



Istraživačka stanica Petnica, Srbija

Marina Radulaški

**Trajektorije značajne za računanje
funkcionalnog integrala
u kvantnoj mehanici**

mentor: Antun Balaž

Laboratorija za primenu računara u nauci

Institut za fiziku, Beograd

mart 2005.

Apstrakt

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.

Trajectories Important for the Calculation of Path Integrals in Quantum Mechanics

Abstract

Trajectories important for the calculation of probability amplitudes in quantum mechanics in functional formalism are investigated in this paper. The area around the solution of classical equations of motion, containing these trajectories, is identified for the case of anharmonic oscillator. If trajectories are sampled so that all of them are contained in the area of a chosen width $\delta(t)$ in a moment t , the calculation will have a certain relative error r . For the fixed value of relative error r , it is found numerically that the width $\delta(t)$ can be written as a polynomial in \sqrt{t} and $\sqrt{T-t}$, where T is the evolution time of quantum system. The coefficients of polynomial are found to be linear functions in $\log r$. Dependence of maximal width $\delta=\delta(T/2)$ on anharmonicity is numerically studied and quadratic behavior is obtained.

Uvod

Dobro je poznato da postoje različite, ali međusobno ekvivalentne formulacije kvantne mehanike [8, 9]. 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 ćemo razmatrati sistem koji se sastoji 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

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

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 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 $q(t_\alpha) = \alpha$, $q(t_\beta) = \beta$. Svako trajektoriji se dodeljuje težina $e^{\frac{i}{\hbar} S}$, 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 (za detalje videti [7])

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

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 doprinos amplitudi A . Poznato je [1-6] 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 Plankove 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 egzaktno 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 [8]. Ona se sastoji u podeli vremena evolucije T na N jednakih intervala $\varepsilon_N = T/N$. Radi određenosti, posmatrajmo klasu teorija opisanih lagranžijanom

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

Ovo 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 [8] dobija*

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

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:

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

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 $1/N$ [7, 8] (slika 1), pa se amplituda A dobija fitovanjem na krivu

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

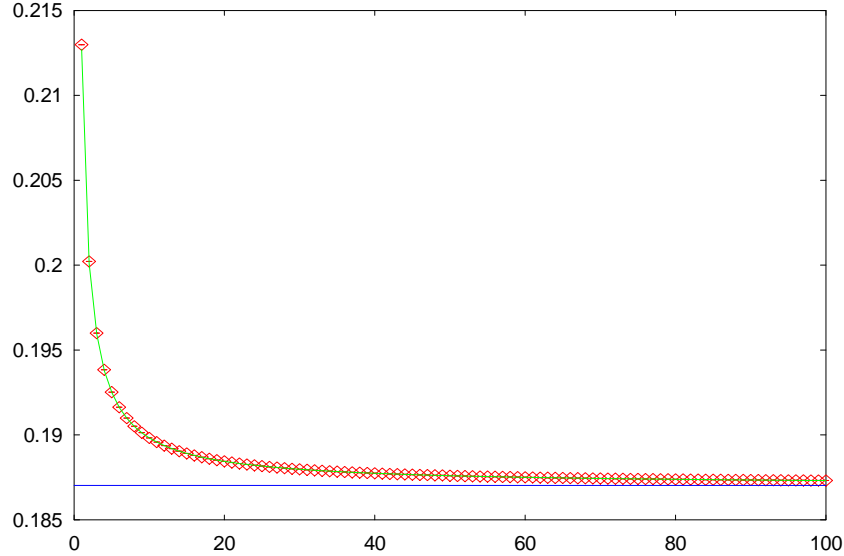
Pri tome, najbolje je fitovati polinom po $x=1/N$, pošto metoda najmanjih kvadrata (MNK) daje najsigurnije rezultate za polinomijalne funkcije.

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

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

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

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.



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 4-th 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 $N_{MC}=10^7$.

