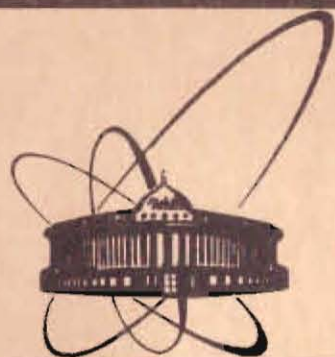


85-765



сообщения
Объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

P11-85-765

Е.П.Жидков, Ю.Ю.Лобанов, О.В.Сидорова

ПРИБЛИЖЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ
ПО УСЛОВНОЙ МЕРЕ ВИНЕРА
В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ
Ангармонический осциллятор

1985

Введение

Большое распространение во многих областях физики и математики приобрел в настоящее время метод континуального интегрирования. Построение квантовой механики на его основе изложено в^{/1/}. В работе^{/2/} содержится обзор существующих методов приближенного вычисления фейнмановских интегралов. Вопросы использования аппарата континуального интегрирования в современной квантовой физике рассмотрены в^{/3-5/}. Большим успехом этого метода явилось создание калибровочной теории на решетке^{/6,7/}. Расчеты на решетке в квантовой теории поля^{/8/} приводят к необходимости вычисления интегралов большой кратности (порядка 10^5), для чего требуются мощные ЭВМ с большой оперативной памятью и высоким быстродействием. Кроме того, как отмечается в^{/9/}, серьезные проблемы возникают при введении решетки в теории гравитации. В^{/9/} развивается метод вычисления фейнмановских интегралов, не требующий введения пространственно-временной решетки. Этот метод основан на аппроксимации аргумента подынтегрального функционала (т.е. траектории) частичной суммой функционального ряда. Работа^{/9/} посвящена применению метода к некоторым задачам квантовой механики.

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 работах^{/12,14,15/}. В последнее время вопросы строгого построения меры в континуальных интегралах квантовой физики вызывают большой интерес у многих авторов. В^{/5/}, в частности, обосновывается построение гауссовой меры в континуальном интеграле для $P(\varphi)_2$ -модели. В работах^{/16/} осуществляется построение винеровской меры в континуальных интегралах квантовой механики (без перехода к евклидовой метрике).

В настоящей работе для вычисления фейнмановских интегралов используются построенные нами в^{/17-19/} 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 точным



ответом и с аналогичными результатами работы^[15], а также с результатами, полученными в^[20,21] путем расчетов на решетке. Работа^[20] посвящена применению метода Монте-Карло на одномерной решетке к решению некоторых квантовомеханических задач. В^[21] 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^[21] предложено аппроксимировать траекторию на отрезках $[t_n, t_{n+1}]$, $t_n = \alpha n$, $n = 0, 1, \dots, N$; $t_N = T$) непрерывной линией, заменяя разность значений потенциала в узлах решетки $a[V(x_n, t_{n+1}) - V(x_n, t_n)]$ интегралом $\int_{t_n}^{t_{n+1}} V(x, t) dt$, вычисляемым аналитически для простых систем. Это позволило авторам получить более точный результат при $\alpha = 0,5$. В нашем подходе траектория считается непрерывной функцией на всем отрезке $[0, T]$.

В нашей предыдущей работе^[12] рассмотрено применение метода континуального интегрирования на примере гармонического осциллятора с гамильтонианом $H_0 = \frac{1}{2}(p^2 + X^2)$. Теперь мы обращаемся к расчетам характеристик ангармонического осциллятора с гамильтонианами $H_1 = \frac{1}{2}(p^2 + X^2 + \lambda X^4)$ и $H_2 = \frac{1}{2}(p^2 + X^2 + \lambda X^4 + \mu X^6)$. Ангармонический осциллятор привлекает к себе внимание многих авторов благодаря тому, что его можно рассматривать как 1-мерный случай ϕ^4 -теории поля. Обзор методов исследования ангармонического осциллятора и ссылки на другие работы в этой области содержатся в^[23,24]. Предметом вычисления является, главным образом, собственные значения и собственные функции гамильтониана системы. В работе^[12] (см. также^[14], с.115) исследованы в явном порядке теории возмущений и получены оценки коэффициентов асимптотического ряда по степеням λ для энергии основного состояния ангармонического осциллятора. В^[20] для этой системы построен сходящийся ряд теории возмущений в случае разложения сильной связи и вычислены его коэффициенты для энергии основного состояния.

В настоящей работе, так же как и в^[9,20,21], непертурбативно (путем приближенного вычисления Фейнмановских интегралов) находятся энергии E_0, E_1 основного и первого возбужденного состояний ангармонического осциллятора, пропагатор $G(\tau) = \langle 0 | x(\tau) x(0) | 0 \rangle$ и квадрат волновой функции основного состояния $| \psi_0(x) |^2$. Приведенное сравнение численных результатов показывает, что используемый нами подход к вычислению интегралов Фейнмана с применением формул^[17-19] является более эффективным, чем способы^[9,20,21], 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 численного нахождения этих интегралов мы использовали детерминированные методы, в частности, квадратурные формулы Гаусса и Чебышева.

