ISSN 0002-3574 (print)
УДК 519.6

Поступила в редакцию 23.09.2016
Received 23.09.2016

В. Б. Малютин

Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ С ПОМОЩЬЮ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ШТУРМА

Данная работа касается двух направлений теории функционального интегрирования: представления физических величин, в частности ядра оператора эволюции, в виде функциональных интегралов и методов вычисления функциональных интегралов. Предложен новый метод приближенного вычисления функциональных интегралов по условной мере Винера, который основывается на использовании формулы Фейнмана – Каца, дающей интегральное представление для ядра оператора эволюции, и на представлении ядра с помощью собственных значений и собственных векторов оператора. Предлагаемый подход эффективен при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках большой длины.

Ключевые слова: функциональные интегралы, формула Фейнмана – Каца, ядро оператора эволюции, последовательность Штурма.

V. B. Malyutin

Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

EVALUATION OF FUNCTIONAL INTEGRALS USING STURM SEQUENCES

The present work deals with two directions of the theory of functional integration. The first is the representation of physical quantities, in particular the evolution operator kernel in the form of functional integrals. The second is concerned with the methods for calculation of functional integrals. A new method for approximate evaluation of functional integrals with respect the conditional Wiener measure is proposed in this work. This method is based both on the use of the Feynman – Kac formula giving the integral representation of the evolution operator kernel and on the representation of the kernel using eigenvalues and eigenvectors of operator. The proposed method is effective for calculation of functional integrals over a space of functions defined on the intervals of large length.

Keywords: functional integrals, Feynman – Kac formula, evolution operator kernel, Sturm sequences.

Введение. В настоящее время в теории функционального интегрирования существуют различные направления исследования: разработка методов приближенного вычисления функциональных интегралов для различных типов интегралов и мер [1–4], исследование связи между функциональными интегралами и решениями стохастических дифференциальных уравнений [5, 6], применение функциональных интегралов в различных областях физики [7–10] и т. д. Данная работа касается двух направлений теории функционального интегрирования: представления физических величин, в частности ядра оператора эволюции, в виде функциональных интегралов и методов вычисления функциональных интегралов.

Существуют различные методы для вычисления различных типов функциональных интегралов [1–4]. Среди них отметим метод Монте-Карло для приближенного вычисления функциональных интегралов [1, 11, 12], суть которого заключается в том, что вычисляемый интеграл представляется как математическое ожидание некоторой случайной величины, среднее арифметическое независимых реализаций которой дает приближенное значение данному интегралу. Один из методов приближенного вычисления функциональных интегралов – это использование приближенных формул, являющихся точными на классе функциональных многочленов заданной степени (см. [1–4] и библиографию к ним). Такие формулы называются формулами заданной степени точности и широко применяются для приближенного вычисления функциональных интегралов. Они особенно эффективны для функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках малой длины.

В данной работе рассматривается приближенное вычисление функциональных интегралов вида

$$\int \exp\left\{-\int_s^t V(x(\tau))d\tau\right\}d\mu_{x_s,x_t}(x), \tag{1}$$

где V – функция, заданная на множестве вещественных чисел R и принимающая значения в R, μ_{x_s,x_t} – условная мера Винера на пространстве функций, заданных на отрезке $[s,t]$ и удовлетворяющих условиям $x(s)=x_s$, $x(t)=x_t$. Интеграл по мере μ_{x_s,x_t} определяется равенством

$$\int \exp\left\{-\int_s^t V(x(\tau))d\tau\right\}d\mu_{x_s,x_t}(x) = \lim_{n\to\infty}\int_R (n-1)\int_R \exp\left\{-\sum_{j=1}^n (t_j - t_{j-1})V(x_j)\right\}\prod_{j=1}^n K^0_{t_j - t_{j-1}}(x_{j-1},x_j), \tag{2}$$

где $K^0_{t_j-t_{j-1}}(x_{j-1},x_j)=\frac{1}{\sqrt{2\pi(t_j-t_{j-1})}}\exp\left(-\frac{(x_j-x_{j-1})^2}{2(t_j-t_{j-1})}\right)$ – ядро оператора $\exp(tH_0)$, $H_0=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $s=t_0<t_1<\ldots<t_n=t$, $x_j=x(t_j)$.

