ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)
УДК 519.6 Поступила в редакцию 26.11.2018
https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-2-152-157 Received 26.11.2018

В. Б. Малютин

Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

ПРИБЛИЖЕННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЦЕНТРОБЕЖНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Аннотация. Рассматривается приближенное вычисление функциональных интегралов от функционалов специального вида, содержащих центробежный потенциал. Под центробежным потенциалом понимается потенциал, возникающий за счет центробежной силы. Сочетание метода разложения по собственным функциям гамильтониана, порождающего функциональный интеграл, и метода последовательностей Штурма для вычисления собственных значений используется для приближенного вычисления функциональных интегралов. Это сочетание позволяет значительно уменьшить счетное время и объем используемой памяти компьютера по сравнению с другими известными методами.

Ключевые слова: функциональные интегралы, центробежный потенциал, собственные функции гамильтониана, последовательность Штурма

Для цитирования. Малютин, В. Б. Приближенное вычисление функциональных интегралов, содержащих центробежный потенциал / В. Б. Малютин // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2019. – Т. 55, № 2. – С. 152–157. https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-2-152-157

V. B. Malyutin

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

APPROXIMATE EVALUATION OF FUNCTIONAL INTEGRALS WITH CENTRIFUGAL POTENTIAL

Approximate evaluation of functional integrals containing a centrifugal potential is considered. By a centrifugal potential is understood a potential arising from a centrifugal force. A combination of the method based on expanding into a series of the eigenfunctions of a Hamiltonian generating a functional integral and the Sturm sequence method for the eigenvalue problem is used for approximate evaluation of functional integrals. This combination allows one to significantly reduce a computation time and a used computer memory volume in comparison to other known methods.

Keywords: functional integrals, centrifugal potential, eigenfunctions of Hamiltonian, Sturm sequences

For citation. Malyutin V. B. Approximate evaluation of functional integrals with centrifugal potential. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2019, vol. 55, no. 2, pp. 152–157 (in Russian). https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-2-152-157

Введение. Широкое применение функциональных интегралов стимулирует развитие методов их приближенного вычисления. К настоящему времени получены значительные результаты в области приближенного вычисления функциональных интегралов. Существуют подходы, которые основаны на дискретизации пространства и времени, и подходы, при которых не требуется дискретизация, а аргумент подынтегрального функционала остается элементом исходного пространства. В рамках подхода, не требующего дискретизации, разработан метод приближенного вычисления функциональных интегралов, основанный на использовании приближенных формул, являющихся точными на классе функциональных многочленов заданной степени (см. монографии [1–4]). В работах [5, 6] был предложен метод вычисления функциональных интегралов, который базируется на разложении по собственным функциям гамильтониана, порождающего функциональный интеграл. Предложенный подход более эффективен по сравнению с методами, использующими дискретизацию, так как требует значительно меньшего счетного времени и памяти ЭВМ. Также он более эффективен по сравнению с методами, полученными в [1–4], при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках большой длины. В [5, 6] предложенный подход был апробирован для функциональных интегралов, порожденных гамильтонианом гармонического осциллятора, гамильтонианом ангармонического осциллятора и гамильтонианом одномерной прямоугольной потенциальной ямы. При описании частиц в квантовой механике используются потенциалы, содержащие переменную в знаменателе, например, Coulomb potential $V(x)=\frac{-c}{x}$, shifted Coulomb potential $V(x)=\frac{-c_1}{x}+c_2$, Kratzer potential $V(x)=\frac{c_1}{x^2}-\frac{c_2}{x}+c_3$, Davidson potential $V(x)=c_1x^2+\frac{c_2}{x^2}$ и др. В связи с этим в настоящей работе рассматривается применение метода, предложенного в [5, 6], для приближенного вычисления функциональных интегралов, содержащих потенциалы с переменной в знаменателе, а именно: исследуется случай центробежного потенциала, для которого можно сравнить приближенные и точные значения. В разделе 1 вводится функциональный интеграл и дается краткое описание метода для его вычисления. В разделе 2 приводятся результаты численного эксперимента, которые свидетельствуют, что предложенный метод позволяет получить хорошие приближенные значения и для функциональных интегралов от функционалов, содержащих в знаменателе функции, по которым выполняется интегрирование.