§ 1. Основные определения

В евклидовой формулировке квантовой механики элементарными операторами эволюции

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

системы с гамильтонианом

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

состоящей из бесспиновой частицы массы $M=1$ во внешнем поле с потенциалом $V(X)$, $X \in (-\infty, \infty)$, заданной в виде континуального интеграла по условной мере Винера^[1,2]:

$$Z(x_i, x_f, T) = \int_{C_{0,x_i,T,x_f}} \exp\left\{-\int_0^T V(x(t)) dt\right\} d_w x.$$

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

$$\begin{aligned} x(0) &= x_i, \\ x(T) &= x_f. \end{aligned}$$

В предположении наличия у H чисто дискретного спектра энергии основного состояния системы может быть определена^[2,3] величина

$$E_0 = \lim_{T \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{T} \ln Z(T) \right],$$

где

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

$$\bar{Z}(X, T) = Z(X, X, T) = \int_{C_{0,X,0}} \exp\left\{-\int_0^T V(x(t)) dt\right\} d_w x,$$

или

$$E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle = \tag{5}$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} \bar{Z}(X, T) dX} \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \int_{-\infty}^{\infty} dX \int_{C_{0,X,0}} \exp\left\{-\int_0^T V(x(t)) dt\right\} \left[\frac{1}{2} X V(X) + V(X) \right] d_w x.$$

Пропагатор $G(\tau)$ определяется следующим образом^[2,3]:

$$G(\tau) = \langle 0 | x(\tau) x(0) | 0 \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \Gamma(\tau), \tag{6}$$

где

$$\Gamma(\tau) = \langle x(0)x(\tau) \rangle = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{Z}(X, T) dX} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \int_{-\infty}^{\infty} dX \cdot X \int_{C_{0,0,1,0}} \exp\left\{-T \int_0^1 V[\sqrt{T}u(t)+X] dt\right\} \cdot [\sqrt{T}u(\frac{T}{2})] d\tilde{u}. \quad (7)$$

Континуальное интегрирование в (4), (5), (7) осуществляется по нормированной условной мере Винера $d_w u$ (см. [22]).

Разность энергий основного и первого возбужденного состояний определяется как

$$\Delta E = E_1 - E_0 = -\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{d}{dT} \ln \theta(T). \quad (8)$$

Квадрат собственной функции гамильтониана, соответствующей основному состоянию системы, может быть найден следующим образом [22]:

$$|\varphi_0(x)|^2 = \lim_{T \rightarrow \infty} [e^{E_0 T} \cdot \tilde{Z}(X, T)]. \quad (9)$$

Итак, вычислив континуальные интегралы в (4), (5) и (7), мы определим интересующие нас величины (E_0 , ΔE , $G(\tau)$, $|\varphi_0(x)|^2$).

§ 2. Энергия основного состояния

Перейдем теперь к рассмотрению одномерной квантовомеханической системы с потенциалом

$$V(X) = \frac{1}{2} X^2 + g X^4 \quad (g \geq 0). \quad (10)$$

В данном случае континуальный интеграл (4) выглядит так:

$$\tilde{Z}(X, T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left\{-\frac{T}{2} X^2 (1+2gX^2)\right\} \cdot I(c_1, c_2, c_3, c_4), \quad (11)$$

$$I(c_1, c_2, c_3, c_4) = \int_{C_{0,0,1,0}} \exp\left\{-\int_0^1 [c_1 u(t) + c_2 u^2(t) + c_3 u^3(t) + c_4 u^4(t)] dt\right\} d_w u, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} c_1 &= XT\sqrt{T}(1+4gX^2), \\ c_2 &= T^2(\frac{1}{2} + 6gX^2), \\ c_3 &= 4gXT^2\sqrt{T}, \\ c_4 &= gT^3. \end{aligned} \quad (13)$$

Обозначим через $E_0^{(4,T)}$ значение энергии основного состояния системы, вычисленное с помощью формул (2)–(4) при конечном T :

$$E_0^{(4,T)} = -\frac{1}{T} \ln \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{Z}(X, T) dX. \quad (14)$$

Через $E_0^{(e,T)}$ будем обозначать значение этой величины, вычисленное в соответствии с (3). С учетом (10)

$$E_0^{(e,T)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (X^2 + 3gX^4) \tilde{Z}(X, T) dX}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{Z}(X, T) dX}. \quad (15)$$

Отметим, что в отличие от гармонического осциллятора $G(0) \neq E_0$. Для значения $G^{(m)}(0)$ величины $G(0)$, вычисленной при фиксированном T согласно (6), (7), имеем

$$G^{(m)}(0) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} X^2 \tilde{Z}(X, T) dX}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{Z}(X, T) dX}. \quad (16)$$

В [22] нами было показано, что для гармонического осциллятора с помощью используемого нами метода хорошие приближения результатов к теоретическим значениям могут быть получены уже при $T \approx 0$. С учетом этого обстоятельства мы находим характеристики ангармонического осциллятора при значениях T того же порядка. Для вычисления интеграла (12) воспользуемся приближенной формулой с весом [16, 19], упрощенный вариант которой имеет вид

$$\begin{aligned} & \int_{C_{0,0,1,0}} \exp\left\{-\int_0^1 [c_2 x^2(t) + c_1 x(t)] dt\right\} \cdot F[x] d_w x \approx \\ & \approx \frac{\sqrt{2c_2'}}{\text{sh} \sqrt{2c_2'}} \cdot \exp\left\{-\frac{c_1^2}{2c_2 \sqrt{2c_2'}} \left[\text{th} \sqrt{\frac{c_2'}{2}} - \sqrt{\frac{c_2'}{2}}\right]\right\} \times \\ & \times \frac{1}{2^m} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 F[\tilde{\theta}_m(u, \cdot) + a(\cdot)] du_1 \dots du_m, \end{aligned} \quad (17)$$

