

LINEARIZOVANO GAUSOVO POLOVLJENJE

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 prikazujemo analitičko i numeričko ispitivanje rekurentne relacije do koje se dolazi primenom metoda Gausovog polovljenja funkcionalnih integrala a koja omogućava veliko ubrzanje procedure numeričkog računanja funkcionalnih integrala. Originalna relacija je nelinearna i nije je moguće analitički rešiti. U ovom radu linearizujemo tu relaciju i rešavamo je u opštem slučaju (uključujući i kontinuum limes). Greška linearizacije je reda $1/N^2$, odnosno istog reda veličine kao i greška koja se čini pri izvođenju Gausovog polovljenja. Ovu činjenicu koristimo da izvedemo opšti algoritam za računanje funkcionalnih integrala koji je daleko efikasniji od standardnog. Za isto vreme računanja standardni algoritam daje grešku proporcionalnu sa $1/N$, dok novi algoritam ima ukupnu grešku koja je reda $1/N^2$.

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

1. Linearizacija rekurzije i njeno rešavanje

U prethodnim radovima [1–3] smo pokazali da se u slučaju kvantnih teorija opisanih lagražijanom oblika $L = 1/2 G(q) \dot{q}^2 + V(q)$ rešavanje asociраниh funkcionalnih integrala može ubrzati iteriranjem rekurentne relacije

$$G_s^{(k+1)} = \mathcal{G} \left[G_s^{(k)}, V_s^{(k)}, \frac{\epsilon_N}{2^{s-k-1}} \right], \quad V_s^{(k+1)} = \mathcal{V} \left[G_s^{(k)}, V_s^{(k)}, \frac{\epsilon_N}{2^{s-k-1}} \right], \quad \text{gde je}$$

$$\mathcal{G}[G, V, \epsilon_N] = G - \frac{\epsilon_N}{16} \left[\frac{G''}{G} - \left(\frac{G'}{G} \right)^2 \right] + \frac{\epsilon_N^2 V''}{16}, \quad \mathcal{V}[G, V, \epsilon_N] = V + \frac{1}{\epsilon_N} \ln \frac{\mathcal{G}}{G} - \frac{\left(\frac{G'}{G} - \epsilon_N V' \right)^2}{32 \mathcal{G}}.$$

U gornjoj relaciji je $\epsilon_N = T/N$, gde je N broj vremenskih koraka diskretizovane teorije, dok je T ukupno vreme propagacije. Početni članovi u rekurziji ($k = 0$) su funkcije G i V iz početnog dejstva S , dok preostali iterati daju odgovarajuće funkcije za efektivna dejstva $S_{N,k}$.

Metod Gausovog polovljenja polazi od rešavanja neparnih integrala u izrazu za generišući funkcional. Na ovaj način se dobija veza između teorije diskretizovane sa N i $N/2$ podeonih tačaka. Navedeni integrali se računaju analitički aproksimacijom koja ih svodi na gausovske integrale i to tako što se dejstvo razvija (do kvadratnih članova) po razlikama $q_{i+1} - q_i$. U prethodnom radu [1] smo pokazali da primenom ove aproksimacije dobijamo grešku proporcionalnu sa $1/N^2$, dakle grešku koja je subdominantna u odnosu na standardni razvoj Z_N oko kontinuum limesa [3, 4], koji ima oblik $Z_N = Z + A/N + B/N^2 + o(1/N^3)$. Takođe je pokazano da se korišćenjem

efektivnog dejstva $S_{N,s}$ dobija kontinuum limes $Z_{N,s} = Z + A/2^s N + B'/N^2 + o(1/N^3)$. Ono što je bitno je da oba izraza teže istom Z i da u oba izraza figuriše isti koeficijent A . Na osnovu ovoga se vidi da je bolje koristiti što viši iterat u rekurziji jer se time umanjuje greška. Vidi se takođe da bi idealno bilo koristiti $s \rightarrow \infty$, tj. kontinuum limes, pošto bi ovo eliminisalo dominantni $1/N$ član u gornjem izrazu i dovelo do daleko manje greške.

