FUNKCIONALNI INTEGRALI BEZ INTEGRALA

A. BALAŽ, A. BELIĆ i A. BOGOJEVIĆ

Institut za fiziku, Beograd, Srbija i Crna Gora
[antun, abelic, alex]@phy.bg.ac.yu

SAŽETAK

U ovom radu prezentujemo i analiziramo novu algebarsku aproksimativnu šemu za računanje funkcionalnih integrala dobijenu primenom opšteg metoda Gausovog polovljenja. Uspešnost nove algebarske šeme analiziramo na primeru generišućeg funkcionala i srednje vrednosti polja, poredeći novodobijene izraze sa egzaktnim rezultatima, kao i sa rezultatima dobijenim primenom standardne semiklasične aproksimacije do na jednu petlju.

Ključne reči: Funkcionalni integral, Kvantna teorija, Monte Karlo metod

1. Algebarska formula za funkcionalni integral

Metoda Gausovog polovljenja funkcionalnih integrala koju smo razvili u seriji prethodnih radova [1–3] daje način da se funkcionalni integral nekog početnog dejstva diskretizovanog na N podeonih tačaka prepiše kao funkcionalni integral novog efektivnog dejstva (dobijenog rešavanjem određene rekurzivne relacije) diskretizovanog na $N/2$ podeonih tačaka. Pored toga, u tim radovima je pokazano da je greška ove metode proporcionalna sa $1/N^2$. Iteriranjem procedure Gausovog polovljenja se prelazi na sukcesivno sve grublje diskretizacije, a greška celog niza polovljenja dominantno dolazi od greške poslednjeg (najgrubljeg) koraka. U radovima [1–3] smo pokazali da se na ovaj način čak i za izuzetno male vrednosti N dobija odlično slaganje sa egzaktnom vrednošću generišućeg funkcionala. Za tipični slučaj se dobija da novi algoritam sa $N = 3$ (odnosno sa 2 integrala)[1] daje rezultat iste preciznosti kao i definicioni algoritam [4] sa 100 integrala.

U ovom radu ispitujemo najgrublju aproksimaciju do koje se dolazi primenom Gausovog polovljenja – aproksimaciju koja polazi od početne $N = 2^s$ diskretizacije i koja se (u s koraka iteriranja rekurzije) spušta do $N = 1$ (dakle do algebarskog izraza u kome nema integracija). Osnovni razlog za ovo ispitivanje je da se dobije nova algebarska aproksimativna šema za računanje opšteg funkcionalnog integrala i da se odredi preciznost te algebarske šeme.

Kada bi u definicionom algoritmu funkcionalni integral zamenili njegovom najgrubljom diskretizacijom jasno je da ne bismo dobili dobre rezultate. Ovaj pristup je ekvivalentan pristupu u kome bi očekivane vrednosti polja aproksimirali sa $\langle q(t)\rangle = 1/2\,(q(0) + q(T)) = 1/2\,(q_i + q_f)$. Na ovaj način bi se u potpunosti zanemarila dinamika posmatranog modela i sve bi zavisilo samo od početnih uslova q_i i q_f. Za razliku od definicionog algoritma u $N = 1$, metod Gausovog polovljenja sadrži dinamiku, tj. do $N = 1$ izraza dolazimo tako što polazimo od kontinualne

[1] Broj integracija je za jedan manji od broja podeonih tačaka.

teorije koju (u beskonačno koraka polovljenja) spustimo do $N = 1$. Ovo se postiže rešavanjem linearizovane rekurentne relacije i korišćenjem beskonačnog iterata, čime dobijamo funkcije G_∞^{lin} i V_∞^{lin} (kinetički i potencijalni član krajnjeg efektivnog dejstva). Kao što je pokazano u radovima [1–3], ove funkcije su date sa

$$G_\infty^{lin} = 1 + \epsilon_N \frac{V_0''}{12} + \epsilon_N^3 \frac{V_0''''}{336}\,, \tag{1}$$

