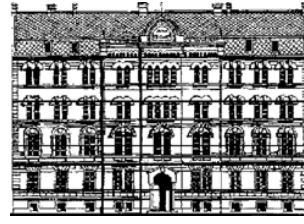




Univerzitet  
u Beogradu



Fizički  
fakultet

Antun Balaž

**Nova rekurzivna formula za funkcionalni  
integral u kvantnoj mehanici: analitičke  
i numeričke osobine**

magistarski rad

Beograd, februar 2004. godine



Zahvalnost za veliki deo svog fizičarskog obrazovanja i uspešnu saradnju (još od srednje škole!) dugujem svom mentoru, dr Aleksandru Bogojeviću (Institut za fiziku, Beograd). Pored presudnog uticaja na izbor zanimanja, on je stvorio veoma podsticajnu radnu atmosferu, pa je nakon diplomskog rada pod takođe njegovim mentorstvom bilo sasvim prirodno da nastavimo saradnju. Uz svog mentora i dr Aleksandra Belića (Institut za fiziku) učinio sam svoje prve korake u fizici. Saradnja sa njima na radovima koje smo zajednički objavili omogućila mi je ne samo da naučim mnogo o teoriji polja, već i o metodologiji naučnog rada, kao i istraživačkom poštenju koje je za naučni rad potrebno. Od dr Aleksandra Belića naučio sam Monte Karlo metod, kao i veći deo onoga što znam o primeni numeričkih metoda u fizici. Od njega sam naučio i mnogobrojne numeričke i programerske trikove koji pisanje simulacija pretvaraju u umetnost.

Čari Linux klastera i paralelnog programiranja (bez kojih ovaj rad ne bi bilo moguće napisati, pošto su paralelne Monte Karlo simulacije bile neophodne za verifikaciju svih dobijenih rezultata, a nekada su čak i kao heurističko oruđe iskorišćene za dobijanje rezultata koji su nakon toga pokazani analitički) otkrili su mi Stefano Cozzini (INFN, SISSA, Trieste, Italy) i Jeremy Enos (NCSA, UIUC, Champaign, Illinois, USA) na predivnoj školi održanoj početkom 2002. godine. Zahvaljujući ovom znanju, kao i saradnji sa dr Aleksandrom Bogojevićem, dr Aleksandrom Belićem i Rašom Karapandžom (Universitat Pompeu Fabra, Barcelona, Spain), nastao je prvi domaći Linux klaster GROM, na kojem su izvršene sve numeričke simulacije čiji su rezultati prikazani u ovom radu.

Želeo bih da se zahvalim i svim članovima naše Grupe za čestice i polja, a posebno prof. dr Maji Burić, doc. dr Voji Radovanoviću i Dušku Latašu (Fizički fakultet, Beograd) na saradnji i svemu što sam naučio od njih. Stalni podsticaj i ohrabrenje pružali su mi i prof. dr Sunčica Elezović-Hadžić i prof. dr Ilija Savić (Fizički fakultet, Beograd).

Zahvaljujem se i Istraživačkoj stanici Petnica, u kojoj sam započeo svoje početničke korake u nauci. U Petnici sam upoznao mnoge današnje prijatelje, prvi put ušao u pravu naučnu biblioteku i napisao svoju prvu numeričku simulaciju. U Petnici sam naučio i da cenim druge nauke, sem fizike.

Naravno, ništa ne bih uspeo da uradim da nije bilo neprekidne podrške moje porodice, koja se odrekla mnogo čega da bi mi pomogla. Nadam se da ću bar delić toga uspeti da joj vratim. Zahvaljujem se i prijateljima na moralnoj podršci koja mi je često bila neophodna. Žao mi je što ne mogu sve da ih pojedinačno pomenem, ali sam siguran da to njima nije bitno. Bitno je ono što imam da im kažem: hvala.

I na kraju, zahvaljujem se instituciji koja je stajala iza mene svih ovih godina, Institutu za fiziku iz Beograda. Bez resursa i materijalne podrške koju je Institut obezbeđivao ovaj rad nikada ne bi bio završen.

Beograd, 20. februar 2004. godine

Antun Balaž



# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Funkcionalni integral u kvantnoj mehanici</b>	<b>5</b>
2.1	Definicija funkcionalnog integrala . . . . .	6
2.2	Funkcionalni integral za slobodnu česticu . . . . .	11
2.3	Metodi računanja funkcionalnih integrala . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Rekurzivna formula</b>	<b>15</b>
3.1	Izvođenje rekurzivne formule . . . . .	17
3.2	Primena rekurzivne formule na slobodnu teoriju . . . . .	25
3.3	Rekurzivna formula za očekivane vrednosti . . . . .	27
3.4	Rezultati numeričkih simulacija . . . . .	28
3.5	Efektivno ubrzanje . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Linearizovana rekurzivna formula</b>	<b>37</b>
4.1	Izvođenje linearizovane rekurzivne formule . . . . .	37
4.2	Rešenje linearizovane rekurzivne formule . . . . .	38
4.3	Rezultati numeričkih simulacija . . . . .	40
4.4	Kontinuum limes . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Aproksimativna algebarska formula</b>	<b>49</b>
<b>6</b>	<b>Zaključak</b>	<b>55</b>
<b>A</b>	<b>Elementarni uvod u Monte Karlo metod</b>	<b>57</b>
<b>B</b>	<b>Programski kod</b>	<b>63</b>
<b>C</b>	<b>Dodatni rezultati numeričkih simulacija</b>	<b>85</b>
C.1	Originalna rekurzivna formula . . . . .	85
C.2	Linearizovana rekurzivna formula . . . . .	94
C.3	Aproksimativna algebarska formula . . . . .	109
	<b>Literatura</b>	<b>113</b>



# 1

## Uvod

Kanonska formulacija kvantne mehanike i kvantne teorije polja počiva na operatorskom formalizmu, koji je i stvoren prilikom zasnivanja ovih teorija u prvoj polovini XX veka. Mali broj analitički rešivih problema podstakao je fizičare na razvijanje približnih metoda za računanje relevantnih fizičkih veličina. Tako je nastao semiklasičan razvoj, teorija perturbacija, različite varijacione metode itd. Pored toga, razvijene su i različite, ali međusobno ekvivalentne formulacije ovih teorija, u želji da se bolje sagledaju problemi koji se ne mogu egzaktno rešiti. Ako je neka teorija egzaktno rešiva u jednoj formulaciji, onda je ona rešiva i u drugoj, ekvivalentnoj, formulaciji. Naravno, rešavanje pojedinih problema je često mnogo lakše u jednom formalizmu nego u drugom. Međutim, u fizici nas najčešće interesuju složeniji modeli koji se ne mogu egzaktno rešiti. Da bi ovakve modele mogli uspešno da proučavamo nekom aproksimativnom metodom, potrebno je da oni predstavljaju malu deformaciju nekog egzaktno rešivog modela. Ovde dolazi do izražaja potreba za različitim formulacijama kvantne teorije. Različitim formulacijama odgovaraju i donekle različite prirodne deformacije rešivih modela.

Funkcionalni formalizam, koji ćemo koristiti u ovom radu, idealan je za proučavanje simetrija neke teorije. Na primer, kod gejdž teorija<sup>1</sup> ovaj formalizam omogućava da na elegantan način zadržimo relativističku kovarijantnost teorije istovremeno fiksirajući kalibracioni uslov. Pored toga, funkcionalni formalizam je posebno pogodan za proučavanje spontanog narušenja simetrije i faznih prelaza, a nudi nam i određenu vizuelizaciju kvantnih procesa, što omogućava da se razvije nova intuicija, koja može da pomogne u sagledavanju i rešavanju problema novom metodom. Funkcionalni formalizam se pokazao kao posebno koristan opšti okvir pri formulaciji novih teorija od kojih je svaka zahtevala izvesno uopštenje uobičajene procedure kvantovanja. Najbolji primeri za to su teorija struna i kvantna teorija polja na nekomutativnim prostorima.

Razvoj funkcionalnog formalizma započeo je Pol Dirak [1] 1933. godine<sup>2</sup>, primećujući da dejstvo (odnosno lagranžijan), koje u klasičnoj fizici ima ključnu ulogu i određuje evoluciju sistema, u dotadašnjoj kvantnoj fizici nije imalo praktično nikakvu ulogu. Razmatrajući ovo pitanje, Dirak je zaključio [3] da je moguće uključiti dejstvo u kvantnu fiziku i da kvantno–mehaničkom propagatoru, u određenom smislu, odgovara izraz  $e^{iS/\hbar}$ , gde je  $S$  dejstvo na klasičnoj trajektoriji. Ričard Fajnman je nastavio razvoj ove ideje i 1948. godine [4] je objavio novu formulaciju kvantne mehanike (treću po redu, nakon Hajzenbergove i Šredingerove), čiju suštinu je moguće veoma lako objasniti. Za razliku od klasične

---

<sup>1</sup>Gejdž ili lokalne simetrije su dinamičke simetrije koje zavise od prostorno–vremenskih koordinata.

<sup>2</sup>Ovde treba skrenuti pažnju i na pionirski rad Norberta Vinera [2] iz 1923. godine u kome se uvode euklidski funkcionalni integrali za slučaj Braunovog kretanja.

fizike u kojoj je evolucija fizičkog sistema deterministička i određena je klasičnim Ojler–Lagranževim jednačinama kretanja, u kvantnoj mehanici i kvantnoj teoriji polja determinizam se odnosi samo na evoluciju talasne funkcije (odnosno operatora, u zavisnosti od slike) između merenja. Vrednosti fizičkih veličina koje merimo u budućnosti nisu unapred određene, a teorija nam daje mogućnost da izračunamo verovatnoću da neka fizička veličina pri merenju ima unapred zadatu vrednost. U funkcionalnom formalizmu se amplituda verovatnoće za neki proces računa tako što se uzmu u obzir doprinosi svih mogućih evolucija sistema od zadatog početnog do zadatog krajnjeg stanja (a ne, kao kod Diraka, samo doprinos klasične evolucije), a težina sa kojom se uračunava neka evolucija je  $e^{iS/\hbar}$ , gde je  $S$  dejstvo teorije koje odgovara toj evoluciji. Kao i Dirak, i Fajnman je smatrao da je Lagranžev pristup u izvesnoj meri fundamentalniji od Hamiltonovog, pa možemo reći da su na ovaj način oni započeli program definisanja kvantne teorije direktno iz Lagranževog formalizma<sup>3</sup>.

Interesantno je napomenuti da se u početku smatralo da je funkcionalni formalizam samo zgodna heuristička alatka koja sadrži važne aspekte kvantne teorije, ali ne sve. Iako je ovaj formalizam pogodan za dobijanje intuitivne slike kvantnih procesa, smatralo se da svi rezultati dobijeni u funkcionalnom formalizmu moraju na kraju da se provere u operatorskom. Razlog za ove sumnje je činjenica da u početku nije bilo jasno gde se u novom formalizmu nalazi zapis nekomutativnosti koji je inherentan svakoj kvantnoj teoriji. Danas je situacija potpuno drugačija i često se u istraživanjima, pa i u udžbenicima, zapravo polazi od funkcionalnog integrala<sup>4</sup>. Kao što ćemo videti kada budemo definisali funkcionalni integral u sledećem poglavlju, nekomutativnost je zaista prisutna u ovom formalizmu, ali se javlja na veoma suptilan način. Razlog zbog koga je za ovo trebalo toliko vremena je što se naše znanje o funkcionalnom integralu može uporediti sa znanjem o običnim integralima pre Rimana. Pre uvođenja koncepta Rimanovih integrala bilo je moguće rešiti samo neke partikularne integrale koristeći specijalne, pogodno izabrane diskretizacije pri računanju Darbuovih suma. Definisanje Rimanovih integrala, koji imaju ključnu osobinu da njihova vrednost ne zavisi od diskretizacije, omogućilo je razvoj praktičnih metoda za njihovo rešavanje. Funkcionalni integrali nisu Rimanovi, to jest njihova vrednost zavisi od diskretizacije<sup>5</sup>. Upravo ta osetljivost na vrstu Darbuove sume predstavlja zapis nekomutativnosti operatorskog formalizma u funkcionalnom formalizmu. Kao što ćemo videti pri

<sup>3</sup>Striktno govoreći, Dirak–Fajnmanov program nije do kraja završen, pošto je za definisanje mere u funkcionalnom integralu neophodno korišćenje Hamiltonovog formalizma u međukoracima. Ovo će biti detaljnije pokazano u sledećem poglavlju, pri definisanju funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru.

<sup>4</sup>Interesantno je uporediti tri osnovne formulacije kvantne teorije sa stanovišta korisnosti. Originalna, kopenhagenska formulacija Hajzenberga i Bora isključuje bilo kakvo razmatranje kvantnog sistema između dva merenja. Ova formulacija je minimalistička. Ona je omogućila čvrsto zasnivanje kvantne mehanike time što ju je potpuno odvojila od klasične. Ipak, ova formulacija se iz istog razloga pokazala i kao najmanje plodna i korisna (sem za filozofiju, gde je podstakla razvoj pozitivizma). Sledeća, Šredingerova formulacija, originalno je pretendovala na davanje potpunog opisa ponašanja kvantnog sistema, čak i u toku merenja. Mada se ispostavilo da ovo ne stoji i da je Šredingerova formulacija ekvivalentna sa Hajzenbergovom matricnom mehanikom, ona ipak ima dve velike prednosti u odnosu na nju. Prvo, daleko je pogodnija za praktičnu primenu. Drugo, opisujući kvantne fenomene formalizmom koji je sličan klasičnom (parcijalne diferencijalne jednačine), pružila nam je izvesne intuitivne slike o kvantnim procesima. Iz oba ova razloga ovo je daleko najkorisnija formulacija za one koji se bave atomskom ili molekularnom fizikom, odnosno hemijom. Treća, Fajnmanova formulacija, ima prednost ne toliko u praktičnim primenama, koliko u istraživačkom smislu – u izgradnji novih modela. Zbog toga je ovo i najkorisnija formulacija kvantne teorije za većinu modernih fizičara.

<sup>5</sup>I pored upornog rada matematičara koji se ovim bave, do danas nije došlo do značajnog prodora u njihovoj aksiomatizaciji.



definisaju funkcionalnog integrala, različite Darbuove sume koje možemo da formiramo odgovaraju različitim uređenjima operatora pri prelasku sa klasične na kvantnu teoriju.

Pored jasne fizičke ideje koja stoji iza ovog formalizma, njegova prednost leži i u tome što se različite aproksimativne metode, ranije izvedene u operatorskom formalizmu, ovde izvode lakše i sa očiglednom fizičkom interpretacijom. Jedna od najvažnijih osobina funkcionalnog formalizma je što je omogućio primenu moćnih numeričkih metoda, kao što je Monte Karlo, za rešavanje relevantnih fizičkih problema. Razlog za to je idealna korespondencija matematičke postavke problema koje želimo da rešimo u ovom formalizmu sa tipičnim problemima za čije rešavanje su upravo i razvijeni pomenuti numerički metodi.

Važno je naglasiti i paralelu između funkcionalnog formalizma kvantne teorije i statističke mehanike, u kojoj se centralni objekt, particiona funkcija, računa na sličan način kao amplituda verovatnoće u kvantnoj mehanici, odnosno generišući funkcional u kvantnoj teoriji polja. Postojanje ove paralele<sup>6</sup> omogućava da se mnogi metodi teorije polja uspešno primenjuju u statističkoj mehanici i teoriji kondenzovanog stanja materije, kao i obratno. Pri tome su se intuicija i iskustvo stečeno u jednoj oblasti često pokazivali korisnim u drugoj oblasti. Navedimo nekoliko najznačajnijih primera. Fajnmanovi dijagrami, koji predstavljaju jedan od najkorisnijih aproksimativnih metoda (perturbativni razvoj) kvantne teorije polja, sa velikim uspehom se primenjuju i u teoriji kondenzovanog stanja. Sa druge strane, renormalizaciona grupa, koja je originalno razvijena u okviru teorije kondenzovanog stanja, široko se primenjuje u teoriji polja. Treći važan primer je teorija faznih prelaza.

Funkcionalni formalizam, koji je kao i mnoge druge fizičke teorije, razvijen bez odgovarajuće matematičke pozadine, ujedno je inicirao razvoj i dao značaj novim oblastima matematike, kao što su diferencijalna geometrija, algebarska topologija i teorija homologija i homotopija. Moderni matematičari sve više liče na fizičare: oni koriste i razvijaju ovaj novi formalizam, a ne fokusiraju sve napore na njegovu aksiomatizaciju i verifikaciju egzistencije.

Imajući u vidu sve ovo, ideja vodilja ovog rada je da se računanje funkcionalnih integrala pojednostavi korišćenjem nove aproksimativne šeme, Gausovog polovljenja, koje će biti definisano u trećem poglavlju. Nova aproksimacija se efektivno svodi na prelazak sa funkcionalnog integrala u diskretizaciji sa  $2N$  podeonih tačaka intervala evolucije na diskretizaciju sa  $N$  podeonih tačaka. Ovaj prelazak se ostvaruje tako što se izvrše integracije po neparnim promenljivim u definiciji funkcionalnog integrala. Da bi ovo bilo moguće, neparni integrali se na odgovarajući način aproksimiraju Gausovim. Prelazak na dvostruko grublju diskretizaciju praćen je promenom originalnog dejstva novim, efektivnim dejstvom. Razvijeni metod ima zanimljive posledice u analitičkom pristupu, dajući nam mogućnost da definišemo nizove različitih teorija koje sve opisuju istu fiziku, pošto imaju isti kontinuum limes. Koristeći linearizovanu verziju novog metoda za računanje funkcionalnih integrala izveli smo i nekoliko aproksimativnih analitičkih formula, koje se mogu porediti sa drugim metodima, kao što su semiklasičan ili perturbativan razvoj. Bitna osobina razvijenog metoda je da je primenljiv i izvan semiklasičnog sektora, u kojem druge metode daju loše rezultate.

Treba napomenuti da je Gausovo polovljenje moglo da bude razvijeno i ranije. Analitički preduslovi za ovo postoje od samog zasnivanja funkcionalnog formalizma, dok su numerički preduslovi ispunjeni u poslednjih desetak godina. Ispunjenost numeričkih preduslova je neophodna zbog mogućnosti verifikacije i poređenja ove aproksimativne šeme sa drugim, već poznatim i proučenim aproksimacijama, kao i egzaktnim rezultatima. Pored razvijenih numeričkih metoda, u numeričke preduslove spada i razvijen hardver koji omogućava pri-

---

<sup>6</sup>Razlog za postojanje paralele je što ove teorije počivaju na ključnoj linearnoj kombinatornoj strukturi. U statističkoj mehanici je reč o aditivnosti verovatnoća, dok je u kvantnoj teoriji reč o aditivnosti amplituda verovatnoće.

menu numeričkih metoda u razumnom vremenu. Mislimo da osnovni razlog što je tek sada razvijena metoda Gausovog polovljenja leži u dugogodišnjem fokusiranju većine istraživača na primenu i generalizaciju funkcionalnog formalizma i na stvaranje novih modela, a manje na zasnivanje novih opštih aproksimativnih metoda.

Novi metod koji smo razvili primenljiv je u slučaju kvantizacije proizvoljne teorije. U ovom radu ćemo detaljnije ispitati osobine nove aproksimativne šeme na slučaju kvantne teorije polja u jednoj dimenziji (što je ekvivalentno standardnoj kvantnoj mehanici). Primena Gausovog polovljenja na višedimenzionalne modele biće predmet daljih istraživanja.

Ovaj rad ima sledeću strukturu: u narednom, drugom poglavlju je definisan funkcionalni integral u kvantnoj mehanici u faznom i u konfiguracionom prostoru, a zatim je eksplicitno izračunat generišući funkcional slobodne čestice. Nakon toga su pobrojani najvažniji analitički aproksimativni metodi u funkcionalnom formalizmu i objašnjeno je kako se numerički izračunavaju funkcionalni integrali. U trećem poglavlju je uvedeno Gausovo polovljenje i izvedena rekurzivna formula koja omogućava efikasnije računanje funkcionalnih integrala, kako u analitičkom, tako i u numeričkom smislu. Na osnovu rezultata Monte Karlo simulacija koje smo razvili za potrebe ovog rada proverena je primenljivost novog metoda. Na kraju trećeg poglavlja je kvantifikovano ubrzanje, odnosno povećanje efikasnosti u računanju koje daje ova metoda. U četvrtom poglavlju su rekurzivne formule Gausovog polovljenja linearizovane i egzaktno rešene. Svi analitički izvedeni rezultati su provereni korišćenjem rezultata numeričkih simulacija i upoređeni sa rezultatima koji se dobijaju primenom originalnih rekurzivnih formula. U poslednjem odeljku ovog poglavlja je razmatran kontinuum limes linearizovane rekurzivne formule i pokazano je da njegova primena predstavlja optimalnu strategiju za računanje funkcionalnih integrala. U petom poglavlju izvedena je algebarska aproksimativna formula za funkcionalni integral i dati su numerički rezultati na osnovu kojih je ocenjen kvalitet ove formule. U šestom poglavlju su sumirani svi rezultati i dati su zaključci. Dodatak A predstavlja elementaran uvod u Monte Karlo metod, u Dodatku B naveden je i diskutovan programski kod razvijenih numeričkih Monte Karlo simulacija, dok su u Dodatku C prikazani kompletni rezultati numeričkih simulacija za širok opseg parametara proučavane teorije (anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom).

## 2

# Funkcionalni integral u kvantnoj mehanici

U klasičnoj mehanici, kretanje čestice u jednoj prostornoj dimenziji određeno je njenim koordinatama  $q$  i  $p$  u faznom prostoru, dok je dinamika definisana pomoću hamiltonijana, koji se u većini slučajeva od fizičkog interesa može predstaviti u obliku  $H(p, q) = f_{ab}p^a q^b$ , gde je sa  $p$  označen generalisani impuls konjugovan koordinati  $q$ , a po ponovljenim indeksima se podrazumeva sumiranje. Prelazak na kvantnu mehaniku u operatorskom formalizmu definisan je korespondencijom  $q \rightarrow \hat{q}$ ,  $p \rightarrow \hat{p}$ , gde su sada  $\hat{q}$  i  $\hat{p}$  hermitski operatori u odgovarajućem Hilbertovom prostoru, pri čemu važi  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ . Jasno je da prelazak sa komutirajućih na nekomutirajuće varijable nije jednoznačno definisan na ovaj način. Na primer, klasičnom izrazu  $qp$  možemo da pridružimo operatore  $\hat{q}\hat{p}$  i  $\hat{p}\hat{q}$  koji su međusobno različiti, a gornja definicija ne daje preciznu preskripciju. Nejednoznačnost se ne otklanja ni zahtevom da preskripcija pridružuje hermitske operatore klasičnim funkcijama (opservablama). To znači da i hamiltonijanu možemo da pridružimo različite operatore: u levoj preskripciji imamo operator  $\hat{H}_L = f_{ab}\hat{p}^a\hat{q}^b$ , a u desnoj  $\hat{H}_D = f_{ab}\hat{q}^b\hat{p}^a$ . Primetimo ovde da operatori  $\hat{H}_L$  i  $\hat{H}_D$  nisu hermitski, ali da je reč o posebno jednostavnim uređenjima koja ćemo koristiti kasnije da pokažemo neke osobine funkcionalnog integrala. U praksi se najčešće koristi Vajlova [5, 6] simetrična preskripcija  $\hat{H}_W = f_{ab}(\hat{p}^a\hat{q}^b)_W$ , u kojoj se svaki sabirak u klasičnom hamiltonijanu totalno simetrizuje po svim koordinatama i impulsima. Formalna definicija Vajlove preskripcije data je implicitno pomoću izraza

$$(\alpha\hat{p} + \beta\hat{q})^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \alpha^k \beta^{n-k} (\hat{p}^k \hat{q}^{n-k})_W.$$

Na primer, Vajlovom preskripcijom dobijamo

$$\begin{aligned} pq &\rightarrow (\hat{p}\hat{q})_W = \frac{1}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}), \\ p^2q &\rightarrow (\hat{p}^2\hat{q})_W = \frac{1}{3}(\hat{p}^2\hat{q} + \hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{q}\hat{p}^2) \text{ itd.} \end{aligned}$$

Očigledno je da ovo uređenje uvek daje hermitske operatore<sup>1</sup>.

Ako sa  $|q, t\rangle$  označimo stanje kvantnog sistema u trenutku  $t$ , a sa  $A(\alpha, t_\alpha; \beta, t_\beta)$  skalarni proizvod (amplitudu verovatnoće)  $\langle \beta, t_\beta | \alpha, t_\alpha \rangle$ , tada je verovatnoća za prelaz iz stanja

---

<sup>1</sup>Iscrpna diskusija o Vajlovoj i drugim mogućim preskripcijama pri prelasku sa klasičnog na kvantni hamiltonijan može se naći u [7, 8].

$|\alpha, t_\alpha\rangle$  u trenutku  $t_\alpha$  u stanje  $|\beta, t_\beta\rangle$  u trenutku  $t_\beta$  data sa  $|A(\alpha, t_\alpha; \beta, t_\beta)|^2$ . Ukoliko za dati hamiltonijan možemo da izračunamo sve ovakve amplitude, odnosno odgovarajuće verovatnoće prelaza, onda smo rešili teoriju u potpunosti [9], odnosno sve opservabilne veličine možemo da izrazimo pomoću odgovarajućih amplituda verovatnoće. Početna tačka u uvođenju funkcionalnog formalizma je upravo računanje amplitude  $A$  za proizvoljno početno i krajnje stanje kvantnog sistema. U Šredingerovoj slici amplitudu verovatnoće prelaza možemo da napišemo u obliku matričnog elementa

$$A(\alpha, t_\alpha; \beta, t_\beta) = \langle \beta | \hat{U}(t_\beta - t_\alpha, t_\alpha) | \alpha \rangle,$$

gde je  $\hat{U}(t_\beta - t_\alpha, t_\alpha)$  evolucionni operator, koji opisuje evoluciju sistema od trenutka  $t_\alpha$  do trenutka  $t_\beta$ . Argumenti evolucionog operatora su vreme trajanja evolucije  $t_\beta - t_\alpha$  i početak evolucije  $t_\alpha$ . Ukoliko se ograničimo na konzervativne sisteme (kada konstante  $f_{ab}$  ne zavise od vremena), koji su invarijantni na vremenske translacije, evolucionni operator zavisi samo od razlike  $T = t_\beta - t_\alpha$ , odnosno  $\hat{U} = \hat{U}(T)$ , a isto važi i za amplitudu  $A = A(\alpha, \beta, T)$ . Za takve sisteme je evolucionni operator dat sa

$$\hat{U}(T) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} T \right\}.$$

U operatorskom formalizmu problem računanja amplitude  $A$  svodi se na eksponenciranje hamiltonijana i nalaženje evolucionog operatora, a nakon toga na računanje odgovarajućih matričnih elemenata. Mi ćemo ovde krenuti nešto drugačijim putem, uvodeći funkcionalni formalizam u kvantnu mehaniku (pedagoški pristup se može naći u [10, 11]). Najjednostaviji pristup je da razmotrimo vremensku evoluciju od trenutka  $t_\alpha$  do trenutka  $t_\beta$  kao uzastopni niz od  $N$  evolucija, od kojih svaka traje  $\epsilon = T/N$ .

## 2.1 Definicija funkcionalnog integrala

Da bismo izračunali amplitudu  $A$ , vremenski interval evolucije sistema  $T$  podelićemo na  $N$  jednakih delova pomoću  $N - 1$  podeonih tačaka  $t_n = t_\alpha + n\epsilon$ , gde je vremenski korak  $\epsilon = T/N$ , a  $n \in \{1, \dots, N - 1\}$ . Zbog konciznosti oznaka uvešćemo konvenciju po kojoj je  $t_0 = t_\alpha$ ,  $t_N = t_\beta$ ,  $q_0 = \alpha$  i  $q_N = \beta$ . Ukoliko sada u definiciju amplitude  $A$  umetnemo  $N - 1$  razlaganja jedinice u koordinatnoj reprezentaciji, dobićemo:

$$A(\alpha, \beta, T) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q_N | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_1 | \hat{U}(\epsilon) | q_0 \rangle. \quad (2.1)$$

U gornjem izrazu imamo proizvod matričnih elemenata oblika  $\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle$ , koji se za dovoljno malu vrednost veličine vremenog koraka  $\epsilon$  (odnosno za dovoljno veliku vrednost broja koraka  $N$ , što uvek možemo da obezbedimo) približno mogu izračunati tako što se evolucionni operator  $\hat{U}(\epsilon)$  napiše kao  $\hat{U}(\epsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}$ , pa je traženi matrični element jednak  $\langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H} | q_n \rangle$ . Ako smo usvojili levu preskripciju koja daje hamiltonijan  $\hat{H}_L$ , tada ćemo ovaj matrični element izračunati umetanjem još jednog razlaganja jedinice, ali ovoga puta u impulsnoj reprezentaciji,

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L \approx \langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle.$$

Sada ćemo iskoristiti vrednost skalarnog proizvoda  $\langle q|p\rangle = \langle p|q\rangle^* = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}pq\right\}/\sqrt{2\pi\hbar}$ , kao i činjenicu da je matični element  $\langle p|\hat{H}_L|q\rangle = \langle p|f_{ab}\hat{p}^a\hat{q}^b|q\rangle = f_{ab}p^a q^b = H(p, q)$  jednak vrednosti klasičnog hamiltonijana za vrednost impulsa  $p$  i koordinate  $q$ . Kada ovo uzmemo u obzir, dobijamo

$$\begin{aligned}\langle q_{n+1}|\hat{U}(\epsilon)|q_n\rangle_L &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}p_n(q_{n+1} - q_n)\right\}}{2\pi\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(p_n, q_n)\right) \approx \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}p_n(q_{n+1} - q_n)\right\}}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(p_n, q_n)\right\}.\end{aligned}$$

Gornje približne jednakosti važe do na linearne članove po vremenskom koraku  $\epsilon$ . U krajnjem koraku ćemo iskoristiti limes  $N \rightarrow \infty$ , pa će ove jednakosti postati egzaktno. Primećimo, međutim, da je poslednji oblik posebno koristan za dalji rad, jer će biti potrebno da pomnožimo  $N - 1$  ovakvih matičnih elemenata. Dakle, dobili smo

$$\langle q_{n+1}|\hat{U}(\epsilon)|q_n\rangle_L \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_n)\right]\right\}, \quad (2.2)$$

gde smo, kao i ranije, sa  $H(p_n, q_n)$  označili vrednost klasičnog hamiltonijana za vrednost impulsa  $p = p_n$  i koordinate  $q = q_n$ .

Slično, ukoliko usvojimo desnu preskripciju za prelazak na kvantni hamiltonijan, matični element je dat sa

$$\langle q_{n+1}|\hat{U}(\epsilon)|q_n\rangle_D \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_{n+1})\right]\right\}. \quad (2.3)$$

Za Vajlovu preskripciju, koju ćemo ubuduće isključivo koristiti (zato ne stavljamo indeks  $W$  kod matičnog elementa), dobija se [5, 7, 12]

$$\langle q_{n+1}|\hat{U}(\epsilon)|q_n\rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H\left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right)\right]\right\}. \quad (2.4)$$

Izrazi (2.2), (2.3) i (2.4) predstavljaju primere leve, desne i srednje Darbuove sume. Oni dovode do različitih vrednosti za amplitudu  $A$ , što pokazuje da funkcionalni integrali nisu Rimanovi. Svaki pojedinačni integral u definiciji funkcionalnog integrala jeste Rimanov, ali limes  $N \rightarrow \infty$  daje rezultat koji ne pripada ovom skupu. Iz gornjeg izvođenja se vidi da ovo nije slučajnost, već da je upravo ovo mesto gde se u funkcionalnom formalizmu krije zapis nekomutativnosti.

Kada rezultat (2.4) unesemo u jednačinu (2.1) i pustimo da broj vremenskih koraka  $N$  teži beskonačnosti, za amplitudu  $A$  dobijamo izraz

$$\begin{aligned}A(\alpha, \beta, T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \frac{dp_1 dq_1}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1} dq_{N-1}}{2\pi\hbar} \cdot \\ &\cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H\left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right)\right]\right\}.\end{aligned} \quad (2.5)$$

Gornji izraz predstavlja standardnu definiciju funkcionalnog integrala u faznom prostoru. Uobičajena oznaka za ovaj funkcionalni integral,

$$A(\alpha, \beta, T) = \int [dq dp] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_\alpha}^{t_\beta} (p\dot{q} - H) dt\right\},$$

podseća nas da u eksponentu izraza (2.5) imamo sumu koja predstavlja diskretizovanu vrednost integrala  $\frac{i}{\hbar} \int_{t_\alpha}^{t_\beta} (p\dot{q} - H) dt = \frac{i}{\hbar} S$ , gde je  $S$  dejstvo teorije. Funkcionalni integral u konfiguracionom prostoru dobija se nakon dodatne integracije po impulsima. U opštem slučaju integraciju po impulsima nije moguće izvršiti u zatvorenom obliku. U ovom smislu Dirakov i Fajnmanov program definisanja kvantnog formalizma u konfiguracionom prostoru nije u potpunosti doveden do kraja.

Kao što vidimo iz gornje definicije funkcionalnog integrala u faznom prostoru, broj integracija po koordinatama i impulsima je različit: imamo  $N - 1$  integracija po koordinatama, a  $N$  integracija po impulsima. Posledica ove činjenice je da se očigledno gubi kanonska invarijantnost mere<sup>2</sup>.

U ovom radu ograničićemo se na klasu lagranžijana oblika  $L = \frac{1}{2} G(q) \dot{q}^2 - V(q)$ , odnosno hamiltonijana oblika  $H = \frac{1}{2} G^{-1}(q) p^2 + V(q)$ . Ova klasa sadrži sve relevantne fizičke modele, a ima i druge važne osobine koje ćemo detaljno objasniti u sledećem poglavlju, pri izvođenju rekurentne formule za funkcionalni integral. Ova klasa teorija ima i dodatnu važnu osobinu da je za nju moguće kompletiranje Dirakovog i Fajnmanovog programa i definisanje funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Naime, za ovu klasu hamiltonijana možemo da izračunamo integrale po impulsima u definiciji (2.5). Ako prepisemo integrale po impulsima iz jednakosti (2.5), vidimo da su to Gausovi integrali,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[ p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - \frac{1}{2} G^{-1} \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) p_n^2 - V \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right]}. \quad (2.6)$$

Tipičan faktor u izrazu (2.6) ima oblik

$$\exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{\hbar} V \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{2\hbar} G^{-1} \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) p_n^2 + \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\},$$

pa primenom standardne procedure za rešavanje Gausovih integrala<sup>3</sup> za rešenje gornjeg integrala dobijamo

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{\hbar} V \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right\} \sqrt{\frac{G \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right)}{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\hbar} G \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 \right\} = \\ & = \sqrt{\frac{G \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right)}{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} G \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Ako sada u definiciju (2.5) uvrstimo ovaj rezultat, za amplitudu  $A$  ćemo dobiti novu formulu, koja sada zavisi samo od integrala po konfiguracionim promenljivim

$$A(\alpha, \beta, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \cdots dq_{N-1} \left( \prod_{k=0}^{N-1} \sqrt{\frac{G \left( \frac{q_{k+1} + q_k}{2} \right)}{2\pi\hbar i\epsilon}} \right).$$

<sup>2</sup>Može se pokazati da mera funkcionalnog integrala nije kanonski invarijantna čak ni pri računanju traga evolucionog operatora  $\text{Tr} U = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q|U|q \rangle$ , mada funkcionalni integral za ovaj izraz ima jednak broj integracija po impulsima i koordinatama.

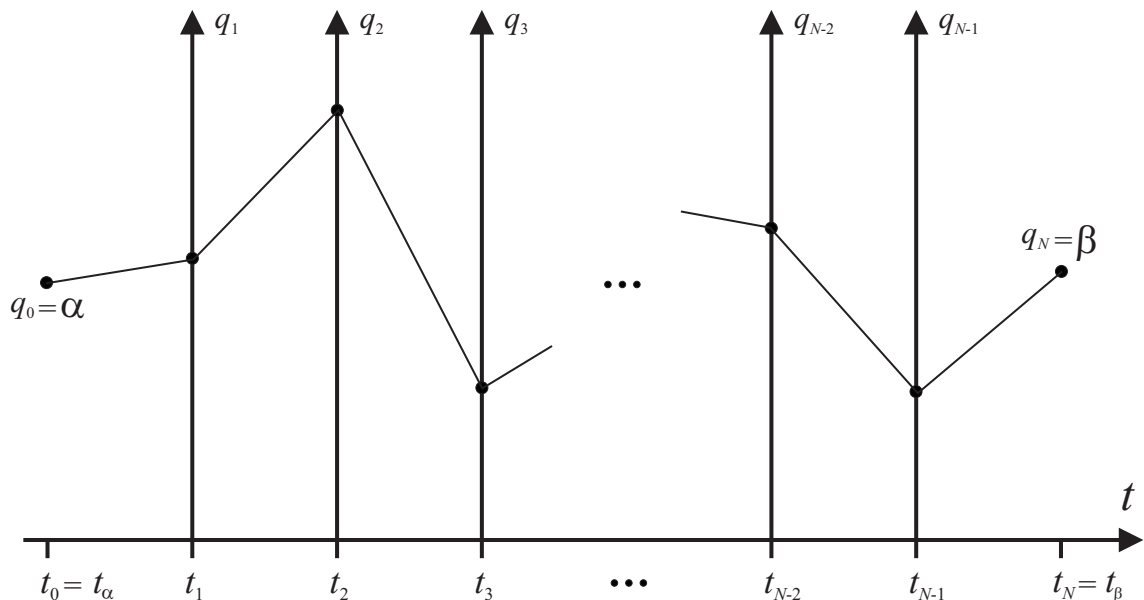
<sup>3</sup>Iz tablične vrednosti za najjednostavniji oblik Gausovog integrala,  $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-ax^2\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ , može se dobiti i rešenje Gausovog integrala u najopštijem obliku, korišćenjem jednostavne transformacije  $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-ax^2 - bx - c\} = \exp\left\{\frac{b^2}{4a} - c\right\} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-a\left(x + \frac{b}{2a}\right)^2\right\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\frac{b^2}{4a} - c\right\}$ . Ovde se pretpostavlja da je realni deo parametra  $a$  pozitivan, što se u našem slučaju može postići dodavanjem malog negativnog imaginarnog dela vremenskom koraku  $\epsilon$ .

$$\cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[ \frac{1}{2} G \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\}. \quad (2.7)$$

Ovo je ujedno i definicija funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru za razmatranu klasu teorija. Uobičajeni formalni zapis ovog integrala je integral,

$$A(\alpha, \beta, T) = \int [d\mu] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\} = \int [d\mu] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[q(t)] \right\}.$$

Gornja definicija nam pruža jasnu fizičku interpretaciju funkcionalnog integrala: vrednost amplitude verovatnoće za prelazak iz početnog stanja  $|\alpha\rangle$  u finalno stanje  $|\beta\rangle$  dobijamo tako što saberemo doprinose svih mogućih evolucija, odnosno svih mogućih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove  $q(t_\alpha) = \alpha$  i  $q(t_\beta) = \beta$ . Pri tome je doprinos svake trajektorije određen težinskim faktorom  $\exp\{\frac{i}{\hbar}S\}$  (i merom  $\mu$ ), gde je  $S$  dejstvo koje odgovara posmatranoj trajektoriji. Skup mogućih trajektorija ima neprebrojivo mnogo elemenata, a praktična definicija (2.7) nam daje uputstvo kako da uračunamo njihove doprinose, kako u analitičkom, tako i u numeričkom pristupu. Na slici 2.1 je ilustrovana definicija funkcionalnog integrala.



Slika 2.1: Ilustracija definicije (2.7) funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Skup svih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove  $q(t_\alpha) = \alpha$  i  $q(t_\beta) = \beta$  se aproksimira skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od  $N$  duži. Unutrašnje granične tačke ovih duži su promenljive i mogu da se nađu na proizvoljnom mestu na odgovarajućoj pravoj. Ovo odgovara integraciji po promenljivim  $q_1, \dots, q_{N-1}$  u definiciji funkcionalnog integrala.

Kao što smo videli, funkcionalni integral je dat kao suma izraza  $\exp\{\frac{i}{\hbar}S\}$ . Ova forma funkcionalnog integrala je posebno pogodna za korišćenje semiklasične aproksimacije, to jest asimptotskog razvoja po (malom) parametru  $\hbar$ . Kolokvijalni izrazi “ $\hbar$  je malo”, odnosno “semiklasični sektor” će stoga označavati da za odgovarajuće trajektorije važi  $\hbar \ll S$ . Na sličan način će “ $\hbar$  je veliko”, odnosno “ultrakvantni sektor” zapravo znače da je  $\hbar \gg S$ . Sam semiklasični razvoj se implementira metodom stacionarne faze<sup>4</sup>. Uslov stacionarne faze

<sup>4</sup>U euklidskoj teoriji je to metoda najbržeg spusta, odnosno u opštem slučaju kompleksnog prostora, metoda sedlaste tačke.

daje  $\frac{\delta S}{\delta q} = 0$ , što je prosto klasična jednačina kretanja. Semiklasičan razvoj nam govori (u slučaju da je  $\hbar$  malo) da dominantan doprinos funkcionalnom integralu daju trajektorije koje su blizu rešenja klasične jednačine kretanja  $q_{cl}$ . U ovom slučaju je  $q_{cl}$  tačno u sredini relevantne oblasti jer je  $q_{cl} \approx \langle q \rangle$ . Ova situacija je prikazana na slici 2.2. Semiklasičan razvoj se u kvantnoj teoriji polja još zove i razvoj po petljama, pošto se pokazuje da Fajnmanovi dijagrami sa  $n$ -petlji daju doprinose proporcionalne sa  $\hbar^n$ . Primetimo da je ovde zaista reč o asimptotskom, a ne Tejlorovom razvoju po  $\hbar$ , pošto dijagrami bez petlji mogu dati doprinose oblika  $e^{-\frac{1}{\hbar}}$ , u kojima je tačka  $\hbar = 0$  esencijalni singularitet. Doprinosi ovog tipa su fizički izuzetno važni jer opisuju “najkvantnije” procese, kao što su tuneliranje, odnosno u teoriji polja solitone i narušenje simetrije.

Povećanjem  $\hbar$  dolazi do dva efekta: širi se oblast relevantnih trajektorija, ali i  $q_{cl}$  počinje da bitnije odstupa od  $\langle q \rangle$ , to jest od sredine ove oblasti (slika 2.3). U ovom slučaju je podesno uvesti novu aproksimativnu šemu u kojoj se razvoj ne vrši oko  $q_{cl}$ , već oko  $\langle q \rangle$ . Poboljšana aproksimacija je razmatrana u radovima [13 – 18], gde je pokazano da nova šema zaista ima prednosti na uobičajen semiklasičan razvoj. Mana ove nove procedure leži u tome što se razvoj ne vrši više oko poznatog  $q_{cl}$ , već oko  $\langle q \rangle$ , čije je računanje jednako složeno kao i računanje početnog funkcionalnog integrala. Praktična implementacija ove poboljšane metode stoga polazi od samousaglašene procedure računanja funkcionalnog integrala i odgovarajuće očekivane vrednosti.

U ultrakvantnom sektoru,  $\hbar$  postaje toliko veliko da aproksimacije ovog tipa više nisu primenljive. U tom slučaju sve trajektorije postaju jednako važne pri računanju funkcionalnog integrala.

Još jedna uobičajena aproksimativna metoda je perturbativni (Tejlorov) razvoj po konstanti interakcije  $g$ . Veza između perturbativnog i semiklasičnog razvoja je posebno jednostavna za teorije sa jednom konstantom interakcije. Na primer, za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom, dejstvo je dato sa

$$S[q(t); \omega, g] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \frac{1}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q^2 - \frac{g}{4!} q^4 \right).$$

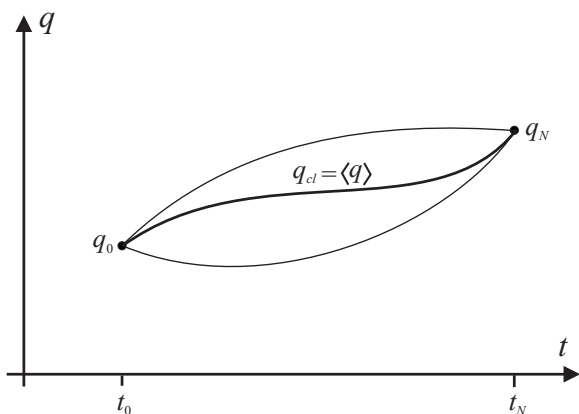
Reskaliranjem  $q \rightarrow Q/\sqrt{g}$  dobijamo

$$\frac{1}{\hbar} S[q(t); \omega, g] \rightarrow \frac{1}{\hbar g} S[Q(t); \omega, 1].$$

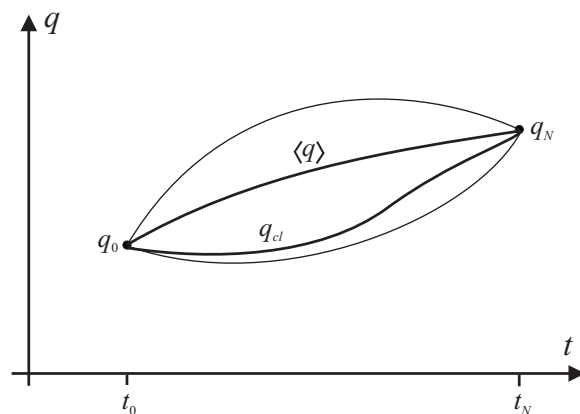
U ovom slučaju je relevantan parametar zapravo  $\hbar g$ . Sada možemo da pređemo na prirodni sistem jedinica, definisan sa  $\hbar = c = 1$  (povratak na uobičajene jedinice se lako može ostvariti korišćenjem dimenzione analize). Vidimo sada da obe aproksimativne šeme (semiklasična i perturbativna) podrazumevaju razvoj po malom  $g$ . Semiklasičan razvoj je, međutim, bogatija (a i fizički zasnovanija) aproksimacija jer sadrži i neperturbativne efekte, kao što je tuneliranje.

Primetimo da je i u teorijama sa netrivialnom merom u funkcionalnom integralu  $[d\mu] = \mu[q][dq]$  moguće primeniti metod stacionarne faze ukoliko se faktor  $\mu[q]$  napiše u obliku  $\mu[q] = \exp\{\ln \mu[q]\}$ . Na ovaj način se mera može svesti na trivijalan oblik, ali se u eksponentu podintegralne funkcije, pored dejstva, pojavljuje dodatan aditivni član,  $S \rightarrow S + \frac{\hbar}{i} \ln \mu[q]$ , koji ima eksplicitnu  $\hbar$  zavisnost. Metoda stacionarne faze u ovom slučaju ne odgovara asimptotskom razvoju po  $\hbar$ , dakle ne predstavlja semiklasičnu aproksimaciju.





Slika 2.2: Trajektorije koje daju dominantan doprinos funkcionalnom integralu u semiklasičnom sektoru su bliske rešenju klasičnih jednačina kretanja i važi  $q_{cl} \approx \langle q \rangle$ . Širina relevantne oblasti oko klasičnog rešenja je proporcionalna sa  $\hbar$ .



Slika 2.3: Trajektorije koje daju dominantan doprinos funkcionalnom integralu u sektoru između semiklasičnog i ultrakvantnog. Oblast je šira nego pre, pošto je  $\hbar$  veće. Istovremeno,  $q_{cl}$  je daleko od  $\langle q \rangle$ , odnosno od sredine ove oblasti.

## 2.2 Funkcionalni integral za slobodnu česticu

U ovom odeljku ćemo ilustrovati analitički način računanja funkcionalnih integrala na primeru slobodne čestice. Dobijeni rezultat, pored pedagoškog značaja, ima i veliku praktičnu upotrebnost: pomoću njega je moguće verifikovati korektnost razvijenog Monte Karlo programskog koda za numeričko računanje funkcionalnih integrala. Verifikacija koda je veoma važan korak u primeni bilo kog numeričkog metoda i neophodno ga je sprovesti pre ozbiljne primene.

Za lagranžijan slobodne čestice,  $L_0 = \frac{1}{2}\dot{q}^2$ , izračunaćemo amplitudu  $A_0(\alpha, \beta, T)$ , definisanu sa

$$A_0(\alpha, \beta, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi i \epsilon)^{N/2}} \exp \left\{ i \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2} \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 \right\}.$$

Ove integrale možemo eksplicitno da rešimo zato što, nakon integracije po  $q_1$ , dobijamo rezultat koji ima isti oblik kao i gornji izraz, pa je integraciju moguće lako nastaviti. Ako pođemo od integrala koji u podintegralnoj funkciji ima samo članove koji zavise od  $q_1$ ,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{(2\pi i \epsilon)^{2/2}} \exp \left\{ \frac{i [(q_2 - q_1)^2 + (q_1 - q_0)^2]}{2\epsilon} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \cdot (2\epsilon)}} \exp \left\{ \frac{i(q_2 - q_0)^2}{2 \cdot (2\epsilon)} \right\},$$

i ako dobijeni izraz pomnožimo sa  $\exp \left\{ \frac{i}{2\epsilon} (q_3 - q_2)^2 \right\} / \sqrt{2\pi i \epsilon}$  i nakon toga prointegralimo po promenljivoj  $q_2$ , dobićemo rezultat  $\exp \left\{ \frac{i}{2 \cdot (3\epsilon)} (q_3 - q_0)^2 \right\} / \sqrt{2\pi i \cdot (3\epsilon)}$ . Očigledno, ako sličan postupak ponovimo  $N - 2$  puta, dobićemo traženi funkcionalni integral za slobodnu česticu,

$$A_0(\alpha, \beta, T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i T}} \exp \left\{ \frac{i}{2T} (\beta - \alpha)^2 \right\}.$$

## 2.3 Metodi računanja funkcionalnih integrala

Kao što smo naglasili u Uvodu, samo za veoma uzak krug teorija moguće je egzaktno rešiti funkcionalni integral. Zbog toga je razvijeno nekoliko različitih aproksimativnih metoda za

njihovo računanje, kako analitičkih, tako i numeričkih. Ovde ćemo dati kratak pregled ovih metoda i sumirati njihove najznačajnije osobine.

Semiklasičan razvoj, kao što smo već naglasili, zasnovan je na metodi stacionarne faze i primenjuje se u sektoru teorije u kome je dejstvo mnogo veće od  $\hbar$  (semiklasičan sektor). Dominantan doprinos funkcionalnom integralu u ovom sektoru daju trajektorije za koje je dejstvo blisko stacionarnoj tački (klasično rešenje). Praktično, ova metoda se koristi tako što se dejstvo razvije u Tejlorov red oko klasičnog rešenja  $q_{cl}$  i eksponent funkcionalnog integrala se faktoriše tako da prvi faktor sadrži samo članove ovog razvoja do kvadratnog reda po  $q - q_{cl}$ , a drugi faktor ostatak. Nakon toga se drugi faktor (eksponent od kubnih i viših članova u razvoju dejstva po  $q - q_{cl}$ ) i sam razvija u Tejlorov red. Na taj način dobijamo samo Gausove integrale i njihove momente, oblika  $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{i x^2\}$ . Ovi momenti se mogu svesti na računanje Gausovih integrala<sup>5</sup>, što nam omogućava da dobijemo aproksimativan izraz za funkcionalni integral u obliku reda po  $\hbar$ . Dominantan član u ovom redu odgovara Gausovom integralu i predstavlja doprinos svih Fajnmanovih dijagrama sa najviše jednom petljom. Korekcije na ovaj član (dijagrami sa dve i više petlji) dolaze od viših momenata odgovarajućeg Gausovog integrala.

