**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**



11-91-456

ШАХБАГЯН
Рубен Роменович

# ПРИБЛИЖЕННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ КРАТНЫХ КОНТИНУАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ ПО ГАУССОВОЙ МЕРЕ

**Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика**

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук**

Дубна 1991

Работа выполнена в Лаборатории Вычислительной Техники и Автоматизации Объединенного Института Ядерных исследований.

Научные руководители:

Доктор физико-математических наук ЖИДКОВ
профессор Евгений Петрович

Кандидат физико-математических ЛОБАНОВ
наук, старший научный сотрудник Юрий Юрьевич

Официальные оппоненты:

Доктор физико-математических наук ЯНОВИЧ
член-корреспондент АН БССР Леонид Александрович

Кандидат физико-математических СЕВАСТЬЯНОВ
наук, доцент Леонид Антонович

Ведущая организация: Вычислительный центр МГУ

Автореферат разослан "19" ноября 1991 г.

Защита диссертации состоится "20" декабря 1991 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 З.М.ИВАНЧЕНКО

## Актуальность

Метод континуального интегрирования приобрел в последние годы достаточно широкое распространение при решении задач в самых разных областях физики. Будучи впервые использованным в квантовой механике Р.Фейнманом (1948г), он получил свое дальнейшее развитие в работах М.Каца (1949г). В качестве аппарата исследования метод функционального интегрирования использовался Р.Фейнманом и А.Хибсом при построении квантовой механики. Вопросам использования этого метода при решении целого класса важных задач квантовой физики посвящены многочисленные исследования. Отметим работы Е.Хопфа (1952г), Н.Н.Боголюбова (1970г), М.Рида и Б.Саймона (1978г) и Дж.Глимма и А.Джаффе (1984г). Столь обширная область применения в значительной мере стимулировала развитие приближенных методов для вычисления континуальных интегралов по мере Винера, являющейся частным случаем гауссовой меры. Первые результаты в этой области восходят к работам Р.Х.Камерона (1951г), И.Ф.Гельфанда, А.С.Фролова и Н.Н.Ченцова (1958г), В.С.Владимирова (1960г), Т.Тобиаса (1966г), А.Г.Конхейма и В.Л.Миранкера (1967г), Г.С.Финлайсона (1968г) и др. Приближенному вычислению континуальных интегралов по гауссовым мерам посвящены монографии Л.А.Яновича (1976г), А.Д.Егорова, П.И.Соболевского и Л.А.Яновича (1985г), И.М.Ковальчика и Л.А.Яновича (1989г). При численном исследовании задач многомерной квантовой механики появляется необходимость приближенного вычисления кратных континуальных интегралов по гауссовым мерам, чему и посвящена настоящая диссертационная работа.

## Цель работы

Разработка численных методов для приближенного вычисления кратных континуальных интегралов по гауссовым мерам.

Численное исследование задач статистической физики методом континуального интегрирования с использованием полученных приближенных формул.

## Научная новизна

Получена новая составная приближенная формула для кратных континуальных интегралов по гауссовой мере, позволяющая заменить континуальный интеграл вычислением кратного риманового интеграла. Доказана сходимость приближений, получаемых по составной формуле, к точному значению и проведена оценка остатка.

Для кратных континуальных интегралов с весом по условной мере Винера построен многомерный аналог линейного преобразования переменной интегрирования, позволяющий заменить вычисление интеграла с весом вычислением интеграла без веса. Доказана теорема об ограниченности обратного преобразования в $L_2$-норме.

Впервые построена приближенная формула для кратных континуальных интегралов с весом по условной мере Винера, точная на классе функциональных многочленов третьей суммарной степени.

Впервые с помощью разработанных в диссертации методов вычислен ряд кратных континуальных интегралов по гауссовой мере. Произведено численное исследование некоторых многомерных задач квантовой статистической физики в рамках континуального подхода (без предварительной дискретизации пространства - времени).

