ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 519.644

11-87-64

СИДОРОВА
Ольга Викторовна

ПРИБЛИЖЕННЫЕ ФОРМУЛЫ ПРОИЗВОЛЬНОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ ДЛЯ КОНТИНУАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ ПО ГАУССОВОЙ МЕРЕ

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико–математических наук

Дубна 1987

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, профессор	Жидков Евгений Петрович
кандидат физико-математических наук	Лобанов Юрий Юрьевич

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор	Морозов Владимир Алексеевич
кандидат физико-математических наук	Зябрев Николай Борисович

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Институт математики Академии наук Белорусской ССР.

Автореферат разослан "16" марта 1987 г.

Защита диссертации состоится "16" апреля 1987 г. в 10.30 часов на заседании Специализированного совета Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических
наук Ивоз З.М.Иванченко

__Актуальность__

Континуальное интегрирование представляет собой удобный математический аппарат в различных областях физики и математики: в квантовой механике, в теории поля, теории вероятностей, математической статистике. Он используется при нахождении решений интегральных и дифференциальных уравнений, уравнений в функциональных производных, при исследовании асимптотики собственных значений дифференциальных операторов, в теории приближения функций и т.д.

Широкое применение континуальных интегралов делает актуальной задачу их вычисления. Большим успехом в решении этой задачи явилось создание калибровочной теории на решетке. Введение пространственно-временной решетки позволяет заменить континуальные интегралы обычными интегралами большой кратности, для вычисления которых обычно используется метод Монте-Карло. Однако использование метода Монте-Карло применительно к вычислению континуальных интегралов порой сталкивается с трудностями технического и теоретического характера. К ним относятся, во-первых, медленная сходимость приближенного значения к точному результату с ростом числа интегрирований (порядка $\frac{1}{\sqrt{n}}$, где n - число интегрирований), что приводит к необходимости вычисления интегралов большой кратности ($\geqslant 10^5$). Во-вторых, оценка погрешности и сходимость в методе Монте-Карло имеют вероятностный характер. В связи с этим особую актуальность приобретает разработка методов, отличных от метода Монте-Карло и обладающих высокой эффективностью. К ним относится, в частности, построение приближенных формул, точных на классе функциональных многочленов определенной степени.

Интегрирование по гауссовой мере является полезным инструментом для решения задач теоретической физики. Так, например, в квантовой механике решение уравнения Шредингера выражается в евклидой метрике через интеграл по условной мере Винера (частный случай гауссовой меры) с помощью формулы Фейнмана-Каца. В ряде задач интегрируемые функционалы содержат множитель, который удобно выделить в качестве весового. В связи с этим возникает необходимость построения приближенных формул с весом.

Постановка задачи

Рассматривается интеграл Лебега I в сепарабельном пространстве Фреше X от действительного функционала $F[x]$ по гауссовой мере $\mu(x)$:

$$I = \int_X F[x]\, d\mu(x). \tag{I}$$

Для приближенного вычисления интеграла (I) известны различные приближенные формулы, например:

$$I \approx \int_{R^m} F\Big[\sum_{k=1}^{m} c_k^{(m)} \theta(v_k)\Big]\, d\nu(v_1) \cdot \ldots \cdot d\nu(v_m)\,; \tag{2}$$

$$I \approx \int_{R^n} \exp\Big\{-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} u_k^2\Big\} F\Big[\sum_{k=1}^{n} u_k e_k\Big]\, du_1 \cdot \ldots \cdot du_n, \tag{3}$$