Kao što je pokazano u radovima [13 – 18], razvoj oko očekivane vrednosti koordinate  $\langle q \rangle$  predstavlja bolji izbor, pošto dominantan doprinos funkcionalnom integralu zapravo daju trajektorije koje su bliske  $\langle q \rangle$ . Kako je računanje ove očekivane vrednosti podjednako komplikovano kao i računanje traženog funkcionalnog integrala, koristi se samousaglašena iterativna šema: u prvom koraku se očekivana vrednost  $\langle q \rangle$  aproksimira klasičnim rešenjem  $q_{cl}$ , a funkcionalni integral se izračuna tako što se dejstvo razvije u Tejlorov red do kvadratnih članova oko  $\bar{q} = q_{cl}$  i reši se dobijeni Gausov integral (što je zapravo semiklasičan razvoj do na jednu petlju). Nakon toga se, u drugom koraku, diferenciranjem po spoljašnjem polju<sup>6</sup> prethodno dobijenog izraza za funkcionalni integral izračuna nova aproksimativna ocena očekivane vrednosti  $\langle q \rangle$ . U ovom koraku se funkcionalni integral aproksimira slično kao i u prvom koraku, samo što se u razvoju dejstva za  $\bar{q}$  koristi upravo dobijena nova aproksimativna vrednost za  $\langle q \rangle$ . Ova procedura se nastavlja sve dok se dobijene ocene funkcionalnog integrala i očekivanih vrednosti ne stabilizuju, odnosno dok se ne postigne konvergencija iterativnog postupka. Kao što se vidi, i ova aproksimativna šema zasnovana je na rešavanju odgovarajućih Gausovih integrala. Ispostavlja se da je ovaj pristup u tesnoj vezi sa aproksimativnom šemom Gausovog polovljenja koja će biti izložena u sledećem poglavlju i koja predstavlja centralni rezultat ovog rada. Osnovna prednost Gausovog polovljenja u odnosu na ovu proceduru je zaobilazanje samousaglašenog postupka.

Perturbativni razvoj zasniva se na ideji da se u eksponentu podintegralne funkcije u funkcionalnom integralu ostavi samo deo dejstva koji odgovara slobodnoj teoriji, a da se interakcija razvije u red po konstanti interakcije  $g$ . Na taj način se dobijaju integrali oblika  $g^k \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{i x^2\}$ , odnosno momenti Gausove raspodele, koji se mogu svesti na računanje Gausovih integrala, isto kao i u semiklasičnom razvoju.

Pored ovih opštih analitičkih aproksimativnih šema, postoji i niz posebnih analitičkih

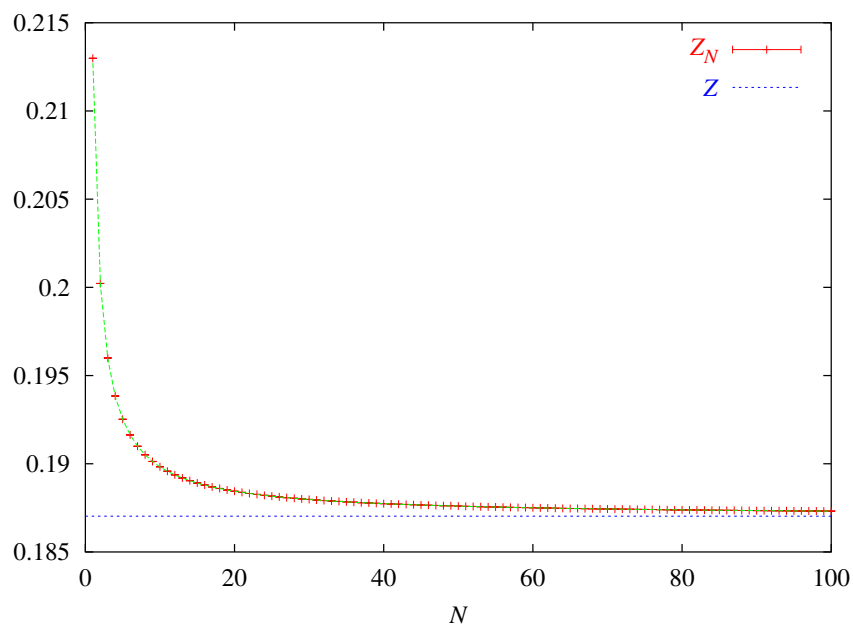
<sup>5</sup>Primenom Vikove rotacije, koja će biti detaljno opisana u sledećem poglavlju, ovi integrali postaju  $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{-x^2\}$ . Ako primetimo da za Gausov integral  $I(j) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-x^2 + jx\} = \sqrt{\pi} \exp\{j^2/4\}$  važi  $\frac{d^n}{dj^n} I(j) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{-x^2 + jx\}$ , onda su traženi momenti  $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{-x^2\} = \left. \frac{d^n}{dj^n} I(j) \right|_{j=0}$ .

Invertovanjem Vikove rotacije dobijaju se prave vrednosti gornjih integrala.

<sup>6</sup>U analitičkom formalizmu se očekivane vrednosti dobijaju uvođenjem spoljašnjeg polja u funkcionalni integral, koji se obično zove generišući funkcional. Diferenciranjem po spoljašnjem polju i normiranjem se zatim dobijaju tražene očekivane vrednosti, slično kao i u statističkoj mehanici. U tom smislu centralni objekt u analitičkom pristupu je generišući funkcional. Za pedagoški pristup videti [19, 20, 21].

metoda, koji su primenljivi samo za određene modele. Bez ulaženja u detalje, naglasimo da i ove metode na ključan način zavise od računanja Gausovih integrala.

Numerički metodi za rešavanje funkcionalnih integrala bazirani su na direktnom izračunavanju  $N$ -tostrukih integrala iz definicije (2.5) pomoću nekog od standardnih metoda, koji kao rezultat daju ocenu vrednosti integrala i ocenu greške. Pri tom postoji jasna interpretacija greške i precizno možemo da definišemo interval u kome se pravi rezultat nalazi. Različiti metodi se razlikuju po veličini ocenjene greške, ali za traženi rezultat uvek imamo definitivnu predikciju. Kvalitet nekog numeričkog metoda za primenu u rešavanju konkretnog problema ocenjujemo na osnovu veličine greške i mogućnosti njene minimizacije povećanjem vremena uloženog u izračunavanje. Pošto za računanje funkcionalnih integrala treba rešavati višestruke integrale visoke dimenzionalnosti, Monte Karlo metod (detaljnije opisan u Dodatku A) koji dominira nad svim ostalim metodima upravo u rešavanju ovakve vrste problema, predstavlja najbolji izbor<sup>7</sup>.



Slika 2.4: Tipična zavisnost  $Z_N$  od broja podeonih tačaka  $N$  za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom. Parametar teorije, konstanta anharmoniciteta  $g$ , ima vrednost  $g = 1$ , dok je vreme evolucije  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka  $N_{MC} = 10^7$ . Ovi rezultati dobijeni su pomoću Monte Karlo simulacije koja je razvijena za potrebe ovog rada i koja je detaljno opisana u dodatku B. Fitovanjem polinoma (2.8) na podatke sa grafika dobija se vrednost generišućeg funkcionala  $Z = 0.1870294(3)$ , koja je takođe prikazana na slici.

Specifičnost u numeričkom rešavanju funkcionalnih integrala u odnosu na rešavanje višestrukih integrala je postojanje limesa  $N \rightarrow \infty$  u definiciji (2.5). To znači da ćemo za svaku vrednost broja podeonih tačaka  $N$  dobiti ocenu vrednosti funkcionalnog integrala  $Z_N$  i odgovarajuće greške  $\Delta Z_N$ , a zatim iz dobijenih vrednosti treba ekstrahovati ocenu prave vrednosti funkcionalnog integrala  $Z$  i greške  $\Delta Z$ . Na slici 2.4 prikazana je tipična zavisnost  $Z_N$  od broja  $N$  za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom, sa

<sup>7</sup>Treba naglasiti da, iako je Monte Karlo opšti numerički metod, njegova efikasnost zavisi od toga koliko smo analitičkih informacija o datom modelu ugradili u algoritam. Kao što je objašnjeno u Dodatku A, ključan element za efikasnost algoritma je izbor funkcije raspodele iz koje će se generisati trajektorije pri računanju funkcionalnog integrala. Nije ni čudno da je i ovde najbolji izbor Gausova raspodela koja se dobija razvojem dejstva u red do kvadratnih članova

lagranžijanom oblika  $L = \frac{1}{2}G(q)\dot{q}^2 - V(q)$ , uz  $G(q) = 1$  i  $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4!}q^4$ . Prikazani rezultati su dobijeni iz Monte Karlo simulacije čiji je kod detaljno prikazan u Dodatku B. Fitovanjem se može pokazati da je u pitanju polinomijalna zavisnost po  $1/N$ ,

$$Z_N = Z + \frac{A}{N} + \frac{B}{N^2} + \dots, \quad (2.8)$$

a parametri ove zavisnosti se mogu oceniti metodom najmanjih kvadata [22]. Slobodni član gornjeg polinoma je tražena vrednost funkcionalnog integrala, a metod najmanjih kvadrata nam daje i ocenu greške  $\Delta Z$  dobijene vrednosti  $Z$  na osnovu ocena grešaka pojedinih vrednosti  $Z_N$  koje dobijamo iz Monte Karlo metoda i na osnovu rasporeda pojedinih tačaka na krivoj na slici 2.4. Koliko je opisani pristup sa fitovanjem efikasniji od naivnog pristupa, u kome se generišući funkcional ocenjuje sa  $Z_N$  za dovoljno veliku vrednost  $N$ , može se ilustrovati na primeru sa slike 2.4. Fitovanje daje rezultat sa greškom od  $3 \cdot 10^{-7}$  pri maksimalnoj vrednosti  $N = 10^2$ . Da bi se postigla ista tačnost u naivnom pristupu, bilo bi neophodno koristiti vrednost  $N = 10^5$ . Kao što ćemo videti u sledećem poglavlju, vreme izvršavanja simulacije je proporcionalno sa  $N^2$ , pa bi u naivnom pristupu bilo potrebno uložiti  $10^6$  puta više vremena nego u pristupu sa fitovanjem. Pored ove bitne razlike, rezultat dobijen u naivnom pristupu daje pristrasnu ocenu, kao što se vidi sa slike 2.4, što dodatno diskvalifikuje ovaj pristup.

Vakuumske očekivane vrednosti u kvantnoj teoriji polja se numerički računaju na sličan način, fitovanjem polinoma po  $1/N$  na dobijene rezultate u diskretizaciji sa  $N$  podeonih tačaka,  $\langle q(t)q(t') \dots \rangle_N$ . U numeričkom pristupu ovakav metod nije opravdan. Naime, numeričko diferenciranje uvodi dodatnu grešku, a u algoritamskom smislu oba pristupa imaju istu složenost (u oba slučaja treba izračunati po dva funkcionalna integrala), pa je jasno da je vakuumske očekivane vrednosti najbolje računati direktno.

# 3

## Rekurzivna formula

Kao što je pokazano u Uvodu, kada se računa generišući funkcional za neku teoriju u diskretizovanom prostor–vremenu (standardno se koristi opisana Fajnmanova diskretizacija), dobija se veličina  $Z_N[S_{D,N}]$ , gde je  $N$  broj koraka na koji smo podelili posmatrani interval evolucije kvantnog sistema, dok je  $S_{D,N}$  diskretizovano dejstvo teorije koje odgovara podeli karakterisanoj sa  $N$ . Prava vrednost generišućeg funkcionala dobija se u limesu

$$Z[S] = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N[S_{D,N}].$$

Razmotrimo sada jednodimenzionalne teorije (jedna vremenska dimenzija  $t$ ), definisane pomoću polja (koordinate)  $q(t)$ , koje zadovoljava date granične uslove. Zapravo, ograničili smo razmatranje na kvantnu mehaniku, pošto se kvantna teorija polja u jednoj vremenskoj dimenziji i nula prostornih dimenzija svodi na kvantnu mehaniku sistema opisanog jednom koordinatom. Diskretizovani generišući funkcional ima oblik

$$Z_N[S_{D,N}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \mu[q_0, \dots, q_N; S] \exp\{iS_{D,N}[q_0, \dots, q_N]\}, \quad (3.1)$$

gde je  $\mu[q_0, \dots, q_N; S]$  mera koja zavisi od diskretizovanih koordinata  $q_0, \dots, q_N$  i od oblika dejstva teorije  $S$ . Način izvođenja konkretnog izraza za meru pokazali smo u drugom poglavlju na primeru jedne široke klase teorija ( $\sigma$ -model).

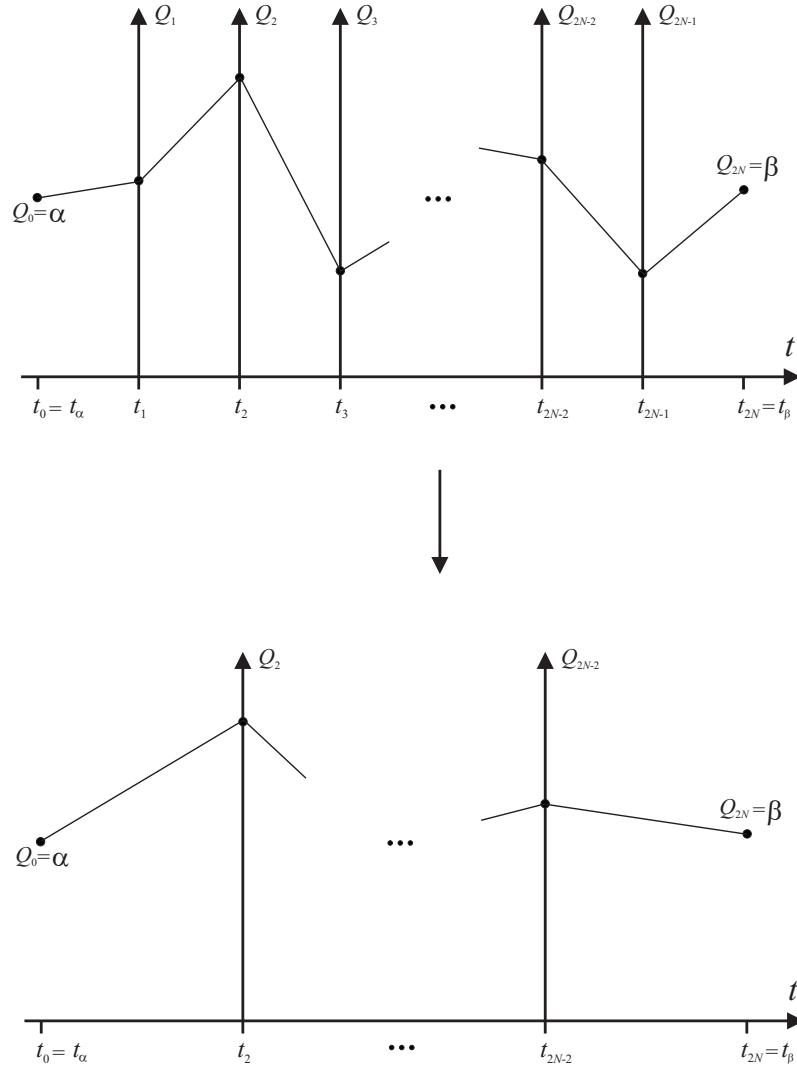
Ako sada napišemo izraz za generišući funkcional sa dvostruko finijom podelom (u kome ćemo koordinate označiti sa  $Q_0, \dots, Q_{2N}$  da bismo ih razlikovali od koordinata u prethodnom izrazu),

$$Z_{2N}[S_{D,2N}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dQ_1 \dots dQ_{2N-1} \mu[Q_0, \dots, Q_{2N}; S] \exp\{iS_{D,2N}[Q_0, \dots, Q_{2N}]\},$$

i formalno ga prointegralimo po neparnim koordinatama  $Q_1, Q_3, \dots, Q_{2N-1}$ , dobijamo identitet

$$Z_{2N}[S_{D,2N}] = Z_N[S_{D,N}^{(1)}], \quad (3.2)$$

gde  $S_{D,N}^{(1)}$  odgovara novom, efektivnom dejstvu (kome odgovara i nova mera  $\mu^{(1)}$ ) u funkcionalnom integralu. Ovo dejstvo zavisi samo od parnih koordinata  $Q_0, Q_2, \dots, Q_{2N}$ , a opisani proces zvaćemo polovljenje. Ukoliko bi stvarno bilo moguće izvršiti pomenute formalne integracije po neparnim koordinatama, dobili bismo eksplicitan izraz za dejstvo  $S^{(1)}$ , a time i način da redukujemo broj preostalih integracija. Na slici 3.1 je ilustrovan proces polovljenja, odnosno prelazak na dvostruko manji broj integrala u definiciji (3.1).



Slika 3.1: Ilustracija polovljenja broja podeonih tačaka u diskretizaciji funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Skup svih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove  $Q(t_\alpha) = Q_0 = \alpha$  i  $Q(t_\beta) = Q_{2N} = \beta$  se prvo aproksimira skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od  $2N$  segmenata. Nakon toga, posle integracije po neparnim koordinatama, skup svih trajektorija u novom funkcionalnom integralu aproksimiran je skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od  $N$  segmenata.

Ako bismo nastavili proces polovljenja, daljom redukcijom broja podeonih tačaka bismo značajno pojednostavili funkcionalni integral koji želimo da izračunamo. Na primer, za  $N = 2^s$  imali bismo niz efektivnih dejstava  $S_D^{(0)} \equiv S_D, S_D^{(1)}, \dots, S_D^{(s)}$ , i niz jednakosti za generišući funkcional

$$Z_N[S_D^{(0)}] = Z_{N/2}[S_D^{(1)}] = \dots = Z_1[S_D^{(s)}],$$

pri čemu je poslednji izraz algebarski, odnosno ne sadrži u sebi integrale.

Naravno, jasno je da je naznačeni proces polovljenja moguće egzaktno sprovesti samo u ograničenom broju slučajeva. Svi oni se svode na rešavanje Gausovih integrala. Zapravo, integrabilne su samo one teorije kod kojih nema interakcije (lagranžijan teorije je linearan ili kvadratičan po poljima i njihovim prvim izvodima; ovakve teorije zovu se slobodne teorije), ili one koje se pogodnom smenom mogu dovesti u ovaj oblik (na primer, Kulonova interakcija, [23 – 26]). Teorije sa lagranžijanom koji je polinom stepena većeg od dva ili sa nepolinomijalnim lagranžijanom mogu se rešavati isključivo aproksimativnim analitičkim

metodama ili numerički. Dakle, ukoliko je u teoriji prisutna netrivialna interakcija, tada gornje integrale ne možemo da rešimo i nemamo eksplicitne izraze za efektivna dejstva  $S_D^{(k)}$ , pa cela ideja ostaje samo na formalnom nivou.

Čak i kada bi za neki jednostavniji oblik polaznog polinomijalnog i lokalnog<sup>1</sup> dejstva  $S_D^{(0)}$  bilo moguće izračunati efektivno dejstvo  $S_D^{(1)}$ , to novo dejstvo ne bi u opštem slučaju bilo ni polinomijalno ni lokalno, čime bi bilo onemogućeno nastavljanje željenog iterativnog procesa polovljenja.

### 3.1 Izvođenje rekurzivne formule

Centralna tema ovog istraživanja je da u određenoj aproksimaciji (Gausovo polovljenje), koja će u ovom odeljku biti detaljno opisana, reši ovaj problem na klasi teorija opisanih lagranžijanom oblika

$$L = \frac{1}{2}G(q)\dot{q}^2 - V(q). \quad (3.3)$$

Kao što je već rečeno, u teoriji polja se dejstvo ovog oblika zove  $\sigma$ -model. Razmatrana klasa teorija je veoma široka: skoro svi fizički modeli od interesa mogu se napisati u obliku neke njene varijante [27], pa ovo ograničavanje ne predstavlja gubitak na opštosti razmatranja. Primetimo da je pojednostavljenje teorije uvođenjem smene  $G(q)\dot{q}^2 = \dot{Q}^2$ , koje bi u klasičnoj fizici bilo dobrodošlo, ovde potpuno nesvrishodno, i to iz dva razloga. Prvo, ovakva smena promenljivih izazvala bi promenu u meri funkcionalnog integrala, koju bismo morali posebno da proučimo<sup>2</sup>. Drugi razlog je činjenica da će se, nakon integracija po neparnim koordinatama, svakako pojaviti netrivialan kinetički član, pa cela ideja gubi svrhu.

Pokazaćemo da je, korišćenjem Gausovog polovljenja, moguće izračunati efektivna dejstva  $S_D^{(k)}$  za sve vrednosti  $k$  za bilo koju teoriju iz gornje klase<sup>3</sup>. Suštinska osobina teorija iz ove klase je da sva dobijena efektivna dejstva  $S_D^{(k)}$  i sama pripadaju istoj klasi, samo sa drugim funkcijama koje definišu lagranžijan (3.3), koje ćemo za  $k$ -ti iterat označiti sa  $G^{(k)}$  i  $V^{(k)}$ . Takođe, sva ova dejstva su lokalna, što nam omogućava da proces polovljenja dalje nastavimo. Na ovaj način povezujemo različite teorije iz ove klase u niz fizički ekvivalentnih teorija. Lokalnost je bitna kako u analitičkom, tako i u numeričkom pristupu. U analitičkom pristupu nelokalnost dovodi do problema sa verifikovanjem egzistencije ključnih objekata koji definišu teoriju. Poseban problem u numeričkom rešavanju nelokalnih teorija je brzo povećanje složenosti algoritma, pošto treba uzeti u obzir interakciju ne samo najbližih suseda, već i interakciju sa daljim susedima. Upravo ove dve osobine klase teorija (3.3) su razlog za njihovo razmatranje u ovom radu.

Pre prelaska na integraciju po neparnim koordinata, treba skrenuti pažnju na jedan tehnički detalj. Umesto običnog, realnog vremena  $t$ , u kvantnoj teoriji polja uobičajen je prelazak na imaginarno vreme  $\tau$  smenom  $\tau = it$  (Vikova rotacija). Ova procedura je prvo definisana za kvantnu mehaniku [28, 29], a nakon toga i za kvantnu teoriju polja [30]. Prvi razlog za ovu smenu je matematičke prirode. Naime, jednostavnije je raditi sa funkcionalnim integralima u euklidskom prostoru, pošto je tu mnogo lakše definisati ih i verifikovati njihovu

<sup>1</sup>Lokalnost za slučaj diskretizovanog dejstva predstavlja osobinu da u potencijalu imamo interakciju samo najbližih suseda, odnosno da se pojavljuju samo članovi oblika  $q_n q_{n+1}$ , a ne i članovi oblika  $q_n q_{n+2}$  ili članovi sa višim korelacijama.

<sup>2</sup>Ovakva smena promenljivih u funkcionalnom integralu dovela bi do korekcija mere reda  $\hbar^2$ . Za detaljnije razmatranje o ovoj temi videti [12]

<sup>3</sup>Striktno govoreći, funkcije  $G$  i  $V$  moraju da budu dva puta diferencijabilne da bi procedura Gausovog polovljenja mogla da bude primenjena, kao što ćemo videti u nastavku ovog odeljka.

egzistenciju, nego u prostoru Minkovskog. Drugi razlog je vezan za numerički pristup. Naime, nemoguće je numerički postići konvergenciju integrala ukoliko oni imaju oscilatorni karakter kao u ovom slučaju. Vikova rotacija obezbeđuje konvergenciju ovih integrala, što se lako vidi na osnovu sledećeg analitičkog argumenta: opisana smena u funkcionalnom integralu znači da se izraz u eksponentu transformiše u

$$iS = i \int_0^T dt L \longrightarrow \int_0^{iT} d\tau \left[ -\frac{1}{2}G(q) \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 - V(q) \right] = - \int_0^{iT} d\tau \left[ \frac{1}{2}G(q) \dot{q}^2 + V(q) \right],$$

gde smo u poslednjem izrazu ponovo uveli skraćenu oznaku za izvod po vremenu (od sada će  $\dot{q}$  označavati izvod po vremenu  $\tau$ , odnosno  $\dot{q} = dq/d\tau$ ). Primitimo da se pri prelasku na imaginarno vreme menja i gornja granica u integraciji. Međutim, poslednji korak u proceduri Vikove rotacije obuhvata rotaciju konture integracije (u integraciji po realnom vremenu  $t$  to je bila realna osa, a u integraciji po vremenu  $\tau$  to je imaginarna osa) za  $90^\circ$ , tako da gornja granica integracije opet postaje  $T$ . Ovaj korak opravdava i ime Vikova rotacija za uvedene transformacije. Primitimo da je poslednji izraz pod integralom ograničen odozdo (kinetički član je pozitivno definitan, a potencijal  $V$  je svakako ograničen odozdo, pošto inače ne bi postojalo osnovno stanje sistema). U važnom specijalnom slučaju kada je  $G(q) = 1$  ovo se vidi još lakše, pošto gornja transformacija ima oblik:

$$iS = i \int_0^T dt L \longrightarrow - \int_0^T d\tau H = -E,$$

gde je  $H$  Hamiltonijan sistema, a  $E$  njegova energija<sup>4</sup>. Pošto je jasno da je energija svakog fizičkog sistema ograničena odozdo, vidimo da će integrali u izrazu za generišući funkcional biti konvergentni. Držeći se standardne notacije u teoriji polja, za diskretizovani oblik Vik-rotiranog dejstva u eksponentu funkcionalnog integrala ćemo zadržati oznaku  $S_{D,N}$ . Može se reći da Vikova rotacija predstavlja određenu vrstu analitičkog produženja, koje se (ako je potrebno) može invertovati. Interesantno je primetiti i da se nakon Vikove rotacije osnovna jednačina kvantne mehanike, Šredingerova jednačina, pretvara u klasičnu difuzionu jednačinu.

Definicija generišućeg funkcionala nakon Vikove rotacije glasi

$$Z_N[S_{D,N}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \mu[q_0, \dots, q_N; S] \exp\{-S_{D,N}[q_0, \dots, q_N]\}. \quad (3.4)$$

Diskretizovano (euklidsko) dejstvo za odabranu klasu teorija ima oblik

$$S_{D,N}[q_0, \dots, q_N] = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_N \left[ \frac{1}{2}G \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 + V \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right], \quad (3.5)$$

gde je  $\epsilon_N = T/N$  vremenski korak diskretizacije, dok je definicija mere za ovu klasu teorija, u skladu sa izrazom izvedenim u drugom poglavlju, data sa

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

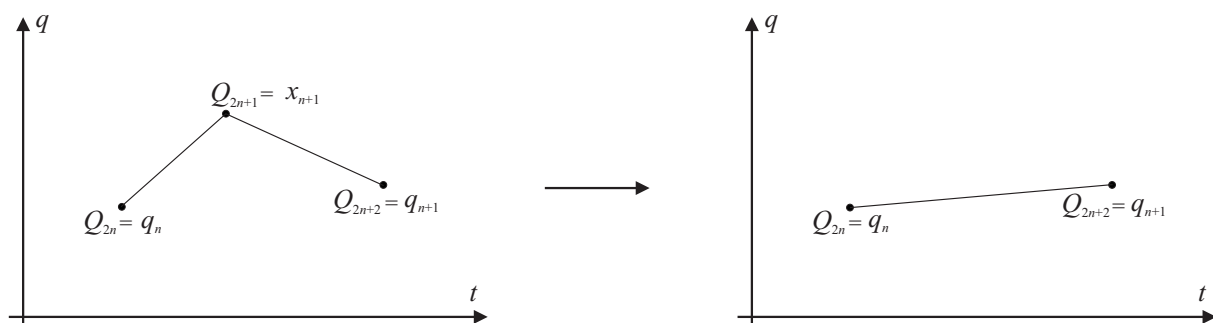
Ovde podrazumevamo granične uslove  $q(0) = q_0 = \alpha$  i  $q(T) = q_N = \beta$ , kao i na slici 3.1 (zbog jednostavnosti, odabrali smo  $t_\alpha = 0$  i  $t_\beta = T$ ).

<sup>4</sup>U teoriji polja se energija zove euklidsko dejstvo, baš iz ovog razloga.



Kao što smo prethodno konstatovali, pri računanju funkcionalnih integrala smo prinuđeni da koristimo različite aproksimativne ili numeričke metode pošto integrali koji se pojavljuju u izrazu (3.4) nisu analitički rešivi. Aproksimativne metode koje se koriste pri rešavanju funkcionalnih integrala sastoje se obično u tome da se u eksponentu podintegralne funkcije zadrži samo kvadratni deo potencijala  $V$  i kinetički član (odnosno njegov kvadratni deo ako je funkcija  $G$  netrivialna), dok se ostatak (interakcija) razvije u red. Izbor tačke oko koje se dejstvo razvija predstavlja karakteristiku aproksimativne metode. Na primer, ukoliko se razvoj izvrši oko klasičnog rešenja jednačina kretanja, dobijamo uobičajeni semiklasičan razvoj. Bolji izbor predstavlja razvoj oko očekivane vrednosti polja (koordinate), kao što je pokazano u [13 – 18]. Često se koristi i asimptotski razvoj u red po stepenima  $\hbar$ , koji zapravo predstavlja razvoj po broju petlji u odgovarajućim Fajnmanovim dijagramima. Najčešće korišćena aproksimacija u teoriji polja je Tejlorov razvoj po stepenima konstante interakcije (perturbativni razvoj), koji se dobija tako što se u eksponentu ostavi samo slobodni deo lagranžijana, a deo sa interakcijom se razvije u red. U svakom od ovih slučajeva, nakon primenjene procedure, dobijamo Gausove integrale koje znamo da rešimo. I jednačine na kojima se zasniva varijacioni metod [24] izvode se iz odgovarajućeg Gausovog integrala.

Metod koji ćemo opisati olakšava rešavanje funkcionalnih integrala i pruža nam novu intuiciju koja može da pomogne u daljem razvoju formalizma. Polazimo od ideje da efektivno izvršimo integraciju po neparnim koordinatama i time redukujemo problem.



Slika 3.2: Ilustracija smene promenljivih pre prelaska na integraciju po neparnim koordinatama  $Q_1 = x_1, Q_3 = x_2, \dots, Q_{2N-1} = x_N$ . Posle integracije ostaju samo parne koordinate, koje su sada označene sa  $Q_0 = q_0 = \alpha, Q_2 = q_1, \dots, Q_{2N} = q_N = \beta$ .

Ako definiciju (3.4) prepisemo za slučaj sa  $2N$  vremenskih koraka, tada je

$$Z_{2N}[S_{D,2N}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dQ_1 \dots dQ_{2N-1} \mu[Q_0, \dots, Q_{2N}; S] \exp \{-S_{D,2N}\}, \quad (3.6)$$

gde je dejstvo  $S_{D,2N}$  definisano izrazom (3.5),  $\epsilon_{2N} = T/2N$ , dok su koordinate po kojima se integrali  $Q_1, \dots, Q_{2N-1}$ , a granični uslovi su  $Q_0 = \alpha$  i  $Q_{2N} = \beta$ .

Sledeći tehnički korak je da u gornjem izrazu uvedemo nove oznake za neparne koordinate,  $Q_1 = x_1, Q_3 = x_2, \dots, Q_{2N-1} = x_N$ , tako da će posle integracije po njima ostati samo parne koordinate, za koje takođe uvodimo nove oznake,  $Q_0 = q_0 = \alpha, Q_2 = q_1, \dots, Q_{2N} = q_N = \beta$ . Ovo je ilustrovano na slici 3.2.

Da bismo mogli da prointegralimo gornji izraz po koordinatama  $x_1, \dots, x_N$ , uvodimo aproksimaciju koju ćemo, zajedno sa redukovanjem broja integracija u funkcionalnom integralu, u daljem tekstu zvati **Gausovo polovljenje**: potencijal  $V$  i funkciju  $G$  razvićemo u red tako da se u eksponentu izraza (3.6) pojavljuju najviše kvadratni članovi po ovim koordinatama. Sada ćemo izvršiti algebarske transformacije mere  $\mu$  kako bismo olakšali

dalji račun:

$$\begin{aligned}
\mu[Q_0, \dots, Q_{2N}; S] &= \prod_{k=0}^{2N-1} \sqrt{\frac{G\left(\frac{Q_{k+1}+Q_k}{2}\right)}{2\pi\epsilon_{2N}}} = \prod_{k=0}^{N-1} \sqrt{\frac{G\left(\frac{x_{k+1}+q_k}{2}\right) G\left(\frac{q_{k+1}+x_{k+1}}{2}\right)}{(2\pi\epsilon_{2N})^2}} = \\
&= \prod_{k=0}^{N-1} \sqrt{\frac{G\left(\frac{q_{k+1}+q_k}{2}\right)}{2\pi\epsilon_N}} \sqrt{\frac{G\left(\frac{x_{k+1}+q_k}{2}\right) G\left(\frac{q_{k+1}+x_{k+1}}{2}\right) 2\pi\epsilon_N}{(2\pi\epsilon_{2N})^2 G\left(\frac{q_{k+1}+q_k}{2}\right)}} = \\
&= \mu[q_0, \dots, q_N; S] \left(\frac{2}{\pi\epsilon_N}\right)^{N/2} \exp\left\{-\sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} \ln G\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2}\right) - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \ln G\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) - \frac{1}{2} \ln G\left(\frac{q_{n+1}+x_{n+1}}{2}\right)\right]\right\}.
\end{aligned}$$

Dakle, da bi mera nakon Gausovog polovljenja ostala ista, eksponencijalni faktor iz gornjeg izraza ćemo uvrstiti u dejstvo. Slične transformacije za dejstvo imaju oblik:

$$\begin{aligned}
&-\sum_{n=0}^{2N-1} \epsilon_{2N} \left[\frac{1}{2} G\left(\frac{Q_{n+1}+Q_n}{2}\right) \left(\frac{Q_{n+1}-Q_n}{\epsilon_{2N}}\right)^2 + V\left(\frac{Q_{n+1}+Q_n}{2}\right)\right] = \\
&= -\sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2\epsilon_{2N}} G\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) (x_{n+1}-q_n)^2 + \frac{1}{2\epsilon_{2N}} G\left(\frac{q_{n+1}+x_{n+1}}{2}\right) (q_{n+1}-x_{n+1})^2 + \right. \\
&\quad \left. + \epsilon_{2N} V\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) + \epsilon_{2N} V\left(\frac{q_{n+1}+x_{n+1}}{2}\right)\right].
\end{aligned}$$

Kada iskoristimo sve dobijene rezultate, definiciju generišućeg funkcionala možemo da napišemo u obliku

$$Z_{2N} = \left(\frac{2}{\pi\epsilon_N}\right)^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \mu[q_0, \dots, q_N; S] dx_1 \dots dx_N \exp\left\{-\sum_{n=0}^{N-1} X_n\right\},$$

gde se izraz za  $X_n$  dobija posle jednostavnih algebarskih transformacija i ima sledeći oblik:

$$\begin{aligned}
X_n &= \frac{1}{2} \ln G\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2}\right) - \frac{1}{2} \ln G\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) - \frac{1}{2} \ln G\left(\frac{q_{n+1}+x_{n+1}}{2}\right) + \\
&+ \frac{1}{\epsilon_N} G\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) (x_{n+1}-q_n)^2 + \frac{1}{\epsilon_N} G\left(\frac{q_{n+1}+x_{n+1}}{2}\right) (q_{n+1}-x_{n+1})^2 + \\
&+ \frac{\epsilon_N}{2} V\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) + \frac{\epsilon_N}{2} V\left(\frac{q_{n+1}+x_{n+1}}{2}\right).
\end{aligned}$$

Očigledno je da bez daljeg specificiranja funkcija  $G$  i  $V$  ne možemo da izvršimo željene integracije. Zbog toga ćemo, u skladu sa aproksimacijama koje obuhvata Gausovo polovljenje, razviti ove funkcije u Tejlorov red zaključno sa kvadratnim članovima,

$$\begin{aligned}
G\left(\frac{x_{n+1}+q_n}{2}\right) &= G\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2} + \frac{x_{n+1}-q_{n+1}}{2}\right) = \\
&= G\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2}\right) + G'\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2}\right) \frac{x_{n+1}-q_{n+1}}{2} + \\
&\quad + \frac{1}{2} G''\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2}\right) \left(\frac{x_{n+1}-q_{n+1}}{2}\right)^2 + o\left((x_{n+1}-q_{n+1})^3\right),
\end{aligned}$$

i, na sličan način,

$$\begin{aligned} G\left(\frac{q_{n+1} + x_{n+1}}{2}\right) &= G\left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} + \frac{x_{n+1} - q_n}{2}\right) = \\ &= G\left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}\right) + G'\left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}\right) \frac{x_{n+1} - q_n}{2} + \\ &\quad + \frac{1}{2} G''\left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}\right) \left(\frac{x_{n+1} - q_n}{2}\right)^2 + o\left((x_{n+1} - q_n)^3\right). \end{aligned}$$

Ovo će nam omogućiti da izračunamo sve integrale po neparnim koordinatama. U daljem tekstu iskoristićemo i *mutatis mutandis* identične razvoje za funkciju  $V$ , koje nećemo pisati eksplicitno. Ovdje smo tačke oko kojih smo razvijali funkcije birali tako da ne sadrže neparne koordinate po kojima želimo da izvršimo integracije, već samo susedne, parne koordinate. Pri tom smo imali u vidu preskripciju korišćenu za diskretizaciju originalnog dejstva (3.5), pošto želimo da nakon procesa polovljenja dobijemo sličan izraz. Dakle, za Tejlorov razvoj funkcija  $G$  i  $V$  u tačkama  $(x_{n+1} + q_n)/2$  i  $(q_{n+1} + x_{n+1})/2$  birali smo  $(q_{n+1} + q_n)/2$  za tačku razvoja.

Iako opravdanost procedure Gausovog polovljenja može da se ustanovi tek na osnovu rezultata koji se dobijaju njegovom primenom, *a priori* možemo da damo argument na osnovu koga se može očekivati da je primenjena aproksimacija opravdana. Opšta karakteristika svakog kvantnog procesa<sup>5</sup> je da, za kratka vremena evolucije  $\epsilon$ , važi  $(q_{n+1} - q_n)^2 \sim \epsilon$ . Kako je suština Gausovog polovljenja u razvoju lagranžijana u Tejlorov red po razlikama  $q_{n+1} - q_n$ , vidimo da će ova aproksimacija biti opravdana sve dok je vremenski korak  $\epsilon$  mali.

Činjenica da su razlike  $q_{n+1} - q_n$  male zapravo znači da su sve trajektorije koje daju dominantan doprinos računanju funkcionalnog integrala međusobno bliske. Za malu vrednost  $\hbar$ , u semiklasičnom režimu teorije, znamo da samo trajektorije koje su bliske rešenju klasičnih jednačina kretanja  $q_{cl}$  daju značajan doprinos funkcionalnom integralu (ovo je ilustrovano na slici 2.2). Širina oblasti oko klasičnog rešenja kojoj pripadaju ove trajektorije proporcionalna je sa  $\hbar$ , a osnova semiklasične aproksimacije je razvoj dejstva teorije u red po stepenima male veličine  $q - q_{cl}$ . Dakle, za male vrednosti  $\hbar$  primena izloženog metoda za računanje funkcionalnih integrala je potpuno opravdana, kao i primena semiklasičnog razvoja.

Međutim, u ultrakvantnom režimu teorije (za veliku vrednost  $\hbar$ ), semiklasična aproksimacija ne daje dobre rezultate, odnosno njena primena nije opravdana. Kao što je pokazano u [13 – 18], mnogo bolja aproksimacija je razvoj u red po stepenima od  $q - \langle q \rangle$ , gde je  $\langle q \rangle$  očekivana vrednost polja  $q$  (ovo je ilustrovano na slici 2.3). Za male vrednosti  $\hbar$  je  $q_{cl} \approx \langle q \rangle$  (razlike su reda  $\hbar$ ), pa je zbog toga semiklasična aproksimacija davala dobre rezultate. U ultrakvantnom režimu su razlike između klasičnog rešenja  $q_{cl}$  i očekivane vrednosti polja  $\langle q \rangle$  značajne, pa je jasno da dejstvo treba razviti u red po stepenima od  $q - \langle q \rangle$ . Naravno, za ovo je neophodno prvo naći očekivanu vrednost polja, što je problem ekvivalentan onome koji pokušavamo da rešimo. Ovaj problem se tipično razrešava spregnutim sistemom aproksimacija (detalji o ovom pristupu mogu se naći u [13 – 18]) u kome se istovremeno računavaju obe veličine (očekivana vrednost polja i generišući funkcional). Zapravo, metod koji se ovde izlaže je po svojoj prirodi ekvivalentan citiranom pristupu, ali sa jednom bitnom razlikom: za njegovu primenu nije neophodno unapred znati očekivanu vrednost polja. Procedura generisanja trajektorija na osnovu dejstva prirodno generiše međusobno bliske trajektorije koje daju značajan doprinos funkcionalnom integralu.

<sup>5</sup>U euklidskoj teoriji, koju zapravo razmatramo, to je karakteristika svakog difuzionog procesa, odnosno slučajnog hoda.

Dakle, kao rezultat ovog razmatranja dobili smo uslov pod kojim je primena Gausovog polovljenja opravdana: vremenski korak  $\epsilon$  mora da bude mala veličina. Ukoliko je ovaj uslov ispunjen, možemo da očekujemo da će izloženi metod biti primenljiv kako u semiklasičnom, tako i u ultrakvantnom režimu teorije.

Pre nego što pređemo na integraciju po neparnim koordinatama u izrazu za  $Z_{2N}$ , kratko ćemo razmotriti kako se primena Gausovog polovljenja odražava na trajektorije koje koristimo za računanje gnerišućeg funkcionala. Na osnovu slike 3.2 možemo da zaključimo da se, nakon Gausovog polovljenja, izlomljeni segment koji povezuju tačke  $q_n$ ,  $x_{n+1}$  i  $q_{n+1}$  zamenjuje ravnim segmentom koji povezuje tačke  $q_n$  i  $q_{n+1}$ . Naravno, ova promena trajektorije ne ostaje bez posledica: ona se kompenzuje promenom dejstva, kao što ćemo videti nakon što izvršimo željene integracije.

Kada uzmemo u obzir Tejlorove razvoje za funkcije  $G$  i  $V$ , kao i razvoj za logaritam u obliku  $\ln [1 + Ax + Bx^2 + o(x^3)] = Ax + (B - A^2/2)x^2 + o(x^3)$ , posle kraćeg računa dobijamo da je izraz za  $X_n$  zapravo kvadratna forma oblika

$$X_n = a_{n+1} x_{n+1}^2 + b_{n+1} x_{n+1} + c_{n+1},$$

gde su koeficijenti  $a_{n+1}$ ,  $b_{n+1}$  i  $c_{n+1}$  dati izrazima

$$a_{n+1} = \frac{2}{\epsilon_N} G + \frac{\epsilon_N}{8} V'' - \frac{1}{8} \left[ \frac{G''}{G} - \left( \frac{G'}{G} \right)^2 \right], \quad (3.7)$$

$$b_{n+1} = -\frac{G'}{2G} + \frac{q_{n+1} + q_n}{8} \left[ \frac{G''}{G} - \left( \frac{G'}{G} \right)^2 \right] - \frac{2(q_{n+1} + q_n)G}{\epsilon_N} + \frac{\epsilon_N V'}{2} - \frac{\epsilon_N (q_{n+1} + q_n) V''}{8}, \quad (3.8)$$

$$c_{n+1} = -\frac{1}{2} \ln G + \frac{(q_{n+1} + q_n)G'}{4G} - \left[ \frac{G''}{G} - \left( \frac{G'}{G} \right)^2 \right] \frac{q_{n+1}^2 + q_n^2}{16} + \frac{G}{\epsilon_N} (q_{n+1}^2 + q_n^2) + \epsilon_N V - \frac{\epsilon_N (q_{n+1} + q_n) V'}{4} + \frac{\epsilon_N V''}{16} (q_{n+1}^2 + q_n^2), \quad (3.9)$$

pri čemu se vrednosti funkcija  $G$  i  $V$  (kao i njihovih izvoda) u gornjim relacijama računaju u tački  $(q_{n+1} + q_n)/2$ .

Pošto je  $X_n$  kvadratna forma po koordinati  $x_{n+1}$ , integral po ovoj koordinati postaje Gausov integral koji znamo da rešimo<sup>6</sup>. Nakon integracije po koordinatama  $x_1, \dots, x_N$  dobijamo

$$I_N = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_N \left( \frac{2}{\pi \epsilon_N} \right)^{N/2} \exp \left\{ - \sum_{n=0}^{N-1} X_n \right\} = \exp \left\{ - \sum_{n=0}^{N-1} Y_n \right\},$$

pri čemu je veličina  $Y_n$  data sa

$$Y_n = \frac{1}{2} \ln \frac{\epsilon_N a_{n+1}}{2} + c_{n+1} - \frac{b_{n+1}^2}{4 a_{n+1}}.$$

<sup>6</sup>Radi lakšeg praćenja teksta ovde ponavljamo ranije izvedeno rešenje Gausovog integrala u najopštijem obliku:  $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-ax^2 - bx - c\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\frac{b^2}{4a} - c\right\}$ .

Ako sada iskoristimo prethodno izvedene izraze (3.7), (3.8) i (3.9) za koeficijente  $a_{n+1}$ ,  $b_{n+1}$  i  $c_{n+1}$ , nakon nekoliko jednostavnih algebarskih transformacija dobijamo eksplicitan izraz za veličinu  $Y_n$ ,

$$Y_n = \epsilon_N \left[ \frac{1}{2} \tilde{G} \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 + \tilde{V} \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right],$$

gde je

$$\tilde{G} = G - \frac{\epsilon_N}{16} \left[ \frac{G''}{G} - \left( \frac{G'}{G} \right)^2 \right] + \frac{\epsilon_N^2}{16} V'', \quad (3.10)$$

$$\tilde{V} = V + \frac{1}{2\epsilon_N} \ln \frac{\tilde{G}}{G} - \frac{\left( \frac{G'}{G} - \epsilon_N V' \right)^2}{32\tilde{G}}. \quad (3.11)$$

Dakle, generišući funkcional napisan preko funkcionalnog integrala u diskretizaciji sa  $2N$  podeonih tačaka uspeli smo da napišemo u obliku izraza u diskretizaciji sa  $N$  podeonih tačaka,

$$\begin{aligned} Z_{2N}[S_{D,2N}] &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \mu[q_0, \dots, q_N; S] \cdot \\ &\cdot \exp \left\{ -\epsilon_N \sum_{n=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2} \tilde{G} \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 + \tilde{V} \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Međutim, ovaj izraz nije funkcionalni integral, pošto njegova mera  $\mu[q_0, \dots, q_N; S]$  odgovara originalnom dejstvu  $S$ , a ne novom, efektivnom dejstvu  $\tilde{S}$ , definisanom pomoću funkcija  $\tilde{G}$  i  $\tilde{V}$ . Zbog toga ćemo izvršiti dodatnu transformaciju

$$\begin{aligned} \mu[q_0, \dots, q_N; S] &= \prod_{k=0}^{N-1} \sqrt{\frac{G \left( \frac{q_{k+1} + q_k}{2} \right)}{2\pi\epsilon_N}} = \prod_{k=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\tilde{G} \left( \frac{q_{k+1} + q_k}{2} \right)}{2\pi\epsilon_N}} \sqrt{\frac{G \left( \frac{q_{k+1} + q_k}{2} \right)}{\tilde{G} \left( \frac{q_{k+1} + q_k}{2} \right)}} = \\ &= \mu[q_0, \dots, q_N; \tilde{S}] \exp \left\{ -\epsilon_N \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2\epsilon_N} \ln \frac{\tilde{G} \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right)}{G \left( \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right)} \right\}, \end{aligned}$$

a nakon toga ćemo, u skladu sa gornjom transformacijom, definisati nove funkcionalne  $\mathcal{G}$  i  $\mathcal{V}$  pomoću relacija

$$\mathcal{G}[G, V, \epsilon_N] = \tilde{G} = G - \frac{\epsilon_N}{16} \left[ \frac{G''}{G} - \left( \frac{G'}{G} \right)^2 \right] + \frac{\epsilon_N^2}{16} V'', \quad (3.12)$$

$$\mathcal{V}[G, V, \epsilon_N] = \tilde{V} + \frac{1}{2\epsilon_N} \ln \frac{\tilde{G}}{G} = V + \frac{1}{\epsilon_N} \ln \frac{\mathcal{G}}{G} - \frac{\left( \frac{G'}{G} - \epsilon_N V' \right)^2}{32\mathcal{G}}. \quad (3.13)$$

U poslednjem izrazu je, zbog promene mere, koeficijent ispred člana sa logaritmom promenjen u odnosu na odgovarajući koeficijent u izrazu (3.11), i sada ima vrednost  $1/\epsilon_N$ . Koristeći novodefinisane funkcionalne  $\mathcal{G}$  i  $\mathcal{V}$  možemo da ostvarimo cilj postavljen na početku ovog poglavlja, u jednačini (3.2), koja povezuje niz međusobno ekvivalentnih teorija koje sve daju istu vrednost za generišući funkcional, ali u različitim diskretizacijama. Ako uvedemo nove oznake

$$G^{(0)} \equiv G, \quad V^{(0)} \equiv V, \quad G^{(1)} = \mathcal{G}[G^{(0)}, V^{(0)}, \epsilon_N], \quad V^{(1)} = \mathcal{V}[G^{(0)}, V^{(0)}, \epsilon_N],$$

tada smo pokazali da za generišući funkcional  $Z_{2N}$  važi relacija

$$Z_{2N}[S_{D,2N}^{(0)}] = Z_N[S_{D,N}^{(1)}].$$

Ovde  $S^{(0)}$  i  $S^{(1)}$  označavaju diskretizovana dejstva, definisana pomoću odgovarajućih funkcija  $G$  i  $V$  ( $G^{(0)}$  i  $V^{(0)}$  pri definisanju  $S^{(0)}$ , odnosno  $G^{(1)}$  i  $V^{(1)}$  pri definisanju  $S^{(1)}$ ).

Na ovaj način smo pokazali da se korišćenjem Gausovog polovljenja generišući funkcional  $Z_{2N}$  može napisati kao funkcionalni integral u ogrubljenoj diskretizaciji sa  $N$  vremenskih koraka, odnosno da je generišući funkcional  $Z_{2N}$  jednak generišućem funkcionalu  $Z_N$  neke druge teorije iz iste klase, koja je definisana funkcijama  $G^{(1)}$  i  $V^{(1)}$ , datim gornjim izrazima.

