Автор: Ю.Ю.Лобанов

Язык: Фортран

ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ ОТ ВЕЩЕСТВЕННЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ИНТЕГРАЛЬНО-ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО ВИДА

Назначение:

Программа FUNINT предназначена для приближенного вычисления функциональных (континуальных) интегралов в задачах физики и математики [1]. В ней реализован подход к функциональным интегралам и методам их вычисления на основе определения интеграла Лебега в абстрактных метрических пространствах, развитый в [1]. В отличие от стохастических методов (Монте-Карло), в данной программе используются детерминированные алгоритмы для вычисления функциональных интегралов, разработанные в [2]. Это дает возможность получения результатов с гарантированной, а не вероятностной оценкой погрешности и обеспечивает более высокую скорость сходимости приближений к точному значению интеграла.

В программе FUNINT осуществляется вычисление функционального интеграла

$$\int_{C_0} F[x]\ d\mu(x), \tag{1}$$

где интегрирование производится по пространству $x(t) \in C_0 \equiv \{C[0,1], x(0) = x(1) = 0\}$ непрерывных на отрезке $[0,1]$ функций с нулевыми значениями на концах отрезка; $d\mu(x)$ - условная мера Винера на пространстве C_0; $F[x]$ – вещественный функционал вида

$$F[x] = \left(\int_0^1 F_1[x(t)]\ dt \right) \times \exp\left\{ -\beta \int_0^1 F_2[x(t)]\ dt \right\}; \tag{2}$$

β – вещественный параметр, $F_1[x]$ и $F_2[x]$ – вещественные функции, задаваемые пользователем.

Основой для вычисления являются приближенные формулы, описанные в [2]:

$$\int\limits_{C_0} F[x]\ d\mu(x) \;=\; (2\pi)^{-n/2} \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \dots \int\limits_{-\infty}^{\infty}}_{n} \exp\{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} u_i^2\}\, \frac{1}{2^m} \Big[\underbrace{\int\limits_{-1}^{1} \dots \int\limits_{-1}^{1}}_{m} F[\theta_m(v,t) -$$

$$- \quad \theta_{m,n}(v,t) + U_n(u,t)]\ dv \Big] du + \mathcal{R}_{m,n}(F), \tag{3}$$

где

$$\theta_m(v,t) = \sum_{i=1}^{m} c_{m,i}\ \rho(v_i,t),$$

$$\theta_{m,n}(v,t) = 2\sum_{k=1}^{n} \sin(k\pi t)\ \frac{1}{k\pi}\ \sum_{i=1}^{m} c_{m,i}\ \mathrm{sign}(v_i)\ \cos(k\pi v_i),$$

$$U_n(u,t) = \sqrt{2}\sum_{k=1}^{n} \sin(k\pi t)\ \frac{u_k}{k\pi}, \qquad \rho(v,t) = \begin{cases} -t\ \mathrm{sign}(v) & , \quad t \le |v| \\ (1-t)\mathrm{sign}(v) & , \quad t > |v| \end{cases},$$

$[c_{m,k}]^2$, $k = 1,\dots,m$ – корни многочлена $Q_m(r) = \sum_{k=0}^{m} (-1)^k\, r^{m-k}/k!$; $r \in R$.

Данные формулы позволяют находить функциональный интеграл путем вычисления $n + m$ - кратного риманова интеграла, где n и m – произвольные натуральные числа. Формулы являются точными на классе функциональных многочленов степени $\leqslant 2m + 1$, т.е. для функционалов $F[x]$ из этого класса остаточный член $\mathcal{R}_{m,n}(F)$ равен нулю. Для остальных интегрируемых функционалов $F[x]$ погрешность определяется теоремами, доказанными в [1]. Как следует из оценки остаточного члена (см. [1]), скорость сходимости приближений, получаемых по данным формулам к точному значению интеграла при $n \to \infty$, m фиксировано, имеет порядок $O\Big(n^{-(m+1)}\Big)$.

В программе FUNINT реализован алгоритм, соответствующий $m = 1$, т.е. остаточный член равен нулю для функциональных многочленов степени не выше 3, а в остальных случаях скорость сходимости имеет порядок $O\Big(\frac{1}{n^2}\Big)$. Для достижения точности порядка 0.1% обычно бывает достаточно выбрать значения параметра n порядка 10 или меньше. В программе FUNINT предусмотрено вычисление n-кратного интеграла по методу Коробова [3] с использованием библиотечной подпрограммы MIKOR, допускающей значение кратности $k \leqslant 20$. Для интегрирования по переменной t в выражении (2) используется библиотечная подпрограмма DSIMPS интегрирования по Симпсону с двойной точностью.

Литература:

1. А.Д.Егоров, Е.П.Жидков, Ю.Ю.Лобанов. Введение в теорию и приложения функционального интегрирования. М: Физматлит, 2006.

2. Yu.Yu.Lobanov. Deterministic computation of functional integrals, Comp. Phys. Comm., 99 (1996) 59-72.

3. Н.М.Коробов, Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. М.: Физматгиз, 1963.