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 prelaza 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

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

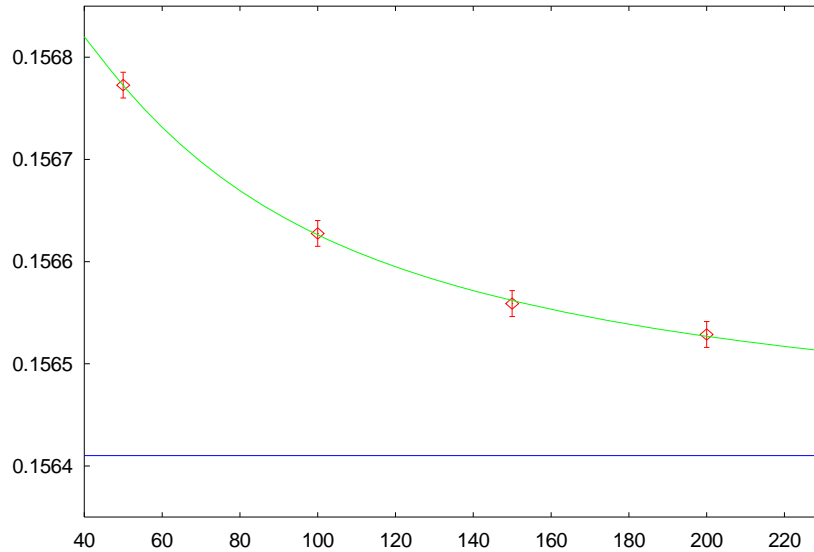
* Za računanje amplitude A korišćena je Monte Karlo simulacija o kojoj je detaljnije objašnjeno u poglavlju Numerički rezultati.

Razmotrićemo kakva je zavisnost $\delta(t_p)$ koja dovodi do relativne greške r u finalnom rezultatu. Prvo ćemo 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 [7]. 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 $[q_{cl}(t_p)-\delta, q_{cl}(t_p)+\delta]$.

Simulacija je izvršavana za četiri različite vrednosti anharmoniciteta g ($g=0.1$, $g=1$, $g=10$, $g=100$), dve vrednosti vremena evolucije T ($T=1$, $T=10$), 50 ekvidistantnih vrednosti t_p , deset vrednosti δ koje su 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 podeonih intervala N ($N=50$, $N=100$, $N=150$, $N=200$). Vrednosti smo, koristeći program *gnuplot* [10], 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 [11].



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 $r=1.9\%$.

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 $g=10$, $T=1$, $t_p=0.3$, $\delta=1$, and $N_{MC}=9.6 \cdot 10^6$. Relative error is $r=1.9\%$.

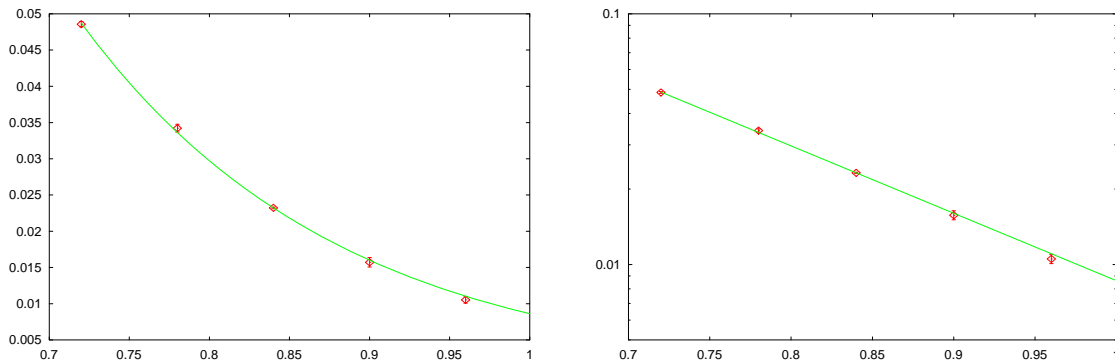
Da bismo odabrali širinu δ koja daje željeno odstupanje r za fiksiranu vrednost t_p , neophodno je izračunati $A(t_p, \delta)$ za više različitih vrednosti δ i nakon toga naći funkciju $r(\delta)$. Iz inverzne funkcije $\delta(r)$ ćemo tada biti u mogućnosti da izračunamo traženu vrednost δ . Na slici 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 egzaktan 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 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 $\delta(r) = \frac{\ln r_0 - \ln r}{\gamma}$.

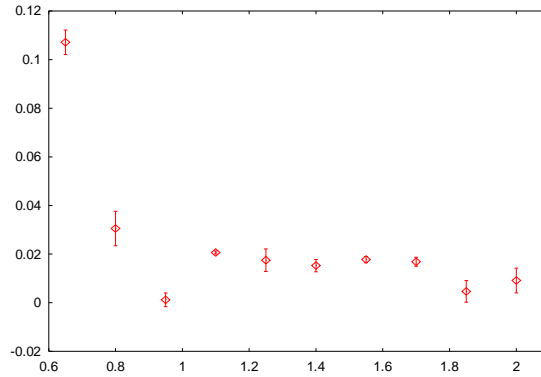


Slika 3: Tipična zavisnost r (relativnog odstupanja $A(t_p, \delta)$ od A) od δ fitovana na eksponencijalnu funkciju na normalnoj (levo) i semilogaritamskoj skali (desno). Parametri teorije su $g=100$, $T=1$, $t_p=0.7$, a $N_{MC}=9.6 \cdot 10^7$.