## Практическая ценность

Разработанные в диссертации методы вычисления континуальных интегралов без введения пространственно - временной решетки, могут быть использованы для численного исследования широкого круга задач, решение которых выражается через континуальные интегралы по гауссовой мере, в частности, через кратные интегралы с весом по условной мере Винера. Сравнение численных результатов решенных в диссертации задач квантовой статистической физики с данными других авторов, применяющих метод Монте - Карло на решетках, показывает, что способ, предложенный в диссертации, в ряде случаев



оказывается более эффективным, т.к. приводит к вычислению интегралов меньшей кратности и требует меньших машинных затрат.

## Апробация работы

Работы, положенные в основу диссертации, докладывались на семинарах по вычислительной и прикладной математике ЛВТА ОИЯИ и ЕрФИ. Представлены на Международном конгрессе по вычислительной и прикладной математике (Лювен, Бельгия, 1988г), на 1-ой и 2-ой Всесоюзной конференции по вычислительной физике и математическому моделированию (Волгоград, 1988-1989гг), на 5-ом Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1989г), на Международной конференции по математическому моделированию и прикладной математике (Москва, Вильнюс, 1990г), на 27-ой научной конференции факультета физ.-мат. и естественных наук УДН (Москва, 1991г) а также на международном коллоквиуме "Дифференциальные уравнения и приложения" (Будапешт, 1991г).

## Публикации

Диссертация основана на результатах 9 печатных работ, опубликованных в виде препринтов ОИЯИ, журнальных статей и тезисов докладов конференций.

## Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Общий объем составляет 93 страницы. Диссертация содержит 16 таблиц, 2 рисунка и список литературы ( 77 наименований).

## Содержание диссертации

Введение содержит в себе обзор результатов, полученных в теории приближенного вычисления континуальных интегралов, описана структура и приведены краткое содержание и сведения об апробации диссертационной работы.

Глава 1 посвящена построению составной приближенной формулы для кратных континуальных интегралов по гауссовой мере.

В §1.1 содержатся определения тех понятий, которые будут использоваться на протяжении всего последующего изложения. Здесь же приводится ряд утверждений из теории мер, на которые существенно опираются полученные в диссертации результаты.

В §1.2 построена составная приближенная формула третьей суммарной степени точности для кратного континуального интеграла по гауссовой мере.

Определение. Интеграл Лебега, построенный на декартовом произведении полных сепарабельных метрических пространств $X^m = X \cdot \ldots \cdot X$ по декартовому произведению гауссовых мер $\mu$, называется m-кратным континуальным интегралом по гауссовой мере и обозначается

$$\int_X \overset{(m)}{\cdots} \int_X F(x_1, \ldots, x_m)\, d\mu(x_1) \ldots d\mu(x_m) \equiv \int_{X^m} F(\mathbf{x})\, d\mu^{(m)}(\mathbf{x}) \qquad (1)$$

Теорема 1. Пусть $F(x_1, \ldots, x_m)$ интегрируемый по декартовому произведению гауссовых мер $\mu$ на $X^m$ функционал. Тогда приближенная формула

$$\int_{X^m} F(\mathbf{x})\, d\mu^{(m)}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-N/2} \int_{R^N} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (u^{(i)}, u^{(i)})\right\} \times$$

$$\times \left[\left(1 - \sum_{i=1}^{m} b_i L\{1\}\right) F(\Sigma_1(x_1 \equiv 0, u^{(1)}), \ldots, \Sigma_m(x_m \equiv 0, u^{(m)})) + \right.$$

$$+ \sum_{i=1}^{m} b_i L_{x_i} \left\{ F(\Sigma_1(x_1 \equiv 0, u^{(1)}), \ldots, \right. \qquad (2)$$

$$\left.\left. \Sigma_i(x_i/\sqrt{b_i}, u^{(i)}), \ldots, \Sigma_m(x_m \equiv 0, u^{(m)})) \right\}\right] du + R_N(F),$$