где $-\frac{T}{2} < c_2 < \infty$,

$$a(t) = -\frac{c_1}{c_2 \text{ch} \sqrt{\frac{c_2'}{2}}} \cdot \text{sh} \sqrt{\frac{c_2'}{2}} t \cdot \text{sh} \sqrt{\frac{c_2'}{2}} (t-1),$$

$$\tilde{\theta}_m(u, t) = \sum_{k=1}^m c_k^{(m)} \cdot \tilde{\theta}(u_k, t), \quad \tilde{\theta}(w, t) = f(w, t) - \tilde{p}(w, t),$$

$$\tilde{p}(w, t) = \begin{cases} \text{sign } w, & t \leq |w|, \\ 0, & t > |w|, \end{cases}$$

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

$[C_N^{(m)}]^2$ - корни многочлена $Q_m(t) = \sum_{N=0}^m (-1)^N \frac{t^{m-N}}{N!}$;

$$K(s) = \frac{1}{1-s} [\sqrt{2c_2} \cdot \operatorname{ctg} \sqrt{2c_2} (1-s) - \frac{1}{1-s}],$$

$$v(s) = \frac{(1-s) \cdot \operatorname{sh} \sqrt{2c_2}}{\operatorname{sh} \sqrt{2c_2} (1-s)}.$$

(Приближенная формула (17) является точной, когда $F[X]$ представляет собой функциональный многочлен степени $\leq 2m+1$).

Подставляя в (17)

$$F[u] = \exp \left\{ - \int_0^1 [c_3 u^3(t) + c_4 u^4(t)] dt \right\} \quad (18)$$

при c_1, c_2, c_3, c_4 из (13), мы получаем значения величин (14)-(16), приведенные при $m=1$ для различных g в табл. 1 и 2. Через $E_0^{(n)}$ в табл. 1 обозначен точный ответ, полученный в [21]. $G^{(n)}(0)$ обозначает точный результат [9], $G^{(n)}(0)$ - результат, полученный в [9] путем вычисления N -кратного интеграла методом Монте-Карло. Для нахождения $G^{(n)}(0)$ в каждой точке g в [9] осуществлялось 10 вычислений, включавших в себя моделирование 3000 траекторий каждое. Счетное время составило для каждой точки g 10×25 с при $N=4$ и 10×17 мин при $N=20$ на ЭВМ Vax 780. Одновременное вычисление величин $E_0^{(L,T)}$, $E_0^{(R,T)}$ и $G^{(n)}(0)$ в настоящей работе заняло для каждой точки g порядка 10 мин на ЭВМ СДС-6500.

В работах [20, 21] вычисления производились для "двугорбого" потенциала:

$$V(X) = \frac{1}{2}(X^2 - f^2)^2 \quad (19)$$

В этом случае

$$\bar{Z}(X, T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp \left\{ - \frac{1}{2}(X^2 - f^2)^2 \right\} \cdot I(c_1, c_2, c_3, c_4), \quad (20)$$

где $I(c_1, c_2, c_3, c_4)$ определяется (12), а коэффициенты c_1, c_2, c_3, c_4 выражаются следующими образом:

$$\begin{aligned} c_1 &= 2XT\sqrt{T}(X^2 - f^2), \\ c_2 &= T^2(3X^2 - f^2), \\ c_3 &= 2XT^2\sqrt{T}, \\ c_4 &= \frac{1}{2}T^3. \end{aligned} \quad (21)$$

Энергия основного состояния согласно (5) записывается в виде

$$E_0^{(R,T)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2}(X^2 - f^2)(3X^2 - f^2) \bar{Z}(X, T) dX}{\int_{-\infty}^{\infty} \bar{Z}(X, T) dX} \quad (22)$$

Результаты вычисления величин (14), (22), (16) по формуле (17) с $m=1$ с учетом (16), (20), (21) для различных f^2 приведены в табл. 3. Через $E_0^{(n)}$ обозначено точное значение, полученное в [21]. Суммарное время вычисления величин $E_0^{(L,T)}$, $E_0^{(R,T)}$, $G^{(n)}(0)$ в каждой точке f^2 составляет порядка 10 мин на ЭВМ СДС-6500.