U analitičkom smislu, relacije (3.12) i (3.13) nam omogućavaju dve različite stvari. Prvo, omogućavaju nam da teorije definisane parovima funkcija  $(G, V)$  i  $(G^{(1)}, V^{(1)})$  identifikujemo kao fizički ekvivalentne, pošto im se generišući funkcionali poklapaju, odnosno obe teorije daju istu fiziku. I drugo, izvedene relacije nam omogućavaju da proces Gausovog polovljenja nastavimo, i na taj način uspostavimo iterativnu šemu u kojoj u svakom sledećem koraku imamo dvostruko manje podeonih tačaka u diskretizaciji funkcionalnog integrala. Ukoliko iteriranje započnemo od diskretizacije sa  $2^s N$  tačaka, dobićemo sledeću hijerarhiju izraza za generišući funkcional,

$$Z_{2^s N}[G_s^{(0)}, V_s^{(0)}] = Z_{2^{s-1} N}[G_s^{(1)}, V_s^{(1)}] = \dots = Z_{2N}[G_s^{(s-1)}, V_s^{(s-1)}] = Z_N[G_s^{(s)}, V_s^{(s)}], \quad (3.14)$$

gde smo zbog eksplicitnosti pisali odgovarajuće parove funkcija  $(G, V)$  kao argumente generišućeg funkcionala, pri čemu smo podrazumevali  $G_s^{(0)} = G^{(0)} = G$  i  $V_s^{(0)} = V^{(0)} = V$ , a donji indeks  $s$  nas podseća da smo iteriranje u hijerarhiji započeli od  $2^s N$  vremenskih koraka. Iterativni proces je definisan pomoću relacija

$$G_s^{(k+1)} = \mathcal{G} \left[ G_s^{(k)}, V_s^{(k)}, \frac{\epsilon N}{2^{s-k-1}} \right], \quad (3.15)$$

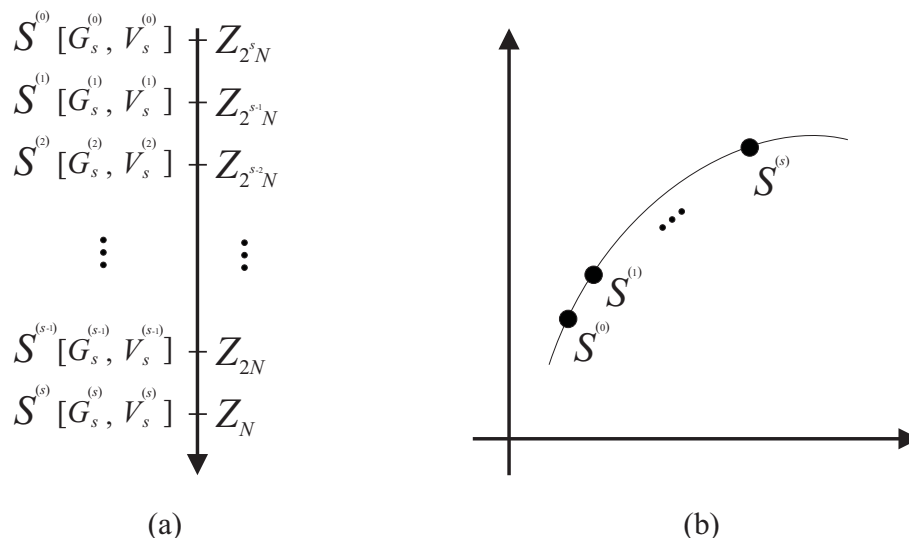
$$V_s^{(k+1)} = \mathcal{V} \left[ G_s^{(k)}, V_s^{(k)}, \frac{\epsilon N}{2^{s-k-1}} \right]. \quad (3.16)$$

Pored hijerarhije izraza za generišući funkcional, imamo i hijerarhiju fizički ekvivalentnih dejstava, definisanih pomoću parova funkcija

$$(G_s^{(0)}, V_s^{(0)}) \rightarrow (G_s^{(1)}, V_s^{(1)}) \rightarrow \dots \rightarrow (G_s^{(s)}, V_s^{(s)}).$$

Ovde treba ponoviti da svaki naredni korak u ovoj hijerarhiji odgovara diskretizaciji sa dvostruko manje podeonih tačaka nego u prethodnom koraku. Na slici 3.3 ilustrovane su pomenute hijerarhije, a prikazan je i niz teorija (reprezentovan odgovarajućim dejstvima u apstraktnom prostoru svih teorija) čija je ekvivalentnost na ovaj način pokazana.

Jasno je da se u opisanoj hijerarhiji u svakom iterativnom koraku primenjuje novo Gausovo polovljenje (sa dvostruko većom vrednosti koraka  $\epsilon$ ), pa nužno dolazi do nagomilavanja greške. Jedan od naših ciljeva u ovom radu je i ispitivanje uticaja ovog nagomilavanja greške na kvalitet dobijenih rezultata. Primetimo da, čak i kada bismo imali egzaktne izraze za funkcionalne  $\mathcal{G}$  i  $\mathcal{V}$ , ne bismo na ovaj način mogli da napravimo “teorijski perpetuum mobile” i da egzaktno izračunamo generišući funkcional, odnosno da iteriranje nastavimo u proizvoljno mnogo koraka i izračunamo vrednost generišućeg funkcionala povećavajući vrednost  $s$  i istovremeno smanjujući vrednost  $N$  u hijerarhiji (3.14). Razlog za to je činjenica da je računanje svakog sledećeg iterata sve komplikovanije. U analitičkom smislu ne možemo daleko da odmaknemo u iteriranju, a u numeričkom pristupu problem nastaje jer je potrebno



Slika 3.3: (a) Hijerarhija generišućih funkcionala u jednačini (3.14) se dobija polovljenjem broja vremenskih koraka u diskretizaciji, od  $2^s N$  do  $N$  koraka. Opisani proces Gausovog polovljenja obuhvata integraciju po neparnim koordinatama u svakom koraku, uz razvoj efektivnog dejstva u Tejlorov red do kvadratnih članova. (b) Pošto su generišući funkcionali koji odgovaraju ovim efektivnim dejstvima jednaki, teorije koje su njima definisane su međusobno ekvivalentne. U apstraktnom prostoru svih dejstava ove teorije se mogu predstaviti kao niz ekvivalentnih tačaka.

sve više i više vremena da se izračuna vrednost kako iteriranje odmiče. Praktično, iteriranje formula (3.15) i (3.16) počinje da predstavlja značajan tehnički problem već za  $s \gtrsim 5$ . U dodatku B, u kojem je dat Monte Karlo programski kod razvijen za potrebe ovog rada, može se naći kako izgledaju prva tri iterata za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom ( $\phi^4$  teorija). Tu se jasno vidi da kompleksnost dobijenih izraza raste veoma brzo.

## 3.2 Primena rekurzivne formule na slobodnu teoriju

U ovom odeljku ćemo primeniti rekurzivnu formulu datu jednačinama (3.12) i (3.13) na slobodnu teoriju, kako bismo iz još jednog ugla osvetlili suštinu Gausovog polovljenja. Lagranžijan slobodne teorije je dat sa

$$L = \frac{1}{2} \dot{q}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 q^2,$$

što odgovara funkcijama  $G = 1$  i  $V = \frac{1}{2} \omega^2 q^2$  u definiciji lagranžijana (3.3). Nakon primene rekurzivne formule dobijamo nove funkcije  $G_1 = \mathcal{G}[G, V, \epsilon]$  i  $V_1 = \mathcal{V}[G, V, \epsilon]$  koje definišu efektivni lagranžijan nakon prelaska sa diskretizacije sa  $2N$  vremenskih koraka na diskretizaciju sa  $N$  vremenskih koraka. U slučaju slobodne teorije dobija se

$$\begin{aligned} G_1 &= 1 + \frac{\omega^2 \epsilon^2}{16}, \\ V_1 &= \frac{1}{2} \omega^2 q^2 + \frac{1}{\epsilon} \ln G_1 - \frac{\epsilon^2 \omega^4 q^2}{32 G_1}. \end{aligned}$$

Vidimo da se, čak i u slobodnoj teoriji, dejstvo menja pri primeni rekurzije. Ova netrivialnost u rekurziji potiče od strukture dejstva (u njemu postoje spregnuti članovi oblika  $q_k q_{k+1}$ , pa Gausove integracije po neparnim koordinatama nisu nezavisne, nego generišu

netrivijalne članove date u gornjim izrazima). Međutim, ove promene ne menjaju dejstvo na značajan način, pošto je dobijena teorija takođe slobodna:  $G_1$  je konstanta, dok je  $V_1$  kvadratna funkcija koordinate  $q$ . Konstantan član proporcionalan sa  $\ln G_1$  utiče samo na normalizaciju, kao i faktor  $\sqrt{G_1}$  koji se sada pojavljuje u meri, pa nisu značajni za ovo razmatranje. Novi lagranžijan se pomoću reskaliranja promenljivih  $q \rightarrow q/\sqrt{G_1}$  može prevesti u standardan oblik

$$\tilde{L} = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + \frac{1}{2}\tilde{\omega}^2 q^2,$$

gde je nova frekvencija  $\tilde{\omega}$  data izrazom

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\frac{\omega^2 - \frac{\epsilon^2 \omega^4}{16G_1}}{G_1}} = \frac{\omega}{G_1}.$$

Da bi bolje razumeli gornju relaciju, a i fizičku pozadinu procedure Gausovog polovljenja, rešićemo klasičnu jednačinu kretanja ove teorije. Diskretizovano dejstvo slobodne teorije ima oblik

$$S_{D,N} = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_N \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{q_{n+1}^N - q_n^N}{\epsilon_N} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{q_{n+1}^N + q_n^N}{2} \right) \right],$$

i predstavlja funkciju  $N - 1$  promenljivih  $q_1^N, \dots, q_{N-1}^N$ . Jednačine kretanja su date sa

$$\frac{\partial S_{D,N}}{\partial q_k^N} = 0, \quad (k = 1, \dots, N - 1).$$

Nakon diferenciranja, ove jednačine imaju oblik

$$\frac{q_{k+1}^N - 2q_k^N + q_{k-1}^N}{\epsilon_N^2} - \omega_N^2 \frac{q_{k+1}^N + 2q_k^N + q_{k-1}^N}{4} = 0.$$

Ovo je prosto diferencna jednačina koja u kontinuum limesu postaje  $\ddot{q} - \omega^2 q = 0$  (primetimo da je ovo jednačina harmonijskog oscilatora u Vik-rotiranoj teoriji). Ukoliko uvedemo smenu  $\xi_N = \epsilon_N \omega_N/2$ , gornja jednačina postaje

$$(1 - \xi_N^2)q_{k+1}^N - 2(1 + \xi_N^2)q_k^N + (1 - \xi_N^2)q_{k-1}^N = 0, \quad (3.17)$$

čije ćemo rešenje potražiti u obliku  $q_k^N = e^{\lambda k}$ . Karakteristična jednačina data je sa

$$(1 - \xi_N^2)e^{2\lambda} - 2(1 + \xi_N^2)e^\lambda + (1 - \xi_N^2) = 0,$$

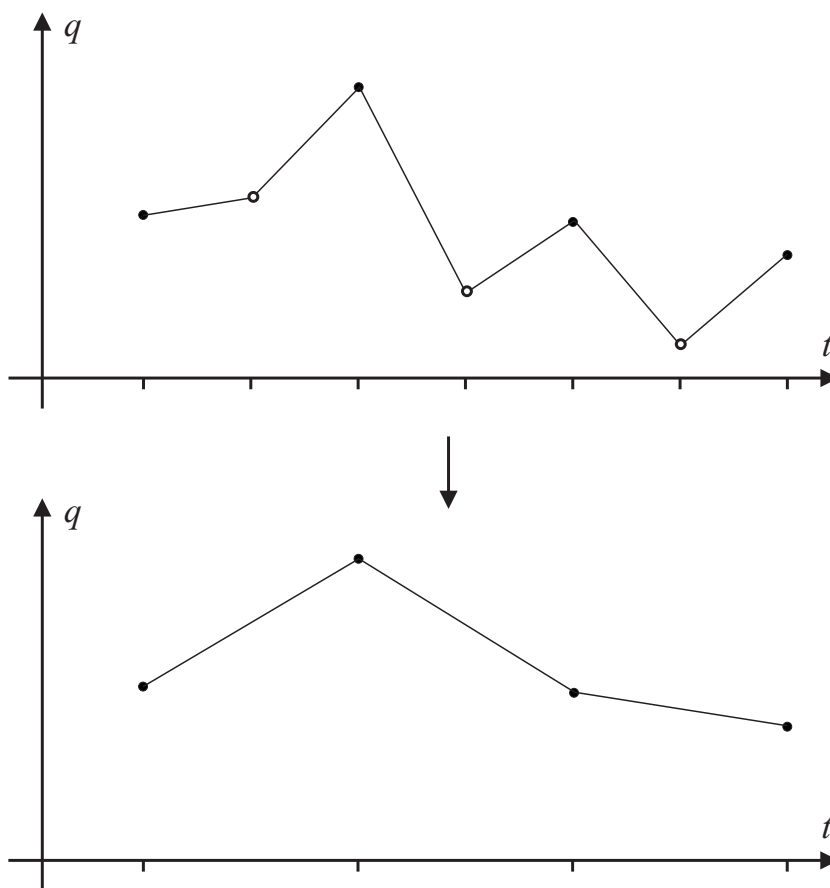
odakle se dobijaju rešenja za eksponent  $\lambda = \pm \lambda_N$ , gde je

$$\lambda_N = \frac{1 + \xi_N}{1 - \xi_N}.$$

Opšte rešenje jednačina (3.17) ima oblik  $q_k^N = Ae^{\lambda_N k} + Be^{-\lambda_N k}$ , a konstante  $A$  i  $B$  se mogu odrediti na osnovu graničnih uslova  $q_0^N = \alpha$  i  $q_N^N = \beta$ .

Prilikom Gausovog polovljenja prelazimo iz diskretizacije sa  $2N$  vremenskih koraka na dvostruko grublju diskretizaciju sa  $N$  vremenskih koraka. Na nivou funkcionalnog integrala ovo se postiže tako što se izvrše integracije po neparnim koordinatama. Na nivou jednačina kretanja Gausovo polovljenje se svodi na zahtev  $q_{2k}^{2N} = q_k^N$ , to jest parne tačke u  $2N$ -diskretizaciji postaju tačke odgovarajuće prepolovljene diskretizacije (slika 3.4).





Slika 3.4: Klasična trajektorija u diskretnoj teoriji sa  $2N$  vremenskih koraka i njoj pridružena klasična trajektorija u diskretizaciju sa  $N$  koraka. Druga trajektorija sastoji se od parnih tačaka prve. Ovo je jednostavna ilustracija Gausovog polovljenja.

Gornja veza između dve diskretizovane trajektorije daje uslov  $2\lambda_{2N} = \lambda_N$ . Rešavanjem ovog uslova se dobija veza između odgovarajućih frekvencija. Koristeći ranije uvedene oznake  $\omega_{2N} = \omega$ ,  $\omega_N = \tilde{\omega}$ ,  $\epsilon_N = \epsilon$  i  $\epsilon_{2N} = \epsilon/2$ , novu frekvenciju  $\tilde{\omega}$  možemo da izrazimo preko stare,

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega}{1 + \frac{\omega^2 \epsilon^2}{16}} = \frac{\omega}{G_1}.$$

Nije ni čudno što smo dobili istovetni rezultat kao i ranije. Gausovo polovljenje je egzaktno u slučaju slobodne teorije. Sa druge strane, opšte je poznato da u slučaju slobodne teorije (i samo tad) jednačine kretanja sadrže istu informaciju kao i funkcionalni integral.

Slobodnom teorijom smo se pozabavili iz dva razoga: da na jednostavnom primeru pokažemo da parametri teorije zavise od diskretizacije i da pokažemo da je priroda Gausovog polovljenja jednostavna i da se svodi na ogrubljenje trajektorija ilustrovano na slici 3.4.

U odeljku 4.4 videćemo da procedura Gausovog polovljenja može pomoći da parametre opšte diskretizovane teorije povežemo sa poznatim parametrima kontinualne teorije.

### 3.3 Rekurzivna formula za očekivane vrednosti

U kvantnoj mehanici i u statističkoj mehanici (koja je zapravo euklidska teorija polja), vrednost  $Z$  je praktično sve što nas interesuje. U kvantnoj mehanici ova veličina predstavlja amplitudu prelaza iz inicijalnog u finalno stanje, kao što smo videli u drugom poglavlju. U

statističkoj mehanici  $Z$  je particiona funkcija, čijim se diferenciranjem dobijaju sve termodinamičke veličine. U teoriji polja nas, međutim, gotovo isključivo<sup>7</sup> interesuju vakuumske očekivane vrednosti, pošto se sve fizičke veličine (opservable) mogu izraziti pomoću njih. Pri tome, naročito važne očekivane vrednosti su  $\langle q(t) \rangle$  (očekivana vrednost polja) i  $\langle q(t)q(t') \rangle$  (propagator). Generišući funkcional je ipak matematički veoma interesantan i u kvantnoj teoriji polja, pošto se njegovim diferenciranjem po spoljašnjem polju mogu dobiti sve vakuumske očekivane vrednosti. Međutim, pošto numeričko diferenciranje uvodi dodatnu grešku, u numeričkom smislu je važno izvesti analogone relacija (3.12) i (3.13) za očekivane vrednosti. Pored toga, pri iteriranju se broj podeonih tačaka u diskretizaciji smanjuje, pa bismo morali da vodimo računa da pri iteriranju u svakoj podeli domena integracije ostane vrednost spoljašnjeg polja po kojoj želimo da diferenciramo generišući funkcional. Naravno, pri računanju viših izvoda ovo bi unosilo dodatne komplikacije. Zato ćemo za očekivane vrednosti izvesti relacije koje omogućavaju njihovo direktno računanje pomoću slične iterativne šeme kao i za generišući funkcional. Na primer, ukoliko računamo očekivanu vrednost polja  $q$  u trenutku  $t$ , u diskretizaciji sa  $N$  podeonih tačaka imamo

$$\langle q(t) \rangle_N = \frac{1}{Z_N} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \mu[q_0, \dots, q_N; S] \cdot q_m \cdot \exp \{-S_{D,N}\},$$

gde podrazumevamo da je  $t = m\epsilon_N = mT/N$ , odnosno  $m = Nt/T$ , jasno je da će u podeli sa  $2N$  podeonih tačaka niz transformacija koje smo ranije primenili ostati validan jer se po koordinati  $q_m$  ne integriše, pa će opet važiti  $\langle q(t) \rangle_{N,s} = \langle q(t) \rangle_{2^s N}$ , gde indeks  $s$  označava da se očekivana vrednost računa uz pomoć  $s$ -tog iterata funkcija  $G$  i  $V$  na osnovu formula (3.15) i (3.16). Ovo važi i za druge očekivane vrednosti, na primer

$$\left\langle q(t_1)q(t_2) \dots q(t_n) \right\rangle_{N,s} = \left\langle q(t_1)q(t_2) \dots q(t_n) \right\rangle_{2^s N},$$

samo što se mora obezbediti da tačke  $t_1, t_2, \dots, t_n$  pripadaju najgrubljoj podeli vremenskog intervala. U numeričkom pristupu ovo nije neki veliki problem, pošto se obično koriste veliki brojevi podeonih tačaka  $N$ , pa je ovaj uslov lako zadovoljiti.

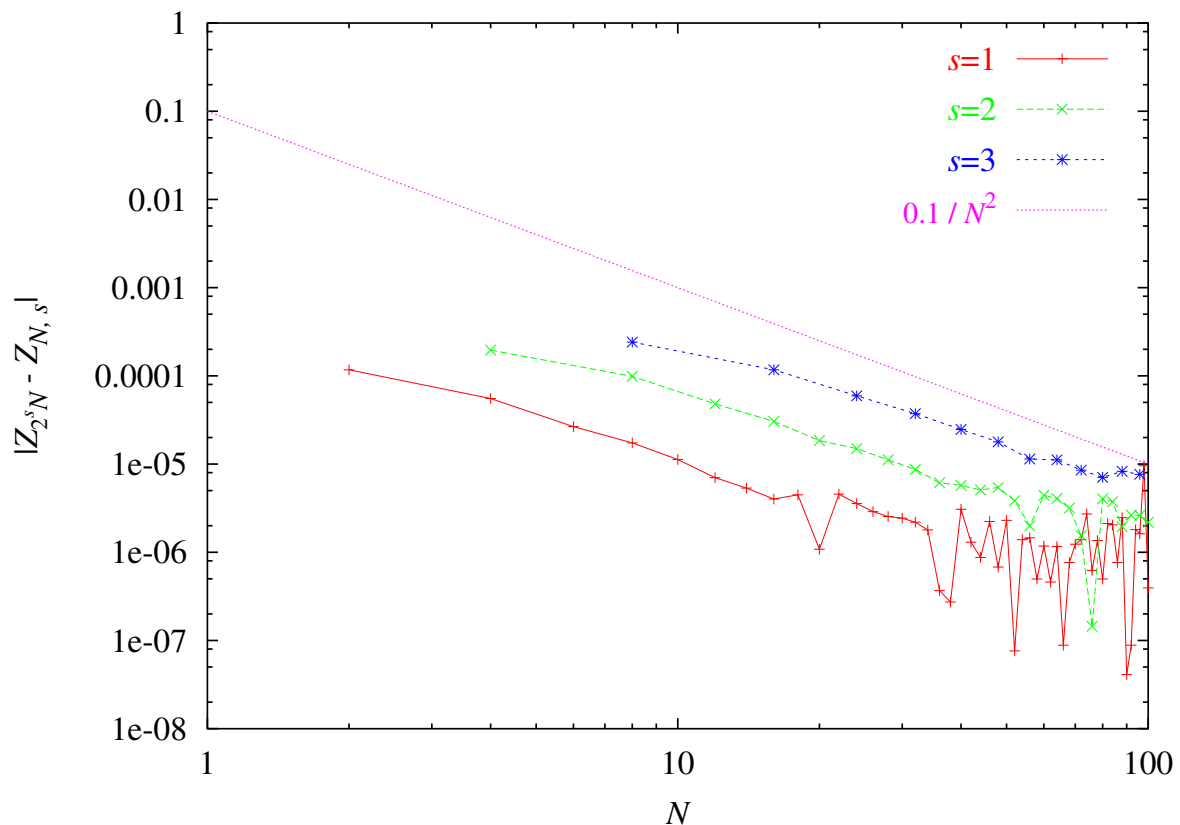
### 3.4 Rezultati numeričkih simulacija

U numeričkom smislu, vrednost relacija (3.12) i (3.13) je potencijalno velika, pošto omogućava da se generišući funkcional računa sa većom preciznošću (boljom diskretizacijom) uz iste računarske napore, i to samo pomoću zamene para funkcija  $(G, V)$  parom  $(G^{(1)}, V^{(1)})$ . Kao što ćemo videti, aproksimacije koje su učinjene ne uvode značajnu dodatnu grešku, odnosno utapaju se u statističku grešku Monte Karlo metoda. To je jasno sa slika 3.5 do 3.9, na kojima su prikazani rezultati za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom ( $\phi^4$  teoriju), za koju su funkcije  $G$  i  $V$ , koje definišu dejstvo, date jednakostima  $G(q) = 1$  i  $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4!}q^4 - jq$ . Ako uvedemo oznaku  $Z_{N,s} = Z_N[G_s^{(s)}, V_s^{(s)}]$ , gde se funkcije  $G_s^{(s)}$  i  $V_s^{(s)}$  dobijaju iz funkcija  $G$  i  $V$   $s$ -tostrukim iteriranjem pomoću rekurzivnih relacija (3.12) i (3.13) počev od diskretizacije sa  $2^s N$  koraka, očekujemo da važi približna skalirajuća jednakost

$$Z_{N,s}[G_s^{(s)}, V_s^{(s)}] = Z_{2^s N,0}[G_s^{(0)}, V_s^{(0)}] = Z_{2^s N}[G, V].$$

Ove relacije smo proverili na osnovu rezultata numeričkih Monte Karlo simulacija.

<sup>7</sup>Važni izuzeci su gravitacija i termalna teorija polja (teorija polja na temperaturama različitim od nule).



Slika 3.5: Apsolutna vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $|Z_{2^s N} - Z_{N,s}|$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 0, 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.1/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazano važenje relacije (3.18), odnosno pokazano je da je greška koju unosi primenjena Gausova aproksimacija reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

Na slici 3.5 eksplicitno se proverava važenje gornje skalirajuće relacije. Sa ovog grafika možemo da zaključimo da je greška koja je uneta opisanom procedurom Gausovog polovljenja reda  $1/N^2$ ,

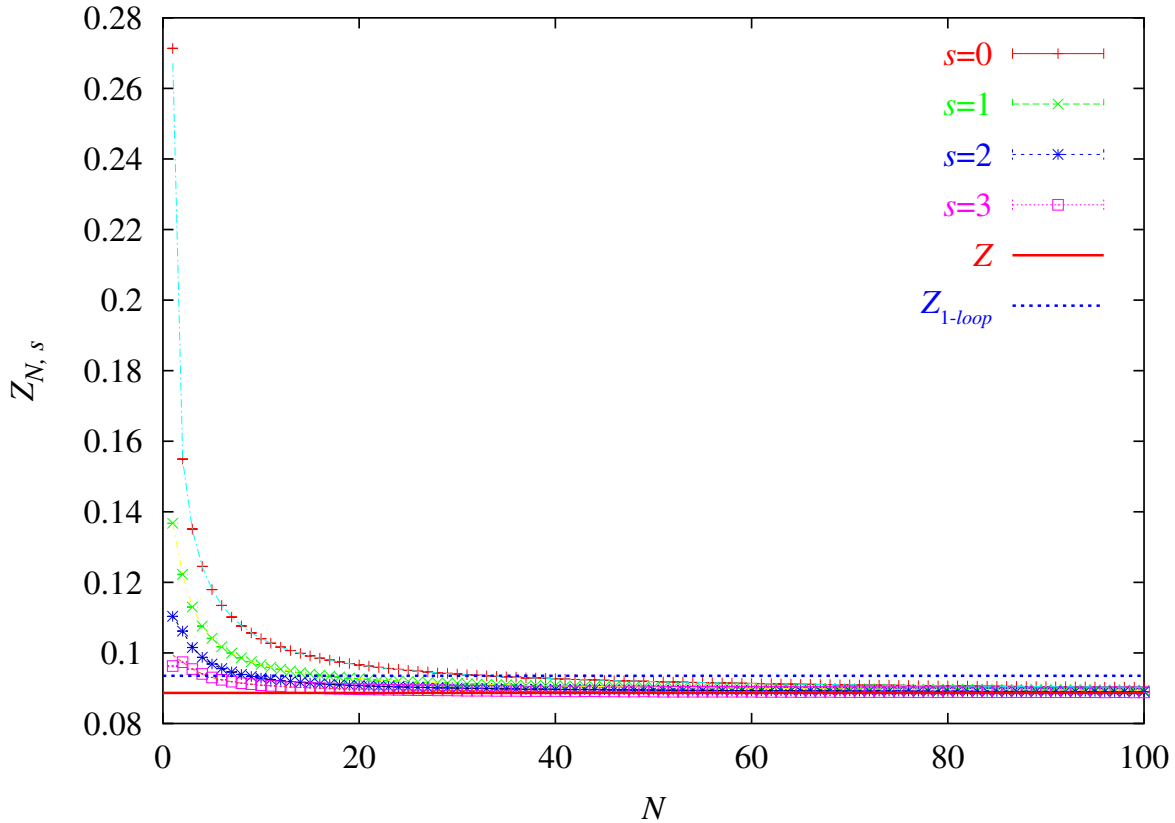
$$Z_{2^s N} - Z_{N,s} = o(N^{-2}). \quad (3.18)$$

To znači da je u polinomijalnom razvoju po  $1/N$  oblika (2.8) linearni član isti za  $s$ -ti iterat generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  i za vrednost koja se dobija pomoću definicione formule  $Z_{2^s N,0}$ , i da se ovi razvoji razlikuju tek od kvadratnog člana po  $1/N$ . Primetimo da grafici na slici 3.5 postaju izlomljeni kada razlika  $|Z_{2^s N} - Z_{N,s}|$  dostigne vrednosti oko  $10^{-6}$ , što je zapravo Monte Karlo statistička greška obe veličine. Jasno je da ćemo za razliku neke dve veličine dobiti samo statistički šum kada ta razlika postane jednaka greškama tih veličine, što objašnjava izgled grafika na slici 3.5. Povećanjem broja Monte Karlo koraka  $N_{MC}$  se ova greška može smanjiti, pošto je proporcionalna sa  $1/\sqrt{N_{MC}}$  (detaljnije o ovoj temi u Dodatku A). Na grafiku je prikazana i pogodna kriva  $0.1/N^2$ , kako bi se lakše videlo<sup>8</sup> da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ .

Na slici 3.6 upoređene su vrednosti dobijene za generišući funkcional na ovaj način korišćenjem efektivnih dejstava reda  $s = 0, 1, 2, 3$  sa vrednostima dobijenim u semiklasičnom razvoju (do na jednu petlju). Da bi se demonstrirala široka oblast primenljivosti

<sup>8</sup>Na log-log grafiku krive oblika  $f(x) = x^a$  postaju prave linije i imaju isti koeficijent pravca  $a$ .

izvedenih rekurzivnih relacija, prikazani su rezultati dobijeni za ekstremne vrednosti parametara teorije, odnosno vrednosti koje su daleko od semiklasičnog i perturbativnog sektora teorije – slučaj jake interakcije.

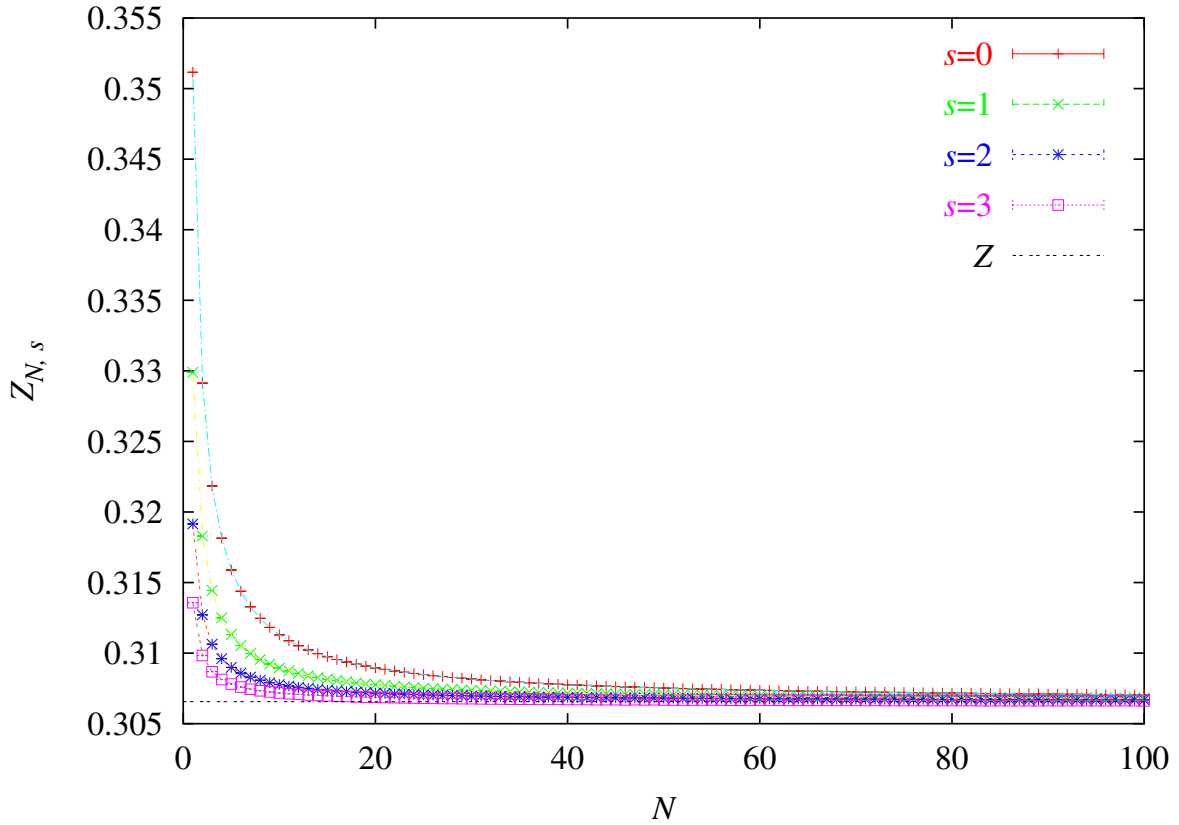


Slika 3.6: Aproksimativne vrednosti  $Z_{N,s}$  generišućeg funkcionala u zavisnosti od broja podeonih tačaka  $N$ . Prikazane su vrednosti dobijene iz definicije generišućeg funkcionala, čemu odgovara  $s = 0$  (multi iterat), kao i prva tri iterata na osnovu formula (3.14) – (3.16), označena sa  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je prikazana i zajednička vrednost generišućeg funkcionala  $Z$ , dobijena fitovanjem na podatke za sve vrednosti broja iterativnih koraka  $k$ , pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.088615(5)$ ,  $Z_{s=1} = 0.088611(7)$ ,  $Z_{s=2} = 0.088611(7)$ ,  $Z_{s=3} = 0.088611(7)$ . Na slici je dat i semiklasičan rezultat do na jednu petlju  $Z_{1-loop} = 0.093500$ . Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

Na sledeće dve slike prikazana je zavisnost  $Z_{N,s}$  od  $N$  (slika 3.7), odnosno zavisnost  $Z_{N,s}$  od  $2^s N$  (slika 3.8) za umerene vrednosti parametara teorije ( $g = 1$ ,  $j = 1$ ,  $T = 1$ ). Na slici 3.7 vidimo da vrednosti  $Z_{N,s}$  prilaze sve bliže pravoj vrednosti  $Z$  kako raste vrednost  $s$ . Pravi razlog za to je što vrednosti  $Z_{N,s}$  odgovaraju vrednostima generišućeg funkcionala originalne teorije u diskretizaciji sa  $2^s N$  podeonih tačaka. To znači da očekujemo da na grafiku zavisnosti  $Z_{N,s}$  od  $2^s N$  dobijemo sve tačke na istoj krivoj. Upravo to i vidimo na slici 3.8. Za vrednosti  $N \leq 5$  postoji malo odstupanje od očekivanog skaliranja, a poklapanje je sve bolje kako vrednost  $N$  raste.

Iako bi savršeno poklapanje dobijenih vrednosti trebalo da se dobije samo za egzaktno izvedene iterativne relacije, činjenica da sve ove tačke dobro leže na istoj krivoj zapravo predstavlja potpunu potvrdu primenljivosti Gausovog polovljenja pri izvođenju ovih relacija.

Kolaps svih tačaka na jednu krivu na slici 3.8 pokazuje i da očekivano skaliranje dobijeno u rekurzivnim relacijama važi ne samo za prvi iterat, već i za ostale, više iterate. Sa slika



Slika 3.7: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.3065648(5)$ ,  $Z_{s=1} = 0.3065644(5)$ ,  $Z_{s=2} = 0.3065644(5)$ ,  $Z_{s=3} = 0.3065644(5)$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

3.7 i 3.8, na osnovu fitovanja polinoma za nulti iterat i poklapanja dobijenih vrednosti pri skaliranju, vidimo i da  $Z_{N,s}$  ima isti oblik funkcionalne zavisnosti od  $N$  kao i ocena vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_N$  u jednačini (2.8),

$$Z_{N,s} = Z + \frac{A_s}{N} + \frac{B_s}{N^2} + \dots \quad (3.19)$$

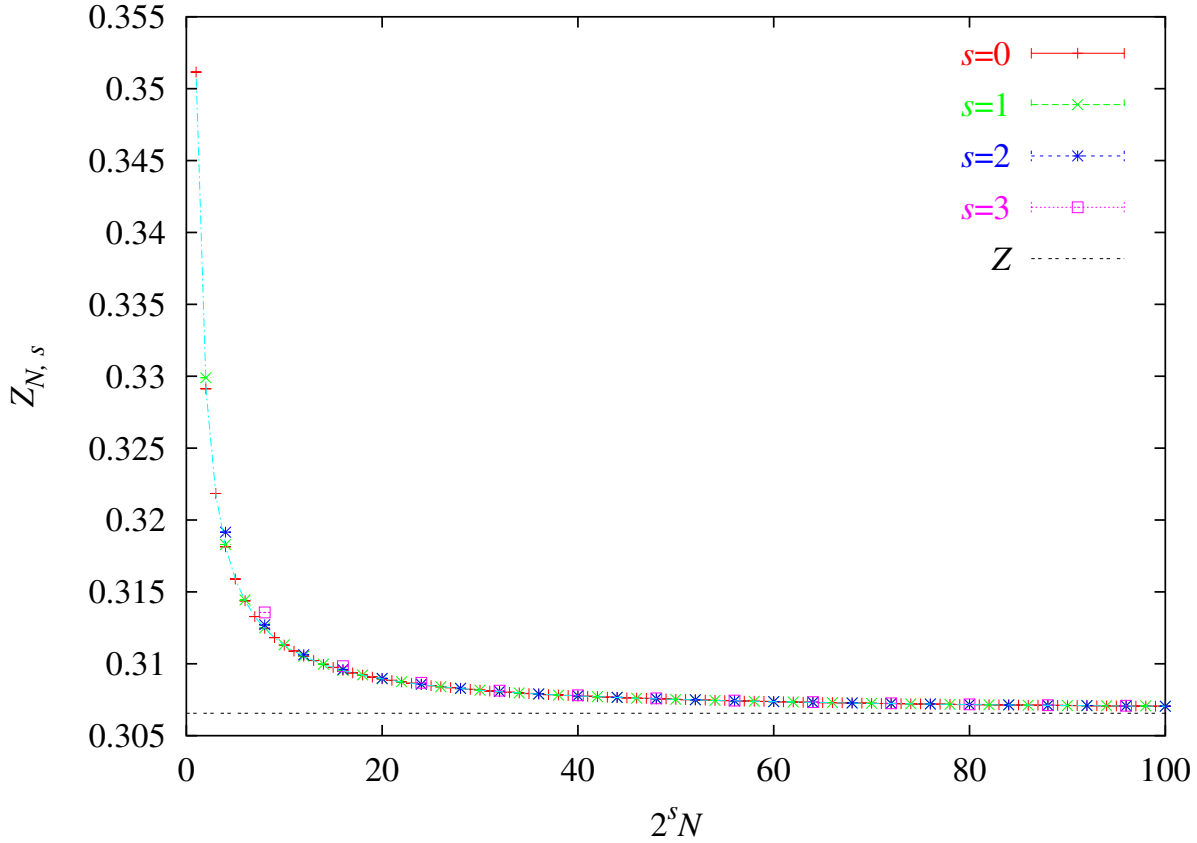
Sa slike 3.8, zbog kolapsa svih vrednosti na jednu krivu i zbog činjenice da  $1/N$  član daje najznačajniji doprinos u izrazu (3.19), možemo da zaključimo da za koeficijente  $A_s$  važi skalirajuća relacija<sup>9</sup>

$$A_s = \frac{A_0}{2^s} + o(N^{-1}). \quad (3.20)$$

Koeficijent  $A_0$  odgovara nultom iteratu, odnosno primeni definicione formule za računanje funkcionalnog integrala.

Pošto Gausova aproksimacija uvodi grešku reda  $1/N^2$ , kao što smo zaključili u izrazu (3.18) na osnovu slike 3.5, relacija ovog tipa ne može da se izvede za koeficijente uz više stepene od  $1/N$ . Jasno je da se povećanjem broja iteracija  $s$  koje smo izvršili eksponencijalno smanjuje vrednost koeficijenta  $A_s$ . To znači da se u polinomijalnom razvoju po  $1/N$  izraza za generišući funkcional  $Z_{N,s}$  koeficijent uz dominantan, linearan član smanjuje. Kada

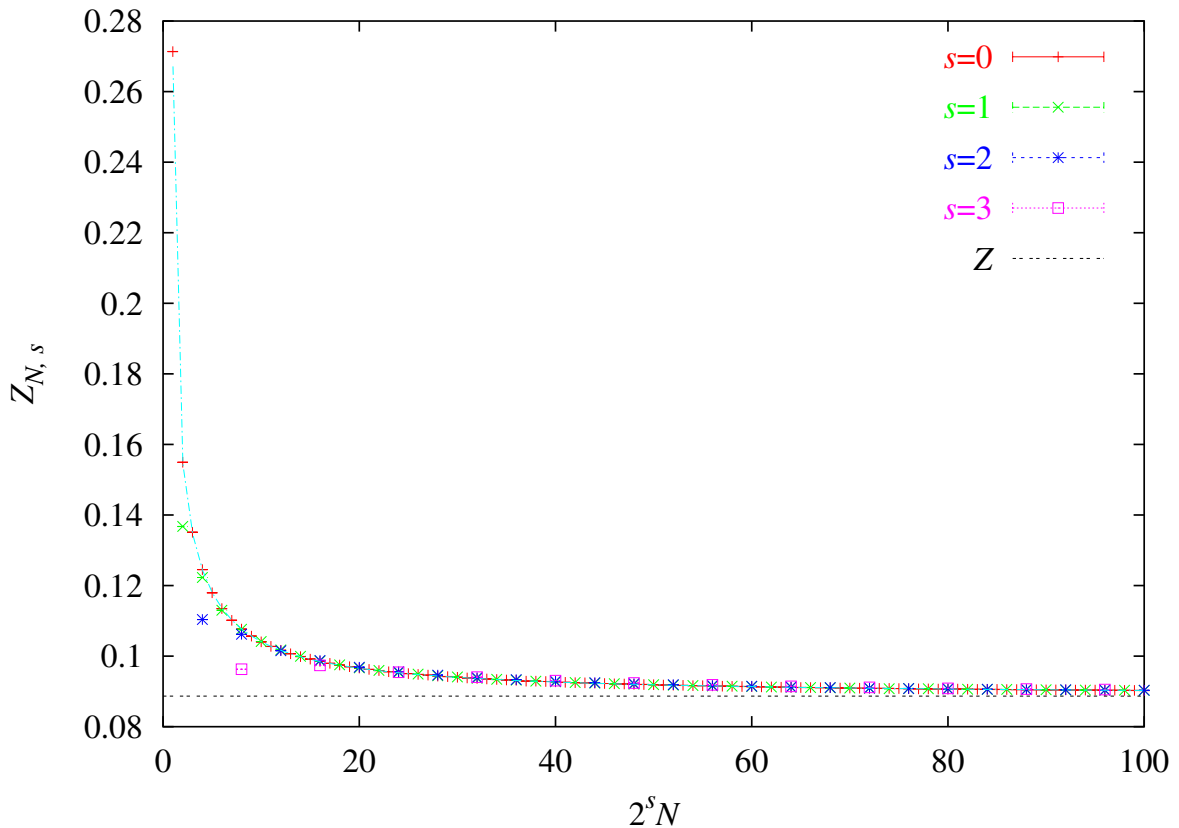
<sup>9</sup>Neposrednom proverom se može utvrditi da ova relacija za rezultate prikazane na slici 3.8 važi sa greškom od 0.1% za prvi iterat, sa greškom od 0.3% za drugi iterat, i sa greškom od 0.8% za treći iterat.



Slika 3.8: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

bismo bili u mogućnosti da broj iterativnih koraka neograničeno povećavamo, u limesu  $s \rightarrow \infty$  linearan član u razvoju  $Z_{N,s}$  po  $1/N$  bi nestao, što bi značajno ubrzalo konvergenciju dobijenih rezultata pravou vrednosti generišućeg funkcionala. Nažalost, već smo zaključili da praktično ne možemo da izvedemo više od tri do četiri iterativna koraka. Pa ipak, u sledećem poglavlju ćemo pokazati da je moguće naći  $s \rightarrow \infty$ , kontinuum limes rekurzivnih relacija, uz primenu dodatne aproksimacije (linearizacije izvedenih rekurzivnih relacija), i na taj način drastično poboljšati konvergenciju dobijenih rezultata.

Važenje skalirajućih relacija iz hijerarhije (3.14) proverili smo na širokom opsegu parametara razmatranog anharmonijskog oscilatora i dobili smo odlično slaganje. Pored variranja konstante anharmoniciteta (interakcije)  $g$ , varirali smo i jačinu spoljašnje struje  $j$  i dužinu trajanja evolucije  $T$ . Na slici 3.9 data je zavisnost iteriranog generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  od efektivnog broja vremenskih koraka  $2^s N$ , kao i na prethodnoj slici, ali za sektor teorije sa jakom interakcijom ( $g = 100$ ). Iako u ovom sektoru drugi aproksimativni metodi nisu pouzdani, sa slike 3.9 se vidi da Gausovo polovljenje daje dobre rezultate. To je posledica činjenice da se u Gausovoj aproksimaciji ne pretpostavlja da je konstanta interakcije mala, niti da se trajektorije koje daju dominantan doprinos funkcionalnom integralu nalaze u blizini rešenja klasičnih jednačina kretanja, što su osnovne pretpostavke drugih aproksimativnih metoda. Kao što smo istakli pri izvođenju rekurzivne formule, osnovna pretpostavka Gausovog polovljenja je da su bitne trajektorije međusobno bliske, odnosno da je vremenski korak  $\epsilon$  mali.



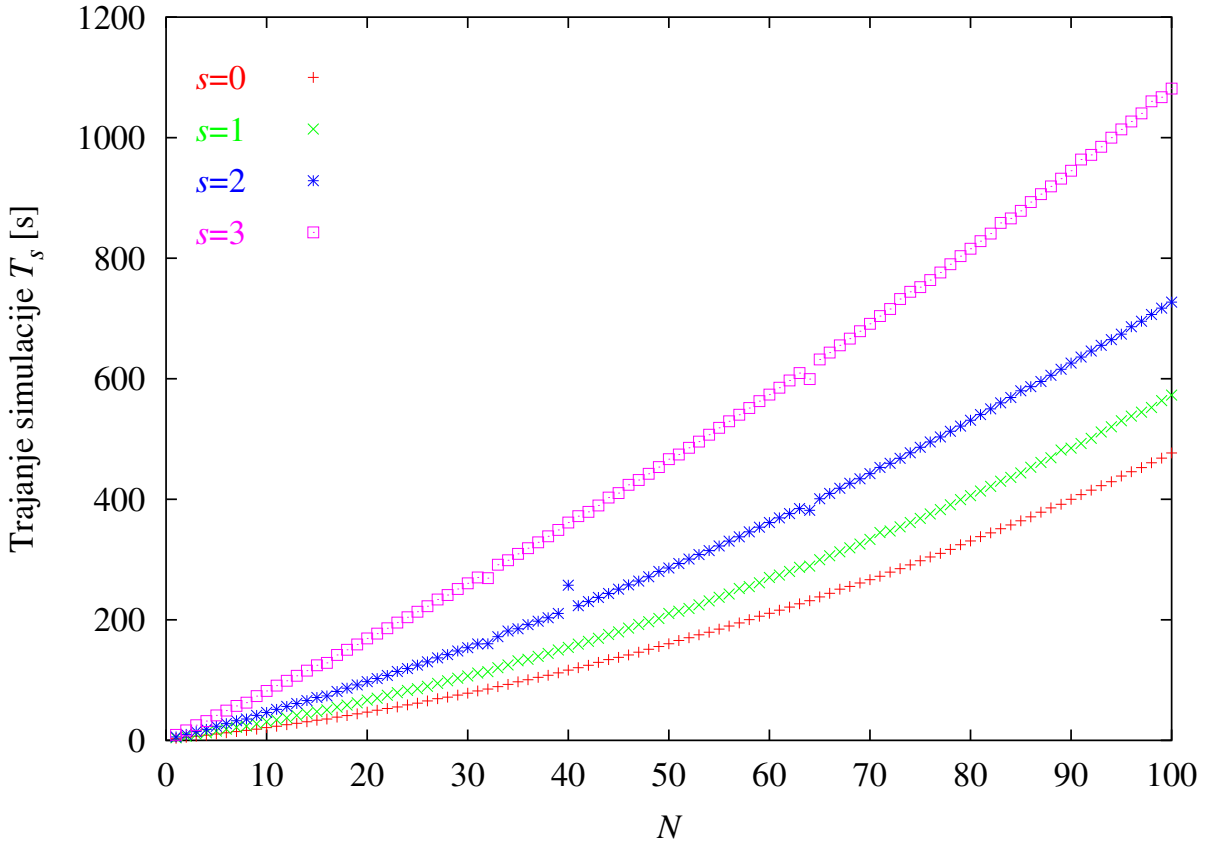
Slika 3.9: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

Iako bismo mogli da očekujemo da za velika vremena evolucije ( $T = 10$ ) i mali broj koraka  $N$  skaliranje nije savršeno (pošto se tada dobijaju velike vrednosti za  $\epsilon$ ), sa slika u Dodatku C vidimo da su i u ovom slučaju skalirajuće relacije zadovoljene i da sve krive gotovo u potpunosti kolapsiraju na jednu krivu.

### 3.5 Efektivno ubrzanje

Vreme izvršavanja (algoritamska složenost) Monte Karlo simulacija koje su razvijene radi provere izvedenih rekursivnih formula proporcionalno je sa  $N_{MC} \cdot N^2$ , gde je  $N_{MC}$  broj Monte Karlo koraka<sup>10</sup>, i slabo zavisi od broja iterativnih koraka  $s$  za male vrednosti  $s$  (za velike vrednosti  $s \gtrsim 5$  izrazi za  $G_s^{(s)}$  i  $V_s^{(s)}$  postaju toliko komplikovani da vreme izračunavanja počinje da značajno zavisi od  $s$ ). Ovo se može videti na slici 3.10, na kojoj je prikazana zavisnost realnog procesorskog vremena neophodnog za izvršavanje simulacije od broja vremenskih koraka  $N$ . Fitovanjem se može pokazati da je u pitanju kvadratna zavisnost od  $N$ . Monte Karlo kod je izložen i detaljnije diskutovan u Dodatku B.

<sup>10</sup>Faktor  $N_{MC}$  u gornjem izrazu je rezultat postojanja petlje u algoritmu po broju Monte Karlo koraka  $N_{MC}$ , dok je  $N^2$  zavisnost rezultat generisanja trajektorija sa  $N$  tačaka. Naime, generisanje svake od  $N$  tačaka je operacija reda  $N$ , pošto se prvo generiše trajektorija za dijagonalizovani oblik kvadratne forme dejstva, a zatim se tačke tražene trajektorije izračunavaju pomoću odgovarajuće linearne transformacije, inverzne dijagonalizovanju.



Slika 3.10: Zavisnost vremena izvršavanja Monte Karlo simulacija od broja vremenskih koraka  $N$ . Vreme izvršavanja ne zavisi od vrednosti parametara teorije. Prikazani rezultati dobijeni su za  $g = 1$ ,  $j = 1$ ,  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ . Kako je simulacija izvršavana na Linux klasteru, ukupno vreme izvršavanja jednako je zbiru vremena izvršavanja paralelnih delova simulacije na svakom pojedinačnom nodu klastera. Hardverske karakteristike klastera date su u Dodatku B.

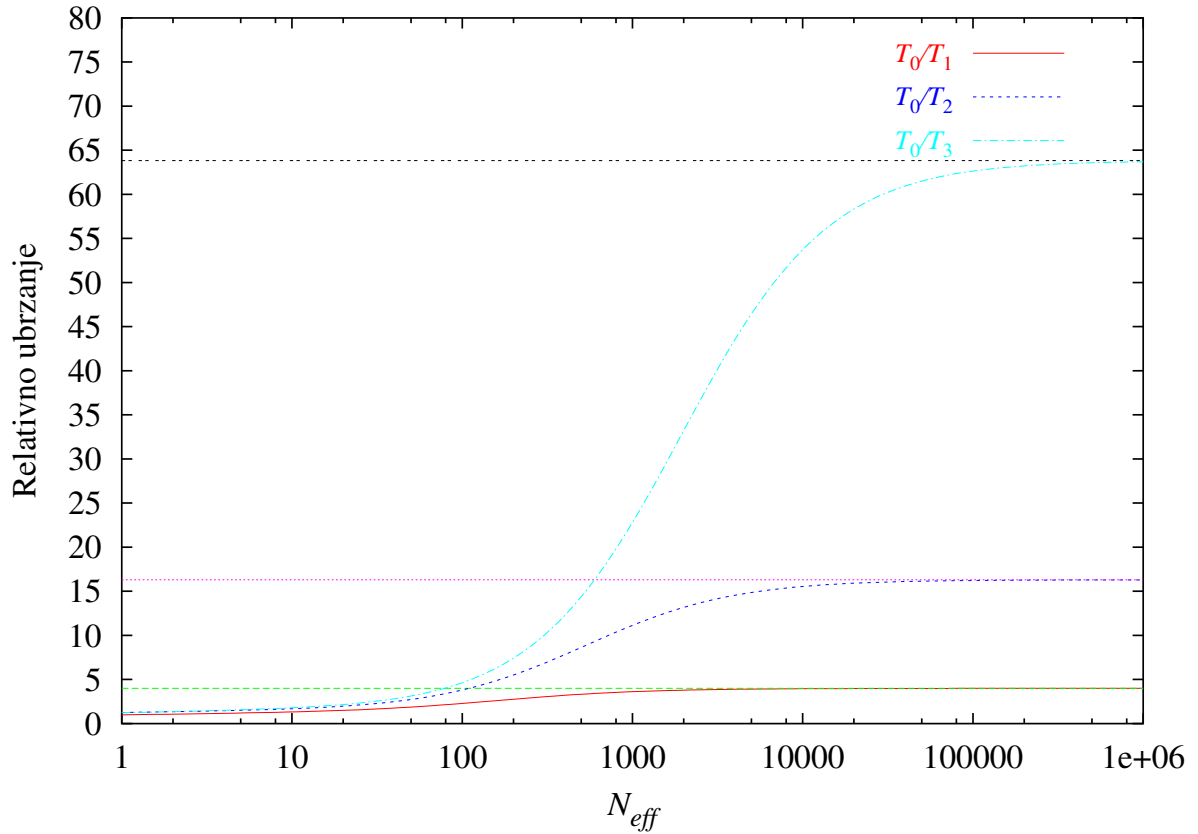
Oдавde sledi da je odnos vremena neophodnih da se postigne ista tačnost koristeći multi iterat (originalnu teoriju) i  $s$ -ti iterat jednak  $N^2/(N/2^s)^2 = 4^s$ , što je očekivano relativno ubrzanje opisanog metoda. Na slici 3.11 prikazano je relativno ubrzanje dobijeno u realnim simulacijama za različite vrednosti broja iterativnih koraka  $s$  u funkciji od efektivnog broja podeonih tačaka  $N_{eff} = 2^s N$ . Kada bi izvedene rekurzivne formule bile egzaktne, vertikalne linije na ovom grafiku odgovarale bi istim aproksimativnim vrednostima za generišući funkcional (aproksimativnim vrednostima sa istom tačnošću), ali u različitim diskretizacijama. Iako su izvedene formule dobijene aproksimativno, korišćenjem Gausovog polovljenja, vrednosti generišućeg funkcionala po vertikalnim linijama na slici 3.11 su veoma bliske (razlike su reda  $1/N^2$  i za tipične vrednosti  $N \sim 10^2$  koje se koriste u realnim simulacijama mogu se zanemariti).

