \\
& - \delta p_-(t_f)\big[x_-(t_f)\big] \\
& + \delta x_+(t_f)\big[p_-(t_f)\big] \\
& + \int_{t_i}^{t_f} dt\, \delta p_+ \left[\frac{d}{dt}\big[x_-\big] - \left(\frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_+ - \frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_-\right)\right] \\
& - \int_{t_i}^{t_f} dt\, \delta x_+ \left[\frac{d}{dt}\big[p_-\big] + \left(\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_+ - \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_-\right)\right],
\end{aligned}
\tag{66}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_\pm &\equiv \frac{\partial H}{\partial p}\bigg|_{\substack{p(t)=p_+(t)\pm\frac{1}{2}p_-(t), \\ x(t)=x_+(t)\pm\frac{1}{2}x_-(t)}}, \\
\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_\pm &\equiv \frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{\substack{p(t)=p_+(t)\pm\frac{1}{2}p_-(t), \\ x(t)=x_+(t)\pm\frac{1}{2}x_-(t)}}.
\end{aligned}
\tag{67}
$$

注意到，为了得到方程66中的第二个等号，我们进行了分部积分，这就是在考察离散相空间路径积分的作用量变分时所做指标操作的连续形式。需要特别注意的是，我们并未对端点处的任何 $p_\pm$ 或 $x_\pm$ 施加约束；也就是说，我们并未令 $\delta p_\pm(t_i)\ \ \delta p_\pm(t_f)\ \ \delta x_\pm(t_i)$ 或 $\delta x_\pm(t_f)$ 为零。正是相

空间变量在时间端点处的变分贡献，为我们提供了正确的初始条件$p_+(t_i)$ $p_-(t_f)$ $x_+(t_i)$ 和 $x_-(t_f)$，稍后我们将对此作明确说明。

由于这些变分 $\delta x_\pm(t)$ 与 $\delta p_\pm(t)$ 均相互独立且任意，为使式 66 恒等于零，各个方括号内的每一项本身都必须恒等于零。由此我们得到连续的经典施温格-凯尔迪什运动方程及其初始条件，采用 $+/-$ 坐标：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_+(t_i) = x_0, \\ p_+(t_i) = p_0 \end{cases} \tag{68a}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} \dfrac{dx_+}{dt} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial H}{\partial p}\Big|_+ + \dfrac{\partial H}{\partial p}\Big|_- \right), \\ \dfrac{dp_+}{dt} = -\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial H}{\partial x}\Big|_+ + \dfrac{\partial H}{\partial x}\Big|_- \right) \end{cases} \tag{68b}$$

$$\text{“Initial” Conditions} \quad \begin{cases} x_-(t_f) = 0, \\ p_-(t_f) = 0 \end{cases} \tag{68c}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} \dfrac{dx_-}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial p}\Big|_+ - \dfrac{\partial H}{\partial p}\Big|_-, \\ \dfrac{dp_-}{dt} = -\left(\dfrac{\partial H}{\partial x}\Big|_+ - \dfrac{\partial H}{\partial x}\Big|_- \right). \end{cases} \tag{68d}$$

请注意，与离散情形相比，我们并未在负坐标的运动方程中意外漏掉一个符号；离散情形中符号发生翻转，是因为那里通过用较晚的分时坐标来求解较早的分时坐标，使反向时间演化变得显式。而在此处的连续情形中，反向时间演化则由最终时刻的“初始”条件（式 68c）隐含地体现。

与离散情形类似，我们可以精确求解 $-$坐标的运动方程（式 68d ），并服从 $t = t_f$ 处的“初始”条件（式 68c）。此时，解甚至更容易看出： $x_-(t) = 0$ 与 $p_-(t) = 0$ 对所有时刻 $t \in [t_i, t_f]$ 显然都是一个解；由常微分方程初值问题解的唯一性（皮卡-林德勒夫定理 [2], 所保证）可知，该解是唯一解。

同样，与离散情形类似，我们有 $p_-(t_i) = 0$，它由驻相法导出的运动方程得出，因此我们再次可以放心地取 $\hbar \to 0$

在 $\exp[-\sigma_x^2 p_-(t_i)^2/2\hbar^2]$ 项中；由于 $x_-(t_i) = 0$ 同样如此，我们也可以放心地在剩余的 $\exp[-x_-^2(t_i)/8\sigma_x^2]$ 项中取$\sigma_x \to 0$ 。

若 $x_-(t) = 0$ 与 $p_-(t) = 0$ 对所有时刻成立，则式68a 与68b 便成为通常的哈密顿方程，作为一个初值问题：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x(t_i) = x_0, \\ p(t_i) = p_0 \end{cases} \tag{69a}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} \left.\dfrac{dx}{dt}\right|_t = \left.\dfrac{\partial H}{\partial p}\right|_{\substack{p=p(t) \\ x=x(t)}}, \\ \left.\dfrac{dp}{dt}\right|_t = -\left.\dfrac{\partial H}{\partial x}\right|_{\substack{p=p(t) \\ x=x(t)}}. \end{cases} \tag{69b}$$

人们希望完成对经典 $\hbar \to 0$ 极限下连续相空间路径积分的讨论，即完整计算驻相法的结果，包括求取作用量的海森矩阵的行列式。或许并不令人意外，泛函行列式的求值要比计算有限维矩阵的行列式微妙得多。尽管我们理想情况下希望通过对式63应用驻相法来严格计算该泛函行列式，但事实证明一般无法做到。相反，泛函行列式通常仅作为比值 [42]才是良定义的。为了在连续相空间路径积分情形下使其良定义，我们需要明确考虑

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = \frac{\langle \psi(t_i)|\hat{U}_{\hat{H}}^\dagger(t_f,t_i)\,\hat{x}\,\hat{U}_{\hat{H}}(t_f,t_i)|\psi(t_i)\rangle}{\langle \psi(t_i)|\hat{U}_{\hat{H}}^\dagger(t_f,t_i)\,\hat{U}_{\hat{H}}(t_f,t_i)|\psi(t_i)\rangle}. \tag{70}$$

对于我们所考虑的归一化初态和幺正时间演化，式70中的分母显然为1。然而，引入该分母使我们能够在 $\hbar \to 0$ 极限下从连续相空间路径积分严格计算泛函导数。（有时人们说，泛函积分测度是由式70 的分母为1这一要求所定义 [43, 44]。）特别地，

在 $\hbar \to 0$ 极限下，我们有，由于 $S_{HR}[x_{\pm,cl}(t)\, p_{\pm,\ cl}(t)] = 0$ 以及$x_{-,\ cl}(t) = p_{-,\ cl}(t)\ = 0$,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle (t_f) &= \frac{\int \mathcal{D}[x_\pm(t), p_\pm(t)] e^{-\frac{\sigma_x^2 p_-(t_i)^2}{2\hbar^2}} e^{-\frac{x_-^2(t_i)}{8\sigma_x^2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t)]} x_+(t_f)}{\int \mathcal{D}[x_\pm(t), p_\pm(t)] e^{-\frac{\sigma_x^2 p_-(t_i)^2}{2\hbar^2}} e^{-\frac{x_-^2(t_i)}{8\sigma_x^2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_\pm(t), p_\pm(t)]}} \\
&= \frac{x_{cl}(t) \left[\int \mathcal{D}[\eta_\pm(t), \pi_\pm(t)] e^{i\frac{1}{2}\eta^T \left(\mathrm{Hess}(S)\right)\eta} \right]}{\left[\int \mathcal{D}[\eta_\pm(t), \pi_\pm(t)] e^{i\frac{1}{2}\eta^T \left(\mathrm{Hess}(S)\right)\eta} \right]} \\
&= x_{cl}(t_f),
\end{aligned} \tag{71}$$

其中 $x_{cl}\ (t_f)$ 满足方程 69a 和 69b。虽然分子和分母中剩余的关于涨落的相空间路径积分显然可以相互抵消，但为完整起见，我们列出定义剩余的关于涨落的相空间路径积分的各个量:

$$\begin{aligned}
x_\pm(t) &\equiv x_{\pm,cl}(t) + \sqrt{\hbar}\,\eta_\pm(t) \\
p_\pm(t) &\equiv p_{\pm,cl}(t) + \sqrt{\hbar}\,\pi_\pm(t), \\
\eta &\equiv \begin{pmatrix} \eta_+(t) \\ \pi_+(t) \\ \eta_-(t) \\ \pi_-(t) \end{pmatrix}, \\
\mathrm{Hess}(S) &= \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}, \\
B &\equiv \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} & \delta(t-t_f) - \partial_t - \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \\ -\delta(t-t_f) + \partial_t - \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial x} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \end{pmatrix} \\
B^T &\equiv \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} & -\delta(t-t_i) - \partial_t - \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \\ \delta(t-t_i) + \partial_t - \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial x} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{72}$$

注意，我们通过以下方式定义转置 B^T

$$\begin{aligned}
\int_{t_i}^{t_f} dt\, \eta_+^T B^T \eta_- &\equiv \int_{t_i}^{t_f} dt\, \eta_-^T B \eta_+, \\
\eta_\pm^T &\equiv (\eta_\pm \ \ \pi_\pm).
\end{aligned} \tag{73}$$

IV. 从 Schwinger-Keldysh 推导牛顿第二定律

A. 离散情形

现在，让我们通过对动量积分，将相空间路径积分转化为位置空间路径积分。按照惯例，我们将使用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{\pm i\, a\, p^2 \mp i\, b\, p} = e^{\pm i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\mp i\frac{b^2}{4a}}; \tag{74}$$

因此，我们必须先对 $1/2$ 坐标中的动量积分，然后再转换为 $+/-$ 坐标。从式33出发，我们得到如下路径积分

$$\langle \hat{x} \rangle (t_f) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^N \prod_{n=0}^{N} \int dx_{+,n} dx_{-,n} x_{+,N} \int \frac{d\lambda_+}{2\pi\hbar} \frac{d\lambda_-}{2\pi\hbar} \\ e^{-\frac{x_{-,0}^2}{8\sigma_x^2}} e^{-\frac{\sigma_x^2 \lambda_-^2}{2\hbar^2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_{\pm,k}, \lambda_\pm]\right\}, \tag{75}$$

其中

$$\begin{aligned} S_{HR}[x_{\pm,k}, \lambda_\pm] \equiv\, & p_0 x_{-,0} - \lambda_+ x_{-,N} + \lambda_- \left(x_{+,0} - x_0\right) \\ & + \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{\epsilon^2} \left(x_{+,k+1} - x_{+,k}\right) \left(x_{-,k+1} - x_{-,k}\right) \right. \\ & \left. - V\left(x_{+,k} + \frac{1}{2} x_{-,k}\right) + V\left(x_{+,k} - \frac{1}{2} x_{-,k}\right) \right\}. \end{aligned} \tag{76}$$

现在我们可以取 $\hbar \to 0$ 方程75 的极限，再次利用驻相法。因此，我们必须求出作用量 $\delta S_{HR}[x_{\pm,k}, \lambda_\pm]$的临界点。这样做可得

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_{+,0} = x_0 \\ x_{+,1} = x_{+,0} + \epsilon \dfrac{p_0}{m} - \dfrac{\epsilon^2}{2m} \left(\left.\dfrac{\partial V}{\partial x}\right|_{+,0} + \left.\dfrac{\partial V}{\partial x}\right|_{-,0} \right) \end{cases} \tag{77a}$$

$$\text{EOM} \quad \left\{ x_{+,k+1} = 2x_{+,k} - x_{+,k-1} - \frac{\epsilon^2}{2m} \left(\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{+,k} + \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{-,k} \right), \right.$$

$$k = 1, \ldots, N-1 \tag{77b}$$

$$\text{Lag. Mult.} \qquad \lambda_+ = m \frac{x_{+,N} - x_{+,N-1}}{\epsilon} \tag{77c}$$

$$\text{“Initial” Conditions} \quad \begin{cases} x_{-,N} = 0 \\ x_{-,N-1} = x_{-,N} \end{cases} \tag{77d}$$

$$\text{EOM} \quad \left\{ x_{-,k-1} = 2x_{-,k} - x_{-,k+1} - \frac{\epsilon^2}{2m} \left(\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{+,k} - \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{-,k} \right), \right.$$

$$k = 1, \ldots, N-1 \tag{77e}$$

$$\text{拉格朗日乘子} \qquad \lambda_- = m \frac{x_{-,1} - x_{-,0}}{\epsilon} + \epsilon \left(\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{+,0} - \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{-,0} \right). \tag{77f}$$