При вычислении интеграла (12) по "элементарной" формуле [12], точной для функциональных многочленов $\leq 2m+1$ степени:

$$\int_{C_{0,0,1,0}} F[X] d_w X \approx \frac{1}{2^m} \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 F[\rho^{(m)}(v, \cdot)] dv_1 \dots dv_m, \quad (23)$$

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

после некоторых преобразований мы получаем при $m=1$

$$\begin{aligned} I(c_1, c_2, c_3, c_4) &\approx \int_0^1 \exp \left\{ - [c_2 \left(\frac{1}{3} - w + w^2 \right) + c_4 \left(\frac{1}{5} - w + \right. \right. \\ &\left. \left. + 2w^2 - 2w^3 + w^4 \right)] \right\} \cdot \operatorname{ch} \left\{ - [c_1 \left(\frac{1}{2} - w \right) + c_3 \left(\frac{1}{4} - w + \frac{3}{2} w^2 - w^3 \right)] \right\} dw. \end{aligned} \quad (24)$$

Результаты представлены для потенциалов (10) и (19) в табл. 4 и табл. 5 соответственно. Интегрирование по v в (24) осуществлялось с относительной погрешностью до 10^{-4} , интегрирование по X в (14)-(16), (22) - до 10^{-3} . Счетное время на СДС-6500 составило порядка 1 с на значение g или f^2 .

Очевидно, что более точных результатов можно достичь, если использовать для вычисления континуального интеграла (12) составную приближенную формулу [17, 22]:

$$\int_{C_{0,0,1,0}} F[X] d_w X \approx (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{R^n} \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n u_k^2 \right\} \frac{1}{2^m} \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 F[\rho^{(m)}(v, \cdot)] \Psi_n(u, \cdot) dv du, \quad (25)$$

где

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

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

$\rho^{(m)}(v, t)$ определено в (23), $c_i^{(m)}$ имеют то же значение, что и в (17). Приближенная формула (25) также точна для функциональных многочленов степени $\leq 2m+1$. После некоторых преобразований в случае $n=m=1$ получаем

$$I(c_1, c_2, c_3, c_4) \approx I^{(1)}(c_1, c_2, c_3, c_4) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}u^2} du \int_{-1}^1 \exp\{-V_0\} dV, \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} V_0 = & c_1 \left[\frac{1}{2} \operatorname{sign} v - v - \frac{2}{\sqrt{2}} (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u) \right] + \\ & + c_2 \left[\frac{1}{3} - |v| + v^2 - \frac{2}{\sqrt{2}} \cos^2 \pi v + \frac{u^2}{\sqrt{2}} \right] + \\ & + c_3 \left[\operatorname{sign} \left(\frac{1}{4} - |v| + \frac{3}{2} v^2 - |v|^3 \right) - \frac{3}{\sqrt{2}} (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u) \right] \times \\ & \times \left(\frac{2}{\sqrt{2}} \sin \pi |v| + (1 - 2|v|) \cos \pi v - \frac{4}{\sqrt{2}} \right) + \frac{3}{2\sqrt{2}} \operatorname{sign} v (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u)^2 \times \\ & \times \left(\frac{1}{2} - |v| + \frac{1}{2\sqrt{2}} \sin 2\pi |v| \right) - \frac{4}{3\sqrt{2}} (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u)^3 \Big] + \\ & + c_4 \left[\frac{1}{5} - |v| + 2v^2 - 2|v|^3 + v^4 - \frac{4}{\sqrt{2}} \operatorname{sign} v (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u) \right] \times \\ & \times \left(\cos \pi v \cdot \left(1 - \frac{6}{\sqrt{2}} - 3|v| + 3v^2 \right) + \frac{3}{\sqrt{2}} \sin \pi v \cdot (1 - 2|v|) \right) + \\ & + \frac{6}{\sqrt{2}} (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u)^2 \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{4\sqrt{2}} \sin 2\pi |v| \cdot (1 - 2|v|) - \frac{1}{4\sqrt{2}} \cos 2\pi v - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} (|v| - v^2) \right) - \frac{4}{\sqrt{2}} \operatorname{sign} v (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u)^3 \left(\cos \pi v - \frac{1}{3} \cos^3 \pi v \right) + \\ & \left. + \frac{3}{8\sqrt{2}} (2 \operatorname{sign} v \cos \pi v - \sqrt{2} u)^4 \right]. \end{aligned}$$

Результаты, полученные с помощью (26), представлены в табл. 6 для потенциала (10) и в табл. 7 для потенциала (19). Суммарное время вычисления величин $E_0^{(L, T, 1)}$, $E_0^{(R, T, 1)}$ и $E_0^{(T, 1)}$ для каждой точки q или f^2 составило порядка 0,5 мин на CDC-6500. Значения $E_0^{(L, T, n)}$ и $E_0^{(R, T, n)}$, вычисленные с помощью (26) с $n=m=1$ для потенциала (19), показаны на рис. 1 крестиками и кружками соответственно. Точками обозначены результаты $E_0^{(20)}$, полученные на решетке с числом узлов $N=300$ и шагом $a=0,20$ при вычислении N -кратного интеграла путем усреднения по 100 монте-карловским итерациям. Треугольниками представлены результаты $E_0^{(21)}$. Поскольку в $E_0^{(20, 21)}$ принято $M=0,5$; $V(X) = (X^2 - f^2)^2$, результаты этих работ для сравнения с нашими разделены на 2. К сожалению, в $E_0^{(20, 21)}$ не указано счетное время и объём, на котором производились данные расчеты. Сплошная линия на рис. 1 представляет собой точный результат E_0^* , полученный в $E_0^{(23)}$ (см. табл. I).