Ilustrovaćemo značaj dobijenog relativnog ubrzanja korišćenjem izvedenih rekurzivnih formula na jednom primeru. Za efektivnu vrednost broja podeonih tačaka u diskretizaciji  $N_{eff} = 800$ , koja odgovara broju podeonih tačaka  $N = 100$  za treći iterat ( $s = 3$ ), relativno ubrzanje iznosi približno 20, kao što vidimo na slici 3.11. To znači da ćemo korišćenjem trećeg iterata 20 puta brže (za 20 puta kraće vreme) dobiti rezultat koji odgovara efektivnom broju podeonih tačaka  $N_{eff} = 800$  nego ako koristimo definicionu formulu (multi iterat,  $s = 0$ ), za koju je  $N_{eff} = N = 100$ .

Na slici 3.11 su prikazane i velike vrednosti efektivnog broja vremenskih koraka  $N_{eff}$



kako bi se videlo asimptotsko ponašanje relativnog ubrzanja. Sa ove slike vidimo da se zaista asimptotski dobijaju očekivane vrednosti relativnog ubrzanja  $4^s$  za iterativnu primenu rekurzivne formule  $s$  puta. Relativno ubrzanje koje je posledica primene Gausovog polovljenja u potpunosti opravdava primenu opisanog metoda u numeričkim simulacijama.



Slika 3.11: Odnos vremena izvršavanja simulacija za multi iterat dejstva  $T_0$  i vremena izvršavanja simulacija za više iterate  $T_s$ ,  $s = 1, 2, 3$ , odnosno relativno ubrzanje. Na slici je prikazan odnos kvadratnih polinoma koji se dobijaju fitovanjem na vrednosti na slici 3.10. Efektivna vrednost broja koraka je za svaki iterat data sa  $N_{eff} = 2^s N$ . Prikazane su i velike vrednosti  $N_{eff}$  kako bi se videlo asimptotsko ponašanje relativnog ubrzanja  $T_0/T_s = 4^s$ .



# 4

## Linearizovana rekurzivna formula

Iterativni procesi tipa  $x_{n+1} = f(x_n)$  često se sreću u mnogim oblastima fizike. Iskustvo stečeno u radu sa ovakvim procesima nam pokazuje da njihovi krajni rezultati često nisu jako osetljivi na oblik funkcije  $f$ , odnosno da se oblik ove funkcije može promeniti u okviru neke klase, a da se rezultat iterativne procedure ne promeni. U velikom broju slučajeva se prostor funkcija  $f$  razbija na klase univerzalnosti unutar kojih iterativna procedura daje isti ili sličan rezultat (kao primer navedimo Fajgenbaumove brojeve koji se dobijaju iteriranjem logističke krive). Ovo je bila motivacija za ideju da pokušamo da pojednostavimo rekurzivne relacije izvedene u prethodnom poglavlju, ostajući u istoj klasi univerzalnosti. Kao što će biti pokazano u ovom poglavlju, jednostavniji oblik rekurzivnih relacija će nam omogućiti da egzaktno rešimo iterativni problem za proučavanu klasu teorija.

### 4.1 Izvođenje linearizovane rekurzivne formule

U ovom poglavlju ćemo pokazati da se izvedene rekurzivne relacije mogu na veoma prirodan način pojednostaviti i egzaktno rešiti. Iz strukture relacija (3.12-3.13) vidi se da one zapravo predstavljaju popravljane funkcija  $G$  i  $V$ , pri čemu popravke predstavljaju stepeni red po vremenskom koraku  $\epsilon$ . Prirodno pojednostavljenje koje ćemo razmotriti je ograničavanje rekurzivnih relacija tako da se obuhvati samo prva popravka, odnosno da se pri iteriranju funkcije  $V$  uzmu u obzir samo linearne popravke po  $\epsilon$ . Kod iteriranja funkcije  $G$  treba uzeti popravke do reda  $\epsilon^3$  da bi bile istog reda kao i popravke kod funkcije  $V$ , što se vidi iz oblika diskretizovanog dejstva

$$\sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_N \left[ \frac{1}{2} G(Q_n) \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 + V(Q_n) \right],$$

Uzimajući ovo u obzir, linearizovane rekurzivne relacije imaju oblik

$$\mathcal{G}^{lin}[G, V, \epsilon] = G - \frac{\epsilon}{16} \left[ \frac{G''}{G} - \left( \frac{G'}{G} \right)^2 \right] + \frac{\epsilon^2}{16} V'', \quad (4.1)$$

$$\mathcal{V}^{lin}[G, V, \epsilon] = V + \frac{1}{\epsilon} \ln \frac{\mathcal{G}[G, V, \epsilon]}{G} - \frac{\left( \frac{G'}{G} \right)^2 - 2 \frac{G'}{G} V' \epsilon}{32 \mathcal{G}[G, V, \epsilon]}, \quad (4.2)$$

gde oznaka “*lin*” znači da zadržavamo samo one članove koji daju popravke odgovarajućeg reda po  $\epsilon$ .

U opštem obliku, ove relacije ne izgledaju ništa jednostavnije od polaznih rekurzivnih relacija. Da bi se dobio jednostavniji oblik, potrebno je specificirati funkcije  $G$  i  $V$ . Ovdje ćemo detaljno razmotriti samo važan specijalan slučaj,  $G(q) = 1$ , odnosno lagranžijan oblika  $L = \frac{1}{2}q^2 + V(q)$ . U ovom slučaju iz rekurzivne formule (4.1) za funkciju  $G$  posle prve iteracije dobijamo  $G^{(1)}(q) = 1 + \epsilon^2 V''/16$ , kao i

$$\begin{aligned} \frac{G^{(1)''}}{G^{(1)}} &= \epsilon^2 \frac{V''''}{16} + o(\epsilon^4) = G^{(1)''} + o(\epsilon^4), \\ \left( \frac{G^{(1)'}}{G^{(1)}} \right)^2 &= \epsilon^4 \left( \frac{V'''}{16} \right)^2 + o(\epsilon^6) = G^{(1)'^2} + o(\epsilon^6). \end{aligned}$$

Iz gornjih relacija sledi da će funkcija  $G$  nakon proizvoljno mnogo iterativnih koraka imati oblik  $1 + \epsilon^2 a(q) + \epsilon^3 b(q) + o(\epsilon^4)$  (prva popravku biće reda  $\epsilon^2$ ). Na osnovu ovoga vidimo da linearizovana rekurzivna formula za funkciju  $G$  ima oblik

$$\mathcal{G}^{lin}[G, V, \epsilon] = G + \frac{\epsilon^2}{16} V'' - \frac{\epsilon}{16} G'' . \quad (4.3)$$

Na sličan način možemo da izvedemo jednostavniji oblik rekurzivne formule za funkciju  $V$ . Kao što smo videli, u proizvoljnom iterativnom koraku je  $G'/G \sim \epsilon^2$ , pa se poslednji član u rekurzivnoj formuli (4.2) može zanemariti. Sa tačnošću do linearnih članova po  $\epsilon$ , logaritamski član u ovoj formuli postaje

$$\frac{1}{\epsilon} \ln \frac{\mathcal{G}[G, V, \epsilon]}{G} \approx \frac{1}{\epsilon} \ln \left[ 1 + \frac{\epsilon^2}{16} \frac{V''}{G} - \frac{\epsilon}{16} \frac{G''}{G} \right] \approx \frac{\epsilon}{16} \frac{V''}{G} - \frac{1}{16} \frac{G''}{G} \approx \frac{\epsilon}{16} V'' .$$

U prvom koraku smo iskoristili relaciju (4.3), u drugom koraku prvi član u Tejlorovom razvoju za  $\ln(1+x)$ , dok smo u poslednjem koraku iskoristili činjenicu da je  $G''/G \sim \epsilon^2$  i da je  $G = 1 + o(\epsilon^2)$ . Konačan oblik rekurzivne relacije za funkciju  $V$  je

$$\mathcal{V}^{lin}[G, V, \epsilon] = V + \frac{\epsilon}{16} V'' . \quad (4.4)$$

## 4.2 Rešenje linearizovane rekurzivne formule

U ovom odeljku ćemo se posvetiti egzaktnom rešavanju izvedenih linearizovanih rekurzivnih formula (4.3) i (4.4). Koristeći oznake iz prethodnog poglavlja, ove formule možemo napisati u obliku

$$G_s^{(k+1)} = G_s^{(k)} + \frac{\epsilon_N^2}{16} \frac{V_s^{(k)''}}{2^{2s-2k-2}} - \frac{\epsilon_N}{16} \frac{G_s^{(k)''}}{2^{s-k-1}} , \quad (4.5)$$

$$V_s^{(k+1)} = V_s^{(k)} + \frac{\epsilon_N}{16} \frac{V_s^{(k)''}}{2^{s-k-1}} . \quad (4.6)$$

Oдавde se vidi da je svaka funkcija  $V_s^{(k)}$  oblika  $V_s^{(k)} = V_0 + \epsilon_N c_s^{(k)}(q)$ , gde  $c_s^{(k)}(q)$  ne sadrži  $\epsilon_N$ . Pošto za funkciju  $V$  uzimamo u obzir samo linearne popravke, gornju relaciju možemo da napišemo u još jednostavnijem obliku

$$V_s^{(k+1)} = V_s^{(k)} + \frac{\epsilon_N}{16} \frac{V_0''}{2^{s-k-1}} .$$

Ako iz gornjeg izraza nađemo razliku  $V_s^{(k+1)} - V_s^{(k)}$  i izračunamo zbir

$$\sum_{k=0}^n (V_s^{(k+1)} - V_s^{(k)}) = V_s^{(n+1)} - V_s^{(0)} = V_s^{(n+1)} - V_0 = \frac{\epsilon_N V_0''}{16 \cdot 2^{s-1}} \sum_{k=0}^n 2^k = (2^{n+1} - 1) \frac{\epsilon_N}{2^{s+3}} V_0'' ,$$

dobijamo eksplicitan izraz za  $V_s^{(k)}$ ,

$$V_s^{(k)} = V_0 + \frac{2^k - 1}{2^{s+3}} \epsilon_N V_0'' .$$

Kao što smo već videli, funkcija  $G$  može da se napiše u obliku

$$G_s^{(k)} = 1 + \epsilon_N^2 a_s^{(k)} + \epsilon_N^3 b_s^{(k)} ,$$

gde nepoznate funkcije koordinata  $a_s^{(k)}$  i  $b_s^{(k)}$  treba odrediti. Kako je  $G_s^{(0)} = G_0 = 1$ , sledi  $a_s^{(0)} = b_s^{(0)} = 0$ . Ako iskoristimo izvedeni izraz za  $G_s^{(k)}$ , kao i dobijeno rešenje za  $V_s^{(k)}$ , iz relacije (4.5) do na članove reda  $\epsilon_N^3$  dobijamo

$$G_s^{(k+1)} = 1 + \epsilon_N^2 a_s^{(k)} + \epsilon_N^3 b_s^{(k)} + \frac{\epsilon_N^2}{2^{2s-2k+2}} \left( V_0'' + \frac{2^k - 1}{2^{s+3}} \epsilon_N V_0'''' \right) - \frac{\epsilon_N \epsilon_N^2 a_s^{(k)''}}{16 \cdot 2^{s-k-1}} .$$

Daljim sređivanjem ovog izraza dobijamo

$$G_s^{(k+1)} = 1 + \epsilon_N^2 \left( a_s^{(k)} + \frac{V_0''}{2^{2s-2k+2}} \right) + \epsilon_N^3 \left( b_s^{(k)} + \frac{2^k - 1}{2^{s+3}} V_0'''' - \frac{a_s^{(k)''}}{2^{s-k-1}} \right) ,$$

odakle dobijamo rekurzivne relacije za funkcije  $a_s^{(k)}$  i  $b_s^{(k)}$  u sledećem obliku

$$a_s^{(k+1)} = a_s^{(k)} + \frac{V_0''}{2^{2s-2k+2}} , \quad (4.7)$$

$$b_s^{(k+1)} = b_s^{(k)} + \frac{2^k - 1}{2^{3s-2k+5}} V_0'''' - \frac{a_s^{(k)''}}{2^{s-k+3}} . \quad (4.8)$$

Rekurzivnu relaciju (4.7) za funkcije  $a_s^{(k)}$  moguće je rešiti na sličan način kao i relaciju za  $V_s^{(k)}$ . Prvo ćemo iz formule (4.7) izraziti razliku  $a_s^{(k+1)} - a_s^{(k)}$ , a zatim izračunati zbir

$$\sum_{k=0}^n (a_s^{(k+1)} - a_s^{(k)}) = a_s^{(n+1)} - a_s^{(0)} = a_s^{(n+1)} = \frac{V_0''}{2^{2s+2}} \sum_{k=0}^n 2^{2k} = \frac{4^{n+1} - 1}{3 \cdot 2^{2s+2}} V_0'' ,$$

pa zaključujemo da je rešenje za funkcije  $a_s^{(k)}$  dato sa

$$a_s^{(k)} = \frac{4^k - 1}{12 \cdot 4^s} V_0'' .$$

Da bismo rešili rekurzivnu relaciju (4.8) za funkcije  $b_s^{(k)}$ , prvo ćemo je prepisati koristeći dobijeno rešenje za  $a_s^{(k)}$ ,

$$\begin{aligned} b_s^{(k+1)} &= b_s^{(k)} + \frac{2^k - 1}{2^{3s+5}} 4^k V_0'''' - \frac{4^k - 1}{12 \cdot 2^{3s+3}} 2^k V_0'''' = \\ &= b_s^{(k)} + \left[ \left( \frac{1}{32} - \frac{1}{96} \right) \frac{8^k}{2^{3s}} - \frac{4^k}{32 \cdot 2^{3s}} + \frac{2^k}{96 \cdot 2^{3s}} \right] V_0'''' = \\ &= b_s^{(k)} + \left[ \frac{8^k}{48} - \frac{4^k}{32} + \frac{2^k}{96} \right] \frac{V_0''''}{8^s} . \end{aligned}$$

Sada se, slično kao i u prethodnim slučajevima, formiranjem zbira  $\sum_{k=0}^n (b_s^{(k+1)} - b_s^{(k)})$  dobija

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (b_s^{(k+1)} - b_s^{(k)}) &= b_s^{(n+1)} - b_s^{(0)} = b_s^{(k+1)} = \left[ \frac{1}{48} \sum_{k=0}^n 8^k - \frac{1}{32} \sum_{k=0}^n 4^k + \frac{1}{96} \sum_{k=0}^n 2^k \right] \frac{V_0''''}{8^s} = \\ &= \left[ \frac{1}{48} \frac{8^{n+1} - 1}{7} - \frac{1}{32} \frac{4^{n+1} - 1}{3} + \frac{2^{n+1} - 1}{96} \right] \frac{V_0''''}{8^s}. \end{aligned}$$

Nakon jednostavnih algebarskih transformacija dobija se rešenje za funkcije  $b_s^{(k)}$  u obliku

$$b_s^{(k)} = \frac{2 \cdot 8^k - 7 \cdot 4^k + 7 \cdot 2^k - 2}{672 \cdot 8^s} V_0''''.$$

Da rezimiramo – dobili smo egzaktna rešenja linearizovanih rekurzivnih formula za opštu teoriju sa lagranžijanom  $L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + V(q)$ . Ova rešenja su oblika

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

Kao što je objašnjeno u prethodnom poglavlju (vidi formulu (3.14)), u ovoj hijerarhiji funkcija mi zapravo koristimo funkcije  $G_s^{(s)}$  i  $V_s^{(s)}$ , koje su date sa

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

### 4.3 Rezultati numeričkih simulacija

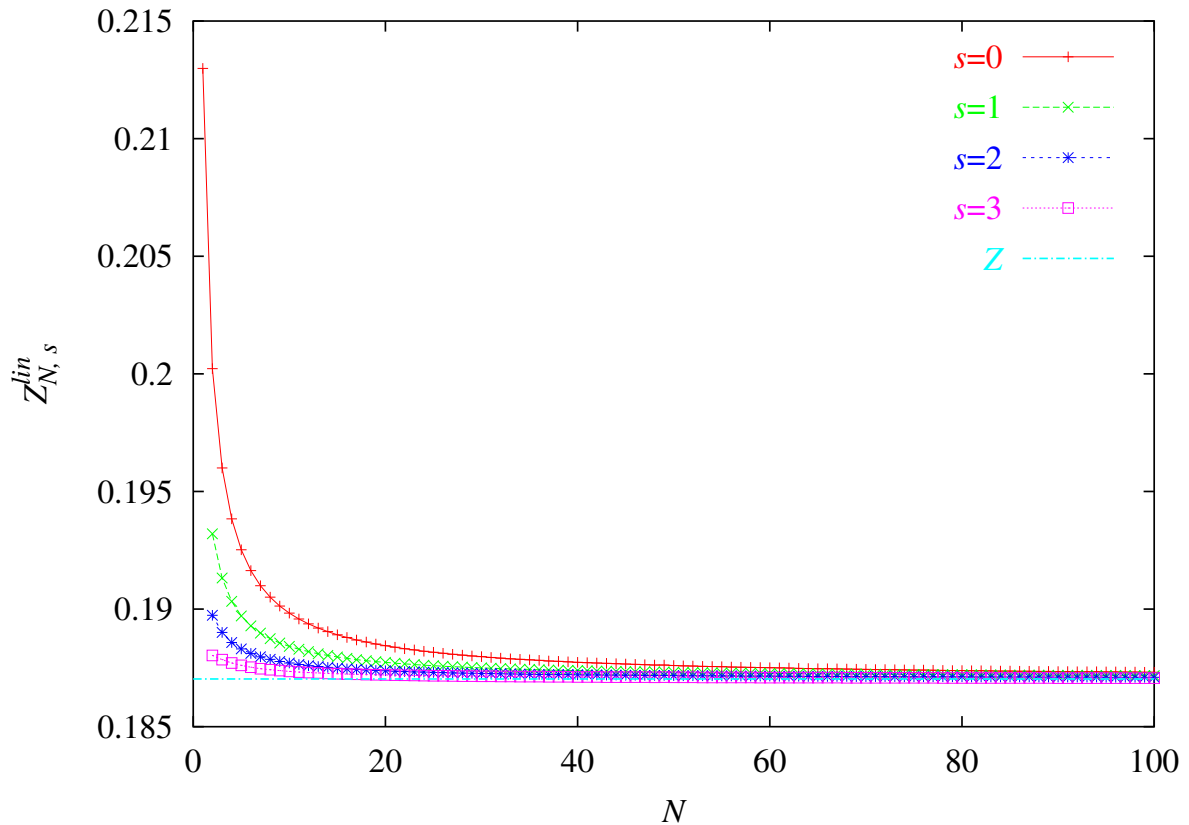
Na slikama 4.1 do 4.3 upoređene su dobijene vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u linearizovanom Gausovom polovljenju sa vrednostima  $Z_{N,s}$  dobijenim korišćenjem originalnih rekurzivnih formula za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom ( $\phi^4$  teorija).

Na slici 4.1 data je tipična zavisnost ocene generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u funkciji od  $N$ . Sa slike vidimo da je oblik zavisnosti isti kao i kod originalne rekurzije. Detaljnijom analizom rezultata dobijamo ocene vrednosti generišućeg funkcionala  $Z$  koje su u međusobnoj saglasnosti i u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Dodatni grafici za različite vrednosti parametara razmatrane teorije dati su u Dodatku C.

Na slici 4.2 je ispitano važenje skalirajuće relacije za linearizovanu rekurzivnu formulu

$$Z_{N,s}^{lin} = Z + \frac{A_0}{2^s N} + \frac{B'_s}{N^2} + \dots, \quad (4.9)$$

koja predstavlja analogon relacije (3.19). Na ovoj slici je prikazana zavisnost ocene generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u funkciji od  $2^s N$ . Pošto skoro sve tačke kolapsiraju na jednu krivu, možemo da zaključimo da gornja relacija važi i nakon linearizacije. Pri tome je dobijeno da koeficijenti  $A_s$  zadovoljavaju istu relaciju  $A_s = A_0/2^s$  kao i koeficijenti u slučaju originalnih rekurzivnih relacija (jednačina (3.20)). Pored toga, i numerički dobijene vrednosti koeficijenata  $A_s$  su jednake u oba slučaja (do na popravke reda  $1/N$ ), dok se koeficijenti  $B_s$  i  $B'_s$  razlikuju (ova razlika je posledica linearizacije).



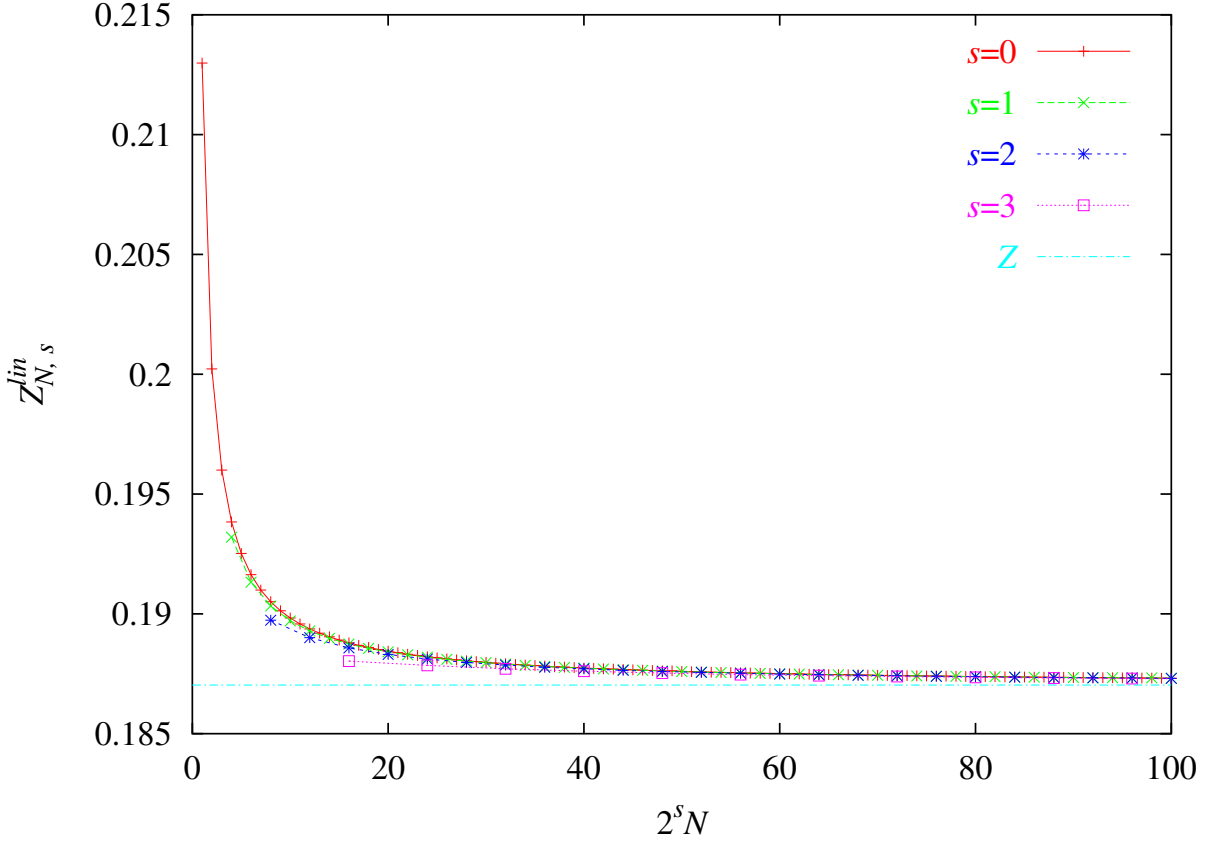
Slika 4.1: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.1870294(3)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.1870292(4)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.1870292(4)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.1870293(4)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

Odstupanja od očekivanog skaliranja (4.9) se mogu uočiti samo za male vrednosti  $N$  ( $N \leq 5$ ). I originalne i linearizovane rekurzivne formule daju, dakle, istu  $2^s N$  zavisnost kod generišućeg funkcionala, a odstupanja od očekivanog skaliranja su prilično mala, čak i za male vrednosti  $N \leq 5$ . Ipak, kada uporedimo grafik na slici 4.2 sa graficima dobijenim u prethodnom poglavlju (slika 3.8), očigledno je da su odstupanja nešto manja za originalnu rekurzivnu formulu. Kako se u euklidskoj teoriji lako može pokazati da aproksimacije koje smo uveli uvek smanjuju vrednosti generišućeg funkcionala (ovo je osnova varijacionog metoda), jasno je da će vrednosti dobijene u originalnom Gausovom polovljenju ležati nešto ispod očekivane skalirajuće krive na slici 3.8, a vrednosti dobijene korišćenjem linearizovane aproksimacije ležaće joñiže. Međutim, već za vrednosti  $N \geq 5$  poklapanje je idealno. U Dodatku C su dati grafici istog tipa za različite vrednosti parametara proučavane  $\phi^4$  teorije, koji potvrđuju izvedeni zaključak.

Na slici 4.3 pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ , gde je  $N$  broj koraka u diskretizaciji vremenskog intervala  $T$ ,

$$Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin} = o(N^{-2}). \quad (4.10)$$

Primetimo da grafici na ovoj slici postaju izlomljeni kada razlike  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  dostignu vrednosti oko  $10^{-6}$ , što je zapravo Monte Karlo statistička greška obe veličine. Na grafiku je prikazana i pogodna kriva  $0.1/N^2$ , kako bi se lakše videli dominantni članovi u razvoju



Slika 4.2: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

prikazanih krivih po  $1/N$ . U Dodatku C date su zavisnosti  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u funkciji od  $N$  za širok opseg parametara teorije.

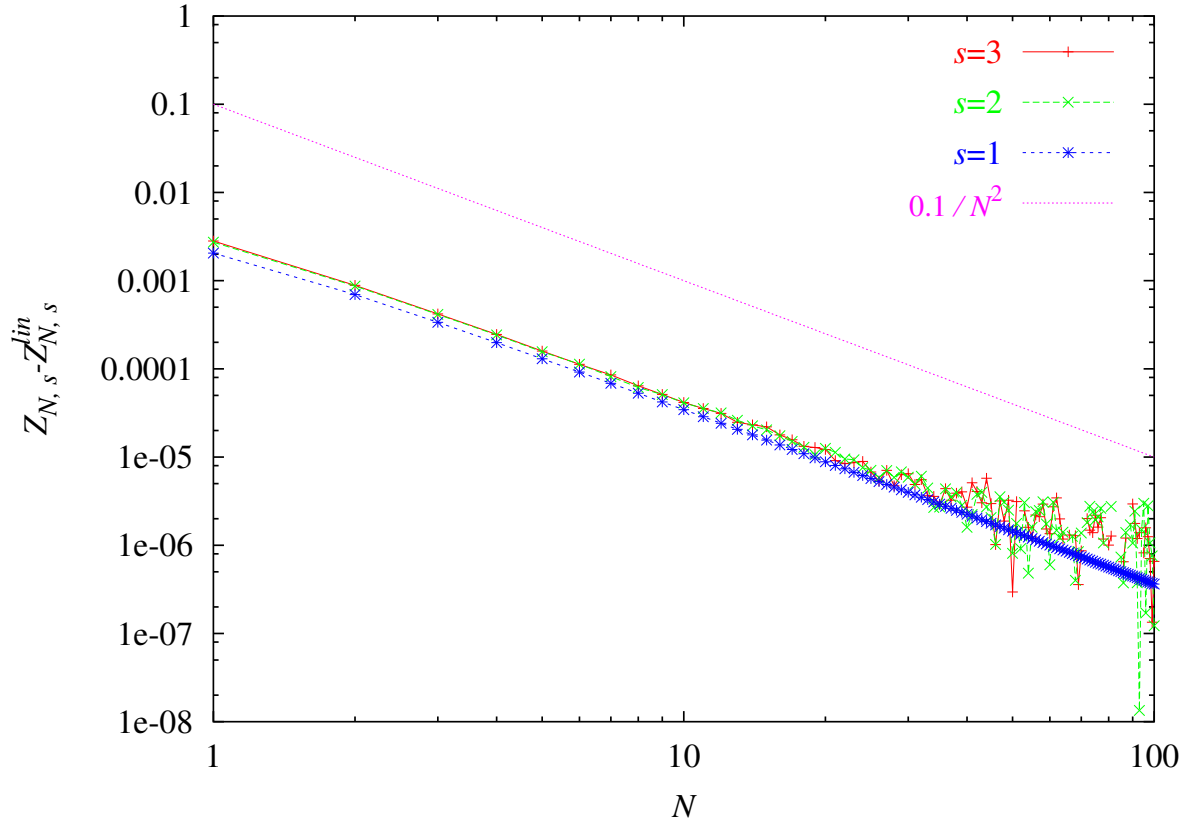
Pošto znamo da se pri korišćenju originalnih rekurzivnih relacija pravi greška reda  $1/N^2$  (formula (3.18)), na osnovu gornje formule možemo da zaključimo da isto važi i pri primeni linearizovanih rekurzivnih formula, odnosno

$$Z_{2^s N} - Z_{N,s}^{lin} = o(N^{-2}). \quad (4.11)$$

Dakle, linearizacija ne unosi značajnu dodatnu grešku, pošto je ona istog reda veličine kao i greška koju smo već uneli primenom Gausovog polovljenja. Ovo je veoma značajno, pošto opravdava linearizaciju dobijenih rekurzivnih formula. Pri tome, uslov primenljivosti linearizacije je isti kao i uslov primenljivosti originalnog Gausovog polovljenja: vremenski korak  $\epsilon$  mora da bude dovoljno mali. Ujedno, gornja formula objašnjava i zašto skalirajuća formula (4.9) važi i za linearizovanu rekurzivnu formulu, kao što smo numerički videli na slici 4.2: kako je greška linearizacije proporcionalna sa  $1/N^2$ , dominantan linearan član se ne menja.

Iz jednačine (4.9) se vidi da su popravke pri korišćenju iterativnog izraza reda  $s$  za dejstvo teorije pri računanju generišućeg funkcionala uvek proporcionalne sa  $1/N$  (to je dominantan član; naravno, postoje dodatne popravke proporcionalne sa  $1/N^2$  itd.), ali pri tom ove popravke opadaju kako  $k$  raste. Ovo se vidi kako iz numeričkih rezultata, tako i analitički, pošto konstanta koja množi član  $1/N$  u jednačini (4.9) ima oblik  $A_0/2^s$ .



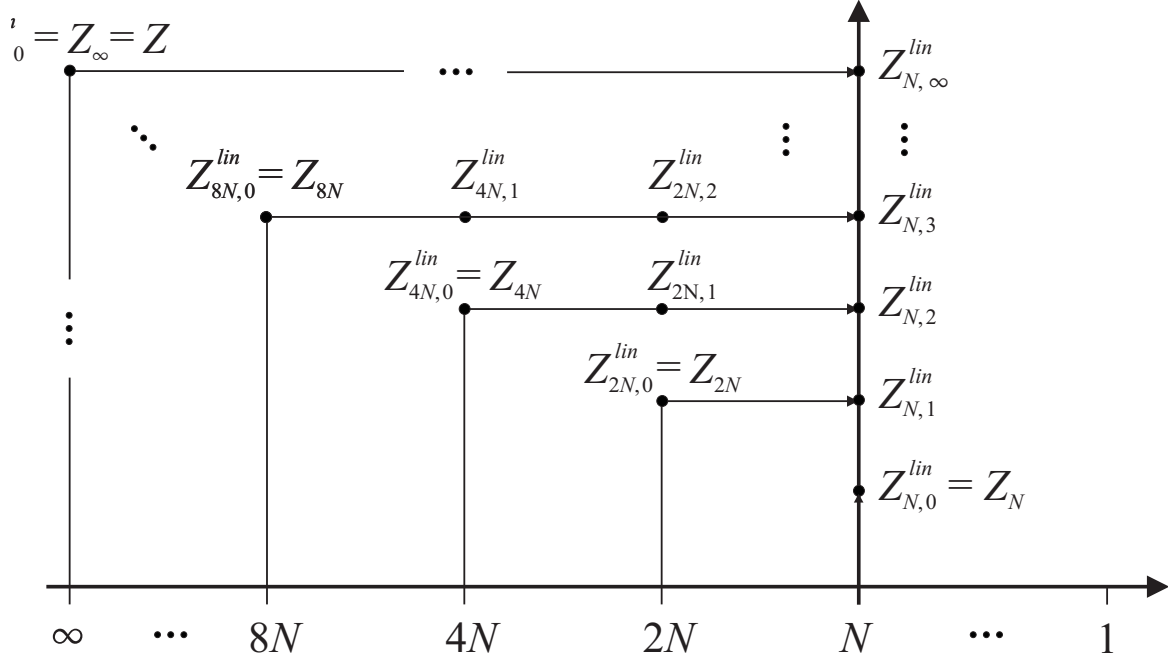


Slika 4.3: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.1/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

## 4.4 Kontinuum limes

Osnovna prednost linearizovane Gausove aproksimacije je što smo našli egzaktno rešenje rekursivnih formula. Ovo nam omogućava da automatski dobijemo i željeni kontinuum limes  $k \rightarrow \infty$ . Kontinuum limes nas naravno interesuje zato što je polazna teorija kontinualna, i prilikom njene diskretizacije vrednosti fizičkih konstanti koje ulaze u definiciju teorije (masa polja, konstante interakcije itd.) se menjaju. Da bi se u diskretizovanu teoriju unele ispravne vrednosti ovih konstanti, neophodno je detaljno proučiti proces diskretizacije. U naivnom pristupu, u diskretizovanoj teoriji koristimo fizičke vrednosti parametara, pa tek u limesu  $N \rightarrow \infty$  dobijamo i fizičku vrednost funkcionalnog integrala. Posledica ovog pristupa je spora  $N$  konvergencija dobijenih rezultata. Kontinuum limes obezbeđuje da se u diskretizovanu teoriju od koje počinjemo mogu uneti fizičke vrednosti parametara teorije. Ovaj limes je značajan i zbog toga što u jednačini (4.9) uklanja linearan član po  $1/N$ , pa je  $N$  konvergencija mnogo brža (kvadratna konvergencija) u odnosu na prethodno razmatrane pristupe (linearna konvergencija).

Na slici 4.4 ilustrovana je hijerarhija aproksimacija vezana za kontinuum limes. Kao što smo već naglasili, tek u kontinuum limesu parametri teorije imaju svoje prave, fizičke vrednosti. Za konačno  $N$  imamo odgovarajuće vrednosti ovih parametara date preko razvoja u red po  $1/N$ .



Slika 4.4: Ilustracija hijerarhije generišućih funkcionala koja nastaje linearizacijom, uz primenu kontinuum limesa. Vidimo da se  $Z_{N,\infty}^{lin}$  dobija kao limes linearizovanih vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  kada  $s \rightarrow \infty$  (vertikalna osa), ili primenom beskonačnog broja linearizovanih Gausovih aproksimacija (horizontalna osa).

U kontinuum limesu funkcije  $G_s^{(s)}$  i  $V_s^{(s)}$  postaju

$$G_\infty^{lin} = \lim_{s \rightarrow \infty} G_s^{(s)} = 1 + \epsilon_N^2 \frac{V_0''}{12} + \epsilon_N^3 \frac{V_0''''}{336}, \quad (4.12)$$

$$V_\infty^{lin} = \lim_{s \rightarrow \infty} V_s^{(s)} = V_0 + \epsilon_N \frac{V_0''}{8}. \quad (4.13)$$

Najvažnija osobina kontinuum limesa (odsustvo člana proporcionalnog sa  $1/N$  u jednačini (4.9)) može se pokazati na još jedan način. Na osnovu izraza (4.11) jasno je da formiranjem linearnih kombinacija aproksimativnih vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  i  $Z_{N,s+1}^{lin}$  možemo da postignemo da se linearni član po  $1/N$  izgubi:

$$2Z_{N,s+1}^{lin} - Z_{N,s}^{lin} = Z + o(N^{-2}).$$

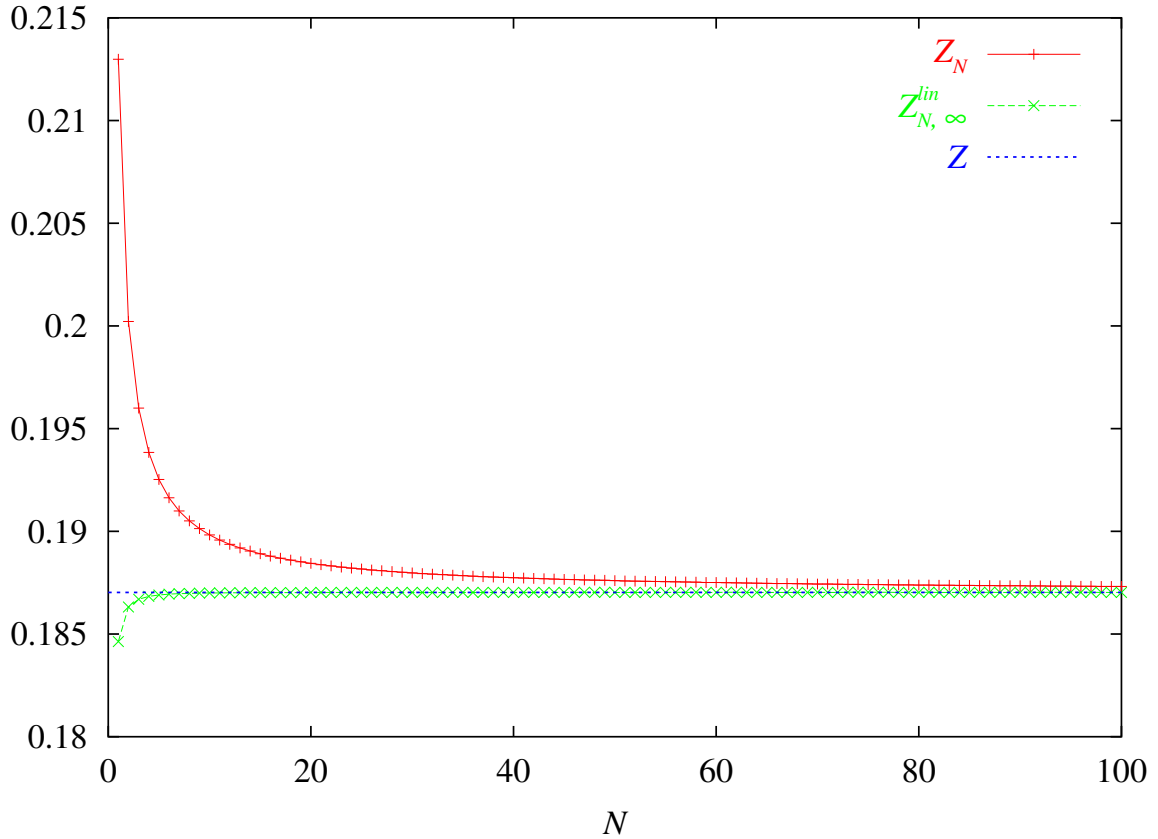
Ako sada iskoristimo limes  $s \rightarrow \infty$ , dobićemo kontinuum limes generišućeg funkcionala u linearizovanom Gausovom polovljenju:

$$2Z_{N,\infty}^{lin} - Z_{N,\infty}^{lin} = Z_{N,\infty}^{lin} = Z + o(N^{-2}). \quad (4.14)$$

Dakle, linearizacijom smo postigli da se linearni član po  $1/N$ , koji je prisutan u originalnoj aproksimaciji, izgubi, što značajno ubrzava algoritam<sup>1</sup>, a u analitičkom pristupu daje bolju aproksimaciju traženih vrednosti generišućeg funkcionala. Pri tome, dejstvo teorije u kontinuum limesu je jednako jednostavno kao i dejstvo polazne teorije. Prisetimo i da je dobijeno dejstvo, definisano funkcijama  $G_\infty^{lin}$  i  $V_\infty^{lin}$ , mnogo jednostavnije od izraza koji se dobijaju primenom originalnih rekurzivnih formula.

<sup>1</sup>Linearizacija ima još jednu prednost. Kako se prava vrednost generišućeg funkcionala dobija kao slobodan član polinoma po  $1/N$  nakon fitovanja na dobijene vrednosti  $Z_N$ , greška slobodnog člana je manja ukoliko imamo analitičku informaciju da ne postoji član linearan po  $1/N$ .

Grafici na slikama 4.5 i 4.6 ilustruju važnje osnovne osobine kontinuum limesa na primeru  $\phi^4$  teorije. Na slici 4.5 vidimo tipičnu zavisnost  $Z_{N,\infty}^{lin}$  od broja podeonih tačaka  $N$ . Primetimo da ova kriva mnogo brže teži asimptotskom rezultatu koji se dobija u limesu  $N \rightarrow \infty$  nego originalna kriva, koja je takođe prikazana na slici.

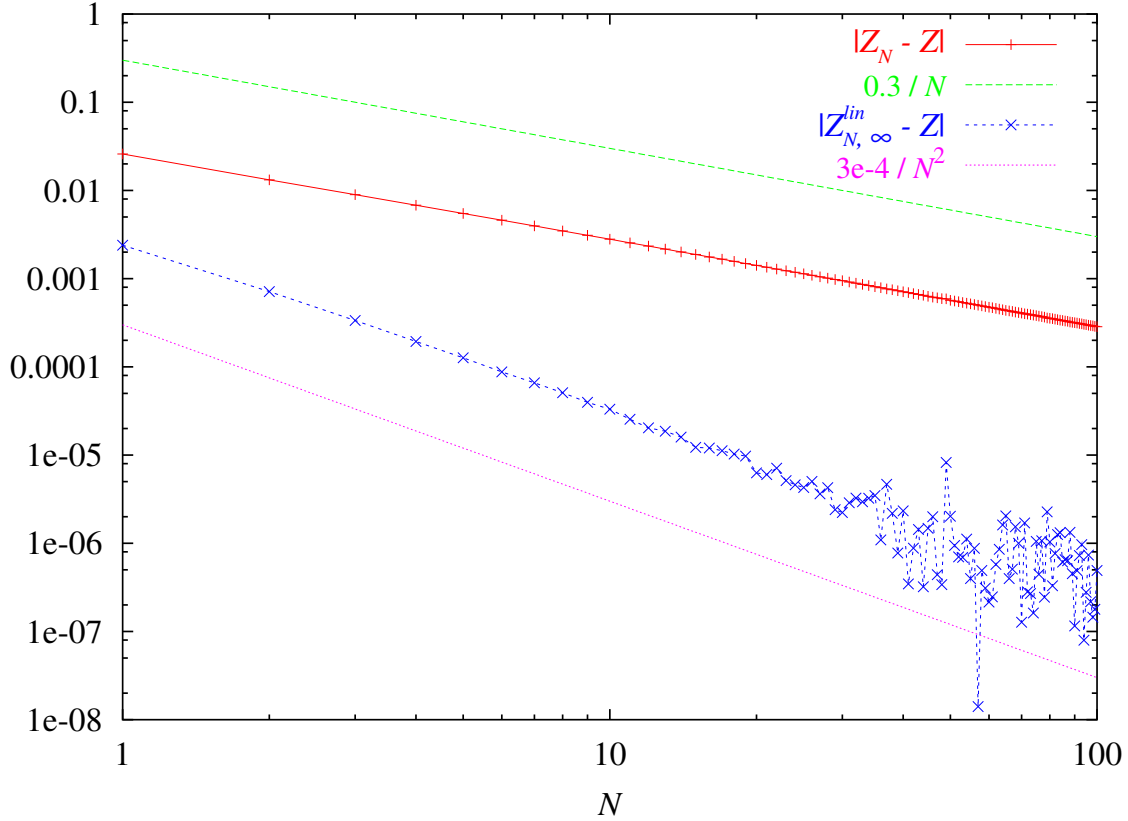


Slika 4.5: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,\infty}^{lin}$  dobijene na osnovu kontinuum limesa linearizovane rekursivne formule i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.1870291(4)$ , a  $Z = 0.1870294(3)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekursivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

Razlog za to je, naravno, činjenica da u razvoju  $Z_{N,\infty}^{lin}$  po  $1/N$  nema linearnog člana, kao što smo pokazali. Ovo se jasno vidi na slici 4.6, na kojoj su prikazane apsolutne razlike ocena generišućeg funkcionala i asimptotske vrednosti  $|Z_N - Z|$  i  $|Z_{N,\infty}^{lin} - Z|$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Kako je u pitanju log-log grafik, vidimo da dominantan doprinos krivoj  $|Z_N - Z|$  daje član proporcionalan sa  $1/N$ , dok kriva  $|Z_{N,\infty}^{lin} - Z|$  ima dominantan član reda  $1/N^2$ .

Primetimo da grafici na slici 4.6 postaju izlomljeni kada razlike  $|Z_N - Z|$  i  $|Z_{N,\infty}^{lin} - Z|$  dostignu vrednosti oko  $10^{-6}$ . Ovo je zapravo Monte Karlo statistička greška obe veličine, pa je takvo ponašanje očekivano. Na grafiku su prikazane i pogodne krive  $0.3/N$  i  $3 \cdot 10^{-4}/N^2$ , kako bi se lakše videli dominantni članovi u razvoju prikazanih krivih po  $1/N$ . U Dodatku C dati su dodatni grafici za različite vrednosti parametara proučavane teorije koji opravdavaju izvedene zaključke.

Vrednosti konstanti  $B'_s$  iz jednačine (4.9), dobijene fitovanjem na numeričke rezultate prikazane na graficima u prethodnom odeljku, slabo zavise od  $s$  i u kontinuum limesu  $s \rightarrow \infty$



Slika 4.6: Apsolutne vrednosti razlika ocena generišućeg funkcionala  $|Z_N - Z|$  i  $|Z_{N,\infty}^{lin} - Z|$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Na grafiku su date i pogodne krive  $0.3/N$  i  $3 \cdot 10^{-4}/N^2$ , kako bi se lakše videlo da prva zavisnost ima dominantan član reda  $1/N$ , a druga reda  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazano važenje relacija (2.8) i (4.14). Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

brzo konvergiraju vrednosti  $B'_\infty$ . Koristeći ovu jednačinu, u kontinuum limesu dobijamo i

$$\begin{aligned} Z_{2N,\infty}^{lin} - Z_{N,\infty}^{lin} &= \frac{B'_\infty}{N^2} + o(N^{-3}), \\ Z_{4N,\infty}^{lin} - Z_{2N,\infty}^{lin} &= \frac{B'_\infty}{4N^2} + o(N^{-3}), \\ &\vdots \end{aligned}$$

Sabiranjem ovih izraza dobijamo još jednu važnu osobinu kontinuum limesa

$$-Z_{N,\infty}^{lin} + Z'_{\infty,\infty} = -Z_{N,\infty}^{lin} + Z = \frac{B'_\infty}{N^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{2k}} + o(N^{-3}) = \frac{4}{3} \frac{B'_\infty}{N^2} + o(N^{-3}),$$

odnosno, u konačnom obliku,

$$Z = Z_{N,\infty}^{lin} + \frac{4}{3} \frac{B'_\infty}{N^2} + o(N^{-3}). \quad (4.15)$$

Ovaj izraz nam omogućava da vrednost generišućeg funkcionala izračunamo na veoma jednostavan način: ako nacrtamo zavisnost veličine  $Z_{2N,s}^{lin} - Z_{N,s+1}^{lin}$  u funkciji od  $1/N$ , dominantan član u razvoju po  $1/N$  biće  $B'_\infty/N^2$  i fitovanjem lako možemo da odredimo

vrednost koeficijenta  $B'_\infty$ . Sada korišćenjem formule (4.15) možemo da izračunamo vrednost generišućeg funkcionala  $Z$  sa tačnošću do  $1/N^3$ . Za dovoljno veliku vrednost  $N$  ova popravka postaje zanemarljiva.



## 5

# Aproksimativna algebarska formula

Rekurzivne formule koje smo izveli u prethodnim poglavljima omogućavaju nam da efikasno numerički računamo generišući funkcional i očekivane vrednosti. Međutim, moguće je dati i analitičku formulu za generišući funkcional u aproksimaciji u kojoj je broj podeonih tačaka intervala vremenske evolucije jednak nula, odnosno  $N = 1$ . U ovom slučaju u izrazu kojim se definiše funkcionalni integral nema integrala, pa se zbog toga dobija samo algebarska formula. Kada bi ovu ideju primenili na definicionu formulu za generišući funkcional i aproksimirali ga sa  $Z_{1,0} = Z_1[G, V]$ , jasno je da ne bismo dobili dobre rezultate. Ovaj pristup je ekvivalentan pristupu u kojem se očekivane vrednosti polja aproksimiraju sa

$$\langle q(t) \rangle = \frac{q(0) + q(T)}{2} = \frac{\alpha + \beta}{2}.$$

Na ovaj način je dinamika potpuno zanemarena i sve zavisi samo od početnih uslova. Pošto želimo da u konačne rezultate uključimo i uticaj dinamike sistema, iskoristićemo izvedene rekurzivne formule. Ukoliko u jednačinu (3.14) uvrstimo vrednost  $N = 1$ , dobijamo sledeću hijerarhiju izraza za generišući funkcional:

$$Z_{2^s}[G_s^{(0)}, V_s^{(0)}] = Z_{2^{s-1}}[G_s^{(1)}, V_s^{(1)}] = \dots = Z_2[G_s^{(s-1)}, V_s^{(s-1)}] = Z_1[G_s^{(s)}, V_s^{(s)}].$$

Na osnovu ove hijerarhije, generišući funkcional možemo da aproksimiramo poslednjim izrazom u nizu,  $Z_{1,s} = Z_1[G_s^{(s)}, V_s^{(s)}]$ . Ovaj izraz u sebi ne sadrži integrale, dakle u pitanju je analitička algebarska aproksimativna formula. Sa druge strane,  $Z_{1,s}$  je (do na primenjeno  $s$ -tostruko Gausovo polovljenje) zapravo  $Z_{2^s}[G, V]$ , pa ova formula u sebe uključuje dinamiku razmatrane teorije. Na ovaj način smo dobili algebarsku aproksimativnu formulu za generišući funkcional,

$$Z_{1,s} = \sqrt{\frac{G_s^{(s)} \left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)}{2\pi T}} \exp \left\{ -\frac{(\beta - \alpha)^2}{2T} G_s^{(s)} \left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) - TV_s^{(s)} \left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \right\}, \quad (5.1)$$

zasnovanu na primeni originalne rekurzivne formule. Za multi iterat ( $s = 0$ ) dobijamo gore pomenutu aproksimaciju koja uzima u obzir samo početne uslove. Jasno je da će kvalitet ove aproksimacije zavistiti od broja  $s$ , pri čemu će dobijeni rezultati biti bolji što je broj  $s$  veći. Najbolje bi bilo kada bismo koristili limes  $s \rightarrow \infty$  u gornjoj formuli

$$Z_{1,\infty} = \lim_{s \rightarrow \infty} Z_1[G_s^{(s)}, V_s^{(s)}],$$

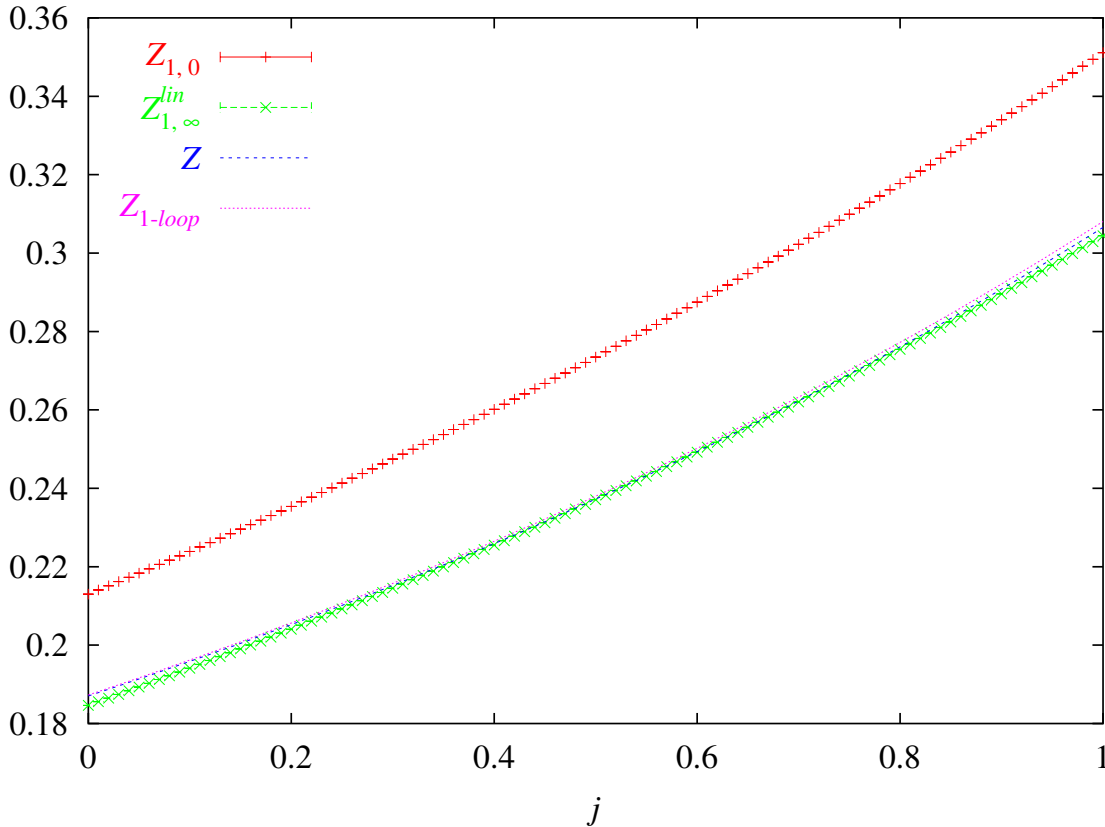
ali, kao što smo već istakli, iterativni izrazi za funkcije  $G$  i  $V$  već posle nekoliko koraka postaju suviše komplikovani za praktičnu upotrebu.