где

$$\Sigma_i(x_i, u^{(i)}) = x_i - S_{n_i}(x_i) + U_{n_i}(u^{(i)}),$$

$$du = du^{(1)} \cdots du^{(m)}, \quad S_{n_i}(x_i) = \sum_{j=1}^{n_i} (e_j, x_i)_{\tilde{H}} e_{j}\text{б}$$

$$U_{n_i}(u^{(i)}) = \sum_{j=1}^{n_i} u_j^{(i)} e_j, \quad N = \sum_{i=1}^{m} n_i$$

точна для функциональных многочленов третьей суммарной степени на $X^m$.

Приближения, полученные по формуле (2), сходятся к точному значению при стремлении всех $n_i (i=1,2,\ldots,m)$ к бесконечности. Этот факт сформулирован и доказан в виде следующей теоремы.

Теорема 2. Пусть для почти всех $v \in R$, относительно меры $\mu(v)$ имеет место сходимость

$$S_{n_i}(\rho(v)) \longrightarrow \rho(v) \text{ при } n_i \longrightarrow \infty, \quad i=1,2,\ldots,m$$

Пусть, далее $F(x)$- непрерывный на $X^m$ функционал, удовлетворяющий почти всюду на $X^m$ условию

$$|F(x)| \le g(A^1(x_1, x_1), \ldots, A^m(x_m, x_m))$$

где $A^k(x_k, x_k)$- неотрицательный квадратичный функционал вида

$$A^k(x, x) ; \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i^k (x_k, e_i)^2_{\tilde{H}}$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i^k < \infty, \quad \gamma_i \ge 0, \quad i=1,2,\ldots$$

$g(x)$- неубывающая по всем переменным, положительная функция, такая что

$$\int_{X^m} \int_R g\,(A^1(x_1, x_1), \ldots, A^k(\rho(v), \rho(v)) + A^k(x_k, x_k), \ldots,$$

$$A^m(x_m, x_m))\, d\nu(v)\, d\mu^{(m)}(x) < \infty$$

Тогда

$$R_N(F) \longrightarrow 0 \text{ при } n_i \to \infty, \quad i=1,2,\ldots,m.$$

В §1.3 доказана теорема, которая позволяет оценить скорость сходимости приближений, получаемых по формуле (2).

Теорема 3. Пусть интегрируемый по мере $\mu^{(m)}(\mathbf{x})$ функционал $F(\mathbf{x})$ представим в виде

$$F(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) = P_3(\mathbf{x}) + r(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0)$$

где $P_3(\mathbf{x})$ - функциональный многочлен третьей суммарной степени, а

$$|r(x;x_0)| \le \prod_{l=1}^{m} (A^l(x_l,x_l))^2 \left[ c_1 \exp\left\{ c_2 A^l(x_l+x_l^0,x_l+x_l^0)\right\} + \right.$$
$$\left. + c_3 \exp\left\{ c_2 A^l(x_l^0,x_l^0)\right\} \right]$$

где $A^l(x_l,x_l)$ те же, что и в теореме 2, $x_0$ - фиксированная точка из $X^m$, $c_i$ - положительные константы (i=1,2,3)

$$\tfrac{1}{2} - c_2\gamma_k^{(l)} \ge 0 \ , \ k = 1,2,\ldots \ , \ i = 1,2,\ldots,m$$
$$\sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k^{(l)} a_k < \infty \ ; \quad (e_k \ , \sqrt{m}\rho(v))^2 \le a_k; \ a_k,v \in R$$

Тогда для погрешности формулы (2) справедлива оценка

$$R_N(F) = O(\prod_{l=1}^{m} (\sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k^{(l)})^2) + \sum_{l=1}^{m} O((\sum_{k=n_l+1}^{\infty} \gamma_k^{(l)} a_k)^2) \qquad (3)$$

В §1.4 сходимость приближений, полученных с использованием формулы (2), к точному значению проиллюстрирована на примере вычисления модельного (берущегося аналитически) интеграла по условной мере Винера. Полученные численные результаты демонстрируют преимущество полученных составных формул перед несоставными, поскольку первые имеют более широкую область применения и обеспечивают получение более точных результатов.