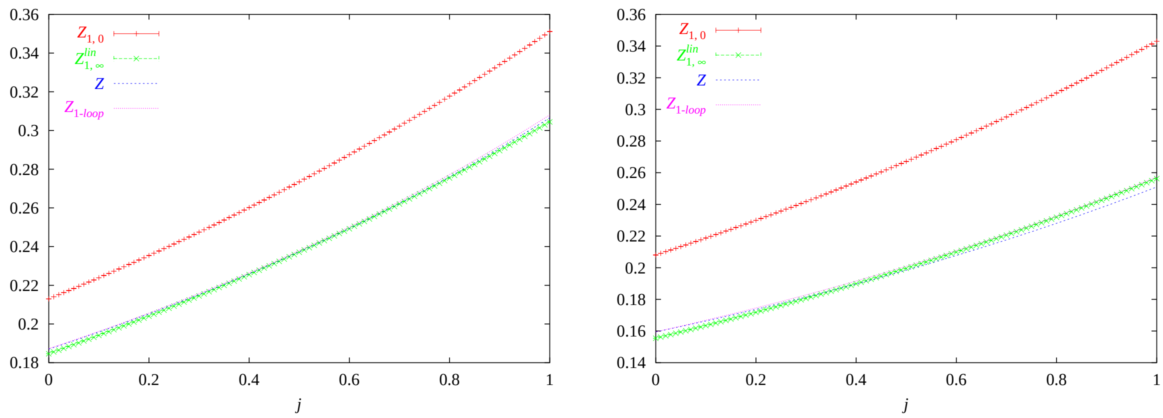
$$V_\infty^{lin} = V_0 + \epsilon_N \frac{V_0''}{8}\,, \tag{2}$$

tj. predstavljaju jednostavne funkcije od G i V (kinetičkog i potencijalnog člana početne teorije). U gornjim izrazima je $\epsilon_N = T/N$, gde je T ukupno vreme propagacije, a N broj podeonih tačaka diskretizacije. Generišući funkcional je sada dat jednostavnim (algebarskim) izrazom

$$Z_{1,\infty}^{lin} = \sqrt{\frac{G_\infty^{lin}\left(\frac{q_i+q_f}{2}\right)}{2\pi T}} \exp\left\{-\frac{(q_f-q_i)^2}{2T} G_\infty^{lin}\left(\frac{q_i+q_f}{2}\right) - T V_\infty^{lin}\left(\frac{q_i+q_f}{2}\right)\right\}. \tag{3}$$

2. Analiza algebarske formule

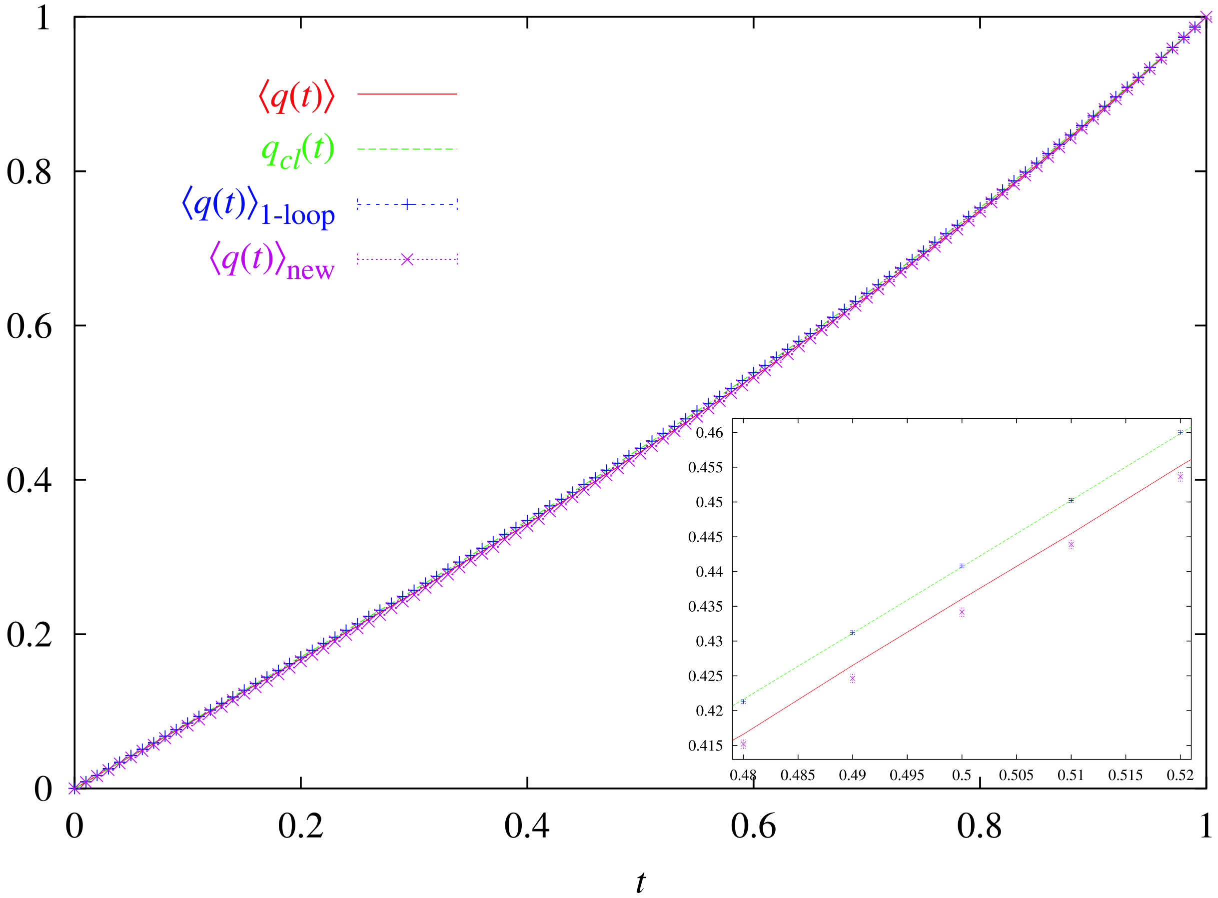
Kvalitet upravo prezentovane nove aproksimacije svakako je bolji od kvaliteta aproksimacije koji se dobija korišćenjem originalne aproksimativne formule. Svi rezultati dobijeni su korišćenjem numeričke Monte Karlo simulacije [3, 5, 6]. Na slici 1 je nova aproksimacija upoređena sa naivnom $N = 1$ aproksimacijom, ali i sa egzaktnim rezultatom i sa 1-loop (tj. semiklasičnom) aproksimacijom. Prikazani rezultati su za anharmonijski oscilator sa početnim uslovom $q_i = 0$ i kvartičnim anharmonicitetom $g = 1$ (levo), odnosno $g = 10$ (desno). Sa grafika se vidi da je kvalitet nove algebarske aproksimacije (bar) uporediv sa 1-loop aproksimacijom.