与之前一样，可以立即看出，由 $\hbar \to 0$ 极限驱动的负坐标有一个必要且唯一的解，即 $x_{-,k} = 0$ 对所有 k 均成立；同样，该解从最终时间片向后传播。随后，正坐标的初始条件和运动方程便归结为牛顿第二定律的离散版本，构成一个初值问题：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_{+,0} = x_0 \\ x_{+,1} = x_{+,0} + \epsilon \dfrac{p_0}{m} - \dfrac{\epsilon^2}{m} \left.\dfrac{\partial V}{\partial x}\right|_0 \end{cases} \tag{78a}$$

$$\text{EOM} \qquad x_{+,k+1} = 2x_{+,k} - x_{+,k-1} - \frac{\epsilon^2}{m} \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{+,k}, \qquad k = 1, \ldots, N-1 \tag{78b}$$

$$\text{拉格朗日乘子} \qquad \lambda_+ = m \frac{x_{+,N} - x_{+,N-1}}{\epsilon}. \tag{78c}$$

方程 78b 和78c中一个引人入胜的方面，是离散二阶导数在最终时间片中依然存在。人们或许会以为，在最终时间片中，动力学会像连续方程离散化时常见的那样，降低一个阶

的运动。我们在这里看到，拉格朗日乘子 λ_+ 会按需调整，以保持完全正确的离散二阶导数。（方程 77d 和 77f中的负坐标也有类似情况。）

遗憾的是，无法像离散相空间的情形那样将海森矩阵化为三对角形式，因为除 λ_- 和 $x_{+,\,N}$ [45] 之外，坐标之间还存在一个环。可以证明，对于式 76，当混合偏导数按 λ_+ 、 、 $x_{+、N}$、……、 $x_{+、0}$、 $x_{-、N}$、……、 $x_{-、0}$、 λ_- 的顺序求值时，其海森矩阵呈块对角形式

$$\mathrm{Hess}(S_{HR}) = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}, \tag{79}$$

其中

$$B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & & & & \\ \frac{m}{\epsilon} & -\frac{m}{\epsilon} & 0 & & & \\ -\frac{m}{\epsilon} & \frac{2m}{\epsilon} & -\frac{m}{\epsilon} & 0 & & \\ 0 & -\frac{m}{\epsilon} & \frac{2m}{\epsilon} & -\frac{m}{\epsilon} & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ & 0 & -\frac{m}{\epsilon} & \frac{2m}{\epsilon} & -\frac{m}{\epsilon} & 0 \\ & & 0 & -\frac{m}{\epsilon} & \frac{m}{\epsilon} & 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon), \tag{80}$$

其余所有元素均为 0。海森矩阵的这种块结构意味着，对于 ϵ 的领头阶，

$$|\det[\mathrm{Hess}(S_{HR})]| = \left(\frac{m}{\epsilon}\right)^{2N}. \tag{81}$$

and

$$\mathrm{sgn}[\mathrm{Hess}(S_{HR})] = 0. \tag{82}$$

因此，驻相法式 37 在 $\hbar \to 0$ 和 $N \to \infty$ 极限下给出

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle (t_f) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^N \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \left[\left(\frac{m}{\epsilon}\right)^{2N}\right]^{-1/2} (2\pi\hbar)^{N+2}\, x_{cl}(t) \\ &= x_{cl}(t_f), \end{aligned} \tag{83}$$

其中 $x_{cl}(t)$根据牛顿第二定律求解运动方程，并满足初始条件 $x(t_i) = x_0$ 和 $\frac{dx}{dt}\big|_{t=t_i} = v_0$，$v_0 \equiv p_0/m$。

B. 连续情形

现在我们想取 $N \to \infty$ 极限，考察粒子路径可视为连续的情形。对于如何取此极限，我们同样有许多选择，例如，可以在初始条件和运动方程层面取极限，也可以在更早的处理步骤中取极限。为了以最自然的方式处理这一问题，我们将从离散情形下的位置空间路径积分（式）75 开始，其作用量由式76给出。我们首先对 λ_+ 自由度进行积分，恢复最终时间片处原来的狄拉克δ函数 $\delta(x_{-,\,N})$。随后，我们可以通过对 $x_{-,\,N}$ 积分并将被积函数中$x_{-,\,N}$ 的所有实例设为 0，来消去这个狄拉克δ函数。对于$x_{+,\,0}$ 坐标，我们也希望执行类似的步骤。首先，我们对 λ_-自由度进行积分，得到

$$\langle \hat{x} \rangle (t_f) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^N \int dx_{+,N} x_{+,N} \prod_{n=0}^{N-1} \int dx_{+,n} dx_{-,n} \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{1/2} e^{-\frac{(x_{+,0}-x_0)^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{x_{-,0}^2}{8\sigma_x^2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_{\pm,k}]\right\}, \quad (84)$$

其中

$$S_{HR}[x_{\pm,k}] \equiv p_0 x_{-,0} + \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{\epsilon^2} \left(x_{+,k+1} - x_{+,k}\right)\left(x_{-,k+1} - x_{-,k}\right) - V\left(x_{+,k} + \frac{1}{2} x_{-,k}\right) + V\left(x_{+,k} - \frac{1}{2} x_{-,k}\right) \right\}. \quad (85)$$

式 84 中相位的预因子 $(2\pi\sigma_x^2)^{-1/2}$exp$[-(x_{+,0} - x_0)^2/(2\sigma_x^2)]$ 在极限 $\sigma_x \to 0$下是一个狄拉克δ函数。然而，正如第 III A 节所述，只有在取了 $\hbar \to 0$之后，我们才能取 $\sigma_x \to 0$。为了继续推导，我们需要对关于 x_+,0 的积分进行渐近分析，并追踪 σ_x中的高阶项。我们可以直接应用拉普拉斯方法 [46], 来完成这样的分析：将势能项展开到二阶，并显式地对x_+, 0中的高斯函数积分。随后，可以将结果按 σ_x逐阶展开。结果表明， σ_x 中的最低阶修正项与 ϵ成正比，

$$\epsilon\sigma_x \frac{\partial V}{\partial x} \quad \text{and} \quad \epsilon\sigma_x^2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2},$$

因此，对于任意良态势，这些修正项在 $N \to \infty$ 极限下均为零；甚至不必在 $\hbar \to 0$ 极限之后再考虑 $\sigma_x \to 0$ 极限。结果是

该预因子实际上等价于一个以 x_0为中心的狄拉克δ函数。因此我们有

$$\langle \hat{x} \rangle (t_f) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^N \int dx_{+,N} dx_{-,0} x_{+,N} e^{-\frac{x_{-,0}^2}{8\sigma_x^2}} \prod_{n=1}^{N-1} \int dx_{+,n} dx_{-,n} e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_{\pm,k}]}, \tag{86}$$

其中

$$S_{HR}[x_{\pm,k}] \equiv p_0 x_{-,0} + \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{\epsilon^2} \left(x_{+,k+1} - x_{+,k}\right)\left(x_{-,k+1} - x_{-,k}\right) \right.$$
$$\left. - V\left(x_{+,k} + \frac{1}{2} x_{-,k}\right) + V\left(x_{+,k} - \frac{1}{2} x_{-,k}\right) \right\}, \tag{87}$$

其中 $x_{+,\ 0} = x_0$ 和 $x_{-,\ N} = 0$。

现在我们取形式上的 $N \to \infty$ 极限，得到连续位置空间路径积分

$$\langle \hat{x} \rangle (t_f) = \int \mathcal{D}[x_\pm(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_\pm(t)]}, \tag{88}$$

其中

$$S_{HR}[x_\pm(t)] = p_0 x_-(t_i)$$
$$+ \int_{t_i}^{t_f} dt\, m \frac{d}{dt}\big[x_+(t)\big] \frac{d}{dt}\big[x_-(t)\big] - V\Big(x_+(t) + \frac{1}{2} x_-(t)\Big) + V\Big(x_+(t) - \frac{1}{2} x_-(t)\Big). \tag{89}$$

由式 86 可知，式 88 中的测度不包括对 $x_+(t_i)$ 或 $x_-(t_f)$ 的积分；这两个值固定为 $x_+(t_i) = x_0$ 和 $x_-(t_f) = 0$。因此，在运用驻相法并考虑式 89 的作用量变分时，我们必须记住令 $\delta x_+(t_i) = \delta x_-(t_f) = 0$。值得注意的是，其他变分都不设为零；特别是，$\delta x_-(t_i) \neq 0$。在第 VI 节讨论与 Galley [19]的联系时，我们会再谈到这一点。

式中作用量的变分89 于是得到

$$\begin{aligned}
\delta S_{HR}[x_\pm(t)] &= p_0\delta x_-(t_i) + \int_{t_i}^{t_f} dt\, m\frac{d}{dt}\left[x_-(t)\right]\frac{d}{dt}\left[\delta x_+(t)\right] + m\frac{d}{dt}\left[x_+(t)\right]\frac{d}{dt}\left[\delta x_-(t)\right] \\
&\quad - \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_+ \left(\delta x_+(t) + \frac{1}{2}\delta x_-(t)\right) + \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_- \left(\delta x_+(t) - \frac{1}{2}\delta x_-(t)\right) \\
&= \delta x_-(t_i)\left[p_0 - m\left.\frac{d}{dt}x_+\right|_{t_i}\right] \\
&\quad + \delta x_+(t_f)\left[m\left.\frac{d}{dt}x_-\right|_{t_f}\right] \\
&\quad + \int_{t_i}^{t_f} dt\,\delta x_-(t)\left[-m\frac{d^2}{dt^2}x_+ - \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_+ + \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_-\right)\right] \\
&\quad + \delta x_+(t)\left[-m\frac{d^2}{dt^2}x_- + \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_+ - \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_-\right],
\end{aligned} \tag{90}$$

其中

$$\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_\pm \equiv \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x(t)=x_+(t)\pm\frac{1}{2}x_-(t)} \tag{91}$$

并且，在分部积分之后，我们利用了 $\delta x_+(t_i) = \delta x_-(t_f) = 0$。

在 $x_+(t_i) = x_0$ 和 $x_-(t_f) = 0$ 已经固定的情况下，应用驻相法令作用量变分为零，得到：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_+(t_i) = x_0 \\ \left.\dfrac{dx_+}{dt}\right|_{t_i} = \dfrac{p_0}{m} \end{cases} \tag{92a}$$

$$\text{EOM} \quad m\left.\frac{d^2x_+}{dt^2}\right|_t = -\frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_+ + \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_-\right) \tag{92b}$$

$$\text{“Initial” Conditions} \quad \begin{cases} x_-(t_f) = 0 \\ \left.\dfrac{dx_-}{dt}\right|_{t_i} = 0 \end{cases} \tag{92c}$$

$$\text{EOM} \quad m\left.\frac{d^2x_-}{dt^2}\right|_t = -\left(\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_+ - \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_-\right). \tag{92d}$$