В настоящей работе для вычисления функциональных интегралов (1) предлагается новый метод, который основывается на использовании формулы Фейнмана – Каца [7], дающей интегральное представление для ядра $K_t(x_s,x_t)$ оператора эволюции $\exp(tH)=\exp(t(H_0-V))$, и представлении ядра $K_t(x_s,x_t)$ с помощью собственных значений и собственных векторов оператора H. Предлагаемый метод эффективен при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках $[s,t]$ большой длины.

Аналитические результаты. Рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial S(t,x)}{\partial t} = HS(t,x), \tag{3}$$

где $H=H_0-V=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-V(x)$.

С помощью формулы Фейнмана – Каца [7] ядро $K_t(x_s,x_t)$ оператора эволюции $\exp(tH)$ представляется в виде функционального интеграла (1). С другой стороны, ядро $K_t(x_s,x_t)$ может быть представлено в виде [13]:

$$K_t(x_s,x_t)=\sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(x_s)\psi_n(x_t)\exp\{-\lambda_n(t-s)\}, \tag{4}$$

где $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ – собственные значения и собственные векторы оператора H.

Таким образом, справедливо равенство

$$\int \exp\left\{-\int_s^t V(x(\tau))d\tau\right\}d\mu_{x_s,x_t}(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(x_s)\psi_n(x_t)\exp\{-\lambda_n(t-s)\}. \tag{5}$$

Для вычисления $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ в узлах $x_j=-A+jh$, $1\le j\le N-1$, A – некоторое положительное число, заменим функции $\psi_j(x)$, $-A\le x\le A$, векторами $\overrightarrow{\psi_j}=(\psi_j(-A+h),\psi_j(-A+2h),\ldots,\psi_j(A-h))$, $hN=2A$, оператор $H=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-V$ аппроксимируем конечно-разностным оператором с матрицей $\overline{H}$ размерности $(N-1)\times(N-1)$, получающейся в результате аппроксимации второй производной в узле x_j выражением $h^{-2}(x_{j+1}-2x_j+x_{j-1})$.

$$\overline{H} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & \cdots & 0 & 0 \\ a_1 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & b_{N-2} & c_{N-2} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{N-2} & b_{N-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -1-h^2V_1 & \frac{1}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{2} & -1-h^2V_2 & \frac{1}{2} & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -1-h^2V_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1-h^2V_{N-1} \end{pmatrix},$$

где $V_j = V(-A + jh),\ \ 1 \le j \le N-1.$

Для вычисления собственных значений $-\overline{\lambda}_j$ трехдиагональной матрицы $\overline{H}$ можно воспользоваться методом последовательностей Штурма [14]. Рассмотрим следующую последовательность полиномов, известную как последовательность Штурма:

$$D_0(\lambda) = 1, \quad D_1(\lambda) = b_1 - \lambda, \quad D_j(\lambda) = (b_j - \lambda)D_{j-1}(\lambda) - a_{j-1}c_{j-1}D_{j-2}(\lambda), \quad 2 \le j \le N-1.$$

Для произвольного λ определим функцию $s(\lambda)$ как число совпадений знаков у следующих друг за другом членов последовательности

$$D_0(\lambda),\ D_1(\lambda),\ D_2(\lambda),\ldots,\ D_{N-1}(\lambda),$$

причем если $D_j(\lambda) = 0$, то в качестве знака этого члена будем брать знак $D_{j-1}(\lambda)$. Тогда значение функции $s(\lambda)$ равно числу собственных значений матрицы $\overline{H}$ бóльших или равных λ.

Для вычисления собственных векторов $\overline{\psi}_j$ трехдиагональной матрицы $\overline{H}$ можно использовать метод обратной итерации [14].

С помощью вычисленных приведенным способом приближений $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$, и формулы (5) получаем приближенные значения функционального интеграла (1).

