ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)
УДК 519.6

Поступила в редакцию 02.11.2017
Received 02.11.2017

В. Б. Малютин

Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

О ВЫЧИСЛЕНИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ, ПОРОЖДЕННЫХ НЕКОТОРЫМИ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИМИ ГАМИЛЬТОНИАНАМИ

Аннотация. Получены численные результаты для функциональных интегралов по условной мере Винера, порожденных гамильтонианом гармонического осциллятора, гамильтонианом ангармонического осциллятора и гамильтонианом одномерной прямоугольной потенциальной ямы, с помощью метода, основанного на разложении по собственным функциям гамильтониана, порождающего функциональный интеграл. Вычисление собственных значений, используемых в разложении, основано на подсчете числа совпадений знаков у следующих друг за другом членов последовательности Штурма. Потому этот метод устойчив к накоплению погрешностей и хорошо реализуется на ЭВМ.

Предложенный метод эффективнее известных ранее методов при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках большой длины.

Ключевые слова: функциональные интегралы, гармонический осциллятор, ангармонический осциллятор, одномерная прямоугольная потенциальная яма

Для цитирования. Малютин, В. Б. О вычислении функциональных интегралов, порожденных некоторыми нерелятивистскими гамильтонианами / В. Б. Малютин // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2018. – Т. 54, № 1. – С. 44–49.

V. B. Malyutin

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

EVALUATION OF FUNCTIONAL INTEGRALS GENERATED BY SOME NONRELATIVISTIC HAMILTONIANS

Abstract. The numerical results for functional integrals with respect to the conditional Wiener measure, generated by the Hamiltonian of a harmonic oscillator, the Hamiltonian of an anharmonic oscillator and the Hamiltonian of a one-dimensional rectangular well, are obtained in the work. Numerical results are obtained using the method based on the expansion in eigenfunctions of the Hamiltonian generating a functional integral. Evaluation of eigenvalues used in the expansion is based on counting the number of matches of signs of terms of the Sturm sequence. Therefore this method is stable to the accumulation of errors and is well implemented on a computer. The proposed method is more effective than the previously known methods for evaluation of functional integrals over the space of functions given on long intervals.

Keywords: functional integrals, harmonic oscillator, anharmonic oscillator, one-dimensional rectangular well

For citation. Malyutin V. B. Evaluation of functional integrals generated by some nonrelativistic Hamiltonians. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2018, vol. 54, no. 1, pp. 44–49 (in Russian).

Введение. Одним из направлений в теории функционального интегрирования является разработка методов приближенного вычисления функциональных интегралов для различных типов интегралов и мер. Существуют разные подходы для вычисления различных типов функциональных интегралов [1–4]. Среди них отметим метод Монте-Карло для приближенного вычисления функциональных интегралов [1, 5, 6], основанный на том, что вычисляемый интеграл представляется как математическое ожидание некоторой случайной величины, среднее арифметическое независимых реализаций которой дает приближенное значение данному интегралу. Еще один метод приближенного вычисления функциональных интегралов – применение приближенных формул, являющихся точными на классе функциональных многочленов заданной степени (см. [1–4] и библиографические списки к ним). Такие формулы называются формулами заданной степени точности, широко применяются для приближенного вычисления функциональных интегралов и особенно эффективны для функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках малой длины.

В данной работе рассматривается задача приближенного вычисления функциональных интегралов по условной мере Винера 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

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

$$= \lim_{n\to\infty}\int_R (n-1)\int_R \exp\left\{-\sum_{j=1}^n (t_j - t_{j-1})V(x_j)\right\} \prod_{j=1}^n K^0_{t_j - t_{j-1}}(x_{j-1}, x_j)dx_1 \ldots dx_{n-1}, \tag{2}$$

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 $\exp(tH_0)$, $H_0 = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $s = t_0 < t_1 < \ldots < t_n = t$, $x_j = x(t_j)$.

Говорят, что функциональный интеграл (1) порождается гамильтонианом $H = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V$.