显然可以看出，$x_-(t) = 0$ 满足运动方程的负号方程（式92d），并满足初始条件（式92c）。根据皮卡德-林德洛夫¨定理 [2], ，此解是唯一解。

为清晰起见，并为了更直接地联系到我们熟悉的经典力学结果，我们省略加号下标，得到通常的牛顿第二定律初值问题：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x(t_i) = x_0 \\ \left.\dfrac{dx}{dt}\right|_{t_i} = \dfrac{p_0}{m} \end{cases} \tag{93a}$$

$$\text{EOM} \quad m \left.\frac{d^2x}{dt^2}\right|_t = -\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x(t)}. \tag{93b}$$

接下来，我们自然希望利用驻相法充分考察 $\langle\hat{x}\rangle(t_f)$。由于作用量变分使 $x_-(t_i)$ 为零，因此我们可以放心地取$\sigma_x \to 0$。我们可以考察作用量的海森矩阵；但正如相空间路径积分的情形所示，分子和分母中作用量二阶变分的贡献将恰好抵消，从而在 $\hbar \to 0$ 极限下得到预期结果

$$\langle\hat{x}\rangle(t_f) = x_{cl}(t_f), \tag{94}$$

其中， $x_{cl}(t)$ 满足牛顿第二定律，并服从初始条件 $x_{cl}(t_i) = x_0$ 和$dx_{cl}/dt|_{t_i} = p_0/m$。

V. Schwinger-Keldysh 路径积分中的欧拉-拉格朗日方程

A. 连续情形：位置空间路径积分

在第 IVA节中可以看到，直接而轻易地将仅依赖离散位置的离散坐标空间路径积分作用量 x_k 与涉及一个同时依赖于 x_k 及其时间导数的拉格朗日量的离散路径积分作用量联系起来，是不可能的。我们将在第 VB 节中展示如何通过引入额外的拉格朗日乘子，在离散情形下建立这种联系。

然而，当我们取连续极限时，有一种直接且富有洞见的方式，可以将第五节 IVB 中的连续位置空间路径积分作用量与用拉格朗日量表示的作用量联系起来。显然，对于我们原来的经典拉格朗日量 $\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$，连续位置空间路径积分公式88及作用量公式89可以写为

$$\langle\hat{x}\rangle(t_f) = \int \mathcal{D}[x_\pm(t)] e^{-\frac{x_-^2(t_i)}{8\sigma_x^2}} e^{\frac{i}{\hbar}S_{HR}\left[x_\pm(t), \frac{d}{dt}\left[x_\pm(t)\right]\right]}, \tag{95}$$

其中

$$S_{HR}\left[x_{\pm}(t),\frac{d}{dt}\left[x_{\pm}(t)\right]\right]\equiv p_0x_-(t_i)+\int_{t_i}^{t_f}dt\,\left\{L\left(x_+(t)+\frac{1}{2}x_-(t),\frac{d}{dt}\left[x_+(t)+\frac{1}{2}x_-(t)\right]\right)\right.$$
$$\left.-L\left(x_+(t)-\frac{1}{2}x_-(t),\frac{d}{dt}\left[x_+(t)+\frac{1}{2}x_-(t)\right]\right)\right\}. \quad (96)$$

值得特别注意的是，位置空间路径积分公式 95 是对路径 $x_{\pm}(t)$ 的积分：位置空间路径积分只对 $x_{\pm}(t)$、$\delta x_{\pm}(t)$ 的变分进行积分；由于泛函积分测度中没有 $\dot{x}_{\pm}(t)$，因此 $\dot{x}_{\pm}(t)$、$\delta\dot{x}_{\pm}(t)$ 不存在变分。我们将在第五节 C 中讨论完整的连续构型空间路径积分，其中 $\dot{x}_{\pm}(t)$ 和 $x_{\pm}(t)$ 都存在变分。与第四节 B 一样，公式 95 中的测度不包括对 $x_+(t_i)$ 或 $x_-(t_f)$ 的积分，因为路径在这两个值处分别固定为 x_0 和 0。

由于 $\dot{x}_{\pm}(t)$ 中不存在变分，我们完全避开了转置规则的问题。（回想一下，转置规则比较的是 $\delta\dot{x}(t)$ 和 $\frac{d}{dt}[\delta x(t)]$。）一个小小的技术难点是，驻相法所诱导的作用量变分现在涉及泛函链式法则。一般而言，我们有

$$L\left(x(t)+\delta x(t),\frac{d}{dt}\left[x(t)+\delta x(t)\right]\right)$$
$$=L\left(x(t),\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)+\frac{\partial L}{\partial x}\delta x(t)+\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\frac{d}{dt}\left[\delta x(t)\right]+\mathcal{O}\left(\delta x^2(t)\right). \quad (97)$$

方程 97 看起来比通常涉及 $\dot{x}(t)$ 的表达式复杂得多；然而，尽管记号繁复，方程 97完全明确，而且形式上可以直接分部积分；我们在考虑作用量变分时[1]。

考虑作用量变分并令其等于零，我们得到以下结果

[1]请注意，在许多论述中，例如 [10]，δ 被视为一个算符，它可以穿过 d/dt，也可以不穿过它。如第 II 节所述，我们将 δ 与变量（例如 x）结合使用，以表示偏离极值点 $(\delta x)(t)$ 的单次变分，从而允许改变泛函积分测度；例如，$x_{\pm}(t)=x_{\pm,\,cl}(t)+\delta x_{\pm}(t)$。

方程：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_+(t_i) = x_0 \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{+,i} + \dfrac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{-,i} \right) = p_0 \end{cases} \tag{98a}$$

$$\text{Equation of Motion} \quad \frac{\partial L}{\partial x}\bigg|_{+} + \frac{\partial L}{\partial x}\bigg|_{-} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{+} + \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{-} \right) = 0 \tag{98b}$$

$$\text{“Initial” Conditions} \quad \begin{cases} x_-(t_f) = 0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{+,f} - \dfrac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{-,f} = 0 \end{cases} \tag{98c}$$

$$\text{Equation of Motion} \quad \frac{\partial L}{\partial x}\bigg|_{+} - \frac{\partial L}{\partial x}\bigg|_{-} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{+} - \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{-} \right) = 0, \tag{98d}$$

其中

$$\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{\pm} \equiv \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\bigg|_{x(t)=x_+(t)\pm\frac{1}{2}x_-(t)} \tag{99}$$

Eq. 中的其他结构也同理 98，其中 i (f) 表示函数在初始（最终）时刻 t_i (t_f) 处取值。

从 Eq. 98c 显然可知，在最终时刻，按通常方式有：

$$\begin{aligned} x_-(t_f) &= 0 \\ \frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\bigg|_{t=t_f} &= 0, \end{aligned} \tag{100}$$

并且由运动方程 Eq. 98d 可知：

$$x_-(t) = 0. \tag{101}$$

随后，我们便可以放心地将 $\sigma_x \to 0$ 取到位置空间路径积分被积函数的实部中。为简化记号并更直接地联系经典力学的通常表述，我们省略 $+$，最终得到欧拉-拉格朗日方程：

一个初值问题：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x(t_i) = x_0 \\ \left.\dfrac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\right|_{t=t_i} = p_0 \end{cases} \tag{102a}$$

$$\text{EOM} \quad \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)} = 0. \tag{102b}$$

同样，按照通常的方式，可得

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = x_{cl}(t_f), \tag{103}$$

其中 $x_{cl}(t_f)$ 是满足初始条件方程 102a 的欧拉-拉格朗日方程方程 102b的经典解。

B. 离散情形

为了得到离散欧拉-拉格朗日方程，我们需要将离散差分 $\left(x_{\pm,\, n+1} - x_{\pm,\, n}\right)/\epsilon$ 与我们用来表示粒子路径在离散时刻的时间导数的符号 $\dot{x}_{\pm,\, n+\frac{1}{2}}$ 联系起来。我们首先通过狄拉克δ函数令这些量相等，以建立这种联系。然后，我们将这些狄拉克δ函数写成对拉格朗日乘子的积分，这些乘子的单位为动量。引入这么多拉格朗日乘子后，我们便会得到一种非常自然的构型空间路径积分，其中对 $x_{\pm,\, n}$ 和 $\lambda_{\pm,\, n}$ 的积分数量相等，并且适用于驻相法。（如果我们只保留对 $x_{\pm}(t)$ 和 $\dot{x}_{\pm}(t)$ 的积分，并用狄拉克δ函数将二者联系起来，就无法严格应用驻相法。）

从式 75 和 76出发，我们插入一个非常复杂的 1：

$$
\begin{aligned}
1 = &\prod_{n=1}^{N-1} \int d(\epsilon \dot{x}_{+,n+\frac{1}{2}}) \delta\big(\epsilon \dot{x}_{+,n+\frac{1}{2}} - (x_{+,n+1} - x_{+,n})\big) \\
&\times \int d(\epsilon \dot{x}_{-,n+\frac{1}{2}}) \delta\big(\epsilon \dot{x}_{-,n+\frac{1}{2}} - (x_{-,n+1} - x_{-,n})\big) \\
= &\epsilon^{2N} \prod_{n=1}^{N-1} d\dot{x}_{+,n+\frac{1}{2}} d\dot{x}_{-,n+\frac{1}{2}} \frac{d\lambda_{+,n}}{2\pi\hbar} \frac{d\lambda_{-,n+1}}{2\pi\hbar} \\
&\exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \left[\lambda_{+,k} \left(\frac{x_{-,k+1} - x_{-,k}}{\epsilon} - \dot{x}_{-,k+\frac{1}{2}} \right) + \lambda_{-,k+1} \left(\frac{x_{+,k+1} - x_{+,k}}{\epsilon} - \dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}} \right) \right] \right\}.
\end{aligned}
\tag{104}
$$

请注意， $k \to k+1$ 中迭代指标相对于 λ_+ 和 λ_-有一个微小的偏移。引入这一偏移，是为了将原始的 $\lambda_{-,\,0}$（用于约束初始波包位置）以及$\lambda_{+,\,N}$（用于约束最终时间片上前向路径与后向路径的交汇）纳入一组自然的 $2N$ 总拉格朗日乘子中。我们本可以插入自变量为 $\dot{x}_{+,\,n+\frac{1}{2}} - \frac{x_{+,\,n+1} - x_{+,\,n}}{\epsilon}$ 的δ函数。但这样会导致拉格朗日乘子的单位为动量除以时间，这并不自然。

方程 75 和 76于是变为

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle(t) = \lim_{N\to\infty} \prod_{n=0}^{N} \int dx_{+,n} dx_{-,n} \frac{d\lambda_{+,n}}{2\pi\hbar} \frac{d\lambda_{-,n}}{2\pi\hbar} e^{-\frac{x_{-,0}^2}{8\sigma_x^2}} e^{-\frac{\sigma_x^2 \lambda_{-,0}^2}{2}} x_{+,N} \\
\prod_{\ell=0}^{N-1} \left(\frac{m\epsilon}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} d\dot{x}_{+,\ell+\frac{1}{2}} \left(\frac{m\epsilon}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} d\dot{x}_{-,\ell+\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_{\pm,k}, \dot{x}_{\pm,k+\frac{1}{2}}, \lambda_{\pm,k}]},
\end{aligned}
\tag{105}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
S_{HR}[x_{\pm,k}, \dot{x}_{\pm,k+\frac{1}{2}}, \lambda_{\pm,k}] = &\, p_0 x_{-,0} - \lambda_{+,N} x_{-,N} + \lambda_{-,0}(x_{+,0} - x_0) \\
&+ \epsilon \sum_{k=0}^{N-1} \Big\{ L[x_{+,k} + \frac{1}{2} x_{-,k}, \dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \dot{x}_{-,k+\frac{1}{2}}] \\
&- L[x_{+,k} - \frac{1}{2} x_{-,k}, \dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \dot{x}_{-,k+\frac{1}{2}}] \\
&+ \lambda_{+,k} \left(\frac{x_{-,k+1} - x_{-,k}}{\epsilon} - \dot{x}_{-,k+\frac{1}{2}} \right) \\
&+ \lambda_{-,k+1} \left(\frac{x_{+,k+1} - x_{+,k}}{\epsilon} - \dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}} \right) \Big\}.
\end{aligned}
\tag{106}
$$