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 $g=100$, $T=1$, $t_p=0.7$, a $N_{MC}=9.6 \cdot 10^7$.

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.



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 $g=100$, $T=10$, $t_p=4$, i $N_{MC}=3.84 \cdot 10^8$.

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), 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 [12] da kada se Vikova rotacija primeni na Šredingerovu jednačinu, se 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 $\sqrt{T-t}$:

$$F_2(t) = p_0 + p_1\sqrt{t} + p_2\sqrt{T-t} + p_3\sqrt{t(T-t)} + p_4t + p_5(T-t)$$

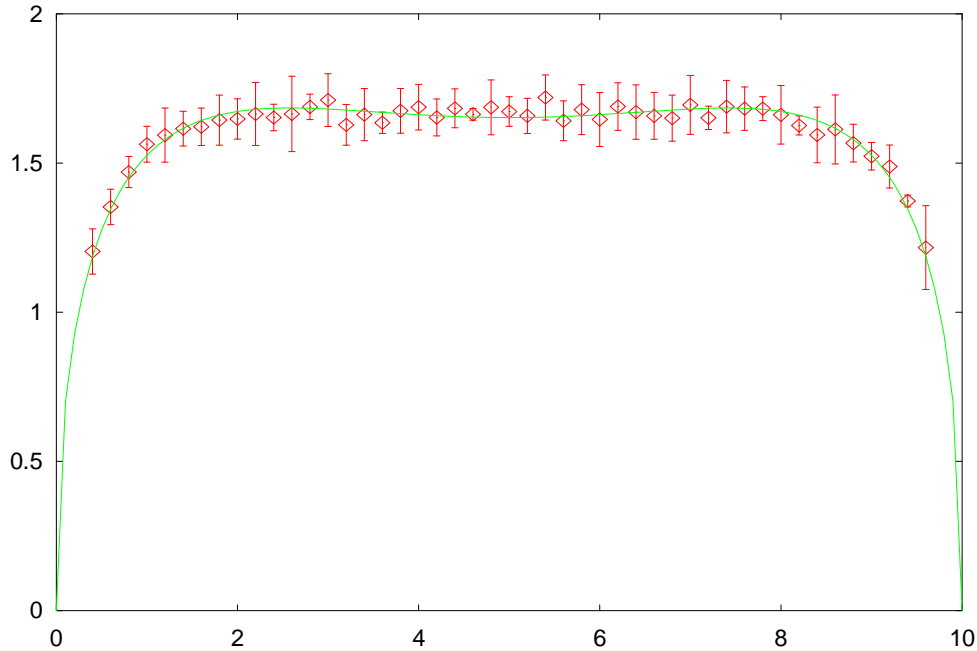
$$F_3(t) = p_0 + p_1\sqrt{t} + p_2\sqrt{T-t} + p_3\sqrt{t(T-t)} + p_4t + p_5(T-t) + p_6t^{3/2} + p_7(T-t)^{3/2} + p_8\sqrt{t(T-t)} + p_9t\sqrt{T-t}.$$

Rezultati opšteg fita u svim slučajevima pokazali su da je $p_4 \approx p_5$, pa se članovi p_4t i $-p_5t$ mogu skratiti, a p_5T 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

