

Trajektorije značajne za računanje funkcionalnog integrala u kvantnoj mehanici

U ovom radu su proučavane trajektorije značajne za računanje amplituda verovatnoće u kvantnoj mehanici u funkcionalnom formalizmu. Identifikovana je oblast oko rešenja klasičnih jednačina kretanja koja sadrži ove trajektorije za anharmonijski oscilator. Ako se trajektorije generišu tako da sve pripadaju oblasti odabrane širine $\delta(t)$ u trenutku t , dobijeni rezultat će imati relativnu grešku r . Numerički je dobijeno da se širina oblasti $\delta(t)$, koja daje unapred određenu vrednost greške r , može napisati kao polinom po \sqrt{t} i $\sqrt{T-t}$, gde je T vreme evolucije kvantnog sistema. Takođe je dobijeno da su koeficijenti ovog polinoma linearne funkcije od $\ln r$. Numerički je proučavana i zavisnost maksimalne širine oblasti $\delta = \delta(T/2)$ od anharmoniciteta i dobijena je kvadratna zavisnost.

Uvod

Dobro je poznato da postoje različite, ali međusobno ekvivalentne formulacije kvantne mehanike (Feynman i Hibbs 1965; Herbut 1983). Uobičajeni pristup koji se razvio uz kvantnu mehaniku je operatorski formalizam. U ovom formalizmu se stanje kvantnog sistema u trenutku t označava sa $|\Psi, t\rangle$. Moguće je odabrati više reprezentacija za prikaz vektora stanja, a najčešće se koristi koordinatna reprezentacija koja odgovara standardnoj, Šredingerovoj slici (talasne funkcije). U ovoj reprezentaciji vektori stanja se prikazuju kao linearne kombinacije baznih vektora $|q, t\rangle$, gde q predstavlja položaj čestice u trenutku t . Zbog jednostavnosti razmatraćemo sistem od jedne čestice koja se kreće u jednoj prostornoj dimenziji.

U operatorskom formalizmu amplituda verovatnoće prelaza sistema iz stanja $|\alpha, t_\alpha\rangle$ u stanje $|\beta, t_\beta\rangle$ je jednaka:

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

gde $\hat{U}(t_\beta - t_\alpha, t_\alpha)$ predstavlja evolucionni operator koji opisuje evoluciju sistema od trenutka t_α do trenutka t_β . Kvadrat modula amplitude verovatnoće

Marina Radulaški
(1986), Beograd,
Ljube Stojanovića
38A, učenica 3.
razreda Matematičke
gimnazije u Beogradu

MENTOR:
Antun Balaž, Institut
za fiziku, Zemun

prelaza predstavlja verovatnoću da će čestica iz početnog stanja $|\alpha, t_\alpha\rangle$ preći u stanje $|\beta, t_\beta\rangle$. Za sisteme koji su invarijantni na vremenske translacije, što znači da je energija održana (konzervativni sistemi), evolucionni operator zavisi samo od vremena trajanja evolucije $\hat{U} = \hat{U}(T)$ i dat je sa:

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

gde \hat{H} predstavlja hamiltonijan sistema. Za ovakve sisteme amplituda A zavisi samo od α, β i $T = t_\beta - t_\alpha$:

$$A(\alpha, t_\alpha; \beta, t_\beta) = A(\alpha, \beta, T)$$

U ovom radu razmotrićemo neke aspekte primene funkcionalnog formalizma u kvantnoj mehanici. U funkcionalnom formalizmu se za računanje amplitude verovatnoće prelaza iz stanja $|\alpha, t_\alpha\rangle$ u stanje $|\beta, t_\beta\rangle$ koriste sve moguće trajektorije sa graničnim uslovima $q(t_\alpha) = \alpha, q(t_\beta) = \beta$. Svakoju trajektoriji se dodeljuje težina $\exp(i/\hbar) \cdot S$, gde S predstavlja dejstvo na toj trajektoriji (integral lagranžijana po vremenu od početnog do krajnjeg trenutka, $S = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} L dt$), a onda se svi ovi doprinosi sabere. Formalni zapis amplitude verovatnoće u ovom formalizmu je (Balaž 2004):

$$A(\alpha, \beta, T) = \int [d\mu] e^{\frac{i}{\hbar} S[q(t)]}$$

gde $[d\mu]$ predstavlja meru funkcionalnog integrala, koja zavisi od oblika dejstva teorije i mora se izvesti za svaki slučaj posebno. Iako smo u prethodnom izrazu iskoristili standardnu oznaku za integral, funkcionalni integrali nisu u svojoj osnovi Rimanovi integrali sa kojima se obično susrećemo u fizici. Kod njih se, umesto integracije po nekom intervalu, integrali po svim trajektorijama sa zadatim graničnim uslovima, odnosno po svim tačkama $q(t)$ kojih ima neprebrojivo beskonačno mnogo, pa je zbog toga funkcionalni integral znatno komplikovaniji objekat. Numerički se on računa korišćenjem Fajnmanove diskretizacije, kao što će biti objašnjeno u sledećem poglavlju.

Jasno je da od svih mogućih trajektorija neke daju veći, a neke manji doprinosi amplitudi A . Poznato je (Balaž *et al.* 1998-2000) da se bitne trajektorije nalaze u okolini očekivane vrednosti polja:

$$\langle q(t) \rangle = \frac{\int [d\mu] q(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t)]\right)}{\int [d\mu] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t)]\right)}$$

U semiklasičnom sektoru teorije, gde je dejstvo mnogo veće od Planckove konstante ($S \gg \hbar$), očekivana vrednost polja je približno jednaka rešenju $q_{cl}(t)$ klasičnih jednačina kretanja (Ojler-Lagranževih jednačina):

$$\langle q(t) \rangle \approx q_{cl}(t)$$

U ovom radu su razmatrane trajektorije koje daju dominantan doprinos funkcionalnom integralu amplitude verovatnoće prelaza. Za fiksirani trenutak evolucije t_p određena je širina oblasti $\delta(t_p)$ oko klasičnog rešenja $q_{cl}(t_p)$, u kojoj su sadržane trajektorije čiji doprinos daje unapred određeno relativno odstupanje od vrednosti amplitude verovatnoće. Odstupanje od egzaktnih vrednosti nastaje zbog odbacivanja trajektorija koje ne leže u oblasti odabrane širine $\delta(t_p)$.

Trajektorije značajne za računanje funkcionalnog integrala

Da bismo izračunali amplitudu $A(\alpha, \beta, T)$ koristićemo standardnu Fajnmanovu diskretizaciju (Feynman i Hibbs 1965). Ona se sastoji u podeli vremena evolucije T na N jednakih intervala $\epsilon_N = T/N$. Radi određenosti, posmatrajmo klasu teorija opisanih lagranžijanom:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q)$$

U pitanju je veoma široka klasa teorija pošto u nju spadaju skoro svi realni fizički sistemi i na ovaj način smo umanjili opštost razmatranja.

Za ovu klasu teorija se u funkcionalnom formalizmu (Feynman and Hibbs 1965) dobija*:

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi i \epsilon_N)^{N/2}} \exp \left\{ i \epsilon_N \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 - V(q_{n,n+1}) \right] \right\}$$

gde je $q_0 = \alpha$, $q_N = \beta$, a $q_{n,n+1} = \frac{q_n + q_{n+1}}{2}$. Iz ovog izraza vidimo kako izgleda mera funkcionalnog integrala za ovu klasu teorija.

Da bi se obezbedila konvergencija prethodnog integrala u numeričkom računu, primenjuje se Vikova rotacija ($it \rightarrow \tau$). Ona predstavlja prelazak sa realne na imaginarnu vremensku osu, što se svodi na rotaciju konture integracije za 90° . Tada formula za računanje amplitude A dobija oblik:

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi \epsilon_N)^{N/2}} \exp \left\{ - \epsilon_N \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 + V(q_{n,n+1}) \right] \right\}$$

* Koristili smo prirodni sistem jedinica $\hbar = c = 1$

Pošto je ovakav integral nemoguće analitički rešiti za sve potencijale od interesa (osim linearnog harmonijskog oscilatora i Kulonovog potencijala), primena numeričkih metoda je neophodna.

Bitno je pomenuti da postoji način da se izvrši obrnuta Vikova rotacija, odnosno da se nađe vrednost funkcionalnog integrala A kada je vreme realno. Međutim, obično računamo fizičke veličine koje ne zavise eksplicitno od vremena (npr. računanje energetskih nivoa sistema), pa nam taj postupak tada uopšte nije potreban.

