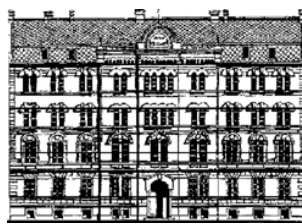




Univerzitet
u Beogradu



Fizički
fakultet

Antun Balaž

O ubrzavanju konvergencije
funkcionalnih integrala

doktorski rad

Beograd, 2008. godine

Ova doktorska disertacija je urađena pod rukovodstvom dr Aleksandra Bogojevića, višeg naučnog saradnika Instituta za fiziku, i predstavlja rezultat duge i uspešne saradnje. Od mentora koji ima neiscrpan izvor ideja i optimizma naučio sam mnogo više nego što je prikazano u ovom radu. Pored kvantne teorije polja, kvantne mehanike i posebno funkcionalnog formalizma, u zajedničkom radu sam od njega naučio šta je to naučni metod, kako odabrati istraživački problem i kako se nakon toga snaći među svim mogućim pravcima istraživanja.

Numerički deo ove teze je urađen pod rukovodstvom dr Aleksandra Belića, višeg naučnog saradnika Instituta za fiziku. Od njega sam naučio osnove numeričkog pristupa u fizici i sve bitne elemente koji izdvajaju scientific computing od teorijskog i eksperimentalnog pristupa nauci. Obojici još jednom hvala.

U istraživanjima prikazanim u ovoj tezi učestvovalo je na značajan način nekoliko mlađih kolega iz Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku. Jelena Grujić i Danica Stojiljković su primenile izvedena efektivna dejstva na računanje očekivanih vrednosti i energetskih spektara jednočestičnih teorija. Ivana Vidanović se pridružila zajedničkom istraživačkom radu u ključnom trenutku uopštenja metoda na višečestične sisteme i značajno doprinela većem broju dobijenih rezultata, kao i razvoju numeričkih simulacija i Mathematica programa. Svima bih želeo da se zahvalim na ovako uspešnoj saradnji, novim i svežim idejama i velikom podsticaju i ohrabrenju, ne samo u istraživačkom radu. Zahvaljujem se i dr Axelu Pelsteru sa Univerziteta Duisburg-Essen u Nemačkoj, koji je kao novi saradnik značajno obogatio naš istraživački program.

Želeo bih da se zahvalim Dušku Latasu na pomoći oko programskog paketa MathTensor. Zahvaljujem se i svim članovima Laboratorije za primenu računara u nauci za podsticajnu radnu atmosferu. Zahvalnost dugujem i Istraživačkoj stanici Petnica, u kojoj sam započeo svoje početničke korake u nauci. U Petnici sam upoznao mnoge današnje prijatelje, prvi put ušao u pravu naučnu biblioteku i napisao svoju prvu numeričku simulaciju. U Petnici sam naučio da cenim i druge nauke, sem fizike.

Posebno se zahvaljujem svojoj porodici na bezrezervnoj podršci i razumevanju koje sam uživao čak i kada to nije bilo opravdano.

Na kraju, želeo bih da se zahvalim i institucijama čija je finansijska i materijalna podrška omogućila moj istraživački rad i nastanak ove teze, Institutu za fiziku i Ministarstvu nauke Republike Srbije (projekat osnovnih istraživanja OI141035). Finansijsku podršku dugujem i EU FP6 projektu CX-CMCS Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku.

Beograd, septembar 2008. godine

Antun Balaž

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Funkcionalni formalizam u kvantnoj teoriji	5
2.1	Definicija funkcionalnog integrala	6
2.2	Funkcionalni integral za slobodnu česticu	11
2.3	Funkcionalni integral za harmonijski oscilator	12
3	Računanje funkcionalnih integrala i efektivna dejstva	15
3.1	Aproksimativni metodi u funkcionalnom formalizmu	15
3.2	Ojlerova sumaciona formula za obične integrale	18
3.3	Efektivno dejstvo i efektivni potencijal	20
3.4	Pregled ranijih rezultata za efektivna dejstva	22
4	Metod polovljenja za efektivna dejstva u $d = 1$	27
4.1	Integralna jednačina za idealni efektivni potencijal	27
4.2	Ojlerova sumaciona formula za funkcionalne integrale	29
4.3	Očekivane vrednosti i estimatori u $d = 1$	32
5	Efektivna dejstva i kratkovremeni propagator	35
5.1	Idealno dejstvo kao očekivana vrednost	35
5.2	Asimptotski razvoj idealnog dejstva	37
6	Efektivna dejstva i Šredingerova jednačina	41
6.1	Rekurzivni pristup za jednočestične sisteme u $d = 1$	41
6.2	Efektivni potencijal za kratkovremene dijagonalne amplitude	44
6.3	Rekurzivni pristup za višečestične sisteme	45
6.4	Dijagramatski prikaz efektivnih dejstava	47
6.5	Rekurzivne relacije za estimatore očekivanih vrednosti	50
7	Numeričke primene efektivnih dejstava	53
7.1	Amplitude prelaza	54
7.1.1	Amplitude za jednočestične teorije u $d = 1$	54
7.1.2	Amplitude za višečestične teorije	58
7.2	Energetski spektri	60
7.2.1	Spektri jednočestičnih teorija u $d = 1$	62
7.2.2	Spektri višečestičnih teorija	67
7.3	Termalne očekivane vrednosti	70
7.3.1	Očekivane vrednosti za jednočestične teorije u $d = 1$	70
7.3.2	Očekivane vrednosti za višečestične teorije	71

8 Zaključak	73
A Efektivna dejstva i estimatori	75
A.1 Efektivna dejstva za jednočestične teorije u $d = 1$	75
A.2 Virijalni estimatori za jednočestične teorije u $d = 1$	77
A.3 Efektivna dejstva za višečestične teorije	79
A.3.1 Efektivna dejstva u topološkoj notaciji	80
A.4 Virijalni estimatori za višečestične teorije	81
B Programski kod razvijen za paket Mathematica	85
B.1 Jednočestične teorije u $d = 1$	85
B.2 Višečestične teorije	91
C Elementarni uvod u Monte Karlo metod	95
D Programski kod SPEEDUP	101
Literatura	125

1

Uvod

Kanonska formulacija kvantne mehanike i kvantne teorije polja počiva na operatorskom formalizmu, koji je i stvoren prilikom zasnivanja ovih teorija u prvoj polovini XX veka. Mali broj analitički rešivih problema podstakao je fizičare na razvijanje približnih metoda za računanje relevantnih fizičkih veličina. Tako je nastao semiklasičan razvoj, teorija perturbacija, različite varijacione metode itd. Pored toga, razvijene su i različite, ali međusobno ekvivalentne formulacije ovih teorija, u želji da se bolje sagledaju problemi koji se ne mogu egzaktno rešiti. Ako je neka teorija egzaktno rešiva u jednoj formulaciji, onda je ona rešiva i u drugoj, ekvivalentnoj formulaciji. Naravno, rešavanje pojedinih problema je često mnogo lakše u jednom formalizmu nego u drugom. Međutim, nas uvek interesuju složeniji realni fizički modeli, koji se ne mogu egzaktno rešiti ni u jednom formalizmu. Da bi ovakve modele mogli uspešno da proučavamo nekom aproksimativnom metodom, potrebno je da oni predstavljaju malu deformaciju nekog egzaktno rešivog modela. Ovde dolazi do izražaja potreba za različitim formulacijama kvantne teorije. Različitim formulacijama odgovaraju i donekle različite prirodne deformacije rešivih modela.

Funkcionalni formalizam, koji ćemo koristiti u ovom radu, daje idealan okvir za proučavanje simetrija kvantnih teorija. Na primer, kod gejdž teorija¹ ovaj formalizam omogućava da na elegantan način zadržimo relativističku kovarijantnost teorije, uz istovremeno fiksiranje odabranog kalibracionog uslova. Pored toga, funkcionalni formalizam je posebno pogodan za proučavanje spontanog narušenja simetrije i faznih prelaza, a nudi nam i određenu vizuelizaciju kvantnih procesa, što omogućava da se razvije nova intuicija, koja može da pomogne u sagledavanju i rešavanju problema novom metodom. Funkcionalni formalizam se pokazao kao posebno koristan opšti okvir pri formulaciji novih teorija od kojih je svaka zahtevala izvesno uopštenje uobičajene procedure kvantovanja. Najbolji primeri za to su teorija struna i kvantna teorija polja na nekomutativnim prostorima.

Razvoj funkcionalnog formalizma započeo je Pol Dirak [1] 1933. godine², primećujući da dejstvo (odnosno lagranžijan), koje u klasičnoj fizici ima ključnu ulogu i određuje evoluciju sistema, u dotadašnjoj kvantnoj fizici nije imalo praktično nikakvu ulogu. Razmatrajući ovo pitanje, Dirak je zaključio [3] da je moguće uključiti dejstvo u kvantnu fiziku i da kvantno–mehaničkom propagatoru, u određenom smislu, odgovara izraz $e^{iS/\hbar}$, gde je S dejstvo na klasičnoj trajektoriji. Ričard Fajnman je nastavio razvoj ove ideje i 1948. godine [4] je objavio novu formulaciju kvantne mehanike (treću po redu, nakon Hajzenbergove i Šredingerove), čiju suštinu je moguće veoma lako objasniti. Za razliku od klasične

¹Gejdž ili lokalne simetrije su dinamičke simetrije koje zavise od prostorno–vremenskih koordinata.

²Ovde treba skrenuti pažnju i na pionirski rad Norberta Vinera [2] iz 1923. godine u kome se uvode euklidski funkcionalni integrali za slučaj Braunovog kretanja.

fizike u kojoj je evolucija fizičkog sistema deterministička i određena je klasičnim Ojler–Lagranževim jednačinama kretanja, u kvantnoj mehanici i kvantnoj teoriji polja determinizam se odnosi samo na evoluciju talasne funkcije (odnosno operatora, u zavisnosti od slike) između merenja. Vrednosti fizičkih veličina koje merimo u budućnosti nisu unapred određene, a teorija nam daje mogućnost da izračunamo verovatnoću da neka fizička veličina pri merenju ima unapred zadatu vrednost. U funkcionalnom formalizmu se amplituda verovatnoće za neki proces računa tako što se uzmu u obzir doprinosi svih mogućih evolucija sistema od zadatog početnog do zadatog krajnjeg stanja (a ne, kao kod Diraka, samo doprinos klasične evolucije), a težina sa kojom se uračunava neka evolucija je $e^{iS/\hbar}$, gde je S dejstvo teorije koje odgovara toj evoluciji. Kao i Dirak, i Fajnman je smatrao da je Lagranžev pristup u izvesnoj meri fundamentalniji od Hamiltonovog, pa možemo reći da su na ovaj način oni započeli program definisanja kvantne teorije direktno iz Lagranževog formalizma³.

Interesantno je napomenuti da se u početku smatralo da je funkcionalni formalizam samo zgodan heuristički alat koji sadrži važne aspekte kvantne teorije, ali ne sve. Iako je ovaj formalizam pogodan za dobijanje intuitivne slike kvantnih procesa, smatralo se da svi rezultati dobijeni u funkcionalnom formalizmu moraju na kraju da se provere u operatorskom. Razlog za ove sumnje je činjenica da u početku nije bilo jasno gde se u novom formalizmu nalazi zapis nekomutativnosti koji je inherentan svakoj kvantnoj teoriji. Danas je situacija potpuno drugačija i često se u istraživanjima, pa i u udžbenicima, zapravo polazi od funkcionalnog integrala⁴. Kao što ćemo videti kada budemo definisali funkcionalni integral u drugom poglavlju, nekomutativnost je zaista prisutna u ovom formalizmu, ali se javlja na veoma suptilan način. Razlog zbog koga je za ovo trebalo toliko vremena je što se naše znanje o funkcionalnom integralu može uporediti sa znanjem o običnim integralima pre Rimana. Pre uvođenja koncepta Rimanovih integrala bilo je moguće rešiti samo neke partikularne integrale koristeći specijalne, pogodno izabrane diskretizacije pri računanju Darbuovih suma. Definisanje Rimanovih integrala, koji imaju ključnu osobinu da njihova vrednost ne zavisi od diskretizacije, omogućilo je razvoj praktičnih metoda za njihovo rešavanje. Funkcionalni integrali nisu Rimanovi, to jest njihova vrednost zavisi od diskretizacije⁵. Upravo ta osetljivost na vrstu Darbuove sume predstavlja zapis nekomutativnosti operatorskog formalizma u funkcionalnom formalizmu. Kao što ćemo videti pri

³Striktno govoreći, Dirak–Fajnmanov program nije do kraja završen, pošto je za definisanje mere u funkcionalnom integralu neophodno korišćenje Hamiltonovog formalizma u međukoracima. Ovo će biti detaljnije pokazano u sledećem poglavlju, pri definisanju funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru.

⁴Interesantno je uporediti tri osnovne formulacije kvantne teorije sa stanovišta korisnosti. Originalna, kopenhagenska formulacija Hajzenberga i Bora isključuje bilo kakvo razmatranje kvantnog sistema između dva merenja. Ova formulacija je minimalistička i omogućila je čvrsto zasnivanje kvantne mehanike time što ju je potpuno odvojila od klasične. Ipak, ova formulacija se iz istog razloga pokazala i kao najmanje plodna i korisna (sem za filozofiju, gde je podstakla razvoj pozitivizma). Sledeća, Šredingerova formulacija je originalno pretendovala na davanje potpunog opisa ponašanja kvantnog sistema, čak i u toku merenja. Mada se ispostavilo da ovo ne stoji i da je Šredingerova formulacija ekvivalentna sa Hajzenbergovom matricnom mehanikom, ona ipak ima dve velike prednosti u odnosu na nju. Prvo, daleko je pogodnija za praktičnu primenu. Drugo, opisujući kvantne fenomene formalizmom koji je sličan klasičnom (parcijalne diferencijalne jednačine), pružila nam je izvesne intuitivne slike o kvantnim procesima. Iz oba ova razloga ovo je daleko najkorisnija formulacija za one koji se bave atomskom ili molekularnom fizikom, odnosno hemijom. Treća, Fajnmanova formulacija ima odlučujuću prednost u numeričkim primenama zahvaljujući Monte Karlo metodu. Međutim, njena prednost je daleko veća u istraživačkom smislu – u izgradnji novih modela. Zbog toga je ovo i najkorisnija formulacija kvantne teorije za većinu modernih fizičara.

⁵I pored značajnih napora u matematici (teorija uopštenih funkcija, teorija mere, teorija integracije), do danas nije došlo do značajnog prodora u njihovoj aksiomatizaciji.

definisaju funkcionalnog integrala, različite Darbuove sume koje možemo da formiramo odgovaraju različitim uređenjima operatora pri prelasku sa klasične na kvantnu teoriju.

Pored jasne fizičke ideje koja stoji iza ovog formalizma, njegova prednost leži i u tome što se različite aproksimativne metode, ranije izvedene u operatorskom formalizmu, ovde izvode lakše i sa očiglednom fizičkom interpretacijom. Jedna od najvažnijih osobina funkcionalnog formalizma je što je omogućio primenu moćnih numeričkih metoda, kao što je Monte Karlo, za rešavanje relevantnih fizičkih problema. Razlog za to je idealna korespondencija matematičke postavke problema koje želimo da rešimo u ovom formalizmu sa tipičnim problemima za čije rešavanje su upravo i razvijeni pomenuti numerički metodi.

Važno je naglasiti i paralelu između funkcionalnog formalizma kvantne teorije i statističke mehanike, u kojoj se centralni objekt, particiona funkcija, računa na sličan način kao amplituda verovatnoće u kvantnoj mehanici, odnosno generišući funkcional u kvantnoj teoriji polja. Postojanje ove paralele⁶ omogućava da se mnogi metodi teorije polja uspešno primenjuju u statističkoj mehanici i teoriji kondenzovanog stanja materije, kao i obratno. Pri tome su se intuicija i iskustvo stečeno u jednoj oblasti često pokazivali korisnim u drugoj oblasti. Navedimo nekoliko najznačajnijih primera. Fajnmanovi dijagrami, koji predstavljaju jedan od najkorisnijih aproksimativnih metoda (perturbativni razvoj) kvantne teorije polja, sa velikim uspehom se primenjuju i u teoriji kondenzovanog stanja. Sa druge strane, renormalizaciona grupa, koja je originalno razvijena u okviru teorije kondenzovanog stanja, široko se primenjuje u teoriji polja. Treći važan primer je teorija faznih prelaza.

Funkcionalni formalizam, koji je kao i mnoge druge fizičke teorije, razvijen bez odgovarajuće matematičke pozadine, ujedno je inicirao razvoj i dao značaj novim oblastima matematike, kao što su diferencijalna geometrija, algebarska topologija i teorija homologija i homotopija. Moderni matematičari sve više liče na fizičare: oni koriste i razvijaju ovaj novi formalizam, a ne fokusiraju sve napore na njegovu aksiomatizaciju i verifikaciju egzistencije.

Imajući u vidu sve ovo, ideja vodilja ovog rada je da se računanje funkcionalnih integrala pojednostavi i numerički značajno ubrza korišćenjem diskretizovanih efektivnih dejstava koja su uvedena u trećem poglavlju. Novi pristup predstavlja nastavak istraživanja predstavljenih u radu [5] i daje njihovo sistematsko uopštenje, kao i proširenje na važne fizičke modele. Prikazana istraživanja su bazirana na dve ključne ideje. Prva ideja je postojanje idealnog diskretizovanog efektivnog dejstva, koje je uvedeno u radu [6], dok je druga ideja proučavanje veze između diskretizacija različitih gustina [7, 8]. Povezivanje ovih ideja je omogućilo pristup koji daje nekoliko metoda za analitičko izvođenje idealnog diskretizovanog dejstva [9, 10, 11]. Svaki od ovih metoda predstavlja novu stepenicu u heurističkom smislu i pruža novi uvid u osobine funkcionalnih integrala. U ovom radu je prvo prikazan metod polovljenja, koji omogućava sistematske popravke efektivnog dejstva za jednočestične jednodimenzionalne teorije, a nakon toga metod baziran na direktnom računanju kratkovremenog propagatora u funkcionalnom formalizmu, koji je omogućio proširenje prethodnog metoda na višestestične teorije u proizvoljnom broju dimenzija. Treći metod, baziran na rekurzivnim relacijama izvedenim iz Šredingerove jednačine, daje daleko efikasniji način izvođenja efektivnih dejstava za sve razmatrane teorije, kako jednočestične, tako i višestestične. Bitna osobina razvijenog pristupa je da je primenljiv i izvan semi-klasičnog sektora, u kojem drugi pristupi obično daju loše rezultate. Pored očigledne prednosti u numeričkim primenama, diskretizovana efektivna dejstva su od velikog značaja i u analitičkim razmatranjima. Pomenimo samo da se na ovaj način dobija uopštenje Ojlerove

⁶Razlog za postojanje paralele je što ove teorije počivaju na ključnoj linearnoj kombinatornoj strukturi. U statističkoj mehanici je reč o aditivnosti verovatnoća, dok je u kvantnoj teoriji reč o aditivnosti amplituda verovatnoće.

sumacione formule za obične integrale na slučaj funkcionalnih integrala, kao što ćemo videti u četvrtom poglavlju. Pored toga, izvedena efektivna dejstva omogućavaju primenu nekih novih analitičkih aproksimativnih šema za kratko vreme propagacije fizičkih veličina.

Treba napomenuti da je ovaj pristup mogao da bude razvijen i značajno ranije. Analitički preduslovi za ovo postoje od samog zasnivanja funkcionalnog formalizma, dok su numerički preduslovi ispunjeni u poslednjih petnaestak godina. Ispunjenost numeričkih preduslova je neophodna zbog mogućnosti verifikacije i poređenja dobijenih rezultata sa drugim, već poznatim i proučenim metodama, kao i egzaktnim rezultatima. Pored razvijenih numeričkih metoda, u numeričke preduslove spada i razvijen hardver koji omogućava primenu numeričkih metoda u razumnom vremenu. Mislimo da osnovni razlog što je tek sada razvijen ovaj novi metod leži u dugogodišnjem fokusiranju većine istraživača na primenu i generalizaciju funkcionalnog formalizma i na stvaranje novih modela, a manje na zasnivanje novih opštih aproksimativnih metoda.

Ovaj rad ima sledeću strukturu: u narednom, drugom poglavlju je definisan funkcionalni integral u kvantnoj mehanici u faznom i u konfiguracionom prostoru, a zatim je eksplicitno izračunata opšta amplituda prelaza za slobodnu česticu i harmonisjki oscilator. Nakon toga su u trećem poglavlju pobrojani najvažniji analitički aproksimativni metodi u funkcionalnom formalizmu i objašnjeno je kako se numerički izračunavaju funkcionalni integrali. U ovom poglavlju je takođe ukratko izvedena Ojlerova sumaciona formula za obične integrale, kao inspiracija za uvođene diskretizovanih efektivnih dejstava, a predstavljeni su i poznati rezultati ranijih istraživanja. U četvrtom poglavlju je uveden metod polovljenja i izvedena integralna jednačina za efektivni potencijal za jednočestične teorije u jednoj prostornoj dimenziji. Nakon toga je pokazano kako se ova jednačina rešava i izvedeni su popravljani estimatori očekivanih vrednosti energije koji daju ubrzanu numeričku konvergenciju kada se koriste paralelno sa izvedenim diskretizovanim efektivnim dejstvima. U petom poglavlju je prethodno uvedeni metod uopšten na slučaj opšte nerelativističke višečestične teorije i izvedena su odgovarajuća efektivna dejstva razvojem u red po kratkom vremenu propagacije. U šestom poglavlju je predstavljen novi pristup, baziran na izvođenju rekurzivnih jednačina za efektivno dejstvo korišćenjem Šredingerove jednačine za opšte amplitude. Ovaj metod je daleko najefikasniji za izvođenje efektivnih dejstava, kako za jednočestične tako i za višečestične teorije. Izvedene rekurzivne relacije smo prikazali i u obliku Fajnmanovih dijagrama, a diskretizovana efektivna dejstva se mogu kompaktnije zapisati na ovaj način, pomoću topološke notacije uvedene u ovom poglavlju. Primenom ovog pristupa izvedeni su i estimatori za očekivane vrednosti energije za višečestične sisteme. U sedmom poglavlju su prikazani numerički rezultati koji verifikuju sve izvedene analitičke rezultate iz prethodnih poglavlja na nekoliko relevantnih fizičkih modela. U osmom poglavlju su ukratko sumirani svi dobijeni rezultati, a u dodacima su detaljnije dati svi važni rezultati: dodatak A sadrži izvedena diskretizovana efektivna dejstva do visokog nivoa, kao i efektivne virijalne estimatore; dodatak B daje programski kod za paket Mathematica [12] koji smo razvili i koristili za računanje efektivnih dejstava; dodatak C predstavlja elementaran uvod u Monte Karlo metod; a dodatak D daje detaljan pregled programskog koda SPEEDUP [13] koji smo razvili i koristili za sve numeričke simulacije čiji su rezultati predstavljeni u sedmom poglavlju.

2

Funkcionalni formalizam u kvantnoj teoriji

U klasičnoj mehanici, kretanje čestice u jednoj prostornoj dimenziji određeno je njenim koordinatama q i p u faznom prostoru, dok je dinamika definisana pomoću hamiltonijana, koji se u većini slučajeva od fizičkog interesa može predstaviti u obliku $H(p, q) = f_{ab}p^a q^b$, gde je sa p označen generalisani impuls konjugovan koordinati q , a po ponovljenim indeksima se podrazumeva sumiranje. Prelazak na kvantnu mehaniku u operatorskom formalizmu definisan je korespondencijom $q \rightarrow \hat{q}$, $p \rightarrow \hat{p}$, gde su sada \hat{q} i \hat{p} hermitski operatori u odgovarajućem Hilbertovom prostoru, pri čemu važi $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Jasno je da prelazak sa komutirajućih na nekomutirajuće varijable nije jednoznačno definisan na ovaj način. Na primer, klasičnom izrazu qp možemo da pridružimo operatore $\hat{q}\hat{p}$ i $\hat{p}\hat{q}$ koji su međusobno različiti, a gornja definicija ne daje preciznu preskripciju. Nejednoznačnost se ne otklanja ni zahtevom da preskripcija pridružuje hermitske operatore klasičnim funkcijama (opservablama). To znači da i hamiltonijanu možemo da pridružimo različite operatore: u levoj preskripciji imamo operator $\hat{H}_L = f_{ab}\hat{p}^a\hat{q}^b$, a u desnoj $\hat{H}_D = f_{ab}\hat{q}^b\hat{p}^a$. Primitimo ovde da operatori \hat{H}_L i \hat{H}_D nisu hermitski, ali da je reč o posebno jednostavnim uređenjima koja ćemo koristiti kasnije da pokažemo neke osobine funkcionalnog integrala. U praksi se najčešće koristi Vajlova [14, 15] simetrična preskripcija $\hat{H}_W = f_{ab}(\hat{p}^a\hat{q}^b)_W$, u kojoj se svaki sabirak u klasičnom hamiltonijanu totalno simetrizuje po svim koordinatama i impulsima. Formalna definicija Vajlove preskripcije data je implicitno pomoću izraza

$$(A\hat{p} + B\hat{q})^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} A^k B^{n-k} (\hat{p}^k \hat{q}^{n-k})_W.$$

Na primer, u Vajlovoj preskripciji dobijamo

$$\begin{aligned} pq &\rightarrow (\hat{p}\hat{q})_W = \frac{1}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}), \\ p^2q &\rightarrow (\hat{p}^2\hat{q})_W = \frac{1}{3}(\hat{p}^2\hat{q} + \hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{q}\hat{p}^2) \text{ itd.} \end{aligned}$$

Očigledno je da ovo uređenje uvek daje hermitske operatore⁷.

Ako sa $|q, t\rangle$ označimo stanje kvantnog sistema u trenutku t , a sa $A(\alpha, t_\alpha; \beta, t_\beta)$ skalarni proizvod (amplitudu verovatnoće) $\langle \beta, t_\beta | \alpha, t_\alpha \rangle$, tada je verovatnoća za prelaz iz stanja

⁷Iscrpna diskusija o Vajlovoj i drugim mogućim preskripcijama pri prelasku sa klasičnog na kvantni hamiltonijan može se naći u [16, 17].

$|\alpha, t_\alpha\rangle$ u trenutku t_α u stanje $|\beta, t_\beta\rangle$ u trenutku⁸ t_β data sa $|A(\alpha, t_\alpha; \beta, t_\beta)|^2$. Ukoliko za dati hamiltonijan možemo da izračunamo sve ovakve amplitude, odnosno odgovarajuće verovatnoće prelaza, onda smo rešili teoriju u potpunosti [18], odnosno sve opservabilne veličine možemo da izrazimo pomoću odgovarajućih amplituda verovatnoće. Zbog toga ćemo ovu veličinu tretirati kao osnovni objekat, a druge razmatrane veličine ćemo izvesti (odnosno definisati) iz amplitude. Dakle, početna tačka u uvođenju funkcionalnog formalizma je računanje amplitude A za proizvoljno početno i krajnje stanje kvantnog sistema. U Šredingerovoj slici amplitudu verovatnoće prelaza možemo da napišemo u obliku matričnog elementa

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

gde je $\hat{U}(t_\beta - t_\alpha, t_\alpha)$ evolucionni operator, koji opisuje evoluciju sistema od trenutka t_α do trenutka t_β . Argumenti evolucionog operatora su vreme trajanja evolucije $t_\beta - t_\alpha$ i početak evolucije t_α . Ukoliko se ograničimo na konzervativne sisteme (kada konstante f_{ab} iz definicije hamiltonijana ne zavise od vremena), koji su invarijantni na vremenske translacije, evolucionni operator zavisi samo od razlike $T = t_\beta - t_\alpha$, odnosno $\hat{U} = \hat{U}(T)$, a isto važi i za amplitudu, koja sada ima oblik

$$A = A(\alpha, \beta, T).$$

Za takve sisteme je evolucionni operator dat sa

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

U operatorskom formalizmu problem računanja amplitude A svodi se na eksponenciranje hamiltonijana i nalaženje evolucionog operatora, a nakon toga na računanje odgovarajućih matričnih elemenata. Mi ćemo ovde krenuti nešto drugačijim putem, uvodeći funkcionalni formalizam u kvantnu mehaniku (pedagoški pristup se može naći u [19, 20]). Najjednostavniji pristup je da razmotrimo vremensku evoluciju od trenutka t_α do trenutka t_β kao uzastopni niz od N evolucija, od kojih svaka traje $\epsilon = T/N$.

2.1 Definicija funkcionalnog integrala

Da bismo izračunali amplitudu A , vremenski interval evolucije sistema T podelićemo na N jednakih delova pomoću $N - 1$ podeonih tačaka $t_n = t_\alpha + n\epsilon$, gde je vremenski korak $\epsilon = T/N$, a $n \in \{1, \dots, N - 1\}$. Zbog konciznosti oznaka uvešćemo konvenciju po kojoj je $t_0 = t_\alpha$, $t_N = t_\beta$, $q_0 = \alpha$ i $q_N = \beta$. Ukoliko sada u definiciju amplitude A umetnemo $N - 1$ razlaganja jedinice u koordinatnoj reprezentaciji, dobićemo:

$$A(\alpha, \beta, T) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q_N | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_1 | \hat{U}(\epsilon) | q_0 \rangle. \quad (2.1)$$

U gornjem izrazu imamo proizvod matričnih elemenata oblika $\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle$, koji se za dovoljno malu vrednost veličine vremenskog koraka ϵ (odnosno za dovoljno veliku vrednost broja koraka N , što uvek možemo da obezbedimo) približno mogu izračunati tako što se evolucionni operator $\hat{U}(\epsilon)$ napiše kao $\hat{U}(\epsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}$, pa je traženi matrični element jednak

⁸Početni i krajnji trenutak propagacije je označen indeksom α odnosno β samo zbog preciznog definisanja, podrazumevajući da ovi indeksi ne predstavljaju promenljive veličine. Ovakva notacija je uobičajena u literaturi.

$\langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H} | q_n \rangle$. Ako smo usvojili levu preskripciju koja daje hamiltonijan \hat{H}_L , tada ćemo ovaj matični element izračunati umetanjem još jednog razlaganja jedinice, ali ovoga puta u impulsnoj reprezentaciji,

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L \approx \langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle.$$

Sada ćemo iskoristiti vrednost skalarnog proizvoda $\langle q | p \rangle = \langle p | q \rangle^* = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p q \right\} / \sqrt{2\pi\hbar}$, kao i činjenicu da je matični element $\langle p | \hat{H}_L | q \rangle = \langle p | f_{ab} \hat{p}^a \hat{q}^b | q \rangle = f_{ab} p^a q^b \langle p | q \rangle = H(p, q) \langle p | q \rangle$ proporcionalan vrednosti klasičnog hamiltonijana za vrednost impulsa p i koordinate q . Kada ovo uzmemo u obzir, dobijamo

$$\begin{aligned} \langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\}}{2\pi\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_n, q_n) \right) \approx \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_n, q_n) \right\}. \end{aligned}$$

Gornje približne jednakosti važe do na linearne članove po vremenskom koraku ϵ . U krajnjem koraku ćemo iskoristiti limes $N \rightarrow \infty$, pa će ove jednakosti postati egzaktno. Primećimo, međutim, da je poslednji oblik posebno koristan za dalji rad, jer će biti potrebno da pomnožimo $N - 1$ ovakvih matičnih elemenata. Dakle, dobili smo

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_n) \right] \right\}, \quad (2.2)$$

gde smo, kao i ranije, sa $H(p_n, q_n)$ označili vrednost klasičnog hamiltonijana za vrednost impulsa $p = p_n$ i koordinate $q = q_n$.