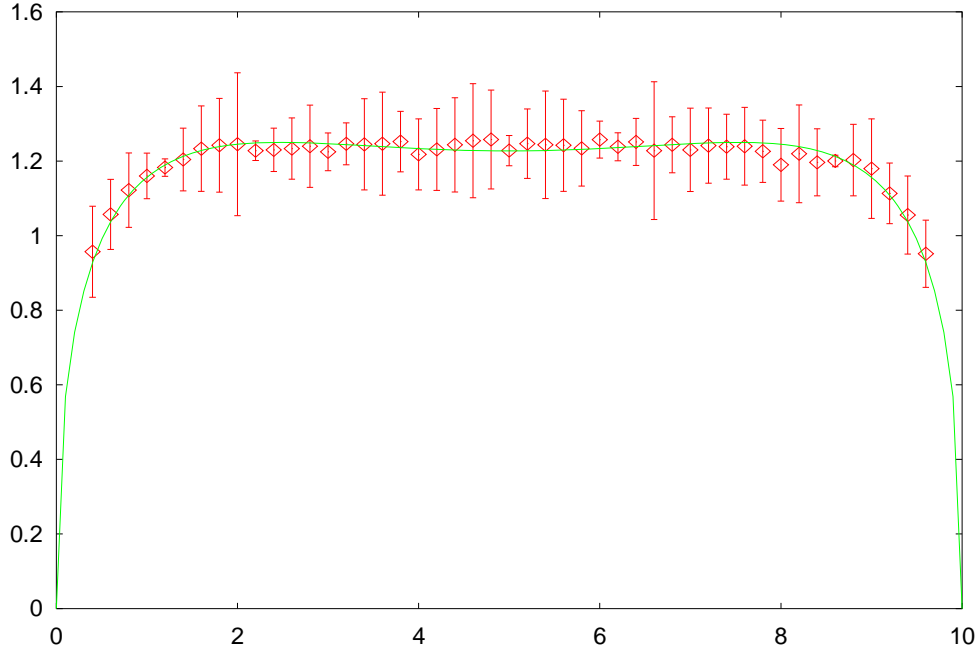
$$F_2'(t) = p_0 - p_0 \left(\sqrt{\frac{t}{T}} + \sqrt{1 - \frac{t}{T}} \right) + p_3 \sqrt{t(T-t)}.$$

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 $p_0=-32.3(4)$, $p_1=-2.35(4)$.

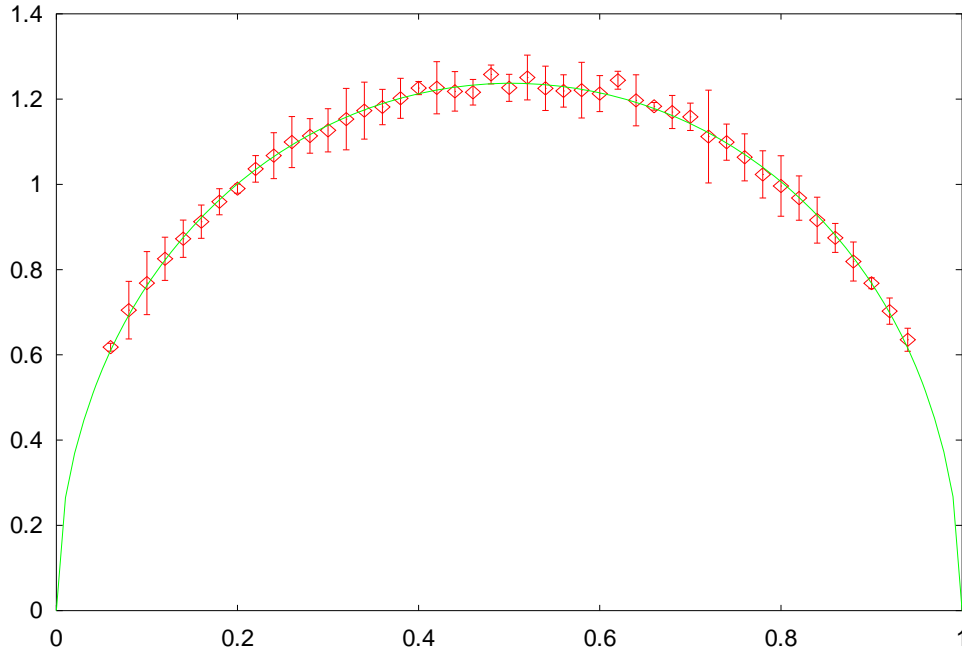
Figure 5: Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_2'(t)$ for the parameters $g=0.1$, $T=10$, $r=2\%$; $N_{MC}=9.6 \cdot 10^6$; $A=0.00223656(3)$. Coefficients of the polynomial are $p_0=-32.3(4)$, $p_1=-2.35(4)$.



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 $p_0=-25.6(4)$, $p_1=-1.88(3)$.

