Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. Н. Николаев, Ренормгрупповой подход к аппроксимациям функций и улучшению последовательных приближений, *ТМФ*, 2010, том 164, номер 2, 243–261

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6537>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.108.108

26 апреля 2023 г., 15:12:05

© 2010 г.

Г. Н. Николаев*

РЕНОРМГРУППОВОЙ ПОДХОД К АППРОКСИМАЦИЯМ ФУНКЦИЙ И УЛУЧШЕНИЮ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Установлена связь взаимно однозначных функций с ренормгрупповыми преобразованиями и найдены их ренормгрупповые инварианты. На этой основе предложен ряд улучшенных (по сравнению с разложением в степенной ряд) аппроксимаций таких функций, учитывающих их глобальный взаимно однозначный характер. Полученные аппроксимации предлагается применять для улучшения последовательных приближений физических величин, получаемых, в частности, с помощью одного из основных методов расчета теоретической физики – метода возмущений. Эффективность ренормгрупповых приближений проиллюстрирована рядом примеров: ренормгрупповыми аппроксимациями нескольких аналитических функций, вычислением энергии основного состояния ангармонического осциллятора. Приведено также обобщение такого подхода на случай отображений множеств, как непрерывных, так и дискретных.

Ключевые слова: ренормализационная группа, инварианты, взаимно однозначные функции, аппроксимации, метод возмущений, улучшение приближений.

1. ВВЕДЕНИЕ

Необходимость в разумных аппроксимациях физических величин связана с тем, что большинство реальных проблем не могут быть решены точно. Для их решения используют приближенные методы. Наиболее распространенными и универсальными являются различного рода теории возмущений вблизи выбранного нулевого приближения. Такие методы возмущений, очевидно, разумны, если параметр возмущения (или параметр взаимодействия, связи) $g \ll 1$. Однако если $g \gtrsim 1$, то разложение искомой величины по степеням g теряет смысл.

С другой стороны, для многих реальных систем из-за их сложности практически единственным методом решения является метод возмущений. Для таких случаев существуют различные методы восстановления (реконструкции) функций или суммирования расходящихся рядов, которые позволяют находить значения искомой функции $f(g)$ при $g \gtrsim 1$, используя ее значения только при $g \ll 1$. К этим методам

*Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия. E-mail: nikolaev@iae.nsk.su

относятся улучшенная теория возмущений, Паде-аппроксимация, метод суммирования Бореля, метод конформных отображений и их комбинации [1], [2], приближение непрерывными дробями [3], алгоритм Ромберга [4]. Такие методы, будучи весьма точными, требуют знания многих последовательных приближений искомой функции. Однако для сложных систем обычно удается рассчитать только несколько последовательных приближений. Следовательно, в этом случае большинство указанных методов неприменимо.

Именно в этой ситуации предлагаемый в настоящей статье метод ренормгруппового (РГ) приближения функций представляется актуальным из-за его весьма хорошей точности при использовании только нескольких последовательных приближений теории возмущений.

В настоящей работе установлена связь взаимно однозначных функций (отображений) с РГ-преобразованиями и найдены РГ-инварианты таких отображений. Это позволило построить набор различных РГ-приближений таких функций, основанных на нескольких членах их разложений в ряд Тейлора. Такие РГ-приближения взаимно однозначной функции в общем случае представляют лучшие в области $g \gtrsim 1$ приближения по сравнению с ее аппроксимацией исходным конечным рядом Тейлора, поскольку они также являются взаимно однозначными, как и искомая функция, для которой строятся приближения. Значения же конечного ряда Тейлора в этой области, как правило, значительно отличаются от значений искомой взаимно однозначной функции за счет доминирования “хвостов” этого ряда, т. е. членов ряда с высшими степенями.

Работа имеет следующую структуру. В разделе 2 устанавливается связь взаимно однозначных функций с РГ-преобразованиями путем построения РГ-инвариантов таких функций. Здесь же приводится дифференциальное уравнение в частных производных для этих инвариантов. В разделе 3 на основе этого уравнения и нескольких первых коэффициентов разложения искомой функции в ряд Тейлора предлагается схема построения ее РГ-приближений, приводятся различные варианты таких приближений. Раздел 4 иллюстрирует эффективность и точность РГ-приближений на примере РГ-аппроксимации энергии основного состояния ангармонического осциллятора, стандартная теория возмущений к которому не применима, так как приводит к расходящемуся по константе ангармонизма ряду. Раздел 5 посвящен обсуждению свойств РГ-приближений. Здесь же предложено обобщение найденного РГ-инварианта взаимно однозначных функций, служащего основой для их РГ-приближений, на случай невырожденных отображений множеств, как непрерывных, так и дискретных. В заключение обсуждаются возможности обобщения предложенного подхода на случай немонотонных и неаналитических функций.

2. РГ-ИНВАРИАНТЫ ВЗАИМНО ОДНОЗНАЧНЫХ ФУНКЦИЙ

Пусть дана взаимно однозначная функция $f(x)$. Рассмотрим значение этой функции при аргументе, равном $x_1 + x$. По определению взаимно однозначная функция $f(x)$ имеет обратную. Выразим величину x через обратную функцию: $x = f^{-1}(f(x))$. Это соотношение позволяет записать выражение $f(x_1 + x)$ в виде новой функции F , зависящей от двух переменных:

$$f(x_1 + x) = f(x_1 + f^{-1}(f(x))) \equiv F(x_1; f(x)). \quad (1)$$

В силу этого определения новая функция двух переменных F при нулевом значении первого аргумента x_1 совпадает с исходной функцией $f(x)$:

$$F(0; f(x)) = f(x). \quad (2)$$

Теперь рассмотрим значение функции f при аргументе $\tilde{x} \equiv x_1 + x_2 + x$. Значение функции $f(\tilde{x})$ в терминах функции F можно представить двумя равнозначными способами.

С одной стороны, сгруппируем в $\tilde{x}$ последние два слагаемых и обозначим их сумму $x_2 + x$ новым символом x_w :

$$x_w \equiv x_2 + x. \quad (3)$$

Это позволяет записать тождество $f(\tilde{x}) \equiv f(x_1 + x_w)$. Теперь воспользуемся для правой части этого тождества соотношением (1):

$$f(\tilde{x}) \equiv f(x_1 + x_w) = F(x_1; f(x_w)). \quad (4)$$

В свою очередь, выражение $f(x_w)$, фигурирующее в правой части (4), можно записать, используя определение (3), в виде $f(x_2 + x)$, допускающем его представление снова через функцию F согласно правилу (1). Таким образом, имеем

$$f(x_w) \equiv f(x_2 + x) = F(x_2; f(x)). \quad (5)$$

После подстановки этого соотношения в правую часть равенства (4) получаем

$$f(\tilde{x}) = F(x_1; f(x_w)) = F(x_1; F(x_2; f(x))). \quad (6)$$

С другой стороны, используя иную группировку слагаемых в $\tilde{x}$, согласно (1) имеем

$$f((x_1 + x_2) + x) = F(x_1 + x_2; f(x)). \quad (7)$$

Приравнявая правые части выражений (6) и (7) на основании равенства их левых частей, получаем функциональное уравнение

$$F(x_1 + x_2; f) = F(x_1; F(x_2; f)). \quad (8)$$

Здесь и далее для краткости опущен аргумент x у функции f .

Функциональное уравнение (8) выражает инвариантность F относительно РГ-преобразований $T(x_2)$ [5], [6], представляющих собой одновременное однопараметрическое преобразование обоих аргументов функции F :

$$T(x_2): \quad x_1 \rightarrow \tilde{x}_1 = x_1 - x_2, \quad f \rightarrow \tilde{f} = F(x_2; f); \quad F(0; f) = f. \quad (9)$$

Отметим, что уравнение (8) гарантирует выполнение группового закона композиции операторов РГ-преобразования: $T(x_1)T(x_2) = T(x_1 + x_2)$.