Za fiksiranu vrednost N se, računanjem gornjih višestrukih integrala, dobija vrednost A_N . Egzaktna vrednost za A se dobija u limesu $N \rightarrow \infty$. Zavisnost A_N od N je polinomijalna funkcija po $1/N$ (Balaž 2004; Feynman i Hibbs 1965), što se može videti na slici 1, pa se amplituda A dobija fitovanjem na krivu:

$$A_N = a_0 + \frac{a_1}{N} + \frac{a_2}{N^2} + \Lambda.$$

Pri tome, najbolje je fitovati polinom po $x = 1/N$, pošto metoda najmanjih kvadrata (MNK) daje najsigurnije rezultate za polinomijalne funkcije.

U ovom radu razmatrana je Φ^4 teorija, odnosno anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom, čiji je lagranžijan dat izrazom:

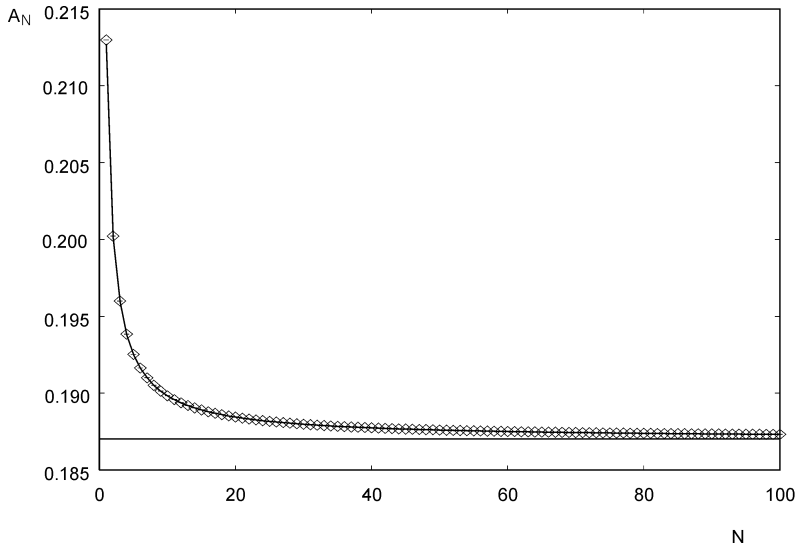
$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q^2 - \frac{g}{4!} q^4$$

gde je g anharmonicitet. Pogodnim redefinisanjem koordinate q i vremena τ moguće je postići $m = \omega = 1$. To znači da su jedini parametri teorije α , β , g i T . Zbog određenosti, kao i dostupnog računarskog vremena, odabrali smo parametre $\alpha = 0$ i $\beta = 1$, dok smo parametre g i T menjali.

Kao što je pomenuto u uvodu, značajne trajektorije za računanje funkcionalnog integrala se nalaze u okolini očekivane vrednosti $\langle q(t) \rangle$. Pošto je računanje ove očekivane vrednosti numerički zahtevno, aproksimirali smo je klasičnim rešenjem $q_{cl}(t)$.

Da bismo proučili kako širina δ oblasti oko $q_{cl}(t)$ utiče na vrednost amplitude A , integraciju po koordinati q u odabranom trenutku evolucije t_p suzićemo na interval $[q_{cl}(t_p) - \delta, q_{cl}(t_p) + \delta]$. U svim ostalim tačkama $t_k \neq t_p$ oblast integracije je $(-\infty, \infty)$.

Za fiksirani trenutak evolucije t_p i fiksiranu širinu δ može se izračunati $A(t_p, \delta)$ fitovanjem vrednosti $A_N(t_p, \delta)$ na polinomijalnu funkciju po $1/N$, a $A = A(t_p, \infty)$ predstavlja egzaktnu vrednost amplitude pre-



Slika 1.

Tipična zavisnost A_N od broja podeonih intervala N . Na grafiku su prikazani zavisnost fitovana po $1/N$ na polinom četvrtog stepena i vrednost $A = 0.1870294(3)$ koja se dostiže u limesu $N \rightarrow \infty$. Parametri teorije su $g=1$, $T=1$, a broj Monte Karlo uzoraka je $N_{MC}=10^7$.

Figure 1.

Typical dependence of A_N on the number of time slices N . The graph also shows fitted 4th order polynomial in $1/N$, and the value $A = 0.1870294(3)$, obtained in the limit $N \rightarrow \infty$. Parameters of the theory are $g=1$, $T=1$, and the number of Monte Carlo samples is $N_{MC}=10^7$.

laza i ne zavisi od t_p . Označimo sa r relativnu grešku koja se načini kada se amplituda prelaza računa na gore opisan način, tj. kada se oblast integracije ograniči u tački t_p :

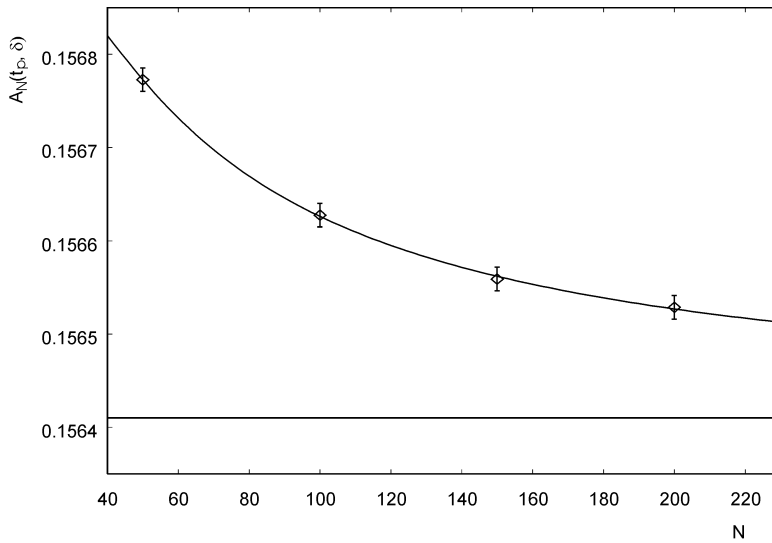
$$r = \frac{|A(t_p, \delta) - A|}{A}$$

Razmotrićemo kakva je zavisnost $\delta(t_p)$ koja dovodi do relativne greške r u finalnom rezultatu. Stoga ćemo prvo odrediti $A(t_p, \delta)$ za vrednosti $t_p \in (0, T)$ i odabrane vrednosti δ (interval vrednosti za δ biramo tako da relativna greška iznosi nekoliko procenata). Za fiksiranu vrednost t_p i nekoliko vrednosti δ posmatraćemo zavisnost $r(\delta)$, da bismo inverzijom ove funkcije za određeno r odredili zavisnost $\delta(t_p)$. Potom ćemo posmatrati kako maksimalna širina oblasti δ zavisi od vrednosti anharmoniciteta.

Numerički rezultati

Za potrebe prvog dela ovog rada iskorišćen je, sa određenom izmenom, osnovni Monte Karlo algoritam iz rada Antuna Balaža (Balaž 2004). U skladu sa idejama prethodnog poglavlja, algoritam je izmenjen (izmena koda je priložena u dodatku) tako da je za fiksirani trenutak evolucije t_p integracija po koordinati q ograničena, tj. $q(t_p)$ za svaku trajektoriju se generiše iz intervala $[q_c(t_p) - \delta, q_c(t_p) + \delta]$.

Simulacija je izvršavana za četiri različite vrednosti anharmoniciteta g ($g = 0.1$, $g = 1$, $g = 10$ i $g = 100$), dve vrednosti vremena evolucije T ($T = 1$ i $T = 10$), 50 ekvidistantnih vrednosti t_p , deset vrednosti δ koje su



Slika 2.

