

Московский государственный университет имени  
М. В. Ломоносова

Физический факультет

Кафедра физики частиц и космологии

## КУРСОВАЯ РАБОТА

Численный расчет функциональных интегралов

Выполнил студент  
4 курса, 443 группы,  
физического факультета  
Иванов А. С.  
Научный руководитель  
д. ф.м. н. Белокуров В. В.

Москва 2014

# Содержание

<b>1 Введение</b>	<b>3</b>
<b>2 Функциональный интеграл</b>	<b>5</b>
2.1 Оператор эволюции . . . . .	5
2.2 Статсумма . . . . .	7
<b>3 Методы Монте-Карло</b>	<b>11</b>
3.1 Метод тепловой бани . . . . .	13
3.2 Метод Метрополиса . . . . .	13
<b>4 Гармонический осциллятор</b>	<b>15</b>
4.1 Наблюдаемые величины . . . . .	15
4.2 Гармонический осциллятор. Метод тепловой бани . . . . .	16
4.3 Гармонический осциллятор. Метод Метрополиса . . . . .	19
<b>5 Ангармонический осциллятор</b>	<b>23</b>
<b>6 Релятивистский осциллятор</b>	<b>25</b>
<b>7 Заключение</b>	<b>28</b>

# 1 Введение

Функциональный интеграл имеет фундаментальное значение в квантовой теории. С его помощью описывается эволюция квантовых систем во времени. Проблемой является вычисление функционального интеграла в общем случае. Для нетривиальных систем не удается провести вычисление явным образом, поэтому становится актуальной задача численного вычисления.

Функциональный интеграл применяется для многих задач, как общих фундаментальных вопросов теории, так и прикладных. Одно из основных уравнений квантовой теории - уравнение Шредингера совпадает по виду с уравнением теплопроводности, но при переходе к мнимому времени. Уравнение теплопроводности с источником, а также уравнение Бюргерса имеют явный вид решения, выраженный через функциональный интеграл [9]. В Преимущество функционального интеграла заключается в том, что можно получить ответ в аналитическом виде. Проблемой является формальность этого вида решения без возможности явно вычислять ответ для разных потенциалов.

Данные уравнения теплопроводности и Бюргерса переходят одно в другое при помощи преобразования Хопфа-Коула. Данное преобразование сводит уравнение Бюргерса к уравнению теплопроводности. Изучение данных уравнений, а также свойств решений для различных начальных и граничных условий было произведено в курсовой работе за 2 курс. Данная работа является продолжением начатого исследования.

Существуют методы численного расчета функциональных интегралов, которые позволяют решать ряд актуальных задач релятивистской квантовой механики и квантовой статистики. Методом численного интегрирования функциональных интегралов могут быть получены релятивистские поправки к одночастичным квантовым системам в сильных полях. Т.к. основные уравнения в физике твердого тела не отличаются от уравнений в квантовой теории поля, то представляется возможным применение всех изученных методов, например, для графена, что является на данный момент актуальной задачей. Важной задачей является расчет релятивистских поправок к атомным уровням тяжелых элементов, например, урана.

С помощью функционального интеграла можно вычислять статистическую сумму термодинамических систем, обладающих достаточно сложным взаимодействием. Вычислив статистическую сумму, можно извлекать из нее всю статистическую информацию о термодинамической системе [6]. Представляется интересным изучать квантовые статистические системы.

Основная цель данной работы - освоение методов численного расчета функциональных интегралов. Чтобы определить возможности изучаемых методов. Расчет функционального интеграла по определению через кратные интегралы сопряжен с рядом трудностей, например, сложность алгоритмов(время, требуемое на вычисление) экспоненциально зависит от размерности задачи. Из-за больших объемов вычислений накапливается ошибка, что является минусом детерминированных методов. Основное преимущество стохастических методов в том, что они имеют полиномиальную сложность алгоритмов, ошибка округления из-за сравнительно меньших объемов вычислений становится приемлемой.

Разработаны методы стохастического интегрирования, получившие общее название методов Монте-Карло. Данные методы подробно изложены в 3 части предлагаемой

емой работы. Произведено их сравнение, описаны преимущества и недостатки.

В качестве проверки возможностей предложенных методов в 4 части исследован гармонический осциллятор. Гармонический осциллятор - точно решаемая задача: все результаты можно сравнить с аналитическими выражениями. Как будет показано в дальнейшем, результаты согласуются с теорией.

В 5 части рассмотрен ангармонический осциллятор(ангармоничность -  $\lambda q^4$ ). Произведено сравнение результатов со значениями, полученными по теории возмущения. В пределах нескольких стандартных отклонений наблюдается согласие результатов. Расчеты произведены на обычном персональном компьютере. Более точное вычисление требует большей мощности, поэтому предполагается дальнейшее уменьшение погрешности за счет использования суперкомпьютера.

В данной работе рассматривается обобщение задачи гармонического осциллятора на релятивистский случай [14]. В 6 части приведено описание данной задачи. Несмотря на то, что теперь функциональный интеграл не является стандартно квадратичным или гауссовым, интеграл по импульсу выражается аналитически через функцию Макдональда. Этот факт делает возможным применение методов Монте-Карло. В двухмерном случае выражение имеет явный вид через простые функции, поэтому скорость его вычисления заметно выше по сравнению с одномерным и трехмерным случаем. Двухмерный случай имеет важное применение в теории графена. Трехмерный случай имеет применение в задаче тяжелых ядер, где определение релятивистских поправок к уровням состояния представляет собой трудную задачу.

Настоящую работу можно рассматривать как продолжение исследования, начатого на 2 курсе по теме "Функциональный интеграл".

## 2 Функциональный интеграл

### 2.1 Оператор эволюции

Рассмотрим квантовую систему, имеющую гамильтониан  $H$ . Пусть в начальный момент  $t = 0$  система находится в состоянии  $|\psi(t=0)\rangle$ . Тогда значение волновой функции в произвольные момент времени  $t$  можно получить при помощи оператора эволюции квантовой системы [1], [3]

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi(0)\rangle,$$

где

$$U(t, 0) = T \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H d\tau \right],$$

причем

$$U(0, 0) = 1.$$

Если гамильтониан квадратичен по импульсу, то матричный элемент оператора эволюции в координатном представлении можно записать

$$\langle q' | U(t', t'') | q'' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dq(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S(t', t'')},$$

где

$$S(t', t'') = \int_{t'}^{t''} L d\tau.$$

$L$  – лагранжин системы.

Если осуществить переход к мнимому времени, то можно получить определение функционального интеграла, удобное для дальнейших вычислений. Формализм, полученный при замене времени, можно применять и к статистической механике.

Приведем определение функционального интеграла в мнимом времени [2]. Пусть  $U(t, t')$  – ограниченный оператор в гильбертовом пространстве, удовлетворяющий свойству марковости, дифференцируемый и обладающий непрерывной производной:

$$U(t, t'')U(t'', t') = U(t, t'), \text{ при } t \geq t'' \geq t' \text{ и } U(t', t') = 1, \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial U(t, t')}{\partial t} \right|_{t=t'} = -\frac{H(t)}{\hbar}. \quad (2)$$

Решение в стационарном случае имеет вид

$$U(t, t') = U(t - t') = e^{-(t-t')\frac{H}{\hbar}},$$

или можно записать в виде

$$U(\hbar\beta, 0) = e^{-\beta H}.$$

Теперь можно записать оператор  $U(t'', t')$  в координатном представлении:

$$\langle q''|U(t'', t')|q'\rangle = \int \prod_{k=1}^{n-1} dq_k \prod_{k=1}^n \langle q_k|U(t_k, t_{k-1})|q_{k-1}\rangle, \quad (3)$$

где  $t_k = t' + k\tau$ ,  $q_0 = q'$ ,  $q_n = q''$ . Вычисление матричного элемента оператора  $U(t'', t')$  не всегда получается выполнить, но для бесконечно малых временных интервалов можно применять асимптотическую оценку. Если оператор  $H(t)$  - локален, то матричный элемент представлени (3) можно построить в виде функционального интеграла. В данной работе  $H(t) = H$  - гамильтониан, не зависящий от времени. Оператор  $U(\hbar\beta, 0)$  - квантовый статистический оператор. Решение уравнения Шредингера с классическим кинетическим членом в координатном базисе в мнимом времени(или уравнения теплопроводности с источником)

$$\begin{cases} -\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q|U(t, t')|q'\rangle = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q, t) \right) \langle q|U(t, t')|q'\rangle \\ \langle q|U(t', t')|q'\rangle = \delta(q - q'), \end{cases} \quad (4)$$

записывается в виде :

$$\langle q|U(t, t')|q'\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t-t')}} \exp\left[-\frac{S(q)}{\hbar}\right], \quad (5)$$

где

$$S(q) = \int_t^{t'} ds \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(s) + V(q(s), s) \right] + O((t-t')^2). \quad (6)$$

В пределе  $t - t' \rightarrow 0$  ошибка стремится к нулю. Используя (3), формально можно записать для матричного элемента  $U(t'', t')$  в координатном базисе :

$$\langle q''|U(t'', t')|q'\rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dq(t)] \exp\left[-\frac{S(q)}{\hbar}\right], \quad (7)$$

где

$$S(q) = \int_{t'}^{t''} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) + V(q(t), t) \right]. \quad (8)$$