Таким образом, $F(x; f)$ является инвариантом ренормгруппы в ее аддитивной форме.

Мультипликативная форма РГ-уравнения получается из уравнения (8) при замене переменных $x_1 = \ln(z/t)$, $x_2 = \ln t$ и очевидных изменениях обозначений: $f \rightarrow g$, $F(\ln z; g) \rightarrow \bar{g}(z, g)$. В результате вместо уравнения (8) имеем

$$\bar{g}(z, g) = \bar{g}\left(\frac{z}{t}, \bar{g}(t, g)\right). \quad (10)$$

Это уравнение описывает в квантовой теории поля поведение инвариантного заряда $\bar{g}$ ультрарелятивистской частицы при одновременном изменении квадрата передаваемого импульса z и специальном преобразовании безразмерной константы связи g [7], [8].

Из уравнения (8) легко получается дифференциальное уравнение в частных производных для функции F [5], [6]. Для этого достаточно продифференцировать обе части уравнения (8) по $x_2 \rightarrow 0$ и воспользоваться свойством (2):

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_1} - \beta(f) \frac{\partial}{\partial f} \right] F(x_1; f) \equiv \hat{R}F(x_1; f) = 0, \quad (11)$$

$$\beta(f) \equiv \frac{\partial F(x_2; f)}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0}. \quad (12)$$

Отметим, что дифференциальное уравнение (11) также свидетельствует о том, что F является инвариантом РГ-преобразования, поскольку оператор $\hat{R}$ является инфинитезимальным оператором РГ.

Решение уравнения (11) с граничным условием (2) есть

$$F(x_1; f) = X^{-1}(x_1 + X(f)), \quad (13)$$

$$X(f) \equiv \int \frac{df}{\beta(f)}, \quad (14)$$

где X^{-1} – функция, обратная к X . Отметим, что выражение (14) является эквивалентом уравнения Гелл-Манна–Лоу (см., например, книгу [8]) для аддитивного варианта РГ. Соответствие выражения (13) функциональному уравнению (8) легко проверяется также прямой подстановкой.

3. РЕНОРМГРУППОВЫЕ АППРОКСИМАЦИИ ВЗАИМНО ОДНОЗНАЧНЫХ ФУНКЦИЙ

Часто значение неизвестной функции $f(x)$ удастся определить лишь в окрестности некоторой точки x_0 . Такая ситуация типична при использовании итерационных процедур или одного из основных методов теоретической и математической физики – метода теории возмущений. Как правило, вычисление высших поправок связано со значительными трудностями технического или принципиального характера (например, из-за расходимости высших поправок). Уравнение (11) позволяет получить улучшенное приближение $f^{(A)}(x)$ неизвестной функции, если в нем использовать вместо точной функции $\beta(f)$ какую-либо ее аппроксимацию $\beta^{(A)}(f)$, хорошо приближающую точную функцию $\beta(f)$ вблизи аргумента $f(x_0)$ (так называемый

метод РГ [7], [8]). Улучшенное приближение функции $f^{(A)}(x)$ тогда является решением $F^{(A)}(x_1; f^{(A)})$ этого уравнения с граничным условием (2). Это решение описывается теми же формулами (13), (14), но с приближенной функцией $\beta^{(A)}(f)$ в интеграле (14) вместо точной.

Ниже аппроксимации $\beta^{(A)}(f)$ будут построены с помощью информации о разложении искомой функции в окрестности точки x_0 .

Здесь уместно отметить следующее. Функция $X(f)$, заданная формулой (14), для искомой взаимно однозначной функции $f(x)$ естественно оказывается тоже взаимно однозначной (монотонной) вследствие постоянства знака ее производной $\beta(f)$ и свойства монотонности возрастания (при $\beta(f) > 0$) или убывания (при $\beta(f) < 0$) интеграла, рассматриваемого как функция его верхнего предела. Аппроксимирующая же производная $\beta^{(A)}(f)$ может оказаться знакопеременной. Пусть она при изменении f от первоначального значения $f(x_0)$ впервые обращается в нуль при некотором значении f_a . Если в этой точке функция $1/\beta^{(A)}(f)$ имеет неинтегрируемую особенность (при нашем рассмотрении только такие особенности и встретятся, см. ниже п. 3.1.1), то интеграл (14) с верхним пределом f_a обращается в ∞ (или $-\infty$). Следовательно, в этом случае f_a является асимптотой функции $f^{(A)}(x)$ при $x \rightarrow \infty$ (или $x \rightarrow -\infty$). Значения же $f^{(A)}(x)$ по другую сторону асимптоты, соответствующие области изменения знака $\beta^{(A)}(f)$, будут принадлежать другой непрерывной ветви функции $f^{(A)}(x)$, не отвечающей граничному условию $f^{(A)}(x_0) = f(x_0)$. Поэтому такие ветви не следует рассматривать. Нужная же ветвь оказывается по построению такой же взаимно однозначной, как и искомая функция.

Таким образом, такие РГ-аппроксимации по построению обладают двумя важными качествами. Во-первых, вблизи точки разложения они близки к точной функции и при разложении в ряд воспроизводят исходный конечный ряд Тейлора. Во-вторых, они, как и точная функция, являются взаимно однозначными (монотонными). Последнее свойство с учетом первого обеспечивает в общем случае лучшую, по сравнению с конечным рядом Тейлора, аппроксимацию взаимно однозначных функций в более широкой области отклонений аргумента от точки разложения ($\gtrsim 1$). Дело в том, что значения конечного ряда Тейлора в этой области, как правило, значительно отличаются от значений искомой взаимно однозначной функции за счет доминирования “хвостов” этого ряда, т. е. членов ряда с высшими степенями, поведение которых существенно отличается от поведения рассматриваемой функции. Особенно это характерно для асимптотических рядов, коэффициенты разложения которых быстро возрастают с ростом порядка разложения.

Приближенную функцию $\beta^{(A)}(f)$ найдем следующим образом.

Пусть нам известно приближенное выражение $f(x)$ в окрестности некоторой точки x_0 (без ограничения общности положим $x_0 = 0$), например, в виде ряда Тейлора:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots \quad (15)$$

Теперь заметим, что функция $\beta(f)$ согласно определениям (12) и (1) является в нашем случае просто производной функции $f(x)$, выраженной через саму функ-

цию f :

$$\beta(f) = \frac{df}{dx} \equiv f'(x(f)). \quad (16)$$

Поэтому для получения приближенной функции $\beta^{(A)}(f)$ продифференцируем сначала ряд (15) по x . Затем обратим ряд (15), т. е. выразим x в виде ряда по f . И, наконец, подставив полученный ряд в продифференцированное выражение, получим представление $\beta^{(A)}(f)$ в виде ряда по f . Более формально коэффициенты разложения функции $\beta(f)$ с учетом соотношения (16) можно найти как коэффициенты ряда Бурмана–Лагранжа [9] в разложении функции $f'(x)$ по степеням функции $f(x)$ (см. приложение).

Здесь следует заметить, что структура обращенного ряда существенно зависит от особенностей исходного ряда.