где величины $c_k^{(m)},\ e_k,\ \theta(v),\ \nu(v)$ удовлетворяют условиям, сформулированным в[I]. Формула (2) точна для функциональных многочленов степени $\leqslant 2m+1$, однако для функционала общего вида рост числа интегрирований не гарантирует сходимости приближений к точному результату. Формула (3) обеспечивает сходимость приближений к точному результату, однако скорость сходимости невысока. Задача состоит в построении приближенных формул, точных на классе функциональных многочленов заданной степени и обеспечивающих более быструю сходимость приближений к точному результату с ростом числа интегрирований. В частности, для интегралов по условной мере Винера вида

$$\tilde{I} = \int_{C_0} P[x]\, F[x]\, d_{w^*} x\,,$$

где

$$P[x] = \exp\Big\{\int_0^1 [\lambda p(t) x^2(t) + g(t) x(t)]\, dt\Big\},$$

возникающих в квантовомеханических задачах, требуется построить приближенные формулы.

Цель работы:

- построение приближенных формул произвольного порядка точности для континуальных интегралов по гауссовой мере, обеспечивающих достаточно быструю сходимость приближений к точному значению с ростом числа интегрирований;
- построение и исследование приближенных формул с весом для интегралов по условной мере Винера;
- вычисление интегралов Фейнмана (в евклидовой метрике), возникающих в ряде квантовомеханических задач ., с применением построенных формул.

[I] Л.А.Янович. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам. "Наука и техника", Минск, 1976.

Научная новизна работы

I. Построена новая приближенная формула произвольного порядка точности (т.е., точная для функциональных многочленов произвольной заданной степени) для континуального интеграла по гауссовой мере, заменяющая континуальное интегрирование $(m+n)$-кратным, где m и n – натуральные параметры, гарантирующая быструю сходимость приближенного значения к точному результату с ростом числа интегрирований (при $n \to \infty$). В частности, в случае интеграла по мере Винера сходимость имеет порядок $O(\frac{1}{n^{m+1}})$, что приводит к вычислению интегралов меньшей кратности и требует меньших ресурсов ЭВМ по сравнению с методом Монте-Карло.

2. Построена замена переменной интегрирования для интеграла с весом по условной мере Винера, позволяющая заменить вычисление этого интеграла вычислением интеграла без веса.

3. Впервые построены "элементарная" и "составная" приближенные формулы с весом для интеграла по условной мере Винера.

Доказана сходимость приближений, получаемых по составной формуле, к точному значению с ростом числа интегрирований. Получена оценка скорости сходимости. При фиксированном числе интегрирований проведена оценка остатка.

4. С помощью построенных формул ряд фейнмановских интегралов впервые посчитан без применения решеточной дискретизации.

Практическая ценность

Ряд физических величин можно выразить через континуальные интегралы по некоторой гауссовой мере, в частности, через интегралы с весом по условной мере Винера. Для их вычисления можно воспользоваться полученными в диссертации приближенными формулами. Как показано в диссертации на примере вычисления интегралов Фейнмана, такой способ в ряде случаев оказывается более эффективным, чем способы, предложенные в других работах, т.к. приводит к вычислению интегралов меньшей кратности (при такой же или более высокой точности результатов) и позволяет экономить счетное время и память ЭВМ.

Апробация работы

Работы, положенные в основу диссертации, докладывались на научных семинарах ОИЯИ, на Международном конгрессе по вычислительной и прикладной математике (Бельгия, 1986) и на Всесоюзной школе по численным методам и математическому моделированию (Шушенское, 1986).

Публикации

Диссертация основана на результатах 7 печатных работ, опубликованных в виде сообщений и препринтов ОИЯИ, в сборнике: "Краткие сообщения ОИЯИ", в тезисах докладов Международного конгресса по вычислительной и прикладной математике (Бельгия, I986) и в сборнике тезисов докладов Всесоюзной школы по численным методам и математическому моделированию (Шушенское, I986).

Объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Общий объем составляет I32 страницы. Диссертация содержит I3 рисунков, I7 таблиц и список литературы (70 наименований).

Содержание диссертации

Во введении отражено развитие теории приближенного вычисления континуальных интегралов. Сформулированы некоторые из основных результатов, полученных в этой области. Обоснована актуальность развития приближенных методов вычисления континуальных интегралов, отличных от методов Монте-Карло.

