сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-85-764

Е.П.Жидков, Ю.Ю.Лобанов, О.В.Сидорова

ПРИБЛИЖЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО УСЛОВНОЙ МЕРЕ ВИНЕРА В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Гармонический осциллятор

1985

Введение

Метод континуального интегрирования, впервые применённый в квантовой механике Р.Фейнманом [1], широко используется в квантовой физике в настоящее время [2,3]. Этот метод послужил основой для создания калибровочной теории на решетке (см., напр., [4,5]), явившейся большим прогрессом в современной теории поля. В последнее время, однако, некоторые авторы (см. [6]) вычисляют континуальные интегралы с помощью методов, не требующих введения пространственно-временной решетки. Теория на решетке (см. [7]) приводит к необходимости вычисления интегралов большой ($\geqslant 10^5$) кратности, что требует использования мощных ЭВМ с большой оперативной памятью и высоким быстродействием. Кроме того, как отмечается в [6], серьезные проблемы возникают при введении решетки в теории гравитации. В [6] развивается метод вычисления фейнмановских интегралов, основанный на аппроксимации аргумента подынтегрального функционала (т.е. траектории) частичной суммой функционального ряда. Работа [6] посвящена применению метода для решения некоторых задач квантовой механики.

Построение квантовой механики на основе аппарата континуального интегрирования изложено в работе [8]. Обзор существующих методов вычисления интегралов Фейнмана содержится в [9].

Один из способов приближенного вычисления фейнмановских интегралов в евклидовой формулировке теории без введения решетки основан на представлении этих интегралов по траекториям в виде континуальных интегралов по условной мере Винера [10-12] с помощью формулы Фейнмана-Каца [13]. Обзор существующих методов приближенного вычисления континуальных интегралов и вопросы теории содержатся в [12,14,15]. Применение интегрирования по гауссовой мере в квантовой физике рассмотрено в работе [16]. В ней, в частности, обосновывается построение гауссовой меры в континуальном интеграле для $P(\varphi)_2$ - модели. В последнее время вопросы строгого построения меры в континуальных интегралах квантовой физики вызывают большой интерес у многих авторов. В работах [17] осуществляется построение винеровской меры в континуальных интегралах квантовой механики (без перехода к евклидовой метрике).

В настоящей работе для вычисления интегралов Фейнмана используются построенные нами в [18-20] приближенные формулы для континуальных интегралов по условной мере Винера, точные на классе функциональных многочленов заданной степени. Мы сравниваем полученные нами результаты решения конкретных задач квантовой механики с известными точными решениями и с аналогичными результатами работы [6], а также с результатами, полученными в [21,22] путем расчетов на решетке. Работа [21] посвящена применению метода Монте-Карло на одномерной решетке к решению некоторых квантовомеханических задач. В [22] проблема исследуется более подробно и рассматривается применение метода к анализу систем со многими степенями свободы. Для уменьшения погрешности, связанной с конечностью шага решетки a, в [22] предложено аппроксимировать траекторию на отрезках $[t_k, t_{k+1}]$ $(t_k = a\cdot k;\ k=0,1,\dots N;\ t_N = T)$ непрерывной линией, заменяя разность значений потенциала в узлах решетки $a[V(x_{k+1})-V(x_k)]$ интегралом $\int_{t_k}^{t_{k+1}} V(x(t))\,dt$, вычисляемым аналитически для простых систем. Это позволило авторам получить более точный результат при $a \simeq 0{,}5$. В нашем подходе траектория считается непрерывной функцией на всем отрезке $[0,T]$. Так же, как в [6,21,22], в качестве объектов исследования для удобства сравнения нами выбраны такие хорошо изученные квантовомеханические системы, как гармонический осциллятор с гамильтонианом $H_0 = \frac{1}{2}(p^2 + X^2)$ и ангармонический осциллятор с гамильтонианами $H_g = H_0 + gX^4$ и $H_f = H_0 + \frac{1}{2}(X^2 - f^2)^2$. Ангармонический осциллятор привлекает к себе внимание многих авторов благодаря тому, что его можно рассматривать как 1-мерный случай $g\varphi^4$ - теории поля.

Так же, как в [6] и в [21,22], в настоящей работе вычисляются энергии E_0, E_1 основного и первого возбужденного состояний системы, пропагатор $G(\tau) = \langle 0|x(0)x(\tau)|0\rangle$ и квадрат волновой функции основного состояния $|\varphi_0(X)|^2$. Приведенное сравнение численных результатов показывает, что используемый нами подход к вычислению интегралов Фейнмана с применением формул [18-20] является более эффективным, чем способы [6,21,22], поскольку он приводит к вычислению интегралов малой кратности (при такой же или более высокой точности результатов) и, соответственно, требует меньшего счетного времени и памяти ЭВМ. Для нахождения этих интегралов мы использовали детерминированные методы, в частности, квадратурные формулы Гаусса и Чебышева.

В данной работе мы приводим основные соотношения и приближенные формулы для континуальных интегралов и демонстрируем использование метода на примере гармонического осциллятора. Результаты расчетов для ангармонического осциллятора приводятся в следующей работе.