3.1. РГ-аппроксимации функций, для которых $a_1 \neq 0$. Пусть $a_1 \neq 0$. В этом случае обращенный ряд естественно представляется в виде

$$x = \phi_1 + b_2 \phi_1^2 + b_3 \phi_1^3 + \dots, \quad (17)$$

$$\phi_1 \equiv \frac{f - a_0}{a_1}, \quad (18)$$

а коэффициенты b_i выражаются через коэффициенты исходного ряда (15). Первые коэффициенты b_i суть

$$b_2 = -\frac{a_2}{a_1}, \quad b_3 = -\frac{a_3}{a_1} + 2\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^2. \quad (19)$$

Используя разложение (15) в соотношении (16) и подставляя в образовавшееся выражение разложение (17), получаем искомую зависимость $\beta(f)$ в виде ряда по ϕ_1 :

$$\beta(\phi_1) = c_0 + c_1 \phi_1 + c_2 \phi_1^2 + c_3 \phi_1^3 + \dots. \quad (20)$$

Подстановка этого выражения в формулу (14) позволяет представить ее в явном виде через известные величины c_i :

$$X(\phi_1) = c_0 \int_0^{\phi_1} \frac{d\varphi_1}{c_0 + c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_1^2 + c_3 \varphi_1^3 + \dots}. \quad (21)$$

Здесь уместно отметить, что, как видно из выражений (14), (16), функция $X(f)$ есть аргумент x искомой функции $f(x)$, выраженный через ее значение f . Поэтому нижний предел интегрирования в выражении (21) продиктован граничным условием $\phi_1(0) = 0$, следующим из равенства (17).

Первые несколько коэффициентов c_i ряда (20), выраженные через a_i , суть

$$c_0 = a_1, \quad c_1 = 2a_2, \quad c_2 = 3a_3 - \frac{2a_2^2}{a_1}. \quad (22)$$

Они связаны с коэффициентами b_i следующим образом:

$$b_2 = -\frac{1}{2} c_1 c_0^{-1}, \quad b_3 = \frac{1}{3} [-c_2 c_0^{-1} + (c_1 c_0^{-1})^2]. \quad (23)$$

Коэффициенты c_i можно найти и непосредственно, поскольку разложение $\beta(f(x))$ в виде ряда по $\phi_1(x)$ представляет собой ряд Бурмана–Лагранжа [9] (см. приложение).

3.1.1. РГ-приближения функций при дробно-рациональных аппроксимациях $\beta(\phi_1)$. Как отмечено выше, различные РГ-аппроксимации искомой функции $f(x)$ можно получить из формулы (13) с использованием граничного условия (2), если в правой части выражения (14) для $X(f)$ использовать какую-либо аппроксимацию функции $\beta(f)$ (заметим, что более удобно использовать для X эквивалентное выражение (21), в которое подставлено выражение (20) для $\beta(\phi_1)$). Ниже мы ограничимся одним из возможных классов аппроксимаций функции $\beta(f)$, а именно только дробно-рациональными Паде-аппроксимациями (ПА) [10] степени $[m/n]$ функции $\beta(\phi_1)$, приводящими к явным аналитическим РГ-аппроксимациям искомой функции $f(x)$. Индекс m степени $[m/n]$ обозначает степень полинома по ϕ_1 числителя ПА, а индекс n – степень знаменателя ПА.

Следует еще раз подчеркнуть, что полученные таким образом улучшенные РГ-аппроксимации функции обладают двумя замечательными особенностями, присущими методу РГ-улучшения приближений [7], [8].

С одной стороны, такие РГ-приближения при разложении их в ряд воспроизводят исходное приближение искомой функции (в нашем случае до порядка $m + n + 1$ включительно).

С другой стороны, полученные РГ-приближения, как и точная функция, удовлетворяют одному и тому же функциональному РГ-уравнению, в нашем случае уравнению (8), выражающему свойство взаимной однозначности функций. Другими словами, РГ-приближение наследует монотонный характер искомой функции. Исходные же полиномиальные приближения в общем случае таким свойством не обладают, что приводит к существенной ошибке такой аппроксимации при умеренных отклонениях (~ 1) ее аргумента от исходной точки, когда искажающее влияние “хвостов” ряда Тейлора велико (см. оценки аппроксимаций в конце п. 3.1).

Таким образом, РГ-аппроксимации оказываются в общем случае лучшими приближениями искомой монотонной функции по сравнению с ее степенным рядом.

Возвращаясь к конкретным реализациям РГ-приближений, рассмотрим для функции β линейное приближение $\beta(\phi_1) \simeq \beta_{[1/0]}(f) = c_0 + c_1\phi_1$ (т.е. ПА степени $[1/0]$). Оно приводит к следующей РГ-аппроксимации искомой функции:

$$\phi_1(x) \simeq \phi_1^{(\beta_{[1/0]})}(x) = (2b_2)^{-1}[1 - e^{-2b_2x}]. \quad (24)$$

Здесь и ниже символами $\beta_{[m/n]}(f)$ и $\phi_1^{(\beta_{[m/n]})}(x)$ обозначена ПА степени $[m/n]$ функции $\beta(\phi_1)$ и полученные на основе этой ПА РГ-аппроксимации функции $\phi_1(x)$ соответственно.

Дополнительное представление о качественном поведении функции $f(x)$ помогает выяснить знак ее второй производной $f''(x)$. При $f''(x) > 0$ функция является вогнутой вниз, при обратном знаке – выпуклой вверх. В нашем случае удобнее судить об этом поведению по величине производной $x''(f)$, имеющей обратный знак по

сравнению с $f''(x)$. Выражение для $x''(f)$ в терминах функции $\beta(f)$ можно представить, с учетом соотношений (16), (18) и (22), в виде $x''(f) = -\beta'(\phi)/(c_0\beta^2(\phi))$.

Для приведенной выше РГ-аппроксимации

$$x''(f^{(\beta_{[1/0]})}) = \frac{2b_2}{c_0(1 - 2b_2\phi_1^{(\beta_{[1/0]})})^2}.$$

Отсюда видно, что эта РГ-аппроксимация $f^{(\beta_{[1/0]})}(x)$ при $b_2/c_0 > 0$ всюду выпуклая, а при обратном знаке – вогнутая.

Дробно-рациональная аппроксимация степени $[0/1]$ функции $\beta(\phi_1) \simeq \beta_{[0/1]}(f) = c_0/[1 - (c_1/c_0)\phi_1]$ порождает следующую РГ-аппроксимацию:

$$\phi_1^{(\beta_{[0/1]})}(x) = (2b_2)^{-1}(\sqrt{1 + 4b_2x} - 1) = \frac{2x}{1 + \sqrt{1 + 4b_2x}}. \quad (25)$$

Эта РГ-аппроксимация $f^{(\beta_{[0/1]})}(x)$ является выпуклой при $b_2 > 0$ и вогнутой в противоположном случае, поскольку $x''(f^{(\beta_{[0/1]})}) = 2b_2/c_0^2$.

Из квадратичного приближения (ПА степени $[2/0]$) $\beta(f) \simeq \beta_{[2/0]}(f) = c_0 + c_1\phi_1 + c_2\phi_1^2$ получается РГ-аппроксимация вида

$$\phi_1^{(\beta_{[2/0]})}(x) = \left[b_2 + \sqrt{b_2^2(1 + 4s)} \operatorname{ctg}\left(\sqrt{b_2^2(1 + 4s)} x\right) \right]^{-1}, \quad (26)$$

$$s \equiv \frac{3}{4} b_3 b_2^{-2} - 1. \quad (27)$$

Для этой РГ-аппроксимации

$$x''(f^{(\beta_{[2/0]})}) = \frac{2b_2(1 + 4b_2s\phi_1)}{\{c_0[1 - 2b_2(1 + 2b_2s\phi_1)\phi_1]\}^2}.$$

Из этого выражения видно, что при $b_2(1 + 4b_2s\phi_1) > 0$ рассматриваемая РГ-аппроксимация $f^{(\beta_{[2/0]})}(x)$ является выпуклой, в противном же случае – вогнутой.