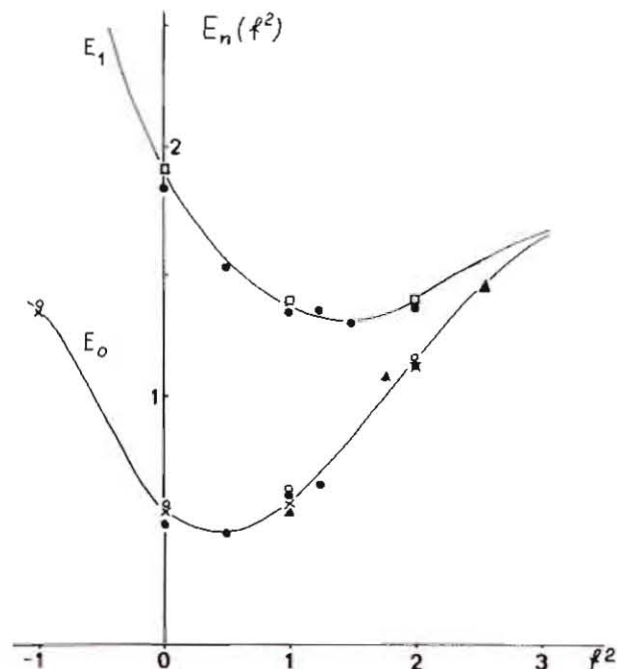


Рис. 1. Энергия основного и первого возбужденного состояний ангармонического осциллятора с $V(X) = \frac{1}{2}(X^2 - f^2)^2$.

§ 3. Волновая функция основного состояния

Квадрат модуля волновой функции основного состояния ангармонического осциллятора мы вычислим с помощью составной приближенной формулы (25), $m=1$, в соответствии с (9):

$$|\psi_0^{(r, n)}(X)|^2 = \exp\{E_0^{(r, n)} T\} \cdot \tilde{Z}^{(n)}(X, T), \quad (27)$$

где $E_0^{(r, n)}$ представляет собой предварительно вычисленное нами по той же формуле с теми же параметрами значение энергии основного состояния. Мы полагаем $E_0^{(r, n)}$ равным

$$E_0^{(r, n)} = \frac{1}{2} (E_0^{(L, T, n)} + E_0^{(R, T, n)}).$$

Результат (27) для потенциала (19) при $f^2=2$ в случае $T=4,0$; $n=1$ показан на рис. 2 крестиками и сплошной линией. Точками и пунктирной линией показан результат работы $E_0^{(20)}$, полученный на решетке с числом узлов $N=200$ и шагом $a=0,20$ путем усреднения по 100 монте-карловским итерациям.

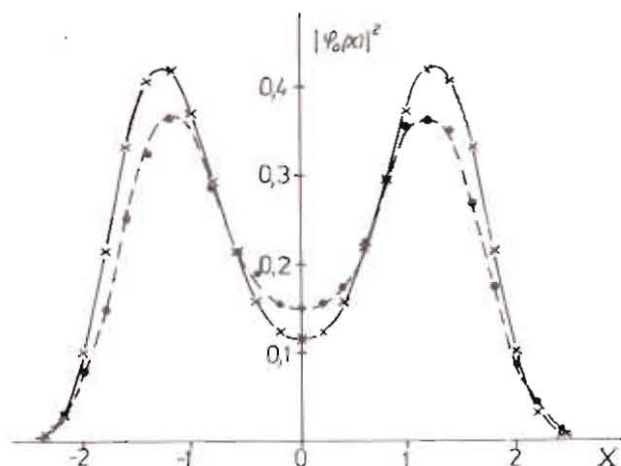


Рис.2. Квадрат волновой функции основного состояния ангармонического осциллятора с $V(X) = \frac{1}{2}(X^2 + f^2)^2$ при $f^2 = 2$.

3.1. Разность энергий основного и первого возбужденного состояний

Перейдем теперь к вычислению пропагатора $G(\tau)$ и разности энергий $\Delta E = E_1 - E_0$. В соответствии с (6), (7) мы определяем величину $G^{(n)}(\tau)$ при конечном T :

$$G^{(n)}(\tau) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \bar{Z}(X, T) dX}{\int_{-\infty}^{\infty} Z(X, T) dX} \quad (28)$$

где $\bar{Z}(X, T)$ определяется (11) и (20),

$$\bar{Z}_1(X, T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left\{-\frac{1}{2}X^2(1+2gX^2)\right\} I_1(c_1, c_2, c_3, c_4), \quad (29)$$

для потенциала (10) и

$$\bar{Z}_2(X, T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(X^2 + f^2)^2\right\} I_1(c_1, c_2, c_3, c_4) \quad (30)$$

для потенциала (19),

$$I_1(c_1, c_2, c_3, c_4) = \int_{c_0, 1, 0}^1 \exp\left\{-\int_0^1 [c_1 u^2 + c_2 u^3 + c_3 u^4 + c_4 u^5] dt\right\} \times \left[\sqrt{T} \cdot u\left(\frac{\pi}{T}\right) + X\right] d_w u. \quad (31)$$

Коэффициенты c_1, c_2, c_3, c_4 в формулах (29) и (30) определяются (13) и (21) соответственно.