Глава 2 посвящена построению приближенной формулы с весом для кратных континуальных интегралов по условной мере Винера.

Е.П.Жидковым, Ю.Ю.Лобановым и О.В.Сидоровой было получено семейство приближенных формул для однократных континуальных интегралов

$$I = \int_{C_0} P(x)\ F(x)\ d_{W_*}x \qquad (4)$$

где P(x)- весовой функционал вида

$$P(x) = \exp\left\{ \int_0^1 \left[ p(t)x^2(t) + q(t)x(t)\right] dt \right\}$$
$$p(t) \ , \ q(t) \in C\ [0,1]$$

Построение этих формул основывается на свойствах линейного преобразования $x(t) \longrightarrow y(t)$ , задаваемого соотношением

$$y = x + Ax \ , \qquad (5)$$



$$A\ x(t) = (1-t) \int_0^1 B(s)\ x(s)\ ds \quad , \quad B(s) \in C\ [0,1]$$

Преобразование (5) взаимно однозначно отображает пространство C само на себя. Обратное преобразование имеет вид

$$x(t) = \hat{A}\ y(t) = y(t) - \frac{1-t}{W(t)} \int_0^1 B(s)\ W(s)\ y(s)\ ds \qquad (6)$$

где

$$W(t) = \exp\left\{ \int_0^t (1-s)\ B(s)\ ds \right\}$$

В частном случае постоянных коэффициентов

$$p(t) = p \equiv \text{const} \ , \ q(t) = q \equiv \text{const}$$

наиболее часто встречающемся в приложениях, важным свойством линейного преобразования (6) является его ограниченность. Установлению этого факта и посвящён §2.1.

Теорема 4. Для линейного преобразования $\hat{A}$, задаваемого соотношением (6) с постоянным коэффициентом $p(t) = p \le \pi^2/2$ имеет место оценка

$$\| \hat{A}\ x \|_{L_2}^2 \le \beta\ \| x \|_{L_2}^2, \ x \in C$$

где

$$\beta = 1 + w + 2\sqrt{w};$$
$$w = \left( \sin\sqrt{2p}\right)^{-4} \left( \sqrt{2p}\cos\sqrt{2p} - \sin\sqrt{2p}\right)^2 \times$$
$$\times\left[ 1 - \frac{\sin 2\sqrt{2p}}{2\sqrt{2p}}\right]$$

В §2.2 на основе обобщенного на многомерный случай линейного преобразования (5), для кратного континуального интеграла по условной мере Винера

$$I = \int_{C^m} P(x)\ F(x)\ d_{W_*}x$$
$$x = (x_1,\ldots,x_m) \quad , \quad d_{W_*}x = d_{W_*}x_1\ d_{W_*}x_2 \cdots d_{W_*}x_m$$

с весом

$$P(x) = \exp\left\{ \sum_{i=1}^{m} \int_0^1 \left( p_i(t)x_i^2(t) + q_i(t)x_i(t) \right) dt \right\}$$

$p_i(t), q_i(t) \in C\,[0,1]$ для всех $i=1,2,\ldots,m$
построена приближенная формула с весом.

$$I \approx \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \int_0^1 (1-s)\; B_i(s)\; ds \right\} \exp\left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \int_0^1 L_i^2(t)dt \right\} \times$$

$$\times \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \int_{-1}^{1} F(\alpha_1,\ldots,\Psi_i(v)+\alpha_i(\cdot),\ldots,\alpha_m)\; dv \qquad (7)$$