注意到，将数量相等的拉格朗日乘子（每个的单位都是动量）与坐标相匹配后，方程 105中的量纲经检查是正确的。我们

现在我们得到了一个看起来相当奇怪的路径积分：其中有三组坐标，$x_{\pm,\,n}$、 $\lambda_{\pm,\,n}$以及$\dot{x}_{\pm,\,n+\frac{1}{2}}$，而不是像过去那样将坐标两两配对。不过请记住，我们积分的量并不是算符（我们积分的是数值），因此并不要求这些量必须以正则共轭对的形式配对。

我们感兴趣的是经典 $\hbar \to 0$ 极限，即路径积分式105 和106。式105 中路径积分的测度完全清楚地表明，作用量将相对于哪些变量进行变分：$x_{\pm,\,k}$， $\dot{x}_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$， $\lambda_{\pm,\,k}$。特别地，与离散速度相关的符号$\dot{x}_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$被允许独立于坐标$x_{\pm,\,k}$进行变分，而这两个量之间的联系则通过拉格朗日乘子$\lambda_{\pm,\,k}$ 的变分来强制实现（除了对 $\lambda_{-,\,0}$的变分之外，该变分将固定粒子的初始位置；以及对$\lambda_{+,\,N}$的变分，该变分将迫使正向路径和反向路径在最终时间片相遇）。

对式106的作用量相对于$x_{\pm,\,k}$， $\dot{x}_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$以及$\lambda_{\pm,\,k}$进行变分，会得到现在常见的情形：负坐标的“初始条件”和运动方程由$x_{-,\,k} = \dot{x}_{-,\,k+\frac{1}{2}} = \lambda_{-,\,k} = 0$唯一地解出。正坐标的初始条件和运动方程则变为：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x_{+,0} = x_0 \\ \lambda_{+,0} = p_0 + \epsilon \left.\dfrac{\partial L}{\partial x}\right|_0 \\ \left.\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_0 = \lambda_{+,0} \end{cases} \tag{107a}$$

$$\text{第一次演化}\ x_{+,1} = x_{+,0} + \epsilon \dot{x}_{+,1\,2} \tag{107b}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} \lambda_{+,k} = \lambda_{+,k-1} + \epsilon \left.\dfrac{\partial L}{\partial x}\right|_k, & k = 1, \ldots, N-1 \\ \left.\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_k = \lambda_{+,k}, & k = 1, \ldots, N-1 \\ x_{+,k+1} = x_{+,k} + \epsilon \dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}}, & k = 1, \ldots, N-1 \end{cases} \tag{107c}$$

$$\text{Lag. Mult.} \quad \lambda_{+,N} = \lambda_{+,N-1}, \tag{107d}$$

其中

$$\left.\frac{\partial L}{\partial x}\right|_k \equiv \left.\frac{\partial L}{\partial x}\right|_{\substack{x=x_{+,k}\\ \dot{x}=\dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}}}}$$
$$\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_k \equiv \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{\substack{x=x_{+,k}\\ \dot{x}=\dot{x}_{+,k+\frac{1}{2}}}} . \tag{108}$$

上述内容的解释如下。方程107a 的第一行设定了$x_{+,\,k}$的初始条件。方程107a接下来的两行构成一个联立方程组，用于求解$\dot{x}_{+,\,k+\frac{1}{2}}$和$\lambda_{+,\,k}$的初始条件。方程107b 给出了位置的第一个时间步演化。接下来的方程107c 描述自由度随时间的演化，最后一个时间步演化给出最终位置$x_{+,\,N}$。最后一个方程107d 吸收了剩余的（不可测量的）拉格朗日乘子演化。

与之前一样，我们希望考察海森矩阵，以确保能够恰当地应用驻相法，并进行一项有实质意义的一致性检验，从而发现量子期望值在 $\hbar \to 0$ 极限下由经典路径给出。

经过一番推导可以证明，海森矩阵在 ϵ 的领头阶是二分的（因此惯性指数为 0），其中

$$\det\left(\mathrm{Hess}(S_{HR})\right) = \epsilon^{2N} \prod_{i=0}^{N-1} \left(\left.\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_{i+\frac{1}{2}}}\right|_i \right)^2 + \mathcal{O}(\epsilon^{2N-1}). \tag{109}$$

对于我们的具体计算，其中

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2, \tag{110}$$

因此，在经典极限下，我们有

$$\det\left(\mathrm{Hess}(S_{HR})\right) = (m\epsilon)^{2N} + \mathcal{O}(\epsilon^{2N-1}). \tag{111}$$

于是可得

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle(t) &= \left(\frac{m\epsilon}{2\pi\hbar}\right)^N \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{2N+2} \left[(m\epsilon)^{2N}\right]^{-1/2} (2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}[2N+2+2n+2+2N]} x_{cl}(t) \\ &= x_{cl}(t),\end{aligned} \tag{112}$$

其中，$x_{cl}(t)$ 满足通常的欧拉-拉格朗日运动方程，并服从初始值$x_{cl}(t_i) = x_0$ 和 $dx_{cl}/dt|_{t_i} = p_0/m$。

C. 连续情形：构型空间路径积分

方程105和106 的连续统推广完全如预期：

$$\langle\hat{x}\rangle(t_f) = \int \mathcal{D}[x_\pm(t), \dot{x}_\pm(t), \lambda_\pm(t)] e^{-\frac{x_-^2(t_i)}{8\sigma_{\hat{x}}^2}} e^{-\frac{\sigma_{\hat{x}}^2 \lambda_-^2(t_i)}{2}} x_+(t_f)$$
$$e^{\frac{i}{\hbar} S_{HR}[x_\pm(t), \dot{x}_\pm(t), \lambda_\pm(t)]}, \tag{113}$$

$$\begin{aligned} S_{HR}[x_\pm(t), \dot{x}_\pm(t), \lambda_\pm(t)] \equiv\ & p_0 x_-(t_i) - \lambda_+(t_f) x_-(t_f) + \lambda_-(t_i)(x_+(t_i) - x_0) \\ & + \int_{t_i}^{t_f} dt \Big\{ L[x_+(t) + \frac{1}{2}x_-(t), \dot{x}_+(t) + \frac{1}{2}\dot{x}_-(t)] \\ & - L[x_+(t) - \frac{1}{2}x_-(t), \dot{x}_+(t) - \frac{1}{2}\dot{x}_-(t)] \\ & + \lambda_+(t) \left(\frac{d}{dt} x_-(t) - \dot{x}_-(t) \right) \\ & + \lambda_-(t) \left(\frac{d}{dt} x_+(t) - \dot{x}_+(t) \right) \Big\}. \end{aligned} \tag{114}$$

然后，驻相法以 $\hbar \to 0$ 极限 $\delta S_{HR} = 0$ 的通常方式给出结果。在这种情况下，通过将 $\dot{x}_\pm(t)$和 $\lambda_\pm(t)$变量显式纳入路径积分测度，我们可以理解并完全掌控作用量变分。特别是，对于 $\dot{x}_\pm(t)$的变分是否独立于 $x_\pm(t)$的变分，不会产生任何混淆： $\dot{x}_\pm(t)$变分独立于 $x_\pm(t)$变分，而 $\dot{x}_\pm(t)$变分与 $x_\pm(t)$变分之间的联系，则仅在取 $\hbar \to 0$ 极限后才由拉格朗日乘子 $\lambda_\pm(t)$施加。此外，转置规则也不存在任何歧义：无需援引或考虑 $\delta\dot{x}_\pm(t)$与 $\frac{d}{dt}[\delta x_\pm(t)]$之间的关系，因为在取 $\hbar \to 0$ 极限之前，这些量彼此独立。我们甚至可以期望，这里所发展的方法能够解决与具有一般非完整约束 [14, 16, 18]的系统之经典力学及其变分表述相关的悬而未决的问题。

–

同样，按照通常的方式，负坐标的“初始条件”和运动方程可由 $x_-(t) = \dot{x}_-(t) = \lambda_-(t) = 0$ 唯一确定。此外，正如预期的那样，可以将拉格朗日乘子视为系统的动量。特别是， $\hbar \to 0$ 极限确定了

$$\lambda_+ = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \tag{115}$$

因此我们发现， $\hbar \to 0$极限给出了作为初值问题的欧拉-拉格朗日方程。具体而言，正坐标的初始条件和运动方程

随后变为（为使记号清晰，并与通常的经典力学表述更直接地联系起来，省略正号）：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} x(t_i) = x_0 \\ \left.\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{t_i} = p_0 \end{cases} \tag{116a}$$

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} \dot{x}(t) = \dfrac{d}{dt}\big[x(t)\big] \\ \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \dfrac{\partial L}{\partial x} = 0. \end{cases} \tag{116b}$$

请注意，在上述内容中，方程 116a是关于初始条件 $\dot{x}(t_i)$ 的隐式方程。

对高斯涨落积分的处理与第 IIIB节完全相同，分子和分母中的泛函积分恰好相互抵消，得到

$$\langle \hat{x} \rangle (t_f) = x_{cl}(t_f). \tag{117}$$

VI. 与 Galley 的联系

既然我们已经完成了从量子位置算符期望值的 $\hbar \to 0$ 极限推导哈密顿方程和欧拉-拉格朗日方程的讨论，现在我们想将推导出的经典变分问题与 Galley 提出的经典变分问题进行比较 [19]。在 [19], 其中没有拉格朗日乘子，也没有来自初始量子波包的动量注入 p_0。为了使边界项（对其作用量的变分进行分部积分所得）的贡献为 0，Galley 设定（用我们的语言来说）

$$\begin{aligned} \delta x_-(t_f) &= 0 \\ \delta x_-(t_i) &= 0 \\ \delta x_+(t_i) &= 0 \end{aligned} \tag{118}$$

并通过动力学方式（即令作用量变分为 0）得出

$$\left.\frac{dx_-}{dt}\right|_{t_f} = 0. \tag{119}$$

不清楚在 [19] 中，粒子的初始动量如何导出在初始时刻对加坐标的时间导数的初始条件。

方程118还存在一个更实际的问题：将 $\delta x_{-}(t_f) = 0$设为 $\left.\frac{dx_{-}}{dt}\right|_{t_f} = 0$，而这在动力学上会导致 $\delta x_{-}(t_i) = 0$，从而得到 三个关于 $x_{-}(t)$ 的条件，这使该 $x_{-}(t)$ 自由度受到过度约束。这种过度约束会导致 Schwinger-Keldysh-Galley 变分作用量原理的数值实现中，解在最终时间切片处发生跳变 [20, 47]。

我们在第 $\hbar \to 0$ 节中考察 Schwinger-Keldysh 位置空间路径积分的极限时VA 发现：1）初始动量 p_0 被引入待变分的作用量中；2）只有两个路径变分被设为零，

$$\begin{aligned} \delta x_{-}(t_f) &= 0 \\ \delta x_{+}(t_i) &= 0. \end{aligned} \tag{120}$$

具体而言，我们并未得到 $\delta x_{-}(t_i) = 0$。正是通过允许 $x_{-}(t_i)$ 发生变分，才能得到

$$\left.\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d}{dt}\left[x(t)\right]\right)}\right|_{t=t_i} = p_0 \tag{121}$$

作为经典运动方程的两个初始条件之一。并且仅通过固定 $\delta x_{-}(t_f)$和 $\delta x_{+}(t_i)$，我们便能够求得变分问题的数值解，而在最终时间片 [48]处没有跳跃。