Численные результаты. В качестве примера рассмотрим вычисление функционального интеграла (1) в случае $V(x) = \frac{1}{2}(-1 + x^2)$. Для данного потенциала $V(x)$ с помощью метода последовательностей Штурма получаем приближенные значения для собственных значений $\overline{\lambda_0}$, $\overline{\lambda_1}$ трехдиагональной матрицы $\overline{H}$. Значения $\overline{\lambda_0}$, $\overline{\lambda_1}$ аппроксимируют собственные значения λ_0, λ_1 оператора H. При $A = 4$, $N = 20$, $-\overline{\lambda_0} = 0{,}0022$, $-\overline{\lambda_1} = -0{,}9736$. Для сравнения точные значения $-\lambda_0 = 0,\ -\lambda_1 = -1.$

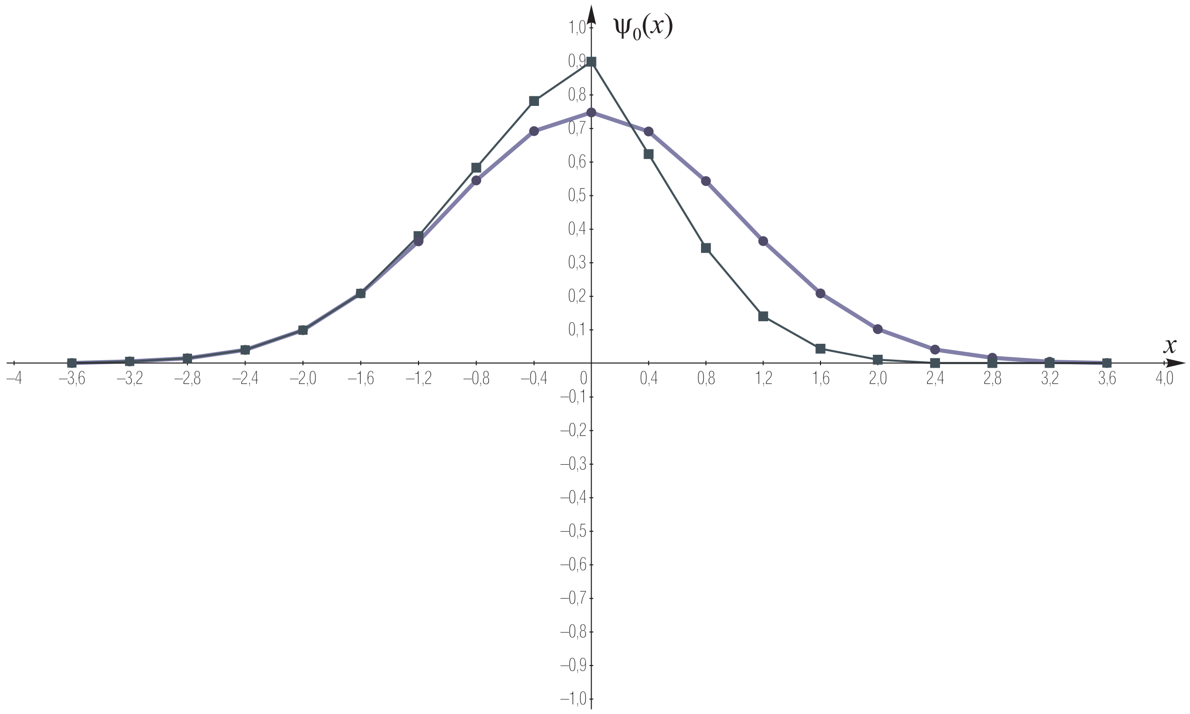
С помощью метода обратной итерации находим приближения собственных векторов $\overline{\psi_0}$, $\overline{\psi_1}$ трехдиагональной матрицы $\overline{H}$. Векторы $\overline{\psi_0}$, $\overline{\psi_1}$ аппроксимируют собственные векторы ψ_0, ψ_1 оператора H.

На рис. 1, 2 приведены численные значения для функций $\overline{\psi_0}(x)$, $\overline{\psi_1}(x)$ соответственно при $A = 4$, $N = 20$.