Slično, ukoliko usvojimo desnu preskripciju za prelazak na kvantni hamiltonijan, matični element je dat sa

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_D \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_{n+1}) \right] \right\}. \quad (2.3)$$

Za Vajlovu preskripciju, koju ćemo ubuduće isključivo koristiti (zato ne stavljamo indeks W kod matičnog elementa), dobija se [14, 16, 21]

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H \left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}. \quad (2.4)$$

Izrazi (2.2), (2.3) i (2.4) predstavljaju primere leve, desne i srednje Darbuove sume. Oni dovode do različitih vrednosti za amplitudu A , što pokazuje da funkcionalni integrali nisu Rimanovi. Svaki pojedinačni integral u definiciji funkcionalnog integrala jeste Rimanov, ali limes $N \rightarrow \infty$ daje rezultat koji ne pripada ovom skupu. Iz gornjeg izvođenja se vidi da ovo nije slučajnost, već da je upravo ovo mesto gde se u funkcionalnom formalizmu krije zapis nekomutativnosti.

Kada rezultat (2.4) unesemo u jednačinu (2.1) i pustimo da broj vremenskih koraka N teži beskonačnosti, za amplitudu A dobijamo izraz

$$\begin{aligned} A(\alpha, \beta, T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \frac{dp_1 dq_1}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1} dq_{N-1}}{2\pi\hbar} \cdot \\ &\cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H \left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Gornji izraz predstavlja standardnu definiciju funkcionalnog integrala u faznom prostoru. Uobičajena oznaka za ovaj funkcionalni integral,

$$A(\alpha, \beta, T) = \int [dq dp] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_\alpha}^{t_\beta} (pq - H) dt \right\},$$

podseća nas da u eksponentu izraza (2.5) imamo sumu koja predstavlja diskretizovanu vrednost integrala $\frac{i}{\hbar} \int_{t_\alpha}^{t_\beta} (pq - H) dt = \frac{i}{\hbar} S$, gde je S dejstvo teorije. Funkcionalni integral u konfiguracionom prostoru dobija se nakon dodatne integracije po impulsima. U opštem slučaju integraciju po impulsima nije moguće izvršiti u zatvorenom obliku. U ovom smislu Dirakov i Fajnmanov program definisanja kvantnog formalizma u konfiguracionom prostoru nije u potpunosti doveden do kraja.

Kao što vidimo iz gornje definicije funkcionalnog integrala u faznom prostoru, broj integracija po koordinatama i impulsima je različit: imamo $N - 1$ integracija po koordinatama, a N integracija po impulsima. Posledica ove činjenice je da se očigledno gubi kanonska invarijantnost mere⁹.

U ovom radu ograničićemo se na klasu lagranžijana oblika

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

odnosno hamiltonijana oblika

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(q),$$

a nadalje ćemo koristiti sistem jedinica u kome je masa $m = 1$. Ova klasa sadrži većinu relevantnih fizičkih modela, a ima i dodatnu važnu osobinu da je za nju moguće kompletiranje Dirakovog i Fajnmanovog programa i definisanje funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Naime, za ovu klasu hamiltonijana možemo da izračunamo integrale po impulsima u definiciji (2.5). Ako prepisemo integrale po impulsima iz jednakosti (2.5), vidimo da su to Gausovi integrali,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - \frac{1}{2} p_n^2 - V\left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right) \right]}. \quad (2.6)$$

Tipičan faktor u izrazu (2.6) ima oblik

$$\exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{2\hbar} p_n^2 + \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\},$$

pa primenom standardne procedure za rešavanje Gausovih integrala¹⁰ za rešenje gornjeg integrala dobijamo

$$\exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right) \right\} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\hbar} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon}\right)^2 \right\} =$$

⁹Može se pokazati da mera funkcionalnog integrala nije kanonski invarijantna čak ni pri računanju traga evolucionog operatora $\text{Tr} U = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q|U|q \rangle$, mada funkcionalni integral za ovaj izraz ima jednak broj integracija po impulsima i koordinatama [22].

¹⁰Iz tablične vrednosti za najjednostavniji oblik Gausovog integrala, $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-ax^2\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, može se dobiti i rešenje Gausovog integrala u najopštijem obliku, korišćenjem jednostavne transformacije $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-ax^2 - bx - c\} = \exp\left\{\frac{b^2}{4a} - c\right\} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-a\left(x + \frac{b}{2a}\right)^2\right\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\frac{b^2}{4a} - c\right\}$. Ovde se pretpostavlja da je realni deo parametra a pozitivan, što se u našem slučaju može postići dodavanjem malog negativnog imaginarnog dela vremenskom koraku ϵ .

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}.$$

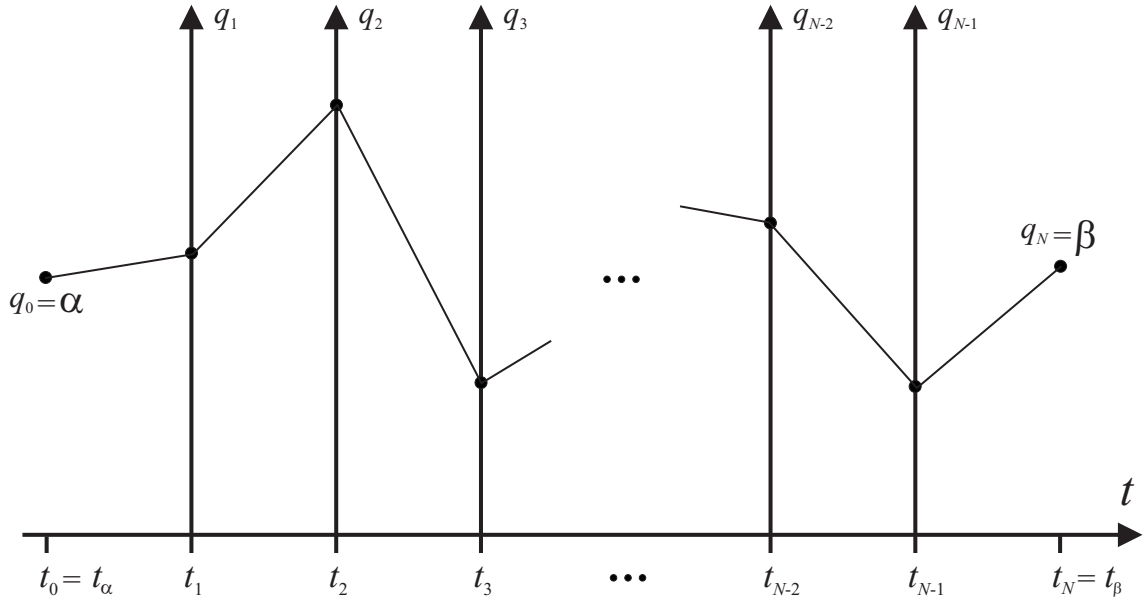
Ako sada u definiciju (2.5) uvrstimo ovaj rezultat, za amplitudu A ćemo dobiti novu formulu, koja sada zavisi samo od integrala po konfiguracionim promenljivim

$$A(\alpha, \beta, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \left(\prod_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}} \right) \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\}. \quad (2.7)$$

Ovo je ujedno i definicija funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru za razmatranu klasu teorija. Uobičajeni formalni zapis ovog integrala je integral,

$$A(\alpha, \beta, T) = \int [d\mu] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\} = \int [d\mu] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[q(t)] \right\}.$$

Gornja definicija nam pruža jasnu fizičku interpretaciju funkcionalnog integrala: vrednost amplitude verovatnoće za prelazak iz početnog stanja $|\alpha\rangle$ u finalno stanje $|\beta\rangle$ dobijamo tako što saberemo doprinose svih mogućih evolucija, odnosno svih mogućih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove $q(t_\alpha) = \alpha$ i $q(t_\beta) = \beta$. Pri tome je doprinos svake trajektorije određen težinskim faktorom $\exp\{\frac{i}{\hbar}S\}$ (i merom μ), gde je S dejstvo koje odgovara posmatranoj trajektoriji. Skup mogućih trajektorija ima neprebrojivo mnogo elemenata, a praktična definicija (2.7) nam daje uputstvo kako da uračunamo njihove doprinose, kako u analitičkom, tako i u numeričkom pristupu. Na slici 2.1 je ilustrovana definicija funkcionalnog integrala.

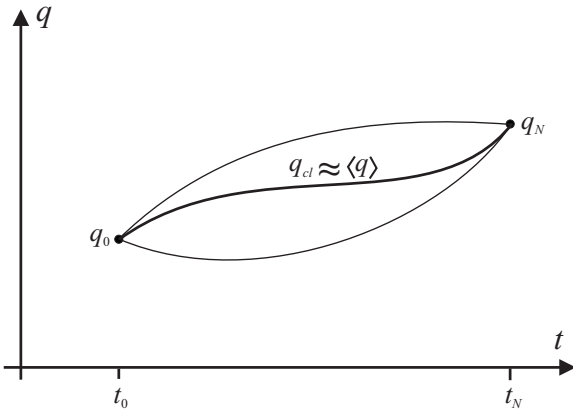


Slika 2.1: Ilustracija definicije (2.7) funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Skup svih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove $q(t_\alpha) = \alpha$ i $q(t_\beta) = \beta$ se aproksimira skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od N duži. Unutrašnje granične tačke ovih duži su promenljive i mogu da se nađu na proizvoljnom mestu na odgovarajućoj pravoj. Ovo odgovara integraciji po promenljivim q_1, \dots, q_{N-1} u definiciji funkcionalnog integrala.

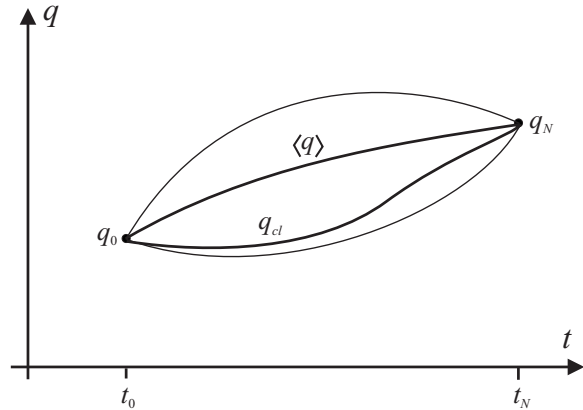
Iz gornje definicije funkcionalnog integrala jasno vidimo kada analitički možemo da izračunamo opštu amplitudu prelaza. Uslov za to je da možemo u kvadraturama da rešimo

integral eksponenta dejstva u opisanoj diskretizaciji i nađemo traženi limes $N \rightarrow \infty$, što nam daje dobro poznate rešive slučajeve slobodne čestice, harmonijskog oscilatora i vodonikovog atoma, kao i nekoliko drugih egzaktno rešivih modela [23]. Naravno, zbog toga su uvedeni različiti aproksimativni metodi za računanje funkcionalnih integrala, kako analitički, tako i numerički.

Kao što smo videli, funkcionalni integral je dat kao suma izraza $\exp\{\frac{i}{\hbar}S\}$. Ova forma funkcionalnog integrala je posebno pogodna za korišćenje semiklasične aproksimacije, to jest asimptotskog razvoja po (malom) parametru \hbar . Kolokvijalni izrazi “ \hbar je malo”, odnosno “semiklasični sektor” će stoga označavati da za odgovarajuće trajektorije važi $\hbar \ll S$. Na sličan način će “ \hbar je veliko”, odnosno “ultrakvantni sektor” zapravo znače da je $\hbar \gg S$. Sam semiklasični razvoj se implementira metodom stacionarne faze¹¹. Uslov stacionarne faze daje $\frac{\delta S}{\delta q} = 0$, što je prosto klasična jednačina kretanja. Semiklasičan razvoj nam govori (u slučaju da je \hbar malo) da dominantan doprinos funkcionalnom integralu daju trajektorije koje su blizu rešenja klasične jednačine kretanja q_{cl} . U ovom slučaju je q_{cl} tačno u sredini relevantne oblasti jer je $q_{cl} \approx \langle q \rangle$. Ova situacija je prikazana na slici 2.2. Semiklasičan razvoj se u kvantnoj teoriji polja još zove i razvoj po petljama, pošto se pokazuje da Fajnmanovi dijagrami sa n -petlji daju doprinose proporcionalne sa \hbar^n [24]. Primetimo da je ovde zaista reč o asimptotskom, a ne Tejlorovom razvoju po \hbar , pošto dijagrami bez petlji mogu dati doprinose oblika $e^{-1/\hbar}$, u kojima je tačka $\hbar = 0$ esencijalni singularitet. Doprinosi ovog tipa su fizički izuzetno važni jer opisuju “najkvantnije” procese, kao što su tuneliranje, odnosno u teoriji polja solitone i narušenje simetrije.



Slika 2.2: Trajektorije koje daju dominantan doprinos funkcionalnom integralu u semiklasičnom sektoru su bliske rešenju klasičnih jednačina kretanja i važi $q_{cl} \approx \langle q \rangle$. Širina relevantne oblasti oko klasičnog rešenja je proporcionalna sa \hbar .



Slika 2.3: Trajektorije koje daju dominantan doprinos funkcionalnom integralu u sektoru između semiklasičnog i ultrakvantnog. Oblast je šira nego pre, pošto je \hbar veće. Istovremeno, q_{cl} je daleko od $\langle q \rangle$, odnosno od sredine ove oblasti.

Povećanjem \hbar dolazi do dva efekta: širi se oblast relevantnih trajektorija, ali i q_{cl} počinje da bitnije odstupa od $\langle q \rangle$, to jest od sredine ove oblasti (slika 2.3). U ovom slučaju je podesno uvesti novu aproksimativnu šemu u kojoj se razvoj ne vrši oko q_{cl} , već oko $\langle q \rangle$. Poboljšana aproksimacija je razmatrana u radovima [25, 26, 27, 28], gde je pokazano da nova šema zaista ima prednosti u odnosu na uobičajeni semiklasičan razvoj. Mana ove nove procedure leži u tome što se razvoj ne vrši više oko poznatog q_{cl} , već oko $\langle q \rangle$, čije je računanje jednako složeno kao i računanje početnog funkcionalnog integrala. Praktična

¹¹U euklidskoj teoriji, kada se pređe na imaginarno vreme pomoću smene $t = i\tau$, metod stacionarne faze postaje metod najbržeg spusta, odnosno u opštem slučaju kompleksnog prostora, metod sedlaste tačke.

implementacija ove poboljšane metode stoga polazi od samousaglašene procedure računanja funkcionalnog integrala i odgovarajuće očekivane vrednosti.

U ultrakvantnom sektoru, \hbar postaje toliko veliko da aproksimacije ovog tipa više nisu primenljive. U tom slučaju sve trajektorije postaju jednako važne pri računanju funkcionalnog integrala.

Još jedna uobičajena aproksimativna metoda je perturbativni (Tejlorov) razvoj po konstanti interakcije g . Veza između perturbativnog i semiklasičnog razvoja je posebno jednostavna za teorije sa jednom konstantom interakcije. Na primer, za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom, dejstvo je dato sa

$$S[q(t); \omega, g] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q^2 - \frac{g}{4!} q^4 \right).$$

Reskaliranjem $q \rightarrow Q/\sqrt{g}$ dobijamo

$$\frac{1}{\hbar} S[q(t); \omega, g] \rightarrow \frac{1}{\hbar g} S[Q(t); \omega, 1].$$

U ovom slučaju je relevantan parametar zapravo $\hbar g$. Sada možemo da pređemo na prirodni sistem jedinica, definisan sa $\hbar = c = 1$ (povratak na uobičajene jedinice se lako može ostvariti korišćenjem dimenzione analize). Vidimo sada da obe aproksimativne šeme (semiklasična i perturbativna) podrazumevaju razvoj po malom g . Semiklasičan razvoj je, međutim, bogatija (a i fizički zasnovanija) aproksimacija jer sadrži i neperturbativne efekte, kao što je tuneliranje.

Primetimo da je i u teorijama sa netrivialnom merom u funkcionalnom integralu $[d\mu] = \mu[q][dq]$ moguće primeniti metod stacionarne faze ukoliko se faktor $\mu[q]$ napiše u obliku $\mu[q] = \exp\{\ln \mu[q]\}$. Na ovaj način se mera može svesti na trivijalan oblik, ali se u eksponentu podintegralne funkcije, pored dejstva, pojavljuje dodatan aditivni član, $S \rightarrow S + \frac{\hbar}{i} \ln \mu[q]$, koji ima eksplisitnu \hbar zavisnost. Metoda stacionarne faze u ovom slučaju ne odgovara asimptotskom razvoju po \hbar , dakle ne predstavlja semiklasičnu aproksimaciju.

2.2 Funkcionalni integral za slobodnu česticu

U ovom odeljku ćemo ilustrovati analitički način računanja funkcionalnih integrala na primeru slobodne čestice. Dobijeni rezultat, pored pedagoškog značaja, ima i veliku praktičnu upotrebnu vrednost: pomoću njega je moguće verifikovati korektnost razvijenog Monte Karlo programskog koda za numeričko računanje funkcionalnih integrala. Verifikacija koda je veoma važan korak u primeni bilo kog numeričkog metoda i neophodno ga je sprovesti pre ozbiljne primene.

Za lagranžijan slobodne čestice mase $m = 1$, $L_0 = \frac{1}{2}\dot{q}^2$, izračunaćemo opštu amplitudu prelaza $A_0(\alpha, \beta, T)$, definisanu sa

$$A_0(\alpha, \beta, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi\hbar i \epsilon)^{N/2}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 \right\}.$$

Ove integrale možemo eksplisitno da rešimo zato što, nakon integracije po q_1 , dobijamo rezultat koji ima isti oblik kao i gornji izraz, pa je integraciju moguće lako nastaviti. Ako pođemo od integrala koji u podintegralnoj funkciji ima samo članove koji zavise od q_1 ,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{(2\pi\hbar i \epsilon)^{2/2}} \exp \left\{ \frac{i[(q_2 - q_1)^2 + (q_1 - q_0)^2]}{2\epsilon\hbar} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \cdot (2\epsilon)}} \exp \left\{ \frac{i(q_2 - q_0)^2}{2\hbar \cdot (2\epsilon)} \right\},$$

i ako dobijeni izraz pomnožimo sa $\exp \left\{ \frac{i}{2\hbar\epsilon} (q_3 - q_2)^2 \right\} / \sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}$ i nakon toga prointegralimo po promenljivoj q_2 , dobićemo rezultat $\exp \left\{ \frac{i}{2\hbar(3\epsilon)} (q_3 - q_0)^2 \right\} / \sqrt{2\pi\hbar i \cdot (3\epsilon)}$. Očigledno, ako sličan postupak ponovimo $N - 2$ puta, dobićemo traženi funkcionalni integral za slobodnu česticu,

$$A_0(\alpha, \beta, T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar iT}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar T} (\beta - \alpha)^2 \right\}. \quad (2.8)$$

2.3 Funkcionalni integral za harmonijski oscilator

Sada ćemo izračunati funkcionalni integral za harmonijski oscilator (HO), čiji je lagranžijan

$$L_{HO} = \frac{1}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q^2. \quad (2.9)$$

Ojler-Lagranževa jednačina kretanja za ovaj sistem ima oblik

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0, \quad (2.10)$$

pa je klasična trajektorija data formulom $q_{cl}(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t$, uz granične uslove $q(t_\alpha) = \alpha$, $q(t_\beta) = \beta$. Uz ranije uvedenu oznaku $T = t_\beta - t_\alpha$, dejstvo lagranžijana (2.9) na klasičnoj trajektoriji može da se predstavi u obliku

$$S_{HO}^{cl}(\alpha, \beta, T, \omega) = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} L_{HO} dt = \frac{\omega}{2 \sin \omega T} [(\alpha^2 + \beta^2) \cos \omega T - 2\alpha\beta]. \quad (2.11)$$

Da bismo izračunali funkcionalni integral za harmonijski oscilator, napisaćemo proizvoljnu trajektoriju $q(t)$ kao

$$q(t) = q_{cl}(t) + \xi(t), \quad (2.12)$$

gde $\xi(t)$ predstavlja odstupanje razmatrane trajektorije od klasične. Granični uslovi su sada $\xi(t_\alpha) = \xi(t_\beta) = 0$. U ovakvim oznakama lagranžijan postaje

$$\begin{aligned} L_{HO} &= \frac{1}{2} (\dot{q}_{cl} + \dot{\xi})^2 - \frac{1}{2} \omega^2 (q_{cl} + \xi)^2 = \\ &= \frac{1}{2} \dot{q}_{cl}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q_{cl}^2 + \frac{1}{2} \dot{\xi}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 \xi^2 + \dot{q}_{cl} \dot{\xi} - \omega^2 q_{cl} \xi. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Kada se računa dejstvo lagranžijana (2.9) napisanog u obliku (2.13) na trajektoriji $q(t)$ razloženoj kao u (2.12), prva dva sabirka daće dejstvo na klasičnoj trajektoriji S_{HO}^{cl} , a poslednja dva ne daju nikakav doprinos, što se lako vidi parcijalnom integracijom. Prema tome, ukupno dejstvo je $S_{HO} = S_{HO}^{cl} + S_{HO}[\xi]$, pa je

$$A_{LHO}(\alpha, \beta, T; \omega) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{HO}^{cl}(\alpha, \beta, T, \omega) \right\} F(T, \omega), \quad (2.14)$$

gde je

$$F(T, \omega) = \int [d\xi] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{HO}[\xi] \right\} \quad (2.15)$$

funkcija koja zavisi od vremenskog intervala T i parametra ω . Razložićemo svaku od trajektorija $\xi(t)$ u Furijeov red (koji će imati samo sinusne članove zbog graničnih uslova):

$$\xi(t) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi t}{T}. \quad (2.16)$$

Dejstvo na ovakvoj trajektoriji izračunavamo koristeći relacije ortogonalnosti trigonometrijskih funkcija. Dobija se

$$S_{HO}[\xi] = \frac{T}{4} \sum_n \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2. \quad (2.17)$$

Ako vreme diskretizujemo kao što smo postupili prilikom definisanja funkcionalnog integrala, onda nam u sumama (2.16) i (2.17) ostaje samo konačan broj sabiraka, pa je

$$\int [d\xi] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{HO}[\xi] \right\} = F(T, \omega) = \lim_{N \rightarrow \infty} F_N(T, \omega),$$

$$F_N(T, \omega) = J \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_1 \dots da_N}{(2\pi\hbar i \epsilon)^{\frac{N}{2}}} \exp \left\{ \frac{iT}{4\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\}. \quad (2.18)$$

Faktor J je jakobijan transformacije, i on očigledno ne zavisi od ω i \hbar , a može da zavisi od vremenskog intervala T . Svi integrali koje imamo u (2.18) su Gauss-ovi, pa možemo da ih rešimo eksplicitno:

$$F_N(T, \omega) = J \prod_{n=1}^N \left(\frac{n\pi}{T} \right)^{-1} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.19)$$

Prva dva faktora zajedno ne zavise od ω , već samo od T , pa ćemo ih označiti sa $C(T)$. Poslednji faktor u (2.19) ima limes

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}},$$

tako da je

$$F(T, \omega) = C(T) \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}}. \quad (2.20)$$

Funkciju $C(T)$ ćemo odrediti iz limesa $\omega \rightarrow 0$, jer tada lagranžijan harmonijskog oscilatora prelazi u lagranžijan slobodne čestice za koji smo eksplicitno izračunali funkcionalni integral A_0 . Za $\omega \rightarrow 0$, pri konstantnom T , imamo $F(T, \omega) \rightarrow C(T)$, i poređenjem sa (2.8), vidimo da je

$$C(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i T}}, \quad (2.21)$$

zato što je eksponencijalni član u (2.8), u stvari, $\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_0^{cl} \right\}$. Kada uzmemo u obzir izraze (2.14), (2.20) i (2.21), za HO dobijamo konačno

$$A_{HO}(\alpha, \beta, T; \omega) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{HO}^{cl}(\alpha, \beta, T, \omega) \right\} \sqrt{\frac{\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega T}}, \quad (2.22)$$

gde je izraz za S_{HO}^{cl} dat jednačinom (2.11).

3

Računanje funkcionalnih integrala i efektivna dejstva

Kao što smo naglasili u Uvodu, samo za veoma uzak krug teorija moguće je egzaktno rešiti funkcionalni integral. Zbog toga je razvijeno nekoliko različitih aproksimativnih metoda za njihovo računanje, kako analitičkih, tako i numeričkih. Ovde ćemo dati kratak pregled ovih metoda i sumirati njihove najznačajnije osobine.

3.1 Aproksimativni metodi u funkcionalnom formalizmu

Semiklasičan razvoj, kao što smo već naglasili, zasnovan je na metodi stacionarne faze i primenjuje se u sektoru teorije u kome je dejstvo mnogo veće od \hbar (semiklasičan sektor). Dominantan doprinos funkcionalnom integralu u ovom sektoru daju trajektorije za koje je dejstvo blisko stacionarnoj tački (klasično rešenje). Praktično, ova metoda se koristi tako što se dejstvo razvije u Tejlorov red oko klasičnog rešenja q_{cl} i eksponent funkcionalnog integrala se faktoriše tako da prvi faktor sadrži samo članove ovog razvoja do kvadratnog reda po $q - q_{cl}$, a drugi faktor ostatak. Nakon toga se drugi faktor (eksponent od kubnih i viših članova u razvoju dejstva po $q - q_{cl}$) i sam razvija u Tejlorov red. Na taj način dobijamo samo Gausove integrale i njihove momente, oblika $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{i x^2\}$. Ovi momenti se mogu svesti na računanje Gausovih integrala¹², što nam omogućava da dobijemo aproksimativan izraz za funkcionalni integral u obliku reda po \hbar . Dominantan član u ovom redu odgovara Gausovom integralu i predstavlja doprinos svih Fajnmanovih dijagrama sa najviše jednom petljom. Korekcije na ovaj član (dijagrami sa dve i više petlji) dolaze od viših momenata odgovarajućeg Gausovog integrala.

Kao što je pokazano u radovima [25, 26, 27, 28], razvoj oko očekivane vrednosti koordinate $\langle q \rangle$ predstavlja bolji izbor, pošto dominantan doprinos funkcionalnom integralu zapravo daju trajektorije koje su bliske $\langle q \rangle$. Kako je računanje ove očekivane vrednosti podjednako komplikovano kao i računanje traženog funkcionalnog integrala, koristi se samousaglašena iterativna šema: u prvom koraku se očekivana vrednost $\langle q \rangle$ aproksimira klasičnim rešenjem

¹²Primenom Vikove rotacije, koja će biti detaljno opisana u sledećem poglavlju, ovi integrali postaju $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{-x^2\}$. Ako primetimo da za Gausov integral $I(j) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-x^2 + jx\} = \sqrt{\pi} \exp\{j^2/4\}$ važi $\frac{d^n}{dj^n} I(j) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{-x^2 + jx\}$, onda su traženi momenti $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{-x^2\} = \frac{d^n}{dj^n} I(j) \Big|_{j=0}$. Invertovanjem Vikove rotacije dobijaju se prave vrednosti gornjih integrala.

q_{cl} , a funkcionalni integral se izračuna tako što se dejstvo razvije u Tejlorov red do kvadratnih članova oko $\bar{q} = q_{cl}$ i reši se dobijeni Gausov integral (što je zapravo semiklasičan razvoj do na jednu petlju). Nakon toga se, u drugom koraku, diferenciranjem po spoljašnjem polju¹³ prethodno dobijenog izraza za funkcionalni integral izračuna nova aproksimativna ocena očekivane vrednosti $\langle q \rangle$. U ovom koraku se funkcionalni integral aproksimira slično kao i u prvom koraku, samo što se u razvoju dejstva za \bar{q} koristi upravo dobijena nova aproksimativna vrednost za $\langle q \rangle$. Ova procedura se nastavlja sve dok se dobijene ocene funkcionalnog integrala i očekivanih vrednosti ne stabilizuju, odnosno dok se ne postigne konvergencija iterativnog postupka. Kao što se vidi, i ova aproksimativna šema zasnovana je na rešavanju odgovarajućih Gausovih integrala. Ispostavlja se da je ovaj pristup u tesnoj vezi sa aproksimativnom šemom Gausovog polovljenja [5] koja je izložena na kraju ovog poglavlja. Osnovna prednost Gausovog polovljenja u odnosu na ovu proceduru je zaobilazanje samousaglašenog postupka.

Perturbativni razvoj zasniva se na ideji da se u eksponentu podintegralne funkcije u funkcionalnom integralu ostavi samo deo dejstva koji odgovara slobodnoj teoriji, a da se interakcija razvije u red po konstanti interakcije g . Na taj način se dobijaju integrali oblika $g^k \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \exp\{i x^2\}$, odnosno momenti Gausove raspodele, koji se mogu svesti na računanje Gausovih integrala, isto kao i u semiklasičnom razvoju.

Pored ovih opštih analitičkih aproksimativnih šema, postoji i niz posebnih analitičkih metoda, koji su primenljivi samo za određene modele. Bez ulaženja u detalje, naglasimo da i ove metode na ključan način zavise od računanja Gausovih integrala.

Numerički metodi za rešavanje funkcionalnih integrala bazirani su na direktnom izračunavanju N -tostrukih integrala iz definicije (2.5) pomoću nekog od standardnih metoda, koji kao rezultat daju ocenu vrednosti integrala i ocenu greške. Pri tom postoji jasna interpretacija greške i precizno možemo da definišemo interval u kome se pravi rezultat nalazi. Različiti metodi se razlikuju po veličini ocenjene greške, ali za traženi rezultat uvek imamo definitivnu predikciju. Kvalitet nekog numeričkog metoda za primenu u rešavanju konkretnog problema ocenjujemo na osnovu veličine greške i mogućnosti njene minimizacije povećanjem vremena uloženog u izračunavanje. Pošto za računanje funkcionalnih integrala treba rešavati višestruke integrale visoke dimenzionalnosti, Monte Karlo metod (detaljnije opisan u Dodatku C) koji dominira nad svim ostalim metodima upravo u rešavanju ovakve vrste problema, predstavlja najbolji izbor¹⁴.

Pre prelaska na dalji opis tipične upotrebe Monte Karlo metoda za računanje funkcionalnih integrala, treba skrenuti pažnju na jedan tehnički detalj. Umesto običnog, realnog vremena t , u numeričkom pristupu je uobičajen prelazak na imaginarno vreme τ smenom $\tau = it$ (Vikova rotacija). Ova procedura je prvo definisana za kvantnu mehaniku [30, 31], a nakon toga i za kvantnu teoriju polja [32]. Prvi razlog za ovu smenu je matematičke prirode. Naime, jednostavnije je raditi sa funkcionalnim integralima u euklidskom prostoru, pošto je tu mnogo lakše definisati ih i verifikovati njihovu egzistenciju, nego u prostoru Minkovskog. Drugi razlog je usko vezan za ograničenja numeričkog pristupa. Naime, nemoguće je nu-

¹³U analitičkom formalizmu se očekivane vrednosti dobijaju uvođenjem spoljašnjeg polja u funkcionalni integral, koji se obično zove generišući funkcional. Diferenciranjem po spoljašnjem polju i normiranjem se zatim dobijaju tražene očekivane vrednosti, slično kao i u statističkoj mehanici. U tom smislu centralni objekt u analitičkom pristupu je generišući funkcional. Za pedagoški pristup videti [24, 22, 29].