§ 1. Основные соотношения

Рассмотрим квантовомеханическую систему, состоящую из бесспиновой частицы с массой $M=1$, совершающей одномерное движение во внешнем поле с потенциалом $V(X)$. В евклидовой формулировке матричные элементы оператора эволюции (в случае $\hbar = 1$)

$$Z(x_i, x_f, T) = \langle x_f | e^{-HT} | x_i \rangle,$$

где H - гамильтониан системы [23]

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + V ,$$

могут быть записаны в виде континуального интеграла по условной мере Винера [8,13]:

$$Z(x_i, x_f, T) = \int\limits_{C_{0,x_i,T,x_f}} \exp\{-\int_0^T V(x(t))\,dt\}\, d_w x \ . \tag{1}$$

Интегрирование в (1) производится по пространству непрерывных на $[0,T]$ функций, удовлетворяющих условию

$$x(0) = x_i ,$$
$$x(T) = x_f .$$

Уже здесь проявляется отличие от наиболее широко используемого сейчас подхода к фейнмановским интегралам (принятого также в [6,21,22]), а именно, в (1) в показателе экспоненты стоит не действие, а только интеграл от потенциала системы, т.е. отсутствует кинетическая часть. Мы предполагаем, что H имеет чисто дискретный спектр $(V(X) \underset{X\to\infty}{\to} \infty)$. В этом случае

$$H\varphi_n(X) = E_n \varphi_n(X);$$
$$Z(x_i, x_f, T) = \sum_n e^{-E_n T} \varphi_n(x_i)\varphi_n(x_f). \tag{2}$$

Энергия основного состояния системы может быть, следовательно, вычислена как

$$E_0 = \lim_{T\to\infty} f(T), \tag{3}$$

где

$$f(T) = -\frac{1}{T}\ln Z(T); \tag{4}$$

$$Z(T) = \sum_n e^{-E_n T} = \int_{-\infty}^{\infty} Z(X,X,T)\,dX \ . \tag{5}$$

Мы можем определить корреляционную функцию

$$\Gamma(\tau) = \langle x(0), x(\tau) \rangle =$$

$$= \frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} dX \int\limits_{C_{0XTX}} \exp\{-\int\limits_0^T V[u(t)]\,dt\}\, u(0)u(\tau)\, d_w u}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} dX \int\limits_{C_{0,X,T,X}} \exp\{-\int\limits_0^T V[u(t)]\,dt\}\, d_w u} . \qquad (6)$$

В пределе $T \to \infty$ получаем (см. напр. /21/)

$$\lim_{T\to\infty} \Gamma(\tau) = G(\tau) = \langle 0 | x(0) x(\tau) | 0 \rangle = \sum_{n \neq 0} e^{-(E_n - E_0)\tau} |\langle 0 | x | n \rangle|^2. \qquad (7)$$

Как нетрудно видеть, отсюда может быть получена разность энергий основного и первого возбужденного состояний:

$$\Delta E = E_1 - E_0 = -\lim_{\tau\to\infty} \frac{d}{d\tau} \ln G(\tau). \qquad (8)$$

Воспользовавшись теоремой вириала /24/ для преобразования кинетической части гамильтониана

$$\frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle X V'(X) \rangle,$$

мы можем вычислить значение E_0 также следующим образом:

$$E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle = \lim_{T\to\infty} \frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} dX \int\limits_{C_{0XTX}} \exp\{-\int\limits_0^T V[u(t)]\,dt\} [\frac{1}{2} X V'(X) + V(X)]\, d_w u}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} dX \int\limits_{C_{0XTX}} \exp\{-\int\limits_0^T V[u(t)]\,dt\}\, d_w u} . \qquad (9)$$

Далее, из (2) получаем, что квадрат собственной функции гамильтониана, соответствующей основному состоянию системы, может быть найден следующим образом:

$$|\varphi_0(X)|^2 = \lim_{T\to\infty} [e^{E_0 T} Z(X,X,T)] . \qquad (10)$$

Таким образом, для определения интересующих нас величин $(E_0, \Delta E, G(\tau), |\varphi_0(X)|^2)$ мы должны вычислить континуальный интеграл (1) с периодическими граничными условиями $x_i = x_f = X$:

$$\tilde{Z}(X,T) = Z(X,X,T), \qquad (11)$$

а также континуальные интегралы (6) и (9). Рассмотрению используемого нами метода вычисления этих интегралов посвящен следующий параграф.

§ 2. Приближенные формулы для вычисления континуальных интегралов

В работе /18/ нами были получены составные приближенные формулы произвольного порядка точности для континуальных интегралов по гауссовой мере. Рассматривая условную меру Винера как частный случай гауссовых мер /12/, мы получаем следующую приближенную формулу для интегралов от функционала F по пространству функций $x(t) \in C[0,1]$, $x(0) = x(1) = 0$:

$$\int\limits_{C_{0,0,1,0}} F[x]\, d_{w^*} x \approx (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int\limits_{R^n} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^n u_k^2\right) \cdot \frac{1}{2^m} \int\limits_{-1}^{1} \cdots \int\limits_{-1}^{1} F[\rho^{(m)}(v,t) - \rho_n^{(m)}(v,t) + \psi_n(u,t)]\, dv\, du, \qquad (12)$$

где

$$\rho^{(m)}(v,t) = \sum_{i=1}^m c_i^{(m)} \rho(v_i, t); \quad \rho(w,t) = \begin{cases} -t\,\mathrm{sign}\, w, & t \le |w|, \\ (1-t)\,\mathrm{sign}\, w, & t > |w|, \end{cases}$$

$$\rho_n^{(m)}(v,t) = 2\sum_{k=1}^n \frac{1}{k\pi} \sin k\pi t \sum_{i=1}^m c_i^{(m)}\, \mathrm{sign}\, v_i \cos k\pi v_i ;$$

$$\psi_n(u,t) = \sqrt{2} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k\pi} u_k \sin k\pi t ;$$

$[c_k^{(m)}]^2$ – корни многочлена $\quad Q_m(t) = \sum_{k=0}^m (-1)^k \frac{t^{m-k}}{k!}$.