1. Описание метода. В данном разделе рассматриваются функциональные интегралы по условной мере Винера, определяемые равенством

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

$$=\lim_{n\to\infty}\int_R(n-1)\int_R\exp\left\{-\sum_{j=1}^n(t_j-t_{j-1})V_{эф}(x_j)\right\}\prod_{j=1}^n K^0_{t_j-t_{j-1}}(x_{j-1},x_j)dx_1...dx_{n-1}, \qquad (1)$$

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

Говорят, что функциональный интеграл (1) порождается гамильтонианом

$$H=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-V_{эф}(x).$$

Мы рассматриваем эффективный потенциал $V_{эф}(x)$ в виде $V_{эф}(x)=\frac{c}{x^2}+V(x)$, где $V(x)=+\infty$ при $x<0$. При этом гамильтониан H по виду совпадает с радиальным оператором Шредингера. Выражение $\frac{c}{x^2}$ может быть истолковано как потенциал отталкивания, возникающий за счет центробежной силы, поэтому его обычно называют центробежным потенциалом [7].

Так как $V(x)=+\infty$ при $x<0$, то формулу (1) можно записать в виде

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

$$=\lim_{n\to\infty}\int_0^\infty(n-1)\int_0^\infty\exp\left\{-\sum_{j=1}^n(t_j-t_{j-1})V_{эф}(x_j)\right\}\prod_{j=1}^n K^0_{t_j-t_{j-1}}(x_{j-1},x_j)dx_1...dx_{n-1},$$

т. е. функцию $V_{эф}(x)$ можно рассматривать не на R, а на R^+.

Для вычисления интегралов вида (1) используется приближенное равенство [5, 6]

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

где $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ – собственные значения и собственные функции оператора $H=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-V_{эф}(x)$, 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 $0 < x \le A$ (A – некоторое положительное число), и оператор $H = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_{эф}(x)$ 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 $h^{-2}(x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1})$ и имеющей вид

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

где $V_j = V_{эф}(jh),\ 1 \le j \le N-1,\ h = \frac{A}{N}$.

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. Поэтому, по сравнению с другими известными подходами, данный метод требует значительно меньшего счетного времени и памяти ЭВМ.

2. Численные результаты. В качестве примера рассмотрим вычисление функционального интеграла (1) в случае $V_{эф}(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{5}{16x^2} + x^2\right)$ при $x > 0$, $V_{эф}(x) = +\infty$ при $x < 0$.

Для указанного $V_{эф}(x)$ на рис. 1 приведены точные и приближенные значения интеграла $K(x_s,x_t)$ при $x_s = x_t = x$, т. е. $K(x,x)$, при $s = 0$, $t = 1$, $N = 40$, $m = 0$, $m = 1$.

