

METOD GAUSOVOG POLOVLJENJA FUNKCIONALNIH 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 jednostavnu rekurzivnu relaciju koja dovodi do ubrzanja numeričke procedure računanja funkcionalnih integrala. Pokazano je da je greška asocirana sa primenom ovog metoda $1/N^2$, tj. da je subdominantna u odnosu na standardnu grešku razvoja diskretizovanog izraza za generišući funkcional Z_N oko njegovog kontinuum limesa (koja je reda $1/N$). Dobijeni rezultati su prikazani na primeru anharmonijskog oscilatora u jednoj dimenziji.

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

1. Gausovo polovljenje

Najkompaktniji zapis svake kvantne teorije je preko generišućeg funkcionala. Generišući funkcionali su dati Fajnmanovim funkcionalnim integralima, tj. limesom $Z[S] = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N[S_{D,N}]$, gde je $S_{D,N}$ dejstvo teorije standardno diskretizovano na N podeonih tačaka. U koordinatnom prostoru (euklidske teorije) imamo

$$Z_N[S_{D,N}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \mu[q_0, \dots, q_N] \exp\{-S_{D,N}[q_0, \dots, q_N]\}. \quad (1)$$

U gornjem izrazu $\mu[q_0, \dots, q_N]$ je mera koja zavisi od diskretizovanih koordinata q_0, \dots, q_N i od oblika dejstva teorije [1]. Najšira klasa teorija za koju se mera može dobiti u zatvorenom obliku su one čije je dejstvo kvadratično po brzinama. Na ovoj klasi teorija smo razvili i novi metod računanja funkcionalnih integrala koji smo nazvali Gausovo polovljenje [2–4]. U ovom radu prikazujemo novi metod na primeru kvantnih teorija polja u $d = 1$ dimenzija (kvantna mehanika). Klasa teorija koje ćemo razmatrati ima lagranžijan oblika $L = 1/2 G(q) \dot{q}^2 + V(q)$. Opšti član ove klase se dobija izborom para funkcija G i V . Lako se pokazuje da je mera funkcionalnog integrala za ovu klasu teorija

$$\mu[q_0, \dots, q_N] = \prod_{i=0}^{N-1} \sqrt{\frac{G\left(\frac{q_{i+1}+q_i}{2}\right)}{2\pi\epsilon_N}},$$

gde je $\epsilon_N = T/N$.

Kada bi u izrazu za funkcionalni integral sa N podeonih tačaka izvršili formalnu integraciju svake druge promenljive, dobili bi identitet koji povezuje diskretizaciju sa N tačaka sa diskretizacijom sa $N/2$ tačaka. Ponavljanjem ove procedure dobili bi

$$Z_N[S_{D,N}] = Z_{N/2}[S_{D,N/2}^{(1)}] = Z_{N/4}[S_{D,N/4}^{(2)}] = \dots$$

Kad gornje integracije ne bi bile formalne, onda bi naznačenom procedurom polovljenja dobili konkretne izraze za efektivna dejstva $S_{N,s} = S_{D,N/2^s}^{(s)}$. Na ovaj način bi nam 2^s puta grublja diskretizacija koja korisiti $S_{N,s}$ dala isti rezultat kao i početna diskretizacija funkcionalnog integrala sa polaznim dejstvom.

Metod Gausovog polovljenja aproksimira naznačene integrale Gausovim i to tako što dejstvo razvija (do kvadratnih članova) po razlikama $q_{i+1} - q_i$. Ovim se svi integrali mogu rešiti analitički. Analitičko opravdanje za ovu aproksimaciju je jednostavno – u slučaju evolucije za kratko vreme ϵ_N svaka teorija zadovoljava $(q_{i+1} - q_i)^2 \sim \epsilon_N$ (osnovna karakteristika difuzionog procesa tj. “slobodnog šetača”). Dakle, aproksimacija Gausovog polovljenja važi to bolje što je N veće. Napomenimo da se ova aproksimacija razlikuje od standardnog razvoja po petljama (odnosno od semiklasičnog razvoja) u kome se takođe vrši Gausova aproksimacija funkcionalnog integrala, ali oko sasvim drugih tačaka (oko klasičnog rešenja).