对 [19] 中提出的作用量原理的一个最小修正是考虑（以 [19]的语言）

$$S[\vec{q}_a] = \vec{\pi}_0 \cdot \vec{q}_{-}(t_i) + \int_{t_i}^{t_f} dt\big[L(\vec{q}_1, \dot{\vec{q}}_1) - L(\vec{q}_2, \dot{\vec{q}}_2) + K(\vec{q}_a, \dot{\vec{q}}_a)\big] \tag{122}$$

with

$$\begin{aligned} \vec{q}_{+}(t_i) &= \vec{q}_0 \\ \vec{q}_{-}(t_f) &= \vec{0} \\ \vec{\eta}_{+}(t_i) &= \vec{0} \\ \vec{\eta}_{-}(t_f) &= \vec{0}. \end{aligned} \tag{123}$$

我们已经证明，方程122 和123 是对 [19] 在考虑保守力时的正确修正。 [19] 的一项重大进展是将耗散力纳入变分框架。据推测，上述修正方程122 和123 也将适用于

非保守力，尽管我们在本工作中尚未考虑具有耗散的量子系统的经典极限。

VII. 驻相法的考量

现在让我们回到式39下方首次指出的微妙之处：路径积分中被积函数内的非相位项 $g(x)$依赖于 $\hbar$，而将驻相法应用于多重积分的通常公式（式 $g(x)$ 中的37 则与小参数 a无关。人们可能会担心，这种差异会使我们在本文中广泛使用的驻相法结果式37失效。现在我们将解释，为什么对于我们的路径积分而言，这种差异并不重要。

从物理上看，问题中唯一具有量纲的量是 $\hbar$、 σ_x、 Δt、 x_0、以及 p_0；由于我们的路径积分中 $g(x)$中令人困扰的部分除$\hbar$ 和 σ_x之外不依赖于任何量，因此，一旦对所有测度完成积分，最终结果就不可能偏离一般公式式37。我们可以通过仔细考察驻相法在调和分析中的推导来支持这一物理直觉；例如，参见 [49]。这样的考察表明，即使 a 依赖于 37 ，从调和分析导出领头阶 $g(x)$结果式 a所需的步骤也不会改变。

尽管当 $g(x)$ 依赖于 a时，朴素的领头阶结果并未改变，但人们仍可能担心幂次计数会发生变化。在我们的情形中，人们可能会担心，领头阶结果在 $\hbar$ 中受到指数抑制，或者高阶修正受到的抑制较弱。我们先来考察领头阶贡献的幂次计数是否发生变化。我们看到，驻相条件总会导出最终时刻的“初始”条件，以及一组运动方程；对所有时间而言，这组方程的唯一解是所有负坐标（包括拉格朗日乘子）均为零。路径积分中导致问题的项 $g(x)$ 是一个负坐标的高斯函数，该坐标的量纲为动量（可以是拉格朗日乘子 λ_- ，也可以是动量 p_-），再除以 $\hbar^2$ （并乘以 σ_x^2，从而使量纲相符）。因此，当该负动量取为 0 时，高斯函数便等于 1，且与 $\hbar$无关；所以，式 37 给出的领头阶贡献既未改变，其幂次计数也未改变，适用于

我们的情形。现在来考察驻相法领头阶结果的高阶修正是否会改变幂次计数。直观而言，人们会预期，自变量按 $1/\hbar^2$ 缩放的高斯函数会使高阶项受到进一步抑制。再次遵循 [49]，中的步骤，可以证明，对于我们的特定被积函数，高阶项确实会额外受到 $\hbar$ 次幂的抑制。（明确地说，在这种情形下可以证明，一旦将 $\hbar$ 按无量纲数 a进行缩放，高阶项就会额外受到 a次幂的抑制。）

VIII. 结论

在本文中，我们推导出一维保守力作用下，非相对论量子位置算符期望值的 Schwinger-Keldysh 形式的经典极限。在此过程中，我们找到了经典质点力学中初值问题的变分原理。具体而言，对我们称为哈密顿修正作用量的作用量进行变分，

$$\delta S_{HR}|_{\substack{x_{+,cl}(t)\\x_{-,cl}(t)}} = 0, \tag{124}$$

其中

$$S_{HR}[x_{\pm}(t)] \equiv p_0 x_-(t_i) + \int_{t_i}^{t_f} dt\, L\big(x_1(t), \frac{d}{dt}[x_1(t)]\big) - L\big(x_2(t), \frac{d}{dt}[x_2(t)]\big), \tag{125}$$

$$x_+(t) = \frac{1}{2}\big(x_1(t) + x_2(t)\big) \tag{126}$$

$$x_-(t) = x_1(t) - x_2(t), \tag{127}$$

满足

$$\begin{aligned} \delta x_-(t_f) &= 0 \\ \delta x_+(t_i) &= 0 \end{aligned} \tag{128}$$

得出经典的哈密顿方程和欧拉-拉格朗日方程，作为初值问题，其中

$$\begin{aligned} x(t_i) &= x_0 \\ p(t_i) &= p_0. \end{aligned} \tag{129}$$

我们展示了，在上述表述中，作用量以路径的显式时间导数表示，作用量变分包含一项泛函链式法则 贡献，该贡献来自拉格朗日量对 $\frac{d}{d}[x(t)]$ 的依赖；也就是说，在这种表述中，路径的时间导数并不被视为与路径本身的变分相独立的变分。

随后，我们引入拉格朗日乘子函数，得到构型空间中的 Schwinger-Keldysh 路径积分。由此得到的哈密顿修正作用量为

$$\begin{aligned} S_{HR}[x_\pm(t), \dot{x}_\pm(t), \lambda_\pm(t)] \equiv\ & p_0 x_-(t_i) - \lambda_+(t_f) x_-(t_f) + \lambda_-(t_i)\big(x_+(t_i) - x_0\big) \\ & + \int_{t_i}^{t_f} dt\, L\big(x_1(t), \dot{x}_1(t)\big) - L\big(x_2(t), \dot{x}_2(t)\big) \\ & \lambda_+(t) \left(\left.\frac{dx_-}{dt}\right|_t - \dot{x}_-(t) \right) + \lambda_-(t) \left(\left.\frac{dx_+}{dt}\right|_t - \dot{x}_+(t) \right). \end{aligned} \tag{130}$$

Then

$$\delta S_{HR}|_{\substack{x_{\pm,cl}(t) \\ \dot{x}_{\pm,cl}(t) \\ \lambda_{\pm,cl}(t)}} = 0, \tag{131}$$

其中，变分 $\delta x_\pm(t)$、 $\delta \dot{x}_\pm(t)$ 和 $\delta \lambda_\pm(t)$ 均 相互独立且完全不受约束，从而得到作为初值问题的经典欧拉-拉格朗日方程。

我们这种方法的一大优势在于，从量子舒温格-凯尔迪什路径积分的 $\hbar \to 0$极限推导经典力学，使得在经典极限中对什么进行变分以及如何进行变分变得完全透明且毫无歧义。由于非完整约束$g_k\big(q^i(t)\ \dot{q}^i(t)\ t\big) = 0$ 会在速度和位置的经典变分之间施加非平凡关系（等价地说，会在量子积分测度中对速度和位置施加非平凡关系），我们预计，这种从量子路径积分出发对经典变分进行的明确控制将极为有用，并可能使我们能够在路径积分以及经典力学的变分作用量表述中全面实现非完整约束。

在上述讨论中，我们惊讶地发现，经典极限总是在最终时间片为负坐标给出“初始条件”，负坐标的运动方程解会随时间向后演化，而满足这些“初始条件”的运动方程唯一解则使负坐标恒等于 0。

在以上所有推导中，我们都从离散时间切片出发，此时所有量都处于完全的理论掌控之中。离散时间切片本身的结果也值得关注，

因为它们与作用量原理及其导出的运动方程的数值实现有关。有趣的是，我们发现，引入各种拉格朗日乘子后，离散运动方程即使在时间端点处也能保持其精度阶。

上述步骤和技术具有很强的普适性。例如，我们已经推导出在考察动量算符的期望值时也会得到相同的结果，但此处未予展示。在附录中，我们展示了如何处理 d 广义坐标。在处理广义坐标问题的过程中，我们说明了如何对拉格朗日量中含有非对易算符的项进行特罗特化，而无需猜测中点或后点规则。将我们的结果进一步推广到场论应该不存在障碍。在场论中，非完整约束常以常用的库仑规范和洛伦兹规范的形式出现，因此这将是未来一个有趣的研究方向。

九、致谢

WAH 和 AR 感谢 J Nordstr¨om 和 M Sievert 进行了富有价值的讨论 .

这项研究的部分工作由 WAH 在访问冲绳科学技术大学院大学（OIST）并参加理论科学访问计划（TSVP）期间完成。WAH 感谢国家研究基金会和 SA-CERN合作在研究期间提供慷慨的资金支持。

AR 欣然感谢高丽大学通过项目 K2510461 用于保持时空对称性的格点场论的全动力学坐标映射以及项目 K2511131 和 K2503291 提供的支持。

X. 作者贡献

WAH提出了问题，完成了所有计算，并撰写了初稿。AR建议使用拉格朗日乘子将 $\dot{x}(t)$与 $\frac{dx}{dt}|_t$联系起来，进行了有价值的讨论，并协助编辑了稿件。

附录 A：广义坐标

哈密顿量和拉格朗日形式在经典力学中的主要优点之一，是能够使用广义坐标 $q^i(t)$，而非笛卡尔坐标$x^i(t)$。在第III B 节和V C 节中，我们试探性地将 $p^2/2m + V(x)$替换为 $H(p, q)$，并将 $m\dot{x}^2/2 - V(x)$替换为 $L(x, \dot{x})$。假设所用坐标为笛卡尔坐标时，这些替换是合理的。不过，我们希望仔细说明，我们所有的结果对于经典力学中通常考虑的各类一般坐标都成立。特别是，我们希望将作为出发点的经典拉格朗日量写为

$$L = \frac{1}{2} m g_{ij}(\vec{q})(\dot{q}^i \dot{q}^j) - V(\vec{q}), \qquad i = 1, \ldots, d. \tag{A1}$$

可以将坐标相关量 g_{ij} 视为所考虑坐标空间的度量，这样理解很有用。对于笛卡尔坐标，$g_{ij} = \delta_{ij}$。

给定拉格朗日量方程 A1，我们有

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \\ &= m g_{ij} \dot{q}^j \qquad \text{(A2)} \\ \Rightarrow \qquad \dot{q}^i &= \frac{1}{m} g^{ij} p_j, \qquad \text{(A3)} \end{aligned}$$

其中，我们将 g_{ij} 的逆定义为

$$g^{ik}(\vec{q}) g_{kj}(\vec{q}) = \delta^i_j. \tag{A4}$$

经典哈密顿量为

$$\begin{aligned} H(\vec{p}, \vec{q}) &= p_i \dot{q}^i - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) \\ &= \frac{1}{2m} p_i g^{ij}(\vec{q}) p_j + V(\vec{q}). \end{aligned} \tag{A5}$$

现在我们想要考虑

$$\langle \hat{x} \rangle(t_f) = \langle \psi_i | e^{i\hat{H}(t_f - t_i)} \hat{x} e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)} | \psi_i \rangle \tag{A6}$$

根据式中给出的广义坐标和拉格朗日量 A1。为了计算式 A6，我们需要对先前的工作作若干推广。首先，我们应考虑特罗特分解所需的完备态组的单位分解

对于式 A6。如上所述，我们可以将 g_{ij} 视为度量，在这种情况下，我们将完备的位置态组归一化为

$$\hat{\mathbb{1}} \equiv \int d^d q \sqrt{g(\vec{q})} |\vec{q}\rangle\langle\vec{q}| \tag{A7}$$

$$\langle\vec{q}|\vec{r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{g(\vec{q})}} \delta^{(d)}(\vec{q}-\vec{r}). \tag{A8}$$