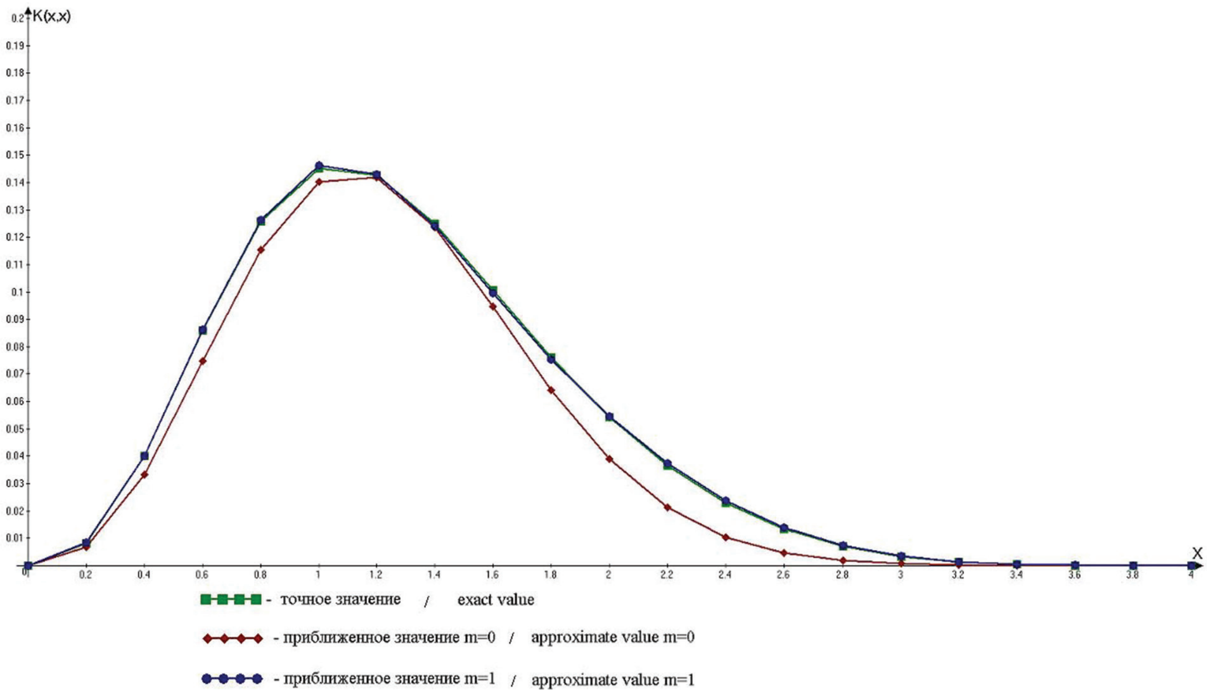

Рис. 1. Точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 1$, $N = 40$, $m = 0$, $m = 1$

Fig. 1. Exact and approximate values of the integral $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 1$, $N = 40$, $m = 0$, $m = 1$

На рис. 2 для этого же $V_{эф}(x)$ приведены точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$ при $s = 0$, $t = 1$, $m = 1$, $N = 10$, $N = 40$.

На рис. 3 для этого же $V_{эф}(x)$ приведены точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$ при $s = 0$, $t = 2$, $N = 40$, $m = 0$, $m = 1$.