Траектория  $q(t)$  имеет вид

$$q(t) = q_i + \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} (q_{i+1} - q_i), \text{ npu } t_i \leq t \leq t_{i+1}.$$

В символ  $[dq(t)]$  включена нормировка  $N = (\frac{m}{2\pi\hbar\tau})^{\frac{n}{2}}$

## 2.2 Статсумма

Рассмотрим квантовую систему с гамильтонианом  $H = T + V$  в мнимом времени, находящуюся в тепловом равновесии при температуре  $\theta$  [6], [11].  $T$  - кинетическая энергия системы, а  $V$  - потенциальная. Будем рассматривать стационарную задачу, т.е. потенциал зависит только от координаты. Обозначим  $|\psi_i\rangle$  собственный вектор гамильтониана  $H$ , соответствующий собственному значению  $E_i$ .

$$H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle.$$

В тепловом равновесии вероятность обнаружить состояние  $|\psi_i\rangle$  пропорциональна  $e^{-\frac{E_i}{\theta}}$ . Тогда среднее значение оператора  $A$  равно

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle e^{-\beta E_i},$$

где  $\beta = 1/\theta$ .  $Z$  - нормировка, подбирается так, чтобы  $\langle 1 \rangle = 1$ . Удобно формулу для среднего записать в следующем виде :

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr}(Ae^{-\beta H})}{Z}$$

где  $e^{-\beta H}$  - матрица плотности. Матричный элемент матрицы плотности в координатном базисе имеет вид

$$\rho(q, q'; \beta) = \langle q | e^{-\beta H} | q' \rangle = \sum_i \psi_i^*(q) \psi_i(q') e^{-\beta E_i}.$$

Среднее значение оператора  $A$  в координатном базисе

$$\langle A \rangle = \frac{\int dq dq' \rho(q, q'; \beta) \langle q | A | q' \rangle}{\int dq \rho(q, q; \beta)}.$$

Далее, будем использовать свойство произведения матриц плотности, а именно произведение двух матриц плотности есть матрица плотности

$$e^{-(\beta_1 + \beta_2)H} = e^{-\beta_1 H} e^{-\beta_2 H}.$$

В координатном базисе последнее равенство имеет вид

$$\rho(q_1, q_3; \beta_1 + \beta_2) = \int dq_2 \rho(q_1, q_2; \beta_1) \rho(q_2, q_3; \beta_2).$$

Применяя данное свойство  $N$  раз

$$e^{-\beta H} = (e^{-\tau H})^N,$$

где  $\tau = \beta/N$ . В координатном представлении имеет вид

$$\rho(q_0, q_N; \beta) = \int \dots \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \rho(q_0, q_1; \tau) \rho(q_1, q_2; \tau) \dots \rho(q_{N-1}, q_N; \tau).$$

При стремлении  $N \rightarrow \infty$  получаем непрерывные траектории  $\{q(t)\}$ , где время изменяется в пределах  $0 \leq t \leq \beta$ . Кинетическую и потенциальную энергию можно разделить в выражении матричного элемента матрицы плотности

$$e^{-\tau(T+V)+\frac{\tau^2}{2}[T,V]} = e^{-\tau T} e^{-\tau V}.$$

При  $\tau \rightarrow 0$

$$e^{-\tau(T+V)} \approx e^{-\tau T} e^{-\tau V}.$$

В координатном представлении

$$\rho(q_0, q_2; \tau) \approx \int dq_1 \langle q_0 | e^{-\tau T} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-\tau V} | q_2 \rangle.$$

Потенциальная энергия диагональна в координатном базисе, поэтому ее матричный элемент имеет вид

$$\langle q_1 | e^{-\tau V} | q_2 \rangle = e^{-\tau V(q_1)} \delta(q_2 - q_1).$$

Для вычисления матричного элемента оператора кинетической энергии будем использовать полноту импульсного базиса, т.е.  $\int dp |p\rangle \langle p| = 1$ . Вставляя данную единицу между экспонентой и векторами координаты, получим

$$\langle q_0 | e^{-\tau T} | q_1 \rangle = \int dp dp' \delta(p - p') \langle q_0 | p \rangle \langle p' | q_1 \rangle e^{-T(p)\tau}.$$

Учитывая, что  $\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iqp}$ , получим

$$\langle q_0 | e^{-\tau T} | q_1 \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{-T(p)\tau - ip(q_0 - q_1)}. \quad (9)$$

Статистическую сумму можно записать в виде

$$Z = \int dq \rho(q, q; \beta).$$

**Нерелятивистский кинетический член** Пусть  $T(p) = \frac{p^2}{2m}$ , тогда можно вычислить (9)

$$\langle q_0 | e^{-\tau T} | q_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau/m}} e^{-\frac{m(q_2 - q_1)^2}{2\tau^2}\tau}.$$

Матрица плотности принимает вид

$$\rho(q_0, q_N; \beta) = \int dq_1 \dots dq_{N-1} (2\pi\tau/m)^{-N/2} \exp \left[ - \sum_{i=1}^N \left( \frac{m(q_i - q_{i-1})^2}{2\tau^2} + V(q_i) \right) \tau \right]. \quad (10)$$

При стремлении  $N \rightarrow \infty$  получаем определение функционального интеграла (10), по виду совпадающего с (7).

## Релятивистский кинетический член

- (1 + 1) - измерение.

Оказывается, что в случае релятивистского кинетического члена, интеграл по импульсу все равно можно вычислить через цилиндрические функции. Зная значение интеграла в каждой точке, можно получить выражение для функционального интеграла. Значение интеграла можно получить, сделав преобразование к интегральному виду функции Макдональда. Пусть  $T(p) = \sqrt{p^2 + m^2}$ . Выражение (9) принимает вид

$$\int \frac{dp}{2\pi} e^{-\sqrt{p^2+m^2}\tau-ip(q_0-q_1)} = \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2+(q_1-q_0)^2}} K_1(m\sqrt{\tau^2+(q_1-q_0)^2}).$$

В пределе  $m\tau \gg 1$ ,  $\frac{(q_1-q_0)^2}{\tau^2} \ll 1$  данный интеграл совпадает с нерелятивистским случаем с учетом массы покоя

$$\frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2+(q_1-q_0)^2}} K_1(m\sqrt{\tau^2+(q_1-q_0)^2}) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau/m}} e^{-\frac{m(q_2-q_1)^2}{2\tau^2}\tau-m\tau}.$$

Масса покоя, которая возникла в нерелятивистском пределе не скажется на вычислениях с помощью методов Монте-Карло, т.к. всегда для вычисления будет важно только изменение действия, а не его абсолютное значение. С физической точки зрения, масса покоя не оказывается на нерелятивистских уравнениях движения, поэтому ее можно включить в нормировку функционального интеграла. Матрица плотности принимает вид

$$\begin{aligned} \rho(q_0, q_N; \beta) &= \int dq_1 \dots dq_{N-1} \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2+(q_1-q_0)^2}} K_1(m\sqrt{\tau^2+(q_1-q_0)^2}) \dots \\ &\dots \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2+(q_N-q_{N-1})^2}} K_1(m\sqrt{\tau^2+(q_N-q_{N-1})^2}) \exp\left(-\sum_{i=1}^N V(q_i)\tau\right). \end{aligned} \quad (11)$$

Вычисления интеграла по импульсу можно произвести методами, аналогичными тому, как считается причинная функция Грина в квантовой теории поля

$$D^c(q) = \frac{mi}{4\pi^2} \frac{K_1(m\sqrt{-\lambda+i\delta})}{\sqrt{-\lambda+i\delta}}$$

где  $\lambda = \tau^2 - \Delta q^2$ . Можно исследовать эти два выражения, сделать переход в евклидово пространство.

- (d + 1) - измерение.

Произведен расчет для  $d = 2, 3$ . Для получения аналитического выражения необходимо перейти к полярным координатам, произвести интегрирование по углам. Далее остается интеграл только по модулю импульса. В трехмерном случае интеграл сводится к частной производной от значения в одномерном случае. Для вычисления в двухмерном варианте необходимо значение интеграла по углам разложить в ряд и интегрировать почленно. Пусть

$T(p) = \sqrt{p_{q_1}^2 + \dots + p_{q_d}^2 + m^2}$ . Выражение (9) необходимо обобщить на  $(d + 1)$ -мерный случай. Выражение принимает вид

$$\int \frac{dp_{q_1} \dots dp_{q_d}}{(2\pi)^d} e^{-\sqrt{p_{q_1}^2 + \dots + p_{q_d}^2 + m^2}\tau - ip_{q_1}(q_{10} - q_{11}) - \dots - ip_{q_d}(q_{d0} - q_{d1})} = \\ = \left( \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)^2}} \right)^{(d+1)/2} \frac{K_{(d+1)/2}(m\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)^2})}{(2\tau)^{(d-1)/2}}.$$

В пределе  $m\tau \gg 1$ ,  $\frac{(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)^2}{\tau^2} \ll 1$  данный интеграл совпадает с нерелятивистским случаем с учетом массы покоя

$$\left( \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)^2}} \right)^{(d+1)/2} \frac{K_{(d+1)/2}(m\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)^2})}{(2\tau)^{(d-1)/2}} \rightarrow \left( \frac{1}{2\pi\tau/m} \right)^{d/2} e^{-\frac{m(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)^2}{2\tau^2}\tau - m\tau}.$$

Матрица плотности принимает вид

$$\rho(q_0, q_N; \beta) = \int dq_1 \dots dq_{N-1} \left( \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)^2}} \right)^{(d+1)/2} \frac{K_{(d+1)/2}(m\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)^2})}{(2\tau)^{(d-1)/2}} \dots \\ \dots \left( \frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_N - \mathbf{q}_{N-1})^2}} \right)^{(d+1)/2} \frac{K_{(d+1)/2}(m\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0)^2})}{(2\tau)^{(d-1)/2}} \exp\left(-\sum_{i=1}^N V(q_i)\tau\right). \quad (12)$$

Заметим, что в двухмерном случае выражение для интеграла по импульсу имеет вид через аналитические функции, что заметно упрощает вычисление, т. к. быстрое вычисление спецфункций представляет собой отдельную задачу.