Kao što smo videli u četvrtom poglavlju, linearizacija rekurzivne formule omogućila nam je da egzaktno nađemo ne samo iterativne izraze za efektivno dejstvo u proizvoljnom iterativnom koraku, već i da egzaktno izračunamo i traženi kontinuum limes  $s \rightarrow \infty$ . Sa druge strane, primena linearizacije uvodi grešku koja je istog reda veličine kao i greška samog Gausovog polovljenja, dakle proporcionalna je sa  $1/N^2$ . Prema tome, najbolja aproksimativna algebarska formula za generišući funkcional data je sa  $Z_{1,\infty}^{lin} = Z_1[G_\infty^{lin}, V_\infty^{lin}]$ , ili eksplicitno

$$Z_{1,\infty}^{lin} = \sqrt{\frac{G_\infty^{lin} \left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)}{2\pi T}} \exp \left\{ -\frac{(\beta-\alpha)^2}{2T} G_\infty^{lin} \left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right) - TV_\infty^{lin} \left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right) \right\}, \quad (5.2)$$

i zasniva se na primeni kontinuum limesa linearizovane rekurzivne formule.  $G_\infty^{lin}$  i  $V_\infty^{lin}$  su veoma jednostavne funkcije od  $G$  i  $V$  i date su izrazima (4.12) i (4.13).

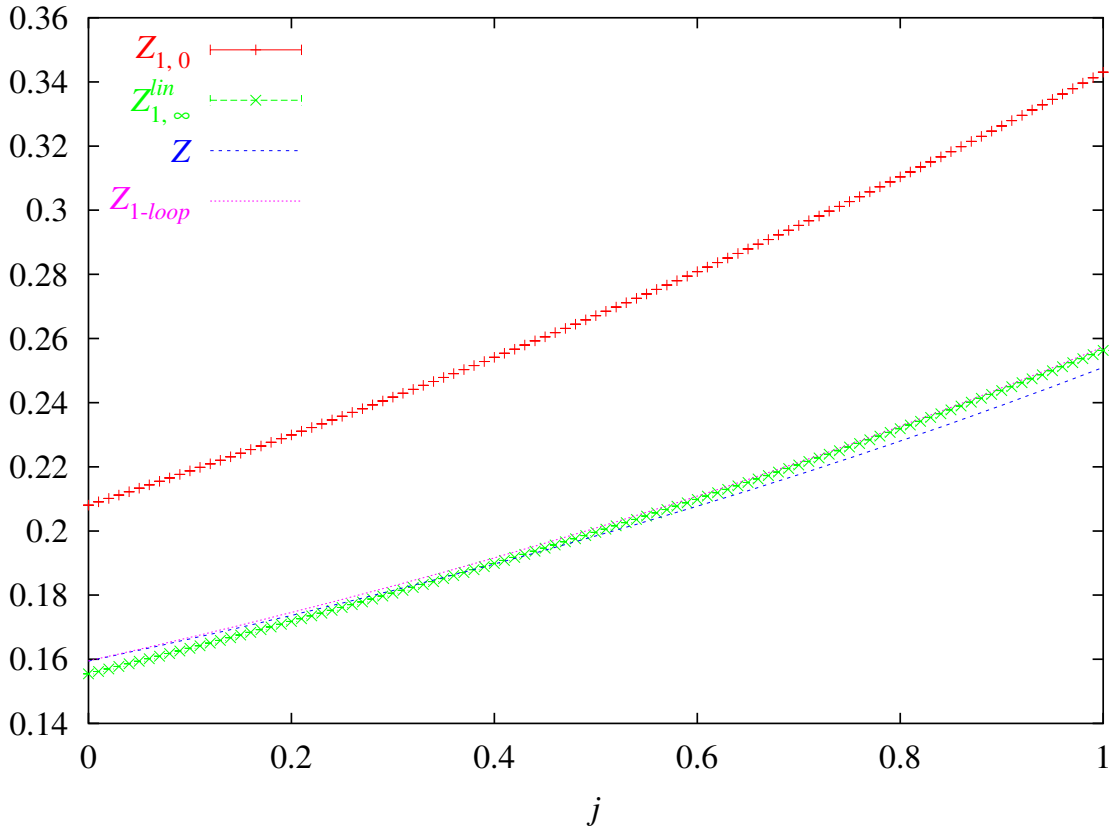
Kvalitet ove aproksimacije svakako je bolji od kvaliteta aproksimacije koja se dobija korišćenjem originalne aproksimativne formule. Na slici 5.1 prikazana je zavisnost aproksimativnih vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{1,0}$  i  $Z_{1,\infty}^{lin}$  od spoljašnje struje  $j$  za razmatranu teoriju (anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom). Date su i egzaktne vrednosti generišućeg funkcionala, a radi poređenja prikazan je i rezultat dobijen u semiklasičnom razvoju do na jednu petlju.



Slika 5.1: Ocene generišućeg funkcionala  $Z_{1,0} = Z_1$  (originalna rekurzivna formula),  $Z_{1,\infty}^{lin}$  (kontinuum limes linearizovane rekurzivne formule), generišući funkcional  $Z$  (egzaktne vrednosti dobijene fitovanjem polinoma po  $1/N$  na odgovarajuću  $Z_N$  zavisnost) i semiklasična vrednost za generišući funkcional  $Z_{1-loop}$  do na jednu petlju u zavisnosti od spoljašnje struje  $j$ . Parametar teorije je  $g = 1$ , a posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ . Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktne vrednosti generišućeg funkcionala je  $N_{MC} = 10^7$ .



Sa grafika na ovoj slici vidimo da je aproksimativna algebarska formula (5.2) dobijena u kontinuum limesu linearizovane rekurzije mnogo bolja od formule koja se dobija korišćenjem originalne rekurzije. Za izbor parametara teorije sa slike 5.1, aproksimativna formula (5.2) daje rezultate koji su istog kvaliteta kao i semiklasični rezultati. Naravno, za veće vrednosti konstante interakcije  $g$ , a pogotovo za veće vrednosti vremena evolucije  $T$  očekujemo da se kvalitet ove nove jednostavne algebarske aproksimacije pogorša (videti Dodatak C). Dobijena aproksimativna formula ima nekoliko prednosti zbog kojih njena primena može biti opravdana u nekim situacijama. Osnovna prednost je da je reč o algebarskoj formuli, koja se lako može koristiti u analitičkom računu.

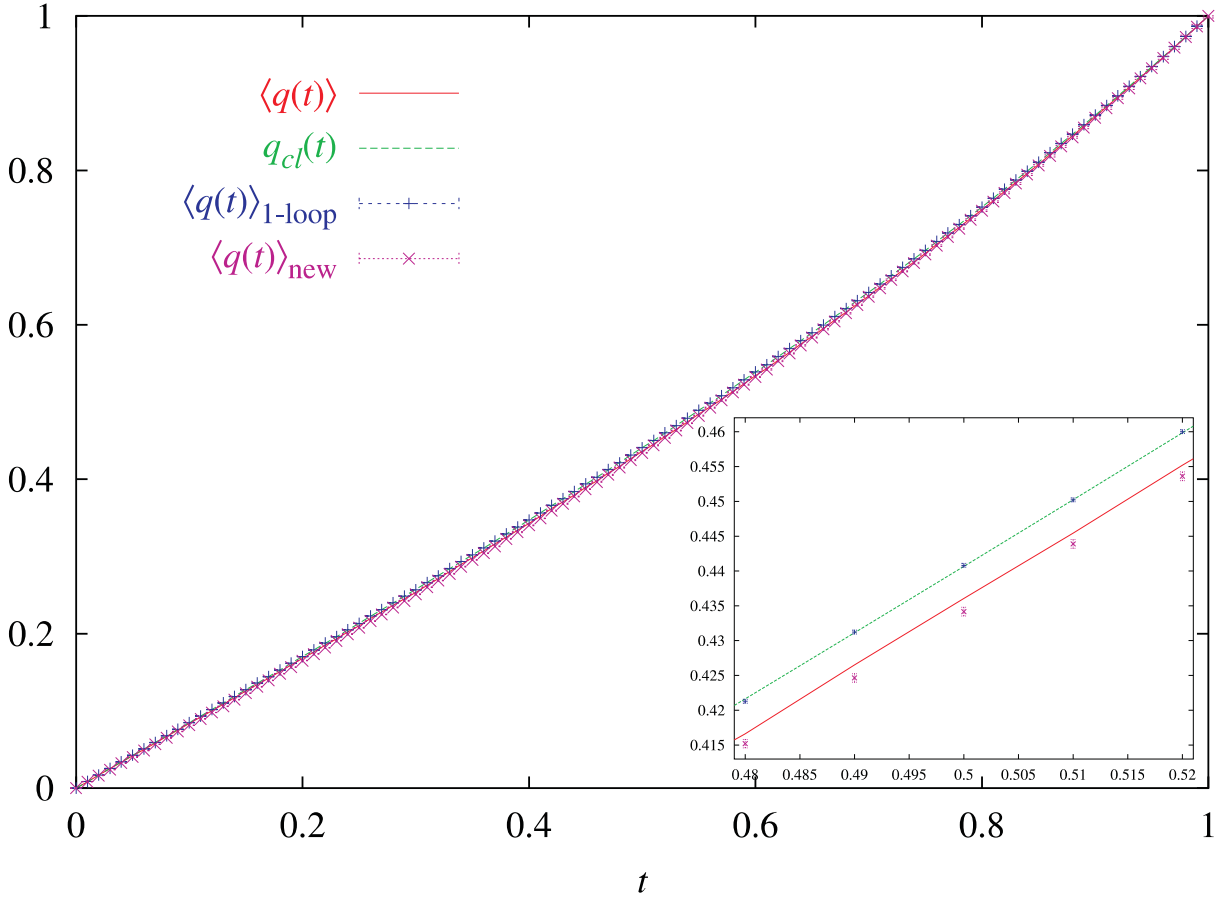


Slika 5.2: Ocene generišućeg funkcionala  $Z_{1,0} = Z_1$  (originalna rekurzivna formula),  $Z_{1,\infty}^{lin}$  (kontinuum limes linearizovane rekurzivne formule), generišući funkcional  $Z$  (egzaktna vrednost dobijena fitovanjem polinoma po  $1/N$  na odgovarajuću  $Z_N$  zavisnost) i semiklasična vrednost za generišući funkcional  $Z_{1-loop}$  do na jednu petlju u zavisnosti od spoljašnje struje  $j$ . Parametar teorije je  $g = 10$ , a posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ . Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktnih vrednosti generišućeg funkcionala je  $N_{MC} = 10^7$ .

Svaka analitička formula predstavlja korak napred u razvoju formalizma, čak i kada je njena primenljivost ograničena na neki sektor teorije. Međutim, prava upotrebna vrednost izvedene formule za generišući funkcional (5.2) se dobija primenom na računanje vakuumskih očekivanih vrednosti. Na primer, očekivanu vrednost polja  $\langle q(t) \rangle$  možemo da napišemo u sledećem obliku:

$$\langle q(t) \rangle_G = \frac{1}{Z_{1,\infty}^{lin}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{G_{\infty}^{lin} \left( \frac{\alpha+x}{2} \right)}{2\pi t}} \exp \left\{ -\frac{(x-\alpha)^2}{2t} G_{\infty}^{lin} \left( \frac{\alpha+x}{2} \right) - t V_{\infty}^{lin} \left( \frac{\alpha+x}{2} \right) \right\} \cdot x \cdot \sqrt{\frac{G_{\infty}^{lin} \left( \frac{x+\beta}{2} \right)}{2\pi(T-t)}} \exp \left\{ -\frac{(\beta-x)^2}{2(T-t)} G_{\infty}^{lin} \left( \frac{x+\beta}{2} \right) - (T-t) V_{\infty}^{lin} \left( \frac{x+\beta}{2} \right) \right\}, \quad (5.3)$$

gde smo propagacije na intervalima  $(0, t)$  i  $(t, T)$ , kao i normalizacioni faktor aproksimirali pomoću formule (5.2). Gornji izraz se lako generalizuje na računanje drugih vakuumskih očekivanih vrednosti:  $\langle q(t_1) \dots q(t_n) \rangle$  se tako aproksimira odgovarajućim  $n$ -tostrukim integralom. Primetimo da formulu (5.3), pored numeričkog izračunavanja integrala koji se u njoj pojavljuje, možemo da iskoristimo i u analitičkom pristupu. Naime, podintegralnu funkciju možemo da razvijemo u Tejlorov red do kvadratnih članova i na taj način ćemo dobiti Gausov integral koji znamo da izračunamo.

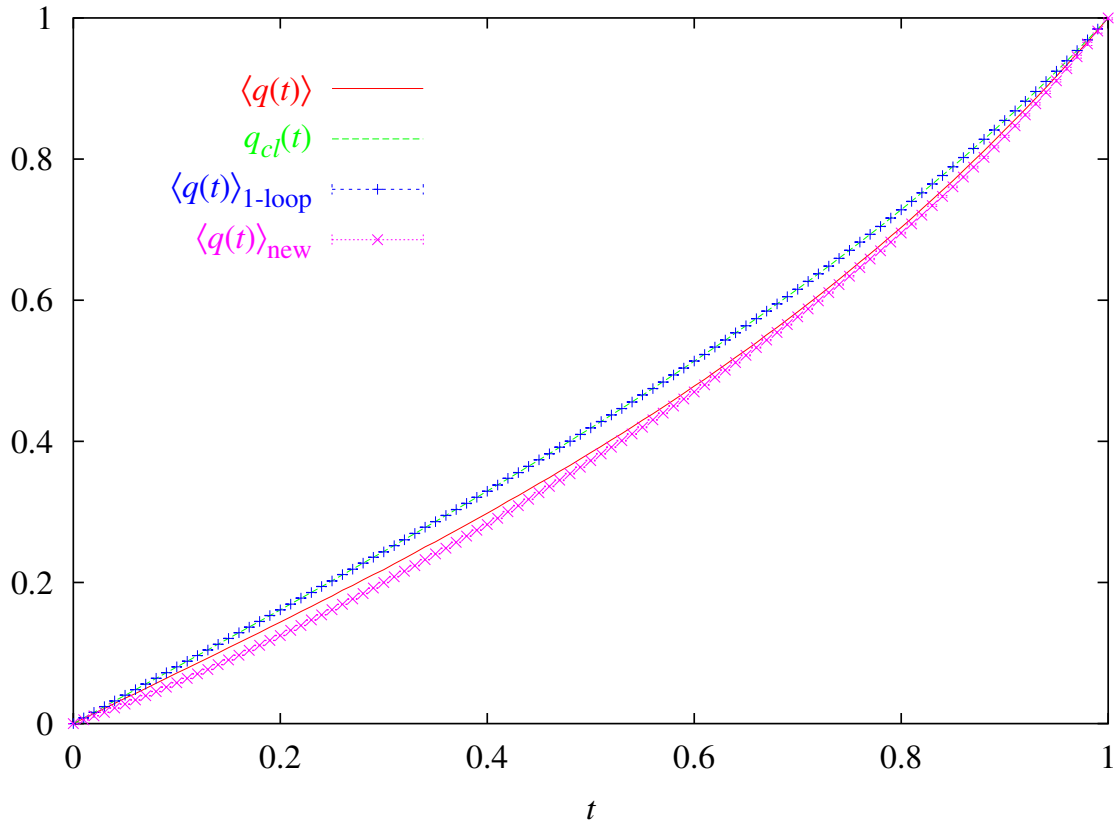


Slika 5.3: Očekivana vrednost  $\langle q(t) \rangle$  računata egzaktno, pomoću semiklasične aproksimacije do na jednu petlju i pomoću nove aproksimativne formule. Kompletnosti radi, prikazano je i odgovarajuće klasično rešenje. Na umanjenom grafiku se vidi detalj gornje slike. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ ,  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

Na slici 5.3 je prikazana očekivana vrednost polja  $\langle q(t) \rangle$  za anharmonijski oscilator računata egzaktno, semiklasično i pomoću nove algebarske formule za koeficijent anharmoniciteta  $g = 1$ . Umanjena slika pokazuje koliko je nova aproksimacija zapravo bolja od semiklasične. Slika 5.4 prikazuje istu situaciju, ali za deset put veći anharmonicitet. Nova aproksimacija je i dalje bolja od semiklasične.

Jednostavan analitički argument pokazuje da je moguće definisati karakterističnu veličinu anharmoniciteta  $g_c$  takvu da za  $g < g_c$  nova aproksimativna formula daje bolje rezultate od semiklasične aproksimacije. Naime, jasno je da će nova aproksimativna formula davati bolje rezultate kada kinetički član dominira nad kvartičnim članom u potencijalu, odnosno za  $\frac{1}{2} q^2 \gtrsim \frac{1}{4!} g q^4$ , pa dobijamo da je  $g_c \sim 1/Q^2$ , gde je  $Q$  karakteristična dužina za dati sistem, npr. apsolutna vrednost polja na kraju evolucije,  $Q = |q(T)| = |\beta|$ , ili razlika polja  $Q = |q(T) - q(0)| = |\beta - \alpha|$ . Numerički smo dobili da je koeficijent proporcionalnosti u ovoj

relaciji oko 100, što znači da za slučaj  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1$ , tj.  $Q \approx 1$ , koji je na slikama prikazan, nova aproksimacija daje mnogo bolje rezultate od semiklasične sve do  $g \sim 100$ , dakle veoma duboko u nelinearnom režimu teorije. Primena i ispitivanje ove aproksimativne formule biće predmet daljeg rada autora.



Slika 5.4: Očekivana vrednost  $\langle q(t) \rangle$  računata egzaktno, pomoću semiklasične aproksimacije do na jednu petlju i pomoću nove aproksimativne formule. Kompletnosti radi, prikazano je i odgovarajuće klasično rešenje. Na umanjenom grafiku se vidi detalj gornje slike. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ ,  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



# 6

## Zaključak

U ovom radu predstavljen je novi metod za računanje funkcionalnih integrala u opštoj kvantno–mehaničkoj teoriji (kvantna teorija polja u  $d = 1$  dimenzija). Izvedena je rekurzivna formula koja je omogućila da analitički bolje razumemo suštinu funkcionalnog formalizma. Na osnovu ovog dubljeg razumevanja analitičkih osobina funkcionalnih integrala izvedena je i aproksimativna analitička formula za generišući funkcional. U numeričkom smislu novi metod daje suštinsko ubrzanje Monte Karlo algoritma za računanje funkcionalnih integrala. Pri tome je numerička greška metoda proporcionalna sa  $1/N^2$ , gde je  $N$  broj podeonih tačaka u diskretizaciji, dok je kod standardnog algoritma ova greška proporcionalna sa  $1/N$ .

Zbog kompletnosti, u ovom radu je prvo na standardan način uveden funkcionalni formalizam u kvantnoj mehanici i naznačene su generalizacije koje se čine pri prelasku na kvantnu teoriju polja u  $d \geq 2$  dimenzija. Zatim je dat kratak pregled opštih analitičkih aproksimativnih metoda, čiji su rezultati upoređeni sa rezultatima koje daje naša rekurzivna formula. U radu je dat i uvod u primenu Monte Karlo metoda za računanje funkcionalnih integrala (detaljan pregled Monte Karlo metoda nalazi se u Dodatku A).

Nakon toga je izložena nova aproksimativna šema koja predstavlja centralni deo rezultata izloženih u ovoj tezi. Nova aproksimativna šema se sastoji u rekurzivnom povezivanju funkcionalnog integrala u diskretizaciji sa  $2N$  podeonih tačaka sa funkcionalnim integralom u diskretizaciji sa  $N$  podeonih tačaka. Aproksimacija koja omogućava izvođenje rekurzivne formule se sastoji u razvoju dejstva u red do kvadratnih članova po razlikama  $q_{n+1} - q_n$ . Ovim se integrali po neparnim podeonim tačkama svode na Gausove. Iz ovog razloga smo navedenu aproksimaciju nazvali Gausovo polovljenje. Nakon primene ove aproksimacije, novodobijeni funkcionalni integral u diskretizaciji sa  $N$  koraka računa se za novu, efektivnu, teoriju, čije je dejstvo dato izvedenom rekurzivnom formulom. Ova formula u analitičkom smislu pruža dublje razumevanje svojstava funkcionalnog integrala, na osnovu povezivanja niza ekvivalentnih teorija u okviru klasa koje se dobijaju iterativnom primenom rekurzivne formule. U numeričkom smislu izvedena rekurzivna formula pruža nam efikasan metod za računanje funkcionalnih integrala, pošto iterativnom primenom formule efektivno dobijamo bolju diskretizaciju i samim tim preciznije numeričke rezultate koji brže konvergiraju pravom rezultatu. Pored rekurzivne formule za generišući funkcional, na sličan način je izvedena je i analogna rekurzivna formula za očekivane vrednosti.

Apriorno opravdanje za Gausovo polovljenje proističe iz činjenice da je  $(q_{n+1} - q_n)^2 \sim \epsilon$ , gde je  $\epsilon$  vremenski korak u diskretizovanoj teoriji. Ovakvo ponašanje (za malo  $\epsilon$ ) je opšta karakteristika svakog kvantnog procesa (u euklidskoj teoriji koju zapravo razmatramo, to je karakteristika difuzionog procesa ili, ekvivalentno, slučajnog hoda). Opisanu proceduru Gausovog polovljenja i posledice izvedenih rekurzivnih relacija smo detaljno ispitivali na

primeru anharmonijskog oscilatora sa kvartičnim anharmonicitetom ( $\phi^4$  teorija). Za ove potrebe razvijen je poseban Monte Karlo kod (izložen i detaljnije diskutovan u Dodatku B) i u simulacijama za različite vrednosti parametara razmatrane teorije dobijeni su rezultati koji su zatim detaljno analizirani. Pokazano je da su dobijeni rezultati u skladu sa izvedenim formulama i da je greška koja se unosi primenom Gausovog polovljenja reda  $1/N^2$ , gde je  $N$  broj vremenskih koraka na koji je podeljen interval evolucije  $T$  za koji se računa generišući funkcional. Takođe je pokazano da je efektivno ubrzanje koje daje primena rekurzivne formule u numeričkim proračunima  $4^k$ , gde je  $k$  broj primenjenih iterativnih koraka. Ovaj rezultat favorizuje primenu rekurzivne formule u odnosu na standardan metod numeričkog računanja funkcionalnog integrala po definicionoj formuli.

Kako je iterativna primena izvedene rekurzivne formule u praksi otežana eksponencijalnim povećanjem složenosti dobijenih izraza za efektivna dejstva, ovaj problem je rešen linearizacijom rekurzivne formule. Ukoliko se u formulama za efektivno dejstvo zadržimo samo na linearnim popravkama po dužini vremenskog koraka  $\epsilon$ , tada će dobijeni izrazi biti mnogo jednostavniji. Nova, linearizovana rekurzivna formula je egzaktno rešena na primeru anharmonijskog oscilatora ( $\phi^4$  teorije), odnosno nađeno je efektivno dejstvo posle proizvoljno mnogo iterativnih koraka. Treba primetiti da je procedura linearizacije rekurzivne formule (za malu vrednost vremenskog koraka  $\epsilon$ ) usaglašena sa osnovnom aproksimacijom na kojoj je zasnovana opšta metoda Gausovog polovljenja. Analizom rezultata numeričkih simulacija pokazano je da je primena linearizovane rekurzivne formule potpuno opravdana, kao i da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ , istog reda kao i korišćenje Gausove aproksimacije.

Egzaktno rešenje linearizovane rekurzivne formula omogućava i da nađemo efektivno dejstvo koje odgovara kontinuum limesu – limesu koji se dobija kada broj iterativnih koraka teži beskonačnosti. Dat je analitički argument na osnovu kojeg možemo da očekujemo da u ovom slučaju tipičan polinomijalni razvoj po  $1/N$  svih dobijenih rezultata ne sadrži lineraran član, odnosno da ovaj razvoj počinje od kvadratnog člana. Ovo je verifikovano analizom numeričkih rezultata. Na osnovu ovog rezultata, jasno je da je konvergencija mnogo brža primenom ovog efektivnog dejstva, pa smo zaključili da je najbolji metod za računanje funkcionalnih integrala upravo primena kontinuum limesa egzaktnog rešenja linearizovane rekurzivne formule.

Na kraju je razmatrana i aproksimativna analitička algebarska formula za generišući funkcional. Ukoliko iterativno primenjujemo izvedene rekurzivne formule na dejstvo teorije sve dok se diskretizacija vremenskog intervala ne svede na samo jedan korak, na osnovu definicije funkcionalnog integrala dobijamo algebarki izraz, bez preostalih integrala u sebi. Originalna rekurzivna formula ovde ne predstavlja dobar izbor, pošto je praktično sa njom moguće izvesti samo nekoliko iterativnih koraka. Linearizovana rekurzija omogućava primenu proizvoljnog broja iteracija, a najbolji izbor je kontinuum limesa linearizovane rekurzije. Dobijeni rezultati upoređeni su sa egzaktnim vrednostima generišućeg funkcionala, kao i sa semiklasičnim razvojem do prvog netrivialnog člana (do na jednu petlju). Za male vrednosti konstante interakcije u proučavanoj teoriji, kao i za male vrednosti vremena evolucije  $T$ , izvedena jednostavna algebarska formula daje rezultate istog kvaliteta kao i semiklasičan razvoj, dok sa porastom konstante interakcije i naročito vremena evolucije kvalitet algebarske formule postaje slabiji. Prava upotrebna vrednost ove jednostavne algebarske formule za generišući funkcional se može videti tek kod računanja očekivanih vrednosti, kao što su  $\langle q(t) \rangle$  i  $\langle q(t)q(t') \rangle$ .

Ovo istraživanje biće nastavljeno primenom izvedenih rekurzivnih formula na kvantnu teoriju polja u dve i više dimenzija. Od posebnog interesa biće primena nove aproksimativne šeme na proučavanje tuneliranja (instantona) i solitona.

# Dodatak A

## Elementarni uvod u Monte Karlo metod

Sredinom XX veka razvijen je Monte Karlo metod, numerički metod koji je, zahvaljujući brzom razvoju računara, postao jedan od najmoćnijih i najvažnijih metoda za rešavanje komplikovanih matematičkih problema. Razvoj generatora slučajnih brojeva, koji je kulminirao u Metropolis algoritmu (ili, preciznije, u (MRT)<sup>2</sup> algoritmu [31]) omogućio je njegovu primenu u skoro svim oblastima fizike. Najjednostavnija definicija Monte Karlo metoda glasi: to je numerički metod za rešavanje matematičkih problema pomoću slučajnih brojeva. Formulacija kvantne mehanike i kvantne teorije polja preko funkcionalnog integrala spada u klasu tipičnih problema koje veoma uspešno rešava Monte Karlo metod. Naime, iz definicije funkcionalnog integrala date u Uvodu, jasno je da je za njegovo računanje potrebno rešavati višestruke određene integrale, a Monte Karlo metod dominira nad svim drugim metodima baš u tom slučaju. Pokazaćemo to pomoću jednostavnog argumenta. Osnova klasičnih numeričkih metoda računanja određenih integrala je u podeli domena integracije na  $N$  delova i aproksimiranju integrala sumom

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \sum_{n=1}^N f(x_n)\Delta x_n,$$

gde je  $\Delta x_n$  širina  $n$ -tog dela u datoj podeli domena integracije definisanoj podeonim tačkama  $x_n$ . Greška  $\Delta I$  koja se na ovaj način čini je proporcionalna tipičnoj vrednosti  $\Delta x_n$ , odnosno  $\Delta I \sim \Delta x_n \sim 1/N$ . Ako umesto vrednosti  $f(x_n)$  u gornjoj formuli koristimo bolje odabranu vrednost, možemo da postignemo da greška  $\Delta I$  bude proporcionalna sa  $1/N^3$  (trapezoidna formula), sa  $1/N^5$  (Simpsonova formula), ili sa  $1/N^7$  (Bodeova formula). Postoje i druge formule, ali svima njima je zajednička osobina da je greška koju činimo pri računanju integrala proporcionalna nekom stepenu tipične veličine koraka integracije,  $\Delta I \sim 1/N^a$ . Ovo važi kako za jednostruke, tako i za višestruke integrale. Sa druge strane, vreme izvršavanja algoritma  $T$  proporcionalno je sa brojem integracionih koraka, pa je za  $D$ -tostruki integral  $T \sim N^D$ . Odave sledi da je  $N \sim T^{1/D}$ , odnosno  $\Delta I \sim 1/N^a \sim 1/T^{a/D}$ . Pri računanju višestrukih integrala velike dimenzionalnosti važi  $a/D \ll 1$ , pa vreme izvršavanja algoritma koje je neophodno uložiti da bi se greška smanjila rapidno raste. Na primer, ukoliko smo izračunali integral sa procenjenom greškom  $\Delta I$  za vreme  $T$  i želimo da grešku smanjimo na  $\Delta I/2$ , tada je vreme potrebno za to  $2^{D/a}T$ , a kako je  $D/a \gg 1$ , vidimo da je za izvršavanje algoritma koji bi dao dvostruko manju grešku potrebno uložiti značajno duže vreme. Za razliku od ovoga, kod Monte Karlo metoda uvek važi  $\Delta I \sim 1/\sqrt{T}$ , pa za dvostruko smanje-

nje greške treba uložiti četiri puta više vremena, pri čemu to ne zavisi od dimenzionalnosti integrala. Kako je dimenzionalnost integrala kojima aproksimiramo funkcionalni integral veoma velika (tipično reda veličine  $10^2$  u našim simulacijama), jasno je da je Monte Karlo metod jedini primenljivi numerički metod u ovom slučaju.

Pre nego što pređemo na opis Monte Karlo metoda, definisaćemo nekoliko pojmova iz teorije verovatnoće i matematičke statistike, koji će nam biti neophodni.

**Diskretna slučajna promenljiva**  $\xi$  je veličina koja uzima vrednosti iz nekog diskretnog skupa  $\{x_i\}$  sa određenom verovatnoćom. Verovatnoću  $p_i$  da diskretna promenljiva  $\xi$  uzme vrednost  $x_i$  iz ovog skupa označavamo sa  $p_i = V(\xi = x_i)$ .

**Neprekidna slučajna promenljiva**  $\xi$  je veličina koja uzima vrednosti iz nekog intervala  $[\alpha, \beta] \subset \mathbb{R}$ . Zatvoreni interval može biti zamenjen otvorenim intervalom (ili intervalom sa jednom otvorenom, a drugom zatvorenom granicom), kao i unijom ovakvih intervala. Zbog jednostavnosti, podrazumevaćemo da je  $\xi \in [\alpha, \beta]$ .

**Raspodela (gustina verovatnoće)**  $p$  neprekidne slučajne promenljive  $\xi$  je funkcija definisana sa  $p(x)dx = V\{\xi \in (x, x + dx)\}$ , gde je sa  $V\{\xi \in (x, x + dx)\}$  označena verovatnoća da slučajna promenljiva uzme vrednost iz intervala  $(x, x + dx)$ . Gustina verovatnoće može da se definiše i za diskretne slučajne promenljive,  $p(x) = \sum_i p_i \delta(x - x_i)$ . Mi ćemo koristiti samo neprekidne slučajne promenljive. Najvažnije osobine svake raspodele su date sa  $(\forall x) p(x) > 0$  i  $\int_{\alpha}^{\beta} p(x)dx = 1$ . Prva od ovih osobina je posledica pozitivnosti verovatnoće, a druga je posledica činjenice da slučajna promenljiva mora da uzme neku vrednost iz intervala  $[\alpha, \beta]$ , u skladu sa definicijom. Navešćemo dva primera raspodele koje ćemo kasnije koristiti.

**Uniformna** raspodela na intervalu  $[\alpha, \beta]$  data je sa  $u(x) = 1/(\beta - \alpha)$ . Slučajna promenljiva čija je raspodela uniformna sa istom verovatnoćom može da uzme bilo koju vrednost iz intervala  $[\alpha, \beta]$ .

**Gausova (normalna)** raspodela, definisana na celom skupu realnih brojeva  $\mathbb{R}$ , data je dvoparametarskom funkcijom

$$\mathcal{N}(x; x_0, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (\text{A.1})$$

U tački  $x_0$  Gausova raspodela ima maksimum i simetrična je u odnosu na ovu tačku, pa se ona zove centar raspodele. Veličina  $\sigma^2$  se zove varijansa, a  $\sigma$  je standardna devijacija ili širina raspodele. Ona ima korisnu interpretaciju: verovatnoća da slučajna promenljiva  $\xi$  uzme vrednost iz intervala  $[x_0 - \sigma, x_0 + \sigma]$  je 68.3% (ovaj interval se obično zove  $1-\sigma$  interval), za  $2-\sigma$  interval  $[x_0 - 2\sigma, x_0 + 2\sigma]$  verovatnoća je 95.4%, za  $3-\sigma$  interval verovatnoća je 99.7% itd. Ove verovatnoće se dobijaju integracijom Gausove raspodele po odgovarajućem intervalu.

**Kumulativna raspodela**  $C$  slučajne promenljive  $\xi$  predstavlja verovatnoću da slučajna promenljiva uzme vrednost koja je manja ili jednaka unapred zadatoj vrednosti  $x$  iz intervala  $[\alpha, \beta]$ , odnosno  $C(x) = V(\xi \leq x) = \int_{\alpha}^x p(x')dx'$ . Za uniformnu raspodelu kumulativna funkcija je linearna, dok je za Gausovu raspodelu kumulativna funkcija jedna od specijalnih funkcija (funkcija greške, "error function").

**Srednja vrednost** funkcije  $g$  u odnosu na raspodelu  $p$  je  $\langle g \rangle_p = \int_{\alpha}^{\beta} g(x)p(x)dx$ . Na primer, srednja vrednost  $\langle x \rangle_p$  slučajne promenljive  $\xi$  dobija se kada za funkciju  $g$  uvrstimo  $g(x) = x$ , i tada je  $\langle x \rangle_p = \int_{\alpha}^{\beta} x p(x)dx$ . Za Gausovu raspodelu (A.1) centar raspodele  $x_0$  je jednak srednjoj vrednosti slučajne promenljive  $x_0 = \langle x \rangle_{\mathcal{N}}$ , a varijansa je data sa  $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle_{\mathcal{N}} - \langle x \rangle_{\mathcal{N}}^2$ .



**Ocena srednje vrednosti**  $\Xi_N$  slučajne promenljive  $\xi$  definiše se kao aritmetička sredina  $\Xi_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i$  skupa  $N$  nezavisnih uzoraka slučajne promenljive  $\{\xi_i\}$ . Veličina  $\Xi_N$  je, za fiksiranu vrednost  $N$ , slučajna promenljiva koja uzima vrednosti  $X_N \in [\alpha, \beta]^1$ . Na osnovu zakona velikih brojeva sledi da je, u limesu velikog broja uzoraka  $N$ , ocena srednje vrednosti jednaka srednjoj vrednosti slučajne promenljive  $\xi$ ,  $\lim_{N \rightarrow \infty} \Xi_N = \langle x \rangle_p$ . Ovde je, kao i ranije, sa  $p$  označena raspodela slučajne promenljive  $\xi$ . Centralna granična teorema nam daje detaljnije informacije o asimptotskom ponašanju raspodele slučajne promenljive  $\Xi_N$ . Iz ove teoreme sledi da je raspodela  $P$  slučajne promenljive  $\Xi_N$  za velike vrednosti broja uzoraka  $N$  data Gausovom raspodelom,

$$P(X_N) \xrightarrow{N \gg 1} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_p^2/N}} \exp \left\{ -\frac{(X_N - \langle x \rangle_p)^2}{2\sigma_p^2/N} \right\} \equiv \mathcal{N} \left( X_N; \langle x \rangle_p, \frac{\sigma_p^2}{N} \right), \quad (\text{A.2})$$

gde je  $\sigma_p^2 = \langle x^2 \rangle_p - \langle x \rangle_p^2$ . Kako je varijansa  $\sigma_p^2$  određena samo raspodelom  $p$  slučajne promenljive  $\xi$ , jasno je da se sa povećanjem broja uzoraka  $N$  smanjuje širina  $\sigma_p/\sqrt{N}$  Gausove raspodele (A.2). U limesu  $N \rightarrow \infty$  gornja raspodela postaje  $\delta$ -funkcija centrirana na vrednosti  $x_0 = \langle x \rangle_p$ , kao što sledi iz zakona velikih brojeva.

Ukoliko na osnovu statističkog uzorka ocenjujemo vrednost neke veličine  $A$  (kao što, na primer, veličinom  $\Xi_N$  ocenjujemo srednju vrednost slučajne promenljive  $\xi$ ), jasno je da ocena ne mora da se poklapa sa pravom vrednošću veličine  $A$  (pretpostavljamo da je veličina  $A$  takva da je njena vrednost dobro definisana i da se ne menja tokom uzimanja uzoraka). Zbog toga je neophodno oceniti i grešku koju smo učinili prilikom ocenjivanja veličine  $A$ , odnosno oceniti interval u kome se prava vrednost veličine  $A$  nalazi. Kada je raspodela ocena koje za veličinu  $A$  dobijamo na osnovu različitih statističkih uzoraka jednaka Gausovoj raspodeli, tada postoji standardan način za ocenu greške sa jednostavnom interpretacijom. Za ocenu greške dobijene vrednosti uzimamo standardnu devijaciju  $\sigma$  Gausove raspodele ocena vrednosti veličine  $A$ . Na osnovu osobina Gausove raspodele možemo da damo interpretaciju ovakve ocene greške: prava vrednost veličine  $A$  nalazi se u  $1-\sigma$  intervalu oko ocenjene vrednosti sa verovatnoćom od 68.3%, u  $2-\sigma$  intervalu oko ocenjene vrednosti sa verovatnoćom od 95.4% itd. Naravno, ukoliko veličinu  $A$  ocenjujemo samo na osnovu jednog uzorka, tada ne možemo utvrditi da li ocene koje odgovaraju različitim uzorcima imaju Gausovu raspodelu, niti kolika je njena širina. Zbog toga se za ocenu uvek koristi ansambl različitih statističkih uzoraka, koji će nam dati skup ocena  $\{A_i\}$  vrednosti veličine  $A$ , po jednu za svaki uzorak iz ansambla. Čak i ako raspodela ovih ocena nije Gausova, ovaj problem možemo lako da rešimo tako što ćemo sve uzorke iz ansambla podeliti u grupe od po  $N$  uzoraka, a prethodno dobijeni skup ocena veličine  $A$  zamenićemo aritmetičkim sredinama ocena dobijenim iz pojedinih grupa uzoraka (dakle, imaćemo po jednu ocenu za svaku grupu uzoraka, jednaku aritmetičkoj vrednosti ocena koje se dobijaju na osnovu uzoraka iz grupe). Na ovaj način smo ocenjivanje veličine  $A$  zamenili ocenjivanjem srednje vrednosti veličine  $A$  na  $N$  uzoraka, a na osnovu centralne granične teoreme znamo da je odgovarajuća raspodela dobijenih ocena Gausova i da je data gornjom formulom (A.2). Zbog toga ćemo u daljem tekstu pretpostaviti da ocene  $\{A_i\}$  vrednosti veličine  $A$  imaju Gausovu raspodelu.

Pošto smo principijelno rešili problem ocene greške, ostaje nam još praktičan problem: iako znamo da dobijene ocene vrednosti veličine  $A$  imaju Gausovu raspodelu (A.2), kako

<sup>1</sup>Ukoliko slučajna promenljiva  $\xi$  uzima vrednosti iz unije intervala, situacija je nešto složenija: u tom slučaju promenljiva  $\Xi_N$  uzima vrednosti iz nadintervala čija je donja (gornja) granica jednaka najnižoj (najvišoj) od donjih (gornjih) granica svih intervala koji čine uniju.

izračunati parametre te raspodele? Jasno je da na osnovu statističkih uzoraka koji su nam poslužili da ocenimo vrednost veličine  $A$  moramo da ocenimo i parametre tražene Gausove raspodele. Očigledno je da centar raspodele možemo da ocenimo aritmetičkom sredinom svih dobijenih ocena  $\{A_i\}$  za veličinu  $A$ , kao što smo ranije pokazali na osnovu zakona velikih brojeva i, nezavisno, na osnovu centralne granične teoreme. Na prvi pogled, pogodna ocena varijanse raspodele veličine  $A$  je data sa

$$\tilde{\sigma}_A^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \right)^2,$$

ali se može pokazati da ova ocena nije nepristrasna (njena srednja vrednost u limesu velikog broja uzoraka nije jednaka pravoj vrednosti veličine koja se ocenjuje,  $\sigma_A^2$ ). Detaljnija analiza [22, 32] pokazuje da je bolja, nepristrasna ocena za varijansu  $\sigma_A^2$  data sa

$$\sigma_A^2 = \frac{N}{N-1} \tilde{\sigma}_A^2 = \frac{N}{N-1} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \right)^2 \right).$$

Broj uzoraka  $N$  je obično dovoljno veliki, pa se ova popravka često može zanemariti.

**Monte Karlo metod** za računanje integrala oblika  $I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx$  se bazira na jednostavnom identitetu

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx. \quad (\text{A.3})$$

Ukoliko za funkciju  $p$  u gornjem izrazu odaberemo nenegativnu funkciju čiji je integral na intervalu  $[\alpha, \beta]$  jednak jedan, onda ovu funkciju možemo da interpretiramo kao raspodelu neke slučajne promenljive i gornji izraz možemo da prepisemo u obliku  $I = \langle f/p \rangle_p$ . Dakle, vidimo da je traženi integral jednak srednjoj vrednosti  $\langle f/p \rangle_p$  funkcije  $f/p$  u odnosu na raspodelu  $p$ . Na osnovu pojmova koje smo prethodno uveli, suštinu Monte Karlo metoda možemo da iskažemo u četiri koraka:

1. generiše se  $N$  slučajnih brojeva  $(x_1, \dots, x_N)$  čija je raspodela data funkcijom  $p$ ,
2. izračunaju se vrednosti  $f_i/p_i = f(x_i)/p(x_i)$  za  $i \in \{1, \dots, N\}$ ,
3. vrednost integrala  $I$  se oceni sa

$$I_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{p_i}, \quad (\text{A.4})$$

4. greška  $\Delta I_{MC}$  gornje ocene vrednosti integrala se oceni sa

$$\Delta I_{MC} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{f_i}{p_i} \right)^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{p_i} \right)^2 \right]}. \quad (\text{A.5})$$

Rezultate Monte Karlo metoda citiramo u obliku  $I = I_{MC} \pm \Delta I_{MC}$ , uz interpretaciju greške na standardan način, kao širine odgovarajuće Gausove raspodele.

Da bismo uspešno primenili Monte Karlo strategiju, ostaje da rešimo još dva problema: izbor raspodele  $p$  u identitetu (A.3) i način generisanja slučajnih brojeva iz ove raspodele.

Što se izbora raspodele  $p$  tiče, pošto imamo potpunu slobodu, iskoristićemo je za minimiziranje greške, odnosno za minimiziranje izraza (A.5). Kada bi funkcija  $f/p$  bila konstantna, onda bi odgovarajuća standardna devijacija  $\sigma_{f/p}$  bila jednaka nuli, pa bi i greška bila jednaka nuli. To bi značilo da slučajne brojeve generišemo iz raspodele  $p(x) \sim f(x)$ , pa iz uslova normiranja  $\int_{\alpha}^{\beta} p(x)dx = 1$  dobijamo  $p(x) = f(x)/I$ , odnosno za normiranje takve raspodele već moramo da znamo vrednost integrala  $I$  koji pokušavamo da izračunamo. Dakle, ovakav pristup ne daje rešenje (a i podrazumevali smo da je funkcija  $f$  nenegativna, što ne mora da bude slučaj). Međutim, primetili smo da je za minimizaciju greške ključno obezbediti da se funkcija  $f/p$  što manje menja na domenu integracije. Izbor raspodele  $p$  je praktično ograničen i zahtevom za generisanje slučajnih brojeva iz te raspodele. Naime, potrebno je razviti algoritam koji će generisati te slučajne brojeve<sup>2</sup>. Iako je ovaj problem rešen u opštem obliku (Metropolis algoritam, [31]), potrebno je izvršiti optimizaciju u svakom pojedinom slučaju. Često se ispostavlja da je kompleksnost Metropolis algoritma suviše velika za generisanje slučajnih brojeva iz idealne raspodele  $p$ , pa je efikasnije odabrati neku drugu raspodelu iz koje se slučajni brojevi lakše i brže generišu, i pri tom povećati broj uzoraka  $N$ . Povećanje broja uzoraka može da kompenzuje povećanje greške usled korišćenja neidealne raspodele  $p$ , tako da se ponekad na ovaj način dobijaju za redove veličina efikasniji algoritmi. U numeričkim simulacijama pogodno je uvesti efikasnost simulacije

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\sigma_{f/p}^2 T_1},$$

gde je  $T_1$  vreme potrebno da se generiše jedan broj iz raspodele  $p$  i izračuna vrednost funkcije  $f/p$  za dobijeni broj. Tek se maksimiziranjem efikasnosti dobija optimalan algoritam.

---

<sup>2</sup>U pitanju su zapravo pseudoslučajni brojevi, pošto se generišu na osnovu nekog algoritma i samo su prividno slučajni. Međutim, postoji niz testova [32] koji nam omogućavaju da identifikujemo algoritme koji daju pseudoslučajne brojeve dovoljnog kvaliteta za primenu u Monte Karlo algoritmima.



# Dodatak B

## Programski kod

Programski kod za numeričke Monte Karlo simulacije koje su korišćene u ovom radu razvili smo u programskom jeziku C, uz poštovanje ANSI standardizacije. Tipično vreme izvršavanja koda sa  $N = 100$  podeonih tačaka (što istovremeno znači i računanje 99-tostrukog određenog integrala) i  $N_{MC} = 10^7$  Monte Karlo koraka iznosi između 10 i 20 minuta na AMD Thunderbird 1.33 GHz platformi. Prema tome, jasno je da je za nesmetano korišćenje koda u istraživačke svrhe (pri čemu je neophodno mnogostruko računanje diskretizovanih funkcionalnih integrala kako bi se verifikovale izvedene zavisnosti i formule na širokom opsegu parametara teorije) potrebno obezbediti računar visokih performansi. Zbog toga smo razvili prvi domaći Linux klaster GROM<sup>1</sup>, kao rešenje koje daje izvanredan odnos performansi i uloženi sredstava, pogotovo pri primenama u Monte Karlo simulacijama koje mogu idealno da se paralelizuju. Nakon toga smo napisali paralelnu verziju koda, zasnovanu na OpenMPI konceptu (detaljnije videti [34], a za metodski pristup [35]), koja će ovde biti predstavljena. Pri tome, originalni delovi koda biće dati crnom bojom, a pomoćne funkcije preuzete iz [22] plavom bojom.

Ceo kod je organizovan u četiri programoteke: `gauss.c`, `mc-gauss.c`, `iter-gauss.c` i `class-gauss.c`. U prvoj programoteci, `gauss.c`, nalazi se glavna funkcija `main()`, u okviru koje se prvo unose parametri  $\phi^4$  teorije za koju se računa generišući funkcional, kao i broj podeonih tačaka  $N$  i broj Monte Karlo koraka  $N_{mc}$ . Zatim se, nakon inicijalizacije promenljivih i alociranja neophodne memorije, nalazi rešenje klasičnih jednačina kretanja pozivom funkcije `class()`. Nakon toga se inicijalizuje matrica  $A$  koja definiše kvadratnu formu koja nastaje razvojem dejstva do kvadratnih članova oko dobijenog klasičnog rešenja. Gausova raspodela data eksponentom ove kvadratne forme biće korišćena u Monte Karlo algoritmu za generisanje slučajnih brojeva i za računanje generišućeg funkcionala. Da bi se obezbedilo generisanje slučajnih brojeva, matrica  $A$  se dijagonalizuje pozivom funkcije `diag()`, koja kao izlaznu vrednost vraća matricu  $D$ . Ortogonalna transformacija pomoću ove matrice dijagonalizuje matricu  $A$ . Nakon toga se poziva funkcija `mc()`, koja započinje Monte Karlo proceduru. Kao izlazne parametre ove funkcije dobijamo vrednost generišućeg funkcionala  $Z$  i odgovarajuću ocenu greške `err` za svaki od procesa pokrenutih na klasteru. U finalnom koraku se pozivom funkcije `MPI_Gather()` vrednosti dobijene u svim procesima

---

<sup>1</sup>Prvi domaći Linux klaster GROM razvijen je u februaru i martu 2002. godine u saradnji Obrazovnog foruma iz Beograda i Instituta za fiziku iz Beograda. U njegovoj izgradnji učestvovali su Raša Karapandža, dr Aleksandar Belić, dr Aleksandar Bogojević i autor ovog rada. Klaster GROM baziran je na OSCAR klastering softveru [33], a hardverska platforma su četiri AMD Thunderbird 1.33 GHz računara sa 100 Mbps mrežnim karticama i odgovarajućim svičom koji obezbeđuje međusobnu povezanost. GROM se nalazi u Laboratoriji za primenu računara u fizici Instituta za fiziku, odmah pored novog 50-procesorskog klastera PARADOX (u izgradnji).

prenose u odgovarajuće promenljive u nultom procesu i izračunava se konačna vrednost generišućeg funkcionala i ocenjene greške. Ove vrednosti se ispisuju, dealocira se zauzeta memorija i izlazi se iz koda.