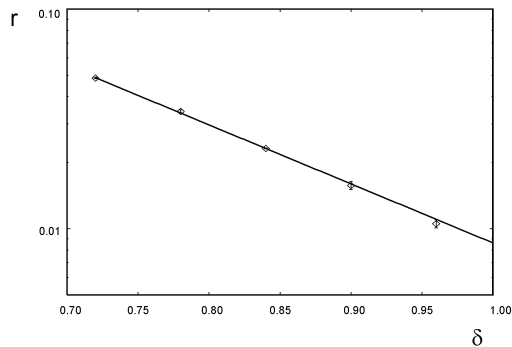
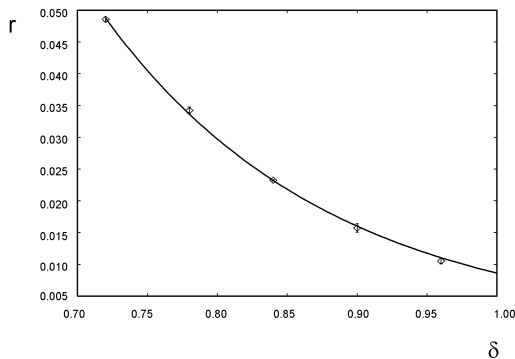
Tipična N -zavisnost amplitude $A_N(t_p, \delta)$, pri čijem računanju je integracija po $q(t_p)$ ograničena na interval $[q(t_p) - \delta, q(t_p) + \delta]$. Na grafiku su prikazani i fitovana kvadratna zavisnost i slobodan član tog polinoma, jednak $A(t_p, \delta)$. Egzaktna vrednost funkcionalnog integrala je $A = 0.159438(2)$. Parametri teorije su $g = 10, T = 1, t_p = 0.3, \delta = 1$, dok je $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$. Relativna greška je $r = 1.9\%$.

odabrane za svaki skup parametara (g, T), tako da relativne greške r imaju vrednosti od nekoliko procenata. Tipična vrednost broja Monte Karlo uzoraka N_{MC} iznosila je 10^7 . Za fitovanje vrednosti $A(t_p, \delta)$ kao slobodnog člana u zavisnosti $A_N(t_p, \delta)$ od $1/N$ korišćene su četiri vrednosti broja podionih intervala N ($N = 50, N = 100, N = 150, N = 200$). Vrednosti smo, koristeći program *gnuplot* (<http://www.gnuplot.info>), fitovali na kvadratnu funkciju po $1/N$ (slika 2). Za sve kombinacije parametara g i T je takođe izračunata i vrednost amplitude prelaza A za slučaj kada integracija nije ograničena (korišćenjem nepromenjenog osnovnog koda, kao i korišćenjem promenjenog koda sa ekstremno velikim vrednostima širine δ ; ovo je ujedno i provera ispravnosti promenjenog koda). Ove simulacije su izvršene za oko 60 sati na 50-procesorskom klasteru PARADOX koji se nalazi u Laboratoriji za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu (<http://scl.phy.bg.ac.yu/>).

Da bismo odabrali širinu δ koja daje željeno odstupanje r za fiksiranu vrednost t_p , neophodno je izračunati $A(t_p, \delta)$ za više različitih vrednosti δ i nakon toga naći funkciju $r(\delta)$. Iz inverzne funkcije $\delta(r)$ ćemo tada biti u mogućnosti da izračunamo traženu vrednost δ . Na slici 3 data je tipična zavisnost $r(\delta)$. Jasno je da važi $r \rightarrow 0$ kad $\delta \rightarrow \infty$ (jer tada integracija nije ograničena, pa se dobija egzaktni rezultat $A(t_p, \infty) = A$, čije je relativno odstupanje $r = 0$). Dobijena vrednost $A(t_p, \delta)$ se smanjuje kada smanjujemo vrednost δ (jer se oblast integracije sužava, pa se smanjuje broj trajektorija koje leže u toj oblasti, a samim tim je njihov ukupan doprinos manji), odnosno r raste kada δ opada, pa je $r(\delta)$ monotono opadajuća

Figure 2.

Typical N -dependence of the amplitude $A_N(t_p, \delta)$, obtained when the integration over $q(t_p)$ was restricted on the interval $[q(t_p) - \delta, q(t_p) + \delta]$. Graph also shows fitted quadratic polynomial in $1/N$ and its zeroth order term, equal to $A(t_p, \delta)$. Exact value of the functional integral is $A = 0.159438(2)$. Parameters of the theory are $g = 10, T = 1$.



funkcija. Na slici 3 (desno) data je zavisnost $r(\delta)$ na semilogaritamskom grafiku. Kako je u pitanju linearna zavisnost, zaključujemo da je za razmatrani interval vrednosti δ :

$$r(\delta) = r_0 e^{-\gamma \delta}$$

što zadovoljava sve pomenute uslove ove funkcije.

Za $\delta = 0$ očekivali bismo $A(t_p, 0) = 0$ pošto su trajektorije koje zadovoljavaju traženi uslov samo one sa $q(t_p) = q_{cl}(t_p)$. Verovatnoća da se generiše $q(t_p)$ baš jednako $q_{cl}(t_p)$ je metafizički jednaka nuli, pa je i $A(t_p, 0) = 0$. Odavde bismo očekivali $r(0) = 1$, odnosno $r_0 = 1$. Fitovana funkcija ne zadovoljava ovaj uslov (jer je $r_0 \neq 1$), što govori da bi za opisivanje zavisnosti u blizini $\delta = 0$ trebalo uvesti određene popravke na odabranu funkciju. Međutim, nas interesuje ponašanje sistema za vrednosti δ koje daju $r \ll 1$, pa ovo možemo zanemariti.

Dakle, inverzna funkcija iz koje ćemo za odabranu vrednost r izračunati odgovarajuće odstupanje δ data je sa $\delta(r) = \frac{\ln r_0 - \ln r}{\gamma}$.

Za setove parametara $g = 10, T = 10$ i $g = 100, T = 10$ (slika 4) grafici nemaju eksponencijalni oblik. Razlog za to je što smo značajne trajektorije tražili u oblasti centriranoj na klasičnu trajektoriju $q_{cl}(t)$, umesto na očekivanu vrednost $\langle q(t) \rangle$. Za veće vrednosti konstante interakcije g i duža vremena evolucije T u sistemu koji posmatramo dominantan doprinos daju kvantni fenomeni, pa aproksimacija $\langle q(t) \rangle \approx q_{cl}(t)$ više ne važi. Zbog toga ove setove parametara isključujemo iz daljeg razmatranja. U budućem radu ovo će biti detaljnije razmotreno.

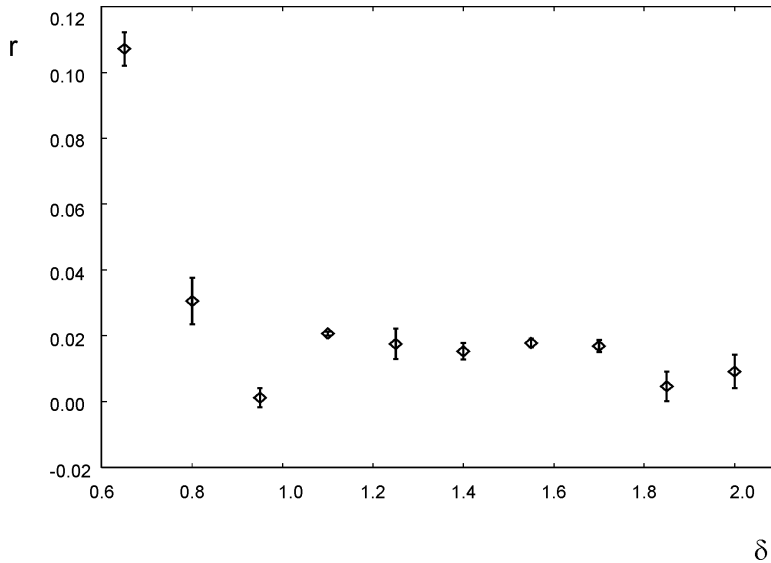
Za određeno r (i fiksirane vrednosti parametara g, T i t_p) koristeći inverznu funkciju $\delta(r)$ možemo da izračunamo širinu δ koja nam daje željeno relativno odstupanje r . Drugim rečima, kada fiksiramo sve parametre (g, T i r),

Slika 3.

Tipična zavisnost r (relativnog odstupanja $A(t_p, \delta)$ od A) od δ fitovana na eksponencijalnu funkciju na normalnoj (levo) i semilogaritamskoj skali (desno). Parametri teorije su $g = 100, T = 1, t_p = 0.7$ i $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^7$.

Figure 3.

Typical δ -dependence of r (relative error of $A(t_p, \delta)$) fitted to exponential function (left), shown also on log-normal scale (right). Parameters of the theory are $g = 100, T = 1, t_p = 0.7$, and $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^7$.



Slika 4.
Primer grafika $r(\delta)$ kod koga nije postignuta eksponencijalna zavisnost. Parametri teorije su $g = 100$, $T = 10$, $t_p = 4$, i $N_{MC} = 3.84 \cdot 10^8$.