Глава I посвящена построению и исследованию составных приближенных формул произвольного порядка точности для интегралов по гауссовой мере. В § I для интеграла (I) построена составная приближенная формула, которая заменяет континуальное интегрирование $(m+n)$-кратным (m и n – натуральные числа):

$$\underline{I} \approx \underline{I}_n^{(m)} = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{R^n} exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} u_k\right\} \int_{R^m} F[\theta^{(m)}(\vec{v}) - S_n(\theta^{(m)}(\vec{v})) + \psi_n(\vec{u})]\, d\nu(v_1) \cdot \ldots \cdot d\nu(v_m) \cdot du_1 \cdot \ldots \cdot du_n, \quad (4)$$

где

$$\vec{v} = (v_1, \ldots, v_m);$$

$$\vec{u} = (u_1, \ldots, u_n);$$

$d\nu(v)$, $\theta^{(m)}(\vec{v})$, $S_n(x)$, $\psi_n(x)$ – определяются согласно /I/. Доказано /I/, что формула (4) точна для функциональных многочленов степени $\le 2m+1$, и приближения, полученные по ней, сходятся к точному значению при $n \to \infty$. В § 2 доказана следующая теорема (Теорема 6 диссертации), которая позволяет оценить скорость сходимости приближений, получаемых по формуле (4), к точному значению при $n \to \infty$, а также при фиксированных m и n оценить погрешность формулы:

Теорема.

Пусть интегрируемый по мере $\mu(x)$ функционал $F[x]$ допускает представление

$$F[x+x_0] = P_{2m+1}[x] + r_{2m+1}[x, x_0],$$

где x_0 – произвольный элемент из X, $P_{2m+1}[x]$ – функциональный многочлен степени $\le 2m+1$, x_0 – может содержаться в нем в качестве параметра;

$$|r_{2m+1}[x, x_0]| \le (A(x,x))^{m+1} \cdot$$

$$\cdot \{L_1 \cdot exp(L_2 A(x+x_0, x+x_0)) + L_3 exp(L_2 A(x_0, x_0))\};$$

квадратичная форма $A(x,x)$ удовлетворяет условиям:

$$A(x,x) = \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k (x, e_k)^2_{\mathcal{H}}; \quad \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k < \infty; \quad \gamma_k \ge 0; \quad k=1,2,\ldots;$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k a_k < \infty,$$

где коэффициенты a_k выбираются так, чтобы были выполнены соотношения $(e_k, \theta^{(m)}(\vec{v}))^2_{\mathcal{H}} \le a_k$ для любого $\vec{v} \in R^m$; $L_1, L_2, L_3 > 0$; $1 - 2L_2\gamma_k > \alpha > 0$, $k=1,2,\ldots$. Тогда для остатка составной приближенной формулы имеет место оценка остатка:

$$|\underline{I} - \underline{I}_n^{(m)}| \le H_m \cdot \left(\sum_{k=n+1}^{\infty} \gamma_k\right)^{m+1} + G_m \cdot \left(\sum_{k=n+1}^{\infty} a_k \gamma_k\right)^{m+1}, \quad (5)$$

где G_m, H_m – положительные константы, зависящие от m.

В доказательство теоремы указан путь вычисления величин G_m и H_m. Это дает возможность оценить погрешность результата, полученного по составной формуле (4) при фиксированных m и n, и тем самым гарантировать определенную точность вычисления по этой формуле. В § 3 использование формулы (4) продемонстрировано на примере меры Винера и условной меры Винера. На основании теоремы 6 проведена оценка скорости сходимости приближений, полученных по формуле (4), которая имеет порядок $O(\frac{1}{n^{m+1}})$. На конкретном примере проведено сравнение приближений, полученных по формуле (4) с $m=1$ и с $m=2$, и с результатами использования несоставной формулы (2). Результаты сравнения демонстрируют, что при одинаковом числе интегрирований формула (4) обеспечивает более точный результат, кроме того, приближения, полученные по формуле (4) с $m=2$, точнее, чем при $m=1$. Расчеты на ЭВМ показывают, что скорость сходимости при $m=2$ выше, чем при $m=1$, что согласуется с теоретической оценкой, полученной из Теоремы 6.