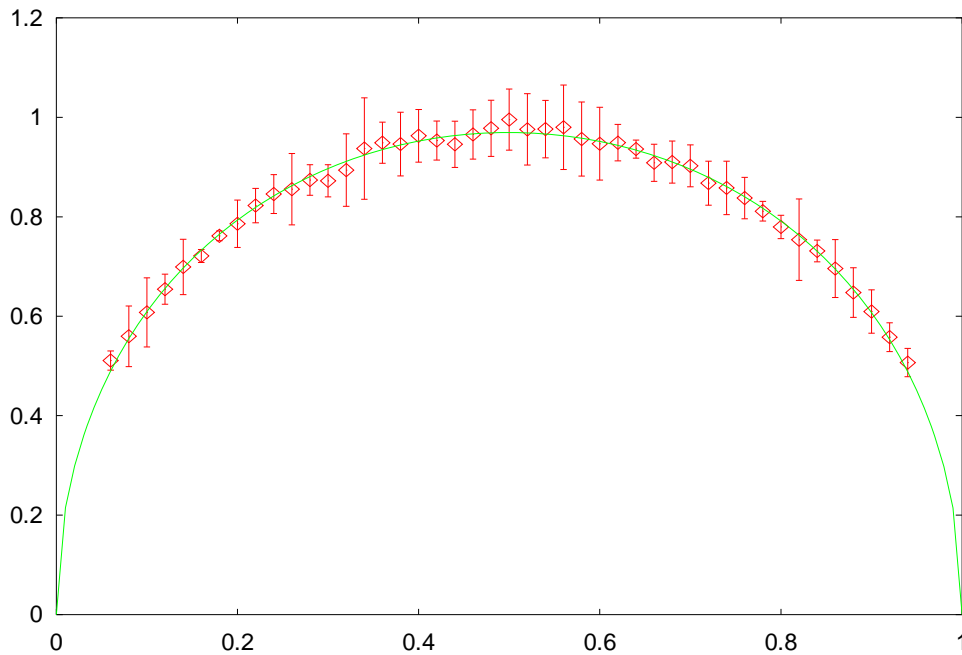
Figure 6: Dependence $\delta(t)$ fitted on $F_2'(t)$ for the parameters $g=1$, $T=10$, $r=6\%$; $N_{MC}=9.6 \cdot 10^6$; $A=0.0017461(3)$. Coefficients of the polynomial are $p_0=-25.6(4)$, $p_1=-1.88(3)$.

Za slučajeve kada je $T=1$ fit je sugerisao da treba koristiti polinom trećeg stepena i pri tome odbaciti članove $p_3\sqrt{t(T-t)}$, $p_8\sqrt{t(T-t)}$ i $p_9t\sqrt{(T-t)}$, 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 $F_3'(t) = p_0 + p_1\sqrt{t} + p_2\sqrt{T-t} - (p_0 + p_1)t^{3/2} - (p_0 + p_2)(T-t)^{3/2}$. 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 .



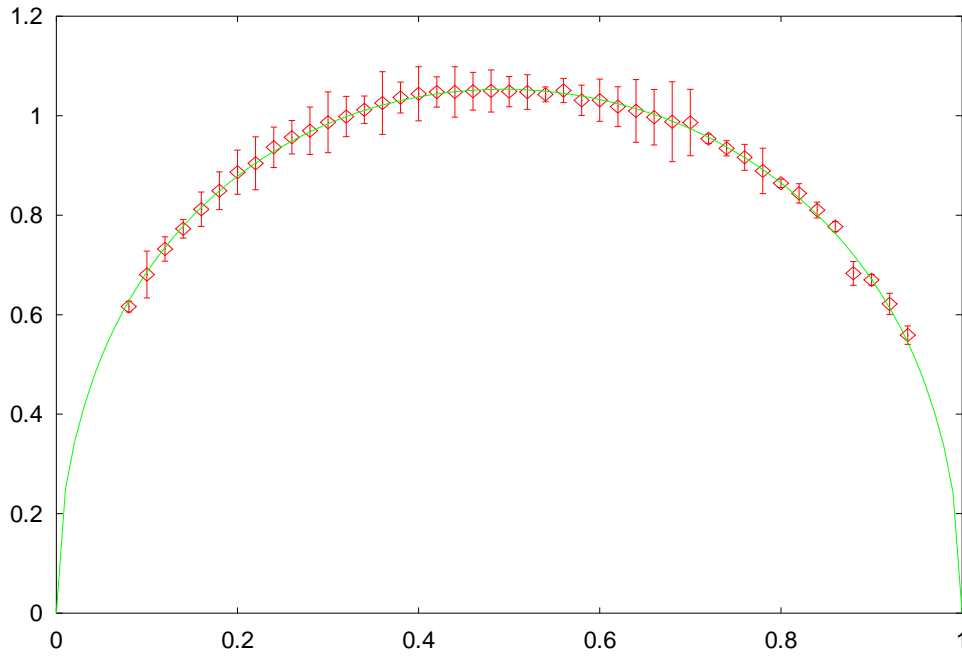
Slika 7: Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g=0.1$, $T=1$, $r=1\%$; $N_{MC}=9.6 \cdot 10^6$; $A=0.19047435(4)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0=-2.38(9)$, $p_1=2.72(4)$, $p_2=2.75(4)$.