Приближенная формула (12) является точной, когда $F[x]$ представляет собой функциональный многочлен степени $\le 2m+1$. Вопросы сходимости и оценки остатка формулы исследованы в /18/.

Отметим, что в левой части (12) стоит интеграл по нормированной условной мере Винера $d_{w^*}x$, удовлетворяющей

$$\int\limits_{C_{0,0,T,X}} d_{w^*} x = 1 .$$

Переход к нормированной мере осуществляется с помощью соотношения

$$d_w x = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} e^{-\frac{X^2}{2T}} d_{w^*} x .$$

В работах /19,20/ для континуальных интегралов по нормированной условной мере Винера построены и исследованы приближенные формулы с весом:

$$\int_{C_{0,0,1,0}} \exp\left\{\int_0^1 [\lambda p(t)x^2(t)+g(t)x(t)]\,dt\right\} F[x]\,d_{w}x \approx$$

$$\approx \exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^1 (1-s)K(s)\,ds\right\} \exp\left\{\frac{1}{2}\int_0^1 x_0^2(t)\,dt\right\} \times \qquad (13)$$

$$\times \frac{1}{2^m}\int_{-1}^{1}\dots\int_{-1}^{1} F[\tilde{\theta}_m(u,\cdot)+a(\cdot)]\,du_1\dots du_m,$$

где λ – вещественный параметр; $p(t)$, $g(t)$ – заданные функции из $C[0,1]$; $K(s)$ – решение дифференциального уравнения:

$$(1-s)K'(s)-(1-s)^2K^2(s)-3K(s)-2\lambda p(s)=0;\quad s\in[0,1],$$

$$K(1)=-\frac{2\lambda}{3};$$

$$x_0(t)=\int_0^t [K(s)v(s)B(s)-g(s)]\,ds + C,\quad \int_0^1 x_0(s)\,ds=0,$$

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

$$a(t)=\int_0^t x_0(s)\,ds-\frac{1-t}{v(t)}\int_0^t K(s)v(s)\left[\int_0^s x_0(u)\,du\right]ds;$$

$$\tilde{\theta}_m(u,t)=\sum_{k=1}^{m} C_k^{(m)}\tilde{\theta}(u_k,t);\quad \tilde{\theta}(w,t)=f(w,t)-\tilde{\rho}(w,t),$$

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

$$f(w,t)=\operatorname{sign} w\ \frac{1-t}{v(t)}\left[1+\int_0^{\min(|w|,t)} K(s)v(s)\,ds\right];$$

$C_k^{(m)}$ имеют то же значение, что и в формуле (12). Формула (13) также точна для $F[x]$ – функциональных многочленов степени $\le 2m+1$.

В случае $\lambda p(t)=-C_2=const$; $g(t)=-C_1=const$ (13) приобретает вид /20/:

$$\int_{C_{0,0,1,0}} \exp\left\{-\int_0^1 [C_2x^2(t)+C_1x(t)]\,dt\right\} F[x]\,d_{w}x \approx$$

$$\approx \sqrt{\frac{\sqrt{2C_2}}{sh\sqrt{2C_2}}}\ \exp\left\{\frac{-C_1^2}{2C_2\sqrt{2C_2}}\left[th\sqrt{\frac{C_2}{2}}-\sqrt{\frac{C_2}{2}}\right]\right\}\times \qquad (14)$$

$$\times\frac{1}{2^m}\underbrace{\int_{-1}^{1}\dots\int_{-1}^{1}}_{m} F[\tilde{\theta}_m(u,\cdot)+a(\cdot)]\,du_1\dots du_m,$$

где

$$-\frac{\pi^2}{2}<C_2<\infty;$$

$$a(t)=\frac{-C_1}{C_2\, ch\sqrt{\frac{C_2}{2}}}\cdot sh\sqrt{\frac{C_2}{2}}\,t\cdot sh\sqrt{\frac{C_2}{2}}\,(1-t);$$

$$K(s)=\frac{1}{1-s}\left[\sqrt{2C_2}\ cth\sqrt{2C_2}(1-s)-\frac{1}{1-s}\right];\quad v(s)=\frac{(1-s)\,sh\sqrt{2C_2}}{sh\sqrt{2C_2}(1-s)}.$$

Наряду с формулами (12)-(14) мы будем также пользоваться "элементарной" формулой /12/:

$$\int_{C_{0,0,1,0}} F[x]\,d_{w}x \approx \frac{1}{2^m}\underbrace{\int_{-1}^{1}\dots\int_{-1}^{1}}_{m} F[\rho^{(m)}(v,\cdot)]\,dv_1\dots dv_m, \qquad (15)$$

точной для функциональных многочленов степени $\le 2m+1$.

Для вычисления величин (1), (6), (9) с помощью приведенных выше формул необходимо интегралы по пространству функций $u(t)\in C_{0,X,T,X}=\{C[0,T];\ u(0)=X,\ u(T)=X\}$ преобразовать к интегралам по пространству $C_{0,0,1,0}$. Продемонстрируем это на примере $\tilde{Z}(X,T)$. Известно /11,13/, что $Z(X_0,X,t)$ является решением задачи

$$\frac{\partial Z}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 Z}{\partial X^2}-V(X)Z,\qquad X\in(-\infty,\infty);\ t\in(0,T];$$

$$Z(X_0,X,0)=\delta(X-X_0),$$

$$Z(X_0,X,t)\xrightarrow[|X|\to\infty]{} 0.$$

$\tilde{Z}(X_0,T)=Z(X_0,X_0,T)$ – значение этого решения в точке $X=X_0$, $t=T>0$. Сделав замену переменных