В главе 2 построены и исследованы приближенные формулы с весом

$$P[x]=\exp\left\{\int_0^1[\lambda p(t)x^2(t)+g(t)x(t)]dt\right\}$$

для континуальных интегралов по условной мере Винера.

В § I построена линейная замена переменной интегрирования $\varphi(x)$, которая позволяет вычисление интеграла с весом заменить вычислением интеграла без веса (Теорема 7) /2/:

$$\tilde{I}=\int_{C_0}P[x]F[x]d_{w^*}x=\mathcal{D}\cdot\int_{C_0}F[\varphi(x)+a]d_{w^*}x, \qquad (6)$$

где

$$\mathcal{D}=\exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^1(1-s)K(s)ds\right\}\cdot\exp\left\{\frac{1}{2}\int_0^1 x_0^2(t)dt\right\};$$

$K(s)$ – решение уравнения

$$(1-s)K'(s)-(1-s)^2K^2(s)-3K(s)-2\lambda p(s)=0;$$
$$K(1)=-\frac{2}{3}\lambda p(1); \qquad s\in[0,1].$$

$$\varphi(x)=x(t)-\frac{(1-t)}{v(t)}\int_0^t K(s)v(s)x(s)ds;$$
$$v(t)=\exp\left\{\int_0^t(1-s)K(s)ds\right\};$$
$$a(t)=\int_0^t x_0(s)ds-\frac{(1-t)}{v(t)}\int_0^t K(s)v(s)\left[\int_0^s x_0(u)du\right]ds;$$
$$x_0(t)=\int_0^t[K(s)v(s)B(s)-g(s)]ds+C;$$

C определяется из условия $\int_0^1 x_0(s)ds=0;$

$$B(t)=\int_t^1 g(s)\frac{(1-s)}{v(s)}ds.$$

На основании равенства (6) получены приближенные формулы с весом произвольного порядка точности:

I) семейство несоставных приближенных формул с весом, зависящих от натурального параметра m /3/:

$$\int_{C_0}P[x]F[x]d_{w^*}x=\mathcal{D}\cdot\frac{1}{2^m}\underbrace{\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1}}_{m}F[\bar{\theta}_m(\vec{u},\cdot)+a(\cdot)]d\vec{u}, \qquad (7)$$

где

$$\bar{\theta}_m(\vec{u},t)=\sum_{K=1}^{m}c_K^{(m)}\bar{\theta}(u_K,t);$$
$$\bar{\theta}(w,t)=\frac{(1-t)\operatorname{sign}w}{v(t)}\left[1+\int_0^{\min\{|w|,t\}}K(s)v(s)ds\right]-\bar{\rho}(w,t);$$

$$\bar{\rho}(w,t)=\begin{cases}\operatorname{sign}w, & t\le|w|;\\ 0, & t>|w|.\end{cases}$$

Формула (7) заменяет континуальное интегрирование m-кратными и точна для функциональных многочленов степени $\le 2m+1$.