Figure 4.
Example of a graph where $r(\delta)$ does not have exponential form. Parameters of the theory are $g = 100$, $T = 10$, $t_p = 4$, and $N_{MC} = 3.84 \cdot 10^8$.

dobijamo zavisnost $\delta(t_p)$, pri kojoj je relativno odstupanje jednako r . Za $\alpha = \beta$ zavisnost $\delta(t_p)$ je simetrična u odnosu na $t_p = T/2$, pa funkcija kojom se opisuje mora na simetričan način da zavisi od t_p i $T - t_p$. Kod nas je $\alpha = 0$, $\beta = 1$, tj. $\delta(t_p)$ ipak odstupa od simetrije u odnosu na $t_p = T/2$. Kao što ćemo videti, odstupanje od simetrije je malo, što ukazuje da funkcija $\delta(t_p)$ zavisi od t_p i $T - t_p$ na sličan način.

Poznato je (Huang 1987) da se primenom Vikove rotacije na Šredingerovu jednačinu dobija difuziona jednačina. U procesu difuzije srednje rastojanje od početnog položaja je srazmerno kvadratnom korenu vremena kretanja. Zato smo zavisnosti $\delta(t)$ fitovali na polinome po \sqrt{t} i $\sqrt{T-t}$.

Rezultati su se odlično slagali sa fitovanim polinomima dugog i trećeg stepena po \sqrt{t} i $\sqrt{T-t}$:

$$F_2(t) = p_0 + p_1 \sqrt{t} + p_2 \sqrt{T-t} + p_3 \sqrt{t(T-t)} + p_4 t + p_5 (T-t)$$

$$F_2(t) = p_0 + p_1 \sqrt{t} + p_2 \sqrt{T-t} + p_3 \sqrt{t(T-t)} + p_4 t + p_5 (T-t) +$$

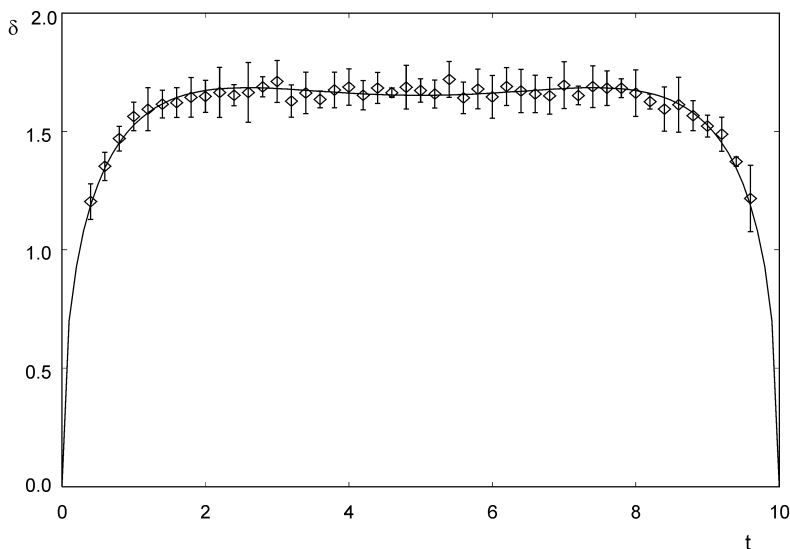
$$+ p_6 t^{3/2} + p_7 (T-t)^{3/2} + p_8 \sqrt{t} (T-t) + t \sqrt{T-t}$$

Rezultati opšteg fita u svim slučajevima pokazali su da je $p_4 \approx p_5$, pa se članovi $p_4 t$ i $-p_5 t$ mogu skratiti, a $p_5 T$ može da se uključi u p_0 . Zbog toga smo uzeli $p_4 = p_5 = 0$. Pošto je vrednost koordinate $q(t)$ fiksirana u početnom i krajnjem trenutku, za te trenutke evolucije važi $\delta(0) = \delta(T) = 0$, što nam može pomoći da smanjimo broj nepoznatih parametara fitovanog polinoma.

Za slučajeve kada je $T = 10$ zavisnosti $\delta(t)$ se najbolje fituju na funkciju drugog stepena. Kada se ubace uslovi $F_2(0) = 0$ i $F_2(T) = 0$, funkcija ima dva slobodna parametra (npr. p_0 i p_3) i svodi se na:

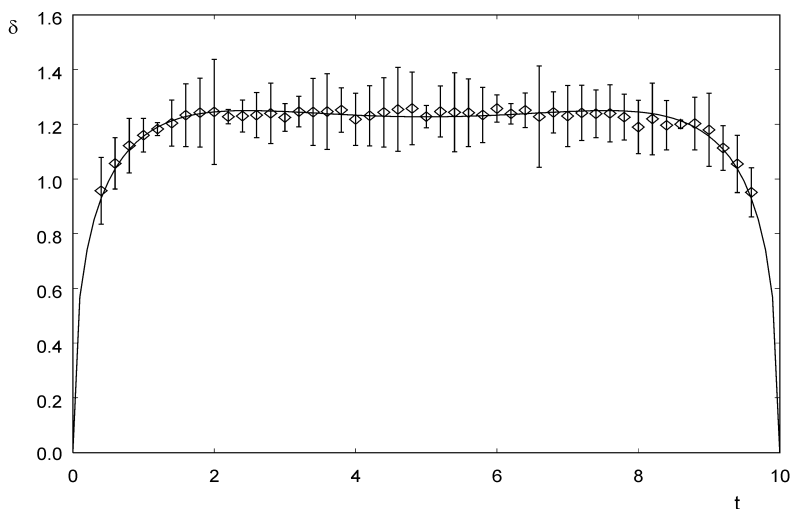
$$F_2'(t) = p_0 - p_0 \left(\sqrt{\frac{t}{T}} + \sqrt{1 - \frac{t}{T}} \right) + p_3 \sqrt{t(T-t)}$$

Na slikama 5 i 6 date su zavisnosti $\delta(t)$ i fitovani polinomi $F_2'(t)$ za različite vrednosti parametara teorije i različite vrednosti relativne greške r .



Slika 5.
Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_2'(t)$ za parametre $g = 0.1$, $T = 10$, $r = 2\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.00223656(3)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0 = -32.3(4)$, $p_1 = -2.35(4)$.

Figure 5.
Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_2'(t)$ for the parameters $g = 0.1$, $T = 10$, $r = 2\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.00223656(3)$. Coefficients of the polynomial are $p_0 = -32.3(4)$, $p_1 = -2.35(4)$.



Slika 6.
Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_2'(t)$ za parametre $g = 1$, $T = 10$, $r = 6\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.0017461(3)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0 = -25.6(4)$, $p_1 = -1.88(3)$.

Figure 6.
Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_2'(t)$ for the parameters $g = 1$, $T = 10$, $r = 6\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.0017461(3)$. Coefficients of the polynomial are $p_0 = -25.6(4)$, $p_1 = -1.88(3)$.

Za slučajeve kada je $T = 1$ fit je sugerisao da treba koristiti polinom trećeg stepena i pri tome odbaciti članove $p_3 \cdot \sqrt{t(T-t)}$, $p_8 \cdot \sqrt{t(T-t)}$ i $p_9 \cdot \sqrt{T-t}$, pošto je u granicama greške dobijeno $p_3 = p_8 = p_9 = 0$. Kada uključimo uslove $F_3(0) = 0$ i $F_3(T) = 0$, broj nepoznatih parametara funkcije se smanjuje na tri (npr. p_0, p_1, p_2) i ima oblik:

$$F_3' = p_0 + p_1 \sqrt{t} + p_2 \sqrt{T-t} - (p_0 + p_1)^{3/2} - (p_0 + p_2)(T-t)^{3/2}$$

Na slikama 7-10 date su zavisnosti $\delta(t)$ i fitovani polinomi $F_3'(t)$ za različite vrednosti parametara teorije i različite vrednosti relativne greške r .

Slike 7–10 (naspramna strana):

Figures 7–10 (opposite page):

Slika 7. Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g = 0.1, T = 1, r = 1\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.19047435(4)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0 = -2.38(9), p_1 = 2.72(4), p_2 = 2.75(4)$.

Figure 7. Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_3'(t)$ for the parameters $g = 0.1, T = 1, r = 1\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.19047435(4)$. Coefficients of the polynomial are $p_0 = -2.38(9), p_1 = 2.72(4), p_2 = 2.75(4)$.

Slika 8. Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g = 1, T = 1, r = 4\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.1870296(3)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0 = -2.07(9), p_1 = 2.23(4), p_2 = 2.22(4)$.