Используя для вычисления интеграла (31) составную приближенную формулу (25) с $n = m = 1$, получаем

$$I_1(c_1, c_2, c_3, c_4) \approx I_1^{(m)}(c_1, c_2, c_3, c_4) = \frac{1}{2\sqrt{\pi T}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}u^2} du \int_{-1}^1 e^{-V_0} \left[\sqrt{T} \cdot \left(\rho\left(u, \frac{\pi}{T}\right) - \frac{1}{\pi} (2 \operatorname{sign} u \cos \pi v - \sqrt{2} u) \cdot \left(\sin \pi \frac{\pi}{T} \right) + X \right) \right] d v, \quad (32)$$

где V_0 определяется в (26), $\rho(u, \frac{\pi}{T})$ задано в (23).

Результаты вычисления $G^{(n)}(\tau)$ согласно (28) с помощью (26) и (32) приведены для потенциала (10) на рис.3 и для потенциала (19) — на рис.4 в логарифмическом масштабе. При вычислении для каждого значения g и f^2 использованы те же величины T , что и при нахождении E_0 и $G^{(n)}(\tau)$ (см. табл.6 и 7). Очевидно, что имеет смысл рассматривать только случай $\tau \ll T$. Время счета на СЭС-5500 составило порядка 1 мин на точку τ . По указанным точкам методом наименьших квадратов проведены прямые, показанные на рис.3 и 4, тангенс угла наклона которых в соответствии с (8) определяет величину разности энергий $\Delta E = E_1 - E_0$. Полученные нами значения этой величины для потенциала (10) приведены в табл.8. Через ΔE^* обозначено точное

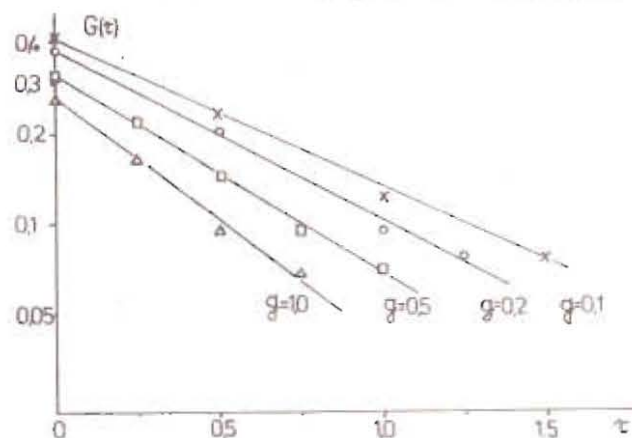


Рис.3. Зависимость $G(\tau) = \langle 0 | \chi(0) \chi(\tau) | 0 \rangle$ для системы с потенциалом $V(X) = \frac{1}{2}X^2 + gX^4$. Сплошной линией показана экспоненциальная параметризация.

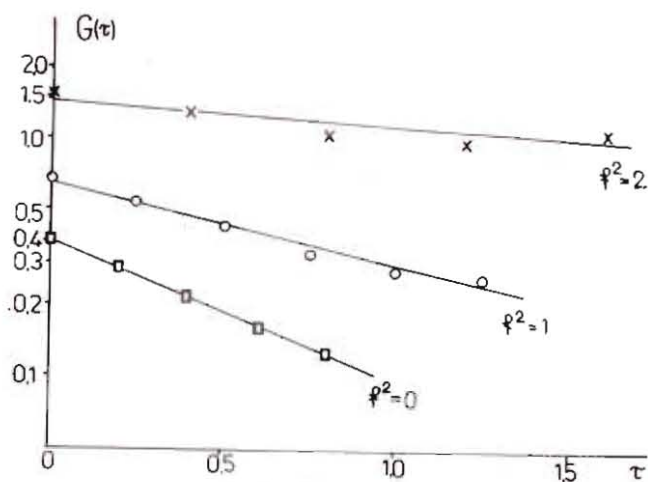


Рис. 4. Зависимость $G(\tau) = \langle 0 | X(0) X(\tau) | 0 \rangle$ для системы с потенциалом $V(X) = \frac{1}{2} (X^2 - f^2)^2$. Сплошной линией показана экспоненциальная параметризация.

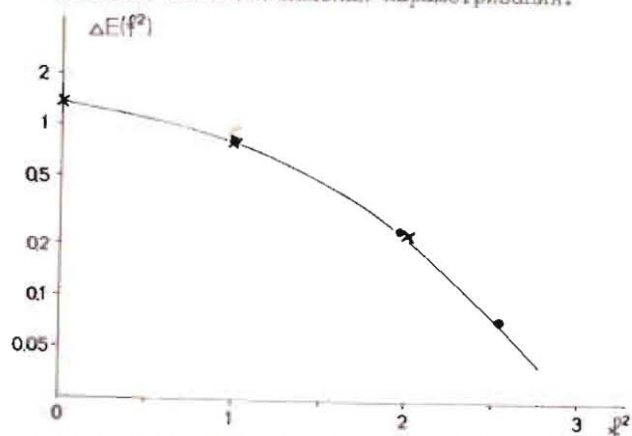


Рис. 5. Разность энергий основного и первого возбужденного состояний ангармонического осциллятора с потенциалом $V(X) = \frac{1}{2} (X^2 - f^2)^2$.