Структура:

SUBROUTINE

Имя: FUNINT

Внутренние подпрограммы: FX, FUNC, FUN1, FUN2, RHO

Внешние подпрограммы: DSIMPS, MIKOR (библиотечные)

F1, F2 (составляются пользователем)

Обращение:

```
CALL FUNINT(K,X,AX,BX,XM,EPS,R)
```

Описание переменных:

K – суммарная кратность риманова интеграла (K=N+1)

X, AX, BX – рабочие массивы размерности K (должны быть описаны оператором DIMENSION в основной программе)

XM – значение предела интегрирования по переменной u (может быть выбрано порядка 4 - 10 вследствие наличия фактора exp(-u**2) в зависимости от вида функционала)

EPS – требуемая максимальная относительная погрешность нахождения функционального интеграла

R – результат вычисления.

В основной программе перед обращением к FUNINT должны быть также определены следующие переменные

B – значение вещественного параметра β в выражении для функционала $F[x]$
M=1 – значение параметра m
DX – массив размерности 2 (должен быть описаны оператором DIMENSION): DX(1) и DX(2) – соответственно начальное и максимальное конечное число точек многомерной сетки интегрирования для подпрограммы MIKOR
L – порядок периодизации для подпрограммы MIKOR, $0 \leqslant$ L $\leqslant 10$ (рекомендованные значения L=1,2,3)
H – относительная ширина пограничного слоя для подпрограммы MIKOR (рекомендуется $0.1 \leqslant$ H $\leqslant 10.0$)

Данные переменные должны быть занесены в COMMON-блок PAR:
COMMON/PAR/B,DX(2),L,M,H

Если задать DX(1), DX(2), L, M, H $\leqslant 0$, то выбор этих величин будет осуществлен в программе автоматически.

Пользователем должны быть также написаны подпрограммы-функции
FUNCTION F1(X) и FUNCTION F2(X) в соответствии с видом интегрируемого функционала $F[x]$ в выражении (2).

<u>Примечания:</u>

1. При необходимости вычисления функционального интеграла по пространству $C[a,b]$ со значениями $x(a) = x_a$; $x(b) = x_b$, он может быть преобразован к интегралу по пространству $C_0 \equiv \{C[0,1], x(0) = x(1) = 0\}$ с помощью замены переменных, описанной в [1].

2. Точность результата и эффективность вычислений во многом зависит от выбора параметров интегрирования для подпрограммы MIKOR. В случае неудачного выбора этих параметров и невозможности достижения требуемой точности выдается соответствующая диагностика.

Тестовый пример 1 (файл FITEST1.FOR)

Известно точное значение интеграла

$$R_1 = \int\limits_{C_0} \exp\left\{-\frac{1}{2}\int\limits_0^1 x^2(t)\ dt\right\}\ d\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{\sinh(1)}} = 0.922452237\ldots$$

Для его численного нахождения с помощью FUNINT необходимо задать

$$\beta = \frac{1}{2}; \qquad F1(x) \equiv 1; \qquad F2(x) = x^2.$$

Для значений параметров

N=3

K=N+1

XM=4.D0

EPS=1.D-3

M=1

DX(1)=-1.D0

DX(2)=-1.D0

L=-1

H=-1.D0

в результате компиляции и выполнения файла FITEST1.FOR получается $R_1 = 0.927$

Тестовый пример 2 (файл FITEST2.FOR)

Для численного нахождения интеграла

$$R_2 = \int\limits_{C_0} \exp\left\{\frac{1}{2}\int\limits_0^1 x^2(t)\ dt\right\}\ d\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{\sin(1)}} = 1.090135\ldots$$

необходимо задать

$$\beta = \frac{1}{2}; \qquad F1(x) \equiv 1; \qquad F2(x) = -x^2.$$

В результате компиляции и выполнения файла FITEST2.FOR (с тем же набором параметров) получается $R_2 = 1.094$

Тестовый пример 3 (файл FITEST3.FOR)

Для функционального интеграла

$$R_3 = \int\limits_{C_0} \left[\int\limits_0^1 x^2(t)\ dt \right]\ d\mu(x) = \frac{1}{6} = 0.166666\ldots$$

приближенная формула (3) дает точный результат, т.е. в данном случае $\mathcal{R}_{m,n}(F) = 0$ независимо от кратности N аппроксимирующего интеграла, поскольку интегрируемый функционал является функциональным многочленом степени 2, а $2m + 1 = 3$. При численном нахождении этого интеграла следует задать

$$\beta = 1; \qquad F1(x) = x^2; \qquad F2(x) \equiv 0.$$

В результате компиляции и выполнения файла FITEST3.FOR с набором параметров

N=2

K=N+1

XM=4.D0

EPS=1.D-3

M=1

DX(1)=-1.D0

DX(2)=-1.D0

L=-1

H=-1.D0

получается $R_3 = 0.16656$; погрешность функционального интегрирования определяется в данном случае только точностью вычисления (N+1)-кратного интеграла.