2) Семейство составных приближенных формул с весом, зависящих от натуральных параметров m и n:

$$\tilde{I}\approx\tilde{I}_n^{(m)}=\mathcal{D}\cdot(2\pi)^{-\frac{n}{2}}\int_{R^n}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{K=1}^{n}u_K^2\right\}\cdot$$
$$\cdot\frac{1}{2^m}\underbrace{\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1}}_{m}\Phi[\theta^{(m)}(\vec{v},\cdot)-S_n(\theta^{(m)}(\vec{v},\cdot))+\psi_n(\vec{u},\cdot)]dv_1\ldots dv_m du_1\ldots du_n, \qquad (8)$$

где

$$\Phi[x]=\dot{F}[\varphi(x)+a];$$
$$\theta^{(m)}(\vec{v};t)=\sum_{K=1}^{m}c_K^{(m)}\theta(v_K,t);$$
$$\theta(w,t)=\begin{cases}-t\operatorname{sign}w, & t\le|w|,\\ (1-t)\operatorname{sign}w, & t>|w|.\end{cases}$$

Формула (8) заменяет континуальное интегрирование $(m+n)$-кратным и точна для функциональных многочленов степени $\le 2m+1$. Доказана сходимость остатка формулы (8) к нулю при $n\to\infty$ (при фиксированном m) (Теорема I0), а также проведена оценка остатка при фиксированных m и n (Теорема II), которая имеет вид, аналогичный (5).

В § 4 рассмотрен случай постоянных коэффициентов в весе $P[x]$:

$$p(t)\equiv1; \quad g(t)\equiv g=\mathrm{const}.$$

В этом случае формулы (7) и (8) приобретают простой вид, т.к. $K(s)$ находится в явном виде /3/. В этом случае остаточный член формулы (8) оценивается следующим образом:

$$|\tilde{I}-\tilde{I}_n^{(m)}|\le\mathcal{D}\cdot B^{m+1}\cdot\left\{C_m\frac{1}{n^{m+1}}+H_m\cdot(2m)^{m+1}\cdot\frac{1}{n^{m+1}}\right\},$$

где

$$B=1+2\sqrt{w}+w, \quad w=\frac{(2\lambda)^2}{24}\cdot\frac{\left(1+\sqrt{\frac{\lambda}{2}}\right)^2}{\left(1-\frac{\lambda}{2}\right)^4}.$$

(Теорема I2), откуда следует, что скорость сходимости приближений, получаемых по формуле (8), – $O\left(\frac{1}{n^{m+1}}\right)$.

Использование формул продемонстрировано на численном примере.

В главе 3 построенные в диссертации приближенные формулы применены для вычисления интегралов Фейнмана, которые в евклидовой метрике с помощью формулы Фейнмана-Каца представляются в виде континуальных интегралов по условной мере Винера /4-7/. Проведено сравнение результатов с точными решениями (в том случае, когда они существуют), а также с результатами вычислений других авторов [2-4].

Рассмотрены гармонический и ангармонический осцилляторы с гамильтонианами

$$H_0 = \frac{1}{2}(p^2 + X^2) \quad ; \quad H_g = H_0 + gX^4$$

и система с "двугорбым" потенциалом

$$H_f = H_0 + \frac{1}{2}(X^2 - f^2)^2 .$$

Вычислялись энергии основного и первого возбужденного состояний E_0, E_1, пропагатор $G(\tau) = \langle 0 | x(0) x(\tau) | 0 \rangle$ и квадрат волновой функции:

$$|\varphi_0(X)|^2 .$$

Проведенное сравнение численных результатов показывает, что подход к вычислению интегралов Фейнмана с применением построенных в диссертации приближенных формул является более эффективным, чем способы, предложенные авторами[2-4], т.к. требует меньших ресурсов ЭВМ при достижении такой же или лучшей точности результатов.

В заключении сформулированы основные результаты.

Основные результаты диссертации:

I. Построена составная приближенная формула произвольного порядка точности для вычисления континуальных интегралов по гауссовой мере. Эта формула зависит от двух натуральных параметров m и n и заменяет континуальное интегрирование $(m+n)$ - кратным. Формула точна для функциональных многочленов степени $\leq 2m+1$.

---

[2] Cahill K., Reeder R. Phys. Lett., 1984, 136B, p.77.

[3] Creutz M., Freedman B. Annals of Phys., 1981, No.132, p.427.