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 $p_0=-2.38(9)$, $p_1=2.72(4)$, $p_2=2.75(4)$.



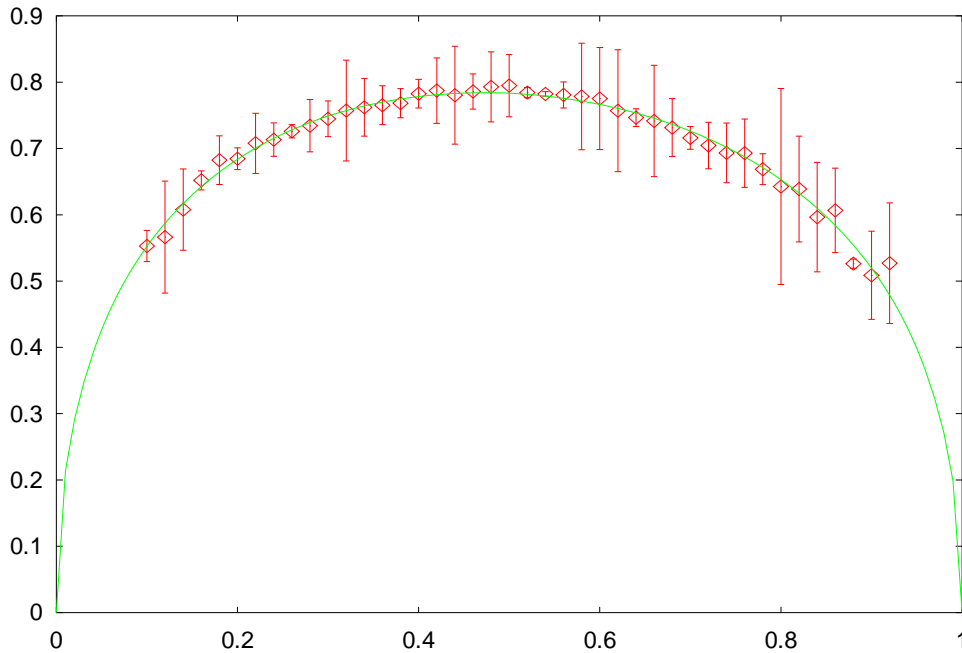
Slika 8: Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g=1$, $T=1$, $r=4\%$; $N_{MC}=9.6 \cdot 10^6$; $A=0.1870296(3)$. Koeficijenti polinoma iznose $p_0=-2.07(9)$, $p_1=2.23(4)$, $p_2=2.22(4)$.

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 $g=10$, $T=1$, $r=2\%$; $N_{MC}=9.6 \cdot 10^6$; $A=0.159438(2)$. Koeffijenti 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 $p_0=-2.66(7)$, $p_1=2.63(3)$, $p_2=2.55(3)$.



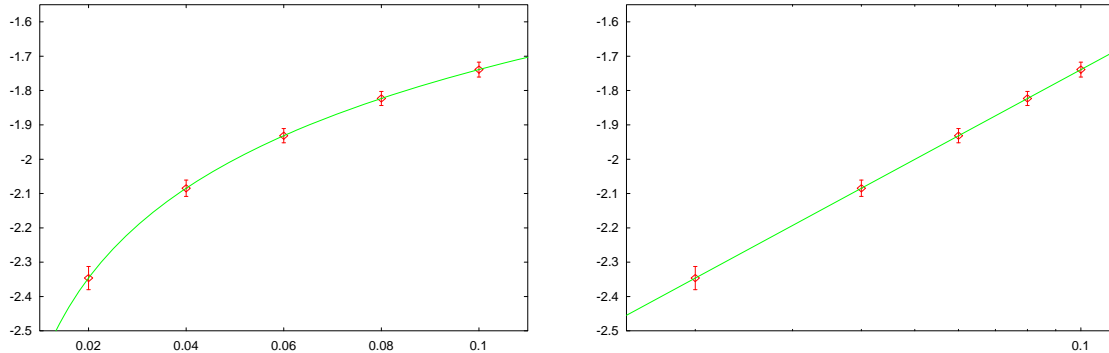
Slika 10: Zavisnost $\delta(t)$ fitovana na $F_3'(t)$ za parametre $g=100$, $T=1$, $r=5\%$; $N_{MC}=9.6 \cdot 10^7$; $A=0.064738(2)$. Koeffijenti polinoma iznose $p_0=-2.7(1)$, $p_1=2.32(5)$, $p_2=2.15(5)$.