С помощью полученных приближений для λ_0, λ_1 и ψ_0, ψ_1 из формулы (5) получаем приближенное значение для функционального интеграла (1). На рис. 3 приведены численные значения для функционального интеграла (1) при $s = 0$, $x_s = y = 0$, $t = 1$, $A = 4$, $N = 20$ и различных значениях $x = x_t$.

Точные значение интеграла при $s = 0$ получаются из равенства [7, 13]:

$$K_t(x_0, x_t) = \frac{e^{\frac{t}{2}}}{\sqrt{2\pi \sinh(t)}} \exp\left\{-\frac{e^t(e^{-t}x - x_0)^2}{2\sinh(t)} - x^2 + x_0^2\right\}.$$

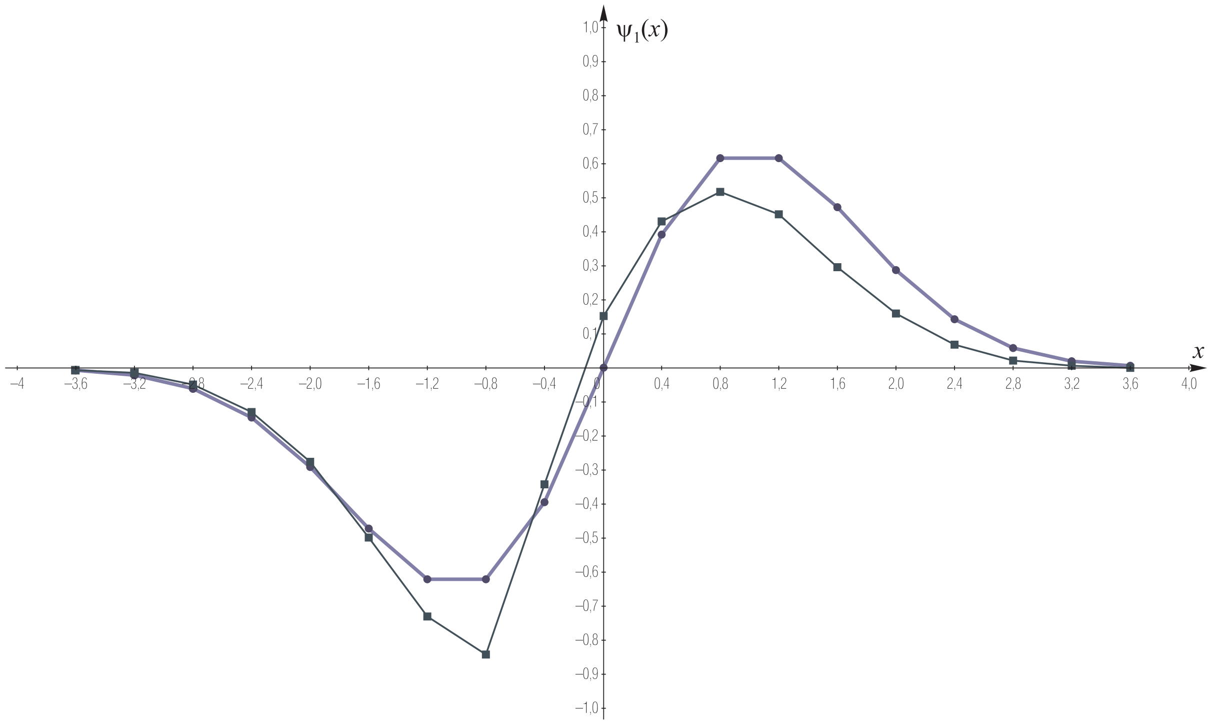


■–■–■–■ – приближенное значение $\psi_0(x)$ / approximate value $\psi_0(x)$

●–●–●–● – точное значение $\psi_0(x)$ / exact value $\psi_0(x)$

Рис. 1. Значения функции $\psi_0(x)$

Fig. 1. Values of the function $\psi_0(x)$



■–■–■–■ – приближенное значение $\psi_1(x)$ / approximate value $\psi_1(x)$

●–●–●–● – точное значение $\psi_1(x)$ / exact value $\psi_1(x)$

Рис. 2. Значения функции $\psi_1(x)$

Fig. 2. Values of the function $\psi_1(x)$

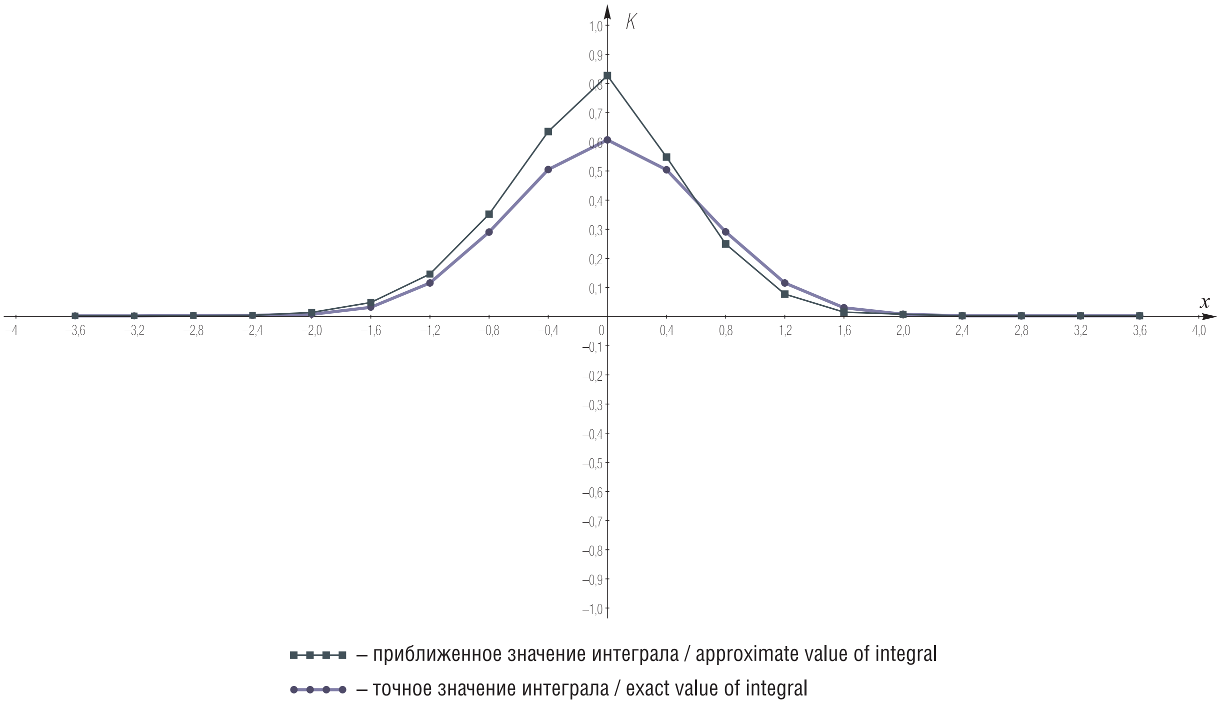


Рис. 3. Значения для функционального интеграла

Fig. 3. Values of the functional integral

Список использованных источников

1. Янович, Л. А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам / Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника. 1976. – 383 с.

2. Егоров, А. Д. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов / А. Д. Егоров, П. И. Соболевский, Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника. 1985. – 310 с.

3. Egorov, A. D. Functional integrals: Approximate evaluation and Applications / A. D. Egorov, P. I. Sobolevsky, L. A. Yanovich. – Dordrecht: Kluwer Academic Pablishers, 1993.

4. Егоров, А. Д. Введение в теорию и приложения функционального интегрирования / А. Д. Егоров, Е. П. Жидков, Ю. Ю. Лобанов. – М.: Физматлит, 2006. – 400 с.

5. Langouche, F. Functional integration and semi-classical expansions / F. Langouche, D. Roekaerts, E. Tirapegui. – D. Dordrecht: Reidel Pub.Co., 1982. – 324 c.

6. Horacio, S. Wio. Application of path integration to stochastic process: an introduction / S. Wio. Horacio. – World Scientific Publishing Company, 2013. – 176 p.