$$t=T\cdot t',\qquad X=\sqrt{T}X' \qquad (16)$$

и введя обозначения

$$Q(X_0',X',t')=\sqrt{T}\cdot Z(\sqrt{T}X_0',\sqrt{T}X',Tt'),$$

$$\tilde{V}(X')=T\cdot V(\sqrt{T}X'),$$

где $X_0'=\frac{1}{\sqrt{T}}X_0$, получаем, что $Q(X_0',X',t')$ удовлетворяет

$$\frac{\partial Q}{\partial t'}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 Q}{\partial X'^2}-\tilde{V}(X')Q;\quad X\in(-\infty,\infty),\ t'\in(0,1];$$

$$Q(X_0',X',0)=\delta(X_0'-X');$$

$$Q(X_0',X',t)\xrightarrow[|X'|\to\infty]{} 0.$$

Таким образом,

$$\widetilde{Z}(X_0,T)=\frac{1}{\sqrt{T}}Q\left(\frac{X_0}{\sqrt{T}},\frac{X_0}{\sqrt{T}},1\right)=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{T}}\int\limits_{C_{0,\frac{X_0}{\sqrt{T}},1,\frac{X_0}{\sqrt{T}}}}\exp\left\{-\int_0^1\widetilde{V}[u(t')]\,dt'\right\}d_w u=\frac{1}{\sqrt{T}}\int\limits_{C_{0,0,1,0}}\exp\left\{-\int_0^1\widetilde{V}\left[u(t')+\frac{X_0}{\sqrt{T}}\right]dt'\right\}d_w u.$$

Переходя к нормированной условной мере Винера, получаем

$$\widetilde{Z}(X_0,T)=\frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\int\limits_{C_{0,0,1,0}}\exp\left\{-T\int_0^1 V[\sqrt{T}u(t')+X_0]\,dt'\right\}d_{w^*}u. \qquad (17)$$

После замены переменных (16) в континуальных интегралах (6) и (9) эти соотношения приобретают вид

$$\Gamma(\tau)=\langle x(0)\,x(\tau)\rangle=$$

$$=\frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}X\,dX\int\limits_{C_{0,0,1,0}}\exp\left\{-T\int_0^1 V[\sqrt{T}u(t)+X]\,dt\right\}\left[\sqrt{T}u\left(\frac{\tau}{T}\right)+X\right]d_{w^*}u}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\widetilde{Z}(X,T)\,dX}, \qquad (18)$$

$$E_0=\langle 0|H|0\rangle= \qquad (19)$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\widetilde{Z}(X,T)\,dX}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dX\int\limits_{C_{0,0,1,0}}\exp\left\{-T\int_0^1 V[\sqrt{T}u(t)+X]\,dt\right\}\left[\frac{1}{2}XV'(X)+V(X)\right]d_{w^*}u.$$

Формулы (17)-(19) являются основой для последующих численных расчетов.

§ 3. Гармонический осциллятор

Рассмотрим теперь одномерную квантовомеханическую систему с потенциалом

$$V(X)=\frac{1}{2}X^2,\quad X\in(-\infty,\infty). \qquad (20)$$

Хорошо известно [23], что такая система обладает дискретным энергетическим спектром

$$E_n=n+\frac{1}{2}. \qquad (21)$$

Квадрат волновой функции основного состояния

$$|\varphi_0(X)|^2=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-X^2}. \qquad (22)$$

С помощью метода континуального интегрирования величина E_0 определяется следующим образом: подставляя (20) в соотношение (9) или (19), получаем, что

$$E_0=\lim_{T\to\infty}\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty}X^2\widetilde{Z}(X,T)\,dX}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\widetilde{Z}(X,T)\,dX}=\langle 0|x^2(0)|0\rangle=G(0). \qquad (23)$$

В работе [21] значение E_0 вычислялось на решетке с числом узлов $N=51$ и шагом решетки $a=0,5$. При точном нахождении N-кратного интеграла результат составил

$$E_0^{(N)}=0,447,$$

что следует сравнивать с теоретическим значением

$$E_0=0,5. \qquad (24)$$

При вычислении интеграла путем моделирования $N_E=100$ решеточных конфигураций в работе [21] получено

$$E_0^{(N,N_E)}=0,45.$$

В работе [6] при нахождении $(N=4)$-кратного интеграла с помощью $N_R=100$ моделирований 10000 траекторий получено

$$E_0^{(N,N_R)}=0,4932\pm 0,145.$$

Вычисление потребовало 19x100 с счетного времени на ЭВМ $Vax\,780$. При $N=10$, $N_R=100$ результат составил

$$E_0^{(N,N_R)}=0,4979\pm 0,051.$$

Счетное время, затраченное на вычисление, равнялось 67x100 с.

При интегрировании по условной мере Винера из (17) с учетом (20) получаем

$$\widetilde{Z}(X,T)=\frac{1}{\sqrt{2\pi T}}e^{-\frac{T}{2}X^2}\int\limits_{C_{0,0,1,0}}\exp\left\{-\frac{T}{2}\int_0^1\left[Tu^2(t)+2X\sqrt{T}u(t)\right]dt\right\}d_{w^*}u. \qquad (25)$$

Нетрудно видеть, что с помощью формулы с весом мы легко получаем для $\widetilde{Z}(X,T)$ точный ответ. В самом деле, подставляя в (14)

$$C_1=+XT\sqrt{T};\quad C_2=+\frac{T^2}{2};\quad F[x]\equiv 1, \qquad (26)$$

мы имеем

$$\widetilde{Z}(X,T)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\, sh T}}\exp\left\{-th\frac{T}{2}X^2\right\}. \tag{27}$$

Таким образом, мы можем найти точно значение $E_0^{(T)}$ энергии основного состояния при любом фиксированном T. В соответствии с (23)

$$E_0^{(T)}=\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty}X^2\widetilde{Z}(X,T)dX}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\widetilde{Z}(X,T)dX}. \tag{28}$$

Подставляя сюда (27), получаем

$$E_0^{(T)}=\frac{1}{2}cth\frac{T}{2}. \tag{29}$$

Очевидно, что $E_0^{(T)}\xrightarrow[T\to\infty]{}0{,}5$.