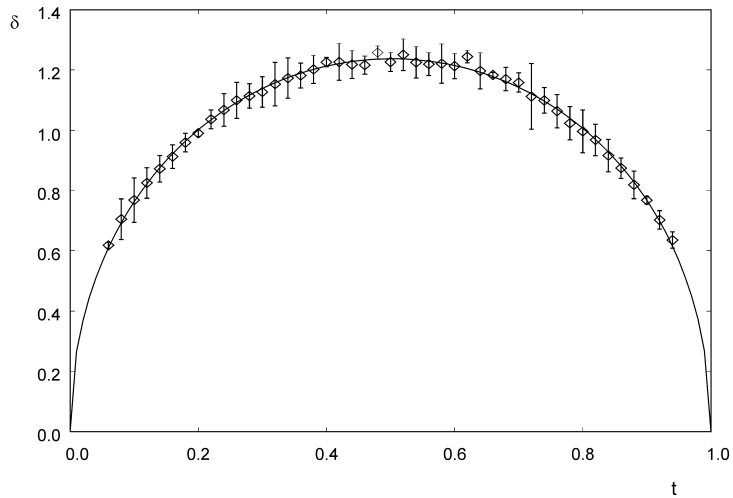
Figure 8. Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_3'(t)$ for the parameters $g = 1, T = 1, r = 4\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.1870296(3)$. Coefficients of the polynomial are $p_0 = -2.07(9), p_1 = 2.23(4), p_2 = 2.22(4)$.

Slika 9. Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g = 10, T = 1, r = 2\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.159438(2)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0 = -2.66(7), p_1 = 2.63(3), p_2 = 2.55(3)$.

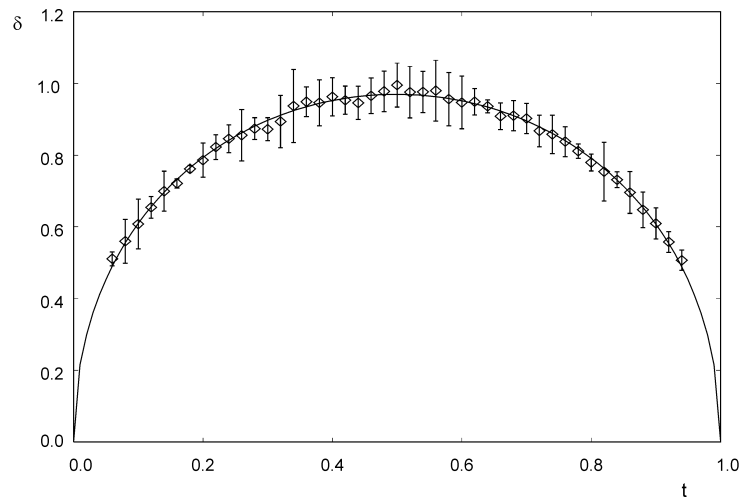
Figure 9. Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_3'(t)$ for the parameters $g = 10, T = 1, r = 2\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^6$; $A = 0.159438(2)$. Coefficients of the polynomial are $p_0 = -2.66(7), p_1 = 2.63(3), p_2 = 2.55(3)$.

Slika 10. Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g = 100, T = 1, r = 5\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^7$; $A = 0.064738(2)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0 = -2.7(1), p_1 = 2.32(5), p_2 = 2.15(5)$.

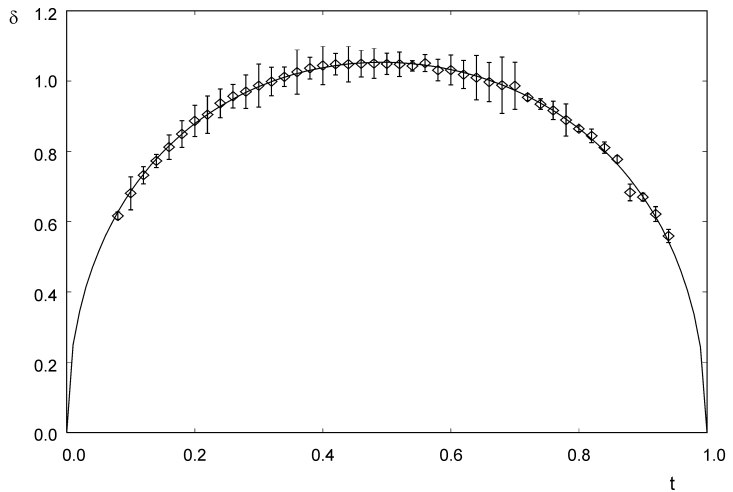
Figure 10. Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_3'(t)$ for the parameters $g = 100, T = 1, r = 5\%$; $N_{MC} = 9.6 \cdot 10^7$; $A = 0.064738(2)$. Coefficients of the polynomial are $p_0 = -2.7(1), p_1 = 2.32(5), p_2 = 2.15(5)$.



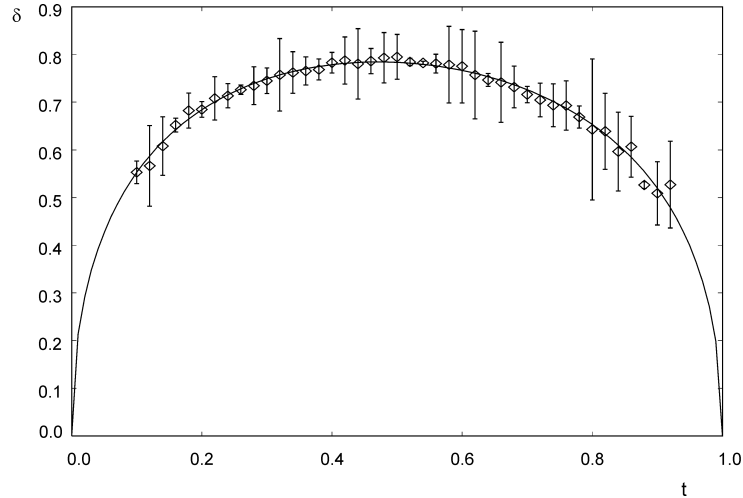
Slika 7 / Figure 7



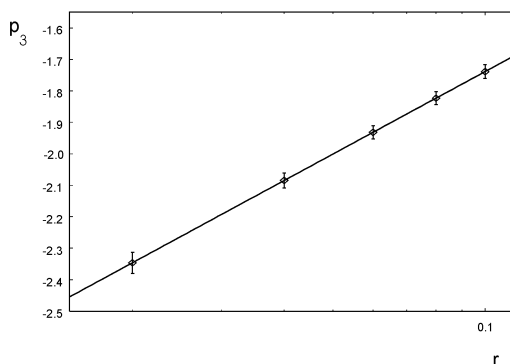
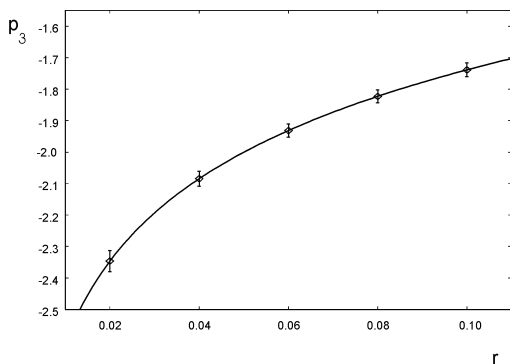
Slika 8 / Figure 8



Slika 9 / Figure 9



Slika 10 / Figure 10



Primitili smo da koeficijenti p_0 i p_3 , odnosno p_0, p_1, p_2 iz prethodnih polinomijalnih funkcija imaju logaritamsku zavisnost od r (slika 11):

$$p_i = C_i + D_i \ln r$$

Ovo ponašanje nije analitički izvedeno. U tabeli 1 date su vrednosti parametara C_i i D_i fitovanih za različite setove parametara g i T .

Za fiksiranu vrednost relativnog odstupanja r , za razmatrane skupove parametara teorije g i T , pomoću podataka iz tabele 1 možemo da izračunamo koeficijente polinomijalne funkcije $\delta(\sqrt{t}, \sqrt{T-t})$. Dakle, poznata nam je i zavisnost $\delta(t)$, pa za fiksirano t možemo da odredimo širinu oblasti \tilde{a} oko klasičnog rešenja $q_c(t)$ u kojoj su sadržane trajektorije čiji ukupan doprinos daje rezultat sa relativnom greškom r .