### 3 Методы Монте-Карло

Прямой численный расчет функционального интеграла представляет собой трудоемкую задачу. сложность детерминированных алгоритмов экспоненциально зависит от размерности задачи, поэтому эффективнее использовать стохастические методы PIMC<sup>1</sup> [4], [5], [6], [7], получившее общее название методов Монте-Карло за свою вероятностную природу. В рамках общего метода существуют два способа вычисления, о которых подробно изложено далее.

Представляет интерес расчет средних значений

$$\langle F(q) \rangle = \frac{\int [dq(t)] F(q) \exp\left[-\frac{S(q)}{\hbar}\right]}{\int [dq(t)] \exp\left[-\frac{S(q)}{\hbar}\right]}. \quad (13)$$

Действие имеет вид

$$S(q) = \int_0^t ds \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2(s) + V(q(s), s) \right]$$

Аппроксимируем интеграл  $\int f(q)[dq(t)]$  конечной суммой  $\sum_{paths} f(\mathbf{q}) \Delta \mathbf{q}$  В интеграле величина  $\exp\left[-\frac{S(\mathbf{q})}{\hbar}\right]$  может изменяться на много порядков, поэтому часть траекторий будет подавлена этим фактором. Метод Монте-Карло использует идею существенной выборки. Траектории выбираются не абсолютно произвольно, а с заданным распределением в области, дающей основной вклад в интеграл. Следуя статистической механике, будем выбирать траектории, имеющие распределение Больцмана :

$$P^{eq}(\mathbf{q}) = \frac{\exp\left[-\frac{S(\mathbf{q})}{\hbar}\right]}{\int [d\mathbf{q}(t)] \exp\left[-\frac{S(\mathbf{q})}{\hbar}\right]}, \text{ где } \mathbf{q} = q(t) - \text{траектория}. \quad (14)$$

Тогда среднее значение будет даваться формулой :

$$\bar{F} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} F(\mathbf{q}_i),$$

где  $N_p$  - число траекторий, по которым производится усреднение. Реализовать существенную выборку можно, используя Марковский процесс. При стремлении  $N_p \rightarrow \infty$ , реализация траектории  $\mathbf{q}$  будет возникать с вероятностью (14). Для Марковского процесса  $P(\mathbf{q})$  существует "матрица" перехода, в данном случае, это функция двух переменных  $W(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$  - вероятность изменения траектории с  $\mathbf{q}$  на  $\mathbf{q}'$ . Данная функция удовлетворяет следующим условиям :

$$\begin{cases} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \geq 0, \\ \int W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q}' = 1, \forall \mathbf{q}, \\ P(\mathbf{q}') = \int P(\mathbf{q}) W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q}. \end{cases}$$

---

<sup>1</sup>PIMC - Path Integral Monte-Carlo

Для процесса в два этапа выполняется условие :

$$W^{(2)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'') = \int W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') W(\mathbf{q}', \mathbf{q}'') d\mathbf{q}'.$$

Если число этапов Марковского процесса стремить к бесконечности, то функция  $W(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$  имеет предел, который называется стационарным распределением (в нашем случае равновесным).

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W^{(n)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = P^{eq}(\mathbf{q}').$$

Т.к.  $P(\mathbf{q})$  - это плотность вероятности того, что траектория  $q(t)$  имеет заданный вид  $\mathbf{q}$ , то должно выполняться условие :

$$\int P(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = 1.$$

Марковский процесс обладает тем свойством, что стационарное распределение единственно, тогда для стационарного (равновесного) распределения справедливы свойства :

$$\begin{cases} P^{eq}(\mathbf{q}) \geq 0, \\ \int P^{eq}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = 1, \\ P^{eq}(\mathbf{q}) = \int P^{eq}(\mathbf{q}') W(\mathbf{q}', \mathbf{q}) d\mathbf{q}'. \end{cases} \quad (15)$$

Аналогичные условия можно записать для функции перехода :

$$\begin{cases} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \geq 0, \\ \int W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') d\mathbf{q} = 1, \\ P^{eq}(\mathbf{q}) = \int P^{eq}(\mathbf{q}') W(\mathbf{q}', \mathbf{q}) d\mathbf{q}'. \end{cases} \quad (16)$$

Однако, условия (16) не фиксируют однозначно функцию перехода, поэтому удобно наложить дополнительное условие - условие детального баланса, т. е. вероятности прямого и обратного процессов равны

$$\frac{W(\mathbf{q}, \mathbf{q}')}{W(\mathbf{q}', \mathbf{q})} = \frac{P^{eq}(\mathbf{q}')}{P^{eq}(\mathbf{q})}. \quad (17)$$

Но и это условие однозначно не фиксирует функцию  $W(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ . Окончательное выражение можно получить, если учесть вид интеграла. Произведем дискретизацию задачи. Выберем равномерную решетку по времени.

$$\begin{cases} t' = 0, \quad t'' = t, \\ N_t \epsilon = t. \end{cases}$$

Обозначим соответственно

$$\begin{cases} \tau_0 = 0, \quad q(\tau_0) = q_0, \\ \tau_{N_t} = t, \quad q(\tau_{N_t}) = q_{N_t}, \\ \tau_n = n\epsilon, \quad q(\tau_n) = q_n. \end{cases}$$

Действие (8) дискретизуется следующим образом :

$$S[q] = \tau \sum_{i=1}^{N_t} \left[ \frac{1}{2} \frac{m(q_i - q_{i-1})^2}{\tau^2} + V(q_i) \right]. \quad (18)$$

Будем рассматривать траектории, которые отличаются только в одном узле. Пусть  $q_i$  - точка, которая меняется, тогда для функции перехода можно получить :

$$\frac{W_s(\mathbf{q}, \mathbf{q}')}{W_s(\mathbf{q}', \mathbf{q})} = \frac{e^{-S(q'_i)/\hbar}}{e^{-S(q_i)/\hbar}}, \quad (19)$$

где  $S(q_i)$  - часть действия, связанная с  $q_i$ . Здесь возникают две возможности, как действовать дальше.

### 3.1 Метод тепловой бани

Данный метод учитывает то, что кинетическая энергия в нерелятивистском случае является квадратичной формой по  $q_i$ . Если потенциал является достаточно простой функцией в том смысле, что мы легко умеем быстро генерировать случайные числа с распределением, пропорциональным  $e^{-S(q_i)/\hbar}$ , то мы однозначно фиксируем функцию перехода :

$$W(q_i, q'_i) = N e^{-S(q'_i)/\hbar}, \quad (20)$$

где учтено то, что переходом является изменение только одного узла.  $N$  - нормировка. Построенная функция перехода удовлетворяет всем условиям (16). Так же выполняется условие детального баланса

$$P^{eq}(q)W(q, q') = P^{eq}(q')W(q', q),$$

в силу того, что  $P^{eq} \sim e^{-S(q)/\hbar}$ .

### 3.2 Метод Метрополиса

Если же генерация случайных чисел с распределением, пропорциональным  $e^{-S(q_i)/\hbar}$  представляет собой дополнительную задачу, то удобнее оказывается метод Метрополиса<sup>2</sup>. Данный метод не чувствителен к яльному виду функции  $S(q_i)$ .

В методе Метрополиса функция  $W(q_i, q'_i)$  представляется в следующем виде

---

<sup>2</sup>Николас Константин Метрополис (11 июня 1915 — 17 октября 1999) — американский математик и физик греческого происхождения.

$$W(q_i, q'_i) = T(q_i, q'_i)A(q_i, q'_i) - \delta(q_i - q'_i)(1 - \int dq''T(q_i, q''_i)A(q_i, q''_i)),$$

где  $T(q_i, q'_i)$  - вспомогательная вероятность перехода, а  $A(q_i, q'_i)$  - вероятность принятия пробного перехода.

$$A(q_i, q'_i) = \min\left[1, \frac{P^{eq}(q'_i)T(q'_i, q_i)}{P^{eq}(q_i)T(q_i, q'_i)}\right].$$

Данная функция перехода удовлетворяет условиям (16). Удобнее всего выбрать в качестве функции  $T(q_i, q'_i)$  - равномерно распределенную плотность вероятности на отрезке  $[-a, a]$ . Параметр  $a$  необходимо выбрать так, чтобы вероятность принятия была порядка 0.5. Если положить  $T(q_i, q'_i) = P^{eq}(q'_i) = Ne^{-S(q'_i)/\hbar}$ , а  $A(q_i, q'_i) = 1$ , то метод Метрополиса перейдет в метод тепловой бани. В методе тепловой бани изменение значения в узле происходит при каждом шаге, в отличие от метода Метрополиса, за счет этого происходит большой выигрыш во времени расчета, но необходимо учитывать то, что метод тепловой бани работает не всегда, а только в редких случаях. Важным критерием является время термализации системы, т.е. достижение Марковским процессом своего стационарного распределения. В методе Метрополиса это происходит медленнее, в силу того, что изменение траектории в узле происходит не при каждой попытке изменить его, а с выбранным заранее распределением  $A(q, q')$ . Для получения новых траекторий необходимо попытаться изменить каждый узел. Если изменять узлы последовательно, то между ними будет корреляция. В качестве одной итерации изменения траектории, можно случайно выбирать узлы и изменять их с заданным распределением. Данная итерация называется свип("sweep").  $N_s$  - число свипов, выполняя  $N_s$ , получаем траекторию.