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 $p_0=-2.7(1)$, $p_1=2.32(5)$, $p_2=2.15(5)$.

Primetili 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 .



Slika 11: Tipična zavisnost koeficijenata 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, on both graphs is also shown fitted linear function in $\log r$, $C + D \log r$, where $C=-0.87003(1)$, $D=0.377332(4)$. Parameters of the theory are $g=0.1$, $T=10$.

	$g=0.1, T=1$	$g=1, T=1$	$g=10, T=1$	$g=100, T=1$	$g=0.1, T=10$	$g=1, T=10$
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)

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

Table 1: Log-dependence parameters of polynomial coefficients for different sets of theory parameters.

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 δ oko klasičnog rešenja $q_{cl}(t)$ u kojoj su sadržane trajektorije čiji ukupan doprinos daje rezultat sa relativnom greškom r .

U budućem 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.

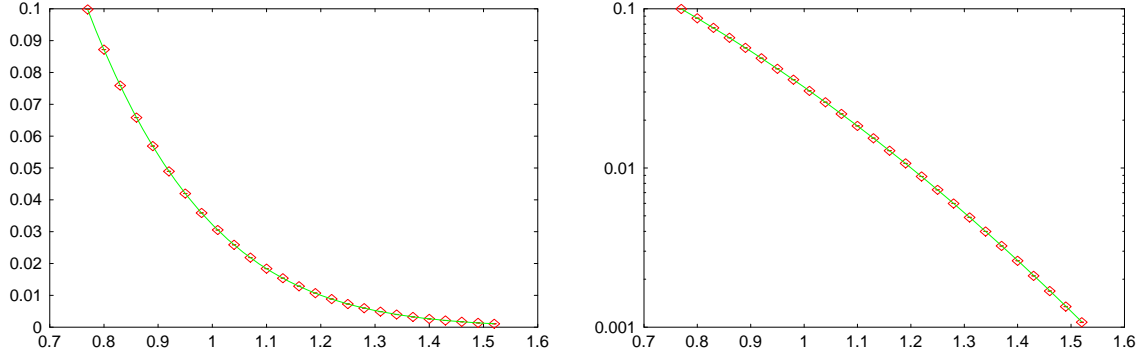
Iz posmatranih zavisnosti širine oblasti δ od trenutka evolucije t očigledno je da oblast ima najveću širinu na polovini evolucije, odnosno δ ima najveću vrednost za trenutak $t=T/2$. Da bismo odredili kako maksimalna širina oblasti, za fiksirano vreme evolucije T i fiksirano relativno odstupanje r zavisi od vrednosti anharmoniciteta g prvo je potrebno da za 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 [7]. Simulacija je izvršavana za 50 ekvidistantnih vrednosti anharmoniciteta 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 [11].

U prethodnom delu rada već smo se bavili određivanjem zavisnosti $r(\delta)$ i opisali je funkcijom $r(\delta) = r_0 e^{-r\delta}$, 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 $r(\delta)$:

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

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.



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 $N_{MC}=9.2 \cdot 10^8$.

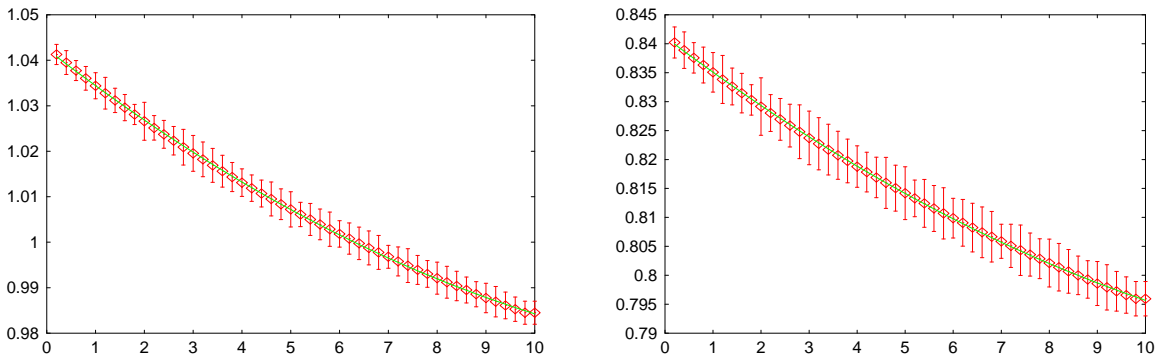
Figure 12: Typical δ -dependence of relative error r at $t=T/2$ fitted to the chosen function $r(\delta)$ (left), also shown on log-normal scale (right). Coefficients of the function are $a=0.179(6)$, $b=1.10(2)$, $c=2.151(6)$, while parameters of the theory are $g=4.0$, $T=1$, $t=0.5$, $N_{MC}=9.6 \cdot 10^7$.