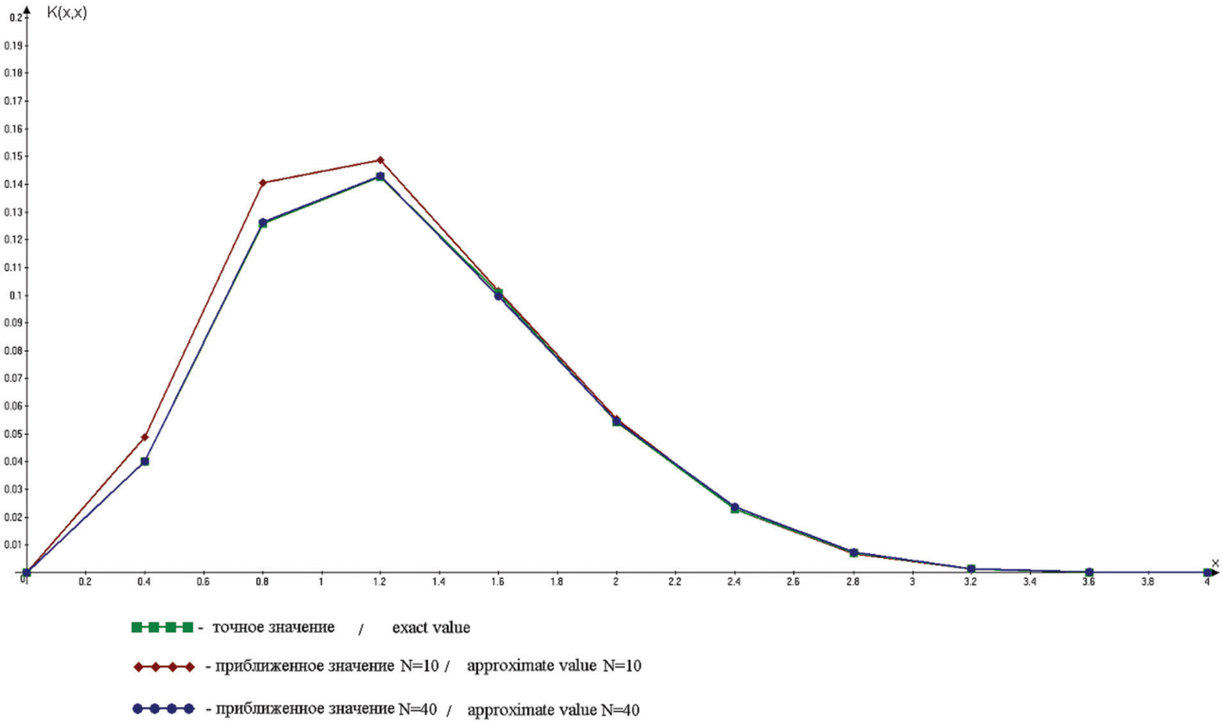

Рис. 2. Точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 1$, $m = 1$, $N = 10$, $N = 40$

Fig. 2. Exact and approximate values of the integral $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 1$, $m = 1$, $N = 10$, $N = 40$

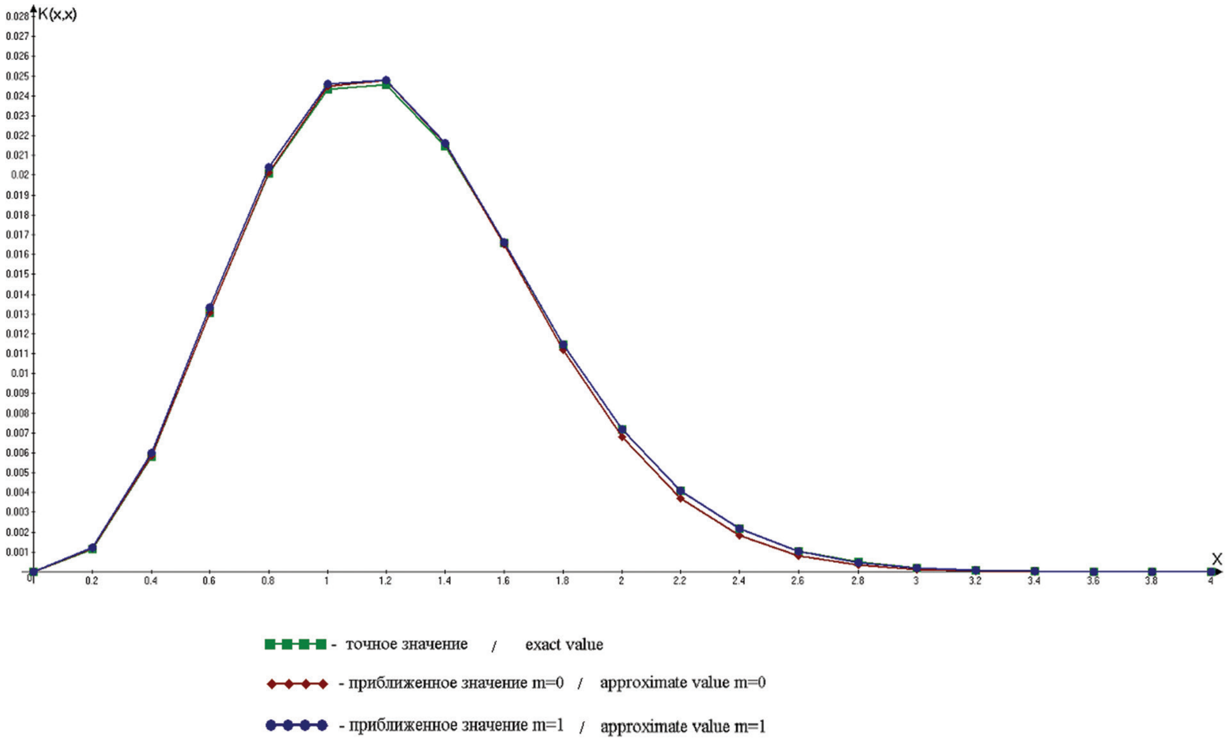

Рис. 3. Точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 2$, $N = 40$, $m = 0$, $m = 1$