¹⁴Treba naglasiti da, iako je Monte Karlo opšti numerički metod, njegova efikasnost zavisi od toga koliko smo analitičkih informacija o datom modelu ugradili u algoritam. Kao što je objašnjeno u Dodatku C, ključan element za efikasnost algoritma je izbor funkcije raspodele iz koje će se generisati trajektorije pri računanju funkcionalnog integrala. Nije ni čudno da je i ovde najbolji izbor Gausova raspodela koja se dobija razvojem dejstva u red do kvadratnih članova

merički postići konvergenciju integrala ukoliko oni imaju oscilatorni karakter kao u ovom slučaju. Vikova rotacija obezbeđuje konvergenciju ovih integrala, što se lako vidi na osnovu sledećeg analitičkog argumenta: opisana smena u funkcionalnom integralu znači da se izraz u eksponentu transformiše u

$$\begin{aligned} iS &= i \int_0^T dt L \longrightarrow \int_0^{iT} d\tau \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 - V(q) \right] = \\ &= - \int_0^{iT} d\tau \left[\frac{1}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right] \longrightarrow - \int_0^T d\tau H = -E, \end{aligned}$$

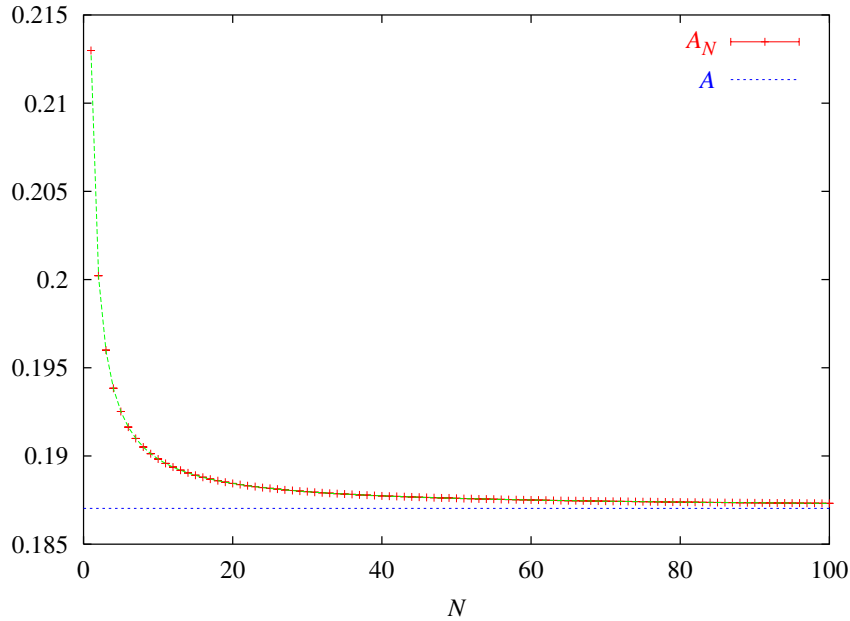
gde smo u poslednjem izrazu ponovo uveli skraćenu oznaku za izvod po vremenu (od sada će \dot{q} označavati izvod po vremenu τ , odnosno $\dot{q} = dq/d\tau$), H Hamiltonijan sistema, a E njegova energija¹⁵. Primetimo da se pri prelasku na imaginarno vreme menja i gornja granica u integraciji. Međutim, poslednji korak u proceduri Vikove rotacije obuhvata rotaciju konture integracije (u integraciji po realnom vremenu t to je bila realna osa, a u integraciji po vremenu τ to je imaginarna osa) za 90° , tako da gornja granica integracije opet postaje T . Ovaj korak opravdava i ime Vikova rotacija za uvedene transformacije. Pošto je jasno da je energija svakog fizičkog sistema ograničena odozdo, vidimo da će integrali u izrazu za generišući funkcional biti konvergentni. Može se reći da Vikova rotacija predstavlja određenu vrstu analitičkog produženja, koje se (ako je potrebno) može invertovati. Interesantno je primetiti i da se nakon Vikove rotacije osnovna jednačina kvantne mehanike, Šredingerova jednačina, pretvara u klasičnu difuzionu jednačinu.

Specifičnost u numeričkom rešavanju funkcionalnih integrala u odnosu na rešavanje višestrukih integrala je prisustvo limesa $N \rightarrow \infty$ u definiciji (2.5). To znači da ćemo za svaku vrednost broja podeonih tačaka N dobiti ocenu vrednosti funkcionalnog integrala A_N i odgovarajuće greške ΔA_N , a zatim iz dobijenih vrednosti treba odrediti ocenu prave vrednosti funkcionalnog integrala A i greške ΔA . Na slici 3.1 prikazana je tipična zavisnost diskretizovane amplitude A_N od broja N za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom, sa lagranžijanom oblika $L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q)$, uz $V(q) = \frac{1}{2} q^2 + \frac{\lambda}{4!} q^4$. Prikazani rezultati su dobijeni iz Monte Karlo simulacije čiji je kod detaljno prikazan u Dodatku D. Fitovanjem se može pokazati da je u pitanju polinomijalna zavisnost po $1/N$,

$$A_N = A + \frac{a_1}{N} + \frac{a_2}{N^2} + \dots, \quad (3.1)$$

a parametri ove zavisnosti se mogu oceniti metodom najmanjih kvadata [33]. Slobodni član gornjeg polinoma je tražena vrednost funkcionalnog integrala (kontinualna amplituda), a metod najmanjih kvadrata nam daje i ocenu greške ΔA dobijene vrednosti A na osnovu ocena grešaka pojedinih vrednosti A_N koje dobijamo iz Monte Karlo metoda i na osnovu rasporeda pojedinih tačaka na krivoj na slici 3.1. Koliko je opisani pristup sa fitovanjem efikasniji od pristupa u kome se generišući funkcional ocenjuje sa A_N za dovoljno veliku vrednost N , može se ilustrovati na primeru sa slike 3.1. Fitovanje daje rezultat sa greškom od $3 \cdot 10^{-7}$ pri maksimalnoj vrednosti $N = 10^2$. Da bi se postigla ista tačnost u naivnom pristupu, bilo bi neophodno koristiti mnogo veću vrednost $N = 10^5$, što odgovara i mnogo dužem vremenu izvršavanja numeričke simulacije. Pored ove ključne razlike, rezultat dobijen ocenjivanjem A sa A_N za dovoljno veliko N daje pristrasnu ocenu, kao što se vidi sa slike 3.1 (vrednost ocene je uvek sistematski iznad vrednosti koja se ocenjuje), što dodatno diskvalifikuje ovaj pristup.

¹⁵U teoriji polja se energija zove euklidsko dejstvo, baš iz ovog razloga.



Slika 3.1: Tipična zavisnost diskretizovane amplitude A_N od broja podeonih tačaka N za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom za prelazak iz stanja sa položajem $\alpha = 0$ u stanje sa položajem $\beta = 1$. Parametar teorije, konstanta anharmoniciteta λ , ima vrednost $\lambda = 1$, masa čestice je $m = 1$, dok je vreme evolucije $T = 1$, a broj Monte Karlo koraka $N_{MC} = 10^7$. Ovi rezultati dobijeni su pomoću Monte Karlo simulacije koja je razvijena za potrebe ovog rada i koja je detaljno opisana u dodatku D. Fitovanjem polinoma (3.1) na podatke sa grafika dobija se kontinualna vrednost amplitude $A = 0.1870294(3)$, koja je takođe prikazana na slici.

Vakuumske očekivane vrednosti u kvantnoj mehanici i kvantnoj teoriji polja se numerički računaju na sličan način, fitovanjem polinoma po $1/N$ na dobijene rezultate u diskretizaciji sa N podeonih tačaka, $\langle q(t)q(t') \dots \rangle_N$.

3.2 Ojlerova sumaciona formula za obične integrale

Trenutno stanje razvoja funkcionalnog formalizma je veoma slično stanju u kojem je teorija običnih integrala bila pre velikih doprinosa Rimana. Tada su integrali računati direktno iz definicione formule, odnosno biranjem odgovarajuće diskretizacije integrala (Darbuove sume), zatim je bilo neophodno da se ona analitički sabere, i na kraju da se nađe kontinuum limes. Na primer,

$$I[f] \equiv \int_0^T f(t)dt = \lim_{N \rightarrow \infty} I_N[f], \text{ gde je } I_N[f] = \sum_{n=1}^N f(t_n)\epsilon_N, \quad (3.2)$$

$\epsilon_N = T/N$ and $t_n = n\epsilon_N$. Naravno, računanje čak i najjednostavnijih integrala na ovaj način predstavljalo je izazov. Matematičari XVIII veka nisu na raspolaganju imali računare, što je verovatno pozitivno uticalo na razvoj teorije integracije. Da su računari u to vreme postojali, integrale bi bilo moguće računati numerički, što bi verovatno imalo dvostruko negativne posledice: sa jedne strane, takve simulacije bile bi veoma neefikasne (diskretizovane Darbuove sume obično veoma sporo konvergiraju ka kontinuum limesu), ali sa druge strane, simulacije bi davale rezultate, što bi usporilo razvoj teorije integracije. Na sreću, taj rani

numerički pristup nije bio moguć, i poslednji veliki korak u razvoju teorije integrala pre Rimana je učinio Ojler.

On je primetio da je, pošto diskretizacija nije jedinstvena, moguće zameniti funkciju $f(t)$ nekom drugom funkcijom (dodajući joj članove proporcionalne sa ϵ_N , ϵ_N^2 , itd.) bez promene vrednosti integrala. Pretpostavimo da je $f^*(t)$ jedna od takvih funkcija ekvivalentnih $f(t)$, ali sa dodatnom osobinom da sume $I_N[f^*]$ ne zavise od N . Zapravo, takva funkcija $f^*(t)$ se lako može eksplicitno konstruisati za svaku datu funkciju $f(t)$. Razmotrimo prvo jednostavan primer $f(t) = 1$. Za njega važi

$$I_N[1] = \sum_{n=1}^N \epsilon_N = T, \quad (3.3)$$

što je već N -nezavisna veličina. Dakle, za ovaj primer svi dodatni članovi u $f^*(t)$ su jednaki nuli, odnosno $f^*(t) = f(t)$. Primetimo da je funkcija $f^*(t)$ u ovom primeru u potpunosti određena funkcijom $f(t)$ (i vrednošću ϵ_N), tako da dodatni članovi mogu da zavise samo od izvoda f' , f'' , itd. koji u ovom slučaju iščezavaju.

Sledeći korak u konstrukciji $f^*(t)$ je razmatranje primera $f(t) = t$. Sada dobijamo

$$I_N[t] = \sum_{n=1}^N t_n \epsilon_N = \frac{N(N+1)}{2} \frac{T^2}{N^2} = \frac{T^2}{2} + \frac{T^2}{2N}. \quad (3.4)$$

Odave sledi da je $I_N[t - \frac{\epsilon_N}{2}] = \frac{T^2}{2}$. Dakle, do na f'' i više izvode od f koji iščezavaju za linearnu funkciju, imamo $f^*(t) = f(t) - \frac{\epsilon_N}{2} f'(t)$.

Ovaj proces se nastavlja razmatranjem $f(t) = t^2$. U ovom slučaju važi

$$I_N[t^2] = \sum_{n=1}^N t_n^2 \epsilon_N = \frac{N(N+1)(2N+1)}{6} \frac{T^3}{N^3} = \frac{T^3}{3} + \frac{T^3}{2N} + \frac{T^3}{6N^2}, \quad (3.5)$$

odakle sledi $I_N[t^2 - \epsilon_N t_n + \frac{1}{3} \epsilon_N^2] = \frac{T^3}{3}$, odnosno $f^*(t) = f(t) - \frac{\epsilon_N}{2} f'(t) + \frac{\epsilon_N^2}{6} f''(t) + \dots$. Dalji članovi su proporcionalni višim stepenim ϵ_N , kao i višim izvodima funkcije f , i mogu se dobiti razmatranjem sume $I_N[t^3]$, itd. Na ovaj način smo definisali eksplicitnu proceduru za nalazjenje funkcije $f^*(t)$ u obliku Tejlorovog reda po ϵ_N za proizvoljnu datu funkciju $f(t)$. Pošto $I_N[f^*]$ ne zavisi od N , sledi

$$\int_0^T f(t) dt = \sum_{n=1}^N f(t_n) \epsilon_N - \frac{\epsilon_N}{2} \sum_{n=1}^N f'(t_n) \epsilon_N + \frac{\epsilon_N^2}{6} \sum_{n=1}^N f''(t_n) \epsilon_N + \dots \quad (3.6)$$

Ovo je dobro poznata Ojlerova sumaciona formula za obične integrale. Ona se takođe može zapisati u kompaktnijem obliku

$$I[f] = I_N[f^{(p)}] + O(\epsilon_N^p), \quad (3.7)$$

gde je $f^{(p)}$ početni deo funkcije f^* koji sadrži prvih p članova. Ojlerova formula daje analitičku vezu između diskretizovanih Darbuovih suma i odgovarajućeg integrala. Sa numeričke tačke gledišta, ova formula omogućava da se ubrza konvergencija diskretizovanih izraza koji se koriste za računanje običnih integrala. Na primer, ako se koristi definiciona relacija, razlika između diskretizovanih izraza i kontinuum limesa (prave vrednosti integrala) je reda $O(1/N)$. Ako se koristi prvih p članova iz Ojlerove sumacione formule, greška se svodi na $O(1/N^p)$. Sve što je neophodno je da je podintegralna funkcija diferencijabilna $p-1$ puta. U ovom radu će ovakav pristup biti sistematski uopšten na funkcionalne integrale. Početni deo funkcije f^* koji sadrži prvih p članova u razvoju po ϵ_N (označen ovde sa $f^{(p)}$) je analogon efektivnog diskretizovanog dejstva, koje ćemo uvesti u narednim sekcijama ovog poglavlja.

3.3 Efektivno dejstvo i efektivni potencijal

Kao što je rečeno, u funkcionalnom formalizmu je amplituda $A(\alpha, \beta; T) = \langle \beta | e^{-T\hat{H}} | \alpha \rangle$ za prelazak iz početnog stanja $|\alpha\rangle$ u stanje $|\beta\rangle$ za euklidsko vreme T data preko funkcionalnog integrala, koji je definisan kao $N \rightarrow \infty$ limes $(N-1)$ -strukog integrala¹⁶

$$A_N(\alpha, \beta; T) = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{-S_N}. \quad (3.8)$$

Euklidski vremenski interval $[0, T]$ je podeljen na N jednakih koraka dužine $\epsilon_N = T/N$, uz oznake $q_0 = \alpha$ i $q_N = \beta$. Ovde je S_N naivno diskretizovano dejstvo teorije. Za razmatranu klasu teorija sa kontinualnim dejstvom oblika

$$S = \int_0^T dt \left(\frac{1}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right), \quad (3.9)$$

naivna diskretizacija u preskripciji srednje tačke¹⁷ je data izrazom

$$S_N = \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N V_n \right), \quad (3.10)$$

gde smo uveli oznake $\delta_n = q_{n+1} - q_n$, $V_n = V(\bar{q}_n)$, i $\bar{q}_n = \frac{1}{2}(q_{n+1} + q_n)$. Naivna diskretizacija se ponekad koristi i u levoj preskripciji, za koju se potencijal računa u levoj tački intervala, odnosno u gornjoj jednačini se zameni $V_n = V(q_n)$. Analogno se definiše i desna naivna preskripcija, u kojoj se koristi desna tačka q_{n+1} za računanje potencijala, $V_n = V(q_{n+1})$. Takođe, ponekad se koristi i simetrizovana naivna preskripcija, u kojoj je $V_n = [V(q_n) + V(q_{n+1})]/2$. U ovom radu, ako drugačije nije naglašeno, podrazumevaćemo uvek Vajlovu preskripciju u kojoj se potencijal računa u srednjoj tački \bar{q}_n .

Kao što je to bio slučaj i kod običnih integrala, i definicija funkcionalnih integrala zahteva prelazak sa kontinualne na diskretizovanu teoriju, što je višestruko nejednoznačan proces. Za teorije opisane dejstvom (3.9), pored gore navedenih preskripcija, zapravo imamo slobodu izbora proizvoljne tačke iz intervala $[q_n, q_{n+1}]$ u kojoj ćemo računati potencijal, bez uticaja na izračunate vrednosti fizičkih veličina – diskretizovane vrednosti amplituda će se razlikovati, ali sve one će imati isti kontinuum limes. Međutim, još važnija sloboda koju imamo pri izboru diskretizovanog dejstva je vezana za mogućnost uvođenja dodatnih članova koji nestaju pri prelasku na kontinuum limit, odnosno nemaju uticaja na izračunate vrednosti fizičkih veličina. Diskretizovana dejstva koja sadrže takve dodatne članove ćemo zvati efektivna dejstva. Na primer, član oblika $\sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_N \delta_n^2 g(\bar{q}_n)$, gde je g regularna funkcija u limesu $\epsilon_N \rightarrow 0$, ne menja fizičke veličine u kontinuumu pošto se ponaša kao $\epsilon_N^2 \int_0^T dt \dot{q}^2 g(q)$, odnosno iščezava proporcionalno sa ϵ_N^2 . Takvi članovi, iako ne menjaju fiziku u kontinuumu, mogu značajno da utiču na brzinu konvergencije ka kontinuumu. Sistematsko proučavanje odnosa između različitih diskretizacija istog funkcionalnog integrala će nam omogućiti da eksplicitno konstruišemo hijerarhiju efektivnih dejstava koje imaju sve bržu i bržu konvergenciju ka kontinuum vrednostima. Međutim, pre toga ćemo uvesti pojam idealnog efektivnog dejstva i pomenuti neke opšte osobine funkcionalnih integrala koje su relevantne za izvođenja u ovom radu.

¹⁶Nadalje koristimo prirodne jedinice u kojima Plankova konstanta \hbar i mase čestica imaju vrednost 1.

¹⁷Ovo je uobičajeni naziv u literaturi.

Amplituda $A(\alpha, \beta; T)$ proizvoljne teorije čije dejstvo smo označili sa S zadovoljava

$$A(\alpha, \beta; T) = \int dq_1 \cdots dq_{n-1} A(\beta, q_{n-1}; \epsilon_N) \cdots A(q_1, \alpha; \epsilon_N) , \quad (3.11)$$

za proizvoljnu vrednost N . Ova opšta relacija je direktna posledica linearnosti prostora stanja u kvantnoj teoriji. Po analogiji sa ranijim razmatranjima kod običnih integrala, pretpostavićemo da i za funkcionalne integrale postoji efektivno dejstvo S^* koje je ekvivalentno dejstvu S (u smislu da daje iste vrednosti fizičkih veličina u kontinuum limesu), pri čemu ima dodatnu osobinu da njegova N -diskretizovana amplituda $A_N^*(\alpha, \beta; T)$ ne zavisi od N , odnosno da zadovoljava sledeću jednakost [6]

$$A_N^*(\alpha, \beta; T) = A(\alpha, \beta; T) . \quad (3.12)$$

Kao što je bio slučaj u prethodnoj sekciji ovog poglavlja, u kasnijim poglavljima ćemo konstruisati opštu proceduru za nalaženje efektivnog dejstva S^* . Ovakvo efektivno dejstvo zovemo idealno efektivno dejstvo, pošto u proizvoljnoj diskretizaciji daje kontinuum rezultate.

Za dejstva koja imaju oblik (3.9) amplituda se može napisati kao

$$A(q_{n+1}, q_n; \epsilon_N) = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} \right) \mathcal{A}(q_{n+1}, q_n; \epsilon_N) , \quad (3.13)$$

gde redukovana amplituda \mathcal{A} teži jedinici kada $\epsilon_N \rightarrow 0$. Ako napišemo idealno efektivno dejstvo S_N^* kao

$$S_N^* = \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N W_n \right) , \quad (3.14)$$

i ako iskoristimo jednačine (3.8), (3.11) i (3.12), dobijamo

$$\exp(-\epsilon_N W_n) = \mathcal{A}(q_{n+1}, q_n; \epsilon_N) . \quad (3.15)$$

Primetimo da W_n podseća na neku vrstu efektivnog potencijala, što znači da bi trebalo da zavisi od \bar{q}_n . Međutim, iz gornje relacije vidimo da ovaj efektivni potencijal mora takođe da zavisi i od diskretizovanih brzina δ_n . Pored toga, W ima i eksplicitnu zavisnost od diskretnog vremenskog koraka ϵ_N , odnosno sumarno W zavisi na sledeći način od relevantnih parametara:

$$W_n = W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) . \quad (3.16)$$

Kao što smo videli, ovakva funkcionalna zavisnost je direktna posledica linearnosti kvantne teorije. Ekvivalentnost dejstava S i S^* ima za posledicu da W mora da teži ka $V(\bar{q})$ kada ϵ_N i δ teže nuli.

Još jedna od opštih osobina efektivnog potencijala W sledi iz realnosti amplituda u euklidskom vremenu (odnosno, iz činjenice da je hamiltonijan sistema hermitski operator). Koristeći ovo, nalazimo da važi $A(\alpha, \beta; T) = A(\alpha, \beta; T)^\dagger = \langle \beta | e^{-T\hat{H}} | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | e^{-T\hat{H}} | \beta \rangle = A(\beta, \alpha; T)$. Nakon uvođenja efektivnog potencijala, ovo se svodi na parnost W u odnosu na diskretizovanu brzinu δ_n kao parametar,

$$W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) = W(-\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) . \quad (3.17)$$

Zbog parne zavisnosti od diskretizovane brzine, vidimo da će u razvoju W u red biti prisutni samo parni stepeni od δ_n :

$$W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) = g_0(\bar{q}_n; \epsilon_N) + \delta_n^2 g_1(\bar{q}_n; \epsilon_N) + \delta_n^4 g_2(\bar{q}_n; \epsilon_N) + \dots \quad (3.18)$$

Sve funkcije g_k moraju da budu regularne u limitu $\epsilon \rightarrow 0$. Veza između početne i efektivne teorije se uspostavlja pomoću relacije

$$g_0(\bar{q}_n; 0) = V(\bar{q}_n), \quad (3.19)$$

koja očigledno mora da važi u limesu $\epsilon_N \rightarrow 0$. Ovo razmatranje kompletira opšte osobine efektivnog dejstva i efektivnog potencijala koje su relevantne za ovaj rad.

Primetimo još da za teorije za koje možemo egzaktno da izračunamo opštu amplitudu, možemo direktno da dobijemo i idealno efektivno dejstvo, odnosno idealni efektivni potencijal W , na osnovu jednačina (3.13) i (3.15). Za slobodnu česticu ovo je trivijalno, pošto je redukovana amplituda jednaka jedinici, pa je idealni efektivni potencijal jednak nuli. Za harmonijski oscilator se za idealni efektivni potencijal dobija opšta kvadratna forma čiji su koeficijenti određeni graničnim uslovima i parametrima dejstva harmonijskog oscilatora S_{HO}^{cl} na rešenju klasične jednačine kretanja datog jednačinom (2.11),

$$S_{HO}^{cl}(q_n, q_{n+1}, \epsilon, \omega) = \frac{\delta_n^2}{2\epsilon} + \epsilon W_{HO}(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon), \quad (3.20)$$

pošto je opšta amplituda data preko gornjeg dejstva pomoću jednačine (2.22). Nakon prelaska na imaginarno vreme (Vikove rotacije), dobijamo sledeći izraz za idealni efektivni potencijal za harmonijski oscilator

$$W_{HO}(\delta, \bar{q}; \epsilon) = \frac{\omega}{\epsilon \sinh \omega \epsilon} \left[\left(\bar{q}^2 + \frac{\delta^2}{4} \right) \cosh \omega \epsilon - \left(\bar{q}^2 - \frac{\delta^2}{4} \right) \right] - \frac{\delta^2}{2\epsilon^2}. \quad (3.21)$$

3.4 Pregled ranijih rezultata za efektivna dejstva

U ovoj sekciji daćemo pregled ranijih rezultata vezanih za unapređenje brzine konvergencije različitih preskripcija i efektivnih dejstava koja se koriste za računanje funkcionalnih integrala. Uobičajena preskripcija data jednačinom (3.10), koja se zasniva na računanju potencijala u srednjoj tački \bar{q}_n , konvergira kao

$$A_N(\alpha, \beta; T) = A(\alpha, \beta; T) + O(1/N), \quad (3.22)$$

za proizvoljne vrednosti α i β , odnosno dobija se razvoj u red po maloj veličini $1/N$. Ovo važi i za naivnu levu i desnu preskripciju i može lako verifikovati numerički [8], a za konkretne modele se može pokazati i analitički. Na primer, za harmonijski oscilator se može eksplicitno izračunati diskretizovana amplituda A_N [34] i pokazati da važi gornja relacija.

Međutim, konvergencija diskretizovanih amplituda se može veoma lako ubrzati. U radu [8] smo pokazali na osnovu Troterove formule da korišćenje popravljene diskretizovane amplitude, definisane sa

$$A_N^P(\alpha, \beta; T) = \frac{1 + e^{\epsilon(V(\alpha) - V(\beta))}}{2} A_N^L(\alpha, \beta; T), \quad (3.23)$$

gde je $A_N^L(\alpha, \beta; T)$ naivna diskretizovana amplituda u levoj preskripciji, ima konvergenciju

$$A_N^P(\alpha, \beta; T) = A(\alpha, \beta; T) + O(1/N^2). \quad (3.24)$$

odnosno da su u gornjem razvoju prisutni samo parni stepeni od $1/N$. Kako je prvi naredni član u razvoju po $1/N$ tek $1/N^4$, ako pronađemo način da eliminišemo $1/N^2$ član, konvergencija će se ubrzati više nego što bismo a priori očekivali. Primetimo da se kvadratna konvergencija dobija i za simetrizovanu naivnu preskripciju, pošto se ona, do na linearne članove po $1/N$, poklapa sa A_N^P .

Dakle, korišćenje ovako popravljene diskretizovanog dejstva ima značajnu numeričku prednost. Primetimo da ako računamo dijagonalne amplitude $A(\alpha, \alpha; T)$ za prelasku $|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$ u naivnoj levoj preskripciji, automatski dobijamo kvadratnu konvergenciju,

$$A_N^L(\alpha, \alpha; T) = A(\alpha, \alpha; T) + O(1/N^2). \quad (3.25)$$

Ovo ponašanje može lako da se pokaže numerički [35], ali i da se razume analitički. Naime, za $\beta = \alpha$ je $A_N^L(\alpha, \alpha; T) = A_N^R(\alpha, \alpha; T) = A_N^P(\alpha, \alpha; T)$, pa je na osnovu gornjeg razmatranja jasno zašto se dobija kvadratna konvergencija u ovom specijalnom slučaju. Ovo je alternativan način da se pokaže dobro poznati rezultat za konvergenciju particione funkcije računane u naivnoj diskretizaciji u levoj preskripciji [36]. Taj rezultat se sada dobija integracijom gornje dijagonalne amplitude po koordinati α (da bi se našao trag),

$$Z(T) = \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha A(\alpha, \alpha; T), \quad (3.26)$$

odnosno u diskretizovanoj verziji,

$$Z_N(T) = \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha A_N(\alpha, \alpha; T). \quad (3.27)$$

Ako u gornjoj jednačini koristimo efektivno dejstvo koje daje diskretizovanu amplitudu sa kvadratnom konvergencijom, to važi i za diskretizovanu particionu funkciju¹⁸.

Dalje unapređenje gornjeg rezultata za particione funkcije je najvažniji rezultat poznat od ranije u literaturi, i izveli su ga Takahaši i Imada [37], a nezavisno od njih Li i Brauton [38]. Koristeći uopštenje Troterove formule [39], oni su pokazali da efektivno dejstvo naivnoj levoj diskretizaciji u kojoj je potencijal V zamenjen sledećim efektivnim potencijalom

$$V^{eff} = V + \frac{1}{24}\epsilon^2 V'^2 \quad (3.28)$$

daje kvartičnu konvergenciju za particionu funkciju,

$$Z_N^{eff}(T) = Z(T) + O(1/N^4). \quad (3.29)$$

Detaljnija analiza se može naći u radu Janga i saradnika [40]. Za neke specijalne klase modela [41] dobijena je i $O(1/N^6)$ konvergencija, ali se ovaj metod ne može primeniti na opštu teoriju. Dalja unapređenja poznata u literaturi su bila fokusirana na popravke u propagatoru za kratko vreme propagacije [42, 43, 44].

Međutim, naglašavamo da se sva ova unapređenja konvergencije odnose isključivo na particione funkcije, a ne i na amplitude (čak ni dijagonalne amplitude). Ovo je posledica činjenice da je za izvođenje gornjeg efektivnog potencijala iskorišćena, pored uopštene

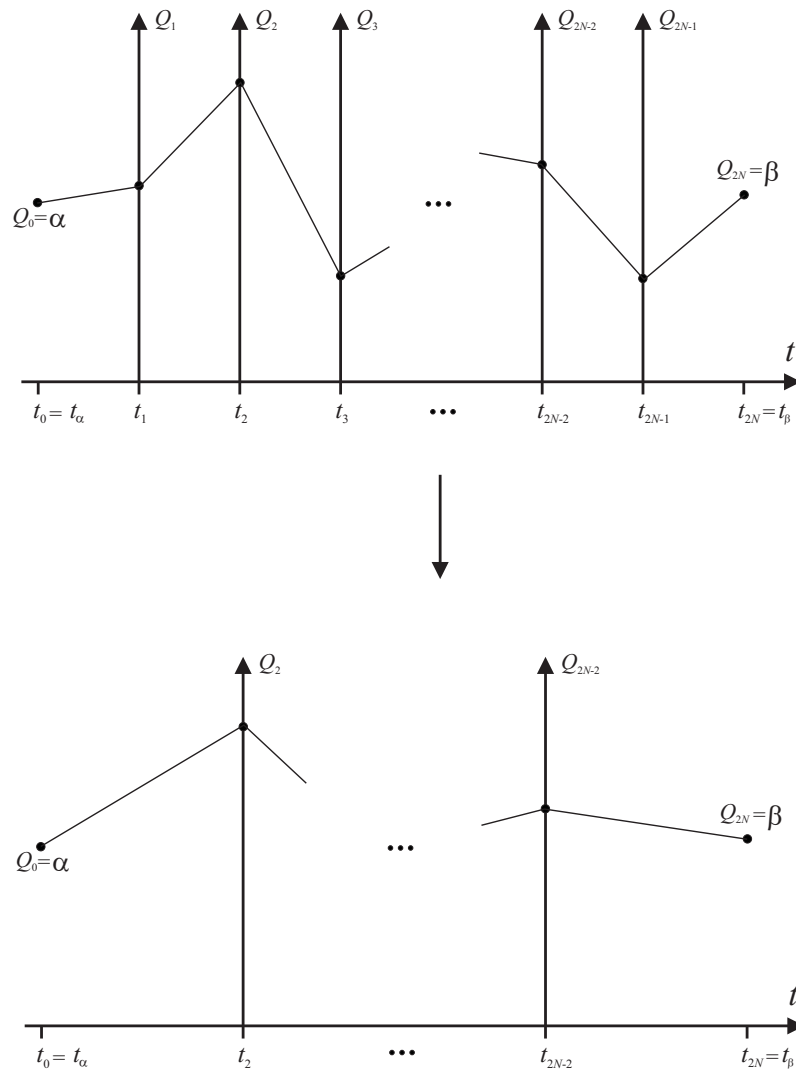
¹⁸Kao argument particione funkcije Z ovde smo koristili vreme propagacije T . U statističkoj fizici i fizici kondenzovanog stanja materije uobičajeni parametar particione funkcije je inverzna temperatura, odnosno Bolcmanov faktor $\beta_t = 1/kT_t$, gde je k Bolcmanova konstanta, a T_t temperatura. Indeks t smo uveli da bi se ove veličine razlikovale od već uvedenih veličina β i T .

Troterove formule, i ciklična osobina traga. Za amplitude ovo ne možemo da iskoristimo, pa je dugo vremena najbolji poznati rezultat u literaturi za opšte diskretizovane amplitude bila kvadratna konvergencija simetrizovane naivne preskripcije. Čak ni unapređeno diskretizovano dejstvo, definisano jednačinom (3.23), nije bilo poznato dok ga autor i saradnici nisu uveli u skorašnjem radu [8].