动量本征态的单位分解为

$$\hat{\mathbb{1}} = \int d^d p |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| \tag{A9}$$

$$\langle\vec{p}|\vec{k}\rangle = \delta^{(d)}(\vec{p}-\vec{k}). \tag{A10}$$

注意， g_{ij} 并不会 出现在动量空间的单位分解或内积中； g_{ij} 不能 出现在动量空间内积或单位分解中，因为根据假设， g_{ij} 取决于坐标 q^i，而坐标无法纳入动量空间内积或单位分解中，因为后者只取决于动量的分量 p_i 。请注意，我们可以考虑有限范围（而非无限范围）的坐标，在这种情况下，动量将被离散化；对于离散动量，可以用求和替代积分，或者更有用地（因为我们很快将考虑 $\hbar \to 0$ 极限），将积分视为勒贝格意义下的积分，而非黎曼意义下的积分。

按照上述约定，通常的狄拉克量子化条件

$$[\hat{q}^i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta^i_j \tag{A11}$$

意味着

$$\langle\vec{q}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \frac{1}{\sqrt[4]{g(\vec{q})}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{p}}, \tag{A12}$$

其中 $\vec{q}\cdot\vec{p} \equiv q^i p_i$。的行列式的四次方根在式A12中看起来有些奇怪，但它的作用是抵消位置本征基的单位分解（式A7）中 的行列式的平方根。

接下来，我们应考虑初始波包的广义形式。我们将初始波包的位置空间表象取为

$$\langle\vec{q}|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{g(\vec{q})(2\pi)^d\sigma^{-2}}} e^{-\frac{1}{4}(q^i-q^i_0)\sigma^2_{ij}(q^j-q^j_0)+\frac{i}{\hbar}q^i p_{0,i}+\mathcal{O}(R\sigma^3)}, \tag{A13}$$

其中 $g(\vec{q}) \equiv \det g_{ij}(\vec{q})$, $\sigma^{-2} \equiv \det[(\sigma^2)^{ij}]$, $(\sigma^2)^{ik}\sigma^2_{kj} = \delta^i_j$, 而 R 表示与 g_{ij} 相关的曲率项。这个广义波包符合我们的通常预期:

$$\begin{aligned}
\langle\psi_0|\psi_0\rangle &= 1 \\
\langle\psi_0|\hat{\vec{q}}|\psi_0\rangle &= \vec{q}_0 \\
\langle\psi_0|(\hat{q}^i - q^i_0)(\hat{q}^j - q^j_0)|\psi_0\rangle &= (\sigma^2)^{ij} \\
\langle\psi_0|\hat{p}_i|\psi_0\rangle &= p_i \\
\langle\psi_0|(\hat{p}_i - p_{0,i})(\hat{p}_j - p_{0,j})|\psi_0\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}\sigma^2_{ij}.
\end{aligned} \tag{A14}$$

最后，我们应当考虑哈密顿量中动能项的算符排序歧义。让我们将哈密顿量提升为算符

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_i g^{ij}(\hat{\vec{q}})\hat{p}_j + V(\hat{\vec{q}}). \tag{A15}$$

式 A15 是将经典动能项提升为算符的唯一方式，可确保厄米性和坐标不变性，忽略曲率的高阶修正 R [50]。 R 中的高阶修正为 $\mathcal{O}(\hbar^2)$，因此与我们的经典 $\hbar \to 0$考察无关。

现在使用上述内容对式 A6进行特罗特化:

$$\langle\hat{\vec{q}}\rangle(t_f) = \lim_{N\to\infty}\langle\psi_0|\underbrace{e^{i\hat{H}\epsilon}\cdots e^{i\hat{H}\epsilon}}_{N\text{ times}}\hat{\vec{q}}\underbrace{e^{-i\hat{H}\epsilon}\cdots e^{-i\hat{H}\epsilon}}_{N\text{ times}}|\psi_0\rangle, \qquad \epsilon \equiv \frac{t_f - t_i}{N}. \tag{A16}$$

然后插入 $2(N+1)$ 个单位分解,

$$\begin{aligned}
\langle\hat{\vec{q}}\rangle(t) = \lim_{N\to\infty}\prod_{n_1=0}^{N}\int d^d q_{1,n_1}\sqrt{g(\vec{q}_{1,n_1})}\prod_{n_2=0}^{N}\int d^d q_{2,n_2}\sqrt{g(\vec{q}_{2,n_2})} \\
\langle\psi_0|\vec{q}_{2,0}\rangle\langle\vec{q}_{2,0}|e^{i\hat{H}\epsilon}|\vec{q}_{2,1}\rangle\ldots\langle\vec{q}_{2,N}|\hat{\vec{q}}|\vec{q}_{1,N}\rangle\ldots\langle\vec{q}_{1,1}|e^{-i\hat{H}\epsilon}|\vec{q}_{1,0}\rangle\langle\vec{q}_{1,0}|\psi_0\rangle.
\end{aligned} \tag{A17}$$

现在我们需要计算

$$\begin{aligned}
\langle\vec{q}_{1,k+1}|e^{-i\hat{H}\epsilon}|\vec{q}_{1,k}\rangle &= \langle\vec{q}_{1,k+1}|e^{-i\epsilon\left[\frac{1}{2}V(\hat{\vec{q}})+\frac{1}{2m}\hat{p}_i g^{ij}(\hat{\vec{q}})\hat{p}_j+\frac{1}{2}V(\hat{\vec{q}})\right]}|\vec{q}_{1,k}\rangle \\
&= \langle\vec{q}_{1,k+1}|e^{-i\epsilon\frac{1}{2}V(\hat{\vec{q}})}e^{-i\epsilon\frac{1}{2m}\hat{p}_i g^{ij}(\hat{\vec{q}})\hat{p}_j}e^{-i\epsilon\frac{1}{2}V(\hat{\vec{q}})}|\vec{q}_{1,k}\rangle + \mathcal{O}(\epsilon^3).
\end{aligned} \tag{A18}$$

在第一行中，我们选择考虑 Strang分裂哈密顿量，将势能均分为两部分，分别置于动能项之前和之后。采用斯特朗分裂可以实现更

对称地处理时间演化算符的矩阵元。原则上，斯特朗分裂还有一个优点：它在 ϵ 中具有二阶精度。

位置本征态可以直接穿过势能项。因此，我们只需计算动能项的位置空间矩阵元。经典的路径积分处理要么断言应采用中点规则 [43, 51], 认为中点规则是“最简单的”[44], ，要么断言存在一种新的量子等价原理，并采用后点规则 [52]。与文献中其他做法不同，我们将相当仔细地通过对 ϵ 展开，并在必要时插入完备的位置和动量本征态组，来确定离散化时间演化算符的矩阵元。我们将看到，这一过程并不会得到通常应用于动能项的中点规则。（再次注意，至少在 $\hbar$的二次阶以内，动能项的算符排序由幺正性唯一确定，也就是说，由时间演化算符的厄米性唯一确定。）具体来说，我们需要考虑

$$\langle \vec{q}_{1,k+1}|\hat{p}_i g^{ij}(\hat{\vec{q}})\hat{p}_j|\vec{q}_{1,k}\rangle = \int d^d q_{1,k+\frac{1}{2}} \sqrt{g(\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}})} \int d^d p_{1,k+\frac{1}{4}} \int d^d p_{1,k+\frac{3}{4}}$$
$$\langle \vec{q}_{1,k+1}|\hat{p}_i|\vec{p}_{1,k+\frac{3}{4}}\rangle\langle\vec{p}_{1,k+\frac{3}{4}}|\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}}\rangle\langle\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}}|g^{ij}(\hat{\vec{q}})|\vec{p}_{1,k+\frac{1}{4}}\rangle\langle\vec{p}_{1,k+\frac{1}{4}}|\hat{p}_j|\vec{q}_{1,k}\rangle, \quad \text{(A19)}$$

经过一些计算和整理后，得到

$$\begin{aligned}\langle \vec{q}_{1,k+1}|e^{-i\hat{H}\epsilon}|\vec{q}_{1,k}\rangle = {} & \frac{1}{\sqrt[4]{g(q_{1,k+1})}} e^{-i\epsilon\frac{1}{2}V(\vec{q}_{1,k+1})} \\ & \int d^d q_{1,k+\frac{1}{2}} \int \frac{d^d p_{1,k+\frac{1}{4}}}{(2\pi\hbar)^d} \frac{d^d p_{1,k+\frac{3}{4}}}{(2\pi\hbar)^d} \\ & e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_{1,k+\frac{3}{4}}\cdot(\vec{q}_{1,k+1}-\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}})} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_{1,k+\frac{1}{4}}\cdot(\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}}-\vec{q}_{1,k})} \\ & e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2m}p_{i;1,k+\frac{3}{4}}g^{ij}(\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}})p_{j;1,k+\frac{1}{4}}} \\ & \frac{1}{\sqrt[4]{g(q_{1,k})}} e^{-i\epsilon\frac{1}{2}V(\vec{q}_{1,k})} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad \text{(A20)}$$

首先请注意，在方程 A20 中，特定中间时间步的标示——在半个时间步处取位置，在四分之一个时间步处取动量——并无任何依据，主要只是为了便于记账；唯一具有物理意义的时间步是整数时间步。按照我们采用的斯特朗分裂，这些时间步对应于势的取值。还要注意，仅将动能项的指数函数展开到 ϵ 的一阶，就已使时间演化算符矩阵元的整体精度阶降至关于 ϵ 的一阶。

由此可得

$$\begin{aligned}
\langle\vec{q}\rangle(t) = \lim_{N\to\infty}\int d^dq_{1,N}d^dq_{2,N}\\
&\prod_{n=0}^{N-1}\int d^dq_{1,n}\int d^dq_{2,n}d^dq_{1,n+\frac12}\frac{d^dp_{1,n+\frac14}}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d^dp_{1,n+\frac34}}{(2\pi\hbar)^d}d^dq_{2,n+\frac12}\frac{d^dp_{2,n+\frac14}}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d^dp_{2,n+\frac34}}{(2\pi\hbar)^d}\\
&\frac{1}{\sqrt[4]{(2\pi)^d\sigma^{-2}}}e^{-\frac14(q^i_{2,0}-q^i_0)\sigma^2_{ij}(q^j_{2,0}-q^j_0)-\frac{i}{\hbar}p_{i;0}q^i_{2,0}}\\
&\frac{1}{\sqrt[4]{(2\pi)^d\sigma^{-2}}}e^{-\frac14(q^i_{1,0}-q^i_0)\sigma^2_{ij}(q^j_{1,0}-q^j_0)+\frac{i}{\hbar}p_{i;0}q^i_{1,0}}\\
&\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{m_2=0}^{N-1}\frac{1}{2m}p_{i;2,m_2+\frac34}g^{ij}(\vec{q}_{2,m_2+\frac12})p_{j;2,m_2+\frac14}\right.\\
&\quad-\frac12 p_{i;2,m_2+\frac34}\frac{q^i_{2,m_2+1}-q^i_{2,m_2+\frac12}}{\epsilon/2}-\frac12 p_{i;2,m_2+\frac14}\frac{q^i_{2,m_2+\frac12}-q^i_{2,m_2}}{\epsilon/2}\\
&\quad\left.+V(\vec{q}_{2,m_2})\big(1-\frac12\delta_{m_2,0}\big)\right]e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac12 V(\vec{q}_{2,N})}\\
&\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{m_1=0}^{N-1}\frac{1}{2m}p_{i;1,m_1+\frac34}g^{ij}(\vec{q}_{1,m_1+\frac12})p_{j;1,m_1+\frac14}\right.\\
&\quad-\frac12 p_{i;1,m_1+\frac34}\frac{q^i_{1,m_1+1}-q^i_{1,m_1+\frac12}}{\epsilon/2}-\frac12 p_{i;1,m_1+\frac14}\frac{q^i_{1,m_1+\frac12}-q^i_{1,m_1}}{\epsilon/2}\\
&\quad\left.+V(\vec{q}_{1,m_1})\big(1-\frac12\delta_{m_1,0}\big)\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac12 V(\vec{q}_{1,N})}\\
&\vec{q}_{1,N}\delta^{(d)}(\vec{q}_{2,N}-\vec{q}_{1,N}).
\end{aligned}\tag{A21}$$