U daljem radu ovo će biti iskorišćeno za optimalizaciju primenjenog algoritma. Naime, ukoliko ograničimo integraciju na oblast širine $\delta(t)$ u svakom trenutku t (a ne, kao do sada, samo u nekom odabranom trenutku vremena), ukupna relativna greška biće jednaka R , pri čemu ćemo numerički naći zavisnost $R(r)$. Dakle, ako fiksiramo vrednost r , a samim tim i vrednost R , ujedno imamo i zavisnost širine oblasti $\delta(t)$ koja će dati rezultat sa relativnom greškom R . Sužavanje integracije u jednoj tački je komplikovalo algoritam, ali ako integraciju sužavamo na odabranu oblast u svakoj tački onda se algoritam može značajno pojednostaviti i izbeći generisanje trajektorija iz Gausove raspodele. Prema tome, očekujemo da će primena rezultata dobijenih u ovom radu dovesti do esencijalnog ubrzanja Monte Karlo algoritma za računanje funkcionalnih integrala.

Iz posmatranih zavisnosti širine oblasti δ od trenutka evolucije t očigledno je da oblast ima najveću širinu na polovini evolucije, odnosno δ ima najveću vrednost za trenutak $t = T/2$. Da bismo odredili kako maksimalna širina oblasti, za fiksirano vreme evolucije T i fiksirano relativno odstupanje r zavisi od vrednosti anharmoniciteta g prvo je potrebno da za

Slika 11.

Tipična zavisnost koeficijenta fitovanih polinoma od r . Levo je prikazana zavisnost p_3 od r na normalnoj, a desno ista zavisnost na semilogaritamskoj skali. Na slici je prikazano i kriva $C + D \ln r$, gde je $C = -0.87003(1)$, $D = 0.377332(4)$. Parametri teorije su $g = 0.1$, $T = 10$.

Figure 11.

Typical r -dependence of the fitted polynomial coefficients. Graph on the left shows r -dependence of p_3 , while the graph on the right shows the same dependence, but on the log-normal scale. To guide the eye, the fitted linear function in $\log r$, $C + D \log r$ is also shown on both graphs, where $C = -0.87003(1)$, $D = 0.377332(4)$. Parameters of the theory are $g = 0.1$, $T = 10$.

Tabela 1. Parametri logaritamskih zavisnosti koeficijena polinomijalnih funkcija za različite setove parametara teorije.

	$\frac{g = 0.1}{T = 1}$	$\frac{g = 1}{T = 1}$	$\frac{g = 10}{T = 1}$	$\frac{g = 100}{T = 1}$	$\frac{g = 0.1}{T = 10}$	$\frac{g = 1}{T = 10}$
C_0	-3.70307(1)	-2.92137(1)	-2.11041(1)	-1.540610(9)	-11.41734(6)	-11.42315(7)
D_0	-0.287738(3)	-0.265424(3)	0.139224(3)	0.391007(3)	5.34641(2)	5.05325(3)
C_1	2.063571(4)	1.57559(1)	1.26178(1)	1.16817(2)	-	-
D_1	-0.142509(1)	-0.204107(3)	-0.349091(3)	-0.383607(4)	-	-
C_2	1.98575(1)	1.607329(3)	1.55055(1)	1.03324(1)	-	-
D_2	-0.165860(3)	-0.1910854(7)	-0.255742(3)	-0.371171(3)	-	-
C_3	-	-	-	-	-0.87003(1)	-0.868184(7)
D_3	-	-	-	-	0.377332(4)	0.359150(3)

različite vrednosti anharmoniciteta i različite vrednosti širine δ u trenutku $t = T/2$, izračunamo vrednost amplitude $A(\delta, T/2)$. Za fiksirane vrednosti parametara T i g onda dobijamo zavisnost $r(\delta)$, a invertovanjem te zavisnosti dobijamo zavisnost $\delta(r)$. Iz funkcije $\delta(r)$ možemo da odredimo δ za koje vrednost amplitude ima fiksiranu relativnu grešku r . Sada možemo da posmatramo zavisnost $\delta(g)$ za fiksirane vrednosti T i r .

Za potrebe drugog dela ovog rada, odnosno za računanje maksimalne širine oblasti korišćen je izmenjeni Monte Karlo algoritam iz rada Antona Balaža (2004). Simulacija je izvršavana za 50 ekvidistantnih vrednosti anarmoniciteta g ($g = 0.2, 0.4, \dots, 10.0$), 51 ekvidistantnu vrednost δ ($\delta = 0.50, 0.53, \dots, 2.00$), vreme evolucije je iznosilo $T = 1$, a tipična vrednost broja Monte Karlo koraka $9.2 \cdot 10^8$. Ove simulacije su izvršene za oko 45 sati na 50-procesorskom klasteru PARADOX koji se nalazi u Laboratoriji za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu (<http://scl.phy.bg.ac.yu/>).

U prethodnom delu rada već smo se bavili određivanjem zavisnosti $r(\delta)$ i opisali je funkcijom $r(\delta) = r_0 e^{-\gamma \delta}$, uz napomenu da je to validna aproksimacija za date rezultate samo na intervalu u kome r ima vrednost od nekoliko procenata (do 10%). S obzirom da smo ovog puta računali amplitudu prelaza za više vrednosti δ , kao i da smo koristili veći broj Monte Karlo koraka, što daje rezultat sa manjom Monte Karlo statističkom greškom, bilo je neophodno uvesti dodatne parametre u funkciju $r(\delta)$:

$$r(\delta) = \exp(- (a + b\delta + c\delta^2))$$

Kao što vidimo, razlika je u dodatnom kvadratnom članu u eksponentu, koji je važan za veće vrednosti δ , odnosno, male vrednosti r . Ova

aproksimacija se može primeniti na intervalu (slika 12) na kome relativno odstupanje r uzima vrednosti od 0.1% do 10%. Na slici 12 desno se vidi da na semilogaritamskom grafiku zavisnost $r(\delta)$ ima oblik parabole, odnosno kvadratne funkcije.

Invertovanjem funkcije $r(\delta)$ dobijamo:

$$\delta(r) = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4c(a + \ln r)}}{2c}$$

Pri fiksiranim vrednostima parametara T i r , pomoću funkcije $\delta(r)$, možemo da odredimo širinu oblasti δ za svaku vrednost anharmoniciteta g , odnosno možemo da dobijemo zavisnost $\delta(g)$. Za vreme evolucije $T = 1$ i relativno odstupanje r od nekoliko procenata zavisnost $\delta(g)$ se može aproksimirati kvadratnom funkcijom (slika 13):

$$\delta(g) = m_0 + m_1 g + m_2 g^2$$

Primitili smo da koeficijenti m_0, m_1, m_2 iz funkcije $\delta(g)$ ne zavise od g i da imaju logaritamsku zavisnost od r . Na semilogaritamskom grafiku

Slike 12 i 13 (na naspramnoj strani):

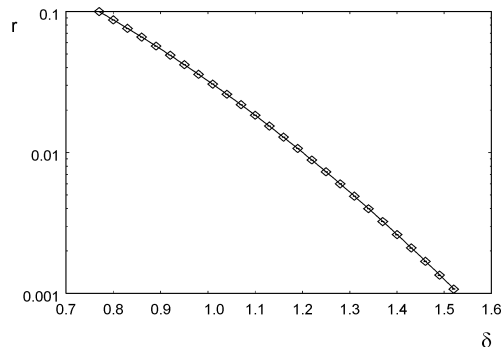
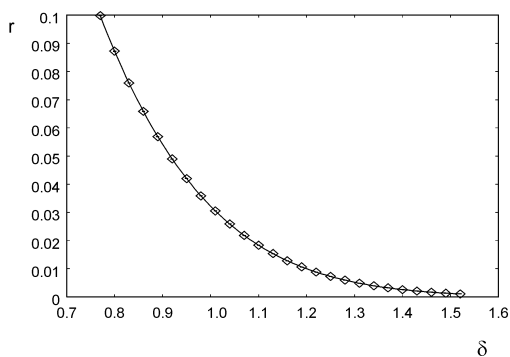
Figures 12 and 13 (on the opposite page):

Slika 12. Tipična zavisnost relativnog odstupanja r od širine oblasti δ u trenutku $T/2$, fitovana na odabranu funkciju $r(\delta)$ na normalnoj (levo) i semilogaritamskoj skali (desno). Koeficijenti funkcije iznose $a = 0.179(6)$, $b = 1.10(2)$, $c = 2.151(6)$, parametri teorije su $g = 4.0$, $T = 1$, $t = 0.5$, a $N_{MC} = 9.2 \cdot 10^8$.