Дробно-рациональная аппроксимация степени $[0/2]$ функции

$$\beta(\phi_1) \simeq \beta_{[0/2]}(\phi_1) = \frac{c_0}{1 - (c_1/c_0)\phi_1 - [c_2/c_0 - (c_1/c_0)^2]\phi_1^2}$$

приводит к кубическому по ϕ_1 уравнению, фактически совпадающему с конечной (вплоть до ϕ_1^3) суммой обращенного ряда (17):

$$\phi_1^3 + \frac{b_2}{b_3}\phi_1^2 + \frac{\phi_1}{b_3} - \frac{x}{b_3} = 0. \quad (28)$$

Решения этого уравнения выражаются через известные решения “неполного” кубического уравнения, получающегося из (28) заменой $\phi_1 = y - b_2/(3b_3)$:

$$y^3 + py + q(x) = 0, \quad (29)$$

$$p \equiv -\frac{(b_2/b_3)^2}{3} + \frac{1}{b_3}, \quad (30)$$

$$q(x) \equiv 2\left(\frac{b_2}{3b_3}\right)^3 - \frac{b_2}{3b_3^2} - \frac{x}{b_3}. \quad (31)$$

Из всех действительных решений уравнения (29) нас интересует то, которому при $x = 0$ соответствует $\phi_1 = 0$. Как известно (см., например, справочник [11]), количество действительных решений уравнения (29) определяется величиной

$$Q(p, q(x)) = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q(x)}{2}\right)^2. \quad (32)$$

При $Q(p, q(x)) > 0$ уравнение (29) имеет единственное (и удовлетворяющее указанному выше условию $\phi_1(0) = 0$) действительное решение.

Положительность $Q(p, q(x))$ при любых x очевидна при $p > 0$, что согласно (30) эквивалентно неравенству $b_3 > b_2^2/3$ (или, в исходных параметрах, неравенству $5a_2^2/3 > a_1a_3$). В этом случае действительное решение уравнения (29) представимо в виде [11]

$$y_0 = A - \frac{p}{3A}, \quad (33)$$

$$A \equiv \sqrt[3]{-\frac{q(x)}{2} + \sqrt{Q(p, q(x))}}. \quad (34)$$

В случае же $p < 0$ при $Q(p, q(x)) < 0$ уравнение (29) имеет в дополнение к решению (33) еще два действительных решения [11]:

$$y_{\pm} = -\frac{A - p/(3A)}{2} \pm i\sqrt{3} \frac{A + p/(3A)}{2}. \quad (35)$$

Лишь один из этих трех корней удовлетворяет указанному выше граничному условию по x . Какой из этих формул будет описываться искомое решение, зависит от соотношения коэффициентов b_i . При $b_3 \leq 0$ (т.е. $a_1a_3 \geq 2a_2^2$) требуемое решение определяется действительным корнем y_- .

В случае $0 \leq b_3 \leq b_2^2/3$ (или $5a_2^2/3 \leq a_1a_3 \leq 2a_2^2$) искомое решение представляется одной из ветвей y_0 или y_+ в зависимости от знака b_2 . При $b_2 \geq 0$ (т.е. $a_1a_2 \leq 0$) решение описывается ветвью y_0 , в обратном случае – ветвью y_+ .

РГ-аппроксимация, соответствующая описанным выше решениям (33), (35), в общем виде может быть записана как

$$\phi_1^{(\beta_{[0/2]})}(x) = y_{\sigma} - \frac{b_2}{3b_3}, \quad (36)$$

где σ принимает одно из значений “0”, “+” или “–” в зависимости от соотношений между коэффициентами b_i , как описано выше.

Для рассмотренного случая $x''(f^{(\beta_{[0/2]})}) = 2b_2(1 + 4b_2(1 + s)\phi_1)/c_0^2$. Поэтому РГ-аппроксимация $f^{(\beta_{[0/2]})}(x)$ является выпуклой при $b_2(1 + 4b_2(1 + s)\phi_1) > 0$ и вогнутой в противном случае.

Последней из семейства ПА функции $\beta(\phi_1)$, для которых $m + n = 2$, является ПА степени [1/1]: $\beta(\phi_1) \simeq \beta_{[1/1]}(\phi_1) = c_0 + c_1^2\phi_1/(c_1 - c_2\phi_1)$. Она дает

$$\phi_1^{(\beta_{[1/1]})}(x) = [2b_2(1 + s)]^{-1} [1 - s^{-1}W(k, se^{s-2b_2[1+s]^2x})], \quad (37)$$

где s задано выражением (27), а $W(k, x)$ – функция Ламберта [12], являющаяся решением уравнения $x = ye^y$ относительно y . Целое число k обозначает ветви функции Ламберта. Нужная ветвь определяется из граничного условия $\phi_1(0) = 0$. При $s \geq -1$ этому условию удовлетворяет ветвь с $k = 0$ (главная ветвь), а при $s < -1$ – ветвь с $k = -1$.

Эта РГ-аппроксимация $f^{(\beta_{[1/1]})}(x)$ является выпуклой при $b_2 > 0$ и вогнутой в противном случае, поскольку $x''(f^{(\beta_{[1/1]})}) = 2b_2/\{c_0^2[1 - 2b_2(1+s)\phi_1]^2\}$.

3.1.2. РГ-приближения функций, следующие из ПА функции $X(\phi_1)$. Как отмечалось ранее, формула (14) с учетом соотношения (16) представляет собой выражение переменной x через функцию f . Таким образом, ряд (17) является разложением выражения (14). Поэтому, удерживая в выражении (17) несколько членов ряда и разрешая полученное приближенное уравнение относительно ϕ_1 , получаем еще один вариант РГ-аппроксимации функции f . Более общий подход заключается в рассмотрении дробно-рациональных аппроксимаций (ПА) степени $[m/n]$ выражения (17), приводящих к явным аналитическим РГ-аппроксимациям искомой функции $f(x)$. Разложение в ряд по ϕ_1 таких ПА степени $[m/n]$ совпадает с выражением (17) вплоть до порядка $m+n$ включительно. В свою очередь, разложение в степенной ряд РГ-аппроксимаций искомой функции $f(x)$, получающихся из обращения таких ПА, совпадает с разложением $f(x)$ также вплоть до порядка $m+n$ включительно. Ниже приводятся все подобные РГ-аппроксимации искомой функции $f(x)$ с $m+n \leq 3$.

Квадратичное приближение ряда (17) $x = \phi_1 + b_2\phi_1^2$, т.е. его ПА степени $[2/0]$, приводит к РГ-аппроксимации, совпадающей с (25).

Из ПА выражения (17) степени $[1/1]$ $x = \phi_1/(1 - b_2\phi_1)$ следует

$$\phi_1^{(X_{[1/1]})}(x) = \frac{x}{1 + b_2x}. \quad (38)$$

Заметим, что это выражение совпадает с приближенной формулой, получаемой из (25) в результате разложения корня в ряд по x .

Использование для ряда (17) ПА степени $[1/2]$, $x = \phi_1/[1 - b_2\phi_1 - (b_3 - b_2^2)\phi_1^2]$, порождает следующую РГ-аппроксимацию искомой функции:

$$\phi_1^{(X_{[1/2]})}(x) = \frac{2x}{1 + b_2x + \sqrt{(1 + b_2x)^2 + 4(b_3 - b_2^2)x^2}}. \quad (39)$$

Дробно-рациональная аппроксимация степени $[2/1]$ обратной функции (17) $x = \phi_1[b_2 - (b_3 - b_2^2)\phi_1]/(b_2 - b_3\phi_1)$ приводит к РГ-аппроксимации вида

$$\phi_1^{(X_{[2/1]})}(x) = \frac{2b_2x}{b_2 + b_3x + \sqrt{(b_2 - b_3x)^2 + 4b_2^3x}}. \quad (40)$$

Наконец, ПА обратной функции (17) степени $[3/0]$ фактически совпадает с уравнением (28), решение которого представляет РГ-аппроксимацию (36).

