МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультут Компьютерных наук

Кафедра Цифровых технологий

Название

Дипломная работа

02.03.01 Математика и компьютерные науки

Распределенные системы и искусственный интеллект

Зав. кафедрой	____________	д-р физ.-мат. наук, проф.	С.Д. Кургалин
Студент	____________		А.А. Махно
Руководитель	____________	канд. физ.-мат. наук, доц.	А.В. Флегель

Воронеж 2016

Содержание

Введение

Здесь будет введение

1 Физическая задача

$$M_0(\epsilon,t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\int_{-\infty}^{0}\frac{e^{i\epsilon(t-t')/\hbar}}{(t-t')^{3/2}}[e^{iS(t,t')/\hbar}-1]dt' \tag{1}$$

2 Описание метода перевала

Метод перевала применяется для оценки при больших значениях параметра λ контурных интегралов вида

$$F(\lambda)=\int_C \phi(t)e^{\lambda f(z)}dz \tag{2}$$

где $f(z)$ и $\phi(z)$ функции, аналитические вдоль линии интегрирования C. Интегралами вида (2) представляются многие специальные функции, решения дифференциальных уравнений, как обыкновенных, так и с частными производными. Эти интегралы часто встречаются при решении различных задач физики.

Рассмотрим частный случай, а именно - действительные интегралы вида

$$F(\lambda)=\int_a^b \phi(t)e^{\lambda f(t)}dt \tag{3}$$

Этот случай был рассмотрен в свое время Лапласом. Идея здесь такая.

Предположим, что $f(t)$ имеет на отрезке (a,b) один резко выраженный максимум. Чем боьше значение параметра λ, тем резче выражается этот максимум, и поэтому ясно, что при больших λ основный вклад в значение интеграла дает окрестность точки максимума.

В основе этого метода лежит лемма:

Лемма : Пусть дан интеграл

$$F(\lambda)=\int_0^a \phi(t)e^{-\lambda t^\alpha}dt \qquad (0<a\leq\infty,\alpha>0)$$

где $\phi(t)$ при $|t|<2h$ представляется сходящимся рядом

$$\phi(t)=t^\beta(c_0+c_1t+\dots+c_nt^n+\dots),\ \beta>-1$$

причем $\int_0^a|\phi(t)|e^{-\lambda_0 t^\alpha}dt\leq M$ для некоторого λ_0. Тогда имеет место асимптотическое разложение

$$F(\lambda)\sim\sum_{n=0}^{\infty}\frac{c_n}{\alpha}\Gamma\left(\frac{\beta+n+1}{\alpha}\right)\lambda^{-\frac{\beta+n+1}{\alpha}} \tag{4}$$

где Γ - гамма-функция Эйлера.

К доказанной лемме сводится оценка интеграла (3)

Теорема 1. Пусть интеграл (3) абсолютно сходится для некоторого $\lambda = \lambda_0$, т. е.

$$\int_a^b |\phi(t)| e^{\lambda_0 f(t)} dt \leq M,$$

и $f(t)$ достигает своего наибольшего значения во внутренней точке t_0 отрезка (a, b), в окрестности $|t - t_0| < \delta$ которой $f(t)$ представляется рядом

$$f(t) = f(t_0) + a_2(t - t_0)^2 + \cdots + a_n(t - t_0)^n + \ldots \quad (a_2 < 0),$$

причем существует $h > 0$ такое, что вне этой окрестности $f(t_0) — f(t) > h$. Пусть еще функция $t = \psi(\tau)$ определяется в окрестности точки $\tau = 0$ из уравнения $f(t_0) — f(t) = \tau^2$, причем в этой окрестности

$$\phi[\psi(\tau)]\psi'(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \tau^n \tag{5}$$

Тогда интеграл (3) имеет асимптотическое разложение

$$F(\lambda) = \int_a^b \phi(t) e^{\lambda f(t)} dt \sim e^{\lambda} f(t_0) \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_2 n}{\lambda^n} \frac{(2n)!}{4^n n!}.$$

Эта теорема относится к случаю, когда наибольшее значение $f(t)$ достигается во внутренней точке отрезка (a, b).