Найдем теперь согласно (28) величину $E_0^{(T)}$ путем вычисления интеграла (25) с помощью составной приближенной формулы. Подставляя в (I2)

$$F(u)=\exp\left\{-\int\limits_0^1[c_2u^2(t)+c_1u(t)]dt\right\},$$

c_1 и c_2 из (26), после некоторых преобразований мы получаем для случая $m=1$

$$\widetilde{Z}(X,T)\approx\widetilde{Z}^{(n)}(X,T)=\frac{1}{\sqrt{2\pi T}}e^{-\frac{T}{2}X^2}\cdot I_0\cdot\prod_{K=1}^{n}I_K;$$

$$I_0=\int\limits_0^1\exp\left\{\frac{T^2}{2}\left[2\sum_{K=1}^{n}\frac{1}{K^2\pi^2}\cos^2K\pi v-v^2+v-\frac{1}{3}\right]\right\}\times \tag{30}$$

$$\times\, ch\left\{XT\sqrt{T}\left[-\frac{1}{2}+V-2\sum_{K=1}^{n}\frac{1}{K^2\pi^2}\cos K\pi v\cdot(\cos K\pi-1)\right]\right\}dv;$$

$$I_K=\frac{1}{\sqrt{1+\frac{T^2}{K^2\pi^2}}}\cdot\exp\left\{\frac{X^2T^3(\cos K\pi-1)}{K^4\pi^4\left(1+\frac{T^2}{K^2\pi^2}\right)}\right\}.$$

Результаты точного вычисления $E_0^{(T)}$ согласно (29) и приближенного вычисления $E_0^{m}\approx E_0^{(T,n)}$ по формулам (28), (30) на ЭВМ CDC-6500 представлены в табл. I. Кратность интегралов, необходимых для вычисления $E_0^{(T,n)}$ с помощью (I2) при $m=1$, составляет $N=n+2$. Приближенное вычисление интеграла по v в (30) и по X в (28) осуществлялось с

относительной погрешностью до 10^{-4}. Из табл. I следует, что хорошие приближения $E_0^{(T,n)}$ к точному результату (24) достигаются уже при сравнительно небольших T и n.

Рассмотрим теперь нахождение квадрата волновой функции основного состояния. В работе /21/ величина $|\varphi_0(X)|^2$ вычислялась на решетке с числом узлов $N=1000$ и шагом $a=1$. Точный результат на такой решетке составил

$$|\varphi_0^{(N)}(X)|^2=0{,}59\cdot e^{-1{,}1X^2}=1{,}05\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-1{,}1X^2}, \tag{31}$$

что следует сравнивать со значением (22). Приближенно функция $|\varphi_0^{(N)}(X)|^2$ вычислялась в /21/ путем усреднения по 300 монте-карловским итерациям. Мы определяем величину $|\varphi_0(X)|^2$ в соответствии с формулой (I0). При точном нахождении континуального интеграла $\widetilde{Z}(X,T)$ по формуле с весом (I4), т.е. на основе выражений (27) и (29), мы получаем при конечном T

$$|\varphi_0(X)|^2=e^{E_0^{(T)}T}\cdot\widetilde{Z}(X,T)=\frac{e^{\frac{T}{2}cth\frac{T}{2}}}{\sqrt{2\, sh T}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-th\frac{T}{2}X^2}. \tag{32}$$

Очевидно, что при $T\to\infty$ $|\varphi_0^{(T)}(X)|^2$ стремится к теоретическому значению

$$|\varphi_0^{(T)}(X)|^2\xrightarrow[T\to\infty]{}\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-X^2}.$$

Значения результата (32) при различных T приведены в табл. 2. Их следует сравнивать с (3I).

При вычислении континуального интеграла (25) по формуле (30) мы получаем

$$|\varphi_0^{(T,n)}(X)|^2=\exp\{E_0^{(T,n)}\cdot T\}\ \widetilde{Z}^{(n)}(X,T), \tag{33}$$

где $E_0^{(T,n)}$ вычисляется согласно (28), (30) при тех же T и n, что и $\widetilde{Z}^{(n)}(X,T)$.

На рис. I сплошной линией показано теоретическое значение (22), пунктирной линией – наилучший результат /21/ на решетке с $N=1000$ (3I), крестиками – полученный нами согласно (33) результат при $T=6$, $n=2$. Интегрирование в (30) осуществлялось с относительной погрешностью до 10^{-5}.

Время вычисления в каждой точке X составляло < 0,I с на ЭВМ CDC-6500. К сожалению, счетное время и ЭВМ, на которой производились расчеты, в работе /2I/ не указаны.

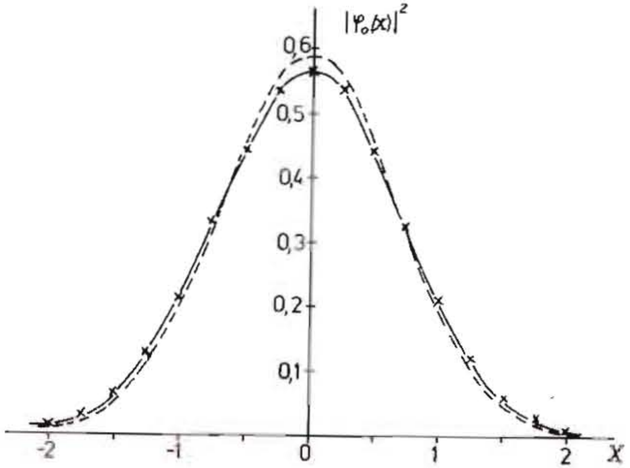

Рис. I. Квадрат волновой функции основного состояния гармонического осциллятора.