3.1.3. Приближения функций методом РГ-аппроксимаций обратной функции. Для взаимно однозначных функций $y = f(x)$ величины y и x являются в определенном смысле равноправными. Поэтому для получения приближений функции $f(x)$

можно воспользоваться методом РГ-аппроксимации обратной функции $x(f)$, которую более удобно представить в виде $x(\phi_1)$. В этом случае основой для получения РГ-приближений вместо формулы (14) является соотношение

$$\phi_1(x) = \int \frac{dx_1}{\alpha(x_1)}, \quad (41)$$

$$\alpha(x) = \frac{dx}{d\phi_1} \equiv x'(x). \quad (42)$$

Коэффициенты d_i разложения функции $\alpha(x)$ в ряд по x

$$\alpha(x) = d_0 + d_1x + d_2x^2 + d_3x^3 + \dots \quad (43)$$

получаются из выражений для c_i/c_0 путем замены $a_i \rightarrow b_i$, поскольку рассматриваемый случай отличается от анализируемого ранее заменой $X \leftrightarrow \phi_1$. В частности, первые несколько коэффициентов d_i выражаются через b_i так же, как и c_i/c_0 через a_i в формулах (22), и связаны с a_i подобно тому, как связаны между собой c_i/c_0 и b_i в формулах (23).

При подстановке ряда (43) в соотношение (41) получаем формулу для $\phi_1(x)$, явно выраженную через известные величины d_i :

$$\phi_1 = \int_0^x \frac{dx_1}{d_0 + d_1x_1 + d_2x_1^2 + d_3x_1^3 + \dots}. \quad (44)$$

Здесь снова нижний предел интегрирования определен граничным условием $\phi_1(0) = 0$, вытекающим из выражения (17).

Искомые РГ-аппроксимации функции ϕ_1 непосредственно определяются формулой (41) (или ее эквивалентом – формулой (44)), если в ее правой части использовать какую-либо аппроксимацию функции $\alpha(x)$. Как и ранее, ограничимся только дробно-рациональными аппроксимациями (ПА) степени $[m/n]$ функции $\alpha(x)$, приводящими к явным аналитическим РГ-аппроксимациям функции $\phi_1(x)$. Отметим, что, как и в п. 3.1.1, разложение получаемой таким образом РГ-аппроксимации функции в степенной ряд по x совпадает с аналогичным разложением искомой функции до порядка $m + n + 1$ включительно.

Ниже приводятся все нетривиальные РГ-аппроксимации с $m + n \leq 2$.

Итак, линейное приближение $\alpha_{[1/0]}(x) = d_0 + d_1x$ (т. е. ПА степени $[1/0]$) дает

$$\phi_1(x) \simeq \phi_1^{(\alpha_{[1/0]})}(x) = (2b_2)^{-1} \ln(1 + 2b_2x). \quad (45)$$

Для этого случая $f''^{(\alpha_{[1/0]})} = -2c_0b_2/(1 + 2b_2x)^2$, поэтому полученная РГ-аппроксимация $f^{(\alpha_{[1/0]})}(x)$ является выпуклой при $c_0b_2 > 0$ и вогнутой в противном случае.

Из квадратичного приближения $\alpha_{[2/0]}(x) = d_0 + d_1x + d_2x^2$ следует

$$\phi_1^{(\alpha_{[2/0]})}(x) = \left[\sqrt{b_2^2(1 + 4s)} \right]^{-1} \arctg \left[\sqrt{b_2^2(1 + 4s)} x(1 + b_2x)^{-1} \right], \quad (46)$$

где s определено выражением (27), и при смене знака величины $(1 + b_2x)$ с изменением x следует перейти к соседней ветви $\arctg$ (при положительности подкоренного выражения) для обеспечения непрерывности аппроксимации.

Для рассматриваемой РГ-аппроксимации

$$f''(\alpha_{[2/0]}) = -\frac{2b_2c_0[1 + 2(1 + 2s)b_2x]}{\{1 + 2b_2x[1 + (1 + 2s)b_2x]\}^2}.$$

Из этого выражения следует, что такая аппроксимация является выпуклой при $b_2c_0[1 + 2(1 + 2s)b_2x] > 0$ и вогнутой в противоположном случае.

Последней из семейства нетривиальных ПА функции $\alpha(x)$ с $m + n \leq 2$ является ПА степени $[1/1]$: $\alpha_{[1/1]}(x) = d_0 + d_1^2x/(d_1 - d_2x)$. Она дает

$$\phi_1^{(\alpha_{[1/1]})}(x) = \frac{2s + 1}{2s - 1} \left\{ x + \frac{2}{b_2(4s^2 - 1)} \ln[1 - b_2(2s - 1)x] \right\}, \quad (47)$$

где s также задается выражением (27). Для этой РГ-аппроксимации

$$f''(\alpha_{[1/1]}) = -\frac{2b_2c_0}{[1 + b_2(1 - 2s)x]^2}.$$

Поэтому такая РГ-аппроксимация $f^{(\alpha_{[1/1]})}(x)$ является выпуклой при $b_2c_0 > 0$ и вогнутой в противном случае.

Приведем оценки относительной погрешности полученных РГ-аппроксимаций, а также аппроксимаций конечными суммами ряда Тейлора для некоторых монотонных функций в точке $x = 1$. В качестве относительной погрешности используем обозначение $\Delta^{(A)} = \{[f^{(A)}(1) - f(1)] / f(1)\}100\%$, где $f^{(A)}(x)$ – различные аппроксимации функции $f(x)$.

Для функции $f(x) = \ln(1 + x)$ ее разложение в ряд вплоть до третьей степени x есть $f(x) \approx f^{(T_3)}(x) = 1 + x - x^2/2 + x^3/3$. Относительная ошибка такой аппроксимации есть $\Delta^{(T_3)} \approx 20.2\%$. Эта ошибка обусловлена главным образом последним, кубичным, членом приведенного разложения (т.е. “вливанием хвоста” конечного ряда Тейлора). Об этом свидетельствует совпадение знака этого члена со знаком ошибки. То же самое справедливо и в отношении квадратичного приближения $f^{(T_2)}$, относительная ошибка которого есть $\Delta^{(T_2)} \approx -27.9\%$. Вообще такое положение (доминирующее влияние “вливания хвоста” конечного ряда Тейлора на ошибку такого приближения) типично для монотонных функций. Предлагаемые же РГ-аппроксимации свободны от этого артефакта. Ошибки для них таковы: $\Delta^{(\beta_{[1/0]})} \approx -8.8\%$, $\Delta^{(\beta_{[0/1]})} \approx 5.6\%$, $\Delta^{(\beta_{[2/0]})} \approx 1.9\%$, $\Delta^{(\beta_{[0/2]})} \approx 0.8\%$, $\Delta^{(\beta_{[1/1]})} \approx -0.6\%$, $\Delta^{(X_{[1/1]})} \approx -3.8\%$, $\Delta^{(X_{[1/2]})} \approx 0.03\%$, $\Delta^{(X_{[2/1]})} \approx -0.4\%$, $\Delta^{(\alpha_{[1/0]})} = \Delta^{(\alpha_{[2/0]})} = \Delta^{(\alpha_{[1/1]})} = 0\%$.

Следует отметить, что ошибки $\Delta^{(\beta_{[m/n]})}$ и $\Delta^{(\alpha_{[m/n]})}$ при $m + n = 1$, а также $\Delta^{(X_{[m/n]})}$ при $m + n = 2$ необходимо сравнивать с ошибкой $\Delta^{(T_2)}$, поскольку указанные РГ-аппроксимации основаны на приближении $f^{(T_2)}$. По этой же причине ошибки $\Delta^{(\beta_{[m/n]})}$ и $\Delta^{(\alpha_{[m/n]})}$ при $m + n = 2$, а также $\Delta^{(X_{[m/n]})}$ при $m + n = 3$ следует сравнивать с ошибкой $\Delta^{(T_3)}$.