Kao što se vidi iz izloženog, svi poznati metodi za ubrzavanje konvergencije funkcionalnih integrala se baziraju ili na specijalnoj osobini koju poseduje particiona funkcija (cikličnost traga) ili su primenjivi samo na posebne klase modela. Sistematski pristup ka ubrzavanju konvergencije opštih funkcionalnih integrala nije postojao u literaturi. Najbliže tome je bilo unapredjeno dejstvo A_N^P koje sistematski popravlja konvergenciju, eliminišući neparne stepene od $1/N$, ali to nije dovoljno pošto nije postojao metod za sistematsko eliminisanje preostalih parnih stepena od $1/N$.

Prvi korak ka sistematskom pristupu ovom problemu je izložen u radu ovog autora [5], u kome je uvedena nova aproksimativna šema koja se sastoji u rekurzivnom povezivanju funkcionalnog integrala u diskretizaciji sa $2N$ podeonih tačaka sa funkcionalnim integralom u diskretizaciji sa N podeonih tačaka. Ova aproksimativna šema je omogućila izvođenje rekurzivne formule na korišćenjem razvoja dejstva u red do kvadratnih članova po razlikama $q_{n+1} - q_n$. Ovim se integrali u diskretizovanom izrazu za funkcionalni integral po neparnim podeonim tačkama svode na Gausove. Iz ovog razloga je ova aproksimacija nazvana Gausovo polovljenje. Nakon primene ove aproksimacije (tj. nakon rešavanja Gausovih integrala po neparnim koordinatama), u novodobijenom funkcionalnom integralu u diskretizaciji sa N koraka dobija se efektivno dejstvo, koje je dato izvedenom rekurzivnom formulom. Ova formula u analitičkom smislu pruža dublje razumevanje svojstava funkcionalnog integrala, na osnovu povezivanja niza ekvivalentnih teorija u okviru klasa koje se dobijaju iterativnom primenom rekurzivne formule. U numeričkom smislu izvedena rekurzivna formula pružila nam je efikasniji metod za računanje funkcionalnih integrala, pošto se iterativnom primenom te formule mogu dobiti bolja efektivna dejstva i samim tim precizniji numerički rezultati koji brže konvergiraju ka kontinuum vrednostima.

Apriorno opravdanje za Gausovo polovljenje proističe iz činjenice da je, u srednjem, $(q_{n+1} - q_n)^2 \sim \epsilon$. Ovakvo ponašanje (za malo ϵ) je opšta karakteristika svakog kvantnog procesa (u euklidskoj teoriji koju zapravo razmatramo, to je karakteristika difuzionog procesa ili, ekvivalentno, slučajne šetnje). U radu [5] je pokazano i da je greška koja se unosi primenom Gausovog polovljenja reda $1/N^2$, a da je efektivno ubrzanje koje daje primena rekurzivne formule u numeričkim proračunima 4^k , gde je k broj primenjenih iterativnih koraka. Kako je iterativna primena izvedene rekurzivne formule u praksi otežana eksponencijalnim povećanjem složenosti dobijenih izraza za efektivna dejstva, ovaj problem je rešen linearizacijom rekurzivne formule. Ukoliko se u formulama za efektivno dejstvo zadržimo samo na linearnim popravkama po dužini vremenskog koraka ϵ , tada su dobijeni izrazi mnogo jednostavniji i mogu se eksplicitno rešiti za sve konkretne fizičke modele. Treba primetiti da je procedura linearizacije rekurzivne formule (za malu vrednost vremenskog koraka ϵ) usaglašena sa osnovnom aproksimacijom na kojoj je zasnovana opšta metoda Gausovog polovljenja. Analizom rezultata numeričkih simulacija pokazano je da je primena linearizovane rekurzivne formule opravdana, kao i da linearizacija unosi grešku reda $1/N^2$, istog reda kao i korišćenje Gausove aproksimacije. Egzaktno rešavanje linearizovane rekurzivne formula omogućilo nam je i da nađemo efektivno dejstvo koje odgovara limesu koji se dobija kada broj iterativnih koraka teži beskonačnosti, a pokazali smo da je konvergencija koju obezbeđuje ovakvo efektivno dejstvo kvadratna za opšti funkcionalni integral. Sama priroda Gausove aproksimacije je sprečavala dalje sistematsko poboljšanje ovog rezultata, a



Slika 3.2: Ilustracija polovljenja broja podeonih tačaka u diskretizaciji funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Skup svih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove $Q(t_\alpha) = Q_0 = \alpha$ i $Q(t_\beta) = Q_{2N} = \beta$ se prvo aproksimira skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od $2N$ segmenata. Nakon toga, posle integracije po neparnim koordinatama, skup svih trajektorija u novom funkcionalnom integralu aproksimiran je skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od N segmenata.

uopštenje opisanog pristupa na višestruke sisteme je takođe predstavljalo značajan problem. U ovom radu je predstavljen novi metod koji je inspirisan Gausovim polovljenjem, a koji uspešno rešava sve pomenute teškoće.

4

Metod polovljenja za efektivna dejstva u $d = 1$

Novi pristup uopštavanju Gausovog polovljenja izložen u ovom poglavlju omogućava analitičko izvođenje hijerarhije efektivnih dejstava koja sistematski ubrzavaju konvergenciju funkcionalnih integrala u $d = 1$ prostornih dimenzija za jednočestične sisteme [7, 8, 9]. Od tipične $1/N$ konvergencije, nova dejstva ubrzavaju konvergenciju na $1/N^p$, gde je p prirodan broj koji nije apriori ograničen. Ovo uopštenje je bazirano na razvoju u red dejstva i zadržavanju svih članova koji daju doprinose veće ili jednake odgovarajućem stepenu od $1/N$, što ujedno određuje i broj p . Korišćenjem pristupa opisanog u ovom poglavlju izvedena su efektivna dejstva do nivoa konvergencije $p = 9$. Metodi za analitičko izvođenje efektivnih dejstava koji se mogu primeniti na višestestične sisteme u proizvoljnom broju dimenzija i za veće vrednosti nivoa p su izloženi u narednim poglavljima.

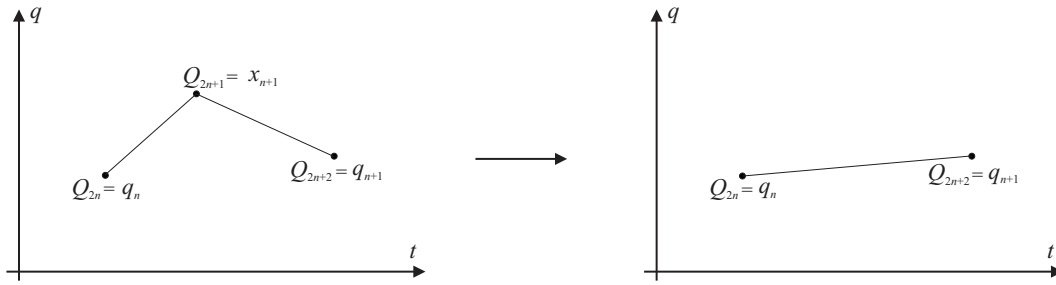
4.1 Integralna jednačina za idealni efektivni potencijal

Kao što je pomenuto u prethodnom poglavlju, proučavanje odnosa između različitih diskretizacija je omogućilo [5] ubrzavanje konvergencije opštih funkcionalnih integrala sa $1/N$ na $1/N^2$. Osnovna ideja je prikazana na slici 3.2 iz prethodnog poglavlja. Prelazak sa diskretizacije sa $2N$ podeonih tačaka na diskretizaciju sa N podeonih tačaka se postiže tako što se u funkcionalnom integralu izvrše integracije po svim neparnim koordinatama. Uz oznake sa slike 3.2, $2N$ -diskretizovano dejstvo se transformiše u N -diskretizovano efektivno dejstvo prema sledećoj relaciji:

$$e^{-\tilde{S}_N} = \left(\frac{2}{\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dx_1 \cdots dx_N e^{-S_{2N}}. \quad (4.1)$$

Ovde je S_{2N} originalno diskretizovano dejstvo u $2N$ -diskretizaciji, a \tilde{S}_N je efektivno diskretizovano dejstvo koje u N -diskretizaciji daje iste vrednosti za amplitudu kao i originalno diskretizovano dejstvo u $2N$ -diskretizaciji. Kao i na slici 3.2, koordinate u $2N$ -diskretizaciji Q_0, Q_1, \dots, Q_{2N} su prepisane kao q i x koordinate na sledeći način: $Q_{2k} = q_k$ i $Q_{2k-1} = x_k$. Ovo je ilustrovano na slici 4.1. Sada je $q_0 = \alpha$, $q_N = \beta$, dok preostalih $N - 1$ koordinata q igra ulogu dinamičkih promenljivih u N -diskretizovanoj teoriji.

Naravno, jasno je da je integracije u jednačini (4.1) teško izvesti egzaktno, pošto je to u praksi moguće samo za teorije za koje je funkcionalni integral moguće rešiti u opštem slučaju. Međutim, čak i kada bi bilo moguće egzaktno rešiti gornje integrale, funkcionalna forma



Slika 4.1: Ilustracija smene promenljivih pre prelaska na integraciju po neparnim koordinatama $Q_1 = x_1, Q_3 = x_2, \dots, Q_{2N-1} = x_N$. Posle integracije ostaju samo parne koordinate, koje su sada označene sa $Q_0 = q_0 = \alpha, Q_2 = q_1, \dots, Q_{2N} = q_N = \beta$.

dejstva S_N i efektivnog dejstva \tilde{S}_N ne bi bila ista, pa ovaj proces ne bi bilo moguće iterirati na opisani način. Ovaj problem se lako rešava ako se prisetimo ranije uvedenog pojma idealnog diskretizovanog efektivnog dejstva S_N^* . Naime, ovo dejstvo ima isti funkcionalni oblik i u N i u $2N$ -diskretizaciji,

$$S_N^* = \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) \right), \quad (4.2)$$

$$S_{2N}^* = \sum_{n=0}^{2N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_{2N}} + \epsilon_{2N} W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_{2N}) \right), \quad (4.3)$$

a vrednosti funkcionalnih integrala izračunate korišćenjem ovih diskretizacija su jednake, jer su to zapravo vrednosti funkcionalnih integrala u kontinuum limesu, po definiciji idealnog dejstva. Dakle, za idealno diskretizovano efektivno dejstvo dobijamo jednačinu

$$e^{-S_N^*} = \left(\frac{2}{\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dx_1 \cdots dx_N e^{-S_{2N}^*}, \quad (4.4)$$

koja se može iskoristiti za nalaženje S_N^* . Nakon zamene definicija (4.2) i (4.3) u gornju jednačinu, dobijamo jednačinu za idealni efektivni potencijal W u obliku,

$$e^{-\epsilon_N W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N)} = \left(\frac{2}{\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_N} y^2\right) G\left(\bar{q}_n + y; q_n, q_{n+1}, \frac{\epsilon_N}{2}\right), \quad (4.5)$$

gde smo uveli novu oznaku

$$-\frac{2}{\epsilon_N} \ln G(x; q_n, q_{n+1}, \epsilon_N) = W\left(q_{n+1} - x, \frac{q_{n+1} + x}{2}; \epsilon_N\right) + W\left(x - q_n, \frac{x + q_n}{2}; \epsilon_N\right). \quad (4.6)$$

Ova integralna jednačina može da se reši egzaktno za neke posebne slučajeve. Na primer, lako se vidi da je $W = 0$ rešenje jednačine, i da ovo rešenje odgovara slobodnoj čestici. Takodje, može se pokazati da je opšta kvadratna forma rešenje jednačine (4.5), i da uz uslove koji slede iz te jednačine dobijamo rešenje koje je konzistentno sa ranije nađenim izrazom (3.21) za harmonijski oscilator.

Naravno, opšte rešenje integralne jednačine (4.5) nije moguće naći, pošto bi to odgovaralo egzaktnom rešavanju proizvoljne kvantne teorije. Međutim, rešavanju gornje jednačine se može pristupiti aproksimativno i na taj način izračunati idealno efektivno dejstvo u razvoju po pogodno odabranom parametru. Primetimo da je sam oblik jednačine (4.5) odlično prilagođen za primenu asimptotske ekspanzije [45] po vremenskom koraku ϵ .

4.2 Ojlerova sumaciona formula za funkcionalne integrale

Rešavanje integralne jednačine (4.5) primenom asimptotske ekspanzije daće nam razvoj idealnog diskretizovanog potencijala (odnosno efektivnog dejstva) po stepenima vremenskog koraka ϵ_N . Dakle, ako ovu jednačinu rešimo konzistentno zadržavajući sve članove koji daju doprinose do reda ϵ_N^{p-1} u efektivnom potencijalu, dobićemo $\epsilon_N^p \sim 1/N^p$ konvergenciju diskretizovanih funkcionalnih integrala računatih pomoću takvog efektivnog dejstva.

Vremenski korak ϵ_N će biti mali parametar u asimptotskoj ekspanziji, potpuno paralelno ulozi koju Plankova konstanta \hbar ima u semiklasičnoj ekspanziji (ekspanziji po petljama). Naravno, ovo podrazumeva da važi $\epsilon_N < 1$, odnosno $T < N$, što možemo uvek da postignemo povećavajući vrednost N . Kao i u semiklasičnoj ekspanziji, prvi korak je Tejlorov razvoj izraza $G(\bar{q}_n + y; q_n, q_{n+1}, \frac{\epsilon_N}{2})$ oko tačke \bar{q}_n po prvom argumentu i rešavanje dobijenih Gausovih integrala (i odgovarajućih momenata). Nakon zamene redosleda integracije i sumiranja u Tejlorovom redu, dobijamo

$$e^{-\epsilon_N W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N)} = \left(\frac{2}{\pi \epsilon_N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{G^{(k)}(\bar{q}_n; q_n, q_{n+1}, \frac{\epsilon_N}{2})}{k!} \int_{-\infty}^{+\infty} dy y^k \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_N} y^2\right),$$

gde oznaka $G^{(k)}(x; q_n, q_{n+1}, \epsilon_N)$ predstavlja k -ti izvod funkcije $G(x; q_n, q_{n+1}, \epsilon_N)$ po promenljivoj x . Odavde direktno sledi

$$W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) = -\frac{1}{\epsilon_N} \ln \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{G^{(2k)}(\bar{q}_n; q_n, q_{n+1}, \frac{\epsilon_N}{2})}{(2k)!!} \left(\frac{\epsilon_N}{4}\right)^k \right], \quad (4.7)$$

gde se na desnoj strani jednakosti sa promenljivih q_n i q_{n+1} smenom pređe na promenljive $\delta_n = q_{n+1} - q_n$ i $\bar{q}_n = (q_n + q_{n+1})/2$.

Dalja primena asimptotske ekspanzije podrazumeva razvoj idealnog efektivnog potencijala u red po diskretizovanim brzinama δ_n , koji ima oblik dat jednačinom (3.18),

$$W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) = \sum_{k=0}^{\infty} \delta_n^{2k} g_k(\bar{q}_n; \epsilon_N). \quad (4.8)$$

Ovaj razvoj se direktno koristi u levoj strani jednačine (4.7), ali takođe i u desnoj strani ove jednačine, kroz definiciju funkcije G . Na osnovu izraza (4.6) sledi da funkcija G sada ima oblik

$$\begin{aligned} -\frac{2}{\epsilon_N} \ln G(x; q_n, q_{n+1}, \epsilon_N) &= \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left[(q_{n+1} - x)^{2k} g_k\left(\frac{q_{n+1} + x}{2}; \epsilon_N\right) + (x - q_n)^{2k} g_k\left(\frac{x + q_n}{2}; \epsilon_N\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Sve što preostaje je računanje izvoda funkcije G u tački \bar{q}_n na osnovu gornjeg izraza, uz istovremeni razvoj u red funkcija g_k oko \bar{q}_n . Nakon zamene dobijenih izraza u jednačinu (4.7) i razvoja njene leve strane u red po diskretizovanim brzinama δ_n , identifikacijom članova koji stoje uz iste stepene od δ_n se dobijaju jednačine za funkcije g_k . Ovo je jednostavno i pravolinijsko izvođenje, ali tehnički veoma zahtevno.

Ključan korak za konzistentno rešavanje gornjih jednačina na željenom nivou p je uzimanje u obzir svih članova koji daju doprinos do reda ϵ_N^{p-1} u efektivnom potencijalu, odnosno do reda ϵ_N^p u efektivnom dejstvu. Za ovo je neophodno uporediti po stepenu malosti kvadrat diskretizovane brzine δ_n^2 i vremenski korak ϵ_N . Poznato je da za kratka vremena propagacije važi $\delta_n^2 \propto \epsilon_N$, pošto se tada potencijal može zanemariti u odnosu na kinetički član¹⁹ i dobijamo slobodnu difuziju [34]. Ovo znači da za zadati nivo p treba da izračunamo funkcije g_k za $k = 0, 1, \dots, p-1$. Funkcija g_p je u izrazu za efektivni potencijal pomnožena sa $\delta_n^{2p} \propto \epsilon_N^p$, pa se njen doprinos može zanemariti. Prilikom izvođenja jednačina za funkcije g_k takođe treba uzeti u obzir i do kog stepena po ϵ_N treba ići za dato k . Koristeći istu logiku kao i za određivanje koje funkcije g_k su relevantne na datom nivou p , zaključujemo da jednačinu za g_k treba napisati do članova ϵ_N^{p-k-1} . Dakle, jednačina za funkciju g_0 će sadržati sve stepene od ϵ_N^0 do ϵ_N^{p-1} , razvoj za g_1 će imati stepene od ϵ_N^0 do ϵ_N^{p-2} , dok će razvoj za poslednju relevantnu funkciju g_{p-1} imati samo član proporcionalan sa ϵ_N^0 , tj. multi član u razvoju.

Ilustrovaćemo ovu proceduru za računanje idealnog efektivnog dejstva tako što ćemo dati izraze koji odgovaraju razvoju u red do $p = 3$. Jednačine za funkcije g_0, g_1 i g_2 koje se dobijaju u ovom slučaju su date sa

$$\begin{aligned}
g_0(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= g_0\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \epsilon_N \left[\frac{1}{4}g_1\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{1}{32}g_0''\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) \right] + \\
&+ \epsilon_N^2 \left[\frac{3}{16}g_2\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) - \frac{1}{32}g_0'^2\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{1}{2048}g_0^{(4)}\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{3}{128}g_1''\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) \right], \\
g_1(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= \frac{1}{4}g_1\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{1}{32}g_0''\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \\
&+ \epsilon_N \left[\frac{3}{8}g_2\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{1}{1024}g_0^{(4)}\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) - \frac{1}{64}g_1''\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) \right], \\
g_2(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= \frac{1}{16}g_2\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{1}{6144}g_0^{(4)}\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right) + \frac{1}{128}g_1''\left(\bar{q}_n; \frac{\epsilon_N}{2}\right). \tag{4.10}
\end{aligned}$$

Primetimo da je zbog konzistentnost u ovim jednačinama funkcija g_0 data u razvoju u red do na ϵ_N^2 , funkcija g_1 do na ϵ_N , a funkcija g_2 do na ϵ_N^0 , kao što smo ranije i objasnili.

Izvođenje jednačina za funkcije g_k za visoke vrednosti nivoa p je tehnički veoma zahtevno, i najefikasniji način za rešavanje ovog problema je da se procedura automatizuje uz pomoć nekog od paketa za simbolički račun, kao što je Mathematica [12]. U dodatku B je dat Mathematica program koji su autori razvili i koristili za računanje efektivnih dejstava višeg reda.

Iako je dobijeni sistem jednačina za funkcije g_k nelinearan, veoma ga je lako rešiti ako se prisetimo da je izveden asimptotskim razvojem u red po ϵ_N . Imajući ovo na umu, svaku od funkcija g_k ćemo takođe napisati kao razvoj u red po stepenima od ϵ_N , u skladu sa

¹⁹Ovde se podrazumeva da potencijal nije singularan, pošto tada skaliranje $\delta_n^2 \propto \epsilon_N$ ne bi važilo. U ovom radu se ograničavamo na potencijale koji su glatki i diferencijabilni potreban broj puta, tako da se za dovoljno kratko vreme propagacije dobija slobodna difuzija.

razmatranim nivoom p , odnosno funkcija g_k će imati članove proporcionalne ϵ_N^0 do ϵ_N^{p-k-1} ,

$$g_k(\bar{q}_n; \epsilon_N) = \sum_{m=0}^{p-k-1} \epsilon_N^m g_{km}(\bar{q}_n) \quad (k = 0, \dots, p-1). \quad (4.11)$$

Primetimo da granični uslov $g_{00}(\bar{q}_n) = V(\bar{q}_n)$ mora uvek da bude ispunjen, pošto u limesu $\delta_n^2 \rightarrow 0$ i $\epsilon_N \rightarrow 0$ mora da važi

$$W(0, \bar{q}_n; 0) = V(\bar{q}_n),$$

kao što je ranije objašnjeno kod jednačine (3.19). Za $p = 3$ imamo

$$\begin{aligned} g_0(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= V(\bar{q}_n) + \epsilon_N g_{01}(\bar{q}_n) + \epsilon_N^2 g_{02}(\bar{q}_n), \\ g_1(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= g_{10}(\bar{q}_n) + \epsilon_N g_{11}(\bar{q}_n), \\ g_2(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= g_{20}(\bar{q}_n). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Kada ove razvoje zamenimo u jednačine (4.10), možemo da nađemo sve neophodne funkcije g_{km} izražene preko potencijala V i njegovih izvoda. Rešenje na nivou $p = 3$ je dato sa

$$\begin{aligned} g_0(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= V(\bar{q}_n) + \epsilon_N \frac{V''(\bar{q}_n)}{12} + \epsilon_N^2 \left[-\frac{V'(\bar{q}_n)^2}{24} + \frac{V^{(4)}(\bar{q}_n)}{240} \right], \\ g_1(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= \frac{V''(\bar{q}_n)}{24} + \epsilon_N \frac{V^{(4)}(\bar{q}_n)}{480}, \\ g_2(\bar{q}_n; \epsilon_N) &= \frac{V^{(4)}(\bar{q}_n)}{1920}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

U dodatku A je dato efektivno dejstvo za više vrednosti nivoa p . Korišćenjem ovog metoda autori su izveli efektivna dejstva za opštu jednočestičnu teoriju u jednoj prostornoj dimenziji do nivoa $p = 9$. Veće vrednosti nivoa konvergencije p mogu se postići pomoću pristupa opisanog u narednim poglavljima.

Kao što smo već napomenuli, funkcije g_k , a samim tim i efektivni potencijal W , zavise od potencijala V i njegovih izvoda. Kada su nam poznate funkcije g_k relevantne za određeni nivo konvergencije p , tada lako konstruišemo i odgovarajuće efektivno dejstvo. Ako sa $S^{(p)}$ označimo idealno efektivno dejstvo S^* razvijeno u red po vremenskom koraku ϵ_N na nivou konvergencije p , tada je

$$S_N^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N \sum_{k=0}^{p-1} \delta_n^{2k} g_k(\bar{q}_n; \epsilon_N) \right] \quad (4.14)$$

Efektivno diskretizovano dejstvo $S^{(p)}$ ima ključnu osobinu da N -diskretizovane amplitude izračunate pomoću njega imaju garantovanu konvergenciju kao ϵ_N^p ,

$$A_N^{(p)}(\alpha, \beta; T) = A(\alpha, \beta; T) + O(\epsilon_N^p). \quad (4.15)$$

Ako ovo uporedimo sa jednačinom (3.7), vidimo da smo izveli uopštenje Ojlerove sumacione formule za funkcionalne integrale. Kao i kod Ojlerove formule za obične integrale, ona daje vezu između kontinualnih vrednosti funkcionalnih integrala i odgovarajućih diskretizovanih vrednosti do na željenu preciznost.

Ovde je važno skrenuti pažnju da se rešavanje gornjih jednačina može izvesti samo jednom za dati nivo p , a pošto potencijal V nije specificiran, dobijeni rezultati će važiti za

proizvoljnu kvantnu teoriju. Jedini zahtev je da je potencijal V diferencijabilan najmanje $2p - 2$ puta, pošto se može pokazati [8] da dejstvo $S^{(p)}$ u opštem slučaju sadrži sve izvode potencijala V do reda $2p - 2$. Efektivna dejstva za veće vrednosti nivoa p su algebarski kompleksnija, ali ova kompleksnost izraza je kompenzovana velikim dobitkom u brzini konvergencije koja se dobija. Ovo će biti detaljnije analizirano u poglavlju koje daje rezultate numeričkih simulacija baziranih na korišćenju izvedenih efektivnih dejstava.

4.3 Očekivane vrednosti i estimatori u $d = 1$

Pre nego što uopštimo izloženi metod za ubrzavanje konvergencije funkcionalnih integrala na važan slučaj očekivanih vrednosti [46], ukratko ćemo predstaviti standardnu proceduru za računanje očekivanih vrednosti u funkcionalnom formalizmu. Kanonska particiona funkcija u statističkoj mehanici se može zapisati kao

$$Z(\beta_t) = \text{Tr} e^{-\beta_t \hat{H}} = \int dq A(q, q; \beta_t) = \int_{q(0)=q(\beta_t)} [dq(t)] e^{-S[q(t)]}, \quad (4.16)$$

odnosno kao integral po svim dijagonalnim amplitudama, gde Bolcmanov faktor β_t sada igra ulogu vremena propagacije T , a integrali se po svim periodičnim trajektorijama koje zadovoljavaju uslov $q(t) = q(t + \beta)$, dok je $\epsilon_N = \beta_t/N$. Iz ove jednačine direktno dobijamo diskretizovanu verziju particione funkcije,

$$Z_N(\beta_t) = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_0 dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{-S_N}, \quad (4.17)$$

koja u kontinuum limesu ovog N -tostrukog integrala daje vrednost particione funkcije Z . Uslov periodičnosti $q(t) = q(t + \beta)$ se u diskretizovanoj verziji svodi na granični uslov $q_N = q_0$. Očekivana vrednost fizičke veličine O je sada definisana kao (termalna) srednja vrednost

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z(\beta_t)} \int_{q(0)=q(\beta_t)} [dq(t)] O[q(t)] e^{-S[q(t)]}.$$

odnosno u diskretizovanoj verziji,

$$\langle O \rangle_N = \frac{1}{Z_N(\beta_t)} \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_0 dq_1 \cdots dq_{N-1} O(q_0, q_1, \dots, q_{N-1}) e^{-S_N}. \quad (4.18)$$

Funkcija $O(q_0, q_1, \dots, q_{N-1})$ koja se pojavljuje u diskretizovanom izrazu za očekivanu vrednost se zove estimator za funkciju O . Imajući u vidu da je na nivou $p = 1$, odnosno u slučaju bez ikakvih ubrzavanja konvergencije²⁰,

$$S_N = \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N V(\bar{q}_n) \right) = \frac{\beta_t}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N^2} + V(\bar{q}_n) \right),$$

naivno bismo očekivali da su estimatori za termalne očekivane vrednosti kinetičke i potencijalne energije na nivou $p = 1$ dati redom izrazima

$$\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N^2}, \quad \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} V(\bar{q}_n),$$

²⁰U našim oznakama, $p = 1$ efektivno dejstvo odgovaraju standardnom naivnom dejstvu u preskripciji srednje tačke.

a da je estimator za termalnu očekivanu vrednost energije dat njihovim zbirom. Pokazaćemo prvo da ovo nije (u potpunosti) tačno i izvešćemo korektne izraze za ove estimatore na nivou $p = 1$, a zatim i odgovarajuće poboljšane izraze, koji će dati ubrzanu konvergenciju kada se koriste uz ranije izvedena efektivna dejstva na odgovarajućem nivou p .

Ako se podsetimo da u srednjem važi $\delta_n^2 \propto \epsilon_N$, vidimo da se gornji izraz za koji smo pretpostavili da može da se koristi kao estimator za kinetičku energiju ponaša kao $N/2T$, odnosno da u $N \rightarrow \infty$ limesu divergira. Lako se može videti i numerički da korišćenje ovakvog estimatora daje vrednosti koje divergiraju proporcionalno sa N . Ovaj problem se može rešiti ako uzmemo u obzir jednačinu

$$U = -\frac{1}{Z(\beta_t)} \frac{\partial}{\partial \beta_t} Z(\beta_t) = -\frac{\partial}{\partial \beta_t} \ln Z(\beta_t), \quad (4.19)$$

gde smo sa U označili termalnu očekivanu vrednost energije sistema. Iz ove jednačine direktno sledi i diskretizovana verzija,

$$U_N(\beta_t) = -\frac{\partial}{\partial \beta_t} \ln Z_N(\beta_t). \quad (4.20)$$

Pošto je $\beta_t = N\epsilon_N$, prilikom diferenciranja moramo da koristimo relaciju $\frac{\partial}{\partial \beta_t} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \epsilon_N}$. Ako ovo uzmemo u obzir, dobijamo

$$U_N(\beta_t) = \frac{1}{Z_N(\beta_t)} \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_0 \dots q_{N-1} \left[\frac{1}{2\epsilon_N} + \frac{\partial S_N}{\partial \epsilon_N} \right] e^{-S_N}. \quad (4.21)$$

Nakon diferenciranja, za korektnu vrednost estimatora očekivane energije sistema dobijamo

$$E_K(q_0, \dots, q_{N-1}) = \frac{N}{2T} - \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N^2} + \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} V(\bar{q}_n).$$

Ovaj izraz daje $p = 1$ estimator, odnosno kada se koristi za računanje diskretizovanih očekivanih vrednosti energije prema formuli (4.18) uz korišćenje efektivnog $p = 1$ dejstva daje $1/N$ konvergenciju ka kontinuum očekivanoj vrednosti energije. Iz gornjeg izraza vidimo i da je korektan estimator za kinetičku energiju dat sa

$$K_K(q_0, \dots, q_{N-1}) = \frac{N}{2T} - \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N^2}.$$

Divergentni član proporcionalan sa $N/2T$ se eksplicitno uklanja iz estimatora, i na osnovu izvođenja vidimo da će razlika imati željeno ponašanje, odnosno ispravan $N \rightarrow \infty$ limes. Estimator za potencijalnu energiju na nivou $p = 1$ nije potrebno modifikovati, on ima ranije navedeni oblik $\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} V(\bar{q}_n)$. Pošto su gornji estimatori za energiju izvedeni korekcijom člana koji se odnosi na kinetičku energiju, ovakvi estimatori se u literaturi uopšteno zovu kinetički, pa smo ih zato označili sa E_K i K_K . Kao što vidimo, korekcija koja uklanja divergenciju estimatora je došla iz mere funkcionalnog integrala, koja zavisi od vremenskog koraka ϵ_N na netrivialan način. Ovo još jednom ukazuje na bitnu razliku između običnih višestrukih integrala i funkcionalnih integrala.