7. Glimm, J. Quantum Physics. A functional integral point of view / J. Glimm, A. Jaffe. – Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981. – 417 p.

8. Feynman, R. P. Quantum mechanics and path integrals / R. P. Feynman, A. R. Hibbs. – McGraw-Hill, New York, 1965. – 377 p.

9. Kleinert, H. Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics, and financial markets / H. Kleinert. – Singapore: World Scientific Publishing, 2004. – 1592 p.

10. Боголюбов, Н. Н. Введение в теорию квантованных полей / Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков. – М., 1976.– 479 с.

11. Решение краевых задач методом Монте-Карло / Б. С. Елепов [и др.]. – Новосибирск: Наука, 1980.– 174 с.

12. Сабельфельд, К. К. О приближенном вычислении винеровских континуальных интегралов методом Монте-Карло / К. К. Сабельфельд // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1979. – Т. 19, № 1. – С. 29–43.

13. Risken, H. The Fokker-Plank equation: methods of solution and applications / H. Risken. – Springer-Verlag, 1984. – 472 p.

14. Wilkinson, J. H. The algebraic eigenvalue problem / J. H. Wilkinson. – Oxford, 1965. – 662 p.

References

1. Yanovich L.A. *Approximate calculation of continual integrals through the Gaussian measures.* Minsk, Nauka i tekhnika, 1976. 383 p. (in Russian)

2. Egorov A.D., Sobolevsky P.I., Yanovich L.A. *Approximate methods for calculation of continual integrals.* Minsk, Nauka i tekhnika, 1985. 310 p. (in Russian)

3. Egorov A.D., Sobolevsky P.I., Yanovich L.A. *Functional integrals: Approximate evaluation and Applications.* Dordrecht, Kluwer Academic Pablishers, 1993.

4. Egorov A.D., Zhidkov E.P., Lobanov Yu.Yu. *An introduction to the theory and application of functional integration*. Moscow: Fizmatlit, 2006. 400 p. (in Russian)

5. Langouche F., Roekaerts D., Tirapegui E. *Functional integration and semi-classical expansions.* Dordrecht, D. Reidel Pub.Co., 1982. 324 p.

6. Wio H.S. *Application of Path Integration to Stochastic Processes: An Introduction*. World Scientific Publishing Company, 2013. 176 p.

7. Glimm J., Jaffe A. *Quantum Physics. A functional integral point of view*. Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag, 1981. 417 p.

8. Feynman R.P., Hibbs A.R. *Quantum mechanics and path integrals*. New York, McGraw-Hill, 1965. 377 p.

9. Kleinert H. *Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics, and financial markets*. Singapore: World Scientific Publishing, 2004. 1592 p.

10. Bogolyubov N.N., Shirkov D.V. *An introduction to the theory of quantum fields*. Moscow, Nauka, 1976. 479 p. (in Russian)

11. Elepov B.S., Kronberg A.A., Mikhailov G.A., Sabel'fel'd K.K. *Solution of boundary-value problems by the Monte-Carlo method*. Novosibirsk: Nauka, 1980. 174 p.

12. Sabel'fel'd K.K. *Approximate evaluation of wiener continual integrals by the Monte Carlo method. USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1979, vol. 19, no. 1, pp. 29–43. doi:10.1016/0041-5553(79)90064-8.

13. Risken H., Frank T. *The Fokker-Plank equation: methods of solution and applications.* Springer-Verlag, 1984. 472 p. doi:10.1007/978-3-642-61544-3.

14. Wilkinson J.H. *The algebraic eigenvalue problem*. Oxford, 1965. 662 p.

Информация об авторе

Малютин Виктор Борисович – ведущий научный сотрудник, Институт математики Национальной академии наук Беларуси (ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: malyutin@im.bas-net.by

Information about the author

Malyutin Victor Borisovich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus (11, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: malyutin@im.bas-net.by

Для цитирования

Малютин, В. Б. Вычисление функциональных интегралов с помощью последовательностей Штурма / В. Б. Малютин // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 32–37.

For citation

Malyutin V.B. Evaluation of functional integrals using the Sturm sequences. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 32–37. (in Russian)