## 4 Гармонический осциллятор

Система, состоящая из гармонического осциллятора, является наиболее простой и хорошо изученной. Все наблюдаемые величины имеют аналитический вид. Поэтому изучение методов Монте-Карло для функционального интеграла естественно начать с данной системы. Написанная программа для расчета функциональных интегралов проверялась на задаче гармонического осциллятора. Были произведены вычисления наблюдаемых характеристик и сравнения с аналитическими выражениями. Пусть потенциал имеет вид :

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2.$$

Поставим задачу определить полную энергию, кинетическую энергию и волновую функцию основного состояния, т.к. эти величины в методах Монте-Карло для функционального интеграла определяются достаточно просто. В качестве перспективы можно поставить задачу определения следующих уровней энергии. Энергию основного состояния можно определять несколькими способами, один из них - это построить волновую функцию, и фитировать ее. Волновая функция определяется по частоте появления соответствующих координат. Как будет показано ниже, результаты согласуются с теоретическими предсказаниями. Альтернативный метод основан на подсчете среднего значения квадрата координат по траекториям. Для гармонического осциллятора эта величина сразу дает значение энергии основного состояния.

Кинетическая энергия определяется нетривиально, но достаточно просто. Пояснение будет приведено ниже.

### 4.1 Наблюдаемые величины

С помощью методов тепловой бани и Метрополиса производится подсчет полной энергии, кинетической энергии и волновой функции основного состояния. Используя теорему вириала, можно записать для гармонического осциллятора

$$\langle K \rangle = \langle V \rangle,$$

где  $K$  - кинетическая энергия,  $V$  - потенциальная энергия. С вычислением кинетической энергии связана важная тонкость, основанная на свойстве уравнения Шредингера. [2], [6] Дискретизованное действие

$$S[q] = \tau \sum_{i=1}^{N_t} \left[ \frac{1}{2} \frac{m(q_i - q_{i-1})^2}{\tau^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right].$$

Отсюда видно, что наиболее сингулярный член при  $\tau \rightarrow 0$  - это  $\frac{(q_i - q'_i)^2}{\tau}$ . Поэтому носитель матричного элемента  $\langle q | U(t' + \epsilon, t') | q' \rangle$  соответствует значениям  $|q_i - q'_i| = O(\sqrt{\tau})$ . Поэтому среднее значение кинетической энергии содержит в себе сингулярность порядка  $1/\tau$ . Корректное выражение для кинетической энергии имеет вид :

$$\langle K \rangle = \left\langle \frac{\hbar}{2\tau} - \frac{m(q_{i+1} - q_i)^2}{2\tau^2} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}.$$

Полная энергия основного состояния имеет вид

$$E_0 = \langle K + V \rangle = m\omega^2 \langle q^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Ожидаемая зависимость  $\langle q^2 \rangle$  от  $\omega$

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Волновая функция основного состояния по  $N_p$  траекториям, разбитым на  $N_t$  узлов дается выражением :

$$|\psi_0(q)|^2 \Delta q = \frac{1}{N_p N_t} \sum_i \theta(\Delta q - |q_i - q|) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}}.$$

Далее, все расчеты для гармонического осциллятора произведены при условии, что  $\hbar = 1, m = 1$ .

## 4.2 Гармонический осциллятор. Метод тепловой бани

Действие, соответствующее узлу  $q_i$  имеет вид

$$S(q_i) = \frac{m}{\tau} \left( q_i^2 \left( 1 + \frac{(\tau\omega)^2}{2} \right) - q_i (q_{i+1} + q_{i-1}) \right).$$

Для изменения траектории необходимо генерировать случайные гауссовые числа, имеющие распределение

$$P(q_i^*) = \sqrt{\frac{2m(1 + (\tau\omega)^2/2)}{2\pi\tau}} \exp \left[ -\frac{\left( q_i^* - \frac{1}{2}(q_{i-1} + q_{i+1})/(1 + (\tau\omega)^2/2) \right)^2}{2m(1 + (\tau\omega)^2/2)} \right].$$

Для создания гауссовых случайных чисел удобно использовать алгоритм Бокса - Мюллера ([15]) : необходимы два случайных равномерно распределенных на отрезке  $[0, 1]$  числа  $\gamma_r, \gamma_\phi$ , сгенерированные, например, алгоритмом XORShift. Далее вычисляем два новых числа

$$\begin{cases} r = \sqrt{-2 \ln \gamma_r}, \\ \phi = 2\pi\gamma_\phi. \end{cases}$$

Тогда можно получить случайную гауссову величину, имеющую нулевое среднее и единичную дисперсию

$$\xi = r \sin \phi, \quad \xi \sim (0, 1).$$

Следуя статье [4], написана программа, реализующая алгоритм тепловой бани для гармонического осциллятора. Основные параметры задачи

$w$  — частота гармонического осциллятора,

$\tau$  — шаг дискретизации по времени,

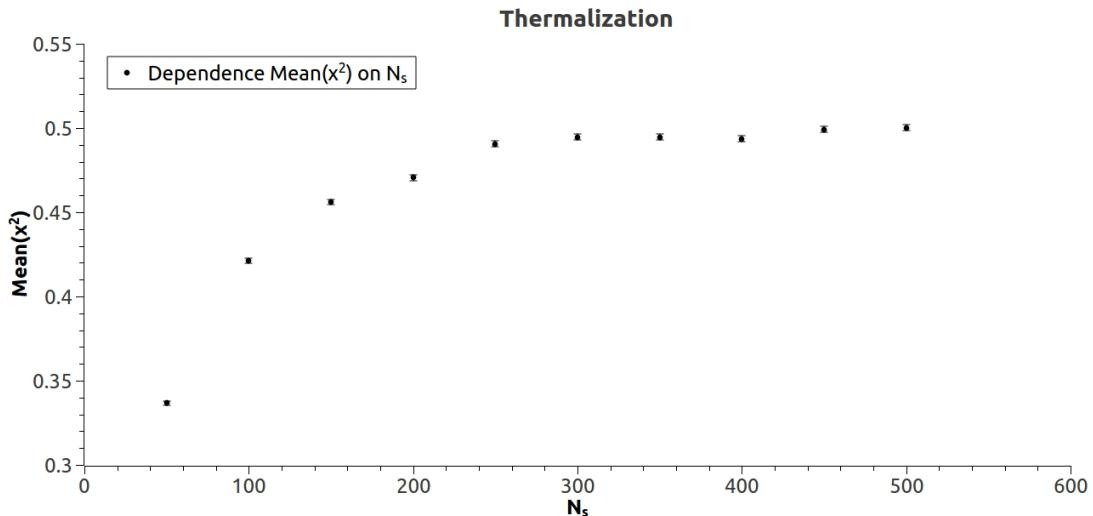
$N_t$  – число узлов решетки,

$N_s$  – число свипов,

$N_p$  – число траекторий, по которым происходит усреднение.

**Термализация**  $N_s$  - количество свипов, которое необходимо выполнить в программе. Важно подобрать данное значение таким образом, чтобы траектории, которые строятся с помощью марковской цепи, были термализованы, т.е. марковская цепь была близка к своему предельному распределению. Приведем характерную зависимость  $\langle q^2 \rangle$  от числа свипов.

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_p = 500. \end{cases}$$



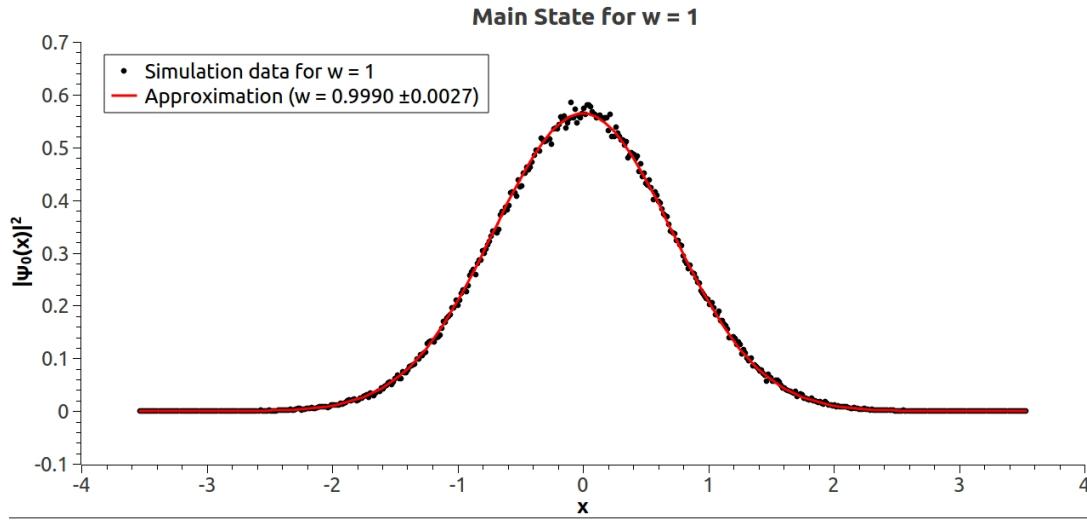
Термализация системы для алгоритма тепловой бани.