Druga ključna osobina Gausovog polovljenja je da dovodi do efektivnih dejstava koja pripadaju istoj klasi kao i polazno dejstvo. Na ovaj način jednostavnim računom dolazimo do rekurentne relacije koja povezuje početno dejstvo sa nizom efektivnih dejstava $S_{N,1}, S_{N,2}, S_{N,3}$, itd. U slučaju početne diskretizacije sa $2^s N$ vremenskih koraka dobijamo

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

$$V_s^{(k+1)} = \mathcal{V} \left[G_s^{(k)}, V_s^{(k)}, \frac{\epsilon_N}{2^{s-k-1}} \right], \quad (3)$$

gde je

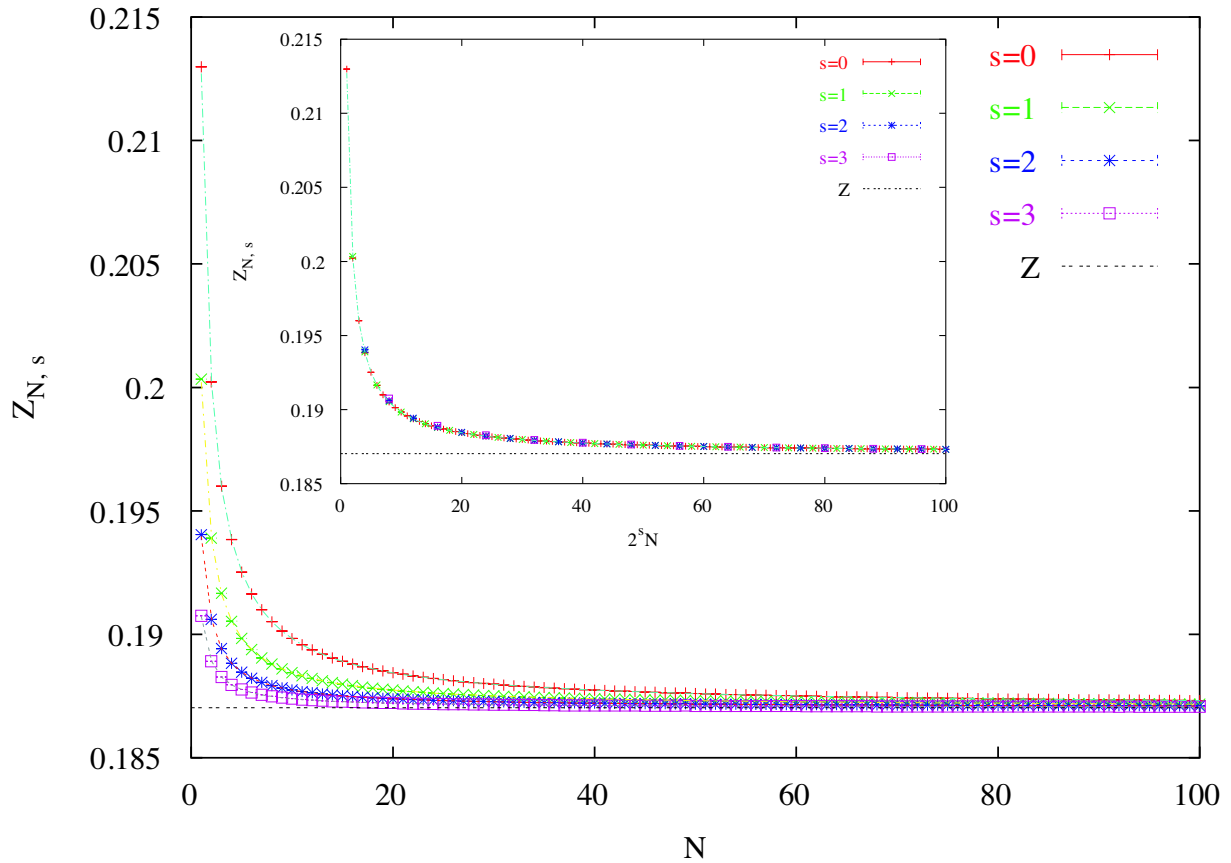
$$\mathcal{G}[G, V, \epsilon_N] = G - \frac{\epsilon_N}{16} \left[\frac{G''}{G} - \left(\frac{G'}{G} \right)^2 \right] + \frac{\epsilon_N^2}{16} V'', \quad (4)$$

$$\mathcal{V}[G, V, \epsilon_N] = V + \frac{1}{\epsilon_N} \ln \frac{\mathcal{G}}{G} - \frac{\left(\frac{G'}{G} - \epsilon_N V' \right)^2}{32 \mathcal{G}}. \quad (5)$$

U gornjim izrazima je $k = 0, 1, 2, \dots, s$, a $k = 0$ odgovara funkcijama G i V iz početnog dejstva.

2. Numerički rezultati

Važenje metoda smo ispitali na primeru oscilatora sa kvartičnim anharmonicitetom g i to u širokom opsegu parametara g , T (vreme propagacije) i j (spoljašnje polje), kao i za različite vrednosti početnih uslova q_i i q_f . Svi rezultati dobijeni su korišćenjem numeričke Monte Karlo simulacije [3, 5, 6]. Slika 1 prikazuje kako aproksimativne vrednosti funkcionalnog integrala sa N podeonih tačaka zavise od N . Vidi se da sa povećanjem broja s izrazi $Z_{N,s}$ sve brže konvergiraju istom kontinuum limesu. Na umanjenom grafiku je $Z_{N,s}$ prikazano u funkciji od $N_{eff} = 2^s N$. Činjenica da sve tače leže na istoj krivoj pokazuje koliko dobro radi procedura Gausovog polovljenja i ujedno objašnjava zašto korišćenjem efektivnih dejstava (rešenja gornje rekurzivne relacije) brze konvergiramo ka traženom kontinuum limesu generišućeg funkcionala Z . Istovetno ponašanje se dobija i za druge vrednosti parametara teorije.