Для указанных интегралов можно использовать приближенные методы, разработанные в [1–4]. В работе [7] был предложен метод вычисления указанных функциональных интегралов, основанный на разложении по собственным функциям гамильтониана, порождающего функциональный интеграл. Предложенный подход более эффективен по сравнению с методами, полученными в [1–4], при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках $[s,t]$ большой длины.

В [7] основное внимание уделено описанию метода. В разделе 1 данной работы приведем его краткое описание. В разделах 2–4 подробно остановимся на численном эксперименте и апробации метода для функциональных интегралов, порожденных гамильтонианом гармонического осциллятора, гамильтонианом ангармонического осциллятора и гамильтонианом одномерной прямоугольной потенциальной ямы.

Так как точные значения известны только для гармонического осциллятора, приведем результаты численного эксперимента для различных возрастающих значений параметров, характеризующих точность вычислений.

1. Описание метода. Для вычисления интегралов вида (1) используется приближенное равенство [7]

$$\int \exp\left\{-\int_s^t V(x(\tau))d\tau\right\} d\mu_{x_s,x_t}(x) \approx \sum_{n=0}^m \psi_n(x_s)\psi_n(x_t)\exp\{-\lambda_n(t-s)\}. \tag{3}$$

где $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ – собственные значения и собственные функции оператора $H = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V$; m – число слагаемых, которое мы выбираем в зависимости от желаемой точности вычислений.

Для вычисления $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ рассматриваем функции $\psi_n(x)$ на интервале $-A \le x \le A$ (A – некоторое положительное число), и 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 $V_j = V(x_j) = V(-A + jh),\ 1 \le j \le N-1,\ h = \frac{2A}{N}$.

Далее методом последовательностей Штурма [8] вычисляются собственные значения $-\overline{\lambda}_j$ матрицы $\overline{H}$ и методом обратной итерации [8] – собственные векторы $\overline{\psi}_j$ матрицы $\overline{H}$. Нахождение собственных значений с помощью последовательностей Штурма основано на подсчете числа совпадений знаков у следующих друг за другом членов последовательности, потому этот метод устойчив к накоплению погрешностей и хорошо реализуется на ЭВМ.

2. Гармонический осциллятор. В данном разделе рассматривается приближенное вычисление функциональных интегралов

$$\int \exp\left\{-\frac{1}{2}\int_s^t x^2(\tau)d\tau\right\} d\mu_{x_s,x_t}(x),$$

порожденных гамильтонианом гармонического осциллятора

$$H = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}x^2. \tag{4}$$

В табл. 1–3 приведены приближенные значения интеграла, порожденного гамильтонианом (4) для $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $t = 1$, $t = 10$ и различных значений параметров A, N, m.

Таблица 1. **Приближенные значения интеграла, $s = 0$, $t = 1$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $m = 0$**
Table 1. **Approximate values of the integral, $s = 0$, $t = 1$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $m = 0$**

	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	$N = 100$
$A = 4$	0,3489	0,3435	0,3435	–	–
$A = 5$	–	0,3440	0,3514	0,3430	–
$A = 6$	–	–	0,3463	0,3434	0,3429

Таблица 2. **Приближенные значения интеграла, $s = 0$, $t = 10$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $m = 0$**
Table 2. **Approximate values of the integral, $s = 0$, $t = 10$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $m = 0$**

	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	$N = 100$
$A = 4$	0,004044	0,003861	0,003830	–	–
$A = 5$	–	0,003883	0,003850	0,003824	–
$A = 6$	–	–	0,003892	0,003829	0,003823

Таблица 3. **Приближенные значения интеграла, $s = 0, x_0 = 0, x_t = 0, N = 100$**
Table 3. **Approximate values of the integral, $s = 0, x_0 = 0, x_t = 0, N = 100$**

	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$
$t = 1$	0,3429	0,3429	0,3663
$t = 10$	0,003823	0,003823	0,003823

Точные значение интеграла при $s = 0$ получаются из равенства [9, 10]

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

При $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $t = 1$ точное значение равно 0,3680; при $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $t = 10$ оно составляет 0,003801.