где

$$\Psi_i(v,\cdot) = \hat{A}_i\rho(v,\cdot) = f_i(v,\cdot) - \sigma_i(v,\cdot),$$

$$f_i(v,t) = \operatorname{sign} v\, \frac{1-t}{W_i(t)} \left( 1 + \int_0^{\min(v,t)} B_i(s)\; W_i(s)\; ds \right)$$

$$\sigma_i(v,t) = \begin{cases} \operatorname{sign} v, & t \le |v| \\ 0, & t > |v| \end{cases}$$

для всех $i=1,2,\ldots,m$, а именно доказана следующая

Теорема 5. При выполнении следующих условий:

$B_i(s)$ -решение дифференциального уравнения

$$(1-s)\; B_i'(s) - (1-s)^2\; B_i^2(s) - 3\; B_i(s) = 2\; p_i(s),\; s \in [0,1]$$

с начальным условием

$$B_i(1) = -2/3\; p_i(1)$$

$$W_i(t) = \exp\left\{ \int_0^t (1-s)\; B_i(s)\; ds \right\}$$

$$\alpha_i(t) = \int_0^t L_i(s)\; ds - \frac{1-t}{W_i(t)} \int_0^t B_i(s)\; W_i(s) \times$$

$$\left[ \int_0^s L_i(u)\; du \right] ds$$



$$L_i(t) = \int_0^t \left[ B_i(s)\; W_i(s)\; H_i(s) - q_i(s) \right] ds + c$$

$$H_i(s) = \int_s^1 q_i(u)\, \frac{1-u}{W_i(u)}\, du \quad , \quad \int_0^1 L_i(u)\; du = 0$$

приближенная формула (7) точна для любого функционального многочлена третьей суммарной степени на $C^m$.

В §2.3 формула (7) применяется при приближенном вычислении некоторого модельного интеграла.

Глава 3 посвящена численному исследованию некоторых задач многомерной статистической физики с помощью метода континуального интегрирования. Полученные формулы применялись при вычислении энергии основного состояния и волновой функции n-мерного гармонического осциллятора (§3.1), модели Калоджеро (§3.2) с гамильтонианом

$$H = -\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{1}{2}\,\omega^2 \sum_{i<j} (x_i - x_j)^2 + g \sum_{i<j} (x_i - x_j)^{-2}$$

$\omega, g$ - заданные константы связи.

Проведенное сравнение численных результатов с точными значениями, а во втором случае и с результатами, приведенными в работах других авторов, позволяет сделать вывод о высокой эффективности разработанных в диссертации приближенных методов.

В §3.3 численно исследуется задача о взаимодействии частиц в ядре атома трития (задача о "тритоне"). Соответствующее уравнение имеет вид

$$\left\{ -\sum_{k=1}^{3} \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \sum_{i<j} V(r_{ij}) \right\} \Psi(X_1,X_2,X_3,\beta) =$$

$$= -\frac{\partial\Psi}{\partial\beta}\,(X_1,X_2,X_3,\beta),$$

с потенциалом

$$V(r) = -51.5 \exp\left( -\frac{r^2}{b^2} \right)\ \text{MeV},\ b = 1.6\ F$$

Данная задача не имеет точного решения и представляет большой практический интерес. Ее приближенному решению (в частности, вычислению энергии основного состояния) посвящены многочисленные публикации. Вычисление энергии основного состояния тритона производилось в диссертации с применением полученных приближенных формул. Результат расчета хорошо согласуется с известными из других работ данными, при этом счетное время оказалось меньшим по сравнению с временами, приведенными в этих работах.

В заключении приведен перечень основных результатов.