По представленным данным становится ясно, что система достигает своего равновесия при  $N_s \geq 300$ . Далее, для надежности, в программе используется значение параметра  $N_s$  равное 500.

**Основное состояние** В качестве критерия качества работы программы используется совпадение частоты, которая задается в программе, и частота, которая определяется по  $\langle q^2 \rangle$  и волновой функции основного состояния.

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_s = 500, \\ N_p = 500. \end{cases}$$

График квадрата модуля волновой функции имеет вид



Основное состояние для алгоритма тепловой бани.

Частота, определенная по волновой функции

$$w = 0.9990 \pm 0.0027.$$

Полученное значение  $\langle q^2 \rangle$  необходимо сравнивать с ожидаемым  $\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = 1/2$

$$\langle q^2 \rangle = 0.5001 \pm 0.0012.$$

Значение частоты по этим данным

$$w = 0.9998 \pm 0.0024.$$

Теоретическое значение  $w = 1$ .

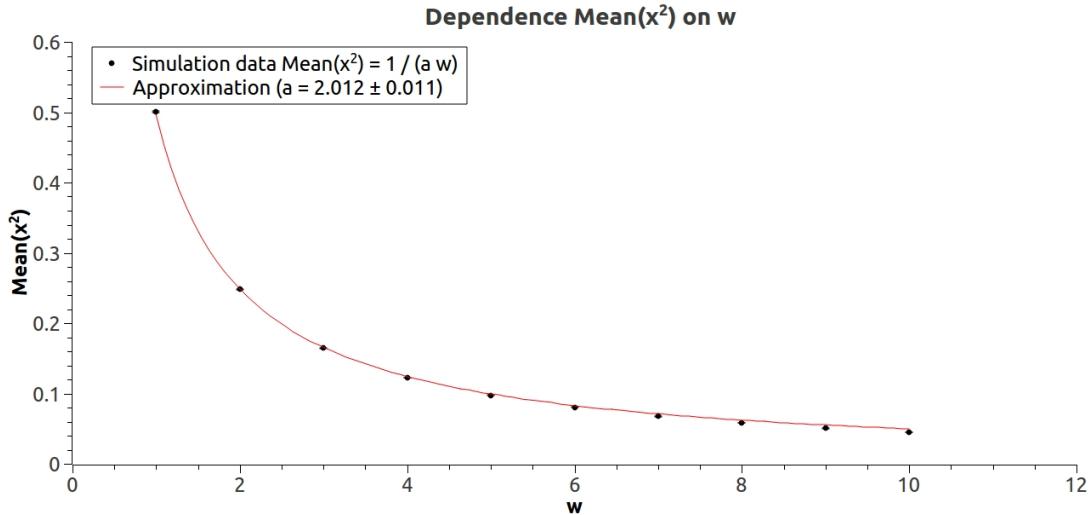
Из приведенных данных следует, что точность данного метода составляет порядка 0.3%. Так же определялось значение кинетической энергии

$$\langle K \rangle = 0.240 \pm 0.010.$$

Точность определения кинетической энергии составляет 4%.

**Зависимость от  $w$**  Проверена зависимость  $\langle q^2 \rangle$  и  $K$  от  $w$ . Полученная зависимость представлена ниже

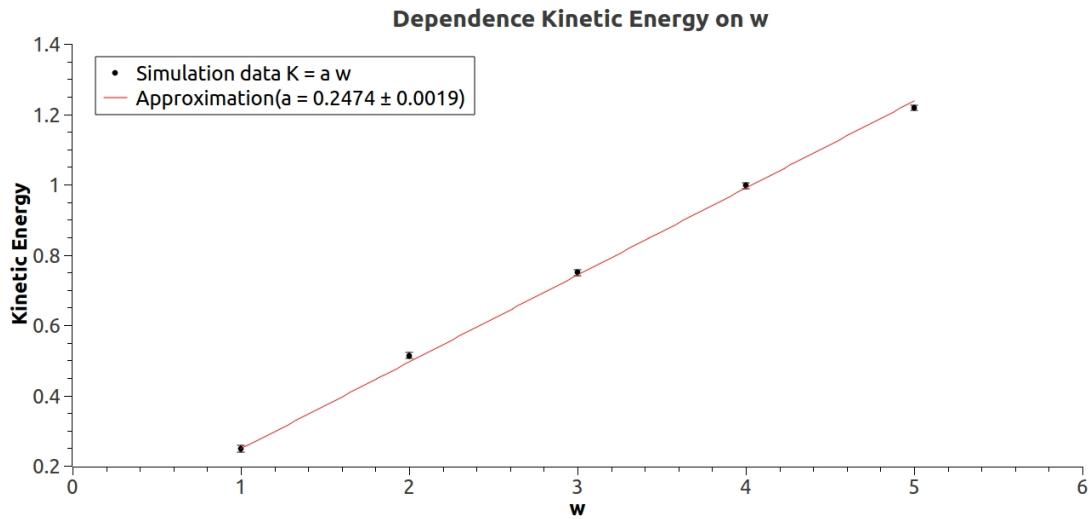
$$\begin{cases} \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_s = 500, \\ N_p = 500. \end{cases}$$



Зависимость  $\langle q^2 \rangle$  от  $\omega$  для алгоритма тепловой бани.

Полученное значение можно сравнить с ожидаемым значением  $a = 2$ .

$$a = 2.012 \pm 0.011$$



Зависимость кинетической энергии для алгоритма тепловой бани.

Полученное значение можно сравнить с ожидаемым значением  $a = 0.25$ .

$$a = 0.2474 \pm 0.0019$$

### 4.3 Гармонический осциллятор. Метод Метрополиса

Функция перехода

$$W(q_i, q'_i) = T(q_i, q'_i)A(q_i, q'_i) - \delta(q_i - q'_i)(1 - \int dq''T(q_i, q''_i)A(q_i, q''_i)),$$

где

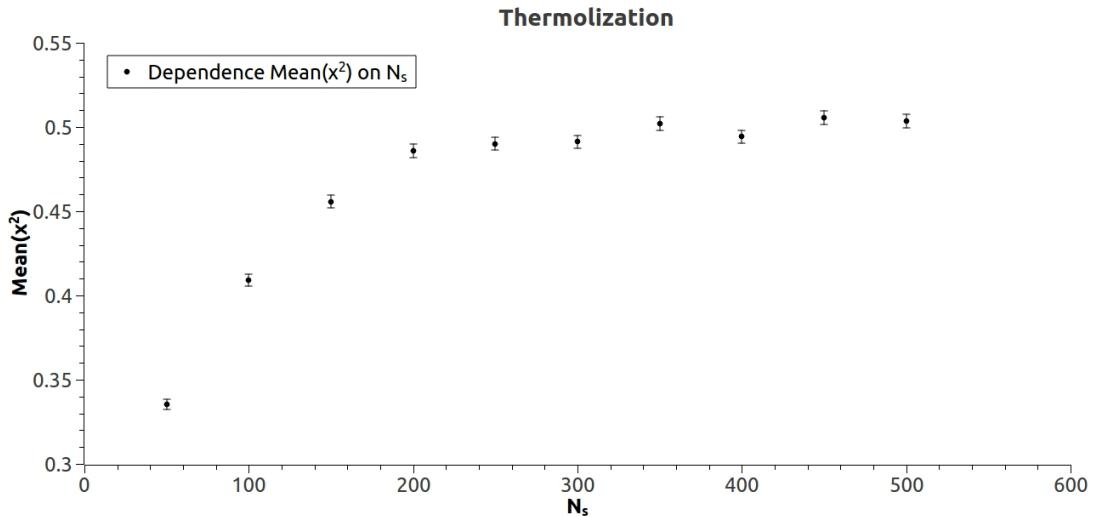
$$A(q_i, q'_i) = \min \left[ 1, e^{-\Delta S(q_i, q'_i)} \right].$$

Попытаемся изменить значение траектории в  $i$ -м узле на величину  $\delta \in [-\Delta, \Delta]$ . Изменение действия за счет изменения значения траектории в узле

$$\Delta S(q_i, \delta) = \frac{m\delta}{\epsilon} \left( (\delta + 2q_i)(1 + \frac{(\epsilon\omega)^2}{2}) - (q_{i-1} + q_{i+1}) \right).$$

**Термализация** Приведем характерную зависимость  $\langle q^2 \rangle$  от числа свипов.

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 1000, \\ N_p = 1000. \end{cases}$$