Nelinearnost rekurzije onemogućava njeno analitičko rešavanje. U ovom radu ćemo linearizovati gornju rekurziju i rešiti je u opštem slučaju. Primitimo da u slučaju opšte teorije za mala vremena propagacije važi $(q_{i+1} - q_i)^2 \sim \epsilon_N$. Ovo prosto znači da originalnu rekurzivnu relaciju možemo linearizovati (odgovarajućim razvojem po ϵ_N) bez da time učinimo bitno novo ogrubljenje naše metode. Linearizacijom dobijamo

$$G_s^{(k+1)} = G_s^{(k)} + \frac{\epsilon_N^2}{16} \frac{V_s^{(k)''}}{2^{2s-2k-2}} - \frac{\epsilon_N}{16} \frac{G_s^{(k+1)''}}{2^{s-k-1}}, \quad V_s^{(k+1)} = V_s^{(k)} + \frac{\epsilon_N}{16} \frac{V_s^{(k)''}}{2^{s-k-1}}. \quad (1)$$

Ova linearizovana rekurzija se lako rešava. U slučaju teorija čije početno dejstvo ima $G = 1$ (većina dejstava koja nas interesuju u fizici su ovog oblika) dobijamo opšte rešenje

$$G_s^{(k)} = 1 + \frac{4^k - 1}{12 \cdot 4^s} \epsilon_N^2 V_0'' + \frac{2 \cdot 8^k - 7 \cdot 4^k + 7 \cdot 2^k - 2}{672 \cdot 8^s} \epsilon_N^3 V_0'''' , \quad V_s^{(k)} = V_0 + \frac{2^k - 1}{2^{s+3}} \epsilon_N V_0'' . \quad (2)$$

Metod Gausovog polovljenja nam garantuje da su efektivna dejstva kvadratična po brzinama. Primitimo, međutim, da efektivna dejstva imaju netrivialni kinetički član (tj. $G \neq 1$).

Na osnovu gornjeg opšteg rešenja lako dobijamo i izraz za kontinuum limes efektivnog dejstva koji nas posebno interesuje. To je limes gornjih izraza za $V_s^{(s)}$ i $G_s^{(s)}$ kada $s \rightarrow \infty$, odnosno

$$G_\infty^{lin} = \lim_{s \rightarrow \infty} G_s^{(s)} = 1 + \epsilon_N \frac{V_0''}{12} + \epsilon_N^3 \frac{V_0''''}{336}, \quad V_\infty^{lin} = \lim_{s \rightarrow \infty} V_s^{(s)} = V_0 + \epsilon_N \frac{V_0''}{8}. \quad (3)$$