значение, полученное в [21]. $\Delta E^{(M)}$ обозначает результаты приближенного вычисления, полученные в [9] путем 10 моделирований 3000 траекторий в каждой точке g , что составило 17х10 мин счетного времени на ЭВМ Vox 780. В табл. 9 приведены результаты наших расчетов для потенциала (19). ΔE^* обозначает точный результат, полученный

в [28]. Для сравнения с результатами работы [21] значения $\Delta E^{(\tau, n)}$ из табл. 9 показаны на рис. 5 (крестиками). Точками обозначены величины разности энергий, полученные в [21] на решетке $N=150$, $\alpha=0,1$ с помощью 10^3 монте-карловских итераций, сплошная линия представляет собой точный результат [28]. Значения $E_i^{(\tau, n)}$, полученные по формуле

$$E_i^{(\tau, n)} = \frac{1}{2} (E_0^{(L, \tau, n)} + E_0^{(R, \tau, n)}) + \Delta E^{(\tau, n)}$$

где $E_0^{(L, \tau, n)}$ и $E_0^{(R, \tau, n)}$ взяты из табл. 7, $\Delta E^{(\tau, n)}$ — из табл. 9, показаны квадратиками на рис. 1. Сплошная линия представляет точный результат [28], точками обозначены результаты [20], полученные на решетке с $N=303$ и $\alpha=0,25$ при вычислении N -кратного интеграла путем усреднения по 10 монте-карловским итерациям.

Таблица 1

g	$E_0^*/[27]$	T	$E_0^{(L, T)}$	$E_0^{(R, T)}$
0,1	0,559146	3	0,552	0,541
0,2	0,602405	2,5	0,592	0,583
0,5	0,696176	2	0,685	0,644
1,0	0,803771	1,5	0,774	0,735

Таблица 2

g	$G^*/[9]$	$G^{(M)}(0)/[9]$ $N=4$	$G^{(M)}(0)/[9]$ $N=20$	T	$G^{(T)}(0)$
0,1	0,4125	0,433±0,16	0,409±0,06	3	0,406
0,2	-	-	-	2,5	0,364
0,5	0,3058	0,296±0,07	0,293±0,04	2	0,293
1,0	0,2571	0,269±0,08	0,267±0,08	1,5	0,257

Таблица 3

f^2	$E_0^*/[28]$	T	$E_0^{(L, T)}$	$E_0^{(R, T)}$	$G^{(M)}(0)$
1	1,33891	2	1,333	1,272	0,254
0	0,53018	2	0,512	0,506	0,355
1	0,56889	2	0,530	0,616	0,689
2	1,14482	1,5	0,783	1,178	1,477

Таблица 4

g	T	$E_0^{(L,T)}$	$E_0^{(R,T)}$	$e^{(T)}(0)$
0,1	3	0,101	0,636	0,467
0,2	2,1	0,187	0,684	0,414
0,3	2	0,069	0,789	0,539
1,0	1,1	0,773	0,931	0,286

Таблица 5

β^2	T	$E_0^{(L,T)}$	$E_0^{(R,T)}$	$e^{(T)}(0)$
-1	2	1,344	1,401	0,301
0	3	0,132	0,580	0,397
1	4	0,104	0,600	0,572
2	3	1,142	1,504	1,33

Таблица 6

g	T	$E_0^{(L,T,1)}$	$E_0^{(R,T,1)}$	$e^{(T,1)}(0)$
0,1	4,1	0,107	0,570	0,419
0,2	4	0,021	0,616	0,377
0,3	3	0,111	0,707	0,513
1,0	2,1	0,801	0,832	0,263

Таблица 7

β^2	T	$E_0^{(L,T,1)}$	$E_0^{(R,T,1)}$	$e^{(T,1)}(0)$
-1	2	1,338	1,371	0,279
0	3	0,135	0,590	0,373
1	4	0,106	0,632	0,572
2	4,1	1,104	1,144	1,000

Таблица 8

g	$\Delta E^*/27/$	$\Delta E^{(N)}/9/N=20$	T	$\Delta E^{(T,n)}$
0,1	1,2104	$1,03 \pm 0,29$	3,1	1,14
0,2	1,3461	-	4	1,32
0,3	1,0282	$1,00 \pm 0,07$	3	1,00
1,0	1,9341	$1,00 \pm 0,01$	2,1	1,00

Таблица 9

β^2	$\Delta E^*/28/$	T	$\Delta E^{(T,n)}$
0	1,30900	3	1,309
1	0,78762	4	0,788
2	0,23121	4,0	0,231

Из приведенного сравнения результатов следует, что путем интегрирования по условной мере Винера с использованием приближенных формул [17-19] могут быть вычислены значения рассмотренных величин с такой же или лучшей точностью, что и в работах [19, 20, 21], но при существенно меньшей кратности интегралов. Это позволяет использовать для их нахождения детерминированные методы и приводит к значительной экономии счетного времени и памяти ЭВМ.