Slika 1: Aproximativne 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.

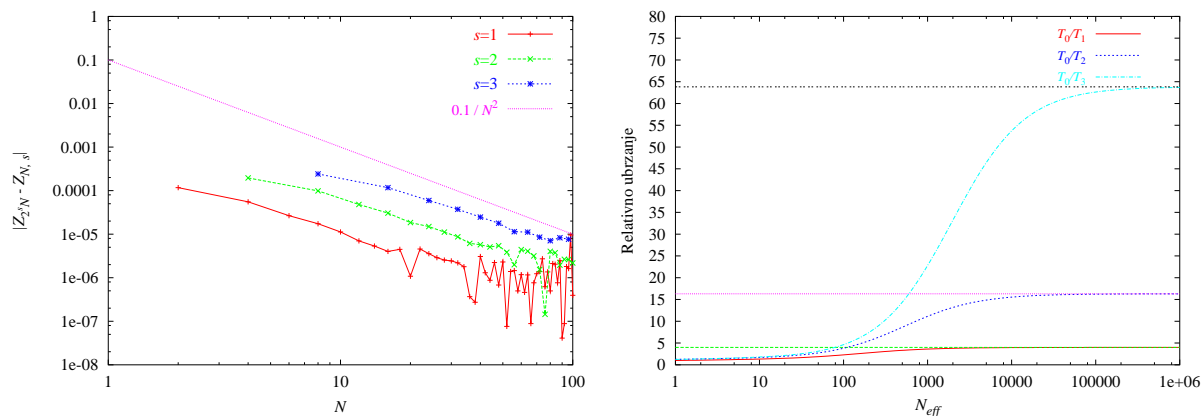
Greška asocirana sa primenom Gausovog metoda polovljenja se vidi sa levog dela slike 2. Odavde dobijamo da je greška metoda proporcionalna sa $1/N^2$, dakle da je zanemarljiva u odnosu na dominantni član u $1/N$ razvoju Z_N oko njegovog kontinuum limesa

$$Z_N = Z + A/N + B/N^2 + o(1/N^3).$$

Subdominantnost greške koju pravimo pri primeni Gausovog polovljenja je ono što dovodi do toga da sve vrednosti $Z_{N,s}$ leže na jednoj jedinoj krivoj koja zavisi samo od N_{eff} . Sa druge strane, ovo analitičko poboljšanje se u numerici prevodi na brže izračunavanje funkcionalnih integrala (pri istoj preciznosti računanja). Ovo je prikazano na desnom delu slike 2. Sa slike se vidi da korišćenje $S_{N,s}$ umesto početnog dejstva dovodi do velikog ubrzanja. Za veće vrednosti N ovo ubrzanje postaje 4^s , što se lako može razumeti ako se ima u vidu da je vreme izvršavanja Monte Karlo računa proporcionalno sa N_{eff}^2 .

3. Zaključak

Izvedena je metoda za efikasnije računanje funkcionalnih integrala. Metod je detaljno ispitan u slučaju teorija u $d = 1$ dimenzija, no direktno se može primeniti i u kvantnoj teoriji polja u više dimenzija. Analitička aproksimacija koja stoji iza metoda Gausovog polovljenja je subdominantna u odnosu na razvoj Z_N oko njegove kontinuum vrednosti. Ova analitička procedura dovodi do toga da se iteriranjem relativno jednostavne rekurentne relacije ubrzava računanje



Slika 2: (levo) Apsolutna vrednost greške Gausovog polovljenja za iterate $s = 0, 1, 2, 3$. Radi ilustracije $1/N^2$ zavisnosti greške je prikazana i kriva $0.1/N^2$. (desno) Odnos vremena izvršavanja simulacija za nulti iterat dejstva T_0 i vremena izvršavanja simulacija za više iterate T_s , odnosno relativno ubrzanje. Parametri teorije su $g = 1$, $j = 0$, $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$.

opšteg funkcionalnog integrala. Mada dobijena analitički, izvedena rekurentna relacija je nelinearna i mi smo je u ovom radu i rešavali numerički. Analitički tretman rekurentne relacije koju daje Gausovo polovljenje je dat u drugom radu prezentovanom na ovoj konferenciji.

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] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [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] A. Balaž, A. Belić, A. Bogojević, *Linearizovano Gausovo polovljenje*, (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.
- [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.