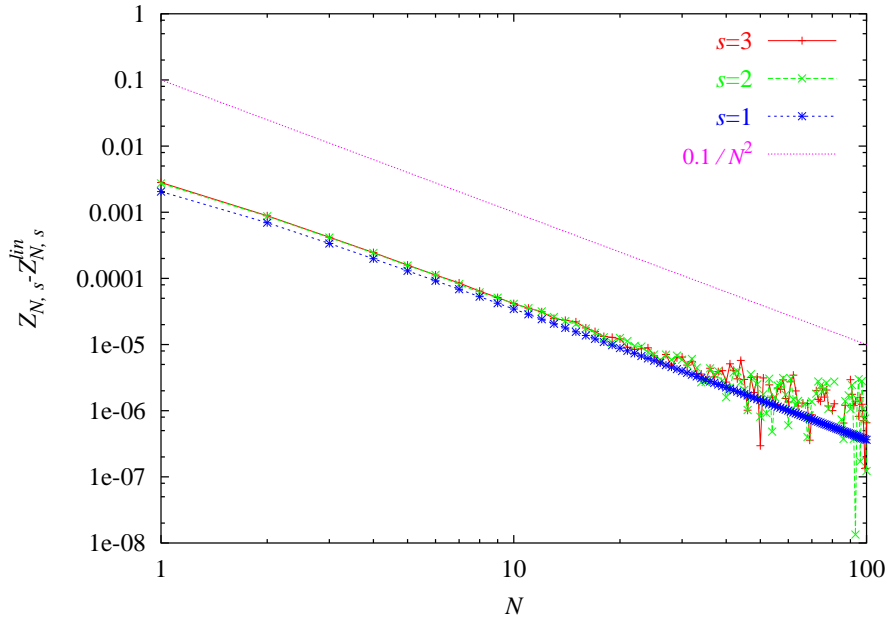
2. Numerički rezultati

Validnost izvedenih opštih analitičkih rezultata smo ispitali na širokom prostoru parametara harmonijskog oscilatora sa kvartičnim anharmonicitetom. Svi rezultati su dobijeni korišćenjem numeričke Monte Karlo simulacije [3, 5]. Na slici 1 je prikazana greška koju unosi linearizacija. Odstupanje od rešenja početne rekurzije Gausovog polovljenja je reda $1/N^2$, tj. istog reda veličine kao i greška samog Gausovog polovljenja. Kao rezultat ovoga, možemo funkcionalne integrale računati korišćenjem analitički računatih efektivnih dejstava koja su rešenja linearizovane rekurzije. Slika 2 pokazuje kako $Z_{N,s}^{lin}$ konvergira istom kontinuum limesu kao i početno dejstvo, ali brže. Ubačena slika pokazuje da i linearizovani izrazi zadovoljavaju skaliranje, tj. da izrazi $Z_{N,s}^{lin}$ leže na jednoj krivoj koja zavisi samo od $N_{eff} = 2^s N$. Detaljnijim numeričkim ispitivanjem se pokazuje da važi

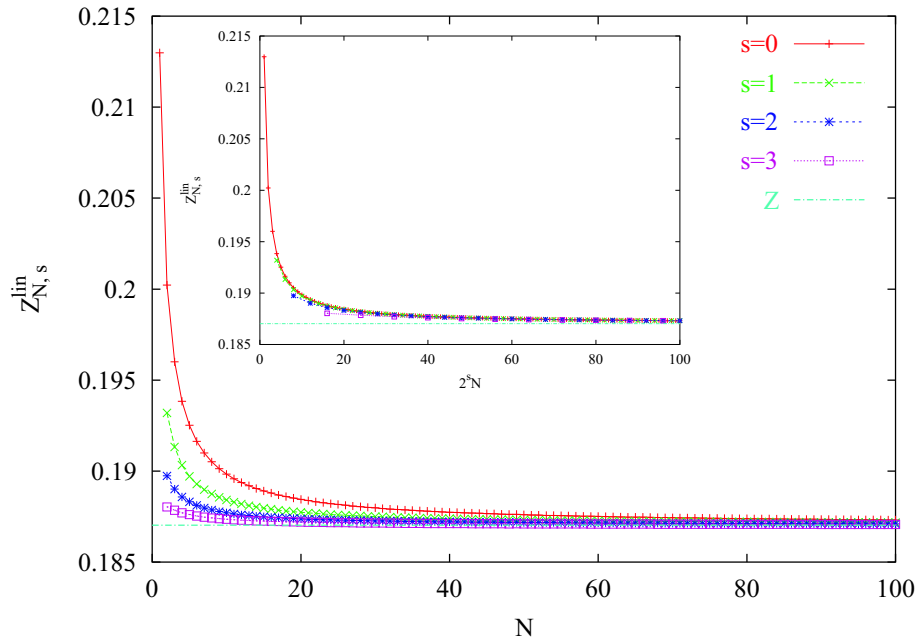
$$Z_{N,s}^{lin} = Z + A/2^s N + B''/N^2 + o(1/N^3).$$

Dominantni član je ostao isti, samo se promenio koeficijent uz subdominantni član. U ovom slučaju zaista znamo izraz za $s \rightarrow \infty$. Slika 3 pokazuje da se na ovaj način u potpunosti anulira dominantni član u grešci za generišući funkcional. Kao što smo već indicirali, korišćenjem $Z_{N,\infty}^{lin}$ za računanje generišućeg funkcionala pravimo grešku koja je reda $1/N^2$. Na osnovu gornje slike vidimo da se na ovaj način čak i za izuzetno male vrednosti N dobija odlično slaganje.

Na jeziku numeričkih simulacija se ovo može iskazati i na drugi način – kontinuum limes linearizovanog Gausovog polovljenja dovodi do ogromnog ubrzanja algoritma računanja funkcionalnih integrala (više hiljada puta u slučaju razumnih vrednosti za preciznost, a još mnogo više u slučaju da funkcionalne integrale računamo sa velikom preciznošću). Novi metod je prikazan na primeru $d = 1$ teorija, no on se direktno može generalizovati na teorije u više dimenzija.