Из численных результатов, приведенных в табл. 3, видно, что при $t = 1$ слагаемое с номером $m = 2$ дает вклад в приближенное значение интеграла при вычислении с точностью до двух значащих цифр и выше. При $t = 10$ слагаемое с номером $m = 2$ не дает вклада в приближенное значение интеграла при вычислении с точностью до четырех значащих цифр. Это обусловлено тем, что чем больше $t - s$, тем быстрее убывают слагаемые в сумме в правой части приближенного равенства (3).

3. Ангармонический осциллятор. В данном разделе рассматривается приближенное вычисление функциональных интегралов

$$\int \exp\left\{-\frac{1}{2}\int_s^t (x^2(\tau) + x^4(\tau))d\tau\right\} d\mu_{x_s, x_t}(x),$$

порожденных гамильтонианом ангармонического осциллятора

$$H = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}x^4. \tag{5}$$

В табл. 4–6 приведены приближенные значения интеграла, порожденного гамильтонианом (5) для $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $t = 1$, $t = 10$ и различных значений параметров A, N, m.

Таблица 4. **Приближенные значения интеграла, $s = 0, t = 1, x_0 = 0, x_t = 0, m = 0$**
Table 4. **Approximate values of the integral, $s = 0, t = 1, x_0 = 0, x_t = 0, m = 0$**

	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	$N = 100$
$A = 4$	0,3562	0,3496	0,3477	–	–
$A = 5$	–	0,3505	0,3501	0,3483	–
$A = 6$	–	–	0,3496	0,3486	0,3486

Таблица 5. **Приближенные значения интеграла, $s = 0, t = 10, x_0 = 0, x_t = 0, m = 0$**
Table 5. **Approximate values of the integral, $s = 0, t = 10, x_0 = 0, x_t = 0, m = 0$**

	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	$N = 100$
$A = 4$	0,000761	0,000684	0,000670	–	–
$A = 5$	–	0,000697	0,000679	0,000670	–
$A = 6$	–	–	0,000684	0,000673	0,000670

Таблица 6. **Приближенные значения интеграла, $s = 0, x_0 = 0, x_t = 0, N = 100$**
Table 6. **Approximate values of the integral, $s = 0, x_0 = 0, x_t = 0, N = 100$**

	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$
$t = 1$	0,3486	0,3486	0,3549
$t = 10$	0,000670	0,000670	0,000670

Здесь, как и в случае гармонического осциллятора, при $t = 1$ слагаемое с номером $m = 2$ дает вклад в приближенное значение интеграла при вычислении с точностью до двух значащих цифр и выше. При $t = 10$ слагаемое с номером $m = 2$ не дает вклада в приближенное значение интеграла при вычислении с точностью до трех значащих цифр.

4. Одномерная прямоугольная яма. В данном разделе рассматривается приближенное вычисление функциональных интегралов

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

порожденных гамильтонианом для одномерной прямоугольной ямы с абсолютно твердыми стенками

$$H = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x), \tag{6}$$

где $V(x) = -\dfrac{\pi^2}{8a}$ при $-a < x < a$, $V(x) = +\infty$ при $|x| \geq a$.

В табл. 7, 8 приведены приближенные значения интеграла, порожденного гамильтонианом (6) для $a = 1$, $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $t = 1$, $t = 10$ и различных значений параметров N, m.