---

```

#include <mpi.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#define NR_END 1
#define FREE_ARG char*
#define NSEC 1000

int *ivector(long, long);
double *dvector(long, long);
double **dmatrix(long, long, long, long);
void free_ivector(int *, long, long);
void free_dvector(double *, long, long);
void free_dmatrix(double **, long, long, long, long);
void nrerror(char *);

long N;
double dpi, eps, logdet, *q, **D, Z, eps2, g, j, normfunc;

int main(int argc, char **argv)
{
    long kron(long, long);
    double func(double *, double *);
    void class(double *, double *);
    void diag(double **, double **, double *);
    void distr(double *, long *, double *, double *);
    void mc(long, double *, double *, double (*)(double *, double *), double *,
            long *, void (*)(double *, long *, double *, double *), double *, double *);

    double *funcpar, *distrpar, err, *x;
    long Nmc, seed, i1, i2;
    double **A, *cl, rez[NSEC], var;

    MPI_Status status;
    int np, myid, proc;

    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &np);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);

    if(argc != 9)
    {
        fprintf(stderr, "usage: gauss T alpha beta g j N Nmc seed\n");
        fprintf(stderr, "T, alpha, beta, g, j are parameters of the action\n");
        fprintf(stderr, "N is the number of time slices\n");
        fprintf(stderr, "Nmc is the number of MC steps\n");
        fprintf(stderr, "seed is used by the random number generator\n");
        exit(EXIT_FAILURE);
    }

    seed = atol(argv[8]) + 10 * myid;
    dpi = 8 * atan(1.0e+00);

```

```

funcpar = dvector(0, 5);
funcpar[0] = atof(argv[1]);
funcpar[1] = atof(argv[2]);
funcpar[2] = atof(argv[3]);
funcpar[3] = atof(argv[4]);
funcpar[4] = atof(argv[5]);
funcpar[5] = atof(argv[6]);
Nmc = atol(argv[7]);
N = atol(argv[6]);
x = dvector(0, N);
q = dvector(1, N - 1);
cl = dvector(0, N);
distrpar = dvector(1, 2 * (N - 1));
A = dmatrix(1, N - 1, 1, N - 1);
D = dmatrix(1, N - 1, 1, N - 1);
eps = funcpar[0] / N;
x[0] = funcpar[1];
x[N] = funcpar[2];
cl[0] = funcpar[1];
cl[N] = funcpar[2];
eps2 = eps * eps;
g = funcpar[3];
j = funcpar[4];
normfunc = - funcpar[5] * log(dpi * eps) / 2;

class(funcpar, cl);

for(i1 = 1; i1 < N; ++ i1)
{
    distrpar[i1] = cl[i1];

    for(i2 = 1; i2 < N; ++ i2)
    {
        A[i1][i2] = (2 / eps + eps / 2 + eps * funcpar[3] * ((cl[i1] + cl[i1 - 1]) *
            (cl[i1] + cl[i1 - 1]) / 4 + (cl[i1 + 1] + cl[i1]) *
            (cl[i1 + 1] + cl[i1]) / 4) / 8) * kron(i1, i2) +
            (- 1 / eps + eps / 4 + eps * funcpar[3] * (cl[i1 + 1] + cl[i1]) *
            (cl[i1 + 1] + cl[i1]) / 32) * kron(i1 + 1, i2) +
            (- 1 / eps + eps / 4 + eps * funcpar[3] * (cl[i2 + 1] + cl[i2]) *
            (cl[i2 + 1] + cl[i2]) / 32) * kron(i1, i2 + 1);

    }
}

diag(A, D, distrpar + N - 1);

mc(Nmc, funcpar, x, func, distrpar, &seed, distr, &Z, &err);

rez[0] = Z;
rez[1] = err;

MPI_Gather(rez, 2, MPI_DOUBLE, rez, 2, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);

Z = 0;
err = 0;

if(myid == 0)
{

```

```

for(proc = 0; proc < np; proc ++)
{
    Z += rez[2 * proc];
    err += rez[2 * proc + 1];
}

Z = Z / np / Nmc;
var = (err / np / Nmc - Z * Z) / (np * Nmc - 1);

if(var > 0)
{
    err = sqrt(var);
}

else
{
    err = 0;
}

if(N == 1)
{
    err = 0;
}

fprintf(stdout, "%d %1.151e %1.151e\n", N, Z, err);
}

free_dmatrix(D, 1, N - 1, 1, N - 1);
free_dmatrix(A, 1, N - 1, 1, N - 1);
free_dvector(distrpar, 1, 2 * (N - 1));
free_dvector(c1, 0, N);
free_dvector(q, 1, N - 1);
free_dvector(x, 0, N);
free_dvector(funcpar, 0, 5);

MPI_Finalize();
exit(EXIT_SUCCESS);
}

```

U programoteci `gauss.c` nalazi se još nekoliko značajnih funkcija. Prva od njih je `kron()`, realizacija Kronekerovog delta simbola. Sledeća funkcija je `diag()`, koja pozivom funkcije `jacobi()`, preuzete iz [22], vrši dijagonalizaciju zadate matrice. Funkcija `distr()` generiše slučajne brojeve iz Gausove raspodele definisane matricom `A`, inicijalizovanom u glavnoj funkciji `main()`. Za generisanje Gausove raspodele koristi se Boks–Milerova metoda, opisana u [32]. Kako je za primenu ove metode neophodan i generator slučajnih brojeva iz uniformne raspodele, koristili smo generator `ran3()`, prezet iz [22].

```

long kron(long i, long k)
{
    if(i == k)
    {
        return 1;
    }

    else
    {

```



```

    return 0;
}
}

void diag(double **A, double **D, double *C)
{
    void jacobi(double **, long, double *, double **, long *);
    long i, nrot;

    logdet = 0;

    jacobi(A, N - 1, C, D, &nrot);

    for(i = 1; i < N; ++ i)
    {
        logdet += log(C[i]);
        C[i] = 1 / C[i];
    }

    return;
}

void distr(double *distrpar, long *seed, double *x, double *pinv)
{
    double ran3(long *);
    double var = 0, rand1, rand2;
    long i, k;

    for(i = 1; i < N; ++ i)
    {
        while(!(rand1 = ran3(seed))){}
        while(!(rand2 = ran3(seed))){}
        q[i] = sqrt(- 2 * distrpar[N - 1 + i] * log(rand1)) * cos(dpi * rand2);
        var += q[i] * q[i] / (2 * distrpar[N - 1 + i]);
    }

    *pinv = (N - 1) * log(dpi) / 2 - logdet / 2 + var;

    for(i = 1; i < N; ++ i)
    {
        x[i] = distrpar[i];

        for(k = 1; k < N; ++ k)
        {
            x[i] += G[i][k] * q[k];
        }
    }

    return;
}

```

Radi kompletnosti, u nastavku je data funkcija `ran3()`, funkcije za alociranje i dealociranje memorije `ivector()`, `dvector()`, `dmatrix()`, `free_ivector()`, `free_dvector()`, `free_dmatrix()`, funkcija za ispis grešaka `nrerror()`, kao i funkcija `jacobi()`, koja se koristi za dijagonalizaciju matrice  $A$ . Sve ove funkcije su preuzete iz [22].

```
#define MBIG 1000000000
#define MSEED 161803398
#define MZ 0
#define FAC (1.0e+00/MBIG)

double ran3(long *idum)
{
    static int inext, inextp;
    static long ma[56];
    static int iff = 0;
    long mj, mk;
    int i, ii, k;

    if(*idum < 0 || iff == 0)
    {
        iff = 1;
        mj= MSEED - (*idum < 0 ? - *idum : *idum);
        mj %= MBIG;
        ma[55] = mj;
        mk = 1;

        for(i = 1; i <= 54; i ++)
        {
            ii = (21 * i) % 55;
            ma[ii] = mk;
            mk = mj - mk;

            if(mk < MZ)
            {
                mk += MBIG;
            }

            mj = ma[ii];
        }

        for(k = 1; k <= 4; k ++)
        {
            for(i = 1; i <= 55; i ++)
            {
                ma[i] -= ma[1 + (i + 30) % 55];

                if(ma[i] < MZ)
                {
                    ma[i] += MBIG;
                }
            }
        }

        inext = 0;
        inextp = 31;
        *idum = 1;
    }

    if(++ inext == 56)
    {
        inext = 1;
    }
}
```

```

    if(++ inextp == 56)
    {
        inextp = 1;
    }

    mj = ma[inext] - ma[inextp];

    if(mj < MZ)
    {
        mj += MBIG;
    }

    ma[inext] = mj;
    return (double) (mj * (double) FAC);
}

#undef MBIG
#undef MSEED
#undef MZ
#undef FAC
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

int *ivector(long nl, long nh)
/* allocate an int vector with subscript range v[nl..nh] */
{
    int *v;

    v = (int *)malloc((size_t) ((nh - nl + 1 + NR_END) * sizeof(int)));
    if(!v) nrerror("allocation failure in ivector()");
    return v - nl + NR_END;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

double *dvector(long nl, long nh)
/* allocate a double vector with subscript range v[nl..nh] */
{
    double *v;

    v = (double *)malloc((size_t) ((nh - nl + 1 + NR_END) * sizeof(double)));
    if(!v) nrerror("allocation failure in ldvector()");
    return v - nl + NR_END;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

double **dmatrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* allocate a double matrix with subscript range m[nrl..nrh][ncl..nch] */
{
    long i, nrow = nrh - nrl + 1, ncol = nch - ncl + 1;
    double **m;

    /* allocate pointers to rows */
    m = (double **) malloc((size_t)((nrow + NR_END) * sizeof(double*)));
    if(!m) nrerror("allocation failure 1 in ldmatrix()");
    m += NR_END;
    m -= nrl;

```

```

/* allocate rows and set pointers to them */
m[nrl] = (double *) malloc((size_t)((nrow * ncol + NR_END) * sizeof(double)));
if(!m[nrl]) nrerror("allocation failure 2 in ldmatrix()");
m[nrl] += NR_END;
m[nrl] -= ncl;

for(i = nrl + 1; i <= nrh; i++) m[i] = m[i - 1] + ncol;

/* return pointer to array of pointers to rows */
return m;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void free_ivector(int *v, long nl, long nh)
/* free an int vector allocated with ivector() */
{
    free((FREE_ARG) (v + nl - NR_END));
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void free_dvector(double *v, long nl, long nh)
/* free a double vector allocated with dvector() */
{
    free((FREE_ARG) (v + nl - NR_END));
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void free_dmatrix(double **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* free a double matrix allocated by dmatrix() */
{
    free((FREE_ARG) (m[nrl] + ncl - NR_END));
    free((FREE_ARG) (m + nrl - NR_END));
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void nrerror(char *error_text)
/* Numerical Recipes standard error handler */
{
    fprintf(stderr, "Numerical Recipes run-time error...\n");
    fprintf(stderr, "%s\n", error_text);
    fprintf(stderr, "...now exiting to system...\n");
    exit(EXIT_FAILURE);
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

#define ROTATE(a,i,j,k,l) g=a[i][j];h=a[k][l];a[i][j]=g-s*(h+g*tau);\
    a[k][l]=h+s*(g-h*tau);

void jacobi(double **a, long n, double *d, double **v, long *nrot)
{
    int j, iq, ip, i;
    double tresh, theta, tau, t, sm, s, h, g, c, *b, *z;

    b = dvector(1, n);
    z = dvector(1, n);

    for(ip = 1; ip <= n; ip++)

```

```

{
  for(iq = 1; iq <= n; iq ++) v[ip][iq] = 0.0;
  v[ip][ip] = 1.0;
}

for(ip = 1; ip <= n; ip ++)
{
  b[ip] = d[ip] = a[ip][ip];
  z[ip] = 0.0;
}

*nrot=0;

for(i = 1; i <= 50; i ++)
{
  sm=0.0;

  for(ip = 1; ip <= n - 1; ip ++)
  {
    for(iq = ip + 1; iq <= n; iq ++) sm += fabs(a[ip][iq]);
  }

  if(sm == 0.0)
  {
    free_dvector(z, 1, n);
    free_dvector(b, 1, n);
    return;
  }

  if(i < 4) tresh = 0.2 * sm / (n * n);
  else tresh = 0.0;

  for(ip = 1; ip <= n - 1; ip ++)
  {
    for(iq = ip + 1; iq <= n; iq ++)
    {
      g = 100.0 * fabs(a[ip][iq]);
      if(i > 4 && (fabs(d[ip]) + g) == fabs(d[ip]) &&
        (fabs(d[iq]) + g) == fabs(d[iq])) a[ip][iq] = 0.0;

      else if(fabs(a[ip][iq]) > tresh)
      {
        h = d[iq] - d[ip];

        if((fabs(h) + g) == fabs(h)) t = (a[ip][iq]) / h;

        else
        {
          theta= 0.5 * h / (a[ip][iq]);
          t = 1.0 / (fabs(theta) + sqrt(1.0 + theta * theta));

          if(theta < 0.0) t = - t;
        }

        c = 1.0 / sqrt(1 + t * t);
        s = t * c;
      }
    }
  }
}

```

```

    tau = s / (1.0 + c);
    h = t * a[ip][iq];
    z[ip] -= h;
    z[iq] += h;
    d[ip] -= h;
    d[iq] += h;
    a[ip][iq] = 0.0;

    for(j = 1; j <= ip - 1; j ++)
    {
        ROTATE(a,j,ip,j,iq)
    }

    for(j = ip + 1; j <= iq - 1; j ++)
    {
        ROTATE(a,ip,j,j,iq)
    }

    for(j = iq + 1; j <= n; j ++)
    {
        ROTATE(a,ip,j,iq,j)
    }

    for(j = 1; j <= n; j ++)
    {
        ROTATE(v,j,ip,j,iq)
    }

    ++ (*nrot);
}
}

for(ip = 1; ip <= n; ip ++)
{
    b[ip] += z[ip];
    d[ip] = b[ip];
    z[ip] = 0.0;
}
}

nrerror("Too many iterations in routine jacobi");
}

#undef ROTATE
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

```

---

Monte Karlo algoritam je implementiran u programoteci `mc-gauss.c`, u kojoj se nalazi funkcija `mc()`. U ovoj funkciji se, nakon inicijalizacije promenljivih, započinje petlja po `Nmc` Monte Karlo koraka. U petlji se prvo poziva funkcija koja generiše slučajnu trajektoriju (`*distr()`), a zatim se poziva funkcija koja računa vrednost eksponenta podintegralne funkcije (`*func()`). Nakon toga se akumuliraju potrebne vrednosti za generišući funkcional  $Z$  i ocenu greške `err`.

---

```

#include <math.h>

void mc(long Nmc, double *funcpar, double *x, double (*func)(double *, double *),
        double *distrpar, long *seed,
        void (*distr)(double *, long *, double *, double *),
        double *intf, double *err)
{
    long i;
    double fp, var, expfp;

    *intf = 0;
    *err = 0;

    for(i = 0; i < Nmc; ++ i)
    {
        (*distr)(distrpar, seed, x, &fp);
        fp += (*func)(funcpar, x);
        expfp = exp(fp);
        *intf += expfp;
        *err += expfp * expfp;
    }

    return;
}

```

---

Definicije iteriranih izraza za funkcije  $G$  i  $V$  su u programoteci `iter-gauss.c`. Funkcija `func()` računa vrednost eksponenta podintegralne funkcije na osnovu vrednosti za  $G$  i  $V$  koje se računaju pozivom funkcije `GV()`. Izbor željenog iterativnog nivoa vrši se definisanjem odgovarajuće pretprocesorske promenljive. Na primer, ako želimo da koristimo drugi iterativni korak, onda definišemo promenljivu `ITER2`:

---

```

#include <math.h>
#define ITER2

extern long N;
extern double dpi, eps, eps2, g, j, normfunc;
double x2;

double func(double *funcpar, double *x)
{
    long i;
    double var = 0, xk, dxk, G, V, sqrtG = 1;
    void GV(double, double *, double *);

    for(i = 0; i < N; ++ i)
    {
        xk = (x[i + 1] + x[i]) / 2;
        dxk = x[i + 1] - x[i];
        GV(xk, &G, &V);
        var += G * dxk * dxk / (2 * eps) + eps * V;
        sqrtG *= G;
    }

    return - var + normfunc + log(sqrtG) / 2;
}

```

```

#ifdef ITER0
void GV(double x, double *G, double *V)
{
    x2 = x * x;
    *G = 1;
    *V = x2 / 2 + g * x2 * x2 / 24 - j * x;
    return;
}
#endif

#ifdef ITER1
void GV(double x, double *G, double *V)
{
    double V0p;

    x2 = x * x;
    *G = 1 + eps2 * (1 + g * x2 / 2) / 16;
    V0p = x + g * x2 * x / 6 - j;
    *V = x2 / 2 + g * x2 * x2 / 24 - j * x -
        eps2 * V0p * V0p / (32 * (*F)) + log(*G) / eps;

    return;
}
#endif

#ifdef ITER2
void GV(double x, double *G, double *V)
{
    double V0, V0p, V0s, G1, G1p, G1s, V1, V1p, V1s, schwarz, var;

    x2 = x * x;
    V0 = x2 / 2 + g * x2 * x2 / 24 - j * x;
    V0p = x + g * x2 * x / 6 - j;
    V0s = 1 + g * x2 / 2;
    G1 = 1 + eps2 * V0s / 64;
    G1s = eps2 * g / 64;
    G1p = G1s * x;
    V1 = V0 + 2 * log(G1) / eps - eps2 * V0p * V0p / (128 * G1);
    V1p = V0p + 2 * G1p / (eps * G1) - eps2 * (2 * V0p * V0s - V0p * V0p * G1p / G1) /
        (128 * G1);
    schwarz = (G1s - G1p * G1p / G1) / G1;
    V1s = V0s + 2 * schwarz / eps - eps2 * (2 * V0s * V0s + 2 * V0p * g * x -
        (4 * V0p * V0s * G1p + V0p * V0p * G1s) / G1 + 2 * V0p * V0p * G1p * G1p /
        (G1 * G1)) / (128 * G1);
    *G = G1 + (- eps * schwarz + eps2 * V1s) / 16;
    var = G1p / G1 - eps * V1p;
    *V = V1 + log(*G / G1) / eps - var * var / (32 * (*G));
    return;
}
#endif

#ifdef ITER3
void GV(double x, double *G, double *V)
{
    double V0, V0p, V0p2, V0s, V0s2, G1, G12, G1p, G1p2, G1s,
    double V1, V1p, V1s, V1t, V1q, G2, G2p, G2s, V2, V2p, V2s;
    double schwarz1, schwarz2, var1, var11, var12, var2;

```



```

x2 = x * x;
V0 = x2 / 2 + g * x2 * x2 / 24 - j * x;
V0p = x + g * x2 * x / 6 - j;
V0p2 = V0p * V0p;
V0s = 1 + g * x2 / 2;
V0s2 = V0s * V0s;
G1 = 1 + eps2 * V0s / 256;
G12 = G1 * G1;
G1s = eps2 * g / 256;
G1p = G1s * x;
G1p2 = G1p * G1p;
V1 = V0 + 4 * log(G1) / eps - eps2 * V0p2 / (512 * G1);
V1p = V0p + 4 * G1p / (eps * G1) - eps2 * (2 * V0p * V0s - V0p2 * G1p / G1) /
(512 * G1);
schwarz1 = (G1s - G1p2 / G1) / G1;
V1s = V0s + 4 * schwarz1 / eps - eps2 * (2 * V0s2 + 2 * V0p * g * x -
(4 * V0p * V0s * G1p + V0p2 * G1s) / G1 + 2 * V0p2 * G1p2 / G12) /
(512 * G1);
var11 = (- 3 * G1s + 2 * G1p2 / G1) * G1p / G12;
V1t = g * x + 4 * var11 / eps - eps2 * (6 * V0s * g * x + (- 6 * V0s2 * G1p -
6 * V0p * g * x * G1p - 6 * V0p * V0s * G1s) / G1 + 2 * V0p * g +
(12 * V0p * V0s * G1p2 + 6 * V0p2 * G1p * G1s) / G12 -
6 * V0p2 * G1p2 * G1p / (G12 * G1)) / (512 * G1);
var12 = (- 3 * G1s * G1s + 12 * G1p2 * G1s / G1 - 6 * G1p2 * G1p2 / G12) / G12;
V1q = g + 4 * var12 / eps - eps2 * (6 * g * g * x2 + 8 * V0s * g +
(- 24 * V0s * g * x * G1p - 12 * V0s2 * G1s - 8 * V0p * g * G1p -
12 * V0p * g * x * G1s) / G1 + (24 * V0s2 * G1p2 +
24 * V0p * g * x * G1p2 + 48 * V0p * V0s * G1p * G1s +
6 * V0p2 * G1s * G1s) / G12 + (- 48 * V0p * V0s * G1p2 * G1p -
36 * V0p2 * G1p2 * G1s) / (G12 * G1) + 24 * V0p2 * G1p2 * G1p2 /
(G12 * G12)) / (512 * G1);
G2 = G1 - eps * schwarz1 / 32 + eps2 * V1s / 64;
G2p = G1p - eps * var11 / 32 + eps2 * V1t / 64;
G2s = G1s - eps * var12 / 32 + eps2 * V1q / 64;
var1 = G1p / G1 - eps * V1p / 2;
V2 = V1 + 2 * log(G2 / G1) / eps - var1 * var1 / (32 * G2);
V2p = V1p + 2 * (G2p / G2 - G1p / G1) / eps + (- G1p * G1s / G1 + G1p2 * G1p / G12 +
G1p2 * G2p / (2 * G1 * G2) + (eps * G1s * V1p + eps * G1p * V1s) / 2 -
eps * G1p2 * V1p / (2 * G1) - eps * G1p * G2p * V1p / (2 * G2) -
eps2 * V1p * V1s * G1 / 4 + eps2 * V1p * V1p * G2p * G1 / (8 * G2)) /
(16 * G1 * G2);
schwarz2 = (G2s - G2p * G2p / G2) / G2;
V2s = V1s + 2 * (schwarz2 - schwarz1) / eps + ((- G1s * G1s - eps * G1p2 * V1s) /
(2 * G1) + (5 * G1p2 * G1s + eps * G1p2 * G1p * V1p) /
(2 * G12) + G1p * G1s * G2p / (G1 * G2) - 3 * G1p2 * G1p2 / (2 * G12 * G1) -
G1p2 * G1p * G2p / (G12 * G2) + G1p2 * G2s / (4 * G1 * G2) -
G1p2 * G2p * G2p / (2 * G1 * G2 * G2) + eps * G1s * V1s / 2 -
3 * eps * G1p * G1s * V1p / (4 * G1) + (- eps * G1s * G2p * V1p -
eps * G1p * G2p * V1s) / (2 * G2) + eps * G1p * V1t / 4 +
eps * G1p2 * G2p * V1p / (2 * G1 * G2) + (- eps * G1p * G2s * V1p +
eps2 * V1p * V1s * G2p * G1) / (4 * G2) + eps * G1p * G2p * G2p * V1p /
(2 * G2 * G2) - (eps2 * V1s * V1s + eps2 * V1t * V1p) * G1 / 8 +
eps2 * V1p * V1p * G2s * G1 / (16 * G2) -
eps2 * V1p * V1p * G2p * G2p * G1 / (8 * G2 * G2)) / (8 * G1 * G2);

*G = G2 + (- eps * schwarz2 + eps2 * V2s) / 16;
var2 = G2p / G2 - eps * V2p;

```

```

    *V = V2 + log(*G / G2) / eps - var2 * var2 / (32 * (*G));
    return;
}
#endif

```

---

Rešavanje klasičnih jednačina kretanja pomoću relaksacione metode implementirano je u programoteci `class-gauss.c`. U funkciji `class()` se prvo inicijalizuju promenljive, a zatim se poziva funkcija `solvde()`, preuzeta iz [22], koja nalazi numeričko rešenje Ojler–Lagranževih jednačina kretanja za Vik–rotiranu teoriju definisanu lagranžijanom (3.3), uz date početne uslove. Nakon toga se dobijeno rešenje interpolira na traženi broj podeonih tačaka  $N$ . Pretprocesorsku promenljivu `MMA` (koja određuje broj podeonih tačaka u relaksacionoj metodi) treba podesiti tako da bude bar za red veličine veća od najveće željene vrednosti broja podeonih tačaka  $N$ , kako bi dobijeno rešenje klasičnih jednačina kretanja imalo dovoljnu tačnost. Za početnu funkciju koja se relaksacijom dovodi do rešenja uzeta je prava linija koja spaja  $q(0) = \alpha$  i  $q(T) = \beta$ . Funkcija `difeq()` računa potrebne izraze koji slede iz jednačina kretanja, kao što je definisano u [22], u poglavlju o relaksacionoj metodi.

---

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#define NR_END 1
#define FREE_ARG char*
#define MMA 10001
#define ITMAX 1000
#define CONV 1e-10
#define SLOWC 1
#define NE 2
#define NB 1

int *ivector(long, long);
double *dvector(long, long);
double **dmatrix(long, long, long, long);
double ***d3tensor(long, long, long, long, long, long);
void free_ivector(int *, long, long);
void free_dvector(double *, long, long);
void free_dmatrix(double **, long, long, long, long);
void free_d3tensor(double ***t, long, long, long, long, long, long);
void nrerror(char *);

double h, alphacur, betacur, jcur, gcur;
int m = MMA;
extern long N;
extern double eps;

void class(double *funcpar, double *cl)
{
    double **s, ***c, **y, scalv[NE + 1], conv = CONV, slowc = SLOWC;
    double ti, tn, T, alpha, beta, g, j;
    int itmax = ITMAX, indexv[NE + 1], ne = NE, i, nb = NB, kold, k;

    void solvde(int, double, double, double *, int *, int, int,
               int, double **, double ***, double **);

```

```

T = funcpar[0];
alpha = funcpar[1];
beta = funcpar[2];
g = funcpar[3];
j = funcpar[4];

alphacur = alpha;
betacur = beta;
jcur = j;
gcur = g;
y = dmatrix(1, ne, 1, m);
s = dmatrix(1, ne, 1, 2 * ne + 1);
c = d3tensor(1, ne, 1, ne - nb + 1, 1, m + 1);
h = T / (m - 1);

for(i = 1; i <= NE; ++ i)
{
    indexv[i] = i;
    scalv[i] = 1;
}

for(i = 1; i <= m; ++ i)
{
    ti = (i - 1) * h;
    y[1][i] = j + (alpha - j) * cosh(ti) + (beta - j - (alpha - j) * cosh(T)) *
        sinh(ti) / sinh(T);
    y[2][i] = (alpha - j) * cosh(ti) + (beta - j - (alpha - j) * cosh(T)) *
        sinh(ti) / sinh(T);
}

solvde(itmax, conv, slowc, scalv, indexv, ne, nb, m, y, c, s);

kold = 1;

for(i = 1; i < N; ++ i)
{
    tn = i * eps;

    for(k = kold; k <= m; ++ k)
    {
        ti = (k - 1) * h;

        if(ti < tn)
        {
            continue;
        }

        if(ti == tn)
        {
            cl[i] = y[1][k];
            kold = k;
            break;
        }

        if(ti > tn)
        {
            cl[i] = (tn - ti + h) * y[1][k - 1] / h + (ti - tn) * y[1][k] / h;
        }
    }
}

```

```

        kold = k;
        break;
    }
}

free_dmatrix(y, 1, ne, 1, m);
free_dmatrix(s, 1, ne, 1, 2 * ne + 1);
free_d3tensor(c, 1, ne, 1, ne - nb + 1, 1, m + 1);

return;
}

void difeq(int k, int k1, int k2, int jsf, int is1, int isf, int *indexv,
           int ne, double **s, double **y)
{
    if(k == k1)
    {
        s[2][2 + indexv[1]] = 1;
        s[2][2 + indexv[2]] = 0;
        s[2][jsf] = y[1][1] - alphacur;
    }

    else if(k > k2)
    {
        s[1][2 + indexv[1]] = 1;
        s[1][2 + indexv[2]] = 0;
        s[1][jsf] = y[1][m] - betacur;
    }

    else
    {
        s[1][indexv[1]] = - 1;
        s[1][indexv[2]] = - 0.5 * h;
        s[1][2+indexv[1]] = 1;
        s[1][2+indexv[2]] = - 0.5 * h;
        s[2][indexv[1]] = - h * (0.5 + gcur * (y[1][k] + y[1][k - 1]) *
                                (y[1][k] + y[1][k - 1]) / 16);
        s[2][indexv[2]] = - 1;
        s[2][2+indexv[1]] = - h * (0.5 + gcur * (y[1][k] + y[1][k - 1]) *
                                (y[1][k] + y[1][k - 1]) / 16);
        s[2][2+indexv[2]] = 1;
        s[1][jsf] = y[1][k] - y[1][k - 1] - 0.5 * h * (y[2][k] + y[2][k - 1]);
        s[2][jsf] = y[2][k] - y[2][k - 1] - h * ( 0.5 * (y[1][k] + y[1][k - 1]) - jcur +
            gcur * (y[1][k] + y[1][k - 1]) * (y[1][k] + y[1][k - 1]) *
            (y[1][k] + y[1][k - 1]) / 48);
    }

    return;
}

```

U nastavku je data funkcija `solvde()`, kao i funkcije ona poziva: `bksub()`, `pinvs()`, `red()`, `d3tensor()` i `free_d3tensor()`. Ove funkcije su preuzete iz [22].

```

void solvde(int itmax, double conv, double slowc, double *scalv, int *indexv,
            int ne, int nb, int m, double **y, double ***c, double **s)
{

```

```

void bksub(int, int, int, int, int, double ***);
void difeq(int, int, int, int, int, int, int *, int, double **, double **);
void pinvs(int, int, int, int, int, int, double ***, double **);
void red(int, int, int, int, int, int, int, int, int, int,
         double ***, double **);

int ic1, ic2, ic3, ic4, it, j, j1, j2, j3, j4, j5, j6, j7, j8, j9;
int jc1, jcf, jv, k, k1, k2, km, kp, nvars, *kmax;
double err, errj, fac, vmax, vz, *ermax;

kmax = ivector(1, ne);
ermax = dvector(1, ne);
k1 = 1;
k2 = m;
nvars = ne * m;
j1 = 1;
j2 = nb;
j3 = nb + 1;
j4 = ne;
j5 = j4 + j1;
j6 = j4 + j2;
j7 = j4 + j3;
j8 = j4 + j4;
j9 = j8 + j1;
ic1 = 1;
ic2 = ne - nb;
ic3 = ic2 + 1;
ic4 = ne;
jc1 = 1;
jcf = ic3;

for(it = 1; it <= itmax; it ++)
{
    k = k1;
    difeq(k, k1, k2, j9, ic3, ic4, indexv, ne, s, y);
    pinvs(ic3, ic4, j5, j9, jc1, k1, c, s);

    for(k = k1 + 1; k <= k2; k ++)
    {
        kp = k - 1;
        difeq(k, k1, k2, j9, ic1, ic4, indexv, ne, s, y);
        red(ic1, ic4, j1, j2, j3, j4, j9, ic3, jc1, jcf, kp, c, s);
        pinvs(ic1, ic4, j3, j9, jc1, k, c, s);
    }

    k = k2 + 1;
    difeq(k, k1, k2, j9, ic1, ic2, indexv, ne, s, y);
    red(ic1, ic2, j5, j6, j7, j8, j9, ic3, jc1, jcf, k2, c, s);
    pinvs(ic1, ic2, j7, j9, jcf, k2 + 1, c, s);
    bksub(ne, nb, jcf, k1, k2, c);
    err = 0.0;

    for(j = 1; j <= ne; j ++)
    {
        jv = indexv[j];
        errj = vmax = 0.0;
        km = 0;

```

```

    for(k = k1; k <= k2; k ++)
    {
        vz = fabs(c[jv][1][k]);

        if(vz > vmax)
        {
            vmax = vz;
            km = k;
        }

        errj += vz;
    }

    err += errj / scalv[j];
    ermax[j] = c[jv][1][km] / scalv[j];
    kmax[j] = km;
}

err /= nvars;
fac = (err > slowc ? slowc / err : 1.0);

for(j = 1; j <= ne; j ++)
{
    jv = indexv[j];
    for(k = k1; k <= k2; k ++) y[j][k] -= fac * c[jv][1][k];
}

if(err < conv)
{
    free_dvector(ermx, 1, ne);
    free_ivector(kmax, 1, ne);
    return;
}
}

nrerror("Too many iterations in solvde");
return;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void bksub(int ne, int nb, int jf, int k1, int k2, double ***c)
{
    int nbf, im, kp, k, j, i;
    double xx;

    nbf = ne - nb;
    im = 1;

    for(k = k2; k >= k1; k --)
    {
        if(k == k1) im=nbf+1;
        kp = k + 1;

        for(j = 1; j <= nbf; j ++)
        {
            xx = c[j][jf][kp];

```

```

        for(i = im; i <= ne; i ++) c[i][jf][k] -= c[i][j][k] * xx;
    }
}

for(k = k1; k <= k2; k ++)
{
    kp = k + 1;
    for(i = 1; i <= nb; i ++) c[i][1][k] = c[i + nbf][jf][k];
    for(i = 1; i <= nbf; i ++) c[i + nb][1][k] = c[i][jf][kp];
}

return;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void pinvs(int ie1, int ie2, int je1, int jsf, int jc1, int k,
           double ***c, double **s)
{
    int js1, jpiv, jp, je2, jcoff, j, irow, ipiv, id, icoff, i, *indxr;
    double pivinv, piv, dum, big, *pscl;

    indxr = ivector(ie1, ie2);
    pscl = dvector(ie1, ie2);
    je2 = je1 + ie2 - ie1;
    js1 = je2 + 1;

    for(i = ie1; i <= ie2; i ++)
    {
        big = 0.0;

        for(j = je1; j <= je2; j ++) if(fabs(s[i][j]) > big) big = fabs(s[i][j]);
        if(big == 0.0) nrerror("Singular matrix - row all 0, in pinvs");
        pscl[i] = 1.0 / big;
        indxr[i] = 0;
    }

    for(id = ie1; id <= ie2; id ++)
    {
        piv = 0.0;

        for(i = ie1; i <= ie2; i ++)
        {
            if(indxr[i] == 0)
            {
                big = 0.0;

                for(j = je1; j <= je2; j ++)
                {
                    if(fabs(s[i][j]) > big)
                    {
                        jp = j;
                        big = fabs(s[i][j]);
                    }
                }

                if(big * pscl[i] > piv)
                {

```

```

        piv = big * pscl[i];
    }
}

if(s[ipiv][jpiv] == 0.0) nrerror("Singular matrix in routine pinvs");
indxr[ipiv] = jpiv;
pivinv = 1.0 / s[ipiv][jpiv];

for(j = je1; j <= jsf; j++) s[ipiv][j] *= pivinv;
s[ipiv][jpiv] = 1.0;

for(i = ie1; i <= ie2; i++)
{
    if(indxr[i] != jpiv)
    {
        if(s[i][jpiv])
        {
            dum = s[i][jpiv];
            for(j = je1; j <= jsf; j++) s[i][j] -= dum * s[ipiv][j];
            s[i][jpiv] = 0.0;
        }
    }
}

jcoff = jc1 - js1;
icoff = ie1 - je1;

for(i = ie1; i <= ie2; i++)
{
    irow = indxr[i] + icoff;
    for(j = js1; j <= jsf; j++) c[irow][j + jcoff][k] = s[i][j];
}

free_dvector(pscl, ie1, ie2);
free_ivector(indxr, ie1, ie2);
return;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void red(int iz1, int iz2, int jz1, int jz2, int jm1, int jm2, int jmf,
        int ic1, int jc1, int jcf, int kc, double ***c, double **s)
{
    int loff, l, j, ic, i;
    double vx;

    loff = jc1 - jm1;
    ic = ic1;

    for(j = jz1; j <= jz2; j++)
    {
        for(l = jm1; l <= jm2; l++)
        {
            vx = c[ic][l + loff][kc];

```



```

        for(i = iz1; i <= iz2; i ++) s[i][l] -= s[i][j] * vx;
    }

    vx = c[ic][jcf][kc];
    for(i = iz1; i <= iz2; i ++) s[i][jmf] -= s[i][j] * vx;
    ic += 1;
}

return;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

double ***d3tensor(long nrl, long nrh, long ncl, long nch, long ndl, long ndh)
/* allocate a double 3tensor with range t[nrl..nrh][ncl..nch][ndl..ndh] */
{
    long i, j, nrow = nrh - nrl + 1, ncol = nch - ncl + 1, ndep = ndh - ndl + 1;
    double ***t;

    /* allocate pointers to pointers to rows */
    t = (double ***) malloc((size_t)((nrow + NR_END) * sizeof(double**)));
    if(!t) nrerror("allocation failure 1 in d3tensor()");
    t += NR_END;
    t -= nrl;

    /* allocate pointers to rows and set pointers to them */
    t[nrl] = (double **) malloc((size_t)((nrow * ncol + NR_END) * sizeof(double*)));
    if(!t[nrl]) nrerror("allocation failure 2 in d3tensor()");
    t[nrl] += NR_END;
    t[nrl] -= ncl;

    /* allocate rows and set pointers to them */
    t[nrl][ncl] = (double *) malloc((size_t)((nrow * ncol * ndep + NR_END) *
        sizeof(double)));
    if(!t[nrl][ncl]) nrerror("allocation failure 3 in d3tensor()");
    t[nrl][ncl] += NR_END;
    t[nrl][ncl] -= ndl;

    for(j = ncl + 1; j <= nch; j ++) t[nrl][j] = t[nrl][j-1] + ndep;

    for(i = nrl + 1; i <= nrh; i ++)
    {
        t[i] = t[i - 1] + ncol;
        t[i][ncl] = t[i - 1][ncl] + ncol * ndep;
        for(j = ncl + 1; j <= nch; j ++) t[i][j] = t[i][j - 1] + ndep;
    }

    /* return pointer to array of pointers to rows */
    return t;
}
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */

void free_d3tensor(double ***t, long nrl, long nrh, long ncl, long nch,
    long ndl, long ndh)
/* free a double d3tensor allocated by d3tensor() */
{
    free((FREE_ARG) (t[nrl][ncl] + ndl - NR_END));
    free((FREE_ARG) (t[nrl] + ncl - NR_END));
}

```