[4] ShuryakE.V., Zhirov O.V. Nucl. Phys., 1984, B242, No.2, p.393; Institute of Nuclear Physics, preprint 83-47, Novosibirsk, 1983.

Доказана сходимость результатов, получаемых по этой формуле, к точному значению с ростом числа интегрирования (при $n \to \infty$). Оценена скорость сходимости. При фиксированных m и n оценен остаток формулы, что дает возможность заранее гарантировать точность вычисления по ней.

2. Для интеграла с весом по условной мере Винера построено преобразование переменной интегрирования, позволяющее заменить вычисление интеграла с весом вычислением интеграла без веса.

На основе этого преобразования для интеграла по условной мере Винера построены "элементарная" и составная формулы с весом, точные для функциональных многочленов степени $\leq 2m + 1$.

Составная формула с весом заменяет континуальное интегрирование $(m+n)$-кратным. Для этой формулы доказана сходимость к точному значению при $n \to \infty$, а также оценена скорость сходимости. При фиксированных m и n оценен остаток формулы.

Численные расчеты иллюстрируют преимущество составной приближенной формулы с весом, которая при том же числе интегрирований позволяет получить более точные результаты, чем "элементарная" формула с весом, кроме того точность вычисления по основной формуле с весом медленнее снижается с ростом значений параметров.

3. Построенные в диссертации приближенные формулы применены для вычисления интегралов Фейнмана. С их помощью для гармонического и ангармонического осциллятора и системы с "двугорбым" потенциалом вычислены энергии основного и первого возбужденного состояний системы, пропагатор и квадрат волновой функции основного состояния.

Проведено сравнение результатов расчетов по построенным формулам с точными значениями, а также с результатами, полученными другими авторами, которое позволяет сделать вывод об эффективности использования построенных в диссертации формул, т.к. они приводят к вычислению интегралов меньшей кратности при такой же или более высокой точности результатов, что позволяет экономить счетное время и память ЭВМ.

Результаты диссертации опубликованы в работах:

I. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. Составная приближенная формула произвольного порядка точности для континуальных интегралов по гауссовой мере. Дубна, 1983, 14с. (Сообщение/Объед.ин-т ядерн.исслед.: PII-83-867).

2. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. Об одной линейной замене переменной интегрирования в континуальном интеграле по условной мере Винера. В сб.: Краткие сообщения ОИЯИ №4-84,Дубна,1984,с28-32.

3. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. Приближенные формулы с весом для континуальных интегралов по условной мере Винера, 1984, 15с. (Сообщение/Объед. ин-т ядерн.исслед.: Р11-84-775).
4. Gregus M., Jr., Lobanov Yu.Yu., Sidorova O.V., Zhidkov E.P. On the deterministic computation of functional integrals in application to quantum mechanical problems. In: International Congress on Computational and Applied Mathematics. Leuven, Belgium, July, 1986 (List of Abstracts), p.48; Дубна, 1986, 18с. (Препринт/Объед. ин-т ядерн.исслед.: Е11-86-266).
5. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. Приближенное интегрирование по условной мере Винера в задачах квантовой механики. Гармонический осциллятор. Дубна, 1985, 19с. (Сообщение/Объед. ин-т ядерн.исслед.: Р11-85-764).
6. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. Приближенное интегрирование по условной мере Винера в задачах квантовой механики. Ангармонический осциллятор. Дубна, 1985, 16с. (Сообщение/Объед. ин-т ядерн.исслед: Р11-85-765).
7. Грегуш М., Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. О детерминированном вычислении континуальных интегралов в применении к задачам квантовой механики. В кн.: Вычислительные методы и математическое моделирование (тезисы докладов Всесоюзной школы молодых ученых и специалистов, Шушенское, сентябрь 1986), "Сибирь", Красноярск, 1986, с.71-72.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 февраля 1987 года.