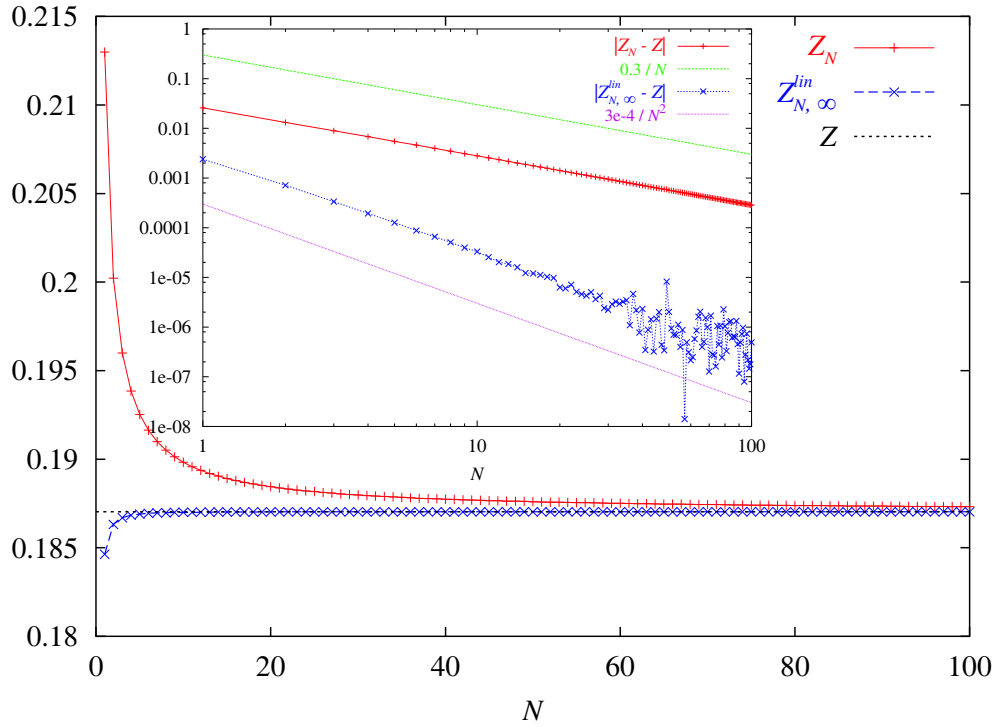
Slika 1: Greška koju unosi linearizacija Gausovog polovljenja. Radi ilustracije $1/N^2$ zavisnosti greške koju unosi linearizacija prikazana je i kriva $0.1/N^2$. Greška linearizacije je istog reda kao i originalna greška samog Gausovog polovljenja. Parametri teorije su $g = 1$, $j = 0$, $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$.



Slika 2: Aproksimativne vrednosti $Z_{N,s}$ generišućeg funkcionala u zavisnosti od broja podeonih tačaka N . Parametri teorije su $g = 1$, $j = 0$, $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$. Na umanjenom grafiku se vidi važnje skalirajuće relacije.

3. Zaključak

U ovom radu predstavljena je linearizacija rekurzivnih relacija za funkcionalni integral izvedenih ranije [1–3], kao i njihovo rešenje u opštem slučaju (uključujući i kontinuum limes). Pokazano je da je greška linearizacije reda $1/N^2$, odnosno istog reda veličine kao i greška koja se čini pri izvođenju Gausovog polovljenja. Na osnovu ovoga dat je opšti algoritam za računanje funkcional-



Slika 3: Poređenje kako Z_N (uobičajeni algoritam računanja funkcionalnih integrala) i $Z_{N,\infty}^{in}$ (novi algoritam) teže kontinualnoj vrednosti Z . Parametri teorije su $g = 1$, $j = 0$, $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$. Na umanjenom grafiku vidimo da novi metod ima grešku reda $1/N^2$, dok je greška uobičajenog algoritma $1/N$.

nih integrala koji je daleko efikasniji od standardnog: za isto vreme standardni algoritam daje grešku reda $1/N$, dok novi algoritam ima ukupnu grešku reda $1/N^2$.

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.; *Funkcionalni integrali bez integrala*, (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.