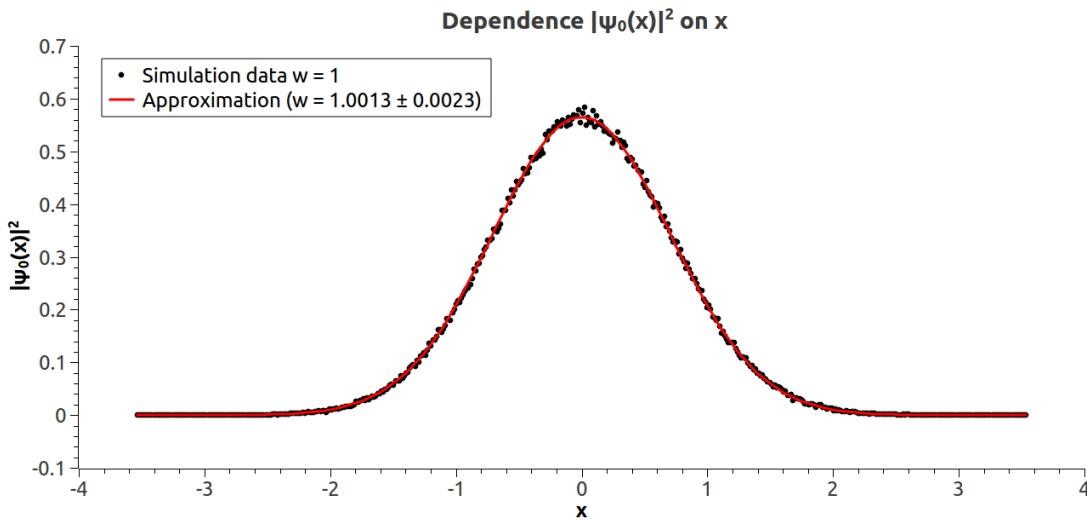
Термализация системы для алгоритма Метрополиса.

По представленным данным становится ясно, что система достигает своего равновесия при  $N_s \geq 300$ . Далее, для надежности, в программе используется значение параметра  $N_s$  равное 500.

### Основное состояние

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 1000, \\ N_s = 1000, \\ N_p = 1000. \end{cases}$$

График квадрата модуля волновой функции имеет вид



Основное состояние для алгоритма Метрополиса.

Полученное значение  $\langle q^2 \rangle$  можно сравнить с ожидаемым значением  $\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = 1/2$

$$\langle q^2 \rangle = 0.4983 \pm 0.0012.$$

Значение частоты по этим данным необходимо сравнивать с теоретическим  $\omega = 1$

$$w = 1.0034 \pm 0.0023.$$

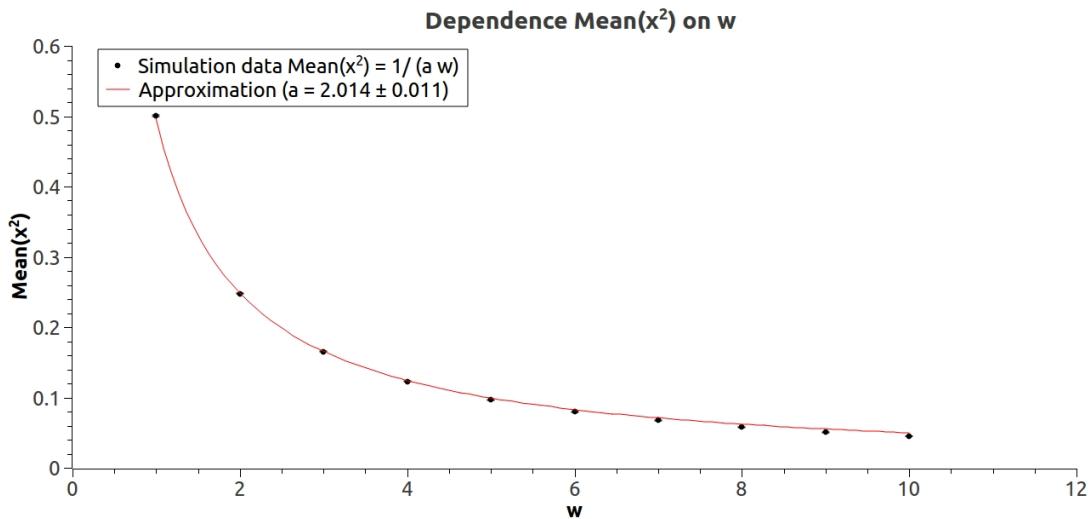
Из приведенных данных следует, что точность данного метода составляет порядка 0.3%. Так же определялось значение кинетической энергии

$$\langle K \rangle = 0.250 \pm 0.010.$$

Точность определения кинетической энергии составляет 4%.

**Зависимость от  $w$**  Проверена зависимость  $\langle q^2 \rangle$  и  $K$  от  $w$ . Полученная зависимость представлена ниже

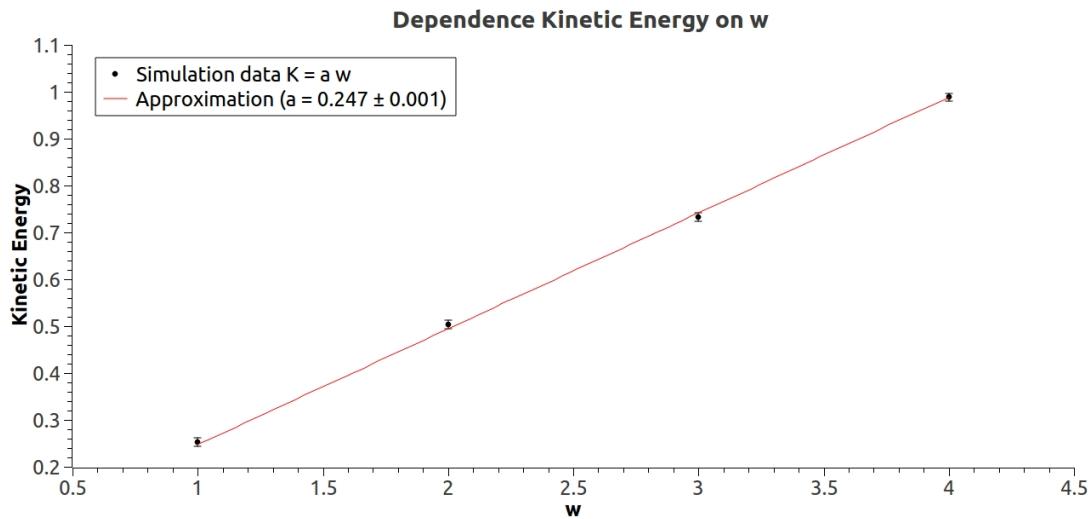
$$\begin{cases} \tau = 0.1, \\ N_t = 1000, \\ N_s = 1000, \\ N_p = 1000. \end{cases}$$



Зависимость  $\langle q^2 \rangle$  от  $\omega$  для алгоритма Метрополиса.

Теоретическое значение  $a = 2$  можно сравнить с экспериментальным

$$a = 2.014 \pm 0.011.$$



Зависимость кинетической энергии для алгоритма Метрополиса.

Теоретическое значение  $a = 0.25$  можно сравнить с экспериментальным

$$a = 0.247 \pm 0.001.$$

Основной результат - программа, позволяющая расчитывать наблюдаемые характеристики различных квантовых систем. В данной главе приведены результаты применения к системе нерелятивистского гармонического осциллятора. Использовались два метода вычисления - тепловая баня и Метрополис. Приведены графики термализации, среднего квадрата координаты, квадрата волновой функции основного состояния, кинетической энергии основного состояния для описанных методов. Полученные результаты согласуются с аналитическими выражениями в пределах одного стандартного отклонения.

## 5 Ангармонический осциллятор

Рассмотрим задачу с гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{2}w^2q^2 + \lambda q^4.$$

Данная задача не является точно решаемой, но существуют методы, позволяющие получить приближенное решение в тех или иных предельных случаях, например, теория возмущений при малых значениях параметра  $\lambda$ .

Особенностью метода Метрополиса является то, что его можно применять к любой задаче. Будем определять энергию основного состояния. Существует ряд альтернативных работ, с которыми можно сравнить результаты. Точность значений, получаемых методом метрополиса гораздо хуже, но при соответствующей настройке можно получить удовлетворительный результат.

Известна зависимость энергии основного состояния, полученная методами, отличающимися от численного расчета функционального интеграла, в зависимости от параметра  $\lambda$  [8].

Необходимо рассматривать два случая:

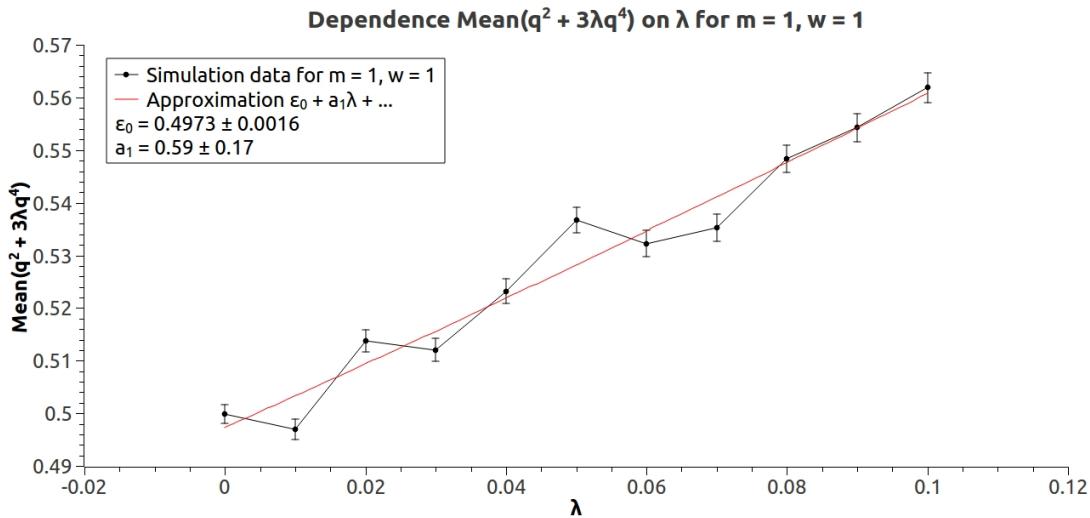
$\lambda$  – малый параметр, т.е.  $\lambda \ll w^4$ .