Теорема 2. Пусть интеграл (3) абсолютно сходится для некоторого $\lambda = \lambda_0$ (см теорему 1) и $f(t)$ достигает наибольшего значения в точке $t = a$, аналитична в этой точке ($f'(a) \neq 0$), и существует $h > 0$ такое, что $f(a) - f(t) > h$ вне некоторой окрестности точки а. пусть еще функция $t = \psi(t)$ определяется в окрестности точки $\tau = 0$ из уравнения $f(a) - f(t) = \tau$, причем в этой окрестности имеет место разложение (5). Тогда

$$F(\lambda) = \int_a^b \phi(t) e^{\lambda f(t)} dt \sim \frac{e^{f(a)}}{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! c_n}{\lambda^n} \tag{6}$$

Суть метода перевала состоит в том, что при больших значениях параметра λ величина интеграла

$$F(\lambda) = \int_C \phi(t) e^{\lambda f(z)} dz$$

в основном определяется тем участком пути интегрирования C, на котором $|e^{\lambda f(z)}| = e^{\lambda \mathrm{Re} f(z)}$, т. е. $\mathrm{Re} f(z)$ велика по сравнению со значениями на остальной части C. При этом интеграл оценивается тем легче, чем меньше этот участок и чем круче падает величина Re$f(z)$ В соответствии со сказанным, при применении метода перевала стараются деформировать путь интегрирования C в наиболее удобный путь $\widetilde{C}$, пользуясь тем, что по теореме Коши такая деформация не меняет величины интеграла. [**?**]

Чтобы уяснить вопрос геометрически, положим $z = \mathrm{x} + iy$ и представим

$$u = \mathrm{Re} f(z)$$

как поверхность S в пространстве (x, y, u). Так как функция и гармоническая, то S не может иметь точек максимума и минимума, а точки, в которых $f'(z) = 0$, будут для нее точками перевала (седловыми точками, рис. 1).

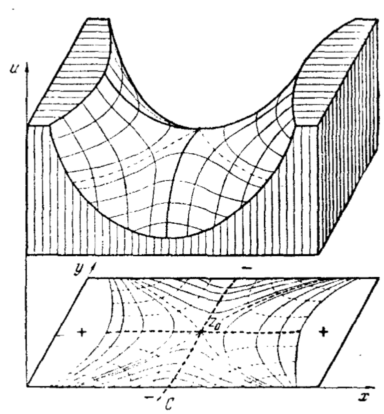

Рис. 1: Седловые точки

Наиболее удобный для оценки путь интегрирования $\widetilde{C}$, в каждой точке должен проходить в направлении наиболее быстрого изменения Re$f(z)$, а так как функция f(z) аналитическая, то это направление должно совпадать с линией, на которой Im$f(z) = \mathrm{const}$.

Также, новый контур $\widetilde{C}$ должен содержать точку z_0, в которой Re$f(z)$ достигает наибольшего значения на $\widetilde{C}$. Покажем для этого случая, что $f'(z_0) = 0$, то есть точка линии Im$f(z) = \mathrm{const}$, в которой Re$f(z)$ достигает наибольшего значения, является точкой перевала.

Так и есть, ведь в точке z_0, которая является максимумом для Re$f(z)$ производная $u = 0$ вдоль линии $\widetilde{C}$ должна быть равна 0, т. е. $\frac{\partial}{\partial s}\mathrm{Re} f(z) = 0$, а так как Im$f(z) = \mathrm{const}$ на $\widetilde{C}$, то $\frac{\partial}{\partial s}\mathrm{Im} f(z) \equiv= 0$, а значит и

$$f'(z_0) = \frac{\partial}{\partial s}\mathrm{Re} f(z) + i\frac{\partial}{\partial s}\mathrm{Im} f(z) = 0.$$

Подведем итоги. Для метода перевала к интегралу (2) путь интегрирования C *следует деформировать в путь* $\widetilde{C}$*, проходящий через точку перева-*

ла z_0 и в окрестности этой точки идущий вдоль линии наибольшего ската $\mathrm{Im} f(z) = \mathrm{const}$ *(рис. 1).*

Есть одно важное обстоятельство, обеспечивающее эффективность применения метода перевала: так как вдоль линии $\widetilde{C}$ имеем $\arg e^{f(z)} = \mathrm{Im} f(z) = \mathrm{const}$, то оценка интеграла (2) сводится к оценке интеграла от действительной функции, которая может быть проведена по методу Лапласа для интеграла вида (3).