Теперь рассмотрим вычисление величин E_0 и $|\varphi_0(X)|^2$ с помощью формул (3)-(5), (I0). При точном нахождении $\tilde{Z}(X,T)$, подставляя (27) в (5), получаем

$$Z(T)=\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{Z}(X,T)\,dX=\frac{1}{2\,sh\frac{T}{2}}\,. \qquad (34)$$

Отсюда в соответствии с (4)

$$E_0^{(T)}=f(T)=\frac{1}{T}\,\ln\left(2\,sh\frac{T}{2}\right). \qquad (35)$$

Для $|\varphi_0^{(T)}(X)|^2$ согласно (I0) и (4)

$$|\varphi_0^{(T)}(X)|^2=\exp\{E_0^{(T)}T\}\cdot\tilde{Z}(X,T)=\frac{\tilde{Z}(X,T)}{Z(T)}\,. \qquad (36)$$

Подставляя (34) и (25) в (36), получаем

$$|\varphi_0^{(T)}(x)|^2=\sqrt{th\frac{T}{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cdot\exp\left\{-th\frac{T}{2}X^2\right\}\xrightarrow[T\to\infty]{}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-X^2}. \qquad (37)$$

Результаты (35) и (37) для различных T приведены в табл. 3.

Таблица I

T	$E_0^{(T)}$	n	$E_0^{(T,n)}$	Счетное время, с
5	0,50678	I	0,5077	I,8
6	0,50248	2	0,5073	3,I
7	0,5009I	3	0,50I0	5,5
8	0,50034	5	0,5002	9,7

Таблица 2

T	$\lvert\varphi_0^{(T)}(X)\rvert^2$
5	$I{,}0345\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}9866}$
6	$I{,}0I50\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}995I}$
7	$I{,}0064\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}9982}$
8	$I{,}0027\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}9993}$

Таблица 3

T	$E_0^{(T)}$	$\lvert\varphi_0^{(T)}(X)\rvert^2$
5	0,49865	$0{,}99328\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}9866}$
6	0,49959	$0{,}99752\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}995I}$
7	0,49987	$0{,}99909\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}9982}$
8	0,49996	$0{,}99966\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-0{,}9993}$

При вычислении (25) с помощью (30)

$$E_0^{(T,n)} = -\frac{1}{T} \ln Z^{(n)}(T);$$

$$|\varphi_0^{(T,n)}(X)|^2 = \frac{\tilde{Z}^{(n)}(X,T)}{Z^{(n)}(T)},$$

где

$$Z^{(n)}(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{Z}^{(n)}(X,T)\,dX .$$

Так, в частности, при $T=6$, $n=2$ мы получаем

$$E_0^{(T,n)} = 0{,}5053.$$

Обратимся теперь к проблеме нахождения разности энергий основного и первого возбужденного состояний. Отметим прежде всего, что для гармонического осциллятора в разложении (7) отличен от нуля только матричный элемент $\langle 0|x|1\rangle$ (см., напр., /23/), поэтому величина $\frac{d}{d\tau}\ln G(\tau)$ в (8) не зависит от τ . Таким образом, для нахождения ΔE может быть вычислена логарифмическая производная $G(\tau)$ в любой точке τ. Так, например, справедливо равенство

$$\Delta E = E_1 - E_0 = -\frac{G'(0)}{G(0)} . \qquad (38)$$

В работе /21/ величина ΔE вычислена на решетке с $N=51$, $a=0{,}5$. При точном нахождении N- кратного интеграла результат составил

$$\Delta E^{(N)} = 0{,}9875;$$

путем моделирования $N_E=100$ решеточных конфигураций было получено

$$\Delta E^{(N,N_E)} = 0{,}99 .$$

Поскольку в /21/ принято $M=0{,}5; V(x)=x^2$, результаты для удобства сравнения разделены на 2. Напомним, что теоретическое значение

$$\Delta E = 1.$$

В работе /6/ в соответствии с (38) ΔE получено для двух значений N с помощью $N_R=100$ вычислений по 10000 траекторий каждое. Результатами являются следующие значения:

$$N=4 \qquad \Delta E^{(N,N_R)} = 0{,}8801 \pm 0{,}202,$$

$$N=10 \qquad \Delta E^{(N,N_R)} = 0{,}9331 \pm 0{,}129 .$$

Счетное время на ЭВМ $Vax\,780$ составило 100x19 с при $N=4$ и 100x67 с при $N=10$.

Мы вычисляем $G(\tau)$ согласно (6), (18) для произвольного $\tau\in[0,T]$. Воспользовавшись формулой с весом (14), для конечного T после некоторых преобразований получаем

$$G^{(T)}(\tau) = \frac{1}{2}\,\mathrm{cth}\,\frac{T}{2}\left(\mathrm{ch}\,\tau - \mathrm{th}\,\frac{T}{2}\,\mathrm{sh}\,\tau\right). \qquad (39)$$

В пределе $T\to\infty$ имеем

$$\lim_{T\to\infty} G^{(T)}(\tau) = G(\tau) = \frac{1}{2} e^{-\tau}. \qquad (40)$$

Из (39) согласно (38) получаем точное значение $\Delta E^{(T)}$:

$$\Delta E^{(T)} = \mathrm{th}\,\frac{T}{2} .$$

Очевидно, что $\Delta E^{(T)} \xrightarrow[T\to\infty]{} \Delta E = 1$. Значения $\Delta E^{(T)}$ для различных T приведены в табл. 4.