Fig. 3. Exact and approximate values of the integral $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 2$, $N = 40$, $m = 0$, $m = 1$

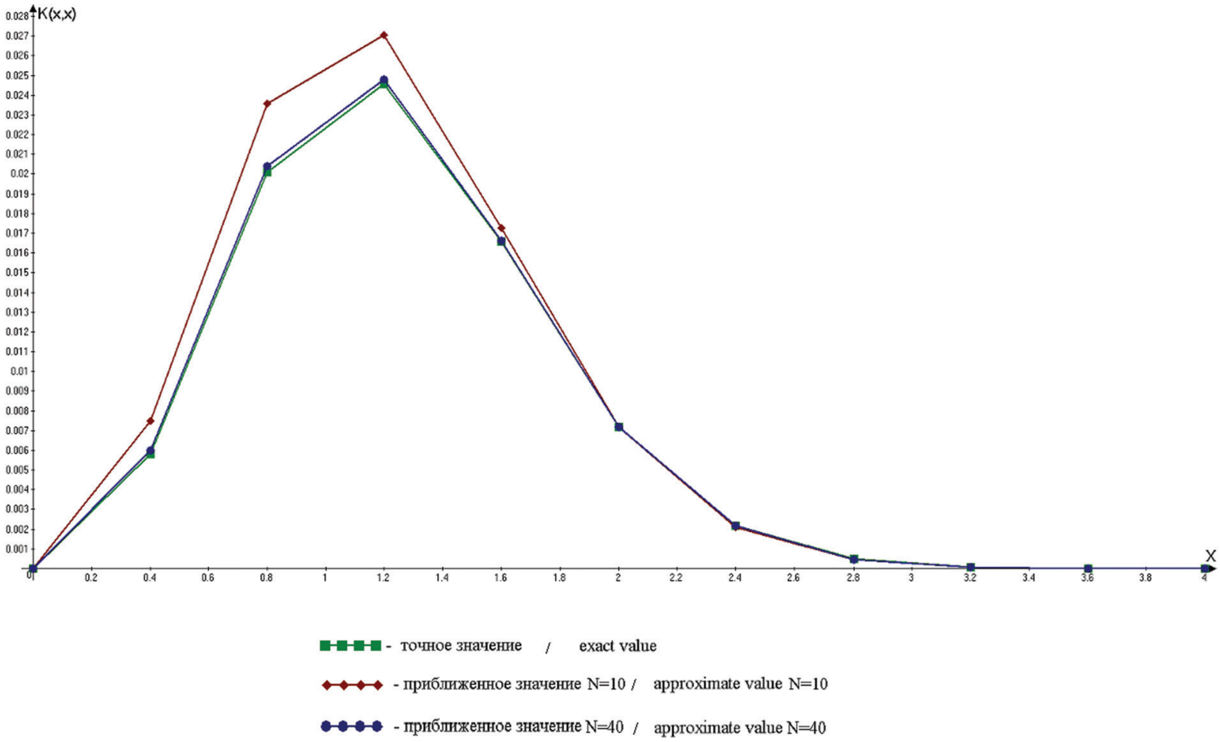

Рис. 4. Точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 2$, $m = 1$, $N = 10$, $N = 40$

Fig. 4. Exact and approximate values of the integral $K(x,x)$, $s = 0$, $t = 2$, $m = 1$, $N = 10$, $N = 40$

На рис. 4 для этого же $V_{эф}(x)$ приведены точные и приближенные значения интеграла $K(x,x)$ при $s = 0$, $t = 2$, $m = 1$, $N = 10$, $N = 40$.