Для другой функции $f(x) = x/\sqrt{1 + x}$ ее разложение в ряд вплоть до третьей степени x есть $f(x) \approx f^{(T_3)}(x) = 1 + x - x^2/2 + 3x^3/8$. Относительные ошибки аппроксимаций этой функции конечными рядами Тейлора суть $\Delta^{(T_2)} \approx -29.3\%$,

$\Delta^{(T_3)} \approx 23.7\%$. Снова, как и для предыдущей функции, видно, что ошибки этих аппроксимаций в основном обусловлены “влиянием хвостов” конечных рядов Тейлора. Ошибки же предлагаемых РГ-аппроксимаций таковы: $\Delta^{(\beta_{[1/0]})} \approx -10.6\%$, $\Delta^{(\beta_{[0/1]})} \approx 3.5\%$, $\Delta^{(\beta_{[2/0]})} \approx 3.1\%$, $\Delta^{(\beta_{[0/2]})} \approx -0.1\%$, $\Delta^{(\beta_{[1/1]})} \approx -0.9\%$, $\Delta^{(X_{[1/1]})} \approx -5.7\%$, $\Delta^{(X_{[1/2]})} \approx 0.2\%$, $\Delta^{(X_{[2/1]})} \approx -0.8\%$, $\Delta^{(\alpha_{[1/0]})} \approx -2.0\%$, $\Delta^{(\alpha_{[2/0]})} \approx 0.1\%$, $\Delta^{(\alpha_{[1/1]})} \approx -0.1\%$. Для данной функции эффективность РГ-аппроксимаций по отношению к аппроксимациям конечными рядами Тейлора $\Delta^{(T_2)}$, $\Delta^{(T_3)}$ следует оценивать так же, как указано для предыдущей функции.

Отметим в заключение, что существование набора аппроксимаций при наличии дополнительной априорной информации о каких-либо особенностях искомой функции (например, об асимптотике) может быть использовано для выбора из всех равнозначных РГ-аппроксимаций той, поведение которой наиболее близко воспроизводит эту особенность, т. е. оптимальной по точности.

3.2. РГ-аппроксимации функций с $a_l = 0$ ($0 < l < k$), $a_k \neq 0$. Как показано в приложении, в этом случае вместо (17) мы имеем разложение $x(f)$ в ряд

$$x = \phi_k + b_2 \phi_k^2 + b_3 \phi_k^3 + \dots \quad (48)$$

по степеням

$$\phi_k = \sqrt[k]{\frac{f - a_0}{a_k}}. \quad (49)$$

Коэффициенты b_i выражаются через a_i посредством формул (58), в которых следует в качестве $v(x)$ подставить x , а в качестве $w(x) - \phi_k(x)$. При этом коэффициенты $\tilde{c}_i$ в выражениях (58) имеют смысл коэффициентов b_i .

Искомая зависимость $\beta(f)$ в виде ряда по ϕ_k может быть получена, как и при $a_1 \neq 0$, последовательной подстановкой в формулу (16) разложений (15) и (48), либо непосредственно по формуле (57), в которую следует в качестве $v(x)$ и $w(x)$ подставить $f'(x)$ и $\phi_k(x)$ (при этом $\tilde{c}_i = c_i$):

$$\beta(\phi_k) = c_{k-1} \phi_k^{k-1} + c_k \phi_k^k + c_{k+1} \phi_k^{k+1} + \dots \quad (50)$$

Коэффициенты c_i этого ряда выражаются через a_i посредством формулы (62).

Как и прежде, основой для получения РГ-приближений является формула (14), которую в данном случае с учетом (49), (50) и (64) можно представить в виде

$$X(\phi_k) = c_{k-1} \int \frac{d\varphi_k}{c_{k-1} + c_k \varphi_k + c_{k+1} \varphi_k^2 + c_{k+2} \varphi_k^3 + \dots}. \quad (51)$$

Сравнивая это соотношение с выражением (21), видим, что формулу (51) можно получить из (21) заменами $\varphi_1 \rightarrow \varphi_k$, $c_i \rightarrow c_{i+k-1}$. Поэтому все РГ-аппроксимации ϕ_k данного типа получаются из выражений (24)–(26), (36) и (37) путем указанных выше замен. Формально эти аппроксимации являются результатом ПА величины

$$\tilde{\beta}(\phi_k) \equiv \frac{\beta(\phi_k)}{\phi_k^{k-1}} = c_{k-1} + c_k \phi_k + c_{k+1} \phi_k^2 + \dots \quad (52)$$

Отметим снова, что соотношение (51) является согласно соотношениям (14) и (16) представлением переменной x через функцию ϕ_k . С другой стороны, эта зависимость выражается в виде ряда (48). Поэтому b_i связаны с c_i . В случае $a_1 \neq 0$ эта связь для нескольких первых коэффициентов представлена соотношениями (23). Поскольку структура рядов (17) и (48) одинакова, а соотношение (51) получается из выражения (21) указанной выше заменой индексов у c_i , то связь коэффициентов b_i и c_i для рассматриваемого случая представляется теми же соотношениями (23), в которых необходимо только сделать эту замену индексов у c_i .

РГ-аппроксимации ϕ_k других видов, связанные с ПА ряда (48) и его РГ-приближениями, совпадают с РГ-аппроксимациями (38)–(40), (45)–(47) функции ϕ_1 предыдущего случая ($a_1 \neq 0$) ввиду одинаковой структуры рядов (17) и (48).

Стоит отметить, что использование результатов п. 3.1 для рассматриваемого случая представляется даже очевидной, поскольку формулы аппроксимации для ϕ_1 выражены через коэффициенты b_i , а структура рядов (17) и (48) одинакова.

Естественно, при таком использовании формул аппроксимации п. 3.1 для аппроксимации рассматриваемой функции ϕ_k в них следует подставлять в качестве b_i и c_i соответствующие значения, указанные в настоящем разделе. Аппроксимации же искомой функции f получаются из аппроксимаций для ϕ_k с помощью соотношения (49).

Приведем явные выражения первых коэффициентов b_i и c_i для наиболее часто встречающегося случая $a_1 = 0$, $a_2 \neq 0$, что характерно, например, для четных функций:

$$b_2 = -\frac{a_3}{2a_2}, \quad b_3 = \frac{5}{8} \left(\frac{a_3}{a_2} \right)^2 - \frac{a_4}{2a_2},$$

$$c_0 = 0, \quad c_1 = 2a_2, \quad c_2 = 2a_3, \quad c_3 = 3a_4 - \frac{7a_3^2}{4a_2}.$$

4. АНГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Предложенные аппроксимации целесообразно использовать для улучшения расчетов величин, получаемых каким-либо методом последовательных приближений, например методом возмущений.

Проиллюстрируем наш метод РГ-аппроксимации на важном физическом примере расчета энергии основного состояния ангармонического осциллятора. Этот пример демонстрирует возможности рассматриваемого метода, поскольку данная проблема обладает следующими особенностями: 1) стандартная теория возмущений неприменима, так как приводит к расходящемуся ряду; 2) известно асимптотическое выражение для энергии при большом параметре ангармонизма; 3) существуют численные расчеты, которые можно сравнить с результатами аппроксимации; 4) имеются другие приближения расчета энергии для сравнения с предлагаемым методом.

Итак, применим наш метод для расчета энергии основного состояния ангармонического осциллятора с гамильтонианом ($\hbar = 1$)

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} y^2 + \lambda m^2 y^4, \quad (53)$$

где m , ω и λ – положительные константы, а $y \in (-\infty, \infty)$.

Известно, что к такому гамильтониану приводится целый ряд физических моделей. Выявлена и признана также связь рассматриваемого осциллятора с так называемой ϕ^4 -моделью в квантовой теории поля.