```
    free((FREE_ARG) (t + nrl - NR_END));  
    return;  
}  
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software. */
```

---

# Dodatak C

## Dodatni rezultati numeričkih simulacija

Ovde su dati kompletni rezultati numeričkih Monte Karlo simulacija koje su razvijene i izvršene za potrebe ovog rada na klasteru GROM, o čemu detaljnije informacije možete naći u Dodatku B. Glavni deo rada (treće i četvrto poglavlje) bio bi previše opterećen velikim brojem sličnih grafika koji svi dokazuju važenje izvedenih rekurzivnih formula ili njihove analitičke i numeričke osobine da smo sve dobijene rezultate prikazali u samom radu. Zato smo odlučili da tamo prikažemo samo ilustrativne grafike za ekstremne vrednosti parametara razmatrane teorije, a da se svi ostali grafici za širok opseg vrednosti parametara za koje smo dobili rezultate prikažu u posebnom dodatku, sa komentarima. Ovaj dodatak je podeljen na tri dela: prvi deo (C.1) je posvećen kompletnim rezultatima numeričkih simulacija za originalnu rekurzivnu formulu, u drugom delu (C.2) predstavljeni su dodatni numerički rezultati koji ilustruju važenje i osobine linearizovanih rekurzivnih relacija, dok je treći deo (C.3) posvećen dodatnim numeričkim rezultatima vezanim za aproksimativnu analitičku algebarsku formulu za generišući funkcional, izvedenu u petom poglavlju.

### C.1 Originalna rekurzivna formula

Na graficima u ovom odeljku su prikazani rezultati numeričkih simulacija kojima se proverava rekurzivna formula definisana izrazima (3.14), (3.15) i (3.16). Dati su rezultati dobijeni za različite vrednosti parametara razmatrane euklidske teorije, definisane sa

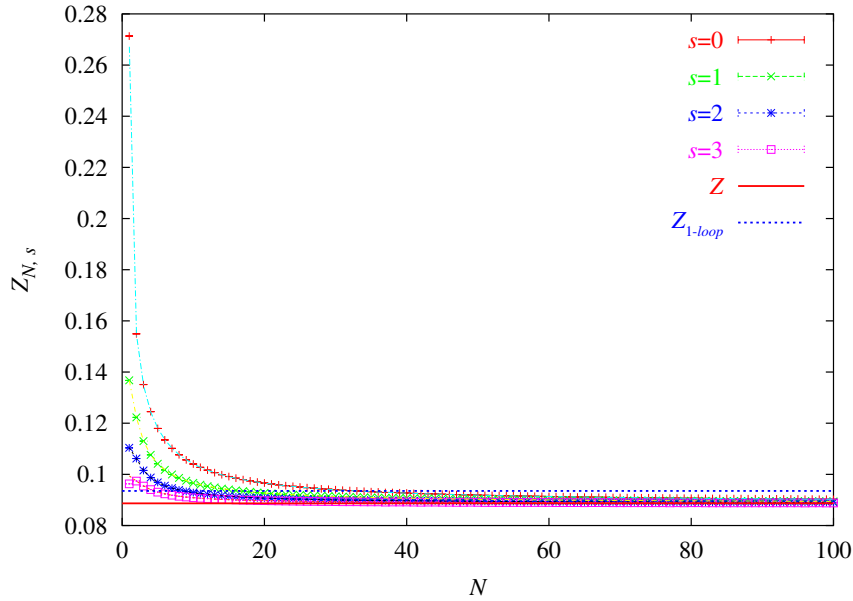
$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4!}q^4 - jq,$$

uz granične uslove  $q(0) = \alpha$  i  $q(T) = \beta$ .

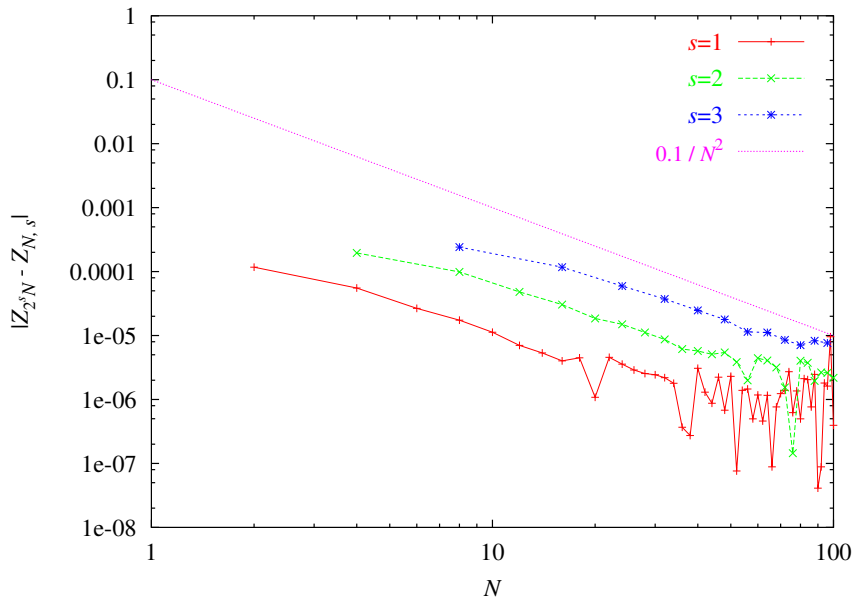
Na slici C.1 je prikazana zavisnost ocena iterativnih vrednosti reda  $s$  generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  od broja koraka  $N$  u diskretizaciji vremenskog intervala evolucije  $T$ , kao i vrednost generišućeg funkcionala koja se dobija u semiklasičnom razvoju do na jednu petlju.

Na sledećoj slici, C.2, eksplicitno se proverava važenje formule (3.18). Pokazuje se da je greška koju unosi primenjeno Gausovo polovljenje reda  $1/N^2$ , odnosno da važi relacija  $Z_{N,s} - Z_{2^s N,0} = o(N^{-2})$ .

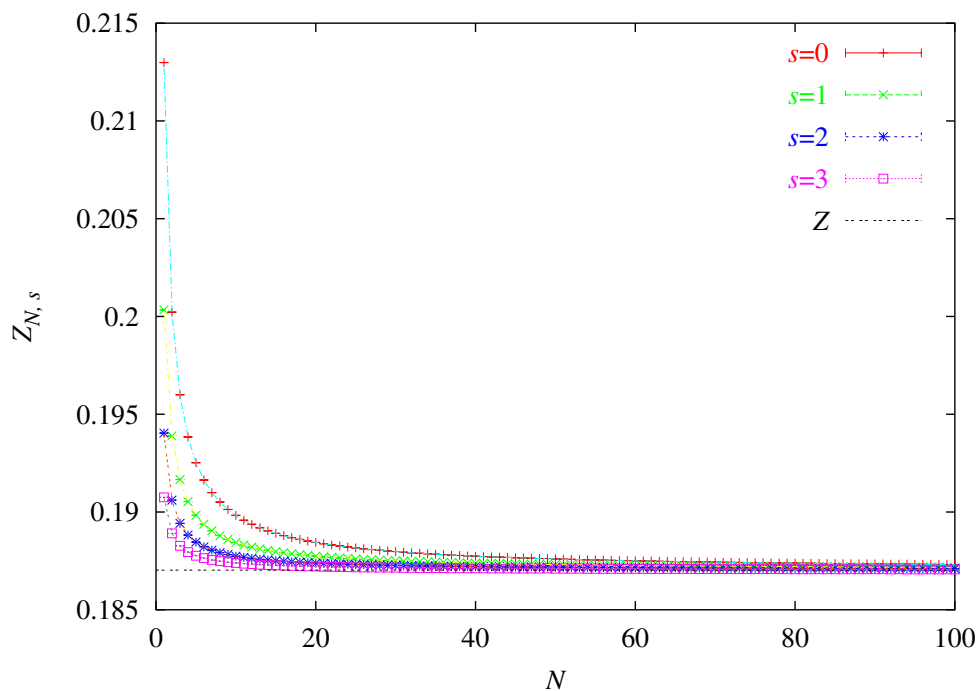
Na slikama C.3 do C.16 prikazana je zavisnost iteriranog generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  od broja vremenskih koraka  $N$ , kao i od efektivnog broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Kada se uzmu u obzir izvedene relacije za hijerarhiju vrednosti generišućeg funkcionala (3.14), očekujemo da se sve vrednosti  $Z_{N,s}$  približno poklapaju (kolapsiraju na istu krivu) kada se prikažu u zavisnosti od efektivnog broja vremenskih koraka  $2^s N$ .



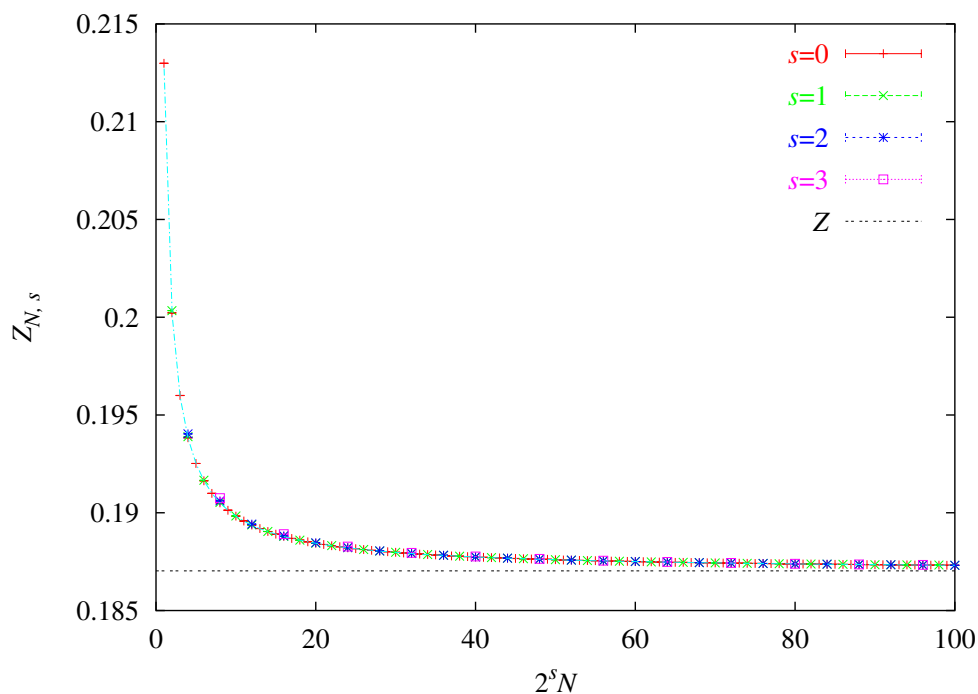
Slika C.1: Aproksimativne vrednosti  $Z_{N,s}$  generišućeg funkcionala u zavisnosti od broja podeonih tačaka  $N$ . Prikazane su vrednosti dobijene iz definicije generišućeg funkcionala, čemu odgovara  $s = 0$  (multi iterat), kao i prva tri iterata na osnovu formula (3.14) – (3.16), označena sa  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je prikazana i zajednička vrednost generišućeg funkcionala  $Z$ , dobijena fitovanjem za sve vrednosti broja iterativnih koraka  $s$ , pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.088615(5)$ ,  $Z_{s=1} = 0.088611(7)$ ,  $Z_{s=2} = 0.088611(7)$ ,  $Z_{s=3} = 0.088611(7)$ . Na slici je dat i semiklasičan rezultat do na jednu petlju  $Z_{1-loop} = 0.093500$ . Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



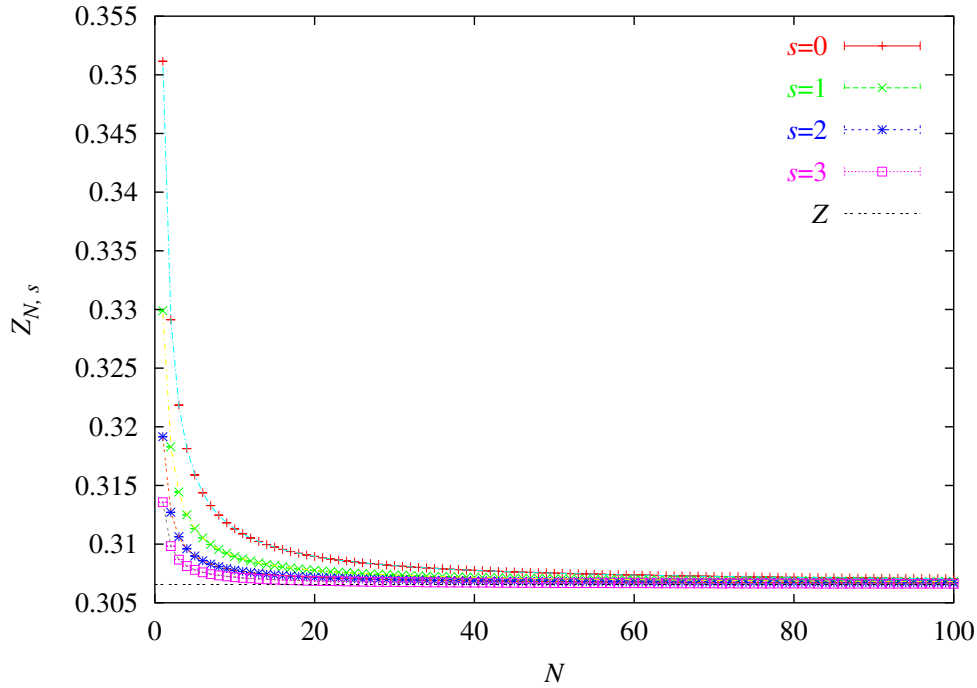
Slika C.2: Apsolutna vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $|Z_{2^s N} - Z_{N,s}|$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 0, 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.1/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazano važenje relacije (3.18), odnosno pokazano je da je greška koju unosi primenjena Gausova aproksimacija reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



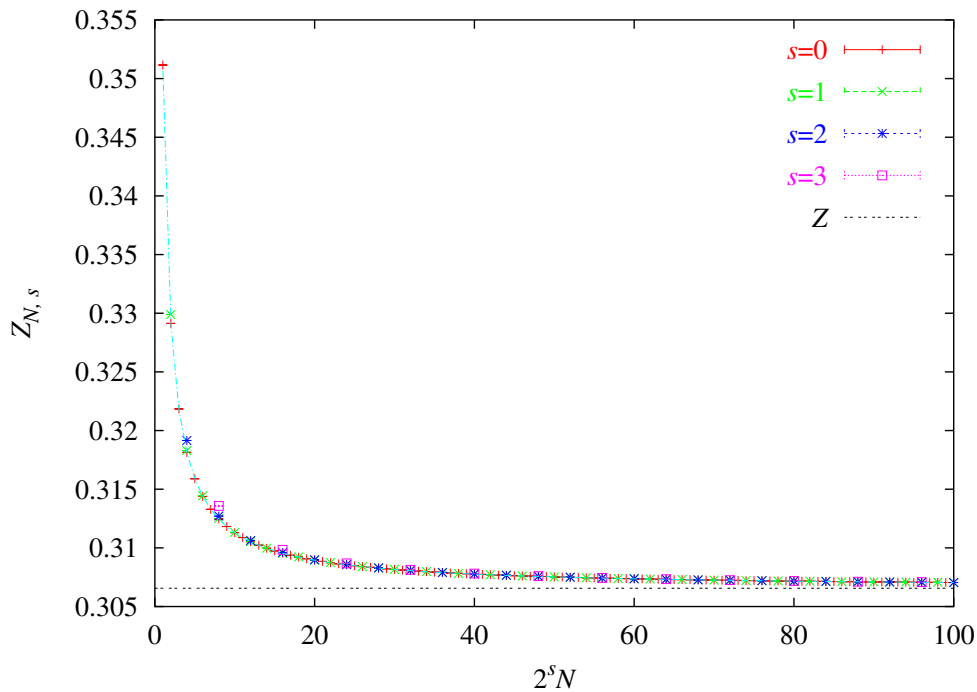
Slika C.3: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.1870294(3)$ ,  $Z_{s=1} = 0.1870292(3)$ ,  $Z_{s=2} = 0.1870292(3)$ ,  $Z_{s=3} = 0.1870292(3)$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



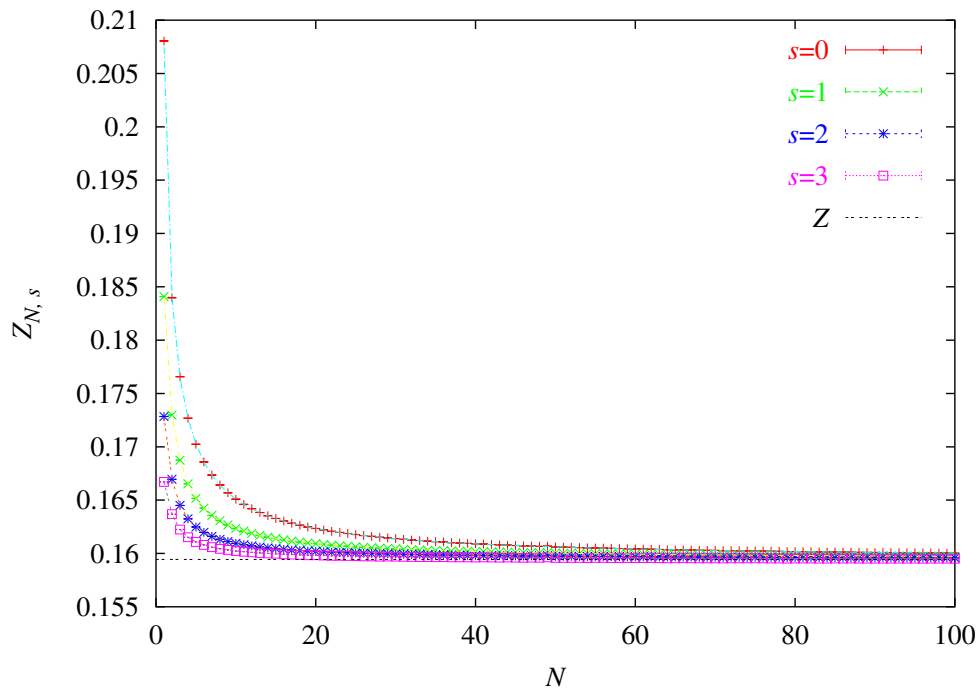
Slika C.4: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



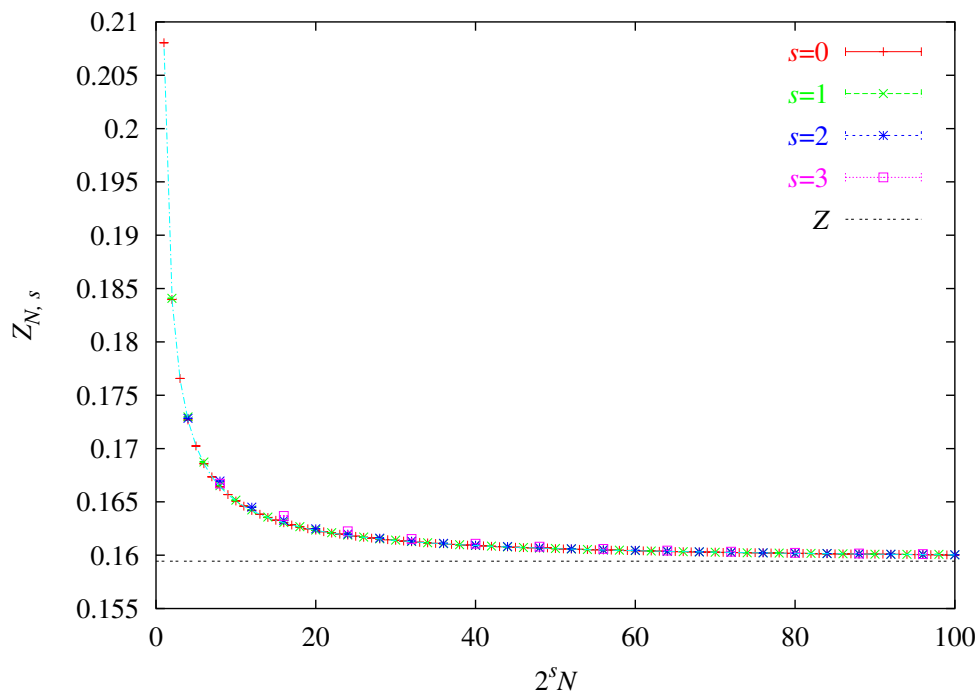
Slika C.5: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.3065648(5)$ ,  $Z_{s=1} = 0.3065644(5)$ ,  $Z_{s=2} = 0.3065644(5)$ ,  $Z_{s=3} = 0.3065644(5)$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



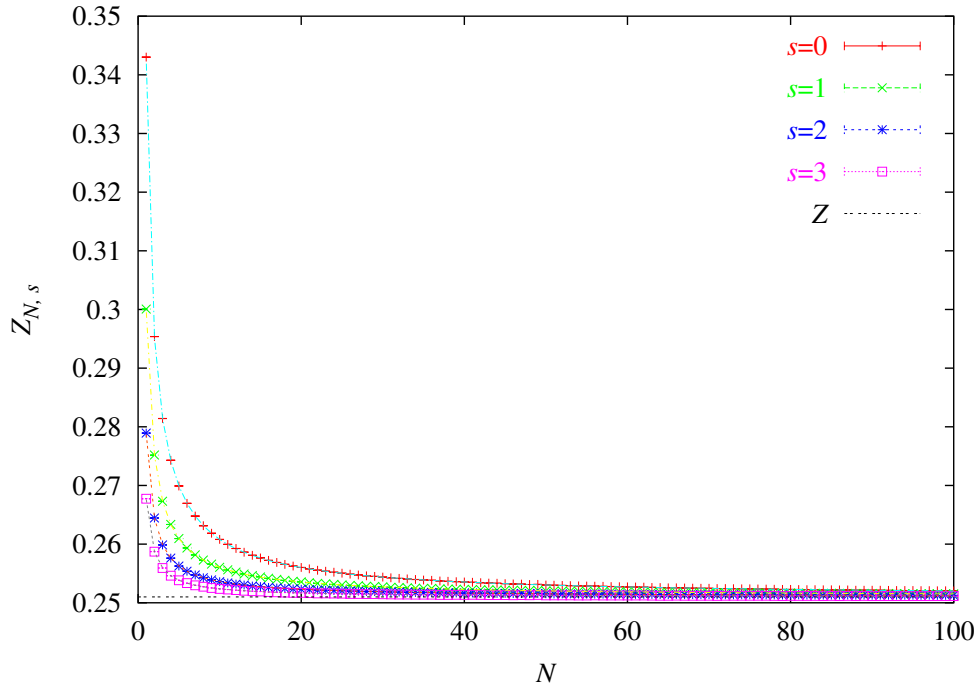
Slika C.6: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



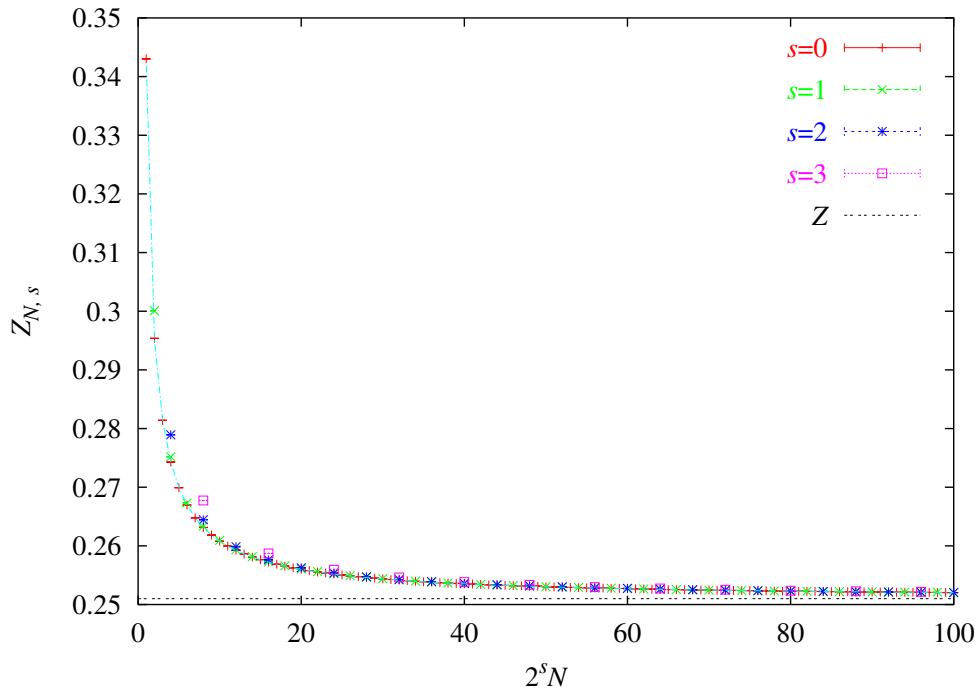
Slika C.7: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.159436(2)$ ,  $Z_{s=1} = 0.159435(2)$ ,  $Z_{s=2} = 0.159435(2)$ ,  $Z_{s=3} = 0.159435(2)$ . Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.8: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

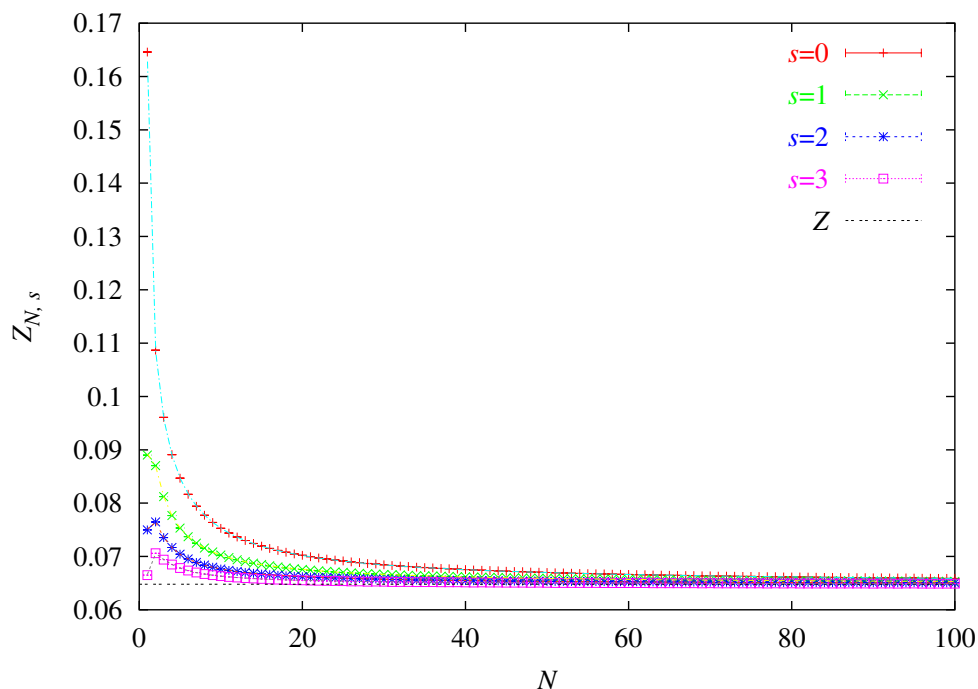


Slika C.9: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.251007(3)$ ,  $Z_{s=1} = 0.251006(3)$ ,  $Z_{s=2} = 0.251006(3)$ ,  $Z_{s=3} = 0.251006(3)$ . Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

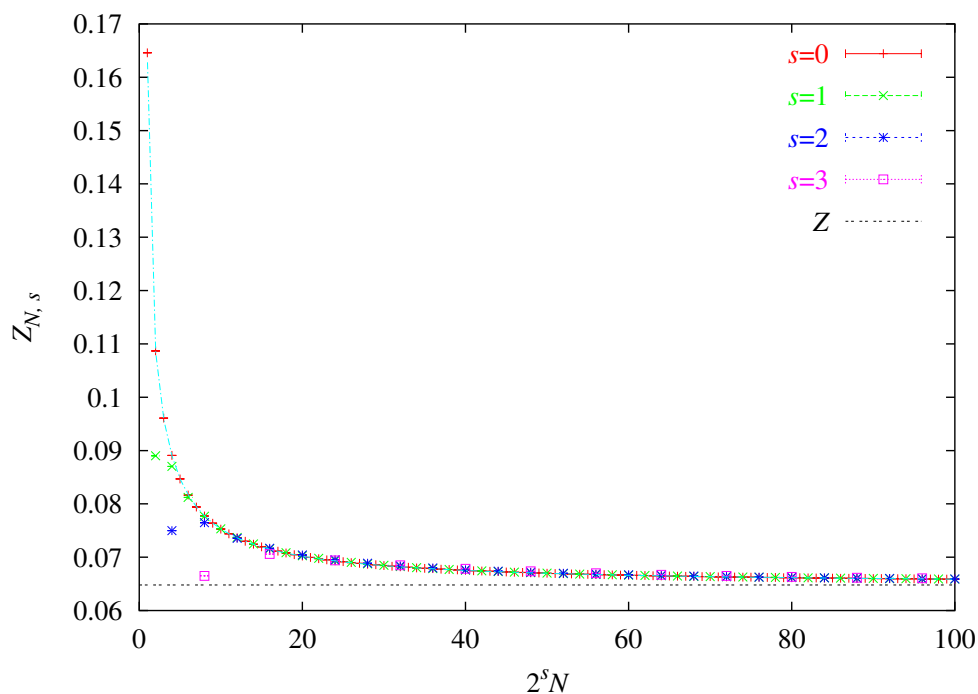


Slika C.10: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

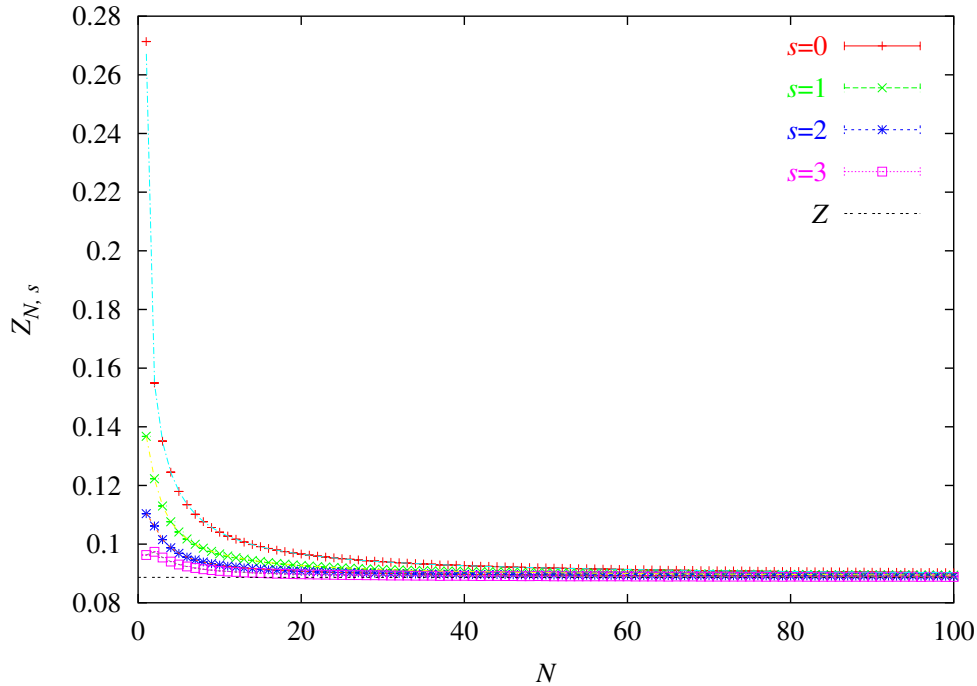




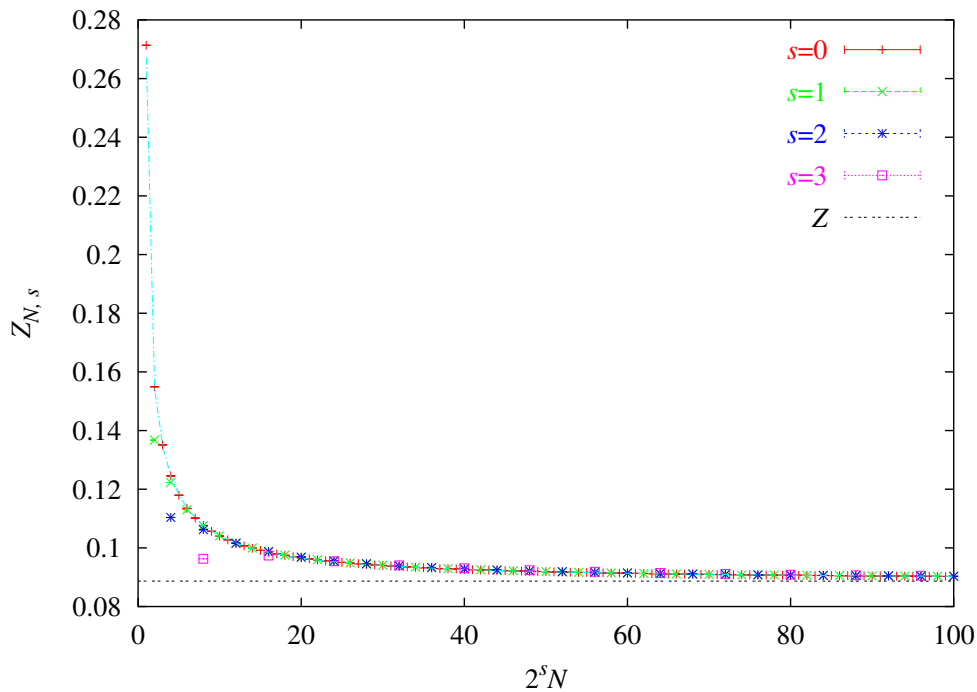
Slika C.11: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.064754(3)$ ,  $Z_{s=1} = 0.064749(8)$ ,  $Z_{s=2} = 0.064747(4)$ ,  $Z_{s=3} = 0.064747(3)$ . Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



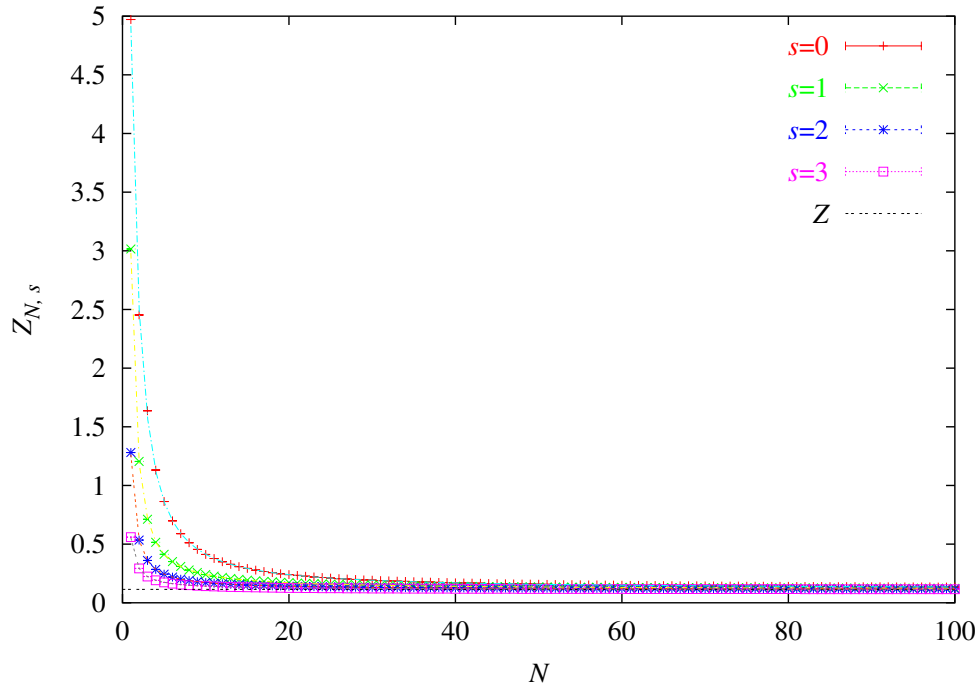
Slika C.12: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



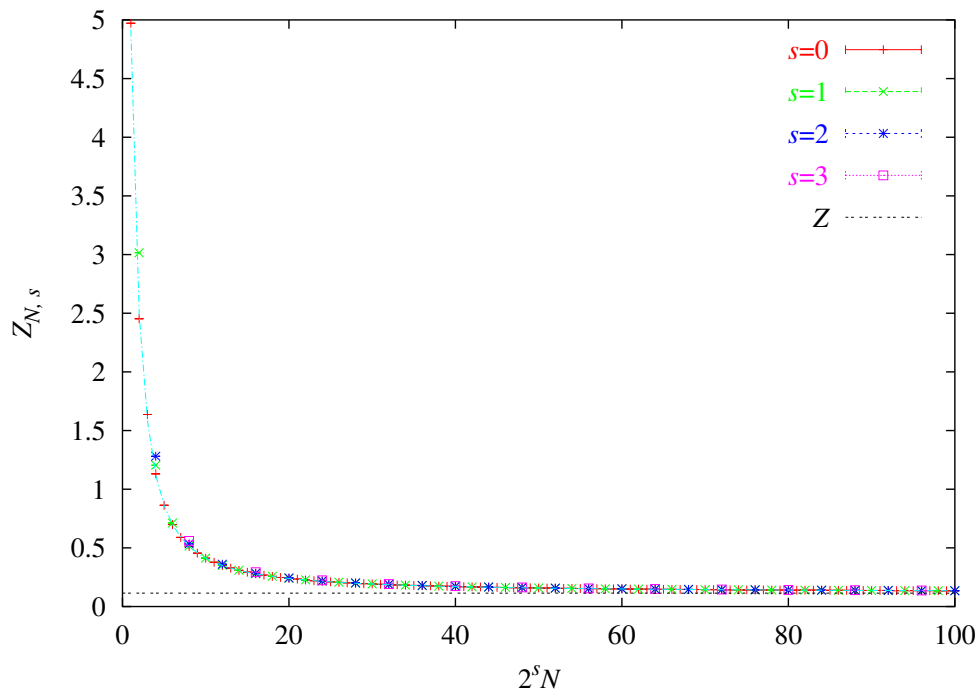
Slika C.13: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.088615(5)$ ,  $Z_{s=1} = 0.088611(7)$ ,  $Z_{s=2} = 0.088611(7)$ ,  $Z_{s=3} = 0.088611(7)$ . Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.14: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.15: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0} = 0.11280(2)$ ,  $Z_{s=1} = 0.11280(2)$ ,  $Z_{s=2} = 0.11279(2)$ ,  $Z_{s=3} = 0.11278(2)$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 10$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.16: Vrednosti generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 10$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

## C.2 Linearizovana rekurzivna formula

U ovom odeljku su prikazani grafici koji ilustruju važenje i osobine linearizovane rekurzivne formule, definisane izrazima (4.3) i (4.4). Dati su rezultati dobijeni za različite vrednosti parametara razmatrane teorije, definisane euklidskim lagranžijanom

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4!}q^4 - jq,$$

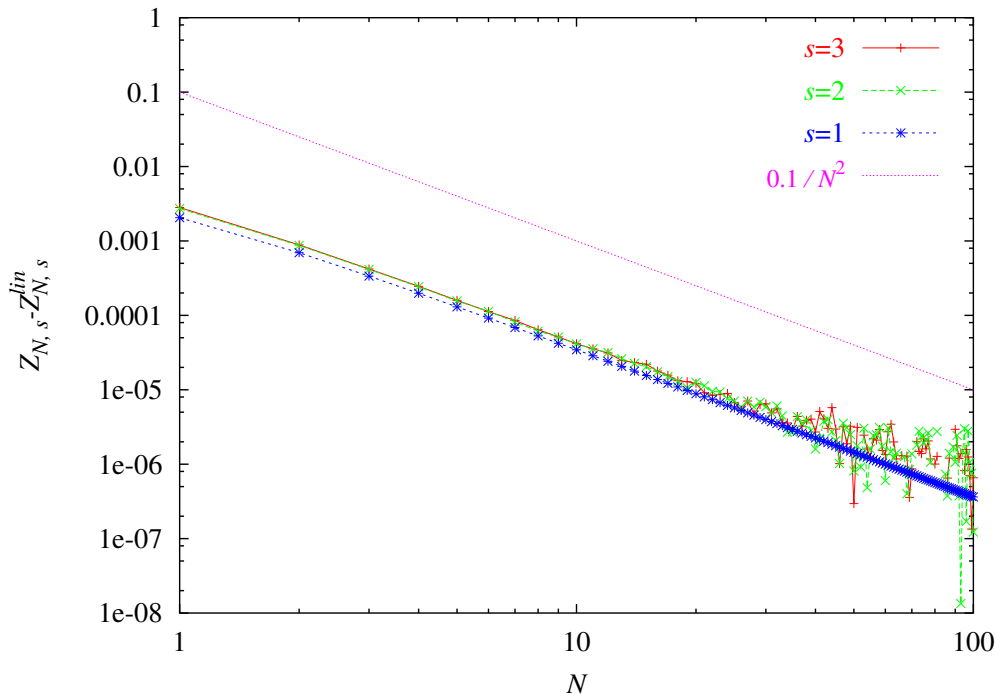
uz granične uslove  $q(0) = \alpha$  i  $q(T) = \beta$ .

Na slikama C.17 do C.23 pokazano je važenje jednakosti (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ , gde je  $N$  broj koraka u diskretizaciji vremenskog intervala  $T$ .

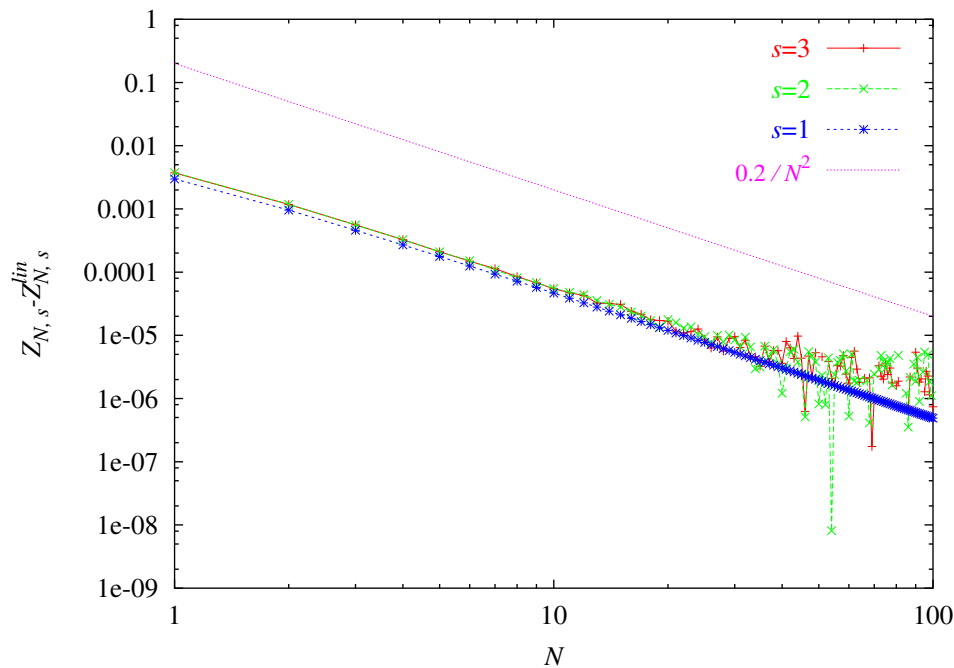
Na slikama C.24 do C.37 prikazana je zavisnost iteriranog generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  od broja vremenskih koraka  $N$ , kao i od efektivnog broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Izvedene relacije za hijerarhiju vrednosti generišućeg funkcionala (3.14) trebalo bi da važe i u slučaju primene linearizovane rekurzivne formule. Prema tome, očekujemo da se sve vrednosti  $Z_{N,s}^{lin}$  približno poklapaju (kolapsiraju na istu krivu) kada se prikažu u zavisnosti od efektivnog broja vremenskih koraka  $2^s N$ .

Na slikama C.38 do C.44 prikazana je  $N$  zavisnost kontinuum limesa  $Z_{N,\infty}^{lin}$  (koji se dobija primenom linearizovane rekurzivne formule za  $s \rightarrow \infty$ ), kao i odgovarajuća  $N$  zavisnost generišućeg funkcionala  $Z_N$ , računatog po definicionoj Fajnmanovoj formuli.

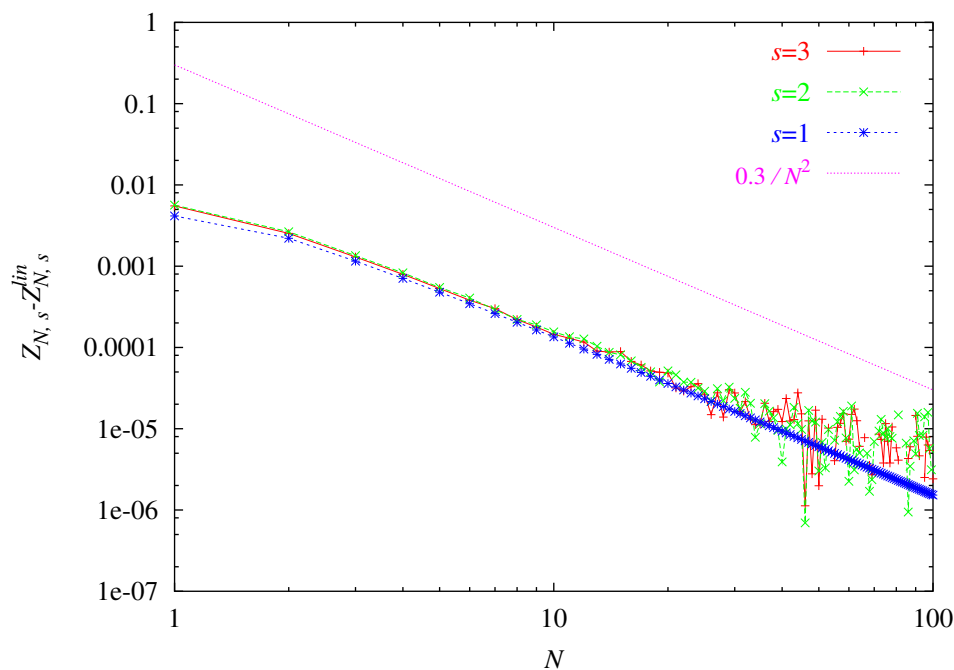
Na kraju, na slikama C.45 i C.46 je pokazano važenje formule (4.14), odnosno odsustvo  $1/N$  člana u polinomijalnom razvoju kontinuum limesa  $Z_{N,\infty}^{lin}$  po  $1/N$ .



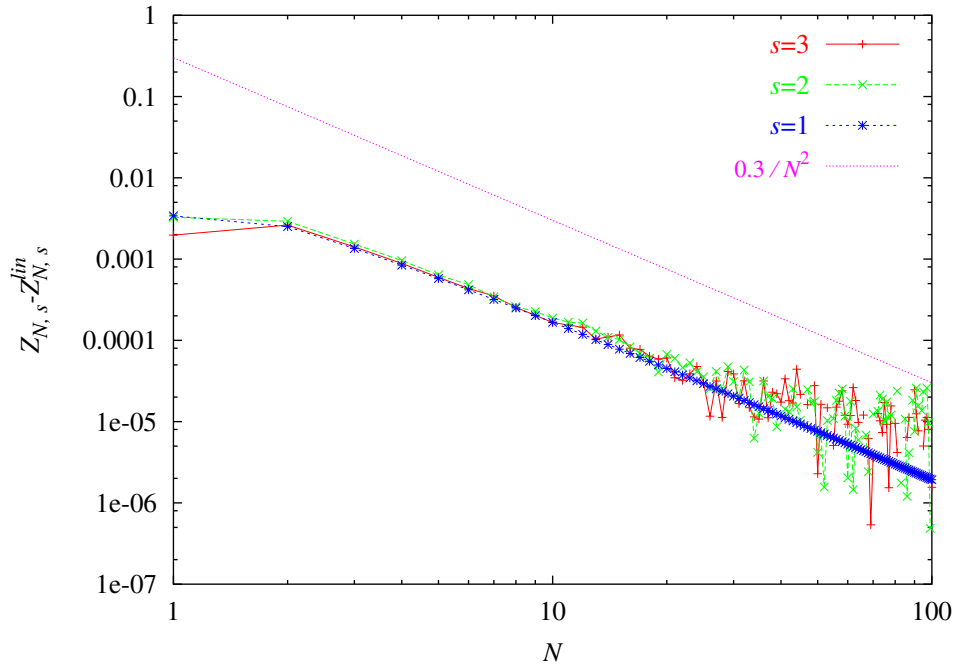
Slika C.17: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.1/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana formula (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



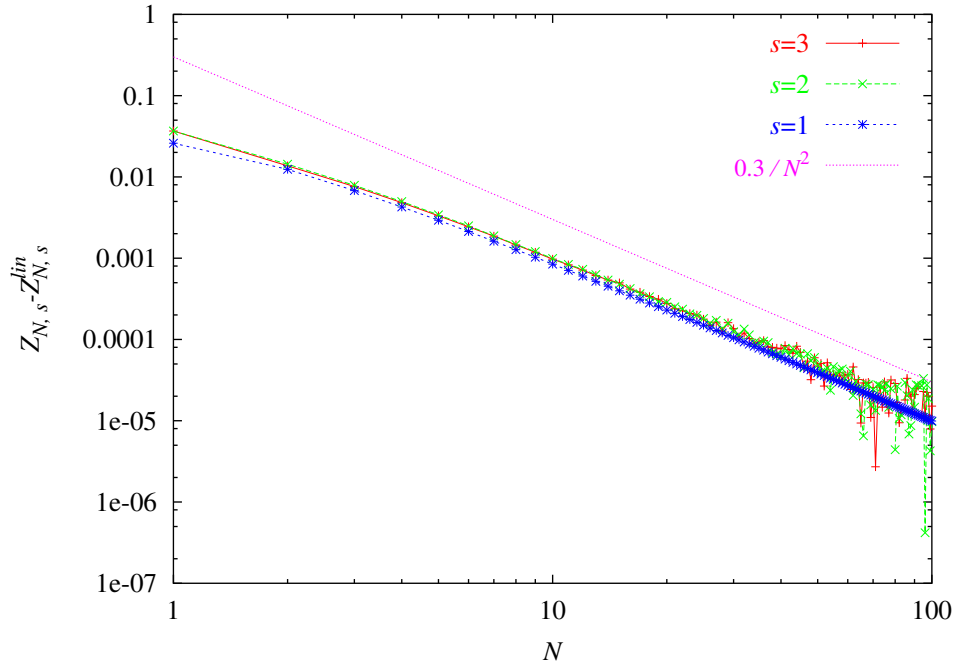
Slika C.18: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.2/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



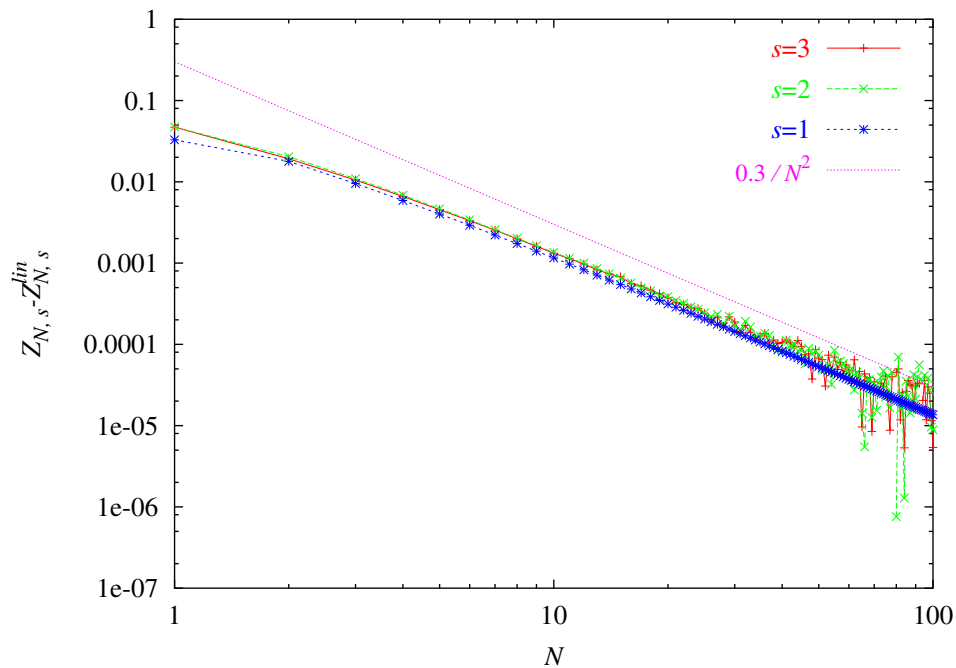
Slika C.19: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.3/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



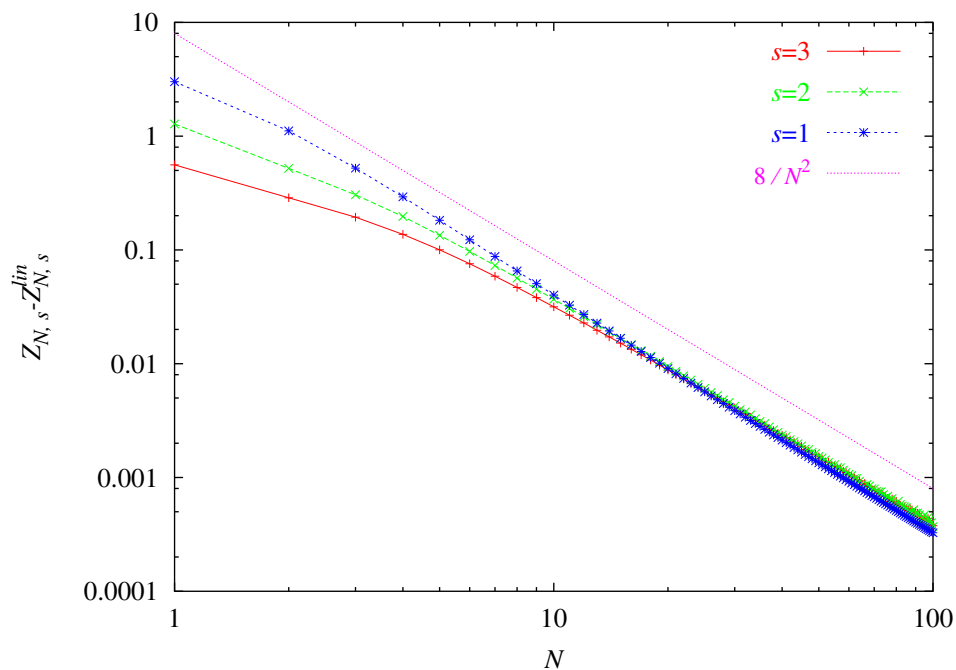
Slika C.20: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iteracije reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.3/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



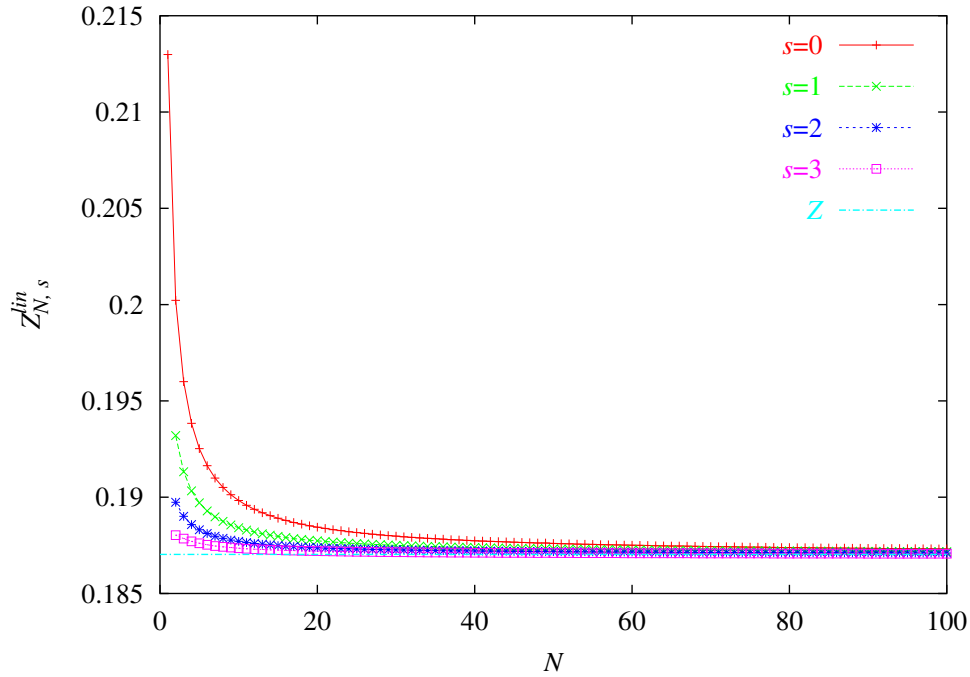
Slika C.21: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iteracije reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.3/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



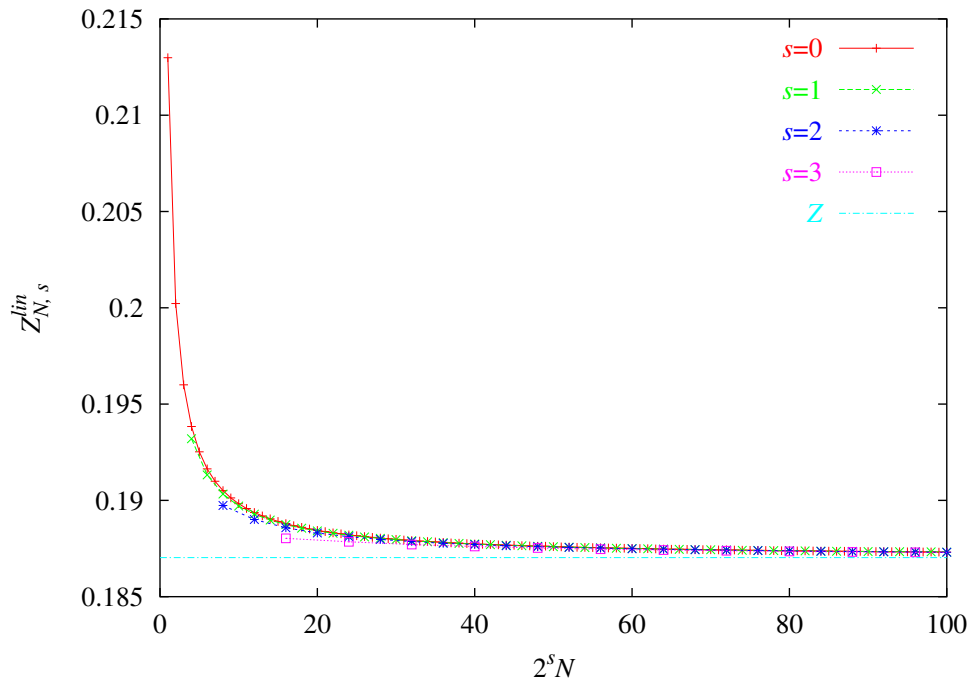
Slika C.22: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $0.3/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.23: Vrednost razlike ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s} - Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Prikazani su rezultati za iterate reda  $s = 1, 2, 3$ . Na grafiku je data i pogodna kriva  $8/N^2$ , kako bi se lakše videlo da ispitivana zavisnost zaista ima dominantan član  $1/N^2$ . Na ovaj način je pokazana jednakost (4.10), odnosno pokazano je da linearizacija unosi grešku reda  $1/N^2$ . Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 10$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

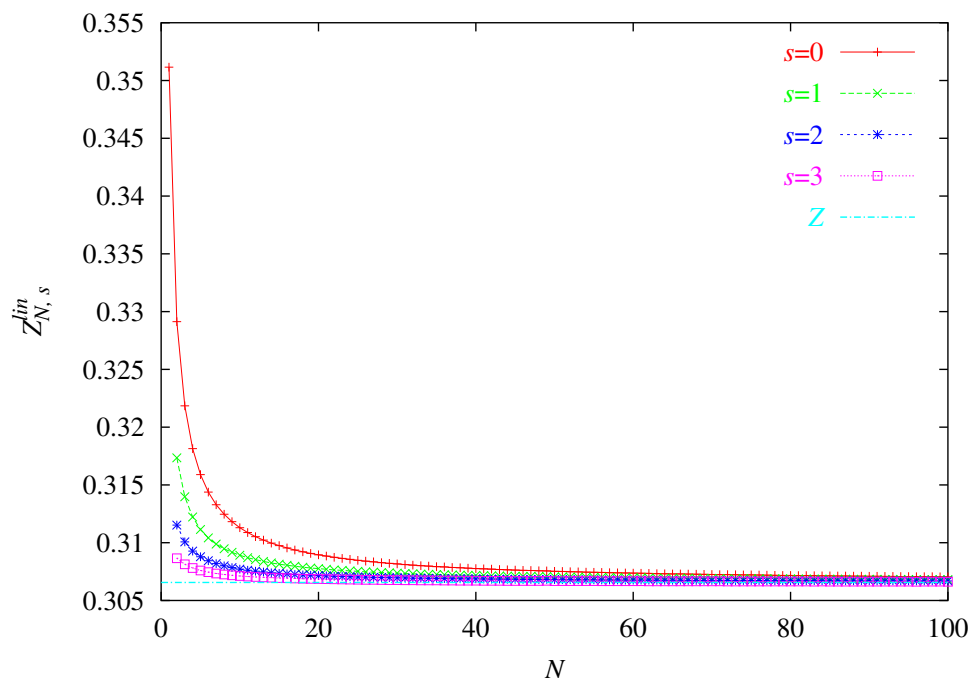


Slika C.24: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.1870294(3)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.1870292(4)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.1870292(4)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.1870293(4)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1, j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

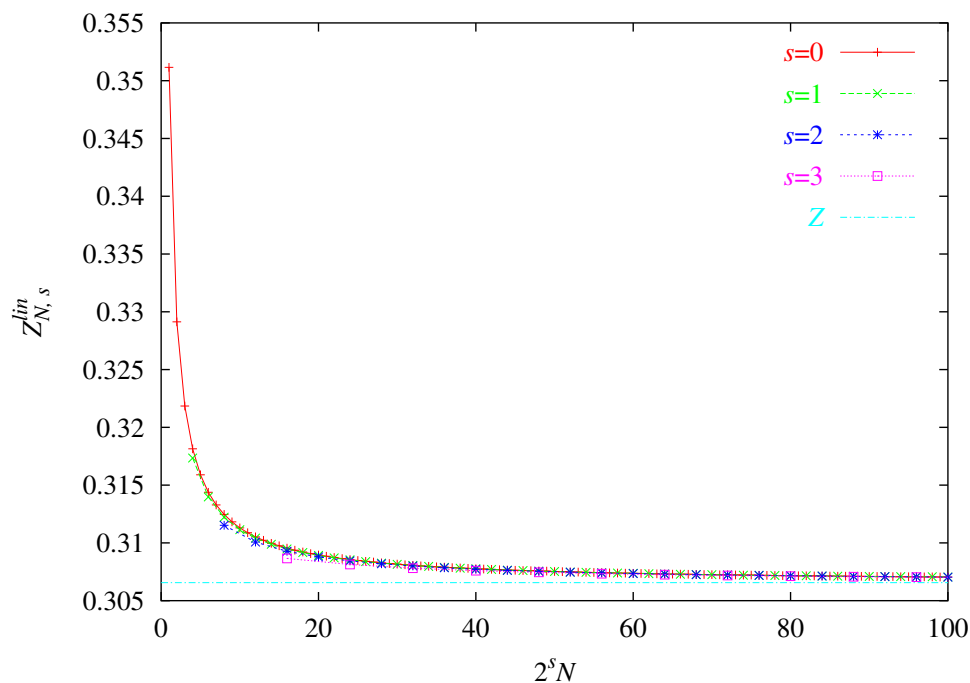


Slika C.25: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1, j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

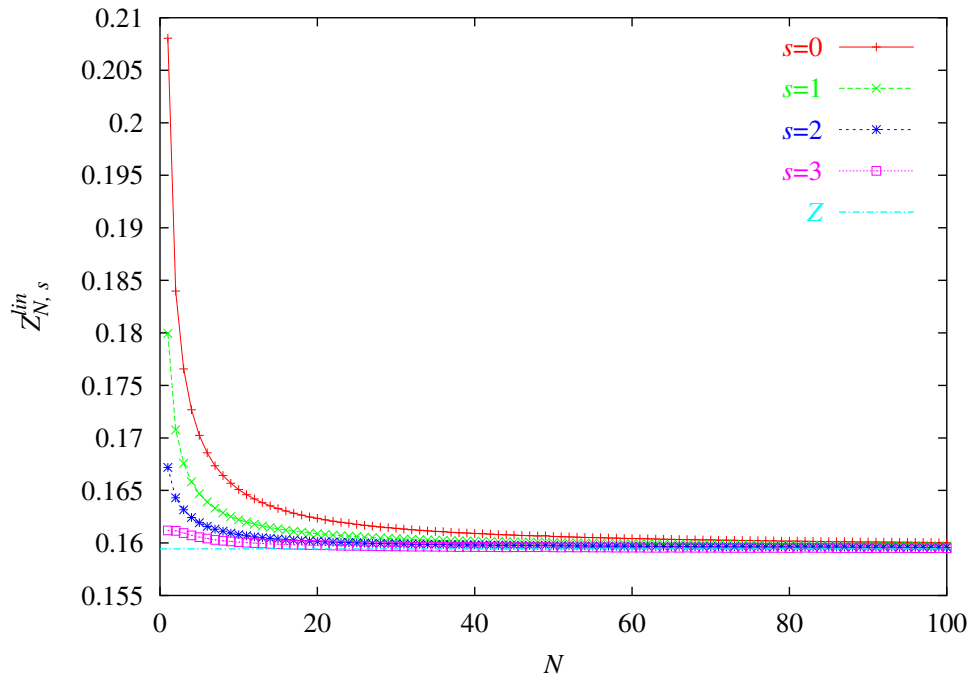




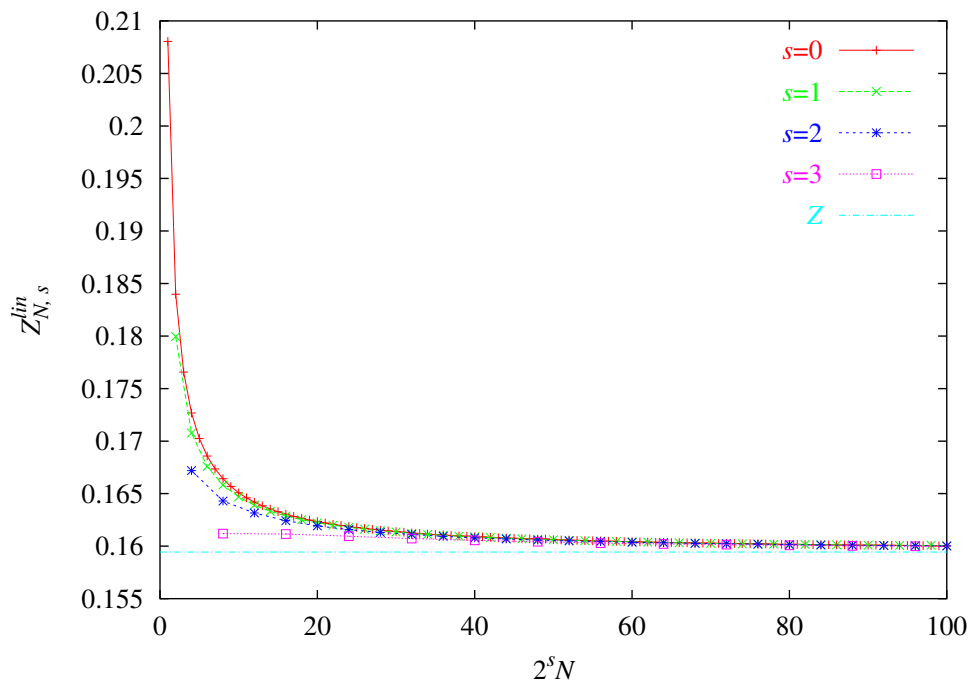
Slika C.26: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.3065648(5)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.3065643(6)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.3065643(6)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.3065646(6)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



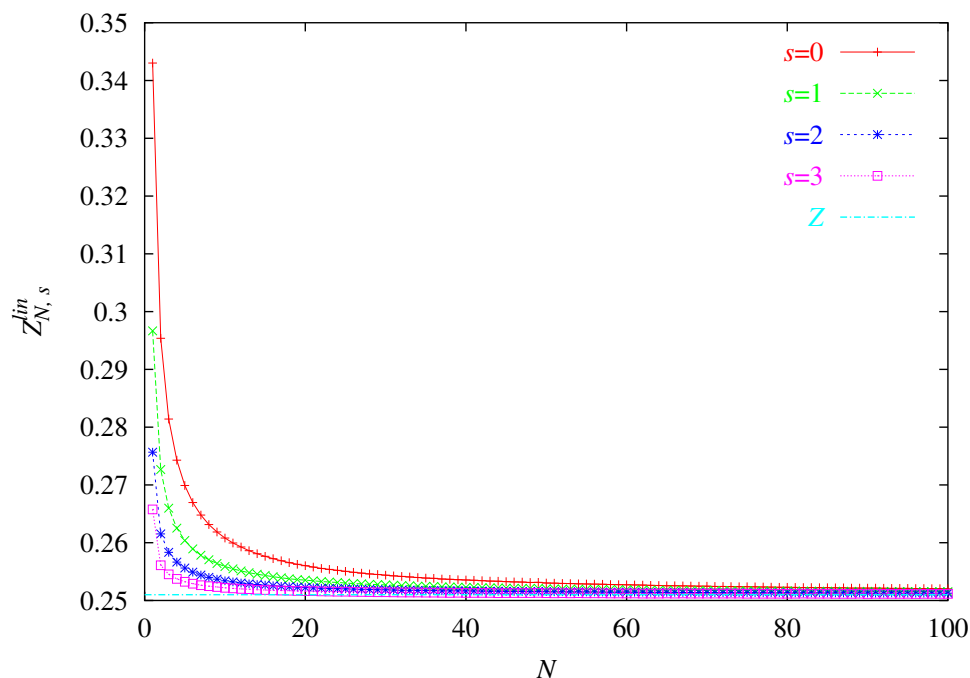
Slika C.27: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



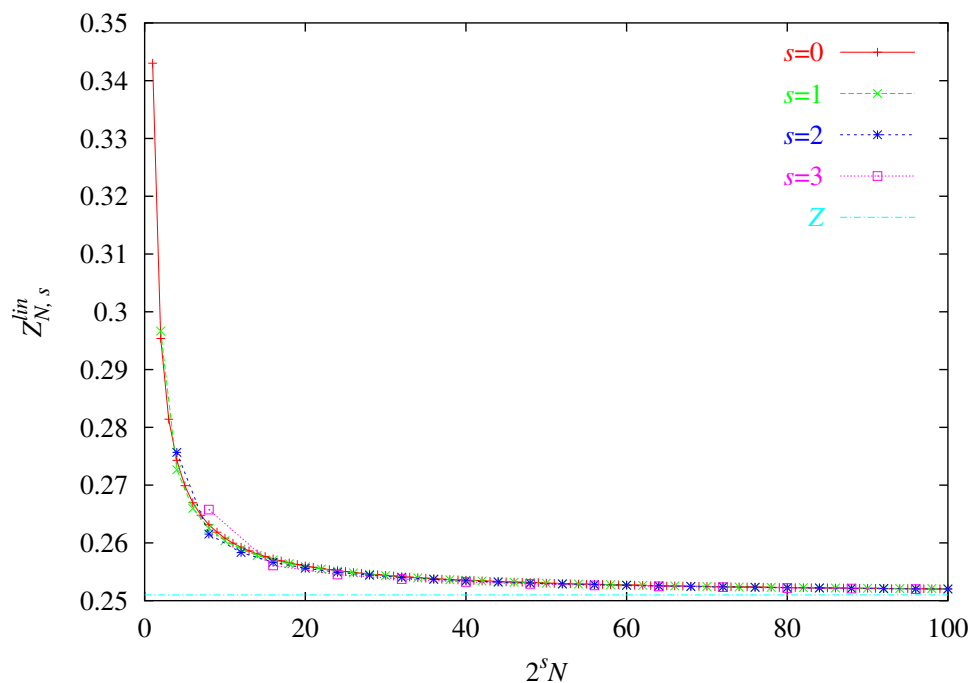
Slika C.28: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.159436(2)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.159436(2)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.159437(2)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.159437(2)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



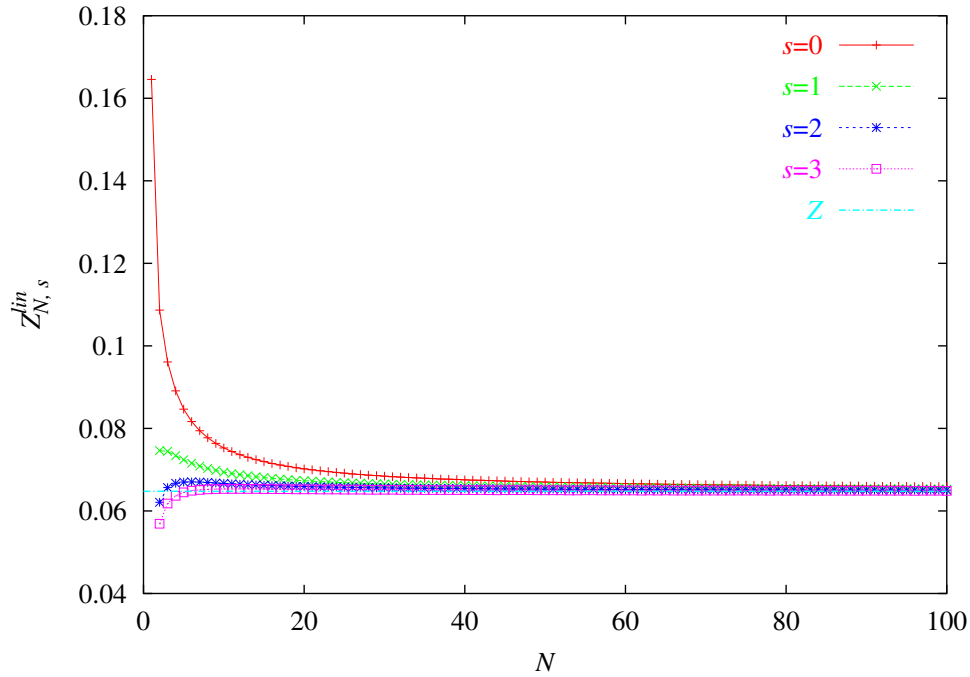
Slika C.29: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



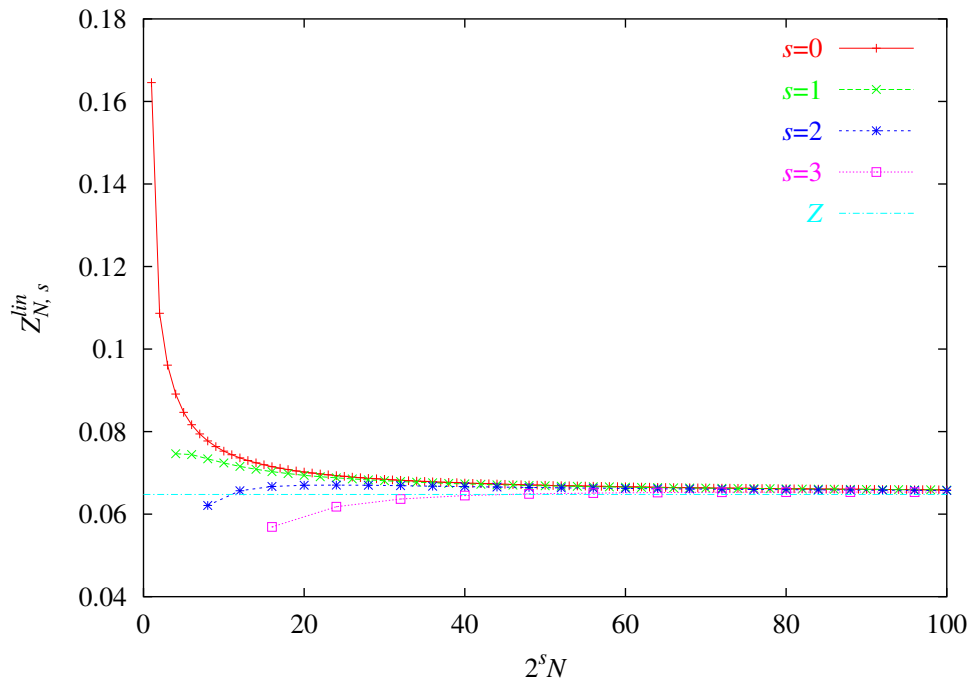