Именно это позволяет нам пользоваться полученными результатами теорем 1 и 2.

Рассмотрим случай, когда путь интегрирования C можно деформировать в путь $\widetilde{C}$, проходящий через точку перевала z_0, где $f'(z_0) = 0$, $f''(z_0) \neq 0$, и в окрестности z_0 совпадающий с линией наибольшего ската $\mathrm{Im} f(z) = \mathrm{const}$, причем на $\widetilde{C}$ вне этой окрестности $\mathrm{Re} f(z) < \mathrm{Re} f(z_0) - h$ $(h > 0)$. Кроме того, предположим, что интеграл (2) абсолютно сходится для достаточно больших значений λ. Тогда образом, оценку интеграла можно провести на основании теоремы 1. Пусть $z = z(t)$ будет уравнение контура $\widetilde{C}$; Тогда,

$$F(\lambda) = \int_C \phi(z) e^{\lambda f(z)} dz = e^{\lambda i \mathrm{Im} f[z(t)]} \int_a^b \phi[z(t)] e^{\lambda \mathrm{Re} f[z(t)]} z' dt \tag{7}$$

и задача сводится к оценки интеграла вида 3 действительной области, разложение для которого уже было получено Лапласом, и имеет вид [?]

$$F(\lambda) = \int_a^b \phi(t) e^{\lambda f(t)} dt \sim \frac{e^{f(a)}}{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! c_n}{\lambda^n}$$

Выпишем первый член этого разложения. Обозначим $\phi[z(t)]z' = \widetilde{\phi}(t)$, $\mathrm{Re} f[z(t)] = \widetilde{f}(t)$ и тогда по формуле (6) получаем:

$$\int_a^b \widetilde{\phi}(t) e^{\lambda \widetilde{f}(t)} dt \sim e^{\lambda \widetilde{f}(t_0)} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \widetilde{c_0} \tag{8}$$

где $\widetilde{c_0}$ - свободный член в разложении функции $\widetilde{\phi}[\widetilde{\psi}(\tau)]\widetilde{\psi}'(\tau)$.

Имеем: $\widetilde{\phi}(t_0) = \phi(z_0) z'(t_0)$, и исходя из того, что $f[z(t)] = \mathrm{Re} f[z(t)] + i \mathrm{Im} f[z(t)] = \widetilde{f}(t) + \mathrm{const}$ вдоль $\widetilde{C}$, то

$$\widetilde{f}''(t_0) = \frac{d^2}{dt^2} f[z(t)] \mid_{t=t_0} = f''(z_0) z'^2(t_0).$$

Причем $f'[z(t)] z''(t) = 0$ при $t = t_0$. Так как эта величина отрицательна, то представив $z'(t_0) = k e^{i\theta}$, можно записать ее в виде $\widetilde{f}'' = -|f''(z_0)| k^2$. Получаем, что

$$\widetilde{c}_0 = \widetilde{\phi}(t_0)\sqrt{-\frac{2}{\widetilde{f}''(z_0)}} = \phi(z_0)e^{i\theta}\sqrt{\frac{2}{|f''(z_0)|}}$$

подставим найденное значение в (8), а затем в (7), получаем искомую формулу

$$F(\lambda) \sim e^{\lambda f(z_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{|f''(z_0)|}}\phi(z_0)e^{i\theta}\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \tag{9}$$

Как уже много раз говорилось, точка z_0 - это точка, где $\mathrm{Re} f(z)$ достигает своего максимального значения. В то же время совершенно обычная ситуация - когда на искомом контуре $\widetilde{C}$ имеется несколько точек перевала, в которых значения $\mathrm{Re} f(z)$ находятся вблизи к наибольшему, то следует взять сумму выражений (9) по всем этим точками.

Тот случай, когда контур интегрирования заканчивается в точке перевала z_0, аналогичным образом приводится к теореме 2.