Таблица 7. **Приближенные значения интеграла, $a = 1$, $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $m = 0$**
Table 7. **Approximate values of the integral, $a = 1$, $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $m = 0$**

	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	$N = 100$
$t = 1$	1,01303	1,00707	1,00399	1,00539	1,00061
$t = 10$	0,99015	1,00132	1,00193	1,00338	1,00017

Таблица 8. **Приближенные значения интеграла, $a = 1$, $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $N = 100$**
Table 8. **Approximate values of the integral, $a = 1$, $s = 0$, $x_0 = 0$, $x_t = 0$, $N = 100$**

	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$
$t = 1$	1,00061	1,00061	1,00066
$t = 10$	1,00017	1,00017	1,00017

Здесь, как и в случае гармонического и ангармонического осциллятора, при $t = 1$ слагаемое с номером $m = 2$ дает вклад в приближенное значение интеграла при вычислении с точностью до шести значащих цифр и выше. При $t = 10$ слагаемое с номером $m = 2$ не дает вклада в приближенное значение интеграла при вычислении с точностью до шести значащих цифр.

Таким образом, в работе приведены результаты численной апробации метода вычисления функциональных интегралов, порожденных гамильтонианами специального вида. Метод основывается на разложении по собственным функциям гамильтониана, порождающего функциональный интеграл. Вычисление собственных значений, используемых в разложении, основано на подсчете числа совпадений знаков у следующих друг за другом членов последовательности Штурма. Потому этот метод характеризуется быстродействием и устойчивостью к накоплению погрешностей.

Список использованных источников

1. Янович, Л. А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам / Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника, 1976. – 382 с.

2. Егоров, А. Д. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов / А. Д. Егоров, П. И. Соболевский, Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника, 1985. – 309.

3. Egorov, A. D. Functional Integrals: Approximate Evaluation and Applications / A. D. Egorov, P. I. Sobolevsky, L. A. Yanovich. – Dordrecht: Kluwer Academic Pablishers, 1993. – 400 p.

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

6. 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.

7. 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.

8. Wilkinson, J. H. The Algebraic Eigenvalue Problem / J. H. Wilkinson. – Oxford, 1965. – 662 p.

9. Glimm, J. Quantum Physics. A Functional Integral Point of View / J. Glimm, A. Jaffe. – Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag 1981. – 417 p.

10. Risken, H. The Fokker-Plank Equation: Methods of Solution and Applications / H. Risken. – Springer-Verlag. 1984. – 413 p.

References

1. Yanovich L. A. *Approximate Evaluation of Continual Integrals with Respect to Gaussian Measures*. Minsk, Nauka i tekhnika Publ., 1976. 382 p. (in Russian).

2. Egorov A. D., Sobolevsky P. I., Yanovich L. A. *Approximate Methods of Evaluation of Continual Integrals*. Minsk, Nauka i tekhnika Publ., 1985. 309 p. (in Russian).

3. Egorov A. D., Sobolevsky P. I., Yanovich L. A. *Functional Integrals: Approximate Evaluation and Applications*. Dordrecht, Kluwer Academic Pablishers, 1993. 400 p. Doi: 10.1007/978-94-011-1761-6

4. Egorov A. D., Zhidkov E .P., Lobanov Yu. Yu. *Introduction to Theory and Applications of Functional Integration*. Moscow, Fizmatlit Publ., 2006. 400 p. (in Russian).

5. Elepov B. S., Kronberg A. A., Mikhailov G. A., Sabelfeld K. K. *Solution of Boundary Value Problems by Monte-Carlo Method*. Novosibirsk, Science Publ., 1980. 174 p. (in Russian).

6. Sabelfeld K. K. Approximate evaluation of Wiener continual integrals by Monte-Carlo method. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki = Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1979, vol. 19, no. 1, pp. 29–43 (in Russian).

7. Malyutin V. B. Evaluation of functional integrals using 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).

8. Wilkinson J. H. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford, 1965. 662 p.

9. Glimm J., Jaffe A. *Quantum Physics. A Functional Integral Point of View*. New York, Springer-Verlag, 1981. 417 p. Doi: 10.1007/978-1-4684-0121-9

10. Risken H. *The Fokker-Plank Equation: Methods of Solution and Applications*. Springer-Verlag, 1984. 413 p. Doi: 10.1007/978-3-642-96807-5

Информация об авторе

Малютин Виктор Борисович – доктор физико-математических наук, 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

Victor B. Malyutin – D. 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