Popravljenosti kinetičkih estimatora na nivou p mogli bismo da izvedemo slično kao i gore, s tim da bismo u jednačini (4.21) koristili efektivno dejstvo $S^{(p)}$. Međutim, ovo nije od praktičnog interesa, jer kinetički estimatori u numeričkim simulacijama pokazuju

jedan značajan problem. Iako u limesu daje tačnu vrednost očekivane energije, pošto je definisan kao razlika dve divergentne veličine, njegova varijansa divergira. U standardnom Monte Karlo metodu se varijansa koristi za ocenu greške dobijenim srednjih vrednosti, što znači da pri korišćenju kinetičkih estimatora nemamo mogućnost procene i kontrole grešaka. Ovo automatski diskvalifikuje ovaj metod iz ozbiljnijih primena. Na sreću, relativno lako je moguće uvesti estimatore koji nemaju ovakav problem [47, 48, 49, 50, 51]. Ovakvi estimatori se nazivaju virijalni, pošto počivaju na korišćenju virijalne teoreme,

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{x} V'(\hat{x}) \rangle. \quad (4.22)$$

Da bismo izveli virijalnu teoremu u funkcionalnom formalizmu, reskaliraćemo koordinate u jednačini (4.17) na sledeći način: $q_n \rightarrow \mu q_n$. Ako iskoristimo vrednost $\mu^2 = \epsilon_N$, zavisnost od β_t je u potpunosti uklonjena iz mere funkcionalnog integrala,

$$Z_N(\beta_t) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_0 \dots dq_{N-1} \exp \left\{ - \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{\delta_n^2}{2} + \epsilon_N V(\epsilon_N^2 \bar{q}_n) \right] \right\}. \quad (4.23)$$

Ako sada diferenciramo ovaj izraz po β_t uz korišćenje jednakosti $\frac{\partial}{\partial \beta_t} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \epsilon_N}$, na osnovu jednačine (4.20) dobijamo novi, virijalni estimator za očekivanu vrednost energije,

$$E_V(q_0, \dots, q_{N-1}) = \frac{1}{2N} \sum_{n=0}^{N-1} \bar{q}_n V'(\bar{q}_n) + \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} V(\bar{q}_n). \quad (4.24)$$

Kao što smo i želeli, ovaj estimator je zbir članova koji su konačni, bez divergentnih delova koji se uzajamno poništavaju. Zbog toga je i varijansa virijalnog estimatora konačna i može se koristiti za procenu greške i kontrolu numeričkih rezultata.

Opisani postupak izvođenja virijalnog estimatora se može ponoviti i kada se u izrazu za particionu funkciju umesto naivnog $p = 1$ dejstva koristi efektivno diskretizovano dejstvo $S_N^{(p)}$ [46]. Na primer, na nivou $p = 2$ efektivno dejstvo je dato izrazom

$$S_N^{(p=2)} = \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N V(\bar{q}_n) + \frac{\epsilon_N^2}{12} V'(\bar{q}_n) + \frac{\delta_n^2}{24} V''(\bar{q}_n) \right], \quad (4.25)$$

pa koristeći gornju proceduru sa reskaliranjem koordinata q , za efektivni virijalni estimator na nivou $p = 2$ dobijamo

$$E_V^{(p=2)}(q_0, \dots, q_{N-1}) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[V_n + \frac{\bar{q}_n}{2} V'_n + \frac{\epsilon_N}{6} V''_n + \frac{\delta_n^2}{12} V''_n + \frac{\bar{q}_n \epsilon_N}{24} V'''_n + \frac{\bar{q}_n \delta_n^2}{48} V'''_n \right], \quad (4.26)$$

gde smo zbog jednostavnosti uveli oznaku $V_n \equiv V(\bar{q}_n)$ i slično za više izvode.

Za više vrednosti p opisana procedura se može ponoviti na sličan način. Dobijeni izrazi za efektivne estimatore postaju komplikovaniji, pa je najjednostavnije napisati program za ovo izvođenje u nekom od paketa za simbolički račun. U dodatku B je dat Mathematica program koji su razvili autori, kao i izrazi za efektivne estimatore za očekivanu vrednost energije za više vrednosti nivoa konvergencije p . Kada se ovakvi estimatori koriste, zajedno sa odgovarajućim efektivnim dejstvom za isti nivo p , dobijene diskretizovane vrednosti očekivanih energija imaju očekivanu ubrzanu konvergenciju,

$$U_N^{(p)}(\beta_t) = U(\beta_t) + O(\epsilon_N^p). \quad (4.27)$$

Za izvođenje efektivnih estimatora za druge veličine (kao što je toplotni kapacitet, susceptibilnost itd.) može se primeniti isti metod, baziran na korišćenju popravljene efektivnog dejstva $S^{(p)}$. Ovo će biti jedna od naših budućih istraživačkih tema.

5

Efektivna dejstva i kratkovremeni propagator

U prethodnom poglavlju predstavljen je metod koji omogućava izvođenje efektivnih dejstava za jednočestične teorije u $d = 1$ prostornih dimenzija. Ova dejstva daju ubrzanu konvergenciju $1/N^p$, gde prirodan broj p nije principijelno ograničen i zavisi od toga koliko daleko želimo da idemo u analitičkom izvođenju, pošto izrazi za efektivna dejstva postaju sve kompleksniji. Iako je ovaj metod prevazišao ograničenja koja su postojala u originalnom Gausovom polovljenju, uopštavanje novog metoda na višečestične teorije u proizvoljnom broju dimenzija je daleko od očiglednog. Zbog toga ćemo u ovom poglavlju predstaviti novi metod za izvođenje efektivnih dejstava koji je od početka formulisan upravo za višečestične fizičke sisteme [10]. Ovaj metod je baziran na korišćenju razvoja za kratkovremeni (short-time) propagator i pomoću njega su autori izveli opšte višečestično efektivno dejstvo do nivoa konvergencije $p = 5$. U narednom poglavlju biće predstavljen rekurzivni pristup koji omogućava izvođenje efektivnih višečestičnih dejstava do viših vrednosti nivoa p .

5.1 Idealno dejstvo kao očekivana vrednost

U ovoj sekciji ćemo idealno efektivno dejstvo za opštu kvantnu teoriju sa M različitih čestica u d prostornih dimenzija izraziti kao zbir efektivnih dejstava za kratko vreme propagacije, od kojih se svako može napisati kao odgovarajuća očekivana vrednost u funkcionalnom formalizmu i nakon toga računati u aproksimaciji malog ϵ_N , kao razvoj u red. Ograničićemo se na proučavanje teorija čiji hamiltonijan ima oblik²¹

$$\hat{H} = \sum_{\ell=1}^M \frac{\hat{p}_{\ell}^2}{2} + \hat{V}(\{\hat{q}\}), \quad (5.1)$$

što obuhvata veliki broj fizički relevantnih modela. Međutim, kao što ćemo videti iz izvođenja, ovaj metod se u principu može primeniti na sve kvantne teorije. Primetimo da se efekti nerazličivosti čestica uzimaju u obzir u numeričkim simulacijama eksplicitnom implementacijom permutacija graničnih uslova (što odgovara fizičkim permutacijama čestica i obezbeđuje njihovu nerazličivost), tako da to nije neophodno razmatrati na nivou efektivnog dejstva. Drugim rečima, ovaj pristup je baziran na formalizmu prve kvantizacije.

²¹Reskaliranjem promenljivih u teoriji se mase svih čestica mogu postaviti na jediničnu vrednost, a kasnije, ako je to neophodno, ponovo vratiti u sve izraze korišćenjem dimenzione analize. Zbog toga ćemo od početka koristiti sistem jedinica u kome su mase svih čestica jednake jedinici.

Za razmatranu klasu teorija, naivno dejstvo ima oblik

$$S_N = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left(\sum_{\ell=1}^M \frac{1}{2} \left(\frac{\delta_{n,\ell}}{\epsilon} \right)^2 + V(\bar{q}_n) \right), \quad (5.2)$$

a naivna diskretizovana amplituda je data sa

$$A_N(\alpha, \beta; T) = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{dMN}{2}} \int dq_1 \dots dq_{N-1} e^{-S_N}. \quad (5.3)$$

Pri tome smo uveli oznake u kojima vektori sa jednim indeksom (na primer, q_n) predstavljaju skup pozicija svih čestica nakon n vremenskih koraka dužine ϵ_N , dok vektori sa dva indeksa (na primer, $q_{n,\ell}$) predstavljaju d -dimenzionalne položaje odgovarajućih čestica u specificiranom trenutku. Vektori sa jednim indeksom imaju dimenziju dM , dok vektori sa dva indeksa imaju dimenziju d . Drugim rečima, prvi indeks (n) se odnosi na diskretizaciju po vremenu, a drugi (ℓ , ako ga ima) određuje česticu. Takođe smo uveli odgovarajuće diskretizovane brzine $\delta_{n,\ell} = q_{n+1,\ell} - q_{n,\ell}$ i srednje tačke $\bar{q}_{n,\ell} = (q_{n,\ell} + q_{n+1,\ell})/2$, odnosno u notaciji sa jednim indeksom, $\bar{q}_n = (q_n + q_{n+1})/2$. Dakle, u ovoj kompaktoj notaciji možemo da zamislamo konfiguraciju kvantnog sistema u datom trenutku vremena kao jedan vektor q čijih dM komponenti q_i ($i = 1, \dots, dM$) predstavljaju redom koordinate svih M čestica sistema. Limes $N \rightarrow \infty$ gornje diskretizovane amplitude simbolički zapisan kao funkcionalni integral

$$A(\alpha, \beta; T) = \int_{q(0)=a}^{q(T)=b} [dq] e^{-S[q(t)]}. \quad (5.4)$$

i predstavlja (euklidsku) amplitudu za prelazak iz stanja $|a\rangle$ u stanje $|b\rangle$, gde su a i b vektori u dM -dimenzionalnom konfiguracijonom prostoru položaja čestica koji smo upravo uveli.

Standardna definicija gornjeg funkcionalnog integrala kao kontinuum limesa diskretizovanih amplituda (5.2) sledi iz relacije kompletnosti (dekompozicije jedinice),

$$A(\alpha, \beta; T) = \int dq_1 \dots dq_{N-1} A(a, q_1; \epsilon_N) \dots A(q_{N-1}, b; \epsilon_N), \quad (5.5)$$

u kojoj se kratkovremene amplitude $A(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N)$ računaju do prvog reda po vremenskom koraku ϵ_N . Kao što je ranije objašnjeno, ovo dovodi i do spore $1/N$ konvergencije diskretizovanih funkcionalnih integrala ka kontinuum vrednostima. Brža konvergencija se može dobiti ako se kratkovremene amplitude izračunaju kao razvoj u red po ϵ_N do viših stepena. Iz gornje relacije kompletnosti sledi da je idealno efektivno dejstvo, koje daje egzaktnu propagaciju za proizvoljan broj vremenskih koraka, određeno idealnim kratkovremenim efektivnim dejstvima S_n^* , definisanim pomoću kratkovremenih amplituda prema relaciji

$$A(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N) = (2\pi\epsilon_N)^{-\frac{dM}{2}} e^{-S_n^*(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N)}. \quad (5.6)$$

Sada je idealno diskretizovano dejstvo za propagaciju za ukupno vreme T dato zbirom članova S_n^* :

$$S_N^* = \sum_{n=0}^{N-1} S_n^*(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N). \quad (5.7)$$

Na prvi pogled bi se reklo da ovakva dekompozicija nije naročito korisna, pošto se jednačina (5.6) može napisati direktno i za propagaciju za vreme T . Međutim, podela

vremena propagacije na N koraka omogućava da dobijemo mali parametar $\epsilon_N = T/N$, i da kratkovremeno efektivno dejstvo S_n^* razvijemo u red po ovom parametru. Uslov $\epsilon_N < 1$, odnosno $T < N$ se može uvek postići pogodnim izborom broja koraka u diskretizaciji N . Izvođenje koje će ovde biti prikazano je inspirisano izvođenjem semiklasične aproksimacije u poznatoj Klajnartovoj knjizi [34]. Primetimo da se problemu rešavanja jednačine (5.6) može pristupiti i korišćenjem drugih aproksimativnih šema, posebno u situacijama kada aproksimacija kratkog vremena propagacije nije odgovarajuća. Primena Fajnman-Klajnartovog varijacionog metoda [52, 53], koja je dalje razvijena u radovima [54, 55, 56, 57, 58], predstavlja interesantan pravac za dalje istraživanje.

Kao što smo već rekli, ubrzanu $1/N^p$ konvergenciju funkcionalnih integrala će mo postići računanjem opšte kratkovremene amplitude $A(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N)$ konzistentnim razvojem u red po vremenskom koraku ϵ_N . Da bi to bilo moguće, kratkovremeno idealno efektivno dejstvo ćemo dovesti u oblik očekivane vrednosti u odnosu na teoriju koja opisuje sistem slobodnih čestica. Prvo ćemo uvesti jednostavnu smenu promenljivih u integralu $q = \xi + x$, gde je ξ fiksna referentna trajektorija²²,

$$A(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N) = e^{-S_n[\xi]} \int_{x(-\epsilon_N/2)=0}^{x(\epsilon_N/2)=0} [dx] e^{-\int_{-\epsilon_N/2}^{\epsilon_N/2} ds (\frac{1}{2}\dot{x}^2 + B(x;\xi))}. \quad (5.8)$$

U ovoj jednačini smo takođe pomerili vreme propagacije iz intervala $t \in [n\epsilon_N, (n+1)\epsilon_N]$ u interval $s \in [-\epsilon_N/2, \epsilon_N/2]$. Referentna trajektorija $\xi(s)$ je odabrana tako da zadovoljava iste granične uslove kao i trajektorija $q(t)$, što znači da je nova integraciona promenljiva $x(s)$ jednaka nuli na granicama. Dejstvo $S_n[\xi]$ je definisano kao

$$S_n[\xi] = \int_{-\epsilon_N/2}^{\epsilon_N/2} ds \left(\frac{1}{2}\dot{\xi}^2 + V(\xi) \right), \quad (5.9)$$

gde je

$$B(x; \xi) = V(\xi + x) - V(\xi) - x \cdot \ddot{\xi},$$

a tačke predstavljaju izvode po vremenu s . Kratkovremena amplituda sada može da se napiše kao

$$A(q_n, q_{n+1}; \epsilon_N) = \frac{e^{-S_n[\xi]}}{(2\pi\epsilon_N)^{\frac{Md}{2}}} \left\langle e^{-\int_{-\epsilon_N/2}^{\epsilon_N/2} ds B(x;\xi)} \right\rangle, \quad (5.10)$$

gde $\langle \dots \rangle$ označava očekivanu vrednost u odnosu na dejstvo sistema slobodnih čestica.

Gornja jednačina važi za proizvoljan izbor referentne trajektorije ξ , koja jedino treba da zadovoljava iste granične uslove kao i originalna trajektorija q . Iz jednačina (5.6) i (5.10) sada dobijamo izraz za idealno kratkovremeno efektivno dejstvo

$$S_n^* = S_n[\xi] - \ln \left\langle e^{-\int_{-\epsilon_N/2}^{\epsilon_N/2} ds B(x;\xi)} \right\rangle. \quad (5.11)$$

5.2 Asimptotski razvoj idealnog dejstva

U ovoj sekciji ćemo izračunati očekivanu vrednost u odnosu na dejstvo slobodnih čestica iz jednačine (5.11) razvojem u red po kratkom vremenu propagacije ϵ_N . Klasa teorija koju

²²Vektori q , ξ i x su dM -dimenzionalni vektori, iz ranije uvedenog konfiguracionog prostora sistema M čestica.

razmatramo nema neodređenosti u uređenju, pa različite preskripcije daju isti kontinuum limes. Zbog određenosti, mi ćemo raditi u preskripciji srednje tačke, kao i ranije, ali se sve može uraditi i u drugim preskripcijama, koje možda više odgovaraju nekim konkretnim problemima.

Očekivana vrednost iz jednačine (5.11) se standardno računa razvojem u Tejlorov red po stepenima B :

$$\left\langle e^{-\int ds B(x;\xi)} \right\rangle = 1 - \int ds \langle B(x;\xi) \rangle + \frac{1}{2} \int \int ds ds' \langle B(x;\xi) B(x';\xi') \rangle + \dots \quad (5.12)$$

gde smo uveli skraćene oznake $x' = x(s'), \xi' = \xi(s')$. Nakon razvoja $B(x;\xi)$ u red oko referentne trajektorije ξ , dobijamo

$$B(x;\xi) = x_i \left(\partial_i V(\xi) - \ddot{\xi}_i \right) + \frac{1}{2} x_i x_j \partial_i \partial_j V(\xi) + \dots \quad (5.13)$$

Od sada pa nadalje podrazumevaćemo sumiranje po ponovljenim indeksima. Očekivana vrednost proizvoda $\langle x_i(s) \dots x_j(s') \rangle$ se dalje računa uz pomoć generišućeg funkcionala za slobodnu teoriju, izraženog preko propagatora,

$$\Delta(s, s')_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{\epsilon_N} \theta(s - s') \left(\frac{\epsilon_N}{2} - s \right) \left(\frac{\epsilon_N}{2} + s' \right) + \frac{\delta_{ij}}{\epsilon_N} \theta(s' - s) \left(\frac{\epsilon_N}{2} + s \right) \left(\frac{\epsilon_N}{2} - s' \right), \quad (5.14)$$

gde su δ_{ij} Kronekerovi simboli, a θ je Hevisajdova step-funkcija. Iz gornje jednačine direktno slede rezultati Vikove teoreme, $\langle x_i(s) \rangle = 0$, $\langle x_i(s) x_j(s') \rangle = \Delta(s, s')_{ij}$, itd. Primitimo da je generišući funkcional (a samim tim i sve očekivane vrednosti) nezavisan od izbora referentne trajektorije, odnosno granični uslovi za trajektoriju x su isti za sve izbore referentne trajektorije ξ , pa je propagator uvek dat jednačinom (5.14). Različiti izbori referentne trajektorije ξ pojednostavljaju različite aproksimativne šeme: korišćenje klasične trajektorije za ξ je optimalno za semiklasični razvoj, dok ćemo videti da je izbor linearne referentne trajektorije optimalan za razvoj po kratkom vremenu propagacije.

Sledeći korak je integracija po vremenu s u preostalim integralima. Zbog eksplicitne zavisnosti referentne trajektorije od s , prvo moramo da razvijemo potencijal i sve njegove izvode u jednačini (5.13) u red oko neke odabrane tačke. Izbor \bar{q}_n za ovu tačku odgovara preskripciji srednje tačke. Kada još odaberemo referentnu trajektoriju $\xi(s)$, sve očekivane vrednosti u jednačini (5.10) su izražene preko kvadratura. Izbor linearne referentne trajektorije $\xi(s) = \bar{q}_n + \frac{\delta_n}{\epsilon_N} s$ omogućava da svi integrali mogu da se izračunaju u zatvorenoj formi, što nam dalje daje eksplicitan izraz za idealno efektivno dejstvo.

Pre nego što pređemo na ovo izvođenje, razmotrićemo prvo koje članove u svim izrazima treba zadržati kako bismo na konzistentan način uzeli u obzir sve doprinose na nivou konvergencije p , odnosno kako bismo dobili $1/N^p$ konvergenciju diskretizovanih amplituda. Iz gornjih izraza se lako vidi da je idealno efektivno dejstvo zbir članova koji imaju tipičan oblik

$$\epsilon_N^\alpha \delta^{2\beta} \left(\partial^{\gamma_1} V(\bar{q}_n) \right) \dots \left(\partial^{\gamma_k} V(\bar{q}_n) \right), \quad (5.15)$$

gde su α , β , i $\gamma_1, \dots, \gamma_k$ nenegativni celi brojevi, koji na osnovu dimenzionalne analize zadovoljavaju uslov

$$\alpha + \beta = k + \frac{1}{2} \sum_{r=1}^k \gamma_r. \quad (5.16)$$

Kao što smo ranije pomenuli, zbog difuzione relazije $\delta_n^2 \propto \epsilon_N$ je za obezbeđivanje $1/N^p$ konvergencije u efektivnom dejstvu potrebno zadržati sve članove koji zadovoljavaju uslov

$\alpha + \beta \leq p$. Prisetimo se da smo ranije koristili ekvivalentan uslov za efektivni potencijal, koji ulazi u dejstvo pomnožen sa ϵ_N , pa je tada nejednakost bila $\alpha + \beta < p$, dok je sada neophodno uključiti i graničan slučaj $\alpha + \beta = p$. Mnogo korisniji uslov se dobija korišćenjem dimenzione jednačine (5.16),

$$k + \frac{1}{2} \sum_{r=1}^k \gamma_r \leq p. \quad (5.17)$$

Ovaj uslov se može praktično koristiti kao kriterijum za zadržavanje članova koji su relevantni na željenom nivou konvergencije p .

Sada ćemo primeniti sve opisane korake za računanje efektivnog dejstva, ilustrujući opštu proceduru na nivou $p = 2$. Uzimajući u obzir gornji uslov i linearnu referentnu trajektoriju ξ , dejstvo $S_n[\xi]$ je dato sa

$$S_n[\xi] = \epsilon_N \left(\frac{1}{2} \frac{\delta_n^2}{\epsilon_N^2} + V(\bar{q}_n) + \frac{\delta_{n,i} \delta_{n,j}}{24} \partial_{ij}^2 V(\bar{q}_n) \right) + O(\epsilon_N^3). \quad (5.18)$$

U gornjem izrazu $\delta_{n,i}$ je i -ta komponenta dM -dimenzionalnog vektora δ_n , dok je ∂_{ij}^2 skraćena oznaka za $\partial_i \partial_j$. Prva dva člana u jednačini (5.18) odgovaraju naivnom dejstvu ($p = 1$), dok treći član daje doprinos na nivou $p = 2$. Međutim, to nije jedini član koji je neophodno uzeti u obzir na nivou $p = 2$. Preostali doprinos se dobija iz očekivane vrednosti

$$\begin{aligned} \left\langle e^{-\int ds B(x;\xi)} \right\rangle &= 1 - \int_{-\frac{\epsilon_N}{2}}^{\frac{\epsilon_N}{2}} ds \langle B(x;\xi) \rangle + O(\epsilon_N^3) = \\ &= 1 - \int_{-\frac{\epsilon_N}{2}}^{\frac{\epsilon_N}{2}} ds \frac{1}{2} \langle x_i x_j \rangle \partial_i \partial_j V(\xi) + O(\epsilon_N^3) = \\ &= 1 - \frac{1}{2} \delta_{ij} \int_{-\frac{\epsilon_N}{2}}^{\frac{\epsilon_N}{2}} ds \Delta(s, s)_{i,j} \partial_{ij}^2 V(\xi) + O(\epsilon_N^3) = \\ &= 1 - \frac{1}{2} \partial^2 V(\bar{q}_n) \int_{-\frac{\epsilon_N}{2}}^{\frac{\epsilon_N}{2}} ds \Delta(s, s)_{i,i} + O(\epsilon_N^3). \end{aligned}$$

Kao što smo rekli, preostali integrali mogu da se izračunaju u zatvorenom obliku,

$$\int_{-\frac{\epsilon_N}{2}}^{\frac{\epsilon_N}{2}} ds \Delta(s, s)_{i,i} = \frac{\epsilon_N^2}{6},$$

odakle dobijamo očekivanu vrednost

$$\left\langle e^{-\int ds B(x;\xi)} \right\rangle = 1 - \frac{\epsilon_N^2}{12} \partial^2 V(\bar{q}_n) + O(\epsilon_N^3) = e^{-\frac{\epsilon_N^2}{12} \partial^2 V(\bar{q}_n)} + O(\epsilon_N^3). \quad (5.19)$$

Relevantni integrali propagatora koji su neophodni za računanje očekivanih vrednosti na višim nivoima p su dati u radu [10]. Konačno, sabiranjem svih doprinosa koje smo izračunali, za $p = 2$ efektivno dejstvo dobijamo

$$S_N^{(p=2)} = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_N \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\delta_n}{\epsilon_N} \right)^2 + V(\bar{q}_n) + \frac{\epsilon_N}{12} \partial^2 V(\bar{q}_n) + \frac{\delta_{n,i} \delta_{n,j}}{24} \partial_{ij}^2 V(\bar{q}_n) \right]. \quad (5.20)$$

Slično se dobijaju i efektivna dejstva za više nivoe konvergencije p , koja su detaljnije data u dodatku A.

Predstavljeni metod omogućava direktno i sistematsko izvođenje efektivnih dejstava za višečestične teorije u proizvoljnom broju dimenzija. Efektivna dejstva na nivou p daju ubranu konvergenciju $1/N^p$ i omogućavaju efikasnije numeričko izračunavanje opštih funkcionalnih integrala. Upotrebom ovog pristupa izvedena su efektivna višečestična dejstva do nivoa $p = 5$. Za specijalan slučaj kada se broj čestica $M = 1$ i kada je broj prostornih dimenzija $d = 1$, izvedena višečestična efektivna dejstva se svode na dejstva koja su izvedena u prethodnom poglavlju, kao što i očekujemo. U poglavlju koje se bavi numeričkom implementacijom dobijenih efektivnih dejstava ćemo proveriti da se analitički izvedena ubrzana konvergencija zaista dobija u numeričkim Monte Karlo simulacijama.

6

Efektivna dejstva i Šredingerova jednačina

Kao što je poznato, u praktičnim primenama je obično lakše (aproksimativno) rešavati Šredingerovu jednačinu nego direktno rešavati odgovarajući funkcionalni integral. Pored toga, za posebne klase potencijala pristup preko Šredingerove jednačine omogućava razvoj efikasnih rekurzivnih metoda za računanje perturbativnog razvoja do veoma visokih redova [59, 60, 61, 62, 63] teorije perturbacije. Imajući ovo u vidu kao inspiraciju, u ovom poglavlju ćemo predstaviti metod za izvođenje efektivnih dejstava baziran na rekurzivnom pristupu rešavanju Šredingerove jednačine za kratkovremene amplitude [11]. Prvo ćemo metod prikazati na slučaju jedne čestice u $d = 1$ prostornih dimenzija, a zatim ćemo novi pristup uopštiti i na slučaj višestruke teorije u proizvoljnom broju dimenzija. Dobljene rekurzivne relacije za efektivna dejstva ćemo prikazati i u obliku Fajnmanovih dijagrama, slično kao što je to urađeno u radovima [64, 65, 66, 67, 68, 69]. Ovaj pristup omogućava izvođenje efektivnih dejstava na najefikasniji način u odnosu na sve prezentovane metode, i do sada su autori pomoću ovog metoda dobili efektivna dejstva nivoa $p = 10$ za opštu višestruku teoriju, i $p = 35$ za jednočestičnu teoriju u jednoj prostornoj dimenziji. Za specijalne izbore potencijala mogu se dobiti i viši nivoi efektivnih dejstava.

6.1 Rekurzivni pristup za jednočestične sisteme u $d = 1$

Kao što smo već pokazali, amplituda $A(q, q'; \epsilon)$ za jednočestični sistem u jednoj prostornoj dimenziji ima simetriju

$$A(q, q'; \epsilon) = A(q', q; \epsilon), \quad (6.1)$$

i zadovoljava vremenski zavisne Šredingerove jednačine,

$$\left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) \right] A(q, q'; \epsilon) = 0, \quad (6.2)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + V(q') \right] A(q, q'; \epsilon) = 0 \quad (6.3)$$

uz početni uslov

$$A(q, q'; 0) = \delta(q - q'). \quad (6.4)$$

Uvešćemo nove koordinate, odstupanje $x = (q' - q)/2 = \delta/2$ i srednju tačku $\bar{x} = (q + q')/2$, pošto će u njima izvođenje biti jednostavnije. Gornje jednačine u ovim koordinatama imaju oblik

$$\left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{1}{8} \bar{\partial}^2 - \frac{1}{8} \partial^2 + \frac{1}{2} (V_+ + V_-) \right] A = 0, \quad (6.5)$$

$$[-\partial \bar{\partial} + 2(V_+ - V_-)] A = 0, \quad (6.6)$$

gde smo uveli oznake $V_{\pm} = V(\bar{x} \pm x)$ radi konciznosti. Rešenje ovih jednačina je dato sa

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp \left[-\frac{\delta^2}{2\epsilon} - \epsilon W(\delta, \bar{x}; \epsilon) \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp \left[-\frac{2}{\epsilon} x^2 - \epsilon W(x, \bar{x}; \epsilon) \right], \quad (6.7)$$

gde je efektivni potencijal W sada izražen kao funkcija novih promenljivih x i \bar{x} . Kao što smo ranije pokazali, $W(x, \bar{x}; \epsilon)$ je parna funkcija odstupanja x zbog simetrije (6.1) euklidskih amplituda. Primetimo da naivna diskretizacija predstavlja aproksimaciju egzaktnog rešenja (6.7) do reda $O(\epsilon)$. Ako zamenimo izraz (6.7) u jednačine (6.5) i (6.6), dobijamo

$$W + x \partial W + \epsilon \frac{\partial W}{\partial \epsilon} - \frac{1}{8} \epsilon \bar{\partial}^2 W - \frac{1}{8} \epsilon \partial^2 W + \frac{1}{8} \epsilon^2 (\bar{\partial} W)^2 + \frac{1}{8} \epsilon^2 (\partial W)^2 = \frac{V_+ + V_-}{2}, \quad (6.8)$$

$$x \bar{\partial} W - \frac{1}{4} \epsilon \partial \bar{\partial} W + \frac{1}{4} \epsilon^2 \partial W \bar{\partial} W = \frac{V_+ - V_-}{2}. \quad (6.9)$$

Obe ove parcijalne diferencijalne jednačine određuju efektivni potencijal $W(x, \bar{x}; \epsilon)$, odnosno amplitudu za prelaz $A(q, q'; \epsilon)$. Iz početnog uslova (6.4) sledi da je efektivni potencijal W regularan u blizini $\epsilon = 0$, tj. da može da se razvije u red po stepenima od ϵ . Mi ćemo razviti efektivni potencijal u dvostruki red, po ϵ i x^2 , a difuziona relacija $x^2 \propto \epsilon$ će nam omogućiti da to uradimo na konzistentan način za željeni nivo konvergencije p . Imajući ovo u vidu, dvostruki red za efektivni potencijal W se može napisati u obliku

$$W(x, \bar{x}; \epsilon) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m c_{m,k}(\bar{x}) \epsilon^{m-k} x^{2k} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m \frac{1}{2^{2k}} c_{m,k}(\bar{x}) \epsilon^{m-k} \delta^{2k}. \quad (6.10)$$

Ograničavanje sume po m od 0 do $p - 1$ će dati diskretizovane amplitude koje ubrzano konvergiraju ka kontinuum vrednostima kao ϵ^p , odnosno $1/N^p$. Zbog jednostavnosti i konciznosti notacije, definisaćemo da su svi koeficijenti $c_{m,k}$ koji se eksplicitno ne koriste na datom nivou p u jednačini (6.10) jednaki nuli, odnosno da važi $c_{m,k} = 0$ kad god uslov $m \geq k \geq 0$ nije ispunjen.

Zamena razvoja (6.10) u parcijalne diferencijalne jednačine (6.8) i (6.9) daje dve ekvivalentne rekursivne relacije. Druga od njih je tehnički teža za rešavanje, pošto ne određuje direktno koeficijente $c_{m,k}(x)$, nego njihove prve izvode. Zbog toga ćemo koristiti samo prvu rekursivnu relaciju, koja sledi iz jednačine (6.8). Dijagonalni koeficijenti se mogu izračunati eksplicitno,

$$c_{m,m} = \frac{V^{(2m)}}{(2m+1)!}, \quad (6.11)$$

dok vandijagonalni koeficijenti zadovoljavaju rekursivnu relaciju

$$\begin{aligned} 8(m+k+1) c_{m,k} &= (2k+2)(2k+1) c_{m,k+1} + c''_{m-1,k} - \sum_{l=0}^{m-2} \sum_r c'_{l,r} c'_{m-l-2,k-r} - \\ &- \sum_{l=1}^{m-2} \sum_r 2r(2k-2r+2) c_{l,r} c_{m-l-1,k-r+1}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

gde suma po r ide od $\max\{0, k - m + l + 2\}$ do $\min\{k, l\}$, u skladu sa ograničenjem da je $c_{m,k} = 0$ kad god uslov $m \geq k \geq 0$ nije ispunjen.