Итак, мы получили рабочую формулу, подставляя в которую составляющие наших искомых функций $\phi(z)$ и $f(z)$, мы должны получать приближенные значения интеграла, когда $\lambda \to \infty$

3 Численное решение

Выполним численное интегрирование интеграла (1)

Заметим, что нижний предел интегрирования у нас $-\infty$. Очевидно, что с этими производить вычисления невозможно, но зато наша начальная функция под первым интегралом

$$A(t) = -c\int_{-\infty}^{t} F(\tau)d\tau$$

Имеет вид:

$$F(t) = F_0 e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} \cos(\omega x) \tag{10}$$

и является затухающей. Таким образом, решив уравнение

$$|e^{-\frac{t_b^2}{\alpha^2}}| < \epsilon$$

на промежутке $[-\infty; 0]$, приближаясь слева, мы получим то самое значение t_b, при котором можно не учитывать отрезок интегрирования в связи с достижением необходимой точности.

В этом случае интеграл (10) примет вид:

$$A(t) = -c\int_{t_b}^{t} F(\tau)d\tau$$

Для вычисления этого интеграла воспользуемся методом интегрирования Гаусса, когда

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = \sum_{j=1}^{N} \omega_j f(x_j)$$

В методе Гаусса точки интегрирования берутся с разными интервалами и при этом имеют различные веса ω_i, характеризующие их вклад в интеграл.

Метод Гаусса также может считать интегралы от неограниченных, быстро затухающий функция. Нам это не потребуется, но в связи с тем, что у нас этот интеграл (10) будет входить, далее, в подынтегральные функции, а также с необходимостью на каждом шаге пересчета матричного элемента, менять пределы интегрирования придется использовать адаптивные методы, то есть с переменным шагом. Они не так сложны в реализации, но поскольку вычислений будет очень много, имеет смысл воспользоваться уже готовой библиотекой GNU GSL.

GNU GSL - Это библиотека, написанная на языке программирования C для численных вычислений в прикладной математике и науке.

Самый главный ее плюс - в скорости вычислений, а также относительная экономия памяти, или же по крайней мере, ограничение ее использования. А также в ней реализовано огромное количество численных методов

Нас пока что интересует только один из них, а именно $gsl\_integration\_qags$, позволяющий нам интегрировать функцию на отрезке с заданной точностью.

Стоит отменить, что для первого интеграла (10) GSL не смог добиться точности абсолютной ошибки выше 10^{-13}, а значит, использовать результат в дальнейшем с большей точностью смысла не имеет.

Далее, у нас есть интеграл α

$$\alpha(\epsilon, t, t') = \frac{|e|}{c}[A_\tau(\epsilon) - \frac{1}{(t-')}\int_{t'}^{t} A(\tau)d\tau] \tag{11}$$

Который потом будет входить в интеграл

$$S(t, t') = -\frac{1}{2m}\int_{t'}^{t} \alpha(\epsilon, t, t')^2 d\epsilon \tag{12}$$

Для упрощения вычислений имеет преобразовать функцию (12) к виду

$$S(t, t') = -\frac{1}{2m}\int_{t'}^{t} A(\tau)^2 d\tau + \frac{1}{2(t'-t)}\int_{t'}^{t} A(\tau)d\tau \tag{13}$$

Итак мы получили функцию $S(t, t')$, которая входит в исходный интеграл (1). Но сложность для вычислений представляет именно последний интеграл M

Заметим схожесть интеграла (1) с общим видом преобразования Фурье

Введем замену $t - t' = \tau$, получаем

$$M = \int_0^\infty \frac{e^{i\epsilon\tau}}{\tau^{3/2}}(e^{i[+S(t,t-\tau)]/\hbar} - 1)d\tau$$

$$F(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi\tau}F(\tau)d\tau$$

Для дискретного преобразования Фурье разницы между нашими пределами не будет, так как функция будет определена только на отрезке $[0; t_{end}]$. То есть интегрирование можно ускорить, использовав не стандартные методы интегрирования, а используя дискретное преобразование Фурье. Или же быстрое преобразование Фурье, что будет еще лучшим решением.

Для этого воспользуемся библиотекой FFTW.

$FFTW$ является набором модулей на языках Си и Фортран для вычисления быстрого преобразования Фурье (БПФ). FFTW позволяет работать как с действительными, так и с комплексными числами, с произвольным размером входных данных, т.е. с длиной данных, не обязательно являющейся числом, кратным

2^n. Библиотека также включает модули параллельной обработки БПФ, которые позволяют использовать ее на многопроцессорных машинах с общей и распределенной памятью.