改变 $+/-$ 坐标并引入

$$\begin{aligned}
\delta^{(d)}(\vec{q}_{-,N}) &= \int\frac{d^d\lambda_+}{(2\pi\hbar)^d}e^{-i\lambda_{i,+}q^i_{-,N}}\\
\exp\big[-\frac12(q^i_{+,0}-q^i_0)\sigma^2_{ij}(q^j_{+,0}-q^j_0)\big] &= \frac{\sqrt{\sigma^{-2}}}{(2\pi)^{d/2}}\int d^d\lambda_- e^{-\frac12\lambda_{i,-}(\sigma^{-2})^{ij}\lambda_{j,-}+i\lambda_{i,-}(q^i_{+,0}-q^i_0)},
\end{aligned}\tag{A22}$$

可以发现

$$\begin{aligned}
\langle\vec{q}\rangle(t) = \lim_{N\to\infty}\int d^dq_{+,N}d^dq_{-,N}\frac{d^d\lambda_+}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d^d\lambda_-}{(2\pi\hbar)^d}\,\vec{q}_{+,N}\\
&\prod_{n=0}^{N-1}\int d^dq_{+,n}d^dq_{-,n}d^dq_{+,n+\frac12}d^dq_{-,n+\frac12}\frac{d^dp_{+,n+\frac14}}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d^dp_{-,n+\frac34}}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d^dp_{+,n+\frac14}}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d^dp_{-,n+\frac34}}{(2\pi\hbar)^d}\\
&\quad\exp\left[-\frac18 q^i_{-,0}\sigma^2_{ij}q^j_{-,0}-\frac12\lambda_{i,-}(\sigma^{-2})^{ij}\lambda_{j,-}\right]e^{\frac{i}{\hbar}S_{HR}[\vec{q}_{\pm,k}\vec{q}_{\pm,k+\frac12},\vec{p}_{\pm,k+\frac14},\vec{p}_{\pm,k+\frac34},\lambda_\pm]},
\end{aligned}\tag{A23}$$

其中

$$
\begin{aligned}
&S_{HR}[\vec{q}_{\pm,k},\vec{q}_{\pm,k+\frac{1}{2}},\vec{p}_{\pm,k+\frac{1}{4}},\vec{p}_{\pm,k+\frac{3}{4}},\lambda_{\pm}] \\
&\quad\equiv \lambda_{i;-}(q^i_{+,0}-q^i_0)-\lambda_{i;+}q^i_{-,N}+p_{i;0}q^i_{-,0}+\frac{1}{2}\epsilon\left[V(\vec{q}_{+,N}-\frac{1}{2}\vec{q}_{-,N})-V(\vec{q}_{+,N}+\frac{1}{2}\vec{q}_{-,N})\right] \\
&\qquad+\epsilon\sum_{k=0}^{N-1}\frac{1}{2m}(p_{i;+,k+\frac{3}{4}}p_{j;+,k+\frac{1}{4}}+\frac{1}{4}p_{i;-,k+\frac{3}{4}}p_{j;-,k+\frac{1}{4}}) \\
&\qquad\qquad\times\left[g^{ij}(\vec{q}_{+,k+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}\vec{q}_{-,k+\frac{1}{2}})-g^{ij}(\vec{q}_{+,k+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}\vec{q}_{-,k+\frac{1}{2}})\right] \\
&\qquad-\frac{1}{4m}(p_{i;-,k+\frac{3}{4}}p_{j;+,k+\frac{1}{4}}+p_{i;+,k+\frac{3}{4}}p_{j;-,k+\frac{1}{4}}) \\
&\qquad\qquad\times\left[g^{ij}(\vec{q}_{+,k+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}\vec{q}_{-,k+\frac{1}{2}})+g^{ij}(\vec{q}_{+,k+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}\vec{q}_{-,k+\frac{1}{2}})\right] \\
&\qquad+\frac{1}{2}p_{i;+,k+\frac{3}{4}}\frac{q^i_{-,k+1}-q^i_{-,k+\frac{1}{2}}}{\epsilon/2}+\frac{1}{2}p_{i;+,k+\frac{1}{4}}\frac{q^i_{-,k+\frac{1}{2}}-q^i_{-,k}}{\epsilon/2} \\
&\qquad+\frac{1}{2}p_{i;-,k+\frac{3}{4}}\frac{q^i_{+,k+1}-q^i_{+,k+\frac{1}{2}}}{\epsilon/2}+\frac{1}{2}p_{i;-,k+\frac{1}{4}}\frac{q^i_{+,k+\frac{1}{2}}-q^i_{+,k}}{\epsilon/2} \\
&\qquad+\left[V(\vec{q}_{+,k}-\frac{1}{2}\vec{q}_{-,k})-V(\vec{q}_{+,k}+\frac{1}{2}\vec{q}_{-,k})\right](1-\frac{1}{2}\delta_{k,0}).
\end{aligned}
\tag{A24}
$$

注意，在这个阶段 $p_{i;\pm,\,k+\frac{1}{4}}$和 $p_{i;\pm,\,k+\frac{3}{4}}$都是完全独立的自由度，在经典极限下，每个自由度都有自己的运动方程。对于 g_{ij} 与坐标无关的情形，例如 $g_{ij}=\delta_{ij}$ 笛卡尔坐标，那么 1）求和的第一行恒等于 0；2）可以对 $q^i_{\pm,\,k+\frac{1}{2}}$积分，令 $p_{i;\pm,\,k+\frac{1}{4}}=p_{i;\pm,\,k+\frac{3}{4}}\equiv p_{i;\pm,\,k+\frac{1}{2}}$；由此便可得到方程 36 的通常（多维）Strang 分裂相空间路径积分推广形式。

若考虑式 A24 的作用量变分，并令所有与负坐标成正比的项为零（假设如同此前所有情况所见，经典极限给出的初始条件和运动方程会使所有负变量恒等于零成为唯一解），则可得正坐标如下

（为使记号清晰，省略正坐标）：

$$\text{Initial Conditions} \quad \begin{cases} q_0^i = q_0^i \\ p_{i;\frac{1}{4}} = p_{i;0} - \dfrac{\epsilon}{2} \left.\dfrac{\partial V}{\partial q^i}\right|_0 \\ q_{\frac{1}{2}}^i = q_0^i + \dfrac{\epsilon}{2m} p_{j;\frac{3}{4}} \left. g^{ij}\right|_{\frac{1}{2}} \\ p_{i;\frac{3}{4}} = p_{i;\frac{1}{4}} - \dfrac{\epsilon}{2m} p_{\ell;\frac{3}{4}} p_{m;\frac{1}{4}} \left.\dfrac{\partial g^{\ell m}}{\partial q^i}\right|_{\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{A25a}$$

第一次演化 $q_1^i = q_{\frac{1}{2}}^i + \dfrac{\epsilon}{2m} p_{j;\frac{1}{4}} \left. g^{ij}\right|_{\frac{1}{2}}$ (A25b)

$$\text{Equations of Motion} \quad \begin{cases} p_{i;k+\frac{1}{4}} = p_{i;k-1+\frac{3}{4}} - \epsilon \left.\dfrac{\partial V}{\partial q^i}\right|_k , & k = 1, \ldots, N-1 \\ q_{k+\frac{1}{2}}^i = q_k^i + \dfrac{\epsilon}{2m} p_{j;k+\frac{3}{4}} \left. g^{ij}\right|_{k+\frac{1}{2}} , & k = 1, \ldots, N-1 \\ p_{i;k+\frac{3}{4}} = p_{i;k+\frac{1}{4}} - \dfrac{\epsilon}{2m} p_{\ell;k+\frac{3}{4}} p_{m;k+\frac{1}{4}} \left.\dfrac{\partial g^{\ell m}}{\partial q^i}\right|_{k+\frac{1}{2}} , & k = 1, \ldots, N-1 \\ q_{k+1}^i = q_{k+\frac{1}{2}}^i + \dfrac{\epsilon}{2m} p_{j;k+\frac{3}{4}} \left. g^{ij}\right|_{k+\frac{1}{2}} , & k = 1, \ldots, N-1. \end{cases} \tag{A25c}$$

在方程A25中，方程A25a 给出了初始条件。（第一行中的记号并不理想：左侧是坐标的 i^{th} 分量在 $\vec{q}$ 时的值 t_0步；右侧是由实验装置确定的粒子位置矢量的初始值。）按当前写法，方程 A25a 的最后两行构成一对隐式耦合方程，必须同时求解，以得到 q_1^i 和 $p_{i;\frac{3}{4}}$。方程A25b 随后给出广义坐标的第一个时间步演化。方程A25c则给出广义坐标和动量随后的时间步演化。方程A25c的中间两行构成一对隐式耦合方程，必须在每个时间步同时求解，以得到 $q_{k+\frac{1}{2}}^i$ 和 $p_{i;k+\frac{3}{4}}$。最后，方程A25c的最后一行给出广义坐标随后的时间步演化。

请注意，为了达到 $\mathcal{O}(\epsilon^2)$精度，可将式 $p_{j;k+\frac{3}{4}}$ 替换为 $p_{j;k+\frac{1}{4}}$，并将 $\left. g^{ij}\right|_{k+\frac{1}{2}}$ 替换为 $\left. g^{ij}\right|_k$，见式A25c第二行；再将 $p_{\ell;k+\frac{3}{4}}$ 替换为 $p_{\ell;k+\frac{1}{4}}$，并将 $\left.\frac{\partial g^{\ell m}}{\partial q^i}\right|_{k+\frac{1}{2}}$ 替换为 $\left.\frac{\partial g^{\ell m}}{\partial q^i}\right|_k$，见式A25c第三行。初始条件式A25a中的耦合方程也可作类似处理。经过这些替换，式A25a 和式A25c 都变为显式且互不耦合的方程。然后，在 $\epsilon \to 0$ 极限下，可以看出式A25 给出了通常的哈密顿方程

广义坐标下作为初值问题的方程:

$$\begin{aligned} q_0^i &= q_0^i \\ p_{i;0} &= p_{i;0} \\ \frac{dq^i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p^i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q^i}. \end{aligned} \tag{A26}$$

通过考察相空间路径积分与作用量的连续形式（式）A23 和A24,

$$\langle \vec{q} \rangle (t_f) = \int \mathcal{D}[\vec{q}_\pm(t), \vec{p}_\pm(t), \vec{\lambda}_\pm(t)] e^{-\frac{1}{8}\vec{q}_-(t_i)\cdot\overleftrightarrow{\sigma}^2\cdot\vec{q}_-(t_i) - \frac{1}{2}\vec{\lambda}_-(t_i)\cdot\overleftrightarrow{\sigma}^{-2}\cdot\vec{\lambda}_-(t_i)} e^{iS_{HR}[\vec{q}_\pm(t),\vec{p}_\pm(t),\vec{\lambda}_\pm(t)]}, \tag{A27}$$