Figure 12. Typical δ -dependence of relative error r at $t=T/2$ fitted to the chosen function $r(\delta)$ (left), also shown on log-normal scale (right). Coefficients of the function are $a = 0.179(6)$, $b = 1.10(2)$, $c = 2.151(6)$, while parameters of the theory are $g = 4.0$, $T = 1$, $t = 0.5$, $N_{MC} = 9.2 \cdot 10^8$.

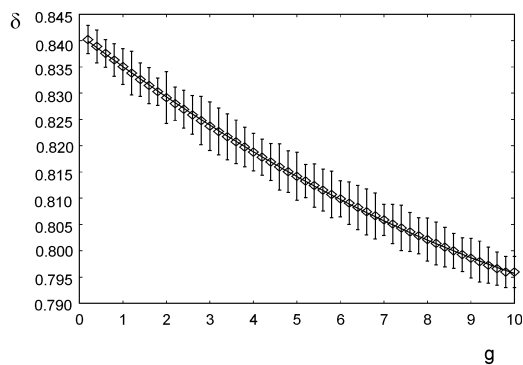
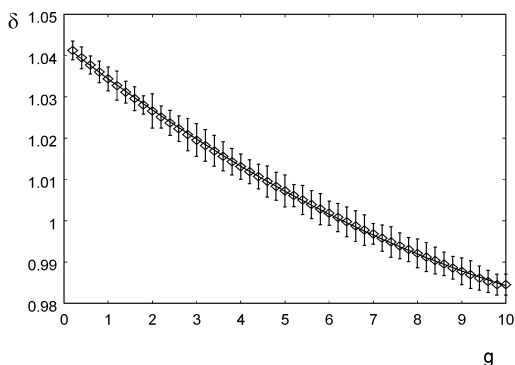
Slika 13. Tipična kvadratna zavisnost širine oblasti δ od vrednosti anharmoniciteta g . Levo: fitovani koeficijenti iznose $m_0 = 1.0425(1)$, $m_1 = -0.00830(5)$, $m_2 = 0.000248(5)$, vreme evolucije je $T = 1$, a relativno odstupanje rezultata $r = 3\%$. Desno: fitovani koeficijenti iznose $m_0 = 0.84118(6)$, $m_1 = -0.00627(3)$, $m_2 = 0.000172(3)$, vreme evolucije je $T = 1$, a relativno odstupanje rezultata $r = 8\%$.

Figure 13. Typical quadratic g -dependence of width δ . (Left) Fitted coefficients are $m_0 = 1.0425(1)$, $m_1 = -0.00830(5)$, $m_2 = 0.000248(5)$, evolution time is $T = 1$, while the fixed relative error is $r = 3\%$. (Right) Fitted coefficients are $m_0 = 0.84118(6)$, $m_1 = -0.00627(3)$, $m_2 = 0.000172(3)$, evolution time is $T = 1$, while the fixed relative error is $r = 8\%$.



Slika 12.

Figure 12.



(slika 14 desno) zavisnost koeficijenta m_i od r ima linearan oblik, što pokazuje da se m_i može predstaviti kao linearna funkcija od $\ln r$:

Slika 13.

Figure 13.

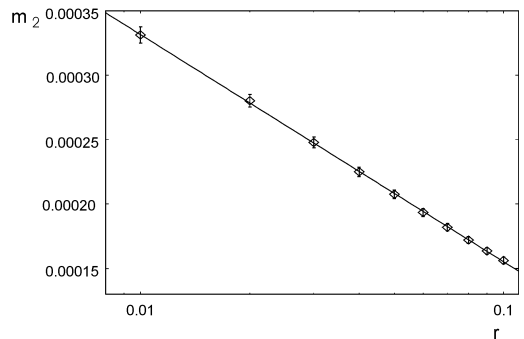
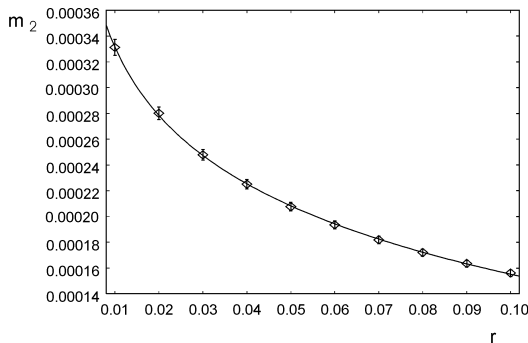
$$m_i = u_i + v_i \ln r$$

U tabeli 2 nalaze se vrednosti koeficijenta u_i i v_i .

Tabela 2. Parametri u_i i v_i zavisnosti od koeficijenta m_0, m_1, m_2 relativnog odstupanja r za vreme evolucije $T = 1$.

i	u_i	v_i
0	0.33(1)	-0.201(4)
1	-0.00113(5)	0.00204(2)
2	-0.000021(2)	-0.0000766(5)

Za fiksirano vreme evolucije $T=1$, pomoću vrednosti iz tabele 2 za unapred određeno relativno odstupanje r od nekoliko procenata možemo da izračunamo koeficijente m_i pomoću kojih dobijamo zavisnost $\delta(g)$. Iz



funkcije $\delta(g)$, za neku vrednost anharmoniciteta g u intervalu $[0.2, 10.0]$ možemo da odredimo maksimalnu širinu oblasti koja uvodi relativnu grešku r u računanje amplitude verovatnoće.

Zaključak

U ovom radu proučavane su trajektorije koje daju dominantan doprinos pri računanju amplituda verovatnoće u kvantnoj mehanici u funkcionalnom formalizmu, na primeru anharmonijskog oscilatora sa kvartičnim anharmonicitetom. Monte Karlo algoritam iz rada Antona Balaža (Balaž 2004), razvijen za računanje funkcionalnih integrala u jednodimenzionalnim teorijama, je modifikovan tako da omogućava sužavanje domena integracije u funkcionalnom integralu. Za male vrednosti anharmoniciteta g i vremena evolucije T numerički je dobijeno da se najvažnije trajektorije nalaze u okolini rešenja klasičnih jednačina kretanja $q_{cl}(t)$. Za nekoliko skupova parametara teorije g i T i za fiksirani trenutak vremena t iz intervala $(0, T)$ ispitana je širina oblasti $\delta(t)$ oko $q_{cl}(t)$ u kojoj leže trajektorije čiji doprinos amplitudi verovatnoće daje rezultat sa unapred određenom relativnom greškom r . Numerički je dobijeno da je zavisnost $\delta(t)$ polinomijalna po \sqrt{t} i $\sqrt{T-t}$, a da koeficijenti ovog polinoma linearno zavise od logaritma relativne greške $\ln r$. Proučavana je i zavisnost maksimalne širine oblasti $\delta(T/2)$ od anharmoniciteta oscilatora za različite fiksirane vrednosti relativne greške r . Dobijena je kvadratna zavisnost $\delta(T/2)$ od anharmoniciteta g , dok su koeficijenti ove zavisnosti linearne funkcije od $\ln r$.

U daljem radu, pored analitičkog objašnjenja numerički dobijenih činjenica, posebna pažnja biće posvećena primeni dobijenih rezultata, odnosno optimalizaciji Monte Karlo algoritma sužavanjem domena integracije u funkcionalnom integralu. Za to će biti neophodno uopštenje primenjenog metoda, odnosno domen integracije treba ograničiti u svim tačkama evolucije t , a ne samo u jednom određenom trenutku. Ovakva promena algoritma daće relativnu grešku R finalnog rezultata, pa će od ključnog značaja biti proučavanje zavisnosti $R(r)$.

Slika 14.

Tipična zavisnost koeficijenta m_i kvadratne funkcije $\delta(g)$ od relativnog odstupanja r . Levo je prikazana zavisnost m_2 od r na normalnoj, a desno ista zavisnost na semilogaritamskoj skali. Na graficima je prikazana i kriva $u_2 + v_2 \ln r$, gde je $u_2 = -0.000021(2)$, $v_2 = -0.0000766(5)$.

Figure 14.

Typical r -dependence of coefficients m_i of quadratic function $\delta(g)$. The r -dependence of m_2 is shown left, and also on the log-normal scale on the right. Fitted function $u_2 + v_2 \ln r$, where $u_2 = -0.000021(2)$ and $v_2 = -0.0000766(5)$, is plotted on the graphs.

Literatura

Balaž A., Belić A., Bogojević A. 1998. An Improved Gaussian Approximation for Quantum Field Theory. *Facta Universitatis* 1: 113.