Гамильтониан (53) с помощью замены $y \rightarrow \sqrt{m}y$ приводится к виду

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{\omega^2}{2} y^2 + \lambda y^4, \quad (54)$$

который более удобен для вычислений. Ряд теории возмущений по λ для энергии E_0 основного состояния такого гамильтониана расходится при любой конечной величине этой константы [13], [14]. Расходимость этого ряда для безразмерной энергии основного состояния

$$e(g) \equiv \frac{E_0}{\omega}, \quad g \equiv \frac{\lambda}{\omega^3}, \quad (55)$$

столь велика, что разложение по степеням g теряет смысл при $g \sim 1$, так как коэффициенты ряда при g^n возрастают как $3^n n!$ при $n \rightarrow \infty$ [14]. В пределе слабой связи ($g \ll 1$) разложение энергии основного состояния (55) по степеням g представляет собой ряд [13], [14]

$$e(g) \simeq \frac{1}{2} + \frac{3}{4}g - \frac{21}{8}g^2 + \frac{333}{16}g^3 - \frac{30885}{128}g^4, \quad g \ll 1. \quad (56)$$

Для оценки точности РГ-аппроксимаций воспользуемся результатами численных расчетов [15]–[17] для энергии основного состояния (55) в широком диапазоне значений константы связи. Ограничиваясь только тремя членами ряда (56), мы получаем квадратичное приближение ряда Тейлора, точность которого $\approx -270\%$ при $g = 1$. С другой стороны, наши РГ-аппроксимации (24), (25), (38) и (45), основанные на этом квадратичном приближении, имеют точность соответственно $\Delta^{(\beta_{[1,0]})} \approx -25\%$, $\Delta^{(\beta_{[0,1]})} \approx 0.5\%$, $\Delta^{(X_{[1,1]})} \approx -17\%$ и $\Delta^{(\alpha_{[1,0]})} \approx -10\%$, превышающие точность исходного приближения более чем на порядок. Такая точность представляется вполне разумной для аппроксимаций, основанных всего лишь на нескольких членах разложения расходящегося ряда. Отметим, что асимптотика РГ-аппроксимации (25) при $g \rightarrow \infty$ имеет наиболее близкий характер ($\propto g^{1/2}$) по отношению к точной ($\propto g^{1/3}$) [16], [17]. Этот факт является определяющей причиной лучшей точности этой РГ-аппроксимации по сравнению с другими, основанными на том же исходном приближении.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный метод РГ-аппроксимации обладает следующими особенностями.

В основе своей он логически ясен и прост. Для построения приближения требуется минимальная информация – знание всего нескольких последовательных членов ряда теории возмущений. Ошибка РГ-аппроксимаций, основанных на простейшем квадратичном приближении, даже для функций $f(g)$, разложение которых в ряд по степеням g расходится, составляет $\sim 10\%$ при $g = 1$. Метод допускает целый ряд аппроксимаций, значения которых близки при умеренных аргументах $g \lesssim 1$,

но отличаются при больших. Если известна априорная информация о каких-либо особенностях искомой функции (например, асимптотика), то из всех равнозначных РГ-аппроксимаций можно выбрать ту, поведение которой наиболее близко воспроизводит эту особенность.

Наш подход допускает ряд обобщений.

В общем случае соотношение инвариантности (8) отображения (1) относительно РГ-преобразования (9) справедливо для широкого круга множеств, состоящих из элементов x , для которых определены невырожденные отображения в другие множества. При выводе соотношения (8) фактически использовалось лишь то обстоятельство, что элементы множества значений аргументов x образуют полугруппу относительно операции сложения. Сами же эти множества могут быть как непрерывными, так и дискретными. В последнем случае можно построить дискретное отображение ряда последовательных приближений какой-либо функции f следующим образом. В качестве аргументов дискретного отображения используем номер приближения $(0, 1, 2, \dots)$, а в качестве значений отображения – последовательные приближения функции $(f_0(x), f_1(x), f_2(x), \dots)$. В этом случае соотношение инвариантности (8) принимает вид $F(n + p; f_0(x)) = F(n; F(p; f_0(x)))$, где n и p – целые неотрицательные числа. Это соотношение можно представить в другом виде, изменив обозначения путем указания целочисленных аргументов отображения F в качестве индексов: $F_{n+p}(f_0(x)) = F_n(F_p(f_0(x)))$. Такое соотношение функциональной автомодельности было получено в работе [18] из других соображений и использовано для построения аппроксимации, названной автомодельной. Отметим, что точность этой аппроксимации энергии основного состояния одномерного ангармонического осциллятора составляет $\sim 10\%$.

В общем случае элементы x множества M размерности m связываются при отображении F с элементами f множества N размерности n . При этом соотношение инвариантности (8) отображения при РГ-преобразовании справедливо в случае взаимной однозначности множества отображаемых точек и их образа (инъективное отображение). Для непрерывных множеств и гладких отображений это условие выполняется, если ранг функционального определителя $\partial(f_1, f_2, \dots, f_n)/\partial(x_1, x_2, \dots, x_m)$ равен наименьшему из чисел m и n (невырожденное отображение). При условии $m < n$ взаимно однозначное отображение F задает некоторое m -параметрическое непересекающееся подмножество (m -мерную непересекающуюся гиперповерхность) в множестве N . Случай отображения с $m = 1$ и $n = 2$ соответствует двухзарядной квантово-полевой модели [7]. При условии же $m > n$ областью определения отображения, инвариантного относительно РГ-преобразования, может быть любая n -мерная непересекающаяся гиперповерхность в M .

Отметим, что монотонный характер инвариантного заряда от квадрата 4-импульса в калибровочных теориях электрослабого и сильного взаимодействий, обладающих РГ-симметрией, представляется естественным в свете вышеизложенного.

В настоящей работе предложены РГ-аппроксимации монотонных функций. Однако наш подход может быть обобщен и на случай произвольных (немонотонных) функций. Это обобщение состоит в представлении реальной функции как реаль-

ной или мнимой части некоторой комплексной взаимно однозначной функции (или одной из ее ветвей) и РГ-аппроксимации последней.

Возможно получение РГ-аппроксимации и не аналитических (как в данной статье), а мероморфных функций с использованием их разложения в ряд Лорана вблизи полюсов.

Также может быть расширен и динамический диапазон РГ-аппроксимации с помощью принципа минимальной чувствительности [19]. Например, такой подход позволяет рассчитать энергию основного состояния ангармонического осциллятора, рассмотренного в разделе 4, с точностью выше 1% во всем диапазоне параметра нелинейности $g \in (0, \infty)$.

Более детально эти и другие обобщения предложенного подхода будут рассмотрены в последующих публикациях.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Нахождение коэффициентов c_n разложения функции $\beta(f)$ для аналитической функции $f(z)$

Рядом Бурмана–Лагранжа называют (см., например, книгу [9]) разложение аналитической функции $v(z)$ по степеням другой аналитической функции $w(z)$:

$$v(z) = \tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 w(z) + \tilde{c}_2 w(z)^2 + \dots + \tilde{c}_n w(z)^n + \dots \quad (57)$$

Это разложение справедливо в окрестности некоторой точки z_0 , где обе функции считаются правильными, причем $w(z)$ принимает свои значения в этой области и на ее границе всего лишь один раз и имеет нуль первого порядка в точке z_0 . Коэффициенты $\tilde{c}_n$ суть

$$\begin{aligned} \tilde{c}_0 &= \lim_{z \rightarrow z_0} \left\{ \frac{v(z)w'(z)(z - z_0)}{w(z)} \right\}, \\ \tilde{c}_n &= \frac{1}{n!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} \left\{ v'(z) \frac{(z - z_0)^n}{w^n(z)} \right\}, \quad n > 0. \end{aligned} \quad (58)$$

1. Случай $a_1 \neq 0$. Воспользуемся выражением (57) для искомой задачи разложения производной $f'(z)$ аналитической взаимно однозначной функции в ряд по значениям самой функции $f(z)$ в окрестности $z_0 = 0$, полагая $v(z) = f'(z)$. Однако саму функцию $f(z)$ нельзя использовать в качестве $w(z)$, так как она не обладает указанными выше свойствами функции $w(z)$. В роли $w(z)$ при $a_1 \neq 0$ следует использовать не $f(z)$, а $\phi_1(z) = (f - a_0)/a_1$, так как именно $\phi_1(z)$ имеет нуль первого порядка в точке $z_0 = 0$. Таким образом, при подстановке $v(z) = f'(z)$ и $w(z) = \phi_1(z)$ в формулы (58) сразу получаем (с учетом разложения (15) и следующего из него разложения для $f'(z)$) коэффициенты c_n разложения $\beta(f) \equiv f'(z)$ по ϕ_1 (по определению в этом случае $\tilde{c}_n = c_n$).