Slika C.30: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.251007(3)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.251006(3)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.251008(3)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.251010(3)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



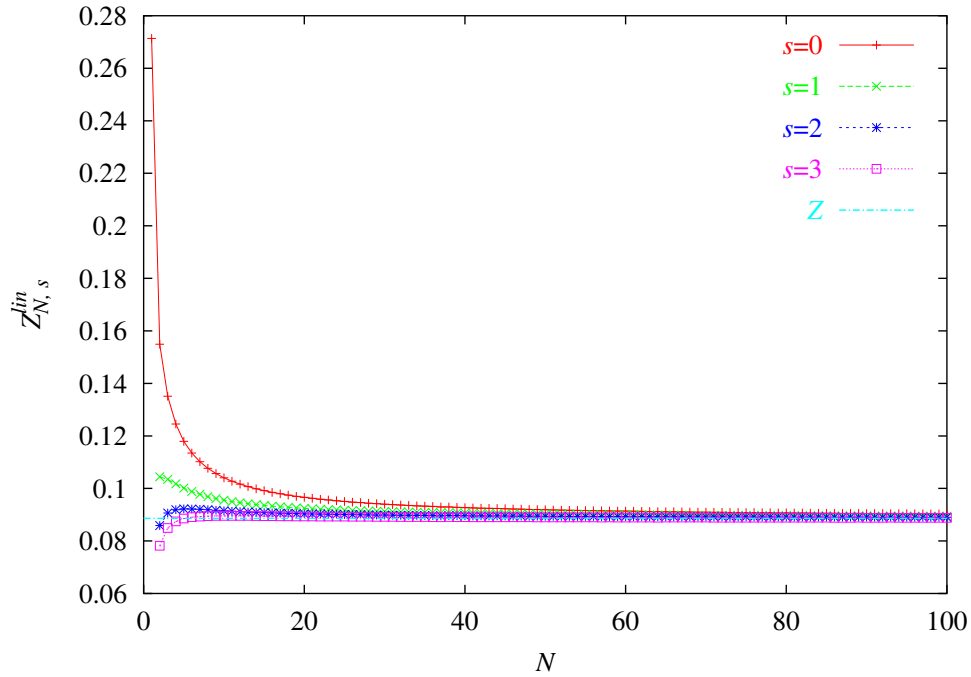
Slika C.31: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



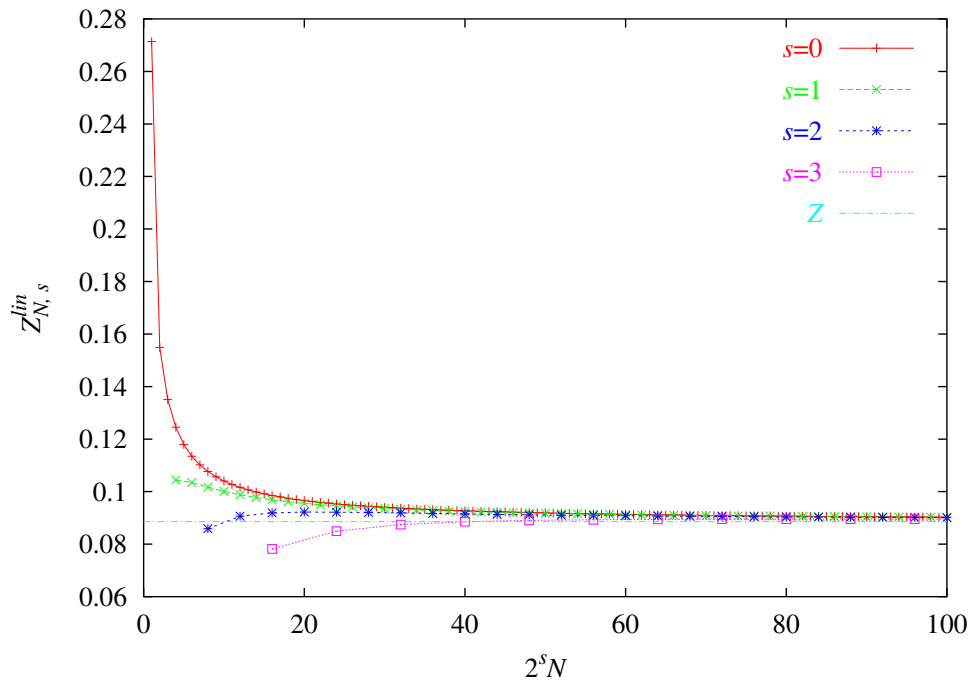
Slika C.32: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.064754(3)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.064753(3)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.064756(3)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.064755(3)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



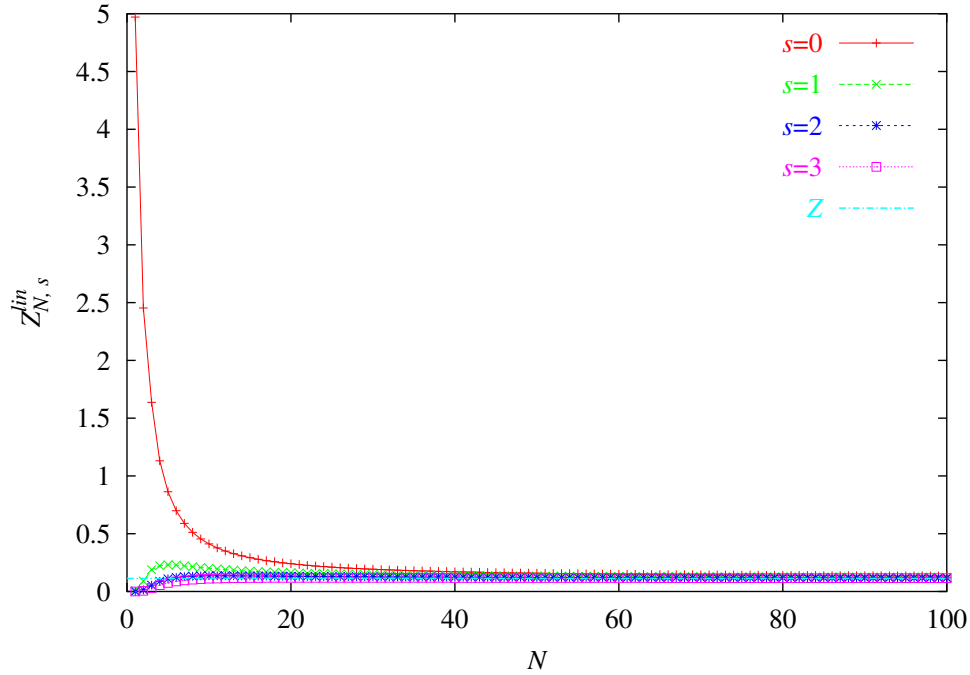
Slika C.33: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



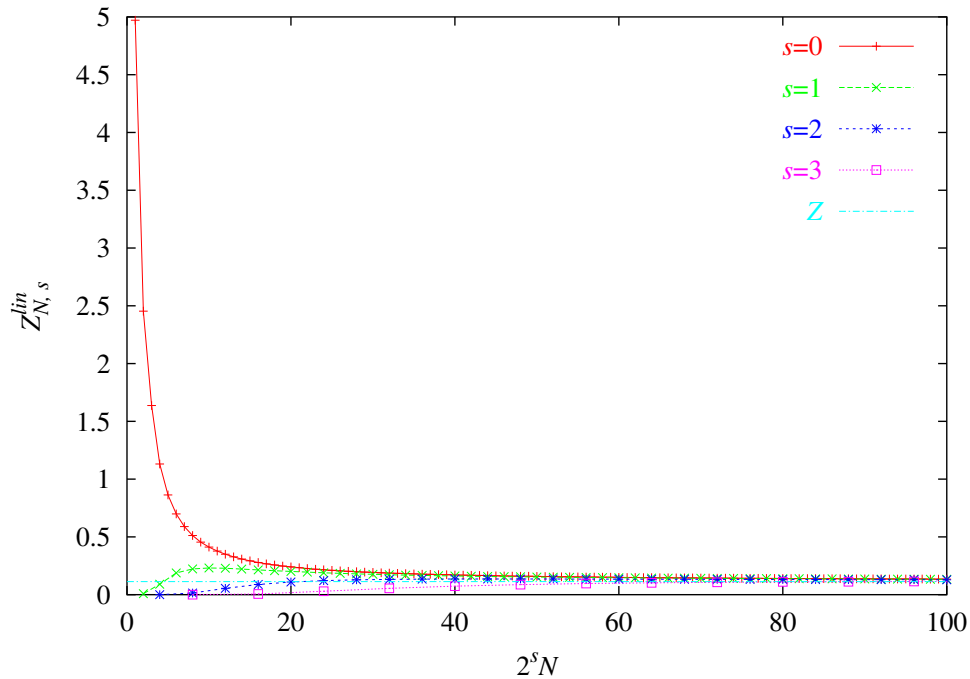
Slika C.34: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.088615(5)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.088616(5)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.088618(5)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.088619(4)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



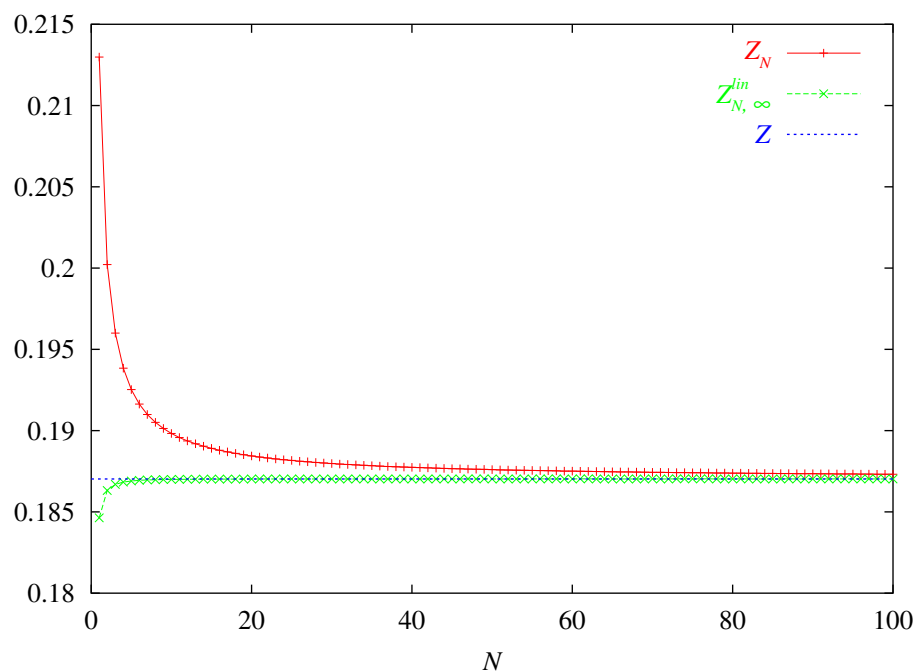
Slika C.35: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



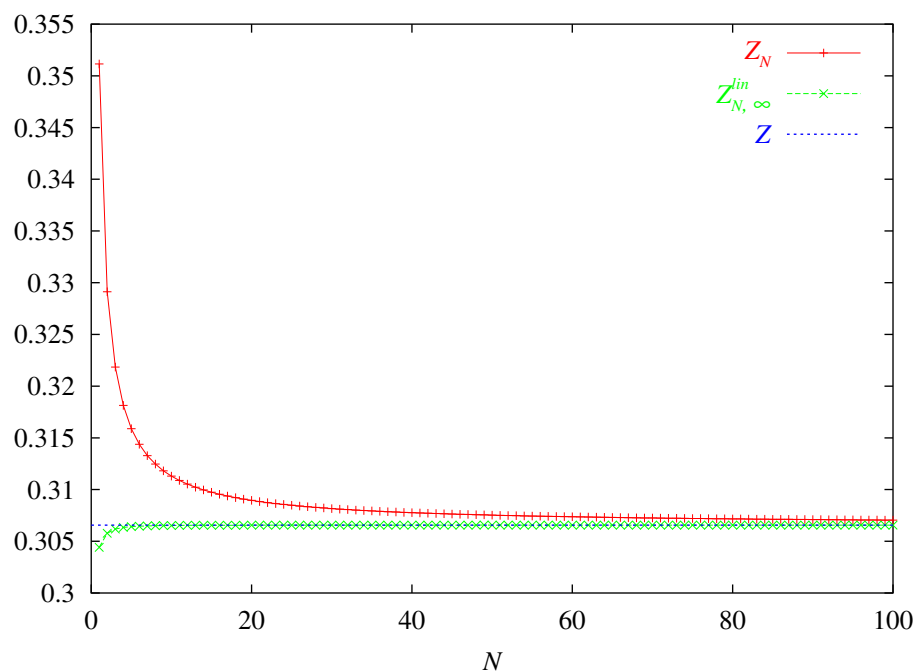
Slika C.36: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazane su iterativne vrednosti reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{s=0}^{lin} = 0.11280(2)$ ,  $Z_{s=1}^{lin} = 0.11280(2)$ ,  $Z_{s=2}^{lin} = 0.11279(2)$ ,  $Z_{s=3}^{lin} = 0.11279(2)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 10$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



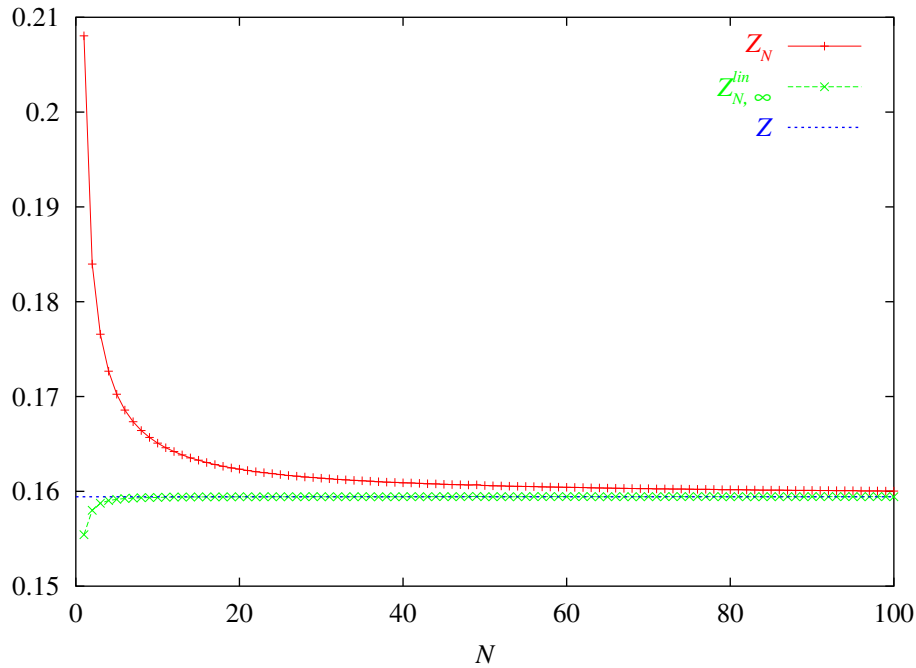
Slika C.37: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,s}^{lin}$  u zavisnosti od efektivne vrednosti broja vremenskih koraka  $2^s N$ . Prikazani su iterati reda  $s = 0, 1, 2, 3$ , kao i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 10$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



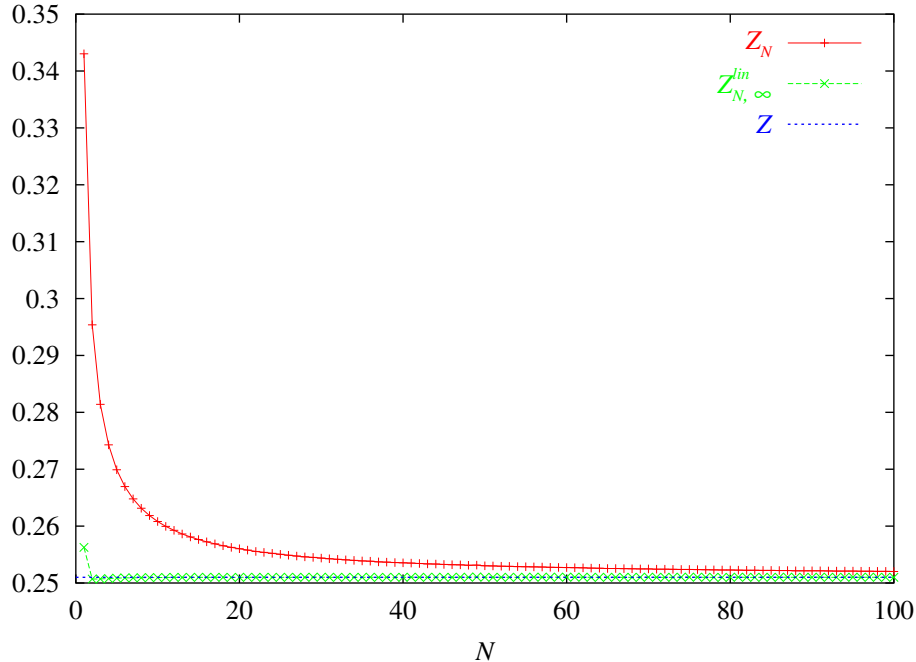
Slika C.38: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N, \infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.1870291(4)$ , a  $Z = 0.1870294(3)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.39: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N, \infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.3065640(3)$ , a  $Z = 0.3065648(5)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

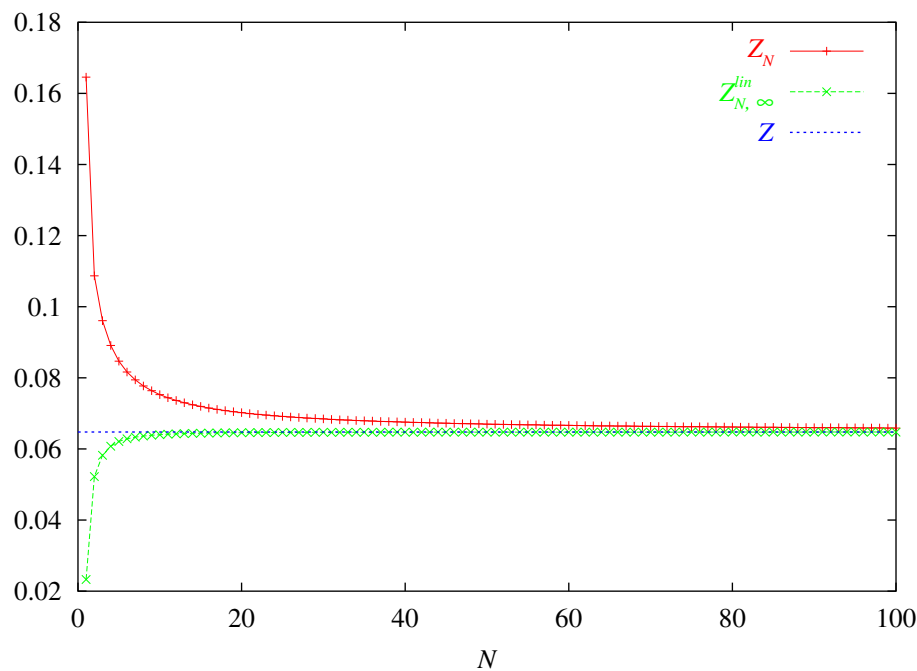


Slika C.40: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,\infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.1594354(9)$ , a  $Z = 0.159436(2)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

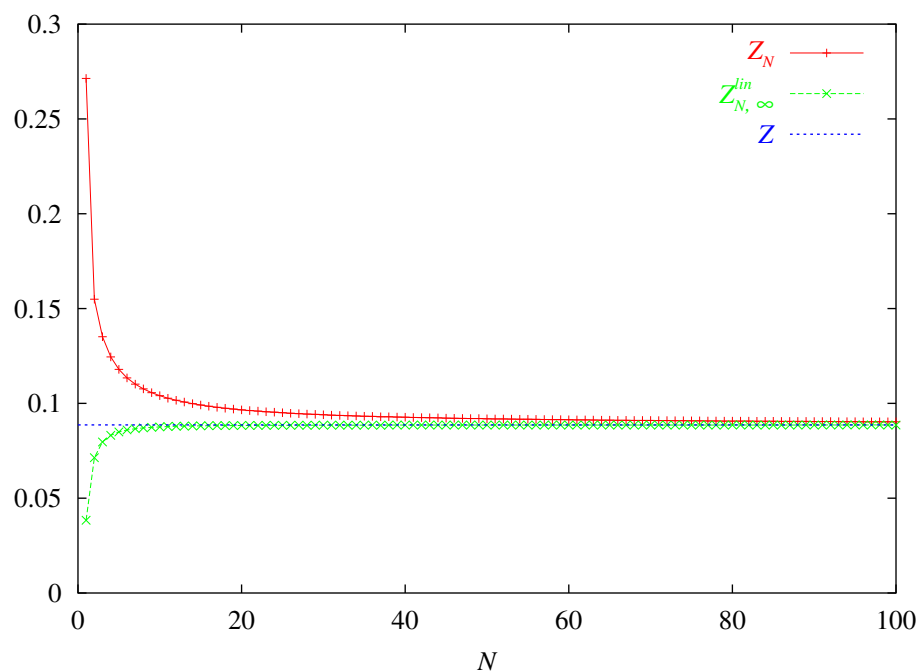


Slika C.41: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,\infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.251006(2)$ , a  $Z = 0.251007(3)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 10$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

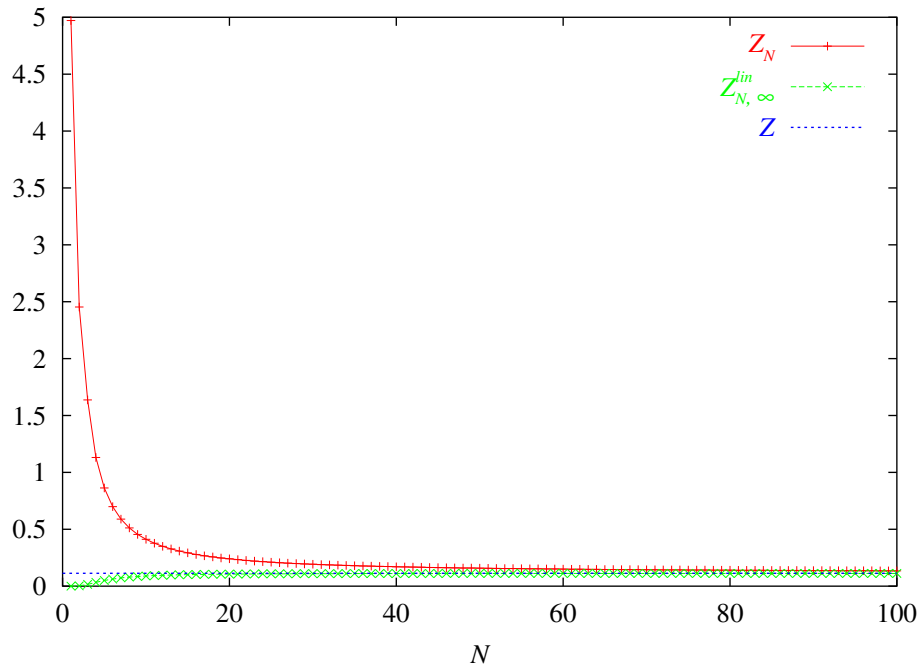




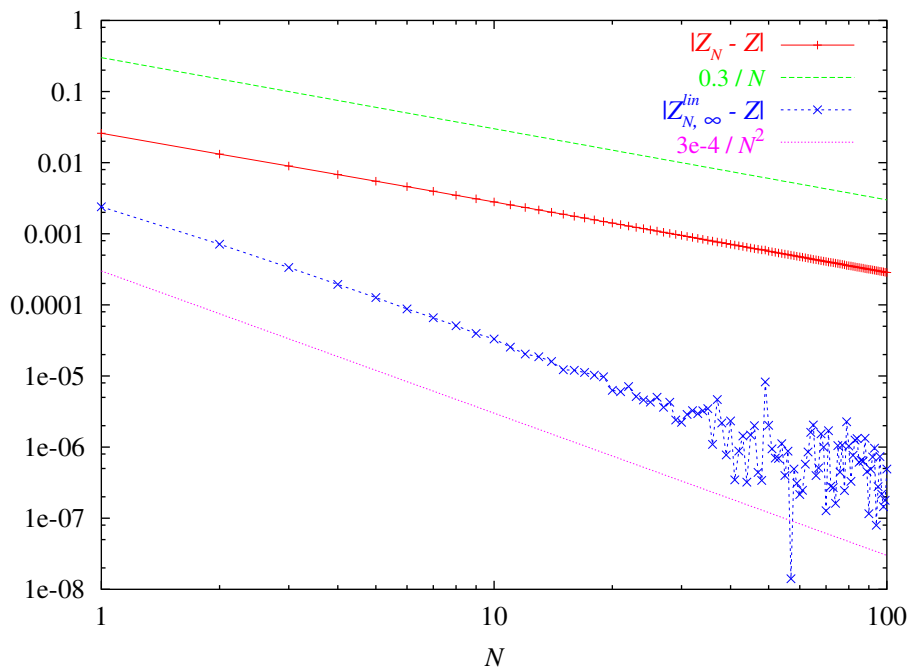
Slika C.42: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N, \infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.064752(3)$ , a  $Z = 0.064754(3)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



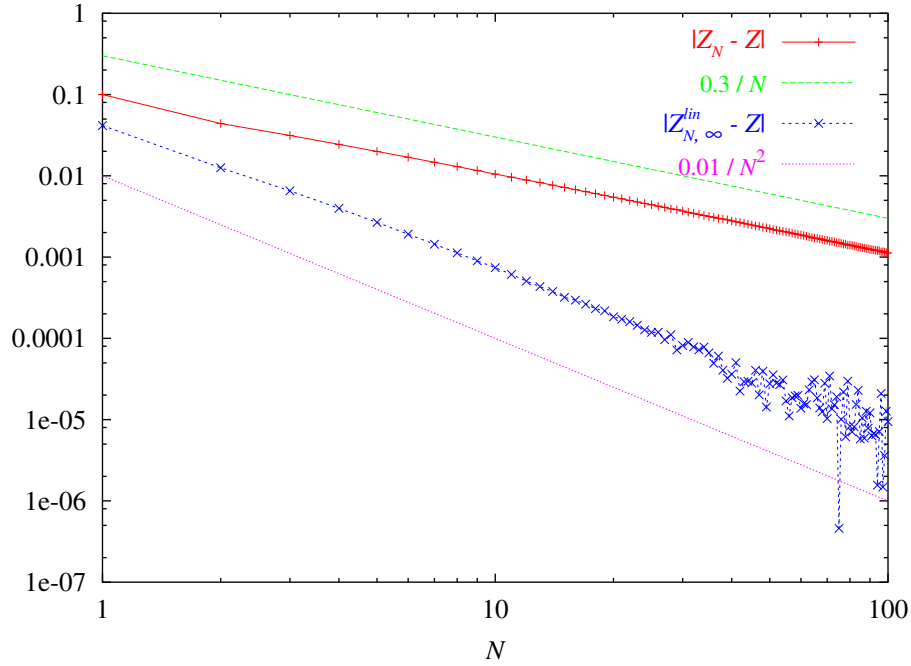
Slika C.43: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N, \infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.088614(2)$ , a  $Z = 0.088615(5)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekurzivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.44: Vrednosti ocena generišućeg funkcionala  $Z_{N,\infty}^{lin}$  i  $Z_N$  u zavisnosti od  $N$ . Prikazana je i zajednička vrednost  $Z$ , dobijena fitovanjem, pri čemu je  $Z_{\infty}^{lin} = 0.11281(1)$ , a  $Z = 0.11280(2)$ . Ove vrednosti su u saglasnosti sa vrednostima dobijenim za originalnu i linearizovanu rekursivnu formulu. Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 1$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 10$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.45: Apsolutne vrednosti razlika ocena generišućeg funkcionala  $|Z_N - Z|$  i  $|Z_{N,\infty}^{lin} - Z|$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Na grafiku su date i pogodne krive  $0.3/N$  i  $3 \cdot 10^{-4}/N^2$ , kako bi se lakše videlo da prva zavisnost ima dominantan član reda  $1/N$ , a druga reda  $1/N^2$ . Na ovaj način je provereno važenje relacija (2.8) i (4.14). Parametri teorije su  $g = 1$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.46: Apsolutne vrednosti razlika ocena generišućeg funkcionala  $|Z_N - Z|$  i  $|Z_{N,\infty}^{lin} - Z|$  u zavisnosti od broja vremenskih koraka  $N$ . Na grafiku su date i pogodne krive  $0.3/N$  i  $0.01/N^2$ , kako bi se lakše videlo da prva zavisnost ima dominantan član reda  $1/N$ , a druga reda  $1/N^2$ . Na ovaj način je provereno važenje relacija (2.8) i (4.14). Parametri teorije su  $g = 100$ ,  $j = 0$ , posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ , a broj Monte Karlo koraka je  $N_{MC} = 10^7$ .

### C.3 Aproksimativna algebarska formula

U ovom odeljku, na slikama C.47 do C.49, prikazani su grafici koji ilustruju primenu algebarskih analitičkih aproksimativnih formula za generišući funkcional u petom poglavlju. Na graficima su date zavisnosti aproksimativnih vrednosti generišućeg funkcionala od spoljašnje struje  $j$  za teoriju definisanu lagranžijanom

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4!}q^4 - jq,$$

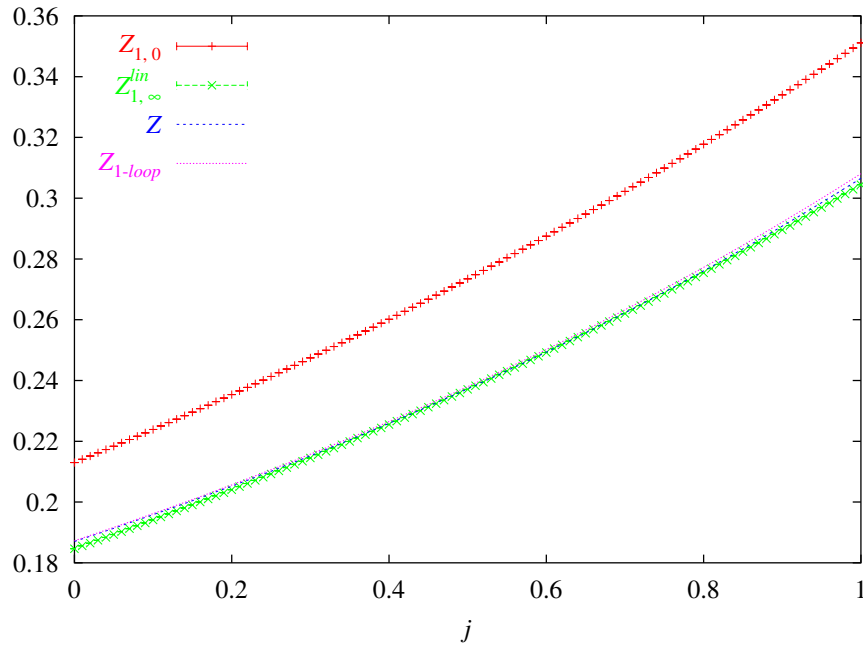
uz granične uslove  $q(0) = \alpha$  i  $q(T) = \beta$ . Prikazane su zavisnosti dobijene primenom algebarske aproksimativne formule (5.1) za  $s = 0$ ,

$$Z_{1,0} = Z_1[G, V] = \sqrt{\frac{G\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)}{2\pi T}} \exp\left\{-\frac{(\beta-\alpha)^2}{2T}G\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right) - TV\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)\right\},$$

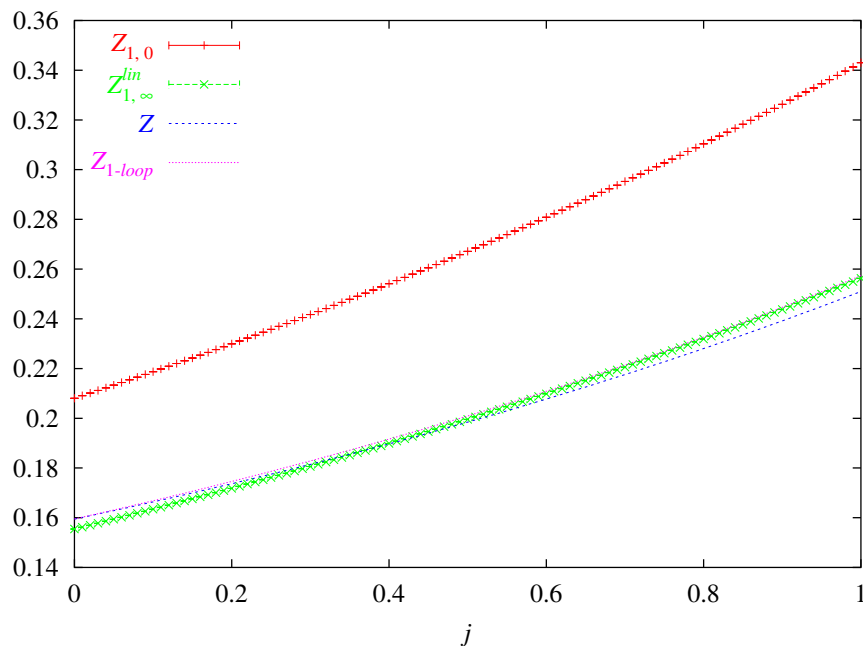
i zavisnosti koje se dobijaju na osnovu aproksimativne algebarske formule (5.2), primenom kontinuum limesa linearizovane rekurzivne formule,

$$Z_{1,\infty}^{lin} = Z_1[G_\infty^{lin}, V_\infty^{lin}] = \sqrt{\frac{G_\infty^{lin}\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)}{2\pi T}} \exp\left\{-\frac{(\beta-\alpha)^2}{2T}G_\infty^{lin}\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right) - TV_\infty^{lin}\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)\right\},$$

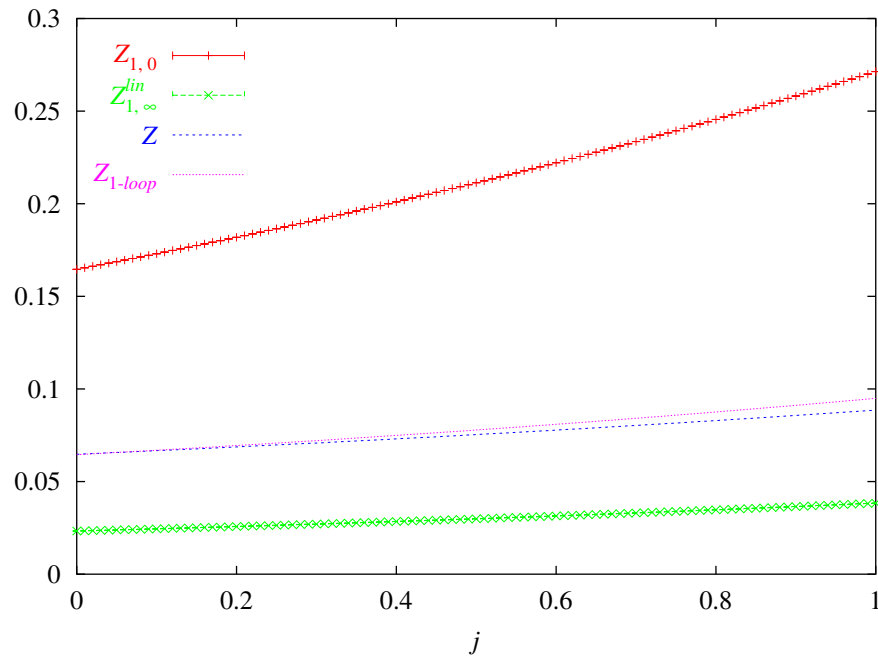
gde su funkcije  $G_\infty^{lin}$  i  $V_\infty^{lin}$  date izrazima (4.12) i (4.13). Radi poređenja, na graficima je prikazana i egzaktna  $j$  zavisnost generišućeg funkcionala  $Z(j)$ , kao i  $j$  zavisnost semiklasične vrednosti do na jednu petlju za generišući funkcional  $Z_{1-loop}(j)$ .



Slika C.47: Ocene generišućeg funkcionala  $Z_{1,0} = Z_1$  (originalna rekurzivna formula),  $Z_{1,\infty}^{lin}$  (kontinuum limes linearizovane rekurzivne formule), generišući funkcional  $Z$  (egzaktna vrednost dobijena fitovanjem polinoma po  $1/N$  na odgovarajuću  $Z_N$  zavisnost) i semiklasična vrednost za generišući funkcional  $Z_{1-loop}$  do na jednu petlju u zavisnosti od spoljašnje struje  $j$ . Parametar teorije je  $g = 1$ , a posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ . Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktnosti generišućeg funkcionala je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.48: Ocene generišućeg funkcionala  $Z_{1,0} = Z_1$  (originalna rekurzivna formula),  $Z_{1,\infty}^{lin}$  (kontinuum limes linearizovane rekurzivne formule), generišući funkcional  $Z$  (egzaktna vrednost dobijena fitovanjem polinoma po  $1/N$  na odgovarajuću  $Z_N$  zavisnost) i semiklasična vrednost za generišući funkcional  $Z_{1-loop}$  do na jednu petlju u zavisnosti od spoljašnje struje  $j$ . Parametar teorije je  $g = 10$ , a posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ . Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktnosti generišućeg funkcionala je  $N_{MC} = 10^7$ .



Slika C.49: Ocene generišućeg funkcionala  $Z_{1,0} = Z_1$  (originalna rekurzivna formula),  $Z_{1,\infty}^{lin}$  (kontinuum limes linearizovane rekurzivne formule), generišući funkcional  $Z$  (egzaktne vrednosti dobijene fitovanjem polinoma po  $1/N$  na odgovarajuću  $Z_N$  zavisnost) i semiklasična vrednost za generišući funkcional  $Z_{1-loop}$  do na jednu petlju u zavisnosti od spoljašnje struje  $j$ . Parametar teorije je  $g = 100$ , a posmatrani vremenski interval evolucije je  $T = 1$ . Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktne vrednosti generišućeg funkcionala je  $N_{MC} = 10^7$ .



# Literatura

- [1] P. A. M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowietunion* **3** (1933) 64.
- [2] N. Wiener, *J. Math. and Phys. Sci.* **2** (1923) 132.
- [3] R. MacKenzie, arXiv:quant-ph/0004090
- [4] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.
- [5] H. Weyl, *Zeitschrift für Physik* **46** (1927) 1.
- [6] H. Weyl, *Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Dover, 1950
- [7] M. M. Mizrahi, *J. Math. Phys.* **16** (1975) 2201.
- [8] J. R. Shewell, *Am. J. Phys.* **27** (1959) 16.
- [9] F. Herbut, *Kvantna mehanika za istraživače*, Prirodno–matematički fakultet, Beograd, 1983.
- [10] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw–Hill, New York, 1965.
- [11] A. Bogojević, *Lectures on Quantum Field Theory*, skripta za predmet Kvantna teorija polja II, Beograd, 1998.
- [12] A. Jevicki, *Extended Particles in Quantum Field Theory*, PhD Thesis, City University of New York, 1976.
- [13] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Facta Universitatis* **1** (1998) 113.
- [14] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, in *Proceedings of the 11th Yugoslav Symposium on Nuclear and Particle Physics* (Studenica, Yugoslavia, 25–28 September 1998), SFIN **A2** (1998) 297.
- [15] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Phys. Low-Dim. Struct.* **5/6** (1999) 1.
- [16] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Phys. Low-Dim. Struct.* **9/10** (1999) 149.
- [17] A. Balaž, A. Belić i A. Bogojević, u *Zborniku radova X kongresa fizičara Jugoslavije* (Vrnjačka Banja, Jugoslavija, 27. – 29. mart 2000.), **knjiga 2** (2000) 843.
- [18] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Phys. Low-Dim. Struct.* **1/2** (2000) 65.
- [19] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press, 1995.

- [20] P. Ramond, *Field Theory: A Modern Primer*, The Benjamin/Cummings Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1981.
- [21] L. Ryder, *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press, 1996.
- [22] 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.
- [23] I. H. Duru and H. Kleinert, Phys. Lett. **84B** (1979) 30.
- [24] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, World Scientific, London, 1990.
- [25] J. S. Kole and H. De Raedt, Phys. Rev. E **64** (2001) 016704.
- [26] C. Grosche, J. Phys. A **28** (1995) 5889.
- [27] M. Blagojević, privatna komunikacija
- [28] M. Kac, in *Proc. 2nd Berkeley Symp. Math. Stat. Probability*, Ed. J. Neyman (1950) 189. (Published by University of California, 1951)
- [29] E. Nelson, J. Math. Phys. **5** (1964) 332.
- [30] G. C. Wick, Phys. Rev. **96** (1954) 1124.
- [31] M. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [32] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo methods, Volume 1: Basics*, John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [33] <http://sourceforge.net/projects/oscar/>
- [34] <http://www.lam-mpi.org/>
- [35] *Joint ICTP-INFM School in "High Performance Computing on Linux Clusters"*, Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, February 2002, Trieste, Italy  
<http://agenda.ictp.trieste.it/agenda/current/fullAgenda.php?ida=a01127>