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)

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



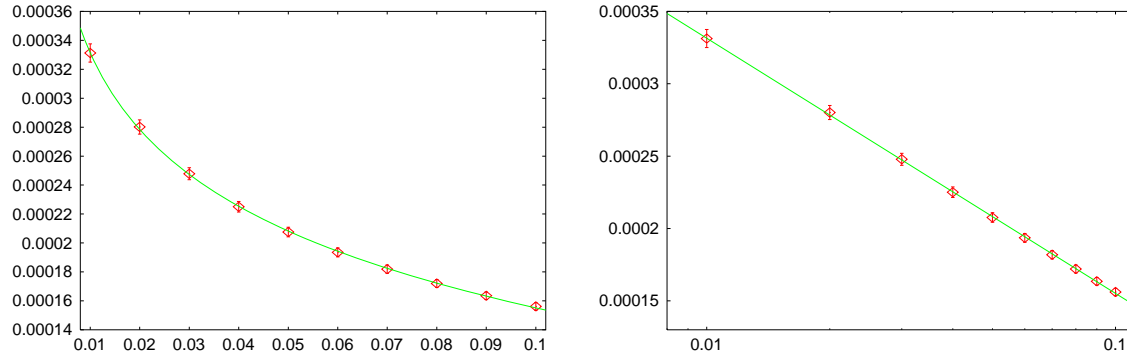
Slika 13: Tipična kvadratna zavisnost širine oblasti δ od vrednosti anharmoniciteta g . (Levo) Fitovani koeficijenti iznose $m_0=1.0425(1)$, $m_1=-0.00830(5)$, $m_2=0.000248(5)$, vreme evolucije je $T=1$, a relativno odstupanje rezultata $r=3\%$. (Desno) Fitovani koeficijenti iznose $m_0=0.84118(6)$,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

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

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

U tabeli 2 nalaze se vrednosti koeficijenata u_i i v_i .



Slika 14: Tipična zavisnost koeficijenata 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 $\delta(g)$. r -dependence of m_2 (left) is also shown on log-normal scale (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.

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)

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

Table 2: Parameters u_i and v_i , defining the r -dependence of coefficients m_0, m_1, m_2 for evolution time $T=1$.

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 [7], 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 $R(r)$.

Dodatak: Izmjena programskog koda

Za potrebe rada, unete su određene izmene u osnovni program za računanje amplitude verovatnoće prelaza sistema iz rada [7]. 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 inetegracija, promenljiva δ za širinu oblasti δ , kao i promenljive $\max\delta$ i $\min\delta$ 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;
}
```

Literatura

- [1] Balaž A., Belić A., and Bogojević A., *Facta Universitatis* **1** (1998) 113.
- [2] Balaž A., Belić A., and Bogojević A., in *Proceedings of the 11th Yugoslav Symposium on Nuclear and Particle Physics* (Studnica, Yugoslavia, 25. – 28. September 1998), SFIN **A2** (1998) 297.
- [3] Balaž A., Belić A., and Bogojević A., *Phys. Low-Dim. Struct.* **5/6** (1999) 1.
- [4] Balaž A., Belić A., and Bogojević A., *Phys. Low-Dim. Struct.* **9/10** (1999) 149.
- [5] Balaž A., Belić A., and Bogojević A., u *Zborniku radova X kongresa fizičara Jugoslavije* (Vrnjačka Banja, Jugoslavija, 27. - 29. mart 2000.), knjiga 2 (2000) 843.
- [6] Balaž A., Belić A., and Bogojević A., *Phys. Low-Dim. Struct.* **1/2** (2000) 65.
- [7] Balaž A. 2004. *Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantnoj mehanici: analitičke i numeričke osobine, magistarski rad*. Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu
- [8] Feynman R. P. and Hibbs A. R. 1965. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. New York: McGraw-Hill
- [9] Herbut F. 1983. *Kvantna mehanika za istraživače*. Beograd: Prirodno matematički fakultet
- [10] <http://www.gnuplot.info/>
- [11] <http://scl.phy.bg.ac.yu/>
- [12] Huang K. 1987. *Statistical Mechanics, 2nd edition*. New York: Wiley