## Основные результаты

1. Разработан эффективный метод приближенного вычисления кратных континуальных интегралов по гауссовым мерам. Построена составная приближенная формула, точная на классе функциональных многочленов третьей степени. Сформулированы и доказаны теоремы о сходимости аппроксимационной формулы к точному значению и об оценке остатка.
2. Проведено исследование линейного преобразования переменной интегрирования, благодаря которому однократные интегралы с весом по условной мере Винера удается представить ввиде интеграла без веса. Доказана теорема об ограниченности обратного преобразования в $L_2$-норме. Построена приближенная формула с весом третьей степени точности для кратных континуальных интегралов по мере Винера.
3. Полученные приближенные формулы применены в диссертации при вычислении некоторых модельных интегралов и для численного исследования ряда задач квантовой статистической физики, а именно при вычислении квантовомеханических характеристик (энергия основного состояния и волновая функция) m-мерного (m=2,3) гармонического осциллятора и энергии основного состояния модели Калоджеро. Сравнение численных результатов с точными значениями (где это возможно), и с результатами, приведенными в работах других авторов демонстрирует высокую эффективность полученных приближенных формул.
4. Приближенно вычислена энергия основного состояния тритона (задачи о взаимодействии частиц в ядре атома трития). Полученный численный результат согласуется с данными других авторов. Проведенное сопоставление счетного времени позволяет сделать вывод о высокой эффективности разработанного в диссертации приближенного метода.



## Список публикаций

1. Yu.Yu.Lobanov, R.R.Shahbagian, O.V.Sidorova and E.P.Zhidkov. Computation of conditional Wiener integrals by the composite approximation formulae with weight. JINR, E11-88-233,1988;
Submitted to the International Congress on Computational and Applied Mathematics. Leuven, Belgium, 1988;
J.Comp.Appl.Math., V29, 1990, p51-60.

2. Yu.Yu.Lobanov, R.R.Shahbagian and E.P.Zhidkov. On some method for computation of functional integrals in statistical mechanics and quantum field theory. In: 5-th International Symposium on Selected topics in statistical mechanics", Dubna, USSR, 1989;
Singapore a.o.: World Scientific, 1990, p469-476.

3. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. Об одном методе вычисления континуальных интегралов без решеточной дискретизации. Мат.моделирование, т1, No8, 1989, с139-157.

4. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. Вычисление континуальных интегралов квантовой физики с помощью приближенных формул точных на классе функциональных многочленов. В сб.: Выч. физика и мат. моделирование, 1 межвуз.конф., Волгоград, 1988; -Москва: изд УДН, 1989, с35.

5. Yu.Yu.Lobanov, R.R.Shahbagian, O.V.Sidorova and E.P.Zhidkov. On some algoritms for computer evaluation of functional integrals. In: Algorithms and Programs for Solution of Some Problems in Physics, v6, KFKI-1989-62/M, Budapest, 1989, p1-28.

6. Yu.Yu.Lobanov, R.R.Shahbagian and E.P.Zhidkov. Modelling of multidimensional quantum systems by the numerical functional integration. JINR, E11-90-393, 1990;
Submitted to the International Conferance "Mathematical Modelling and Applied Mathematics", Vilnius, USSR, 1990;
In: Mathematical Modelling and Applied Mathematics, Intern. IMACS Conferance, Moscow, Vilnius, USSR, 1990, p156-157.

7.Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. Вычисление функции Грина многомерного уравнения Шредингера методом приближенного континуального интегрирования.
В сб.: Выч. физика и мат. моделирование, 2 межвуз.конф., Волгоград, 1989; -Москва: изд УДН, 1990, с39-42.
8.Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. Приближенное вычисление кратных континуальных интегралов в многомерных задачах квантовой физики. Мат.моделирование, т2, No10, 1990, с110-119.
9.Yu.Yu.Lobanov, R.R.Shahbagian and E.P.Zhidkov. Computation of Green function of the Schródinger-like partial differential equations by the numerical functional integration. JINR, E11-91-353, Dubna, 1991;
Submitted to the International Colloquium "Differential Equations and Applications", Budapest, 1991;
Budapest: J. Bolyai Math. Society, 1991, p24.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 октября 1991 года.