Slika 1: (levo) Generišući funkcional računat egzaktno, pomoću 1–loop aproksimacije i pomoću nove aproksimativne formule (bez integrala). Nova aproksimacija dobro radi zato što u sebi sadrži kontinuum limes linearizovanog Gausovog polovljenja. Poređenja radi, prikazano je i Z_N za $N = 1$, odnosno definiciona formula za funkcionalni integral bez integrala. Parametri teorije su $g = 1$, $j = 0$, $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$. (desno) Isti grafici, samo za $g = 10$.

Algebarska aproksimacija za generišući funkcional se može koristiti i za računanje Grinovih funkcija, što ćemo ovde prikazati na primeru srednje vrednosti polja. Srednju vrednost računamo korišćenjem formule

$$\langle q(t)\rangle_{new} = \frac{\int Z_{1,\infty}^{lin}(T,t)\, q(t)\, Z_{1,\infty}^{lin}(t,0)}{\int Z_{1,\infty}^{lin}(T,t)\, Z_{1,\infty}^{lin}(t,0)}\,.$$

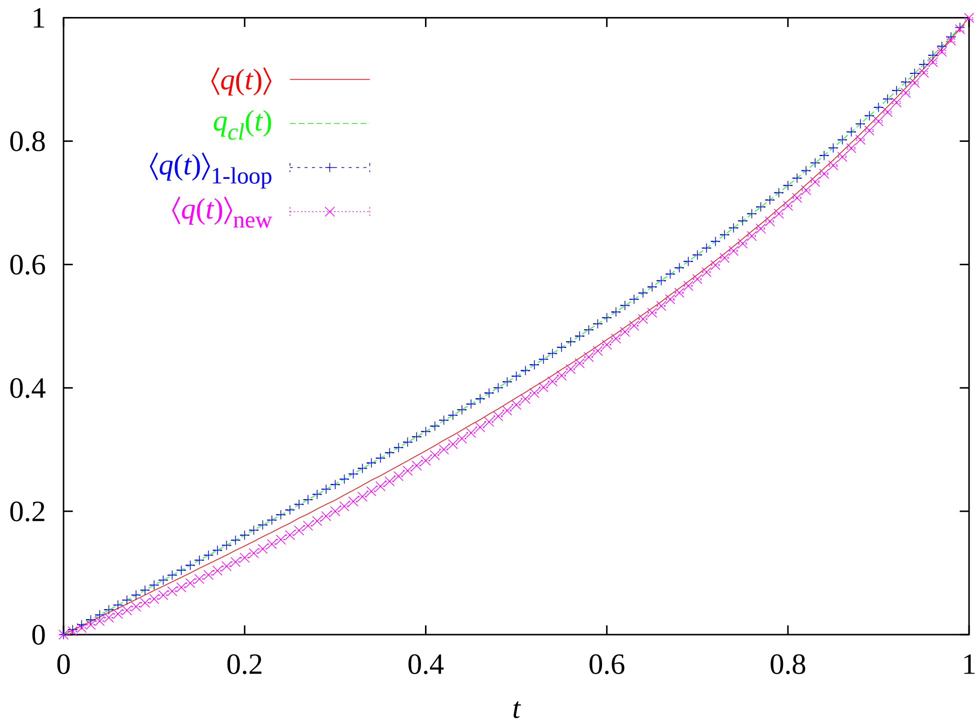


Slika 2: Očekivana vrednost $\langle q(t)\rangle$ računata egzaktno, pomoću 1–loop aproksimacije i nove aproksimativne formule. Kompletnosti radi, prikazano je i odgovarajuće klasično rešenje. Na umanjenom grafiku se vidi detalj gornje slike. Parametri teorije su $g = 1$, $j = 0$, $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$.

Na slici 2 je prikazano $\langle q(t)\rangle$ za anharmonijski oscilator računato egzaktno, semiklasično i pomoću nove algebarske formule za koeficijent anharmoniciteta $g = 1$. Umanjena slika pokazuje koliko je nova aproksimacija zapravo bolja od semiklasične. Slika 3 pokazuje istu situaciju, ali za deset put veći anharmonicitet. Nova aproksimacija je i dalje bolja od semiklasične. U radu [3] smo jednostavnim analitičkim izvođenjem pokazali da je nova aproksimacija bolja od semiklasične za $g < g_c$, gde je kritični anharmonicitet $g_c \propto 1/q_f^2$. Koeficijent proporcionalnosti u ovoj relaciji je oko 100, što znači da za slučaj $q_f = 1$, koji je na slici prikazan, nova aproksimacija daje mnogo bolje rezultate od semiklasične sve do $g \sim 100$, dakle veoma duboko u nelinearnom režimu teorije.