Za zadatu vrednost m koeficijente $c_{m,k}$ za $k = 0, 1, \dots, m$ određujemo na sledeći način: dijagonalni koeficijent $c_{m,m}$ je dat jednačinom (6.11), dok se vandijagonalni koeficijenti $c_{m,k}$ mogu direktno izračunati iz rekurzivne relacije (6.12) u redosledu $k = m - 1, \dots, 1, 0$. Ovaj način rešavanja gornjih rekurzivnih relacija je šematski prikazan na slici 6.1. Ilustrovaćemo ovu proceduru do na najniži netrivialni nivo ($p = 2$). Za $p = 1$ iz jednačine (6.11) dobijamo

$$c_{0,0} = V. \quad (6.13)$$

Za $p = 2$ prvo moramo da odredimo koeficijent $c_{1,1}$ iz jednačine (6.11), odakle sledi

$$c_{1,1} = \frac{V''}{6}. \quad (6.14)$$

Sada se iz rekurzivne relacije (6.12) može odrediti koeficijent $c_{1,0}$ na osnovu prethodno nađenih koeficijenata,

$$c_{1,0} = \frac{1}{16}c''_{0,0} + \frac{1}{8}c_{1,1}. \quad (6.15)$$

Iz jednačina (6.13)–(6.15) dobijamo rešenje za $c_{1,0}$,

$$c_{1,0} = \frac{V''}{12}. \quad (6.16)$$

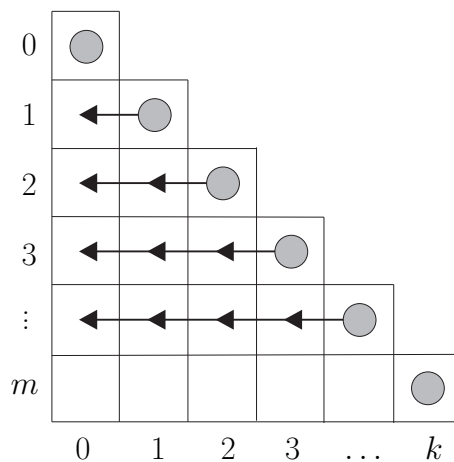
Slično, za $p = 3$ dobijamo

$$c_{2,2} = \frac{V^{(4)}}{120}, \quad (6.17)$$

$$c_{2,1} = \frac{1}{32}c''_{1,1} + \frac{3}{8}c_{2,2} = \frac{V^{(4)}}{120}, \quad (6.18)$$

$$c_{2,0} = \frac{1}{24}c''_{1,0} + \frac{1}{12}c_{2,1} - \frac{1}{24}(c'_{0,0})^2 = \frac{V^{(4)}}{240} - \frac{V'^2}{24}. \quad (6.19)$$

Opisana procedura se na isti način nastavlja za više nivoa konvergencije p . Procedura se lako može automatizovati u nekom od paketa za simboličko računanje, kao što je Mathematica. U dodatku B je dat Mathematica program koji smo napisali i koristili za izračunavanje



Slika 6.1: Redosled po kojem se računaju koeficijenti $c_{m,k}$. Dijagonalni koeficijenti slede iz jednačine (6.11), a vandijagonalni se računaju iz rekurzivne relacije (6.12).

efektivnih dejstava visokog nivoa p . Iako kompleksnost efektivnih dejstava značajno raste sa povećanjem nivoa p , opisani metod je mnogo efikasniji nego pristupi iz prethodnih poglavlja i omogućava izračunavanje efektivnih dejstava za suštinski veće vrednosti p , trenutno do vrednosti $p = 35$ za opštu jednočestičnu teoriju u jednoj prostornoj dimenziji.

Ova tehnika može da se iskoristi na još jedan način. Svi do sada predstavljeni rezultati se odnose na opštu kvantnu teoriju, u kojoj potencijal V nije specificiran. Međutim, za neke posebne izbore potencijala moguće je naći i značajno više nivoa efektivnog dejstva. Na primer, za kvartični anharmonijski oscilator smo našli efektivna dejstva do nivoa $p = 144$, a slično važi i za druge polinomijalne potencijale, jer se njihovi viši izvodi pojednostavljaju. Međutim, i za druge tipove potencijala se mogu dobiti viši nivoi efektivnog dejstva. Dobar primer je modifikovani Pošl-Teler potencijal, za koji smo izračunali efektivna dejstva do nivoa $p = 41$.

Kao što je već rečeno, glavni razlog za konstruisanje efektivnih dejstava visokog nivoa p je njihovo korišćenje u Monte Karlo simulacijama koje se na taj način mogu ubrzati za redove veličina zbog ubrzane konvergencije diskretizovanih funkcionalanih integrala. Međutim, pošto smo uspeli da izvedemo efektivna dejstva do tako visokog nivoa, postaje moguće iskoristiti ih i u analitičkom pristupu. Na primer, poznavanje kratkovremene propagacije sistema do tako visokog stepena u razvoju po vremenskom koraku omogućava upotrebu standardnih resumacionih tehnika, kao što su Pade aproksimacija i Borel resumacioni metod, za dobijanje informacija o ponašanju sistema za duža vremena propagacije.

6.2 Efektivni potencijal za kratkovremene dijagonalne amplitude

Deo efektivnog potencijala koji ne zavisi od diskretizovanih brzina, $W_0(\bar{x}; \epsilon) \equiv W(0, \bar{x}; \epsilon)$, određuje dijagonalne amplitude. Iako ne sadrži sve informacije koje su neophodne za konstruisanje efektivnog dejstva, od interesa je za određivanje fizičkih veličina kao što je gustina čestica i energetski spektri. Ovaj objekt je mnogo jednostavniji nego puni efektivni potencijal W . Pored toga, odnos između potencijala V i W_0 omogućava nam da vizeulizujemo efektne kvantizacije i diskretizacije za dati potencijal. U ovoj sekciji ćemo izvesti diferencijalnu jednačinu za potencijal W_0 za jednočestični sistem u jednoj prostornoj dimenziji.

Obe jednačine (6.5) i (6.6) sadrže izvode u odnosu na x , pa ne možemo jednostavno u njih da zamenimo $x = 0$ i da dobijemo odgovarajuću jednačinu za efektivni potencijal W_0 . Međutim, ako jednačinu (6.6) diferenciramo po x , dobijamo

$$\bar{\partial} \partial^2 A = 4A \bar{\partial} V + \dots, \quad (6.20)$$

gde tačke označavaju članove koji iščezavaju kada $x \rightarrow 0$. Dakle, diferenciranjem jednačine (6.5) po \bar{x} i zamenom gornjeg rezultata možemo da dobijemo jednačinu koja ne sadrži izvode po x . Konačno, u toj jednačini možemo da zamenimo $x = 0$ i dobijemo diferencijalnu jednačinu koju zadovoljavaju dijagonalne amplitude prelaza,

$$\left(\bar{\partial} \frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{1}{8} \bar{\partial}^3 + \frac{1}{2} \bar{\partial} V + V \bar{\partial} \right) A(\bar{x}, \bar{x}; \epsilon) = 0. \quad (6.21)$$

Zamenom izraza za dijagonalnu amplitudu,

$$A(\bar{x}, \bar{x}; \epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{-\epsilon W_0(\bar{x}; \epsilon)},$$

iz jednačine (6.21) dobijamo traženu diferencijalnu jednačinu za efektivni potencijal W_0 ,

$$\begin{aligned} \bar{\partial}W_0 + \frac{\epsilon}{4} \left(8\bar{\partial}\frac{\partial W_0}{\partial\epsilon} - 8W_0\bar{\partial}W_0 + 8V\bar{\partial}W_0 - \bar{\partial}^3W_0 \right) - \\ - \frac{\epsilon^2}{4} \left(8\bar{\partial}W_0\frac{\partial W_0}{\partial\epsilon} - 3\bar{\partial}W_0\bar{\partial}^2W_0 \right) - \frac{\epsilon^3}{4} (\bar{\partial}W_0)^3 = \bar{\partial}V. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Ovu jednačinu rešavamo u obliku stepenog reda

$$W_0(\bar{x}; \epsilon) = \sum_{m=0}^{\infty} c_{m,0}(\bar{x}) \epsilon^m, \quad (6.23)$$

koji predstavlja pojednostavljeni dvostruki red za efektivni potencijal W iz jednačine (6.10), u kojem je diskretizovana brzina x izjednačena sa nulom. Nakon zamene u diferencijalnu jednačinu (6.22), dobijamo sledeću rekurzivnu relaciju koja određuje koeficijente $c_{m,0}$ iz razvoja za potencijal W_0 ,

$$\begin{aligned} (2m+1)c'_{m,0} = \frac{1}{4}c'''_{m-1,0} - 2Vc'_{m-1,0} + 2\sum_{k=0}^{m-1} c'_{k,0}c_{m-k-1,0} + \\ + 2\sum_{k=1}^{m-1} kc_{k,0}c'_{m-k-1,0} - \frac{3}{4}\sum_{k=0}^{m-2} c'_{k,0}c''_{m-k-2,0} + \frac{1}{4}\sum_{k=0}^{m-3}\sum_{l=0}^{m-k-3} c'_{k,0}c'_{l,0}c'_{m-k-l-3,0}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Korišćenjem ove jednačine izračunali smo efektivni potencijal W_0 za opštu jednočestičnu teoriju u jednoj prostornoj dimenziji do nivoa $p = 37$. U dodatku B je dat Mathematica program koji smo napisali za ovu svrhu. Kao i ranije, za posebne izbore potencijala V mogu se dostići znatno viši nivoi konvergencije p .

6.3 Rekurzivni pristup za višečestične sisteme

Sada ćemo proširiti pristup iz sekcije 6.1 na slučaj opšte nerelativističke teorije M čestica u d prostornih dimenzija. Izvođenje jednačine za efektivni potencijal W je potpuno paralelno slučaju za jednočestični sistem u $d = 1$ prostornih dimenzija. Šredingerove jednačine sada imaju oblik

$$\left[\frac{\partial}{\partial\epsilon} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \Delta_i + V(q) \right] A(q, q'; \epsilon) = 0, \quad (6.25)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial\epsilon} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \Delta'_i + V(q') \right] A(q, q'; \epsilon) = 0, \quad (6.26)$$

gde Δ_i i Δ'_i predstavljaju d -dimenzionalne laplasijane po početnim i krajnjim koordinatama čestice i , dok su q i q' vektori dimenzije $d \times M$ i reprezentuju položaje svih čestica u početnom i krajnjem trenutku propagacije. Podrazumevamo da potencijal V sadrži sva spoljašnja polja koja deluju na čestice, kao i interakcije između čestica (dvočestične interakcije, kao i interakcije višeg reda, ako postoje). Nakon zamene dM -dimenzionalnog uopštenja izraza za amplitudu prelaza (6.7) u Šredingerove jednačine (6.25) i (6.26), dobijamo analogone

jednačina (6.8) i (6.9) za efektivni potencijal W ,

$$W + x \cdot \partial W + \epsilon \frac{\partial W}{\partial \epsilon} - \frac{1}{8} \epsilon \bar{\partial}^2 W - \frac{1}{8} \epsilon \partial^2 W + \frac{1}{8} \epsilon^2 (\bar{\partial} W)^2 + \frac{1}{8} \epsilon^2 (\partial W)^2 = \frac{V_+ + V_-}{2}, \quad (6.27)$$

$$x \cdot \bar{\partial} W - \frac{\epsilon}{4} \partial \cdot \bar{\partial} W + \frac{\epsilon^2}{4} (\partial W) \cdot (\bar{\partial} W) = \frac{V_+ - V_-}{2}. \quad (6.28)$$

Ovde smo koristili definiciju $A \cdot B = A_i B_i$, gde indeks i uzima vrednosti $i = 1, 2, \dots, dM$, a po ponovljenim indeksima se podrazumeva sumiranje. Bilo koja od gornjih jednačina za W može da se iskoristi za nalaženje njegovog razvoja u dvostruki Tejlorov red po kratkom vremenu propagacije ϵ i parnim stepenima diskretizovane brzine $x = \delta/2$,

$$W(x, \bar{x}; \epsilon) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m W_{m,k}(x, \bar{x}) \epsilon^{m-k}. \quad (6.29)$$

U gornjem izrazu je uvedena oznaka

$$W_{m,k}(x, \bar{x}) = x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_{2k}} c_{m,k}^{i_1, \dots, i_{2k}}(\bar{x}) = \frac{1}{2^{2k}} \delta_{i_1} \delta_{i_2} \cdots \delta_{i_{2k}} c_{m,k}^{i_1, \dots, i_{2k}}(\bar{x}).$$

Ispostavlja se da je veoma pogodno izvesti rekurzivne relacije za kontrahovane veličine $W_{m,k}$ umesto za odgovarajuće koeficijente $c_{m,k}^{i_1, \dots, i_{2k}}$. Na ovaj način se izbegava računski zahtevna simetrizacija po svim indeksima i_1, \dots, i_{2k} . Kao i ranije, jednostavnije je koristiti prvu od dve jednačine za nalaženje efektivnog potencijala W . Zamenom izraza (6.29) u jednačinu (6.27) direktno dobijamo dijagonalne koeficijente

$$W_{m,m} = \frac{1}{(2m+1)!} (x \cdot \bar{\partial})^{2m} V. \quad (6.30)$$

Vandijagonalni koeficijenti zadovoljavaju novu rekurzivnu relaciju, koja predstavlja uopštenje rekurzivne relacije (6.12) iz sekcije 6.1,

$$\begin{aligned} 8(m+k+1)W_{m,k} &= \bar{\partial}^2 W_{m-1,k} + \partial^2 W_{m,k+1} - \sum_{l=0}^{m-2} \sum_r (\bar{\partial} W_{l,r}) \cdot (\bar{\partial} W_{m-l-2,k-r}) - \\ &- \sum_{l=1}^{m-2} \sum_r (\partial W_{l,r}) \cdot (\partial W_{m-l-1,k-r+1}). \end{aligned} \quad (6.31)$$

Kao i ranije, suma po indeksu r ide od $\max\{0, k-m+l+2\}$ do $\min\{k, l\}$. Gornja rekurzivna relacija se rešava na isti način kao i u slučaju jednočestičnih teorija u $d = 1$, prema šemi prikazanoj na slici 6.1. Kao ilustraciju napisaćemo i rešiti jednačine do nivoa konvergencije $p = 3$:

$$\begin{aligned} W_{0,0} &= V, \\ W_{1,1} &= \frac{1}{6} (x \cdot \bar{\partial})^2 V, \\ W_{1,0} &= \frac{1}{16} \bar{\partial}^2 W_{0,0} + \frac{1}{16} \partial^2 W_{1,1} = \frac{1}{12} \bar{\partial}^2 V, \\ W_{2,2} &= \frac{1}{120} (x \cdot \bar{\partial})^4 V, \\ W_{2,1} &= \frac{1}{32} \bar{\partial}^2 W_{1,1} + \frac{1}{32} \partial^2 W_{2,2} = \frac{1}{120} (x \cdot \bar{\partial})^2 \bar{\partial}^2 V, \\ W_{2,0} &= \frac{1}{24} \bar{\partial}^2 W_{1,0} + \frac{1}{24} \partial^2 W_{2,1} - \frac{1}{24} (\bar{\partial} W_{0,0})^2 = \frac{1}{240} \bar{\partial}^4 V - \frac{1}{24} (\bar{\partial} V) \cdot (\bar{\partial} V). \end{aligned}$$

Isto kao i u jednočestičnom slučaju, za nalaženje efektivnog dejstva na željenom nivou p neophodno je izračunati sve kontrakcije $W_{m,k}$ za $0 \leq m < p$ i $0 \leq k \leq m$. Efektivna dejstva višeg nivoa se mogu naći u dodatku A, kao i Mathematica program koji smo koristili za njihovo izračunavanje. Ovaj program koristi specijalni Mathematica paket MathTensor [70], koji omogućava efikasan rad sa tenzorima. Za opštu višečestičnu teoriju i opšti potencijal V smo našli efektivna dejstva do nivoa konvergencije $p = 10$. Nalaženje efektivnih dejstava za još više nivoe p je moguće, a trenutno ograničenje je nametnuto samo limitima paketa MathTensor.

6.4 Dijagramatski prikaz efektivnih dejstava

Izvedene rekurzivne relacije za efektivna dejstva i njihova rešenja mogu da se prikažu u dijagramatskoj formi koja je slična rekurzivnoj grafičkoj konstrukciji Fajnmanovih dijagrama u seriji radova [64, 65, 66, 67, 68, 69]. U ovom pristupu, efektivni potencijal W predstavlja zbir svih povezanih vakuumskih dijagrama jedne specijalne teorije, čija ćemo Fajnmanova pravila sada definisati. Propagator je reprezentovan Kronekerovim delta simbolom,

$$\delta_{ij} = \begin{array}{c} i \text{ --- } j \end{array}, \quad (6.32)$$

a verteks sa l izlaznih linija je l -ti izvod potencijala

$$\bar{\partial}_{i_1} \bar{\partial}_{i_2} \cdots \bar{\partial}_{i_l} V = \begin{array}{c} \bullet \\ \swarrow \quad \dots \quad \searrow \\ i_1 \quad \dots \quad i_l \end{array}, \quad (6.33)$$

dok linija na kojoj se nalazi spoljašnji izvor odgovara množenju sa diskretnom brzinom \bar{x}_i

$$x_i = \begin{array}{c} \times \text{ --- } i \end{array}. \quad (6.34)$$

Primetimo da su u ovoj teoriji dozvoljeni samo dijagrami sa parnim brojem spoljašnjih linija, što odgovara parnosti efektivnog potencijala po diskretnim brzinama. Iz jednostavne dimenzionalne analize možemo da nađemo sve dijagrame koji doprinose datom koeficijentu $W_{m,k}$. Diskretizovani efektivni potencijal W je generišući funkcional povezanih dijagrama, jer se pojavljuje u eksponentu izraza za amplitude. Dijagramatska notacija eksplicitno pokazuje da je razvoj u red po kratkom vremenu propagacije čisto kombinatorni problem u kojem su sve bitne informacije sadržane u simetrijskim faktorima (koeficijentima) koji množe odgovarajuće dijagrame. Prema tome, jednačina (6.31) predstavlja Švinger-Dajsonovu jednačinu kvantne teorije koja se nalazi u pozadini dijagramatske reprezentacije. Kao što je poznato, upravo je rešavanje Švinger-Dajsonove jednačine najjednostavniji način za određivanje simetrijskih faktora.

Sada ćemo rekurzivnu relaciju za višečestične sisteme, odnosno Švinger-Dajsonovu jednačinu za našu teoriju, napisati u dijagramatskom obliku. Prvo ćemo uvesti Fajnmanov dijagram za kontrahovanu veličinu $W_{m,k}$,

$$W_{m,k} = \begin{array}{c} \boxed{m, k} \\ \underbrace{\times \cdots \times}_{2k} \end{array}. \quad (6.35)$$

Prema jednačini (6.30), dijagonalni članovi $W_{m,m}$ su direktno dati preko verteksa koji su kontrahovani sa parnim brojem spoljašnjih izvora,

$$W_{m,m} = \begin{array}{c} \boxed{m, m} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2m} \end{array} = \frac{1}{(2m+1)!} \begin{array}{c} \bullet \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2m} \end{array} . \quad (6.36)$$

Rekurzivna relacija (6.31) za vandijagonalne članove sadrži izvode dijagrama u odnosu na srednju tačku \bar{x} , kao i u odnosu na diskretnu brzinu x . Ove operacije deluju na sledeći način:

$$\bar{\partial}_i \begin{array}{c} \boxed{m, k} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{m, k} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k} \end{array} \text{---} i , \quad (6.37)$$

$$\partial_i \begin{array}{c} \boxed{m, k} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k} \end{array} = 2k \begin{array}{c} \boxed{m, k} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k-1} \end{array} \text{---} i . \quad (6.38)$$

Kada sve ove elemente uzmemo u obzir, grafička reprezentacija Švinger-Dajsonove jednačine ima sledeći oblik:

$$8(m+k+1) \begin{array}{c} \boxed{m, k} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{m-1, k} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k} \end{array} + (2k+2)(2k+1) \begin{array}{c} \boxed{m, k+1} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k} \end{array} - \sum_{l=0}^{m-2} \sum_r \begin{array}{c} \boxed{l, r} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2r} \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \boxed{m-l-2, k-r} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k-2r} \end{array} - \sum_{l=1}^{m-2} \sum_r 2r(2k-2r+2) \begin{array}{c} \boxed{l, r} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2r-1} \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \boxed{m-l-1, k-r+1} \\ \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_{2k-2r+1} \end{array} . \quad (6.39)$$

Suma po indeksu r ima iste granice kao i kod jednačine (6.31). Iz gornje rekurzivne relacije, koristeći potpunu indukciju, vidimo da su zaista svi vakuumski dijagrami koji doprinose efektivnom potencijalu povezani. U dijagramatskoj notaciji se prethodno dobijena rešenja za diskretizovani efektivni potencijal za opštu višečestičnu teoriju do nivoa $p = 4$ mogu napisati na sledeći način:

$$W_{0,0} = \bullet ,$$

$$W_{1,1} = \frac{1}{6} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \downarrow \end{array} = \frac{1}{6} (1)^2 ,$$

$$W_{1,0} = \frac{1}{12} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \end{array} = \frac{1}{12} (11) ,$$

$$W_{2,2} = \frac{1}{120} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \end{array} = \frac{1}{120} (1)^4 ,$$

$$W_{2,1} = \frac{1}{120} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \downarrow \downarrow \end{array} = \frac{1}{120} (1)^2 (11) ,$$

$$W_{2,0} = \frac{1}{240} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \downarrow \end{array} - \frac{1}{24} \begin{array}{c} \bullet \text{---} \bullet \end{array} = \frac{1}{240} (11)^2 - \frac{1}{24} (12) ,$$

$$W_{3,3} = \frac{1}{5040} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \end{array} = \frac{1}{5040} (1)^6 ,$$

$$W_{3,2} = \frac{1}{3360} \begin{array}{c} \bullet \\ \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \end{array} = \frac{1}{3360} (1)^4 (11) ,$$

$$\begin{aligned}
W_{3,1} &= \frac{1}{3360} \text{diagram} - \frac{1}{120} \text{diagram} - \frac{1}{360} \text{diagram} = \\
&= \frac{1}{3360} (1)^2(11)^2 - \frac{1}{120} (1)^2(12) - \frac{1}{360} (1)(2)(12), \\
W_{3,0} &= \frac{1}{6720} \text{diagram} - \frac{1}{120} \text{diagram} - \frac{1}{360} \text{diagram} = \frac{1}{6720} (11)^3 - \frac{1}{120} (11)(12) - \frac{1}{360} (12)^2.
\end{aligned}$$

U gornjim izrazima smo uveli i jednostavnu topološku notaciju za dijagrame. Prevođenje između notacija je očigledno:

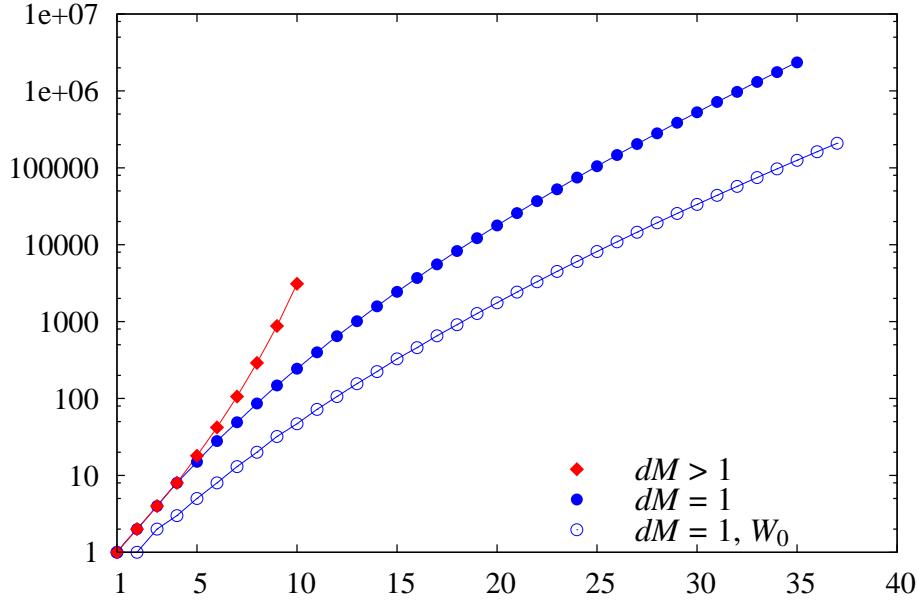
- (1) predstavlja spoljašnji izvor na prvom verteksu, odnosno kontrakciju diskretizovanom brzinom i izvoda $x \cdot \bar{\partial}$ koja deluje na potencijal $V(\bar{x})$;
- (12) predstavlja propagator između verteksa 1 i 2, odnosno kontrahovani proizvod izvoda potencijala $\bar{\partial}V \cdot \bar{\partial}V$;
- (11) predstavlja petlju na verteksu 1, odnosno kontrahovani proizvod izvoda koji deluje na potencijal, $\bar{\partial}^2V$, itd.

Topološka notacija je mnogo kompaktnija nego sve prethodne, što nam omogućava da ovde predstavimo i $p = 5$ rezultat za opštu višestručnu teoriju:

$$\begin{aligned}
W_{4,4} &= \frac{1}{362880} (1)^8, \\
W_{4,3} &= \frac{1}{181440} (1)^6(11), \\
W_{4,2} &= \frac{1}{120960} (1)^4(11)^2 - \frac{1}{3360} (1)^4(12) - \frac{1}{2520} (1)^3(2)(12) - \frac{1}{2016} (1)^2(2)^2(12) \\
W_{4,1} &= \frac{1}{120960} (1)^2(11)^3 - \frac{1}{1680} (1)^2(11)(12) - \frac{1}{2520} (1)^2(12)^2 - \frac{1}{1260} (1)^2(22)(12) \\
&\quad - \frac{1}{2520} (1)(2)(11)(12) - \frac{1}{5040} (1)(2)(12)^2, \\
W_{4,0} &= \frac{1}{241920} (11)^4 - \frac{1}{2240} (11)^2(12) - \frac{1}{1680} (11)(12)^2 - \frac{17}{40320} (11)(22)(12) \\
&\quad - \frac{1}{6720} (12)^3 + \frac{1}{240} (12)(13).
\end{aligned}$$

Izrazi za efektivno dejstvo za nivo $p = 6$ su dati u dodatku A, a viši izrazi za efektivno dejstvo koje smo izračunali, zaključno sa nivoom $p = 10$, dati su na veb stranicama Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku [13].

Na kraju ove sekcije ćemo dati kratko kvantitativno poređenje broja članova u efektivnim dejstvima koja smo izveli. Dijagramatska notacija nam omogućava da primetimo da se, što se razvoja po kratkom vremenu propagacije tiče, svi sistemi dele na dve klase kompleksnosti u zavisnosti od vrednosti parametra dM . Kompleksnost diskretizovanih efektivnih potencijala za sisteme za koje je $dM > 1$ raste mnogo brže za porastom p nego u slučaju kada je $dM = 1$, kao što se vidi sa slike 6.2. Razlog za ovo je što mnoštvo različitih dijagrama za $dM > 1$ kolapsira u jedinstven član u specijalnom slučaju $dM = 1$ (jedna čestica u jednoj prostornoj dimenziji), što značajno redukuje broj članova u efektivnom dejstvu.



Slika 6.2: Broj Fajnmanovih dijagrama koji daju doprinos na datom nivou konvergencije p ilustruje porast kompleksnosti izraza za efektivno dejstvo. Kvatni sistemi se mogu svrstati u dve klase kompleksnosti: klasu u kojoj kompleksnost raste brže, za koje je $dM > 1$ (gornja kriva), i klasu u kojoj kompleksnost raste mnogo sporije, za koju je $dM = 1$ (donja kriva). Pored toga, na slici je data i zavisnost broja članova u potencijalu W_0 koji ne sadrži diskretizovane brzine za slučaj $dM = 1$.

6.5 Rekurzivne relacije za estimatore očekivanih vrednosti

U ovoj sekciji ćemo ukratko izvesti rekurzivnu relaciju za virijalni estimator energije višečestičnog kvantnog sistema u proizvoljnom broju dimenzija [10]. Prvo ćemo izvesti virijalni estimator koji odgovara naivnom diskretizovanom dejstvu, odnosno nivou konvergencije $p = 1$, za slučaj $dM > 1$. Koristeći formulu $U(\beta_t) = -\partial_{\beta_t} \ln Z(\beta_t)$ za očekivanu vrednost energije sistema, za diskretizovani izraz dobijamo

$$U_N(\beta_t) = -\frac{\partial \ln Z_N(\beta_t)}{\partial \beta_t}. \quad (6.40)$$

Ako se podsetimo da važi $\partial_{\beta_t} = 1/N \partial_{\epsilon}$, i reskaliramo koordinate prema relaciji $q \rightarrow q\sqrt{\epsilon}$, izvršimo diferenciranje i zatim vratimo prvobitne koordinate, dobijamo izraz za diskretizovanu vrednost očekivane energije u obliku

$$U_N(\beta_t) = \frac{1}{Z_N} \left(\frac{1}{2\pi\epsilon} \right)^{\frac{dMN}{2}} \int dq_1 \dots dq_N E_V e^{-S_N}, \quad (6.41)$$

gde je virijalni estimator dat sa

$$E_V = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left(V(\bar{q}_n) + \frac{1}{2} \bar{q}_{n,i} \partial_i V(\bar{q}_n) \right). \quad (6.42)$$

Prema izvođenju, ovaj estimator daje $1/N$ konvergenciju diskretizovanih vrednosti očekivane energije.

Kao što smo ranije objasnili, ubrzana konvergencija za očekivane vrednosti se postiže korišćenjem popraavljenih izraza za estimatore, uz istovremeno korišćenje odgovarajućih efektivnih dejstava. Pri tome, popraavljeni izrazi za virijalni estimator mogu da se izvedu direktno iz efektivnih dejstava na odgovarajućem nivou konvergencije p . Idealno efektivno dejstvo možemo da napišemo kao sumu doprinosa za različite nivoe konvergencije p ,

$$S_N^* = S_N^{(p=1)} + \sum_{p=2}^{\infty} \sigma^{(p)}, \quad (6.43)$$

gde $S_N^{(p=1)}$ odgovara naivno diskretizovanom dejstvu. Idealni virijalni estimator takođe možemo da napišemo na ovaj način,

$$E_V^* = E_V^{(p=1)} + \sum_{p=2}^{\infty} e_V^{(p)}, \quad (6.44)$$

gde je $E_V^{(p=1)}$ naivni virijalni estimator, dat jednačinom (6.42). Naravno, za svaki dati nivo p je odgovarajući doprinos efektivnom dejstvu dat kao suma po diskretizovanim vremenskim koracima (kao i u slučaju naivnog diskretizovanog dejstva na nivou $p = 1$),

$$\sigma^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} \sigma_n^{(p)},$$

a isto važi i za popravke na virijalni estimator za nivo p ,

$$e_V^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} e_{V,n}^{(p)}.$$

Iz definicione relacije za diskretizovani estimator (6.41), nakon sprovedene gore opisane procedure, sledi relacija

$$e_{V,n}^{(p)} = \frac{1}{\beta_t} \left(p + \frac{1}{2} \bar{q}_{n,i} \partial_i \right) \sigma_n^{(p)}. \quad (6.45)$$

Ova jednačina se može direktno koristiti za računanje izraza za virijalne estimatore za više nivoe konvergencije p . U dodatku A su dati virijalni estimatori za opštu višestetičnu teoriju do nivoa $p = 5$.

7

Numeričke primene efektivnih dejstava

U ovom poglavlju ćemo praktično pokazati kako se u numeričkim simulacijama mogu iskoristiti izvedena efektivna dejstva, kao i kako se numerički vidi ubrzana konvergencija diskretizovanih funkcionalnih integrala koji se računaju pomoću izraza na nivou p . Prednosti korišćenja popravljenih efektivnih dejstava ćemo pokazati na primerima računanja opštih amplituda prelaza za jednočestične teorije u jednoj prostornoj dimenziji, kao i za višestestične teorije u višem broju prostornih dimenzija. Pored toga, izvedena dejstva su primenjena i za računanje energetskih spektara različitih teorija, kao i termalnih očekivanih vrednosti energije. Rezultati numeričkih simulacija prikazani u ovom poglavlju su dobijeni pomoću SPEEDUP programskog koda [13], razvijenog od strane autora i saradnika. Ovaj programski kod je detaljno prikazan u dodatku D. Sve numeričke simulacije su izvedene na paralelnom klasteru Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu [71].