Тогда энергия выражается в виде ряда по малому параметру  $\lambda$  (в первом приближении)

$$E_0 = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\lambda + \dots$$

Параметры программы

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_p = 500, \\ N_s = 500. \end{cases}$$



Зависимость энергии основного состояния в пределе малых  $\lambda$ .

Можно сравнить со значениями, полученными с помощью первых членов ряда теории возмущения  $\epsilon_0 = 0.5$ ,  $a_1 = 0.75$

$$\begin{cases} \epsilon_0 = 0.4973 \pm 0.0016 \\ a_1 = 0.59 \pm 0.17 \end{cases}$$

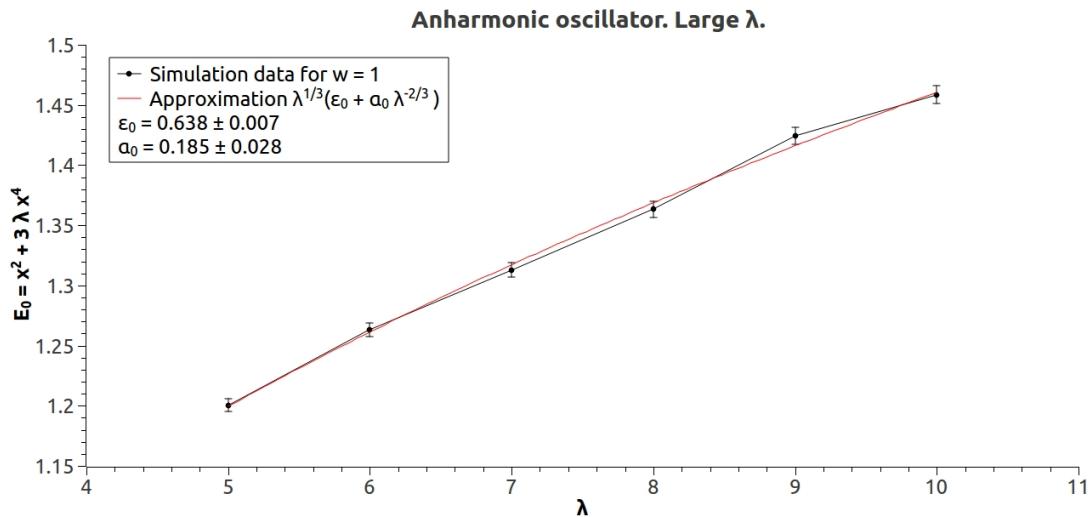
$\lambda$  – большой параметр, т.е.  $\lambda \gg w^4$ .

Энергия в данном случае имеет вид (первые члены разложения по обратным степеням  $\lambda$ )

$$E_0 = \lambda^{1/3}(0.668 + 0.144\lambda^{-2/3} + \dots).$$

Параметры программы

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_p = 500, \\ N_s = 500. \end{cases}$$



Зависимость энергии основного состояния в пределе больших  $\lambda$ .

Можно сравнить со значениями, полученными при помощи разложения по обратным степеням  $\lambda$ :  $\epsilon_0 = 0.668$ ,  $\alpha_0 = 0.144$

$$\begin{cases} \epsilon_0 = 0.638 \pm 0.007 \\ \alpha_0 = 0.195 \pm 0.028 \end{cases}$$

Таким образом, программа дает удовлетворительный результат для энергии ангармонического осциллятора в предельных случаях константы  $\lambda$  ( $\lambda \ll w$ ,  $\lambda \gg w$ ). Для того, чтобы результаты работы программы согласовывались с предсказаниями альтернативных теорий, необходимо брать несколько стандартных отклонений. Программа реализована на обычном персональном компьютере и использует линейный алгоритм (не параллельный). Для повышения точности необходимо использовать суперкомпьютер, что является целью дальнейшей работы.

## 6 Релятивистский осциллятор

Рассмотрим систему, гамильтониан которой имеет вид

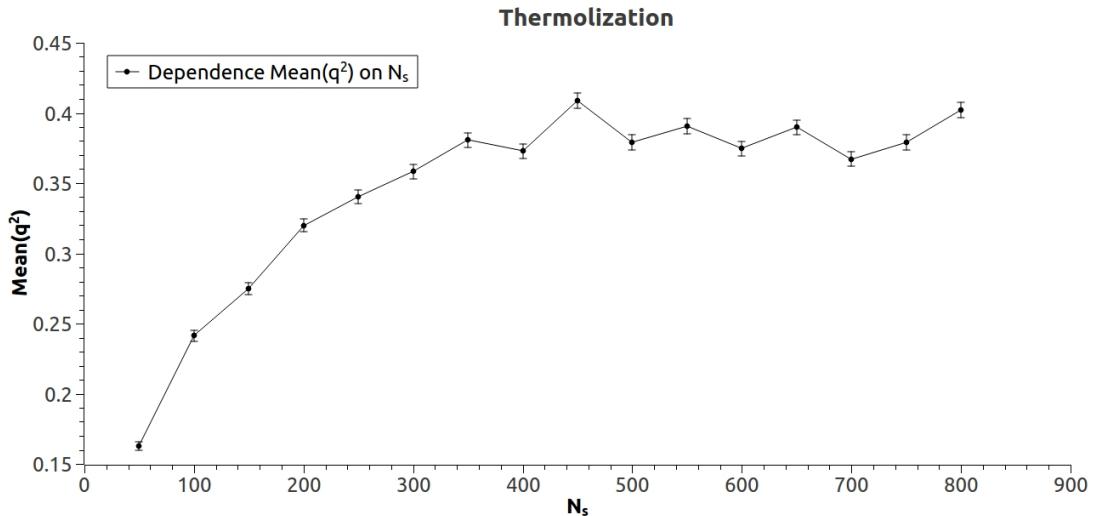
$$H = \sqrt{p^2 + m^2} + \frac{1}{2}mw^2q^2.$$

Для функционального интеграла (12) необходимо использовать метод Метрополиса. Часть выражения, соответствующая только узлу  $q_i$  имеет вид

$$f(q_i) = \left(\frac{m\tau}{\pi}\right)^2 \frac{K_1(m\sqrt{\tau^2 + (q_{i+1} - q_i)^2})K_1(m\sqrt{\tau^2 + (q_i - q_{i-1})^2})}{\sqrt{\tau^2 + (q_{i+1} - q_i)^2}\sqrt{\tau^2 + (q_i - q_{i-1})^2}}.$$

Это выражение потребуется для метода Метрополиса. Характерный график термализации имеет вид

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ m = 1, \\ N_t = 500, \\ N_p = 500, \\ N_s = 500. \end{cases}$$

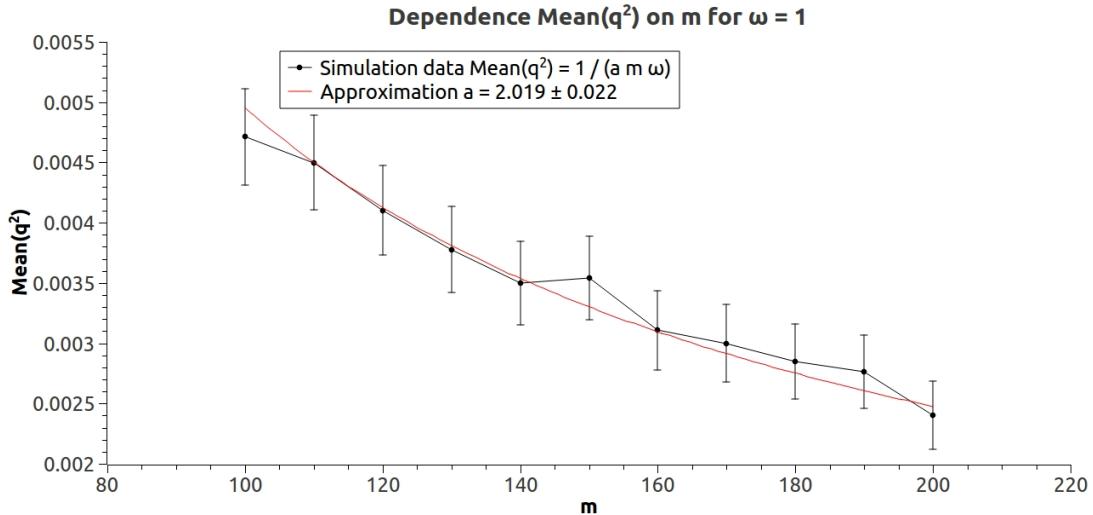


Термализация релятивистского осциллятора.