其中

$$\begin{aligned} & S_{HR}[\vec{q}_\pm(t), \vec{p}_\pm(t), \vec{\lambda}_\pm(t)] \\ & = \vec{\lambda}_-(t_i)\cdot(\vec{q}_+(t_i) - \vec{q}_0) - \vec{\lambda}_+(t_f)\cdot\vec{q}_-(t_f) + \vec{p}_0\cdot\vec{q}_-(t_i) \\ & \quad + \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2m}(p_{i;+}p_{j;+} + \frac{1}{4}p_{i;-}p_{j;-}) \left(g^{ij}(\vec{q}_+ - \frac{1}{2}\vec{q}_-) - g^{ij}(\vec{q}_+ + \frac{1}{2}\vec{q}_-) \right) \right. \\ & \quad - \frac{1}{4m}(p_{i;-}p_{j;+} + p_{i;+}p_{j;-}) \left(g^{ij}(\vec{q}_+ - \frac{1}{2}\vec{q}_-) + g^{ij}(\vec{q}_+ + \frac{1}{2}\vec{q}_-) \right) \\ & \quad \left. + \vec{p}_+\cdot\frac{d\vec{q}_-}{dt} + \vec{p}_-\cdot\frac{d\vec{q}_+}{dt} + V(\vec{q}_+ - \frac{1}{2}\vec{q}_-) - V(\vec{q}_+ + \frac{1}{2}\vec{q}_-) \right]. \end{aligned} \tag{A28}$$

接着，只考虑负坐标的变分（假设正坐标的变分一如往常会使所有负坐标在动力学上取零），便可得到广义坐标下通常的哈密顿方程，作为一个初值问题；这与上文式A26所示的离散情形的连续极限完全相同。

为了推导构型空间路径积分表述，并由此得到 $\hbar \to 0$ 极限下的欧拉-拉格朗日方程，我们需要对式 A23 中的动量积分。在 $\pm$ 坐标系中对动量积分相当复杂，因为不同动量通过 g^{ij} 相互混合。相反，回到原始 1/2坐标系下的相空间路径积分（式 A21）要简单得多。此时，例如，可以轻松地对 $p_{i;1,k+\frac{3}{4}}$ 动量积分，从而得到δ函数

$$\delta^{(d)} \left(\frac{\epsilon}{2m} p_{j;1,k+\frac{1}{4}} g^{ij}(\vec{q}_{1,k+\frac{1}{2}}) - (q^i_{1,k+1} - q^i_{1,k+\frac{1}{2}}) \right), \tag{A29}$$

这些δ函数本身又可用于消去关于 $p_{i;1,k+\frac{1}{4}}$ 动量的积分。对 $p_{i;2,k+\frac{3}{4}}$ 和 $p_{i;2,k+\frac{1}{4}}$ 动量重复这一过程，可得

$$
\begin{aligned}
\langle\vec{q}\rangle(t) = \lim_{N\to\infty} \int & d^d q_{1,N} d^d q_{2,N}\, \vec{q}_{1,N} \delta^{(d)}(\vec{q}_{1,N} - \vec{q}_{2,N}) \\
& \prod_{n=0}^{N-1} \int d^d q_{1,n} \int d^d q_{2,n} d^d q_{1,n+\frac{1}{2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} d^d q_{2,n+\frac{1}{2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \\
& \left|\det\left[\frac{\epsilon}{2m} g^{ij}(\vec{q}_{1,n+\frac{1}{2}})\right]\right|^{-1} \left|\det\left[\frac{\epsilon}{2m} g^{ij}(\vec{q}_{2,n+\frac{1}{2}})\right]\right|^{-1} \\
& \frac{1}{\sqrt[4]{(2\pi)^d \sigma^{-2}}} e^{-\frac{1}{4}(q^i_{2,0} - q^i_0)\sigma^2_{ij}(q^j_{2,0} - q^j_0) - \frac{i}{\hbar} p_{i;0} q^i_{2,0}} \\
& \frac{1}{\sqrt[4]{(2\pi)^d \sigma^{-2}}} e^{-\frac{1}{4}(q^i_{1,0} - q^i_0)\sigma^2_{ij}(q^j_{1,0} - q^j_0) + \frac{i}{\hbar} p_{i;0} q^i_{1,0}} \\
& \exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon \sum_{m_2=0}^{N-1} \left(-\frac{m}{2} g_{ij}(\vec{q}_{2,m_2+\frac{1}{2}}) \frac{q^i_{2,m_2+1} - q^i_{2,m_2+\frac{1}{2}}}{(\epsilon/2)} \frac{q^i_{2,m_2+\frac{1}{2}} - q^i_{2,m_2}}{(\epsilon/2)} \right.\right. \\
& \qquad \left.\left. + V(\vec{q}_{2,m_2})(1 - \frac{1}{2}\delta_{m_2,0}) \right)\right] \\
& e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2}V(\vec{q}_{2,N})} \\
& \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon \sum_{m_1=0}^{N-1} \left(-\frac{m}{2} g_{ij}(\vec{q}_{1,m_1+\frac{1}{2}}) \frac{q^i_{1,m_1+1} - q^i_{1,m_1+\frac{1}{2}}}{(\epsilon/2)} \frac{q^i_{1,m_1+\frac{1}{2}} - q^i_{1,m_1}}{(\epsilon/2)} \right.\right. \\
& \qquad \left.\left. + V(\vec{q}_{1,m_1})(1 - \frac{1}{2}\delta_{m_1,0}) \right)\right] \\
& e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{1}{2}V(\vec{q}_{1,N})}. \qquad \text{(A30)}
\end{aligned}
$$

现在，我们可以将坐标变回 $\pm$，插入拉格朗日乘子，将末端负坐标上的狄拉克δ函数以及初始正位置上的高斯展宽转换为积分形式，并插入拉格朗日乘子，将坐标的时间导数与带点坐标联系起来。随后，驻相法得到的海森矩阵将给出恰当的行列式，从而抵消积分掉 $p_{i;1/2,k+\frac{3}{4}}$ 动量时引入的行列式，最终得到以广义坐标表示的、作为初值问题的正确欧拉-拉格朗日方程。连续极限也可以用类似的方法轻松处理。

[1] 艾萨克·牛顿，自然哲学的数学原理（皇家学会，伦敦，1687 年）。

[2] E. A. Coddington 和 N. Levinson，《常微分方程理论》（麦格劳-希尔，1955），1987年第9次重印。[3] W. R. Hamilton，《伦敦皇家学会哲学汇刊》124，247（1834）。[4] W. R. Hamilton，《伦敦皇家学会哲学汇刊》125，95（1835）。[5] V. I. Arnold，《经典力学的数学方法》，第2版，《数学研究生教材》第60卷（施普林格，纽约，1989年）。[6] H. Goldstein、C. Poole 和 J. Safko，《经典力学》，第3版（艾迪生-韦斯利，旧金山，2002年）。[7] E. Noether，《哥廷根科学学会新闻》，数学与物理学类，235（1918）。[8]A. Rothkopf 和 W. A. Horowitz，《物理评论 E》（2024），10.1103/rch9-wsbw，arXiv:2409.11063 [physics.class-ph].[9] H. Goldstein、C. Poole 和 J. Safko，《经典力学》，第3版（艾迪生-韦斯利，2002年）。[10] M. R. Flannery，《数学物理学杂志》52，032705（2011）。[11] I. M. Gelfand 和 S. V. Fomin，《变分法》（多佛出版社，米尼奥拉，纽约州，2000年）。[12] A. Einstein，《物理学年鉴》17，891（1905）。[13] K. R. Popper，《科学发现的逻辑》（劳特利奇，伦敦，1959年）。[14] M. R. Flannery，《美国物理学杂志》73，265（2005）。[15] M. de Le´on、M. Lainz、A. L´opez-Gord´on 和 J. C. Marrero，《几何与物理学杂志》198，105116（2024）。[16] W. A. Horowitz 和 A. Rothkopf，（2024），arXiv:2408.14420 [math-ph].[17] O. E. Fernandez 和 M. L. Radhakrishnan，《科学报告》8，14878（2018）。[18] B. Bert 和 W. A. Horowitz，（2025年），arXiv:2505.20684 [hep-th].[19] C. R. Galley，《物理评论快报》110，174301（2013），arXiv:1210.2745 [gr-qc].[20] A. Rothkopf 和 J. Nordstr¨om，《计算物理学杂志》498，112652（2024），arXiv:2307.04490[math.NA].[21] J. Schwinger，《数学物理学杂志》2，407（1961）。[22] L. V. Keldysh，《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》20，1018（1965）。[23] J. Berges，《美国物理联合会会议论文集》739，3（2004），arXiv:hep-ph/0409233.[24] J. Rammer，《非平衡态量子场论》（剑桥大学出版社，剑桥，2007年）。

[25] K. Balzer与M. Bonitz，《非均匀系统的非平衡格林函数方法》，物理学讲义，第867卷（施普林格，柏林，海德堡，2013年）。[26] A. Kamenev，《非平衡系统场论》（剑桥大学出版社，剑桥，2011年）。[27] N. P. Landsman与C. G. van Weert，《物理学报告》145，141（1987年）。[28] A. K. Das，《有限温度场论》（世界科学出版社，纽约，1997年）。[29]M. Laine与A. Vuorinen，《热场论基础》，第925卷（施普林格，2016年）arXiv:1701.01554 [hep-ph]。[30] R. D. Jordan，《物理评论D》33，444（1986年）。[31] S. Weinberg，《物理评论D》72，043514（2005年）。[32]J. Casalderrey-Solana、H. Liu、D. Mateos、K. Rajagopal与U. Achim Wiedemann，《规范/弦对偶、热QCD与重离子碰撞》（剑桥大学出版社，2014年）arXiv:1101.0618 [hep-th]。[33] R. P. Feynman与F. L. Vernon, Jr.，《物理年鉴》24，118（1963年）。[34] A. O. Caldeira与A. J. Leggett，《物理学A辑》121，587（1983年）。[35] P. M. Morse与H. Feshbach，《理论物理方法》（麦格劳-希尔，纽约，1953年）第3.2节。[36] H. F. Trotter，《美国数学会会刊》10，545（1959年）。[37] G. Strang，《工业与应用数学学会数值分析杂志》5，506（1968年）。[38] L. H¨ormander，《线性偏微分算子分析 I：分布理论与傅里叶分析》，第2版，数学经典（施普林格柏林海德堡，2003年）平装ISBN：978-3-540-00662-6。[39] T. Kugo与I. Ojima，《理论物理进展增刊》66，1（1979年）。[40] J. Berges与T. Gasenzer，《物理评论A》76，033604（2007年），arXiv:凝聚态物理/0703163。[41] R. A. Horn与C. R. Johnson，《矩阵分析》，第2版（剑桥大学出版社，剑桥，2013年）。[42] G. V. Dunne，《物理学杂志A辑》41，304006（2008年），arXiv:0711.1178 [hep-th]。[43] R. P. Feynman与A. R. Hibbs，《量子力学与路径积分》（麦格劳-希尔，纽约，1965年）。[44] L. s. Schulman，《路径积分的技巧与应用》（1981年）。[45] A. E. Brouwer与W. H. Haemers，《图谱》，大学文本（施普林格科学与

Business Media，2012年）。[46] R. Wong，《积分的渐近近似》，应用数学经典丛书，第34卷（工业与应用数学学会（SIAM），费城，宾夕法尼亚州，2001年），1989年版的勘误重印。[47] A. Rothkopf、W. A. Horowitz与J. Nordstr¨om，《计算物理学杂志》524，113686（2025年），arXiv:2404.18676 [math.NA]。[48] A. Rothkopf、W. A. Horowitz与J. Nordstr¨om，准备中（2026年）。[49] T. H. Wolff，《调和分析讲义》，I. ́Laba与C. Shubin编，大学讲座丛书，第29卷（美国数学学会，普罗维登斯，罗得岛州，2003年）第137页。[50] B. S. DeWitt，《现代物理评论》29，377（1957年）。[51] M. S. Marinov，《物理学报告》60，1（1980年）。[52] H. Kleinert，《量子力学、统计学、聚合物物理学和金融市场中的路径积分》（世界科学出版社，新加坡，2009年）。