4 Формулы

Дана формула (1)

Часть интеграла с (-1) может быть отброшена, так как (говорилось ранее) основной вклад с интеграл вносят седловые точки. !!!!!Написать что-нибудь еще

$$M \sim \int_{-\infty}^{t} \frac{1}{(t-t')^{3/2}} e^{i[\epsilon(t-t')+S(t,t')]/\hbar} dt'$$

Введем замену $t - t' = \tau$, получаем

$$M \sim \int_{0}^{\infty} \frac{1}{\tau^{3/2}} e^{i[\epsilon\tau+S(t,t-\tau)]/\hbar} d\tau$$

Если обозначить $f(t,\tau) = \epsilon\tau + S(t, t-\tau)$ и $\phi(\tau) = \frac{1}{\tau^{3/2}}$

То получим формулу вида

$$M \sim \int_{0}^{\infty} \phi(\tau) e^{if(t,\tau)/\hbar} d\tau$$

Которая совпадает с формулой для Метода Перевала, применимого для интегралов вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{f(x)} dx$$

Для нашего случая приближение должно принимать вид:

$$M_0(\epsilon, t) \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}} \sum_{t0} e^{f(t_0)} \sqrt{-\frac{2}{f''(t_0)}} \phi(t_0)$$

, где t_0 - корни уравнения $f'(t) = 0$

Остается только получить формулу для $f''(t)$ и решить уравнение на стационарные точки

В формулу (1) входят некоторые элементы, такие как

$$S(t,t') = -\frac{1}{2m} \int_{t'}^{t} \alpha(\epsilon, t, t')^2 d\epsilon$$

$$\alpha(\epsilon, t, t') = \frac{|e|}{c} [A_\tau(\epsilon) - \frac{1}{(t-')} \int_{t'}^{t} A(\tau) d\tau]$$

$$A(t) = -c\int_{-\infty}^{t} F(\tau)d\tau$$

Найдем теперь перевальные точки (t_0), дифференцируя по τ

$$f(t,\tau) = \epsilon\tau + S(t, t-\tau),$$
$$f'(t,\tau) = \epsilon + S'(t, t-\tau)$$
$$f'(t,\tau) = 0 => S'(t, t-\tau) = -\epsilon \tag{14}$$

С введенной заменой S примет вид

$$S(t, t-\tau) = -\frac{1}{2m}\int_{t-\tau}^{t} \alpha(\epsilon, t, t-\tau)^2 d\epsilon$$

Дифференцируя по τ, получаем

$$S'(t, t-\tau) = -\frac{1}{2m}\alpha(t-\tau, t, t-\tau)^2$$

Произведем обратную замену $t_0 = t - \tau$ и с учетом того, что $S' = -\epsilon$ (14), получаем явный вид уравнения на стационарные точки:

$$\alpha(t_0, t, t_0) = 2\epsilon m$$

Теперь найдем $f''(t)$

$$f''(t) = -\frac{1}{2m}[\alpha(t-\tau, t, t-\tau)^2]' =$$

$$= -\frac{2\alpha(t_0, t, t_0)}{2m} * \alpha(t_0, t, t_0)'$$

Рассмотрим новое α

$$\alpha(t_0, t, t_0) = \frac{|e|}{c}[A_\tau(t_0) - \frac{1}{(t-t_0)}\int_{t_0}^{t} A(\tau)d\tau]$$

Итого, получаем формулу для F'' вида

$$F''(t, t_0) = -\frac{|e|\alpha(t_0, t, t_0)}{m}[F(t_0) -$$

$$-\frac{1}{(t-t_0)^2}\int_{t_0}^{t} A(\tau)d\tau - A(t_0)\frac{1}{t-t_0}]$$

Обозначим $D = -2mF''(t, t_0)$ и

$$S^{\sim} = \epsilon\tau + S(t, t - \tau) = \epsilon(t - t_0) + S(t, t_0)$$

Подставляя в формулу для Метода перевала, получаем:

$$M_0(\epsilon, t) \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}} \sum_{t_0} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}S^{\sim}(t,t_0)}\sqrt{2m}}{\sqrt{D}(t - t_0)^{3/2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi i\hbar}} \sum_{t_0} \frac{me^{\frac{i}{\hbar}S^{\sim}(t,t_0)}}{\sqrt{D}(t - t_0)^{3/2}}$$

Заключение