В качестве проверки можно исследовать предел  $m \gg w$ . Данный предел должен совпадать с нерелятивистским осциллятором. Можно исследовать значение  $\langle q^2 \rangle$ . Ожидаемая зависимость

$$\langle q^2 \rangle = \frac{1}{2mw}.$$

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_p = 500, \\ N_s = 500. \end{cases}$$



Зависимость  $\langle q^2 \rangle$  для релятивистского осциллятора в пределе больших масс.

Теоретическое значение  $a = 2$ . Полученное значение

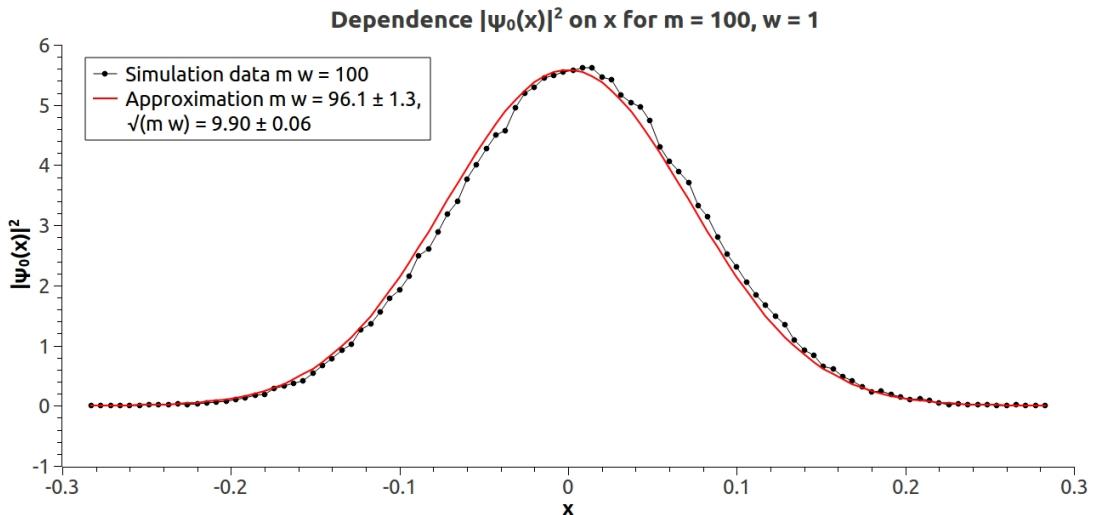
$$a = 2.019 \pm 0.022$$

Точность данного вычисления составляет 1% Так же можно исследовать волновую функцию в классическом пределе. Для параметров  $m = 100$ ,  $w = 1$  ожидаемый результат в классическом случае  $\langle q^2 \rangle = 0.005$ , получен результат

$$\langle q^2 \rangle = 0.00506 \pm 0.00023.$$

$$\begin{cases} w = 1, \\ \tau = 0.1, \\ N_t = 500, \\ N_p = 500, \\ N_s = 500. \end{cases}$$

Для данных параметров определена волновая функция



Зависимость  $\langle q^2 \rangle$  для релятивистского осциллятора в пределе больших масс.

Получаем хорошее согласие данных в нерелятивистском приближении.

В итоге, проделана работа - написана программа, из которой можно получить много результатов. Для проверки корректности рассмотрен нерелятивистский предел. Результаты согласуются в пределе нескольких стандартных отклонений. Основная проблема, по которой точность не достаточно высока - это долгое вычисление функции Макдональда стандартными библиотеками языка программирования. Существует несколько вариантов решения данной проблемы, в качестве одного из них выступает предподсчет и запись в память значений функции для аппроксимации и быстрого вычисления в программе. По этой причине выделен случай четномерного пространства, т.к. в этом случае функция Макдональда выражается через простые функции.

$$K_{n+1/2}(x) = (-1)^n \sqrt{\frac{\pi}{2}} x^{n+1/2} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left( \frac{e^{-x}}{x} \right)$$

Применение суперкомпьютеров для данной задачи значительно повысит точность, поэтому актуально написание алгоритма, работающего параллельно.

Метод Метрополиса элементарно допускает обобщение на многомерный случай, поэтому возможно применение к более сложным задачам.

## 7 Заключение

Функциональный интеграл имеет фундаментальное значение в квантовой механике и квантовой теории поля, поэтому умение вычислять интегралы такого типа является основной задачей квантовой физики. Также возможно применение к уравнениям математической физики(уравнение теплопроводности и уравнение Бюргерса). Функциональный интеграл в мнимом времени эквивалентен статистической сумме квантовой системы, поэтому широко используются в статистической физике.

В данной работе приведен обзор некоторых известных методов, представлено их сравнение, а также результаты применения для простых, тренировочных задач. В качестве одной из таких задач, рассмотрен гармонический осциллятор. Данная задача представляет собой исключительно академический интерес, однако очень удобна для проверки результатов. Среднее значение квадрата координаты, волновая функция и кинетическая энергия сходятся в пределах погрешности, что позволяет сделать вывод об эффективности методов. Также рассмотрен ангармонический осциллятор. В данной курсовой работе приведены результаты начатого исследования по релятивистскому осциллятору. Все данные пока предварительные, в настоящее время результаты проверяются и уточняются. Основной задачей является повысить скорость и точность за счет решения проблемы с подсчетом функций Макдональда и написания параллельного алгоритма.

Существуют альтернативные методы вычисления функциональных интегралов, использующие абсолютно сходящиеся ряды [12], [13]. В данных методах функциональному интегралу сопоставляется абсолютно и равномерно сходящийся ряд вместо асимптотического ряда стандартной теории возмущения. Таким образом, существует альтернативный метод вычисления. Интерес представляет сравнение результатов данного метода и методов Монте-Карло, что является задачей для дальнейших исследований.

Кроме того, было произведено изучение методов параллельных вычислений с использованием суперкомпьютеров, которые позволяет переписать все изложенные алгоритмы для суперкомпьютера. В дальнейшем будут использоваться только алгоритмы для суперкомпьютеров, что позволит увелиить скорость и точность вычислений. Проблема скорости стоит достаточно остро, т.к. характерные времена работы программы на описанных алгоритмах порядка нескольких часов, на экстремальных условиях достигались десятков часов.

Дальнейшей целью является написание параллельной программы, применение ее к задаче релятивистского осциллятора, обобщение методов на многомерные случаи и применение их к задаче графена и релятивистских поправок к уровням энергии тяжелых элементов. Так же целью является освоение альтернативных методов вычисления функционального интеграла и сравнение с имеющимися.

Хочу выразить благодарность научному руководителю - Белокурову Владимиру Викторовичу за проявленное терпение и неоценимую помощь в процессе работы над данной работой, а также научной группе при ФГБУ "ГНЦ РФ ИТЭФ" и физическом факультете МГУ им. М. В. Ломоносова за консультации при изучении численных методов Монте-Карло. Особенно хочется поблагодарить сотрудника кафедры КТиФВЭ на физическом факультете МГУ им. М. В. Ломоносова Павловского Олега Владимира за проявленный интерес к работе и продуктивные консультации по данной теме.

## Список литературы

- [1] Фейнман Р., Хиббс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — Мир, 1968. 382с.
- [2] Ж. Зинн-Жюстен. Континуальный интеграл в квантовой механике. — Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2010.
- [3] Смолянов О. Г., Шавгулидзе Е. Т. Континуальные интегралы. — М.: Изд-во МГУ, 1990, 150 с.
- [4] M. Creutz and B.A. Freedman, "A statistical approach to quantum mechanics— Ann. Phys. 132, 427-462 (1981).
- [5] C. Morningstar, "The Monte-Carlo method in quantum field theory— arXiv:hep-lat/0702020v1. High Energy Physics - Lattice (hep-lat) (2007).
- [6] D. M. Ceperley, "Path integrals in the theory of condensed helium— Rev. Mod. Phys. 67, 279 (1995)
- [7] D. M. Ceperley, "Metropolis Methods for Quantum Monte-Carlo Simulations arXiv:physics/0306182 (2003).
- [8] F. T. Hioe, Don MacMillen, E. W. Montroll, "Quantum theory of anharmonic oscillators: energy levels of a single and a pair of coupled oscillators with quartic coupling— Phys. Rep., Sec. C, 43, No. 7, 305-335 (1978)
- [9] Мацкевич С. Е., "Функциональные интегралы и уравнения типа Бюргерса Дис...канд. физ.-мат. наук, Москва (2010).
- [10] Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В., Введение в теорию квантованных полей , — Наука, 4-е издание (1984).
- [11] Chaichian M., Demichev A., Path Integrals in Physics, Volume 1, Stochastic Processes and Quantum Mechanics, IOP Publishing Ltd (2001).
- [12] Белокуров В. В., Соловьев Ю. П., Шавгулидзе Е. Т., Метод приближенного вычисления континуальных интегралов, использующих теорию возмущений со сходящимися рядами. I, ТМФ, 109:1 (1996), 51-59
- [13] Belokurov V., Shavgulidze E., Solovyov Y. P. New perturbation theory for quantum field theory: Convergent series instead of asymptotic expansions // Acta Applicandae Mathematicae. — 2001. — Vol. 68, no. 1/3. — P. 71–104.
- [14] Ian H. Redmount and Wai-Mo Suen, Path integration in relativistic quantum mechanics, Int. J. Mod. Phys. A8 (1993) 1629-1636
- [15] G. E. P. Box and Mervin E. Muller, A Note on the Generation of Random Normal Deviates, The Annals of Mathematical Statistics (1958), Vol. 29, No. 2 pp. 610–611