Рассмотрим теперь приближенное нахождение $G^{(T)}(\tau)$ с помощью составной формулы. В соответствии с (18)

$$G^{(T)}(\tau) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} X\cdot\tilde{Z}_1(X,T)\,dX}{\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{Z}(X,T)\,dX}, \qquad (41)$$

где

$$\tilde{Z}_1(X,T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\, e^{-\frac{T}{2}X^2} \int_{C_{0,0,1,0}} \exp\left\{-\frac{T}{2}\int_0^1 \left[T u^2(t) + 2X\sqrt{T}\,u(t)\right]dt\right\}\cdot\left[\sqrt{T}\,u\left(\tfrac{\tau}{T}\right)+X\right] d_w u .$$

Подставляя в (12)

$$F[u] = \exp\left\{-\int_0^1\left[c_2 u^2(t) + c_1 u(t)\right]dt\right\}\cdot\left[\sqrt{T}\,u\left(\tfrac{\tau}{T}\right)+X\right],$$

c_1 и c_2 определены в (26), после некоторых преобразований получаем при $m=1$

$$\tilde{Z}_1(X,T) \approx \tilde{Z}_1^{(n)}(X,T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\cdot e^{-\frac{T}{2}X^2}\cdot P_0 \cdot \prod_{k=1}^{n} I_k; \qquad (42)$$

$$P_0 = \int_0^1 \exp\left\{\frac{T^2}{2}\left[2\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k^2\pi^2}\cos^2 k\pi v - v^2 + v - \frac{1}{3}\right]\right\}\times$$

$$\times\Bigg[\mathrm{ch}\left\{XT\sqrt{T}\left[-\frac{1}{2}+v-2\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k^2\pi^2}\cos k\pi v\cdot(\cos k\pi-1)\right]\right\} X\left[1+2\sum_{\ell=1}^{n}\frac{\sin \ell\pi\frac{\tau}{T}\cdot(\cos\ell\pi-1)}{(\ell\pi)^3\left(\frac{1}{T^2}+\frac{1}{\ell^2\pi^2}\right)}\right]+$$

$$+\mathrm{sh}\left\{XT\sqrt{T}\left[-\frac{1}{2}+v-2\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k^2\pi^2}\cos k\pi v\cdot(\cos k\pi-1)\right]\right\}\cdot\sqrt{T}\cdot\left[\bar{\rho}\left(v,\tfrac{\tau}{T}\right)-2\sum_{\ell=1}^{n}\frac{\sin \ell\pi\frac{\tau}{T}}{\ell\pi}\cos\ell\pi v\right]\Bigg]dv,$$

$$\bar{\rho}(v,t) = \begin{cases} -t, & t\le |v|; \\ (1-t), & t>|v| . \end{cases}$$

Величины I_κ определяются согласно (30). Значения $G^{(\tau,n)}(\tau)$, вычисленные по формуле

$$G^{(\tau,n)}(\tau) = \frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} X \widetilde{Z}_1^{(n)}(X,T)\,dX}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \widetilde{Z}(X,T)\,dX}\,, \qquad (43)$$

где $\widetilde{Z}^{(n)}(X,T)$ определяется в (30), при $T=6$, $n=2$ показаны крестиками на рис. 2 в логарифмическом масштабе. Вычисление интегралов в (43), (30), (42) осуществлялось с относительной погрешностью до 10^{-5}.

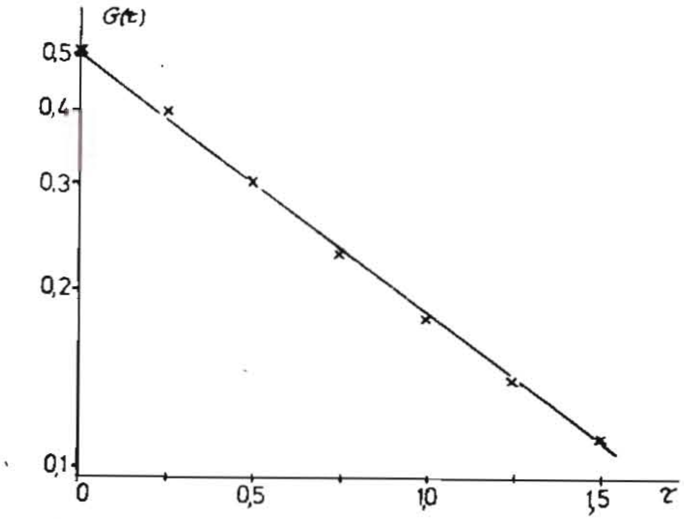

Рис. 2. Зависимость от τ пропагатора системы $G(\tau) = \langle 0|x(0)x(\tau)|0\rangle$. Сплошной линией показано теоретическое значение.

Счетное время на ЭВМ CDC-6500 составило порядка 10 с на точку τ. Очевидно, что имеет смысл рассматривать только случай $\tau \ll \frac{T}{2}$. Сплошной линией (прямой) показана теоретическая зависимость $G(\tau)$, определяемая (40). Логарифмическая производная $G(\tau)$ соответствует тангенсу угла наклона прямой на рис. 2. Проведя по указанным точкам прямую по методу наименьших квадратов, мы получили

$$G^{(\tau,n)}(0) = E_0^{(\tau,n)} = 0{,}5053\,,$$
$$\Delta E^{(\tau,n)} = 1{,}0198\,.$$

В работе /22/ особо рассмотрено вычисление континуального интеграла $Z(0,0,T) = \widetilde{Z}(0,T)$ с абсолютной нормировкой. На рис. 3 точками показаны значения, полученные в /22/ методом Монте-Карло на решетке с $N=25$.