Balaž A., Belić A., Bogojević A. 1998. Improved Gaussian Approximation. In *Proceedings of the 11th Yugoslav Symposium on Nuclear and Particle Physics* (Studnica, Yugoslavia, 25. – 28. September 1998), SFIN A2: 297.

Balaž A., Belić A., Bogojević A. 1999. Improved Approximation for the Free Energy in Low Dimensions. *Phys. Low-Dim. Struct.* 5/6: 1.

Balaž A., Belić A., Bogojević A. 1999. Efficient Monte Carlo Calculation of the Free Energy in Low Dimensions. *Phys. Low-Dim. Struct.* 9/10: 149.

Balaž A., Belić A., Bogojević A. u *Zborniku radova X kongresa fizičara Jugoslavije* (Vrnjačka Banja, Jugoslavija, 27-29. mart 2000.), knjiga 2 (2000) 843.

Balaž A., Belić A., Bogojević A. 2000. Adaptive Monte Carlo Algorithm in $d = 1$. *Phys. Low-Dim. Struct.* 1/2: 65.

Balaž A. 2004. Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantnoj mehanici: analitičke i numeričke osobine. Magistarski rad. Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu

Feynman R. P. i Hibbs A. R. 1965. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. New York: McGraw-Hill

Herbut F. 1983. *Kvantna mehanika za istraživače*. Beograd: Prirodno matematički fakultet

<http://www.gnuplot.info>

<http://scl.phy.bg.ac.yu>

Huang K. 1987. *Statistical Mechanics, 2nd edition*. New York: Wiley

Marina Radulaški

Trajectories Relevant for the Calculation of Path Integrals in Quantum Mechanics

Introduction. Quantum mechanics has several different but equivalent formulations. One of them, functional formalism, is considered in this paper. Calculation of probability amplitudes in this formalism uses all possible trajectories consistent with the initial and final state of the quantum system. The contribution of each trajectory to the probability amplitude is $\exp(iS/\hbar)$, where S is the corresponding action of the trajectory. The probability amplitude can formally be written (Balaž 2004) as a path integral $A = \int [d\mu] \exp(iS[q(t)]/\hbar)$, and is defined through the standard Feynman discretization (Feynman and Hibbs 1965): time of evolution T is splitted in

N time slices $\varepsilon_N = T/N$, and all trajectories are discretized as lines connecting the points (q_0, q_1, \dots, q_N) . For the typical one-particle quantum system in external potential $V(q)$, after Wick rotation, the probability amplitude has the form (Feynman and Hibbs 1965):

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi i \varepsilon_N)^{N/2}} \exp \left\{ i \varepsilon_N \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon_N} \right)^2 - V(q_{n,n+1}) \right] \right\}$$

The aim of this paper is to identify trajectories with the dominant contribution to probability amplitudes calculated in functional formalism. Since these trajectories are known to be in the vicinity of the solution of classical equations of motion (Balaž *et al.* 2000), their contribution is quantified as follows: if the set of considered trajectories is restricted to belong to the area of width $\delta(t_p)$ around the classical solution for a fixed moment t_p , then the obtained probability amplitude will have a relative error r . The correspondence between $\delta(t_p)$ and r was used as a measure of the contribution of trajectories in a given area. For simplicity, all calculations in this paper are done for the anharmonic oscillator with quartic anharmonicity.

Relevant Trajectories. To find out how the value of amplitude A depends on the width δ , the integration over coordinate $q(t)$ for a fixed moment of evolution t_p was restricted on the interval $[q_{cl}(t_p) - \delta, q_{cl}(t_p) + \delta]$ around the classical solution $q_{cl}(t_p)$ at that moment. It has been found that, for different values of parameters (constant of anharmonicity g and time of evolution T), the relative error r of the amplitude has exponential dependence on δ , $r(\delta) = r_0 e^{-\gamma \delta}$.

Since Schroedinger's equation in Wick-rotated time is a diffusion equation (Huang 1987), t -dependence of δ for a fixed value of r has been fitted to the polynomials in \sqrt{t} and $\sqrt{T-t}$. For long evolution times, it has been found that $\delta(t)$ can be successfully fitted to the second-order polynomial:

$$F_2' = p_0 - p_0 (\sqrt{t/T} + \sqrt{1-t/T}) + p_3 \sqrt{t(T-t)}$$

while for shorter evolution times a third-order polynomial must be used:

$$F_3' = p_0 + p_1 \sqrt{t} + p_2 \sqrt{T-t} - (p_0 + p_1)^{3/2} - (p_0 + p_2) (T-t)^{3/2}$$

It has also been found that the coefficients p are linear functions in $\log r$, $p_i = C_i + D_i \log r$. The numerical values of constants C_i and D_i for different theory parameters are given in Table 1. Dependence of the maximal width $\delta(T/2)$ on the anharmonicity was also investigated, and quadratic behavior was observed. The coefficients in $\log r$ were again linear.

Summary. Trajectories with the dominant contribution to probability amplitudes in quantum mechanics in functional formalism are investigated and identified in this paper. Further research will be devoted to the theoretical justification of obtained numerical results, as well as to the optimization of the algorithm by restricting integration to the identified relevant area around the classical solution.

Dodatak: Izmena programskog koda

Za potrebe rada, unete su određene izmene u osnovni program za računanje amplitude verovatnoće prelaza sistema iz rada (Balaž 2004). Program je pisan u programskom jeziku C, specijalizovan za paralelno procesiranje na višeprocorskom sistemu korišćenjem MPI koncepta.

Izmene se sastoje u tome što su među globalne promenljive dodate: promenljiva t_p za trenutak t_p na kome se sužava integracija, promenljiva delta za širinu oblasti δ , kao i promenljive maxdelta i mindelta za njenu maksimalnu i minimalnu vrednost. Među pretprocesorske konstante su dodate vrednosti ukupnog broja različitih trenutaka za koje se ograničava integracija NPOZ i broja različitih vrednosti širine NDELTA.

```
#define NPOZ 50
#define NDELTA 10
long tp;
double delta, maxdelta, mindelta;
```

Ekstremne vrednosti širine δ su uključene među pozivne parametre funkcije `main()`, kao i `maxkoef` – broj različitih vrednosti podeonih trenutaka N za koje se računa funkcionalni integral, a parametar koji je u originalnom programu predstavljao vrednost N , u izmenjenom kodu predstavlja minimalnu vrednost N_{min} broja podeonih intervala N .

U prvom delu rada glavni deo funkcije `main()`, posle unosa i dodele vrednosti parametarima funkcije, stavljen je u petlju koja menja vrednost N u svakoj iteraciji, a deo u kome se generišu putanje i računa funkcionalni integral se nalazi u petljama koje kroz iteracije menjaju vrednosti δ i t_p . U kodu korišćenom u drugom delu rada uklonjena je petlja po t_p (koristi se samo $t_p=T/2$), a uvedena petlja po g .

```
double korak, delta;
long koef;
for(koef = 1; koef <= maxkoef; ++ koef) {
    N = koef * Nmin;
    .
    .
    .
    korak = (maxdelta - mindelta) / NDELTA;

    for (itp = 1; itp <= NPOZ; ++ itp) {
        pozicija = itp * koef;

        for(delta = maxdelta, idelta = 0; idelta <= NDELTA;
            delta -= korak, idelta++) {
            .
            .
            .
        }
    }
    .
    .
    .
}
```

Najbitnija promena koda je u funkciji `distr()` u kojoj se generišu trajektorije. U programski kod je unet uslov koji ograničava generisanu vrednost koordinate $q(t_p)$, odnosno ako njena vrednost ne pripada intervalu $[q_{cl}(t_p) - \delta, q_{cl}(t_p) + \delta]$ funkcija vraća vrednost nula, što se kasnije koristi za izostavljanje doprinosa ove trajektorije pri računanju funkcionalnog integrala. U skup pozivnih parametara funkcije `distr()`, kao i svih funkcija koje je pozivaju, uključeno je i rešenje klasičnih jednačina kretanja, koje se nalazi diskretizovano u nizu `qc1[]`.

```
int distr(double *distrpar, long *seed, double *x,
          double *pinv, double *cl) {

    double ran3(long *);
    double var, rand1, rand2;
    long i, k;
    int ind = 1;

    for(i = 1, var = 0; 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] += D[i][k] * q[k];
        }

        if ((i == tp) && (fabs(x[i] - cl[i]) > delta)) {
            ind = 0;
        }
    }

    return ind;
}
```