Pre prelaska na prezentovanje numeričkih rezultata, daćemo nekoliko komentara vezanih za Monte Karlo algoritme koje smo koristili. U prvom od primenjenih algoritama trajektorije po kojima je vršena integracija su generisane iz Gausove raspodele koja je dobijena iz semiklasičnog razvoja. Kompleksnost ovog algoritma je $N^2 \cdot N_{MC}$, pošto je neophodno dijagonalizovati kvadratnu formu u eksponentu funkcije raspodele. Drugi algoritam koji smo koristili je baziran na bisekcionom metodu [35], i kompleksnost mu je proporcionalna sa $N \cdot N_{MC}$. Prema tome, bisekcioni algoritam je metod izbora za veće vrednosti gustine diskretizacije N . Međutim, kao što znamo, primena efektivnih dejstava visokog reda p omogućava nam da značajno smanjimo gustinu diskretizacije N , a da pri tom dobijemo istu preciznost. U regionu malih vrednosti N oba algoritma imaju uporediva vremena izvršenja i daju uporedivu preciznost rezultata, pa nema prepreka za korišćenje bilo kog algoritma.

U oba algoritma, kao i kod svih Monte Karlo simulacija, bilo je neophodno koristiti generator slučajnih brojeva koji je sposoban da obezbedi veliki broj (kvazi-)slučajnih brojeva koji nisu međusobno korelisani, i to u obliku koji je pogodan za primenu na paralelnom klasteru. Naš izbor je bila Scalable Parallel Random Number Generator biblioteka [72, 73] (SPRNG). Sledeći dobru praksu u numeričkom radu [74] proverili smo da su dobijeni rezultati konzistentni sa rezultatima dobijenim pomoću drugog generatora slučajnih brojeva. Provera je izvedena pomoću RAN3 generatora [33] koji je korišćen sa drugačijim početnim uslovom za svaki od paralelnih procesa. Slaganje je u svim slučajevima bilo odlično, odnosno svi rezultati su se slagali u granicama jednog σ intervala (jedne standardne devijacije), što znači da nema skrivenih sistematskih grešaka. Oba algoritma su takođe testirana na nekoliko egzaktno rešivih primera, kako bi se verifikovalo da nema sistematskih grešaka.

7.1 Amplitude prelaza

Prva veličina na kojoj ćemo ilustrovati kako se koriste izvedena efektivna dejstva, kao i prednosti koje iz primene efektivnih dejstava dobijaju, su opšte amplitude prelaza. Za nekoliko karakterističnih teorija, prvo za jednu česticu u jednoj dimenziji, a zatim i na primeru višestručne teorije, ćemo pokazati da se zaista dobija ubrzana konvergencija $1/N^p$ kada se koristi efektivno dejstvo nivoa p .

7.1.1 Amplitude za jednočestične teorije u $d = 1$

Prvi model na kojem ćemo primeniti [7, 8] izvedena jednočestična efektivna dejstva je anharmonijski oscilator za kvartičnim anharmonicitetom, čiji je potencijal dat sa

$$V(q) = \frac{1}{2} q^2 + \frac{\lambda}{4!} q^4. \quad (7.1)$$

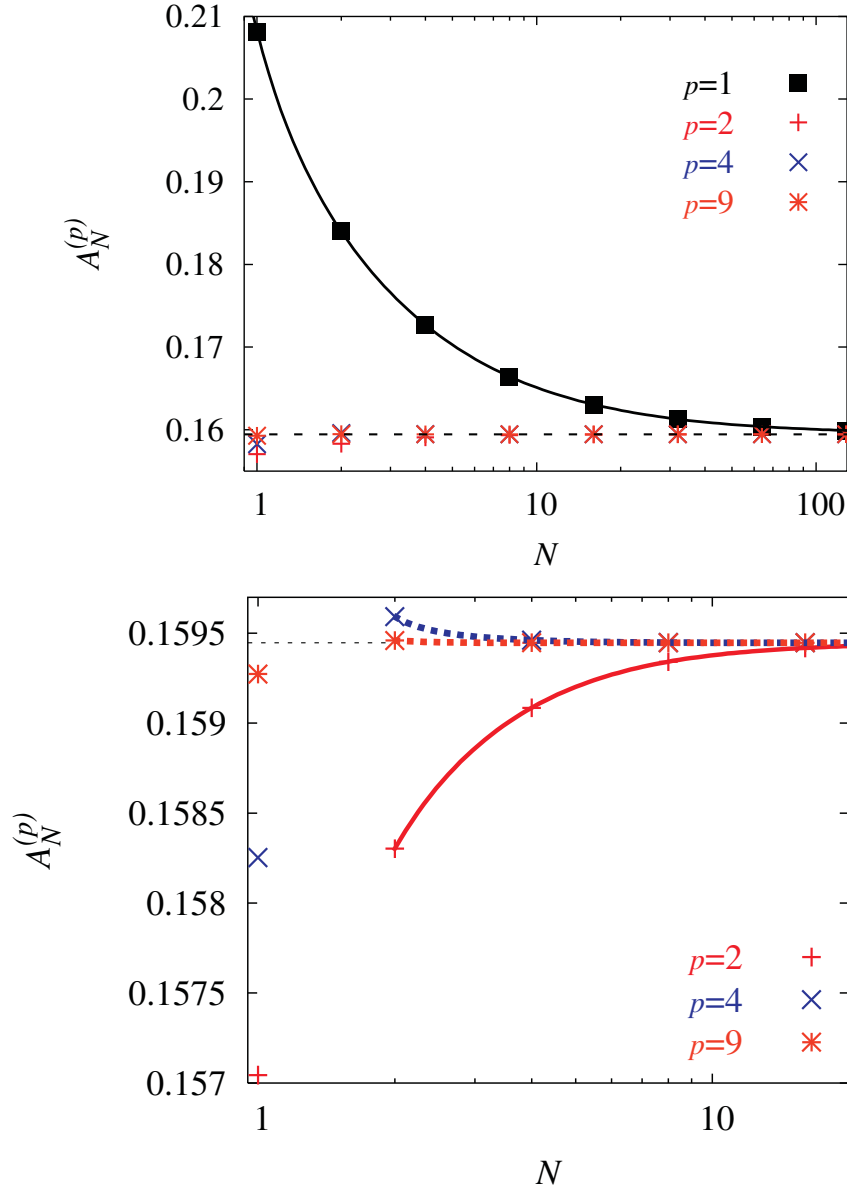
Na slici 7.1 je prikazano kako se diskretizovane amplitude $A_N^{(p)}$ približavaju kontinuum vrednosti amplitude za nivoe $p = 1$ (naivno diskretizovano dejstvo u preskripciji srednje tačke), kao i za $p = 2, 4$ i 9 . Gornji grafik daje dobar uvid u to kako diskretizovane amplitude za granične uslove $\alpha = 0$, $\beta = 1$ i vreme propagacije $T = 1$, računate pomoću efektivnih dejstava viših nivoa sistematski daju bolje rezultate od efektivnih dejstava nižeg nivoa. Posebno, vidimo kako su efektivna dejstva za $p > 2$ mnogo bolja za praktično korišćenje od naivnog dejstva. Na donjem grafiku slike 7.1 vidimo detalj sa gornjeg grafika koji omogućava lakše kvantitativno praćenje razlike između diskretizovanih amplituda za nivoe $p = 2, 4$ i 9 . U skladu sa očekivanom relacijom za konvergenciju diskretizovanih amplituda na nivou p , krive koje smo fitovali na podatke za nivo p su polinomi po $1/N$ oblika

$$A_N^{(p)} = A^{(p)} + \frac{B^{(p)}}{N^p} + \frac{C^{(p)}}{N^{p+1}} + \dots \quad (7.2)$$

Kao što i očekujemo, za različite vrednosti p su svi slobodni članovi $A^{(p)}$ dobijeni fitovanjem međusobno konzistentni (jednaki u granicama greške), pošto oni predstavljaju procenjenu vrednosti kontinualne amplitude $A(\alpha, \beta; T)$. Kontinuum vrednosti su predstavljene na graficima pomoću vodoravne isprekidane linije. U svim slučajevima je fitovanje izvršeno korišćenjem podataka za $N > 1$. Razlog što smo izostavili tačke koje odgovaraju $N = 1$ je što za $T = 1$ imamo $\epsilon_1 = 1$, odnosno ove tačke ne zadovoljavaju okvirni uslov $\epsilon_N < 1$ za konvergenciju razvoja po vremenskom koraku. Međutim, diskretizovane amplitude za $N = 1$ su veoma interesantne pošto one predstavljaju algebarske izraze u kojima nema nikakvih integracija. Za manje vrednosti vremena propagacije T se za procenu kontinuum vrednosti amplitude mogu koristiti i vrednosti dobijene za $N = 1$. Kao što vidimo sa grafika, za veće vrednosti nivoa p diskretizovane vrednosti amplitude za $N = 1$ daju sve bolje i bolje ocene kontinuum amplitude. Ovo važi i za druge potencijale. Proučavanje diskretizovanih amplituda za $N = 1$, koje daju algebarsku aproksimaciju za amplitude, predstavlja jedan od naših budućih pravaca istraživanja.

Za vrednosti vremena propagacije $T > 1$ neophodno je izvršiti barem nekoliko integracija. Ono što se posebno vidi sa gornje slike je i koliko su manje vrednosti gustine diskretizacije N neophodne kada se koriste viši nivoi efektivnih dejstava p . Praktično, za visoke vrednosti p može se koristiti minimalna vrednost $N = [T] + 1$ sa zadovoljavajućom tačnošću.

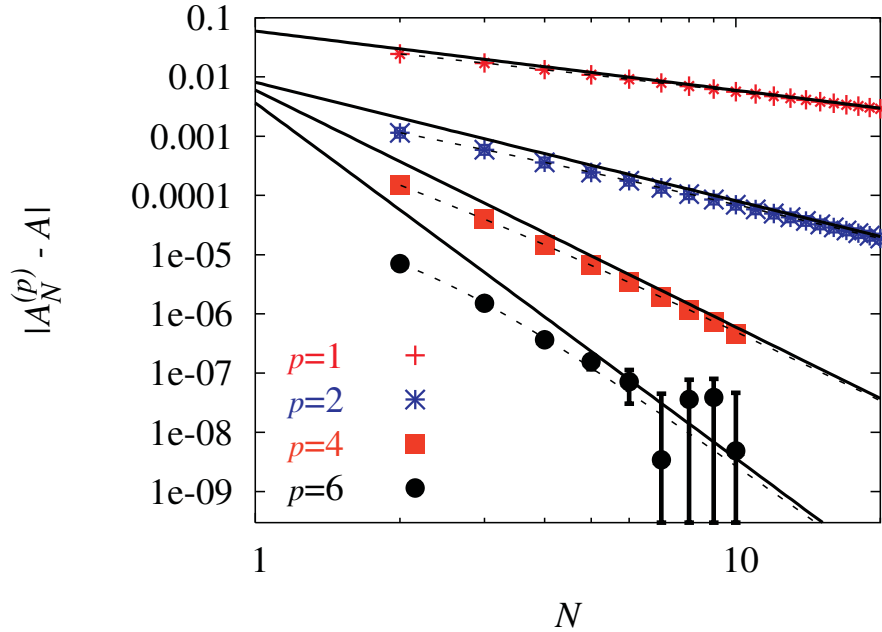
Kvantitativna mera kvaliteta izvedenih efektivnih dejstava može se videti na slici 7.2. Na njoj su prikazana odstupanja od kontinualnih vrednosti amplitude (dobijenih fitovanjem). Pošto na log-log skali dobijamo linearne zavisnosti od N (sa negativnim koeficijentom



Slika 7.1: (gore) Zavisnost diskretizovanih amplituda $A_N^{(p)}$ u funkciji od gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 4$ i 9 za anharmonijski oscilator sa kvartičnim anharmonicitetom $\lambda = 10$, za vreme propagacije $T = 1$ i granične uslove $\alpha = 0$, $\beta = 1$. Broj Monte Karlo uzoraka je $N_{MC} = 9.2 \cdot 10^7$. (dole) Detalj gornjeg grafika koji omogućava poređenje diskretizovanim amplituda za $p = 2, 4$ i 9 . Na oba grafika isprekidana linija predstavlja kontinualnu vrednost amplitude, dobiju iz fitovanja kao slobodan član odgovarajućeg polinoma po $1/N$.

pravca) ovih odstupanja, vidimo da je u pitanju stepena zavisnost od $1/N$ sa vodećim članom oblika $1/N^\gamma$. Fitovanjem se pokazuje da za dati nivo p eksponent γ zaista ima vrednost $\gamma = p$.

Kao što smo videli, odstupanja diskretizovanih amplituda od kontinuum limesu $|A_N^{(p)} - A|$ postaju ekstremno mala čak i za umerene vrednosti gustine diskretizacije N ako koristimo efektivna dejstva visokog reda p . To naravno obezbeđuje brzu konvergenciju i daje nam praktično kontinualne rezultate sa velikim brojem značajnih cifara čak i za male vrednosti N , ali sa druge strane otežava numeričko verifikovanje egzaktne zavisnosti $1/N^p$ i razlučivanje odstupanja datih na slici 7.2. Zbog toga je neophodno koristiti velike vred-



Slika 7.2: Odstupanja diskretizovanih amplituda od kontinuum limes $|A_N^{(p)} - A|$ kao funkcija gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 4$ i 6 (redom, naniže). Vrednosti parametara su iste kao i na prethodnoj slici, jedino je broj Monte Karlo uzoraka za $p = 1, 2$ povećan na $N_{MC} = 9.2 \cdot 10^9$, za $p = 4$ na $N_{MC} = 9.2 \cdot 10^{10}$, a za $p = 6$ na $N_{MC} = 3.68 \cdot 10^{11}$. Isprekidane krive daju odgovarajuće polinome po $1/N$ dobijene fitovanjem, a pune krive daju vodeće $1/N^p$ ponašanje.

nosti broja Monte Karlo uzoraka N_{MC} kako statističke greške Monte Karlo metoda ne bi maskirale ova ekstremno mala odstupanja. Za $p = 6$ smo koristili veoma veliki broj Monte Karlo uzoraka ($N_{MC} = 3.68 \cdot 10^{11}$), ali čak i tako je statistička greška postala jednaka odstupanjima od kontinuum vrednosti amplitude već za $N \gtrsim 8$. Takve simulacije zahtevaju po nekoliko dana CPU vremena na našem klasteru. Za $p = 9$ odstupanje od kontinuum limes postaje jednako statističkoj grešci već za $N = 2$, odnosno čak i za tako malu vrednost N smo dobili kontinuum vrednost amplitude u granicama ekstremno male statističke greške. Dok ovo predstavlja tehničku poteškoću za numeričko verifikovanje zavisnosti $1/N^p$, istovremeno je ovo jedan od efikasnih pokazatelje koliko opisani metod dobro radi, i kako nam daje veoma precizne rezultate (npr. na slici 7.2 dobijamo osam značajnih cifara) za veoma grube diskretizacije, kao što je $N = 1$ ili $N = 2$, gde imamo da izvedemo još samo jednu ili nijednu integraciju. U praktičnoj primeni, ovakve simulacije traju nekoliko sekundi na trenutno dostupnim PC računarima.

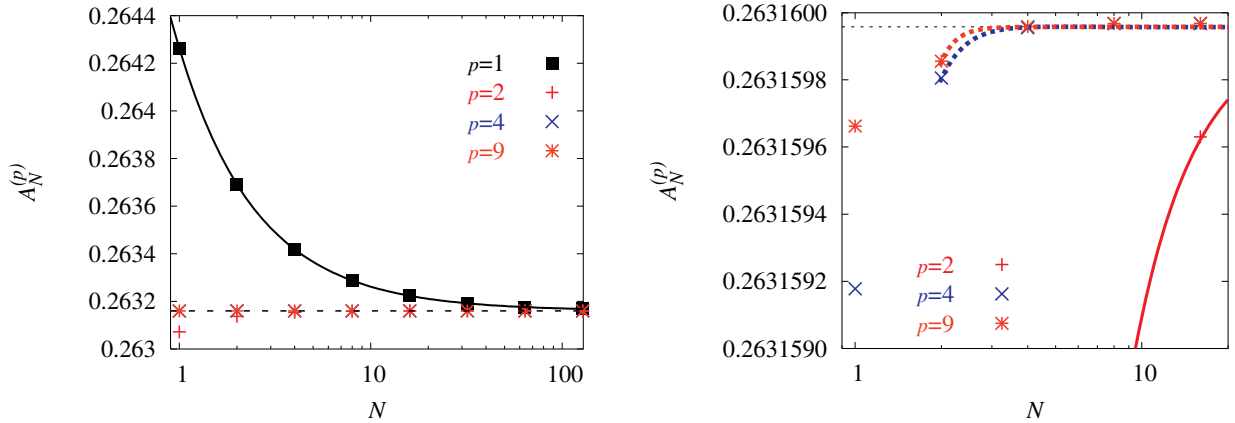
Drugi model koji smo razmatrali [7, 8] je čestica koja se kreće u modifikovanom Pošl-Teler potencijalu,

$$V(q) = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2 \beta (\beta - 1)}{\cosh^2 \alpha q}. \quad (7.3)$$

Ovo je dobro poznati egzaktan rešiv model [23]. Za razliku od anharmonijskog oscilatora, modifikovani Pošl-Telerov potencijal ima i diskretan, ali i kontinualan spektar. Diskretna svojstvena stanja imaju energije

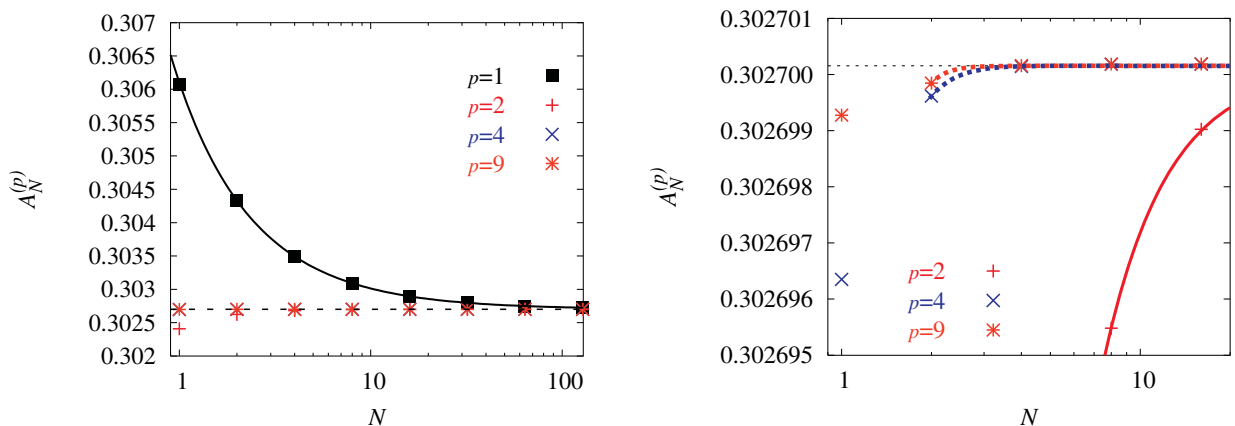
$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2} (\beta - 1 - n)^2, \quad (7.4)$$

za $0 \leq n \leq \beta - 1$. Prema tome, vidimo da model ima kritične vrednosti konstante interakcije $\beta = 1, 2, 3, \dots$, za koje dobija nova vezana stanja.



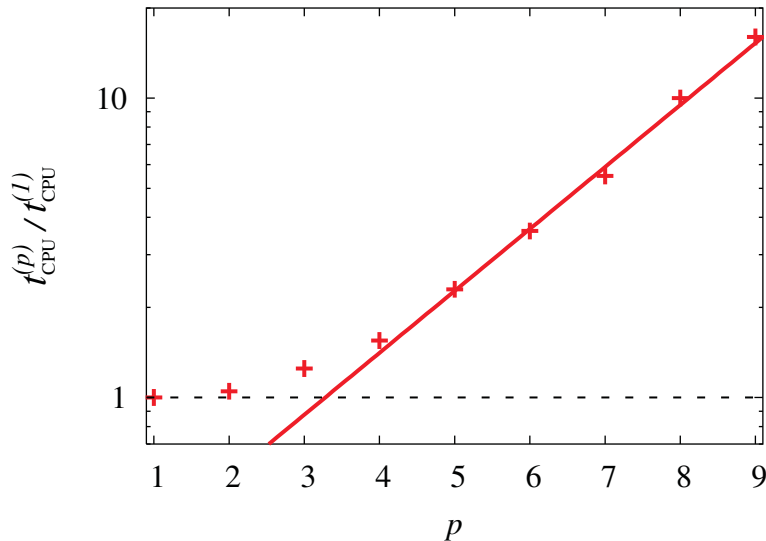
Slika 7.3: (levo) Zavisnost diskretizovanih amplituda $A_N^{(p)}$ u funkciji od gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 4$ i 9 za česticu koja se kreće u modifikovanom Pošl-Teler potencijalu sa parametrima $\alpha = 0.5$, $\beta = 1.5$. Vreme propagacije je $T = 1$, a granični uslovi $a = 0$, $b = 1$. Broj Monte Karlo uzoraka je $N_{MC} = 9.2 \cdot 10^7$. (desno) Detalj gornjeg grafikona koji omogućava poređenje diskretizovanim amplituda za $p = 2, 4$ i 9 . Na oba grafika isprekidana linija predstavlja kontinualnu vrednost amplitude, dobiju iz fitovanja kao slobodan član odgovarajućeg polinoma po $1/N$.

Slika 7.3 pokazuje kako diskretizovane amplitude $A_N^{(p)}$ teže kontinuum limesu za nivoe $p = 1, 2, 4, 9$ za modifikovani Pošl-Teler potencijal sa parametrima $\alpha = 0.5$ i $\beta = 1.5$. Ista zavisnost za vrednosti parametara $\alpha = 0.5$ i $\beta = 2$ (za koje β ima kritičnu vrednost) dati su na slici 7.4. Kao što možemo da vidimo, efektivna dejstva daju podjednako dobre rezultate u oba slučaja kao i kod anharmonijskog oscilatora. Prilazak kritičnoj tački kao što je $\beta = 2$ svakako utiče na fizičke veličine koje računamo (pojavljuju se nova vezana stanja u spektru), ali ubrzanja koja daju efektivna dejstva ni na koji način nisu promenjena.



Slika 7.4: Zavisnosti kao na slici 7.3, ali za modifikovani Pošl-Teler potencijal sa kritičnom vrednošću konstante $\beta = 2$. Ostali parametri su nepromenjeni.

Sa porastom nivoa konvergencije p raste i kompleksnost izraza za efektivna dejstva, i to eksponencijalno. Prema tome, eksponencijalno raste i vreme potrebno za izvišavanje simulacija koje koriste viša efektivna dejstva, kao što je prikazano na slici 7.5. Međutim,



Slika 7.5: Relativni porast u vremenu rada numeričkih simulacija $t_{CPU}^{(p)} / t_{CPU}^{(1)}$ u funkciji od nivoa konvergencije p , kao posledica povećanja algebarske kompleksnosti izraza za viša efektivna dejstva.

kao što smo videli, povećanjem nivoa p drastično ubrzavamo konvergenciju ka kontinuum limesu. Važna posledica ovoga je da za veće vrednosti p možemo da koristimo mnogo grublje diskretizacije, odnosno mnogo manje vrednosti N , a da dobijemo rezultate iste preciznosti kao i za manje vrednosti p za koje je neophodno koristiti fine diskretizacije, sa velikim brojem vremenskih koraka N . Ovo predstavlja osnovu ubrzanja koje smo dobili. Preciznije rečeno, analitički smo izveli efektivno dejstvo koje nam daje ubranu konvergenciju, sa odstupanjem od kontinuum limesa proporcionalnim sa $1/N^p$, pa ako smo koristeći naivno dejstvo sa N_1 podeonih tačaka postigli tipičnu preciznost $1/N_1$, tada je na nivou p za istu preciznost potrebno koristiti mnogo grublju diskretizaciju sa N_p podeonih tačaka, gde je

$$\frac{1}{N_1} \sim \frac{1}{N_p^p} \quad \Rightarrow \quad N_p \sim N_1^{1/p}.$$

Kao što smo videli, eksponencijalni porast u kompleksnosti izraza za efektivna dejstva ograničava odozgo praktično upotrebljive vrednosti p . Sa slike 7.5 međutim vidimo da je $p = 9$ još uvek daleko od te gornje granice – dobit od osam redova veličine u brzini konvergencije (odnosno odgovarajuće smanjenje gustine diskretizacije N) daleko premašuje porast vremena izvršavanja numeričkih simulacija za jedan red veličine.

7.1.2 Amplitude za višestične teorije

U ovoj sekciji ćemo predstaviti numeričke rezultate naših Monte Karlo simulacija²³ primenjenih na računanje amplituda za višestične teorije [10]. Da bismo verifikovali analitički izvedeno ubrzanje funkcionalnih integrala, proučavali smo sistem dve čestice ($M = 2$) u dve prostorne dimenzije ($d = 2$), uz kvartičnu interakciju definisanu potencijalom

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 + \frac{g_1}{24}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^4 + \frac{g_2}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)^2. \quad (7.5)$$

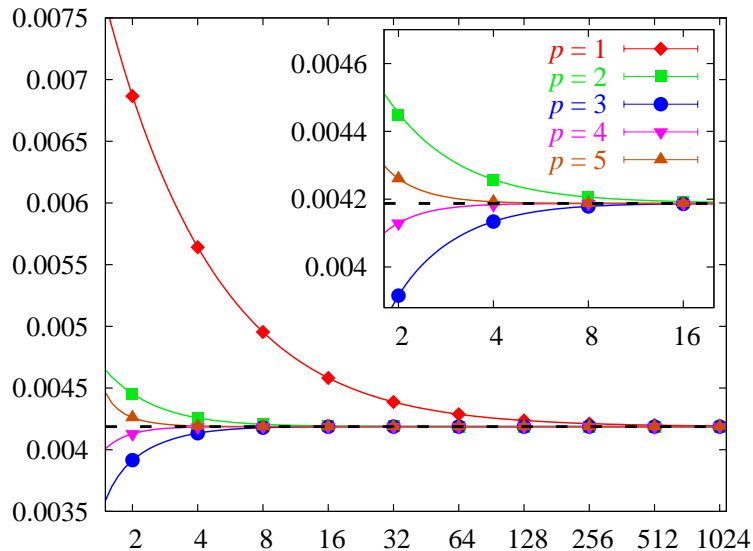
²³Uobičajena skraćena u literaturi za ovakvu vrstu numeričkih simulacija je PIMC, od izraza Path Integral Monte Carlo.

Poslednji član u potencijalu narušava translacionu invarijantnost, što sprečava pojavu kontinualnog spektra zbog degeneracije prilikom integracije po vektorima položaja. Iako se ovaj sistem može redukovati na kretanje jedne efektivne čestice prelaskom u sistem centra mase, čak i nakon takve transformacije ovaj sistem suštinski spada u višestručne sisteme u našoj notaciji ($dM > 1$), pošto je broj dimenzija $d = 2$, pa se ne mogu koristiti efektivna dejstva izvedena za slučaj jednočestičnih teoriju u $d = 1$.

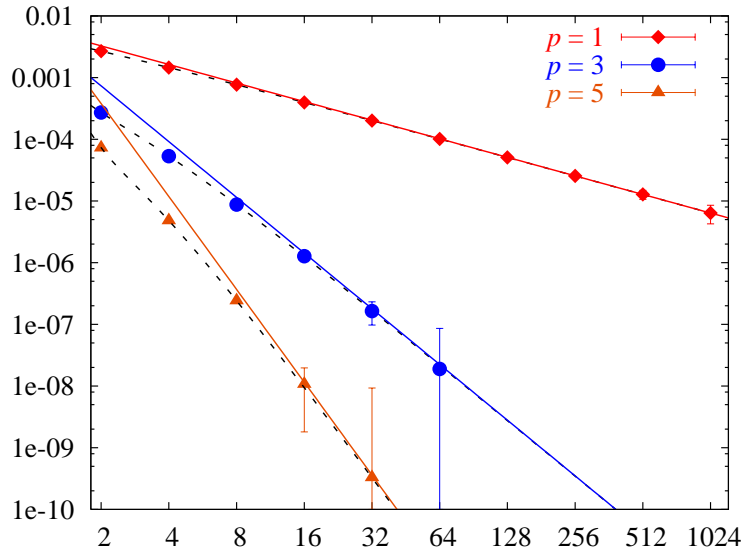
Za opisani sistem smo izvršili numeričke simulacije pomoću SPEEDUP [13] programskog koda za različite vrednosti konstanti interakcije g_1 i g_2 , kao i za seriju početnih i finalnih stanja, koja su ovde reprezentovana parovima dvodimenzionalnih vektora položaja, odnosno u kompaktnoj notaciji četvorodimenzionalnim vektorima. Kao i ranije, kontinualne vrednosti amplituda su ocenjene fitovanjem na diskretizovane vrednosti amplitude dobijene iz simulacija, na osnovu analitički izvedene relacije

$$A_N^{(p)} = A^{(p)} + \frac{B^{(p)}}{N^p} + \frac{C^{(p)}}{N^{p+1}} + \dots \quad (7.6)$$

Za sve vrednosti nivoa konvergencije p dobijeno je da se ocene kontinuum amplitude $A^{(p)}$ slažu unutar granica greške, odnosno poklapaju unutar statistički značajnog intervala širine jedne standardne devijacije. Dobijena $1/N$ zavisnost daje eksplicitnu potvrdu analitički izvedenog ubrzanja konvergencije funkcionalnih integrala za višestručne teorije. Tipičan slučaj je ilustrovan na slici 7.6. Očekivana $1/N^p$ konvergencija najlakše može da se uoči sa slike 7.7, na kojoj su prikazana odstupanja diskretizovanih amplituda od odgovarajućih kontinuum limesa na log-log grafiku u funkciji od gustine diskretizacije N . Kao i ranije, povećanje nivoa p dovodi do brže konvergencije ka kontinuum limesu.



Slika 7.6: Konvergencija diskretizovanih amplituda $A_N^{(p)}$ ka odgovarajućoj kontinualnoj vrednosti u funkciji od gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 3, 4, 5$ za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije koje se kreću u kvartičnom potencijalu (7.5) uz vrednosti parametara $g_1 = 10$, $g_2 = 0$, vreme propagacije $T = 1$, i za početno i krajnje stanje $a = (0, 0; 0.2, 0.5)$, $b = (1, 1; 0.3, 0.6)$. Broj Monte Karlo uzoraka je $N_{MC} = 10^6$. Horizontalna isprekidana linija predstavlja kontinuum vrednost amplitude dobijene iz fitovanja kao slobodni član, a pune linije daju odgovarajuće fitovane funkcije iz jednačine (7.6).



Slika 7.7: Odstupanja diskretizovanih amplituda od odgovarajućih kontinuum limes vrednosti $|A_N^{(p)} - A|$ kao funkcija od gustine diskretizacije N na log-log grafiku za $p = 1, 3, 5$ za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije koje se kreću u kvartičnom potencijalu (7.5) uz vrednosti parametara $g_1 = 10$, $g_2 = 0$, vreme propagacije $T = 1$, i za početno i krajnje stanje $a = (0, 0; 0.2, 0.5)$, $b = (1, 1; 0.3, 0.6)$. Broj Monte Karlo uzoraka je $N_{MC} = 10^6$ ($p = 1$), 10^9 ($p = 3$), 10^{11} ($p = 5$). Pune linije daju vodeće $1/N^p$ ponašanje, a isprekidane linije su odgovarajuće fitovane funkcije (7.6), bez slobodnog člana $A^{(p)}$.