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

Литература

1. Лейнман Р., Либс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир", М., 1968.
2. Экнер П. ЭАМ, 1964, т.10, вып.1, с.121.
3. Боголюбов Н.Н., Яворский Д.В. Введение в теорию квантованных полей. "Наука", М., 1964, гл.20.
4. Ишиксон Л., Эбергер Л.-В. Квантовая теория поля, т.2. "Мир", М., 1964.
5. Тлимм Дж., Джаффе А. Математические методы квантовой физики. Подход с использованием функциональных интегралов. "Мир", М., 1964.
6. Wilson K. Phys. Rev., 1974, D10, p.2445.
7. Bogat J.B. ПЛ-(ТТ)-82-46, Чехословакия, 1962.
8. Махалдиани Н.В., Шиллер-Гройскер А., Ишмаков С.А. ОМЯД, P2-04-302, Дубна, 1964.

9. Cahill K., Reeder R. Phys. Lett., 1984, 136B, p.77.
10. Wiener N. Journ. Math. and Phys., 1923, 2, p.131;
Proc. London Math. Soc., 1924, v.22, No.6, p.454.
11. Гельфанд И.М., Яглом А.М. УМН, 1956, т. II, № I, с.77.
12. Янович Л.А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам. "Наука и техника", Минск, 1976.
13. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике. "Мир", М., 1965.
14. Далецкий Ю.Д., Фомин С.В. Меры и дифференциальные уравнения в бесконечномерных пространствах. "Наука", М., 1983.
15. Егоров А.Д., Соболевский П.И., Янович Л.А. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов. "Наука и техника", Минск, 1985.
16. Daubechies I., Klauder J.R. J. Math. Phys., 1982, No.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, No.48, p.117.
17. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. ОИЯИ, PII-83-867, Дубна, 1983.
18. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. В сб.: Краткие сообщения ОИЯИ, № 4-84, Дубна, 1984, с.28.
19. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. ОИЯИ, PII-84-775, Дубна, 1984.
20. Creutz M., Freedman B. Annals of Phys., 1981, No.132, p.427.
21. Shuryak E.V., Zhurov O.V. Nucl. Phys., 1984, B242, No.2, p.393;
Institute of Nuclear Physics. Preprint 83-47, Novosibirsk, 1983.
22. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. ОИЯИ, PII-85-764, Дубна, 1985.
23. Graffi S., Grecchi V. Rayleigh-Hitz Method, Secular Determinant and Anharmonic Oscillators. Istituto Nazionale di Fisica Nucleare Sezione di Bologna, Bologna, 1973.
24. Турбинер А.В. УФН, 1984, №144, с.35.
25. Bender C.M., Wu T.T. Phys. Rev., 1973, 7D, p.1620.
26. Турбинер А.В., Ушверидзе А.Г. ИТФ-197, Moscow, 1984.
27. Biswas S.H. et al. J. Math. Phys., 1973, v.14, No.9, p.1190.
28. Blankenbecler R. et al. Phys. Rev., 1980, D21, p.1055.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 октября 1985 года.

Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В.

P11-85-765

Приближенное интегрирование по условной мере Винера
в задачах квантовой механики.
Ангармонический осциллятор

Рассмотрено применение метода континуального интегрирования к нахождению некоторых характеристик квантовомеханических систем в евклидовой формулировке теории. Континуальные интегралы по условной мере Винера вычисляются с помощью построенных нами приближенных формул, точных на классе функциональных многочленов заданной степени. Использование метода продемонстрировано на примере ангармонического осциллятора с гамильтонианами $H_g = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + gx^4$ и $H_r = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \frac{1}{2}(x^2 - a)^2$. Вычислены энергии E_0, E_1 основного и первого возбужденного состояний системы, пропагатор $G(r) = \langle 0 | x(0) x(r) | 0 \rangle$ и квадрат волновой функции основного состояния $|\phi_0(x)|^2$. Нахождение интегралов осуществляется с помощью детерминированных методов (кватратурные формулы Гаусса и Чебышева). Приведенное сравнение численных результатов с аналогичными значениями, полученными другими авторами путем расчетов методом Монте-Карло на решетке и при помощи аппроксимации траекторий в фейнмановском интеграле, показывает более высокую эффективность используемого нами метода.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Zhidkov E.P., Lobanov Yu.Yu., Sidorova O.V.

P11-85-765

Approximate Calculation of the Conditional Wiener Integral in
Quantum Mechanics Problems
Anharmonic Oscillator

Application of the functional integration method to obtain some characteristics of quantum mechanics system in the Euclidean formulation of theory is considered. The conditional Wiener integrals are calculated using our approximate formulas, which are exact for the functional polynomials of certain degree. The use of the method is demonstrated taking the anharmonic oscillator with $H_g = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + gx^4$ and $H_r = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \frac{1}{2}(x^2 - a)^2$ as an example. The E_0, E_1 energies of the ground and first excited states of this system, propagator $G(r) = \langle 0 | x(0) x(r) | 0 \rangle$ and wave function squared of the ground state $|\phi_0(x)|^2$ are calculated. The evaluation of the integrals is performed using the Gauss and Chebyshev quadrature formulas. The comparison of our numerical results with the values obtained by other authors using both Monte Carlo method on the lattice and approximation of paths in the Feynman Integral is presented. This comparison demonstrates a higher efficiency of the method used.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985