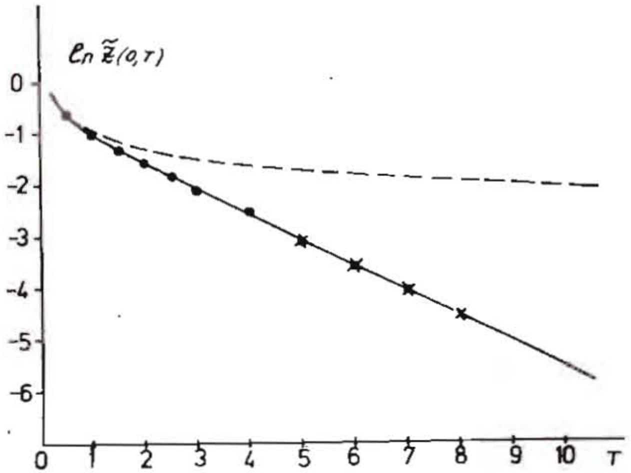

Рис. 3. Континуальный интеграл $\widetilde{Z}(0,T)$ для гармонического осциллятора. Пунктиром показана функция Грина свободной частицы.

Сплошная линия представляет собой теоретический результат:

$$\widetilde{Z}(0,T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\, \mathrm{sh}\, T}}\,, \qquad (44)$$

пунктиром показана функция Грина свободной частицы:

$$\widetilde{Z}_0(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}}\,. \qquad (45)$$

В нашем подходе результаты (44), (45) получаются автоматически по формуле с весом из (27) при $X=0$ и из (17) при $V(X)=0$ соответственно. Значения $\widetilde{Z}^{(n)}(0,T)$, полученные по составной формуле согласно (30) при T и n, соответствующих табл. I, показаны на рис. 3 крестиками. Счетное время составило $< 0{,}1$ с на точку T на ЭВМ CDC-6500. Таким образом, путем интегрирования по условной мере Винера с использованием приближенных формул /18–20/ могут быть вычислены значения рассмотренных величин с такой же, а в некоторых случаях и более высокой точностью, что и в работах /6, 21, 22/, но при существенно меньшей кратности интегралов. Это позволяет использовать для их нахождения детерминированные методы и приводит к значительной экономии счетного времени и памяти ЭВМ.

Таблица 4

T	$\Delta E^{(T)}$
5	0,9866
6	0,995I
7	0,9982
8	0,9993

В заключение авторы выражают благодарность за полезные обсуждения В.П.Гердту, И.Л.Боголюбскому и Н.В.Махалдиани.

ЛИТЕРАТУРА

I. Feynman R.P. Rev.Mod.Phys.,1948,v.20,N°2,p.367 .
2. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. "Наука", М., 1984, гл. УШ.
3. Ициксон К., Зюбер Ж.-Б. Квантовая теория поля, т.2. "Мир", М., 1984.
4. Wilson K. Phys.Rev.,1974,D10,p.2445 .
5. Kogut J.B. ILL-(TH)-82-46,Urbana,1982 .
6. Cahill K.,Reeder R. Phys.Lett.,1984,136B,p.77 .
7. Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М., Шмаков С.Ю. ОИЯИ, Р2-84-302, Дубна, 1984.
8. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир", М., 1968.
9. Экснер П. ЭЧАЯ, 1984, т.I5, вып.I, с.I2I.
I0. Wiener N. Journ.Math.and Phys.,1923,2,p.131 ;
Proc.London Math.Soc.,1924,v.22,N°6,p.454 .
II. Гельфанд И.М., Яглом А.М. УМН, 1956, т.II, № I, с.77.
I2. Янович Л.А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам. "Наука и техника", Минск, 1976.
I3. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике. "Мир", М., 1965.
I4. Далецкий Ю.Л., Фомин С.В. Меры и дифференциальные уравнения в бесконечномерных пространствах. "Наука", М., 1983.
I5. Егоров А.Д., Соболевский П.И., Янович Л.А. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов. "Наука и техника", Минск, 1985.
I6. Глимм Дж., Джаффе А. Математические методы квантовой физики. Подход с использованием функциональных интегралов. "Мир", М., 1984.

I7. Daubechies I.,Klauder J.R. J.Math.Phys.,1982,N°23,p.1806;
Measures for More Quadratic Path Integrals,
Bell Laboratories,Murray Hill,1983;
Quantum Mechanical Path Integrals with Wiener Measures for All Polynomial Hamiltonians.II. AT&T Bell Laboratories, Murray Hill,1985;
Klauder J.R.,Daubechies I. Phys.Rev.Lett.,1982,N°48,p.117 .
I8. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. ОИЯИ, РII-83-867, Дубна, 1983.
I9. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. В сб.: Краткие сообщения ОИЯИ , № 4-84, Дубна, 1984, с. 28.
20. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. ОИЯИ, РII-84-775, Дубна, 1984.
2I. Creutz M.,Freedman B. Annals of Phys.,1981,N°132,p.427 .
22. Shuryak E.V.,Zhirov O.V. Nucl.Phys.,1984,B242,N°2,p.393;
Institute of Nuclear Physics,preprint 83-47,Novosibirsk,1983 .
23. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Физматгиз, М., 1963.
24. Шифф Л. Квантовая механика. ИИЛ, М., 1957.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 октября 1985 года.