Точные значения для функционального интеграла получены из формулы [9–11]

$$K(x_s, x_t) = \int \exp\left\{-\int_s^t \left(\frac{c_3}{x^2(\tau)} + c_2 x^2(\tau)\right) d\tau\right\} d\mu_{x_s,x_t}(x) =$$

$$= \frac{\gamma\sqrt{x_s x_t}}{2\operatorname{sh}\left(\frac{\gamma}{2}(t-s)\right)} \exp\left\{-\frac{\gamma}{4}(x_s^2 + x_t^2)\operatorname{cth}\left(\frac{\gamma}{2}(t-s)\right)\right\} I_\mu\left(\frac{\gamma x_s x_t}{2\operatorname{sh}\left(\frac{\gamma}{2}(t-s)\right)}\right),$$

где $\gamma = \sqrt{8c_2}$, $\mu = \frac{1}{2}\sqrt{1+8c_3}$, I_μ – модифицированная функция Бесселя порядка μ.

Рис. 1, 3 демонстрируют, что для различных значений t приближенные значения ближе к точным значениям при большем m. Рис. 2, 4 показывают, что для различных значений t приближенные значения ближе к точным значениям при большем N.

Отметим, что время приближенного вычисления функционального интеграла предложенным методом на компьютере с процессором 3.01 ГГц составляет менее одной секунды, а методами, использующими дискретизацию, – десятки минут.

Таким образом, в работе предложен метод вычисления функциональных интегралов, содержащих центробежный потенциал, и приведены результаты его численной апробации. Метод основывается на разложении по собственным функциям гамильтониана, порождающего функциональный интеграл. Вычисление собственных значений, которые применяются в разложении, основано на подсчете числа совпадений знаков у следующих друг за другом членов последовательности Штурма. Поэтому метод требует значительно меньшего счетного времени и объема используемой памяти компьютера по сравнению с другими известными подходами.

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. 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.

6. 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. https://doi.org/10.29235/1561-2430-2018-54-1-44-49

7. Бом, Д. Квантовая теория / Д. Бом. – М.: Наука, 1965. – 727 с.

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

9. Schulmann, L. S. Techniques and Applications of Path Integration / L. S. Schulmann. – New York: John Wiley and Sons, 1981.– 359 p.

10. Grosche, C. Classification of solvable Feynman path integrals / C. Grosche, F. Steiner. // Proc. of the IV Int. Conf. on Path Integrals from meV to MeV, Tutzing, Germany 1992. – Singapore: World Scientific, 1993. – P. 276–288.

11. Bennati, E. A path integral approach to derivative security pricing I: formalism and analytical results / E. Bennati, M. Rosa-Clot, S. Taddei. // Int. J. Theor. Appl. Finan. – 1999. – Vol. 2, № 4. – P. 381–407. https://doi.org/10.1142/s0219024999000200

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. https://doi.org/0.1007/978-94-011-1761-6

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. 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).

6. 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). https://doi.org/10.29235/1561-2430-2018-54-1-44-49

7. Bohm D. *Quantum Theory*. New York, Prentice-Hall, 1951. 534 p.

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

9. Schulmann L. S. *Techniques and Applications of Path Integration*. New York, John Wiley and Sons, 1981. 359 p.

10. Grosche C., Steiner F. Classification of solvable Feynman path integrals. *Proceedings of the IV International Conference on Path Integrals from meV to MeV, Tutzing, Germany, 1992*. Singapore, World Scientific, 1993, pp. 276–288.

11. Bennati E., Rosa-Clot M., Taddei S. A path integral approach to derivative security pricing I: formalism and analytical results. *International Journal of Theoretical and Applied Finance*, 1999, vol. 2, no. 4, pp. 381–407. https://doi.org/10.1142/s0219024999000200

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 – 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