3. Zaključak

U ovom radu je prikazana jedna izuzetno jednostavna konsekvenca upravo razvijenog metoda Gausovog polovljenja funkcionalnih integarala. Prikazana metoda daje algebarsku aproksimaciju (analitički dobijenu u zatvorenom obliku) za generišući funkcional. Na sličan način se dobijaju i sve Grinove funkcije teorije, pri čemu je n-čestična Grinova funkcija data kao količnik dva n-tostruka integrala. Prezentovani metod računa sve integrale u funkcionalnom integralu aproksimirajući ih Gausovim. Razlika od uobičajene 1-loop aproksimacije je u tome oko čega se razvija dejstvo [3], kao i u redosledu kojim se računa beskonačan broj integrala.



Slika 3: Kao na prethodnom grafiku, ali za $g = 10$.

Istraživanja prezentovana u ovom radu urađena su u Laboratoriji za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu. Monte Karlo simulacije su izvršene na računarskom klasteru GROM. Autori žele da se zahvale Ministarstvu za nauku i zaštitu životne sredine Republike Srbije na finansiranju ovog istraživačkog rada kroz projekte broj 1486 i 1899.

Literatura

[1] A. Balaž, A. Belić, A. Bogojević, *Metod Gausovog polovljenja funkcionalnih integrala*, (u ovom Zborniku radova), Kongres fizičara Srbije i Crne Gore, Petrovac na moru, 2004.; *Linearizovano Gausovo polovljenje*, (u ovom Zborniku radova), Kongres fizičara Srbije i Crne Gore, Petrovac na moru, 2004.

[2] A. Balaž, A. Belić, A. Bogojević, SFIN A2 (1998); Phys. Low-Dim. Struct. **5/6** (1999), 1; Phys. Low-Dim. Struct. **9/10** (1999), 149; Phys. Low-Dim. Struct. **1/2** (2000), 65; Phys. Low-Dim. Struct. **7/8** (2000) 121; Phys. Low-Dim. Struct. **9/10** (2000) 113; Phys. Low-Dim. Struct. **7/8** (2002) 33.

[3] A. Balaž, *Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantnoj mehanici: analitičke i numeričke osobine*, magistarski rad, 2004.

[4] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.

[5] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods*, Vol. 1: Basics, John Wiley and Sons, New York, 1986.

[6] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1992.