2. Общий случай. Пусть разложение функции $f(z)$ по положительным степеням переменной z начинается с некоторой степени $k > 0$ (т.е. коэффициенты

разложения $a_l = 0$ при $0 < l < k$). Тогда функцию $f(z)$ можно представить в виде

$$f(z) = a_0 + a_k z^k \psi_k(z), \quad (59)$$

$$\psi_k(z) \equiv 1 + \frac{a_{k+1}}{a_k} z + \frac{a_{k+2}}{a_k} z^2 + \dots \quad (60)$$

В этом случае можно положить $w(z) = z \sqrt[k]{\psi_k(z)}$, так как эта функция имеет нуль первого порядка в точке $z_0 = 0$ ($\psi_k(0) = 1$) и обладает всеми остальными свойствами функции $w(z)$, используемой в формуле (57). В данном случае функция $w(z)$ выражается через искомую функцию в виде $w(z) = \sqrt[k]{[f(z) - a_0]/a_k} \equiv \phi_k(z)$, где следует брать главное значение корня. Коэффициенты разложения (58) функции $v(z) = f'(z)$ по степеням такой функции $w(z)$ представляются в терминах $\psi_k(z)$ в виде (здесь снова по определению $\tilde{c}_j = c_j$)

$$c_0 = k a_k \lim_{z \rightarrow 0} \left\{ \left(\psi_k(z) \left[1 + \frac{z \psi'_k(z)}{k \psi_k(z)} \right] \right)^2 z^{k-1} \right\}, \quad (61)$$

$$c_n = \frac{a_k}{n!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} \left\{ \left(\frac{\psi''_k(z) z^2 + 2k z \psi'_k(z) + k(k-1) \psi_k(z)}{\psi_k^{n/k}(z)} \right) z^{k-2} \right\}, \quad n \geq 1. \quad (62)$$

Выражение в круглых скобках перед z^{k-1} в формуле (61) равно единице при $z = 0$, поэтому

$$c_0 = a_k \delta_{k,1}, \quad (63)$$

где $\delta_{k,1}$ – символ Кронекера.

Из равенства (62) видно, что $c_n = 0$ для $n < k - 1$, так как при этих значениях n после j -кратного дифференцирования ($j \leq n - 1$) множителя z^{k-2} степень z остается положительной. При граничном же значении $n = k - 1$

$$c_{k-1} = k a_k, \quad (64)$$

так как в этом случае правая часть равенства (62) отлична от нуля лишь при распространении дифференцирования только на множитель z^{k-2} , поэтому в пределе $z \rightarrow 0$ ненулевым в круглых скобках оказывается лишь слагаемое $k(k-1)\psi_k(z)$ в числителе дроби. Формально в этом рассуждении следует полагать $k \neq 1$, однако выражение $c_{k-1} = k a_k$ справедливо и для $k = 1$, поскольку величина $k - 1$ не входит в его правую часть явно. Его значение согласуется в этом случае ($k = 1$) с выражением, приведенным выше при обсуждении коэффициента c_0 .

Анализ формулы (62) показывает, что если $\psi_k(z)$ – четная функция (нечетной она не может быть по определению, так как $\psi_k(0) = 1$), то половина коэффициентов c_n тождественно равны нулю. Действительно, в этом случае выражение в круглых скобках в формуле (62) также является четной функцией. Таким образом, выражение в фигурных скобках обладает определенной четностью, задаваемой четностью степени множителя z^{k-2} . Если четности степени этого множителя ($k - 2$) и порядка дифференцирования фигурных скобок ($n - 1$) разные, то результатом дифференцирования выражения в фигурных скобках является нечетная функция,

которая обращается в нуль при $z \rightarrow 0$. Поэтому $c_{2m} = 0$ при четном k и $c_{2m+1} = 0$ при нечетном k ($m = 1, 2, \dots$) для четной функции $\psi_k(z)$.

В качестве примера рассмотрим случай $a_1 = 0$, $a_2 \neq 0$. В такой ситуации разложение искомой функции $\beta(f)$ ведется по степеням $\sqrt{(f - a_0)/a_2}$. Согласно формулам (61), (62) несколько первых коэффициентов c_n такого разложения оказываются следующими: $c_0 = 0$, $c_1 = 2a_2$, $c_2 = 2a_3$, $c_3 = 3a_4 - (7/4)(a_3^2/a_2)$.

Благодарности. Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 07-02-17107).

Список литературы

- [1] D. I. Kazakov, D. V. Shirkov, *Fortschr. Phys.*, **28**:8–9 (1980), 465–499.
- [2] J. Zinn-Justin, *Phys. Rep.*, **70**:2 (1981), 109–167.
- [3] У. Джоунс, В. Трон, *Непрерывные дроби. Аналитическая теория и приложения*, Мир, М., 1985.
- [4] F. Beleznaý, *J. Phys. A*, **19**:4 (1986), 551–562.
- [5] Д. В. Ширков, *ДАН СССР*, **263**:1 (1982), 64–67.
- [6] В. Ф. Ковалев, Д. В. Ширков, *ТМФ*, **121**:1 (1999), 66–88, arXiv:math-ph/0001027.
- [7] Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *ДАН СССР*, **103** (1955), 203–206.
- [8] Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Введение в теорию квантованных полей*, Наука, М., 1984.
- [9] М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат, *Методы теории функций комплексного переменного*, Наука, М., 1985.
- [10] Дж. Бейкер, П. Грейвс-Моррис, *Аппроксимации Паде*, Мир, М., 1986.
- [11] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных и инженерных работников*, Наука, М., 1974.
- [12] R. M. Corless, G. H. Gonnet, D. E. G. Hare, D. J. Jeffrey, D. E. Knuth, *Adv. Comput. Math.*, **5**:1 (1996), 329–359.
- [13] C. M. Bender, Tai Tsun Wu, *Phys. Rev.*, **184**:5 (1969), 1231–1260.
- [14] C. M. Bender, Tai Tsun Wu, *Phys. Rev. D*, **7**:6 (1973), 1620–1636.
- [15] S. N. Biswas, K. Datta, R. P. Saxena, P. K. Srivastava, V. S. Varma, *J. Math. Phys.*, **14**:9 (1973), 1190–1195.
- [16] F. T. Hioe, E. W. Montroll, *J. Math. Phys.*, **16**:9 (1975), 1945–1955.
- [17] F. T. Hioe, D. MacMillen, E. W. Montroll, *Phys. Rep.*, **43**:7 (1978), 305–335.
- [18] V. I. Yukalov, *Phys. A*, **167**:3 (1990), 833–860.
- [19] P. M. Stevenson, *Phys. Rev. D*, **23**:12 (1981), 2916–2944.

Поступила в редакцию 21.09.2009,
после доработки 22.12.2009