Dakle, korišćenje efektivnih dejstava za višečestične teorije izvedenih u prethodnim poglavljima ima očekivane prednosti u numeričkim primenama. Naravno, da bi se dobili podaci za sliku 7.7 bilo je neophodno značajno procesorsko vreme na paralelnom klasteru, pošto smo želeli da ilustrujemo ponašanje greške koja veoma brzo postaje ekstremno mala. Međutim, u tipičnoj primeni korišćenje efektivnog dejstva reda $p = 5$ omogućava da se dobiju četiri značajne cifre za amplitudu prelaza čak i za tako grube diskretizacije kao što je $N = 2$. Za ovakve simulacije neophodno je zanemarljivo vreme i to pokazuje glavnu prednost novog pristupa.

Jedan od važnih tehničkih detalja je i kriterijum za optimalan izbor broja Monte Karlo uzoraka N_{MC} u numeričkim simulacijama za računanje funkcionalnih integrala. Statistička greška Monte Karlo metoda je proporcionalna sa $1/\sqrt{N_{MC}}$, a pošto se na datom nivou p kontinualnim vrednostima amplituda može prići do na $1/N^p$ za dato N , što predstavlja grešku diskretizacije, optimalan izbor je dat sa $1/\sqrt{N_{MC}} \sim 1/N^p$. Ukoliko gustinu diskretizacije N smanjujemo sa povećanjem nivoa p tako da je greška diskretizacije konstantna, optimalan broj Monte Karlo uzoraka ostaje isti.

7.2 Energetski spektri

Particiona funkcija predstavlja centralni objekat u statističkoj mehanici, a mi ćemo ga iskoristiti za dobijanje informacija o energetskom spektru teorija. Funkcionalni formalizam daje elegantan okvir za računanje particionih funkcija koji može da se iskoristi takođe i za izvođenje analitičkih aproksimativnih tehnika, kao i za numeričke primene. Metod opisan u ovom radu, koji daje analitičko poboljšanje u konvergenciji diskretizovanih amplituda,

potpuno analogno važi i kada se računaju diskretizovane particione funkcije, pošto se one razlikuju od amplituda samo po tome što se dodaje još jedna integracija po periodičnim graničnim uslovima,

$$Z(\beta_t) = \int_{-\infty}^{\infty} da A(a, a; \beta_t). \quad (7.7)$$

Kao i ranije u sekciji o termalnim očekivanim vrednostima, sada inverzna temperatura β_t igra ulogu vremena propagacije. Diskretizovana particiona funkcija je data izrazom

$$Z_N(\beta_t) = \int_{-\infty}^{\infty} da A_N(a, a; \beta_t) = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon_N} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_0 dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{-S_N}, \quad (7.8)$$

gde je $q_0 = q_N = a$ promenljiva po kojoj se takođe integriše, a $\epsilon_N = \beta_t/N$ je diskretni “vremenski” korak.

Sa druge strane, ako particionu funkciju izračunamo kao trag u energetskom bazu, dobijamo

$$Z(\beta_t) \equiv e^{-\beta_t F(\beta_t)} = \sum_{n=0}^{\infty} d_n e^{-\beta_t E_n}. \quad (7.9)$$

pri čemu je $F(\beta_t)$ slobodna energija sistema, a d_n je degeneracija energetskog nivoa E_n . Dakle, particiona funkcija je u potpunosti određena energetskim spektrom teorije i obratno. Ako definišemo hijerarhiju dodatnih funkcija

$$F_{(n)}(\beta_t) = -\frac{1}{\beta_t} \ln \left(e^{-\beta_t F} - \sum_{i=0}^{n-1} d_i e^{-\beta_t E_i} \right), \quad (7.10)$$

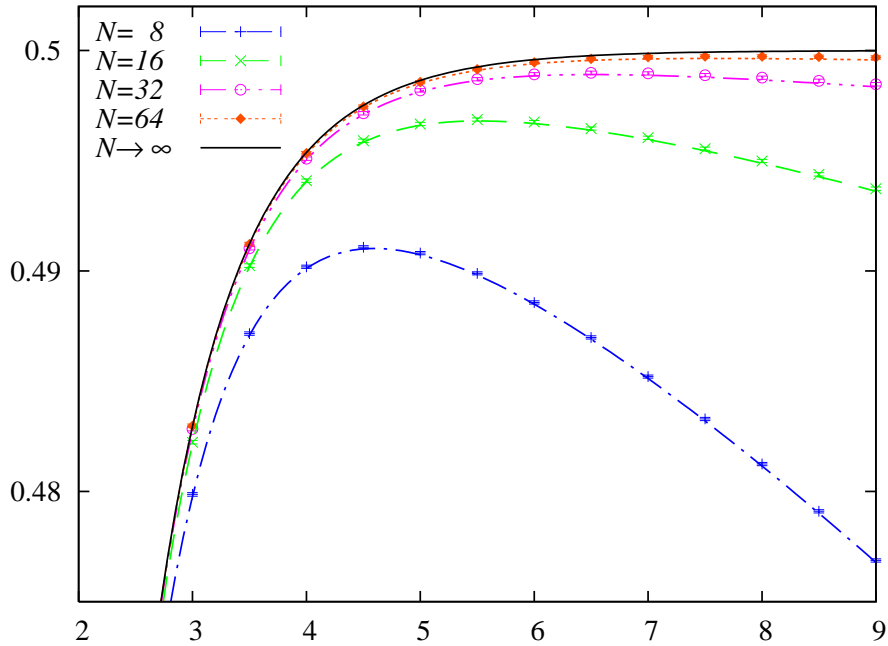
uz konvenciju $F_{(0)}(\beta_t) \equiv F(\beta_t)$, vidimo da se u limesu $\beta_t \rightarrow \infty$ funkcija $F_{(n)}(\beta_t)$ ponaša kao $F_{(n)}(\beta_t) \rightarrow E_n$. Pošto se degeneracije d_n obično mogu odrediti iz simetrijskih razmatranja, ako precizno znamo particionu funkciju na ovaj način možemo da dobijemo ceo energetski spektar teorije. Zapravo, bila bi nam neophodna particiona funkcija (odnosno funkcije $F_{(n)}$) za jako velike vrednosti inverzne temperature β_t , što je numerički veoma teško postići, i zahteva sve finije i finije diskretizacije kako bi vremenski korak ϵ_N bio dovoljno mali.

Drugi problem o kome treba povesti računa je da limesi $N \rightarrow \infty$ i $\beta_t \rightarrow \infty$ koje moramo da upotrebimo ne komutiraju međusobno, i moraju se simultano izvesti. To se najlakše vidi na primeru egzaktno rešivog modela – harmonijskog oscilatora. Za ovaj potencijal moguće je analitički izračunati ne samo egzaktnu vrednost particione funkcije i slobodne energije, nego i odgovarajuće diskretizovane izraze u levoj preskripciji za naivno diskretizovano dejstvo [34],

$$F_N^{HO}(\beta_t) = \frac{1}{\beta_t} \ln (2 \sinh \tilde{\omega} \beta_t), \quad (7.11)$$

gde je $\tilde{\omega} = (2/\epsilon_N) \operatorname{arcsinh}(\omega\epsilon_N/2)$. Ovo je ilustrovano na slici 7.8. Iz gornjeg izraza sledi da, za razliku od kontinualne vrednosti slobodne energije $F(\beta_t)$, diskretizovana slobodna energija $F_N(\beta_t)$ ne teži konstantnoj vrednosti za veliko β_t (i slično za ostale diskretizovane funkcije $F_{(n),N}(\beta_t)$). U diskretizovanoj teoriji energetski nivoi zavise od ϵ_N , odnosno od β_t . Za harmonijski oscilator se za n -ti energetski nivo dobija

$$E_{N,n}^{HO}(\epsilon_N) = \tilde{\omega} (n + 1/2),$$



Slika 7.8: Egzaktna rešenja (7.11) za diskretizovane vrednosti slobodne energije za harmonijski oscilator u levoj preskripciji F_N u funkciji od inverzne temperature β_t za $\omega = 1$, za različite vrednosti N . Tačke predstavljaju rezultate numeričkih simulacija sa pripadajućim Monte Karlo statističkim greškama, i iskorišćene su za verifikovanje ispravnosti SPEEDUP programskog koda. Broj Monte Karlo uzoraka je $N_{MC} = 10^7$.

i jasno je da ne možemo da koristimo limes $\beta_t \rightarrow \infty$ za fiksiranu vrednost N . Ako bismo to pokušali, dobili bismo [75] za slobodnu energiju zavisnosti kao na slici 7.8 iz kojih nije moguće izvući informacije o energetskom spektru. U narednim sekcijama ovog poglavlja ćemo pokazati kako se praktično rešavaju opisani problemi.

Činjenica da za harmonijski oscilator egzaktno znamo diskretizovane vrednosti slobodne energije može da se iskoristi za dodatno verifikovanje korektnosti algoritma. Na gornjoj slici su, pored analitičkih zavisnosti $F_N(\beta_t)$, dati i rezultati numeričkih simulacija. Iz odličnog slaganja između analitičkih i numeričkih rezultata možemo da zaključimo da SPEEDUP programski kod radi korektno i da nema skrivenih sistematskih grešaka. Tehnički detalj na koji treba skrenuti pažnju je da smo, pošto su gornji analitički izrazi izračunati u levoj preskripciji, u SPEEDUP kodu takođe upotrebili levu preskripciju, što je mala i jednostavna promena, ali esencijalna za verifikovanje rezultata.

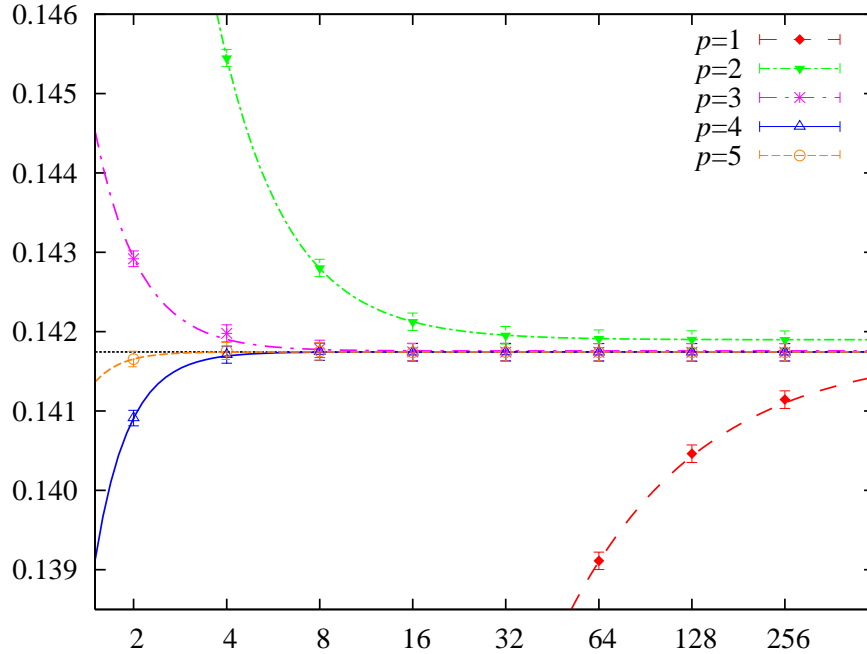
7.2.1 Spektri jednočestičnih teorija u $d = 1$

Kao što nam je dobro poznato na osnovu prethodnih razmatranja, diskretizovana slobodna energija se od kontinuum vrednosti razlikuje do na članove proporcionalne sa ϵ_N ukoliko se koristi naivno diskretizovano dejstvo u preskripciji srednje tačke, $F_N(\beta_t) - F(\beta_t) = O(\epsilon_N)$. Ukoliko iskoristimo levu preskripciju, imaćemo bolju konvergenciju, pošto particiona funkcija tada konvergira kao $1/N^2$, pa će važiti $F_N(\beta_t) - F(\beta_t) = O(\epsilon_N^2)$. Da bismo dalje sistematski ubrzali konvergenciju diskretizovanih vrednosti slobodne energije ka odgovarajućoj kontinuum vrednosti kao ϵ_N^p , neophodno je da iskoristimo efektivna dejstva odgovarajućeg

nivoa p , data prethodno izvedenim izrazima $S_N^{(p)}$, i onda će važiti

$$F_N^{(p)}(\beta_t) = F(\beta_t) + O(\epsilon_N^p).$$

Pri tome, zbog limesa $\beta_t \rightarrow \infty$ moramo da vodimo računa i o vrednosti N koju koristimo, tako da $\epsilon_N = \beta_t/N$ bude dovoljno malo. Cena koju pri tom plaćamo je povećanje vremena izvršavanja numeričkih simulacija, koje raste linearno sa gustinom diskretizacije N . Za fiksiranu vrednost β_t na slici 7.9 vidimo kako korišćenje efektivnih dejstava nivoa p daje ubranu konvergenciju ka kontinuum vrednosti slobodne energije za anharmonijski oscilator [75].



Slika 7.9: Zavisnost diskretizovane slobodne energije $F_N^{(p)}(\beta_t)$ od gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 3, 4, 5$ za anharmonijski potencijal sa kvartičnom interakcijom dat jednačinom (7.1), uz parametre $\lambda = 1$, $\beta_t = 1$, $N_{MC} = 10^7$. Ovakvo ponašanje se dobija i za druge vrednosti parametara, kao i za druge potencijale, pod uslovom da važi $\epsilon_N = \beta_t/N \lesssim 1$.

U numeričkim simulacijama baziranim na Monte Karlo metodu koje smo koristili za računanje slobodne energije postoje dva izvora grešaka. Prva vrsta je statistička greška, koja je inherentna svakom Monte Karlo algoritmu i proporcionalna je sa $1/\sqrt{N_{MC}}$. Ona se lako može kontrolisati menjanjem broja Monte Karlo uzoraka N_{MC} , ali se ne može eliminisati. Drugi izvor grešaka je vremenska diskretizacija, koja je, kao što smo pokazali, proporcionalna sa $1/N^p$ kada se koristi efektivno dejstvo nivoa konvergencije p . Ove dve vrste grešaka treba da budu otprilike istog reda veličine u numeričkim primenama, pošto nema smisla povećavati broj Monte Karlo uzoraka i na taj način smanjivati statističku grešku, ako je greška diskretizacije značajno veća od toga (i obratno). U praksi se preciznost fiksira izborom broja Monte Karlo uzoraka, a onda se greška diskretizacije smanjuje ili povećanjem gustine diskretizacije N za fiksiranu vrednost nivoa konvergencije p , ili povećanjem nivoa konvergencije p uz fiksiranu vrednost N . Pošto vreme izvršavanja simulacija slabo zavisi od nivoa p za vrednosti koje smo koristili ($p \leq 10$), mnogo je efikasnije povećati vrednost p do maksimalno dostupne, a ond prilagoditi vrednost N tako da važi $1/\sqrt{N_{MC}} \sim 1/N^p$, pri tom vodeći računa o uslovu $\epsilon_N \lesssim 1$.

Razmotrimo sada ubrzanje koje dobijamo na ovaj način. Ako fiksiramo preciznost (odnosno statističku grešku) na neku zadatu vrednost $\Delta \sim 1/\sqrt{N_{MC}}$, za nivo p je potrebno koristiti gustinu diskretizacije $N \sim \Delta^{-1/p}$, a vreme izvršavanja simulacije se skalira kao $t_{CPU}^{(p)} \sim f(p)N_{MC}N \sim \Delta^{-2-1/p}$, gde funkcija $f(p)$ predstavlja porast kompleksnosti izraza za efektivna dejstva i estimatore za veće vrednosti p . Relativno ubrzanje koje dobijamo korišćenjem efektivnog dejstva nivoa p u odnosu na naivno dejstvo je

$$\frac{t_{CPU}^{(1)}}{t_{CPU}^{(p)}} \sim f(p)\Delta^{-1+1/p}. \quad (7.12)$$

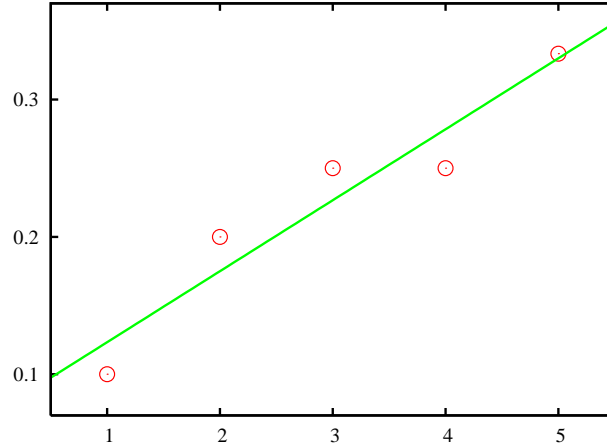
Dakle, korišćenjem viših nivoa efektivnih dejstava brzo prilazimo idealnom ubrzanju Δ^{-1} , pošto funkcija $f(p)$ ima umerenu zavisnost od nivoa p , pa čak i za $p = 10$ ima vrednost reda veličine 10. Da bismo ovo ilustrovali, navešćemo da ako u našim numeričkim simulacijama fiksiramo preciznost na dve značajne cifre, za $p = 9$ dobijamo ubrzanje reda veličine 10^2 , dok za četiri značajne cifre ubrzanje postaje reda veličine 10^4 . Prema tome, najveća prednost novog metoda leži u računanju veličina sa velikom preciznošću, a upravo to je neophodno za nalaženje energetskog spektra neke teorije.

Kao što smo videli, za svaki unapred zadati interval inverznih temperatura $[0, \beta_{t,max}]$ možemo da izračunamo slobodnu energiju sa željenom preciznošću ako na odgovarajući način odaberemo parametre N , p i N_{MC} . Sada ćemo uporediti kvalitet različitih diskretizacija slobodne enegrije $F_N^{(p)}$ sa idealnom diskretizacijom F^* na zatom skupu inverznih temperatura $\{\beta_{t,i}\}$ i pokazati da i iz ovog razmatranja sledi da je optimalan izbor parametara dat sa $1/\sqrt{N_{MC}} \sim 1/N^p$. Standardan način za to je konstrukcija χ^2 funkcije, koja je u ovom slučaju definisana sa

$$\chi^2(N, p) = \frac{1}{L} \sum_{\{\beta_{t,i}\}} \frac{\left(F_N^{(p)}(\beta_{t,i}) - F^*(\beta_{t,i})\right)^2}{\left(\Delta F_N^{(p)}(\beta_{t,i})\right)^2 + \left(\Delta F^*(\beta_{t,i})\right)^2}, \quad (7.13)$$

gde je L broj tačaka u skupu $\{\beta_{t,i}\}$, a ΔF je odgovarajuća statistička Monte Karlo greška. Uzimanje u obzir Monte Karlo greške za veličinu F^* u težinama tačaka u χ^2 funkciji je posledica činjenice da se i F^* računa numerički, pa je takođe poznata samo do na statističku grešku. Kao što je poznato [33], vrednost χ^2 bi trebalo da bude oko jedinice za dobro optimizovane vrednosti N i p . Primetimo da se dobija $\chi^2 \gg 1$ ako egzaktna vrednost F^* ne leži unutar granica grešaka za $F_N^{(p)}$, dok je $\chi^2 \ll 1$ ako su Monte Karlo greške suviše velike. U praktičnim primenama se za vrednost F^* može uzeti fitovana vrednost slobodnog člana u razvoju $F_N^{(p)}$ po $1/N$, ili jednostavno diskretizovana vrednost slobodne energije za dovoljno veliko N i p . Računanje funkcije χ^2 nam omogućava da procenimo da li su dobijene numeričke vrednosti dovoljnog kvaliteta, odnosno da nam ukaže na probleme ukoliko je dobijena vrednost značajno različita od jedinice.

Numerički smo izveli ovaj test [75] za slučaj anharmonijskog oscilatora sa kvartičnom interakcijom, čiji je potencijal dat jednačinom (7.1). Diskretizovane slobodne energije smo izračunali za $\beta_t \in [0.5, 8]$ sa korakom 0.5, za vrednosti $N \leq 1024$ i nivoa konvergencije $p = 1, 2, \dots, 9$. Broj Monte Karlo uzoraka koji smo koristili je $N_{MC} = 10^6$. Poređenje je izvršeno za opseg konstante interakcije $\lambda \in \{0, 0.1, 1, 10, 100, 1000\}$. Uzimajući vrednost $F_{1024}^{(9)}$ kao egzaktni rezultat, izračunali smo χ^2 za svaki par parametara (N, p) i konstantu interakcije λ , i nakon toga našli parove (N, p) koji imaju otprilike jednake vrednosti $\chi^2 \sim 1$. Ovi parovi vrednosti su prikazani na slici 7.10. Kao što možemo da vidimo, dobija se



Slika 7.10: Parovi (N, p) koji daju slične vrednosti $\chi^2 \sim 1$. Na x -osi je data vrednost p , a na y -osi je $1/\log_2 N$ za anharmonijski oscilator (7.1) uz parametre $\lambda = 1$, $\beta_{t,max} = 8$, $N_{MC} = 10^6$, $\chi^2 \approx 2 - 4$.

relacija $1/\log_2 N \propto p$, što potvrđuje da su optimalne vrednosti parametara zaista povezane relacijom $1/N^p = const$.

Nakon razmatranja svih važnih detalja numeričkih procedura, prelazimo na rezultate simulacija za energetske spektre jednočestičnih teorija. Kao što je objašnjeno ranije, energetske nivoe ćemo određivati koristeći pogodno definisanih funkcija (7.10), koje ćemo sada napisati u obliku

$$F_{(n)}(\beta_t) = E_n - \frac{1}{\beta_t} \ln \left(1 + \sum_{i=n+1}^{\infty} e^{-\beta_t(E_i - E_n)} \right). \quad (7.14)$$

Pri tome smo pretpostavili da su svi energetske nivo nedegenerisani ($d_n = 1$), što važi za teorije razmatrane u ovoj sekciji. Imajući u vidu gornju definiciju, numeričke rezultate smo fitovali na funkcije oblika

$$f_{(n)}(\beta_t) = E_n - \frac{1}{\beta_t} \ln (1 + C_1 e^{-C_2 \beta_t}), \quad (7.15)$$

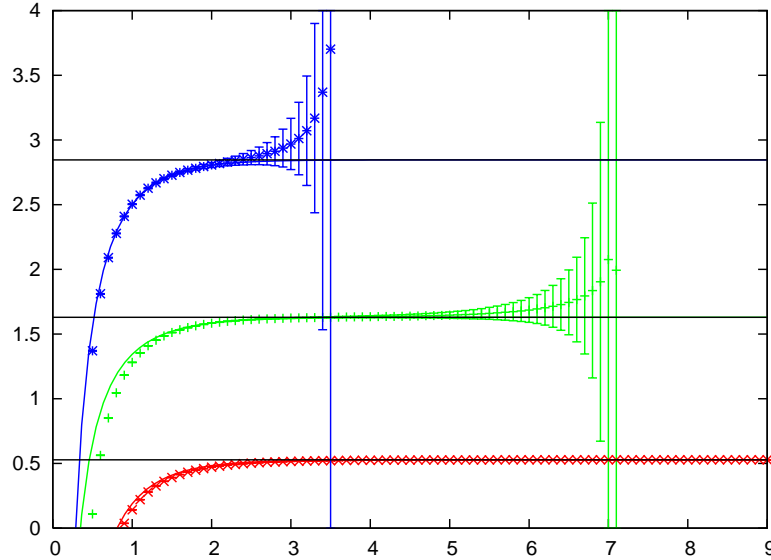
gde su E_n , C_1 i C_2 parametri fita. Pri tome, u fitu dozvoljavamo vrednosti parametra $C_1 \neq 1$, a vrednost C_2 ne interpretiramo kao razliku $E_{n+1} - E_n$, pošto član koji sadrži ove parametre u funkciji $f_{(n)}$ aproksimira čitavu sumu pod logaritmom u jednačini (7.14). Slika 7.11 pokazuje slobodnu energiju $F(\beta_t)$ (aproksimiranu diskretizovanim vrednostima za $N = 256$ i $p = 9$), kao i odgovarajuće pridružene funkcije $F_{(1)}(\beta_t)$ i $F_{(2)}(\beta_t)$ za anharmonijski oscilator sa konstantom interakcije $\lambda = 1$. Primetimo da klasa funkcija (7.15) daje bolje ocene za veće vrednosti inverzne temperature β_t . Ovo se zaista vidi sa slike 7.11.

Rezultati za slobodnu energiju su dobijeni direktno iz SPEEDUP Monte Karlo simulacija i pomoću njih smo odredili energiju osnovnog stanja E_0 . Dodatne funkcije $F_{(n)}$ su onda dobijene rekursivnom primenom jednačine (7.10), na osnovu prethodno određenih energetskih nivoa. Greške na slici 7.11 su ocenjene na osnovu formule

$$\Delta F_{(n)} = \frac{e^{-\beta_t F} \Delta F + \sum_{i=0}^{n-1} e^{-\beta_t E_i} \Delta E_i}{e^{-\beta_t F} - \sum_{i=0}^{n-1} e^{-\beta_t E_i}}, \quad (7.16)$$

koja direktno sledi iz jednačine (7.10). Za velike vrednosti inverzne temperature β_t imenilac u gornjoj formuli postaje eksponencijalno mali, što dovodi do eksponencijalnog porasta ocene

greške $\Delta F_{(n)}$. Takve tačke veoma brzo prestaju da daju doprinos računanju odgovarajućeg energetskog nivoa, pošto su pri fitovanju težine tačaka proporcionalne sa $1/(\Delta F_{(n)})^2$, tako da to ne predstavlja problem. Međutim, vredi primetiti da bi nedostatak eksponencijalnog porasta grešaka na slici 7.11 bio dobra indikacija loših numeričkih rezultata.



Slika 7.11: Zavisnost slobodne energije F i prve dve pridružene funkcije $F_{(1)}$ i $F_{(2)}$ od inverzne temperature β_t za anharmonijski oscilator sa konstantom interakcije $\lambda = 1$. Krive date punim linijama predstavljaju fitovane funkcije na osnovu formule (7.15). Horizontalne linije predstavljaju odgovarajuće energetske nivoe E_n . Parametri numeričkih simulacija su određeni sa $p = 9$, $N = 256$ i $N_{MC} = 10^7$.

Efekat eksponencijalnog porasta grešaka postaje izraženiji za više energetske nivoe. Pored prethodno opisanog razloga za porast grešaka, iz jednačine (7.16) vidimo da postoji i efekat nagomilavanja numeričkih grešaka svih prethodno izračunatih energetskih nivoa, pošto za definisanje pridruženih funkcija $F_{(n)}$ koristimo sve prethodno izražunate vrednosti E_0, \dots, E_{n-1} . Zbog toga je broj energetskih nivoa koje možemo da odredimo na ovaj način ograničen brojem Monte Karlo uzoraka u numeričkim simulacijama, kao i brojem tačaka u skupu $\{\beta_{t,i}\}$ koji koristimo za ocenu vrednosti energija. Kao ilustracija mogućnosti opisanog metoda, u tabeli 7.1 je dato nekoliko nižih energetskih nivoa anharmonijskog oscilatora za različite vrednosti konstante interakcije λ . Energija osnovnog stanja je određena na pet značajnih cifara za sve vrednosti konstante interakcije, a za više energetske nivoe greška raste. Porast grešaka je brži za veće vrednosti konstante interakcije λ , pošto su i vrednosti energetskih nivoa viši, tako da članovi $e^{-\beta_t E_n}$ postaju sve manji.

Numerički smo proučavali i modifikovani Pošl-Teler i Morzeov potencijal [75] i dobili isto kvalitativno ponašanje. Posebno, analitički izvedeno ubrzanje je dobijeno u svim slučajevima. Energetski nivoi koje smo našli za modifikovani Pošl-Teler potencijal, dat jednačinom (7.3), prikazani su u tabeli 7.2. Ovaj rešiv model smo odabrali pošto on omogućava i verifikaciju numeričke procedure koju smo koristili. Egzaktne vrednosti energetskih nivoa su date jednačinom

$$E_n^{exact} = -\frac{\alpha^2}{2}(\beta - 1 - n)^2, \quad 0 \leq n \leq \beta - 1, \quad n \in \mathbb{N},$$

λ	E_0	E_1	E_2	E_3
0	0.49993(2)	1.502(2)	2.48(6)	3.6(5)
0.1	0.50301(2)	1.516(1)	2.54(5)	3.5(2)
1	0.52765(2)	1.6295(8)	2.85(2)	3.98(7)
10	0.67335(2)	2.230(1)	4.12(2)	
100	1.16247(4)	4.058(6)		
1000	2.3578(2)			

Tabela 7.1: Niži energetske nivoi anharmonijskog oscilatora sa kvartičnom konstantom interakcije λ , numerički izračunati uz parametre $N = 256$, $p = 9$, $N_{MC} = 10^7$ i uz opseg vrednosti inverzne temperature $\beta_t \in [0.5, 8]$ sa korakom 0.5.

gde su α i β konstante interakcije ovog potencijala. Kao što vidimo iz tabele 7.2, slaganje numeričkih i egzaktnih rezultata je odlično čak i za malu vrednost gustine diskretizacije N koju smo koristili. Upotreba viših efektivnih dejstava je ovde ključna, pošto ona značajno povećavaju preciznost izračunavanja slobodne energije, a samim tim i energetskih nivoa. Na taj način se redukuje akumulirana numerička greška.

α	β	E_0	E_0^{exact}	E_1	E_1^{exact}
0.25	5.5	-0.6329(2)	-0.63281	-0.3819(7)	-0.38281
0.25	15.5	-6.5704(6)	-6.57031	-5.694(9)	-5.69531
0.5	5.5	-2.5313(3)	-2.53125	-1.530(3)	-1.53125
0.5	15.5	-26.281(1)	-26.2813	-22.80(3)	-22.7813
α	β	E_2	E_2^{exact}	E_3	E_3^{exact}
0.25	5.5	-0.18(2)	-0.19531	-0.09(3)	-0.07031
0.25	15.5	-4.92(2)	-4.88281	-3.8(4)	-4.13281
0.5	5.5	-0.80(2)	-0.78125	-0.31(6)	-0.28125
0.5	15.5	-19.6(5)	-19.5313	-16.9(9)	-16.5313

Tabela 7.2: Niži energetske nivoi modifikovanog Pošl-Teler potencijala sa konstantama interakcije α i β , numerički izračunati uz parametre $N = 256$, $p = 9$, $N_{MC} = 10^7$ i uz opseg vrednosti inverzne temperature $\beta_t \in [0.5, 8]$ sa korakom 0.5.

7.2.2 Spektri višestetičnih teorija

Procedura opisana u prethodnoj sekciji za jednočestične teorije u $d = 1$ prostornih dimenzija se može pravolinijski primeniti i za višestetične teorije u višem broju prostornih dimenzija [10]. Bitna razlika je što je za ovakve teorije obično neophodno uzeti u obzir degeneracije energetskih nivoa, pošto se sa povećanjem broja čestica i broja dimenzija u teoriji obično pojavljuju nove simetrije koje izazivaju pojavu degeneracija. Uopštenje formule (7.14) koje ćemo koristiti ima oblik

$$F_{(n)}(\beta_t) = E_n - \frac{\ln d_n}{\beta_t} - \frac{1}{\beta_t} \ln \left(1 + \sum_{i=n+1}^{\infty} d_i e^{-\beta_t(E_i - E_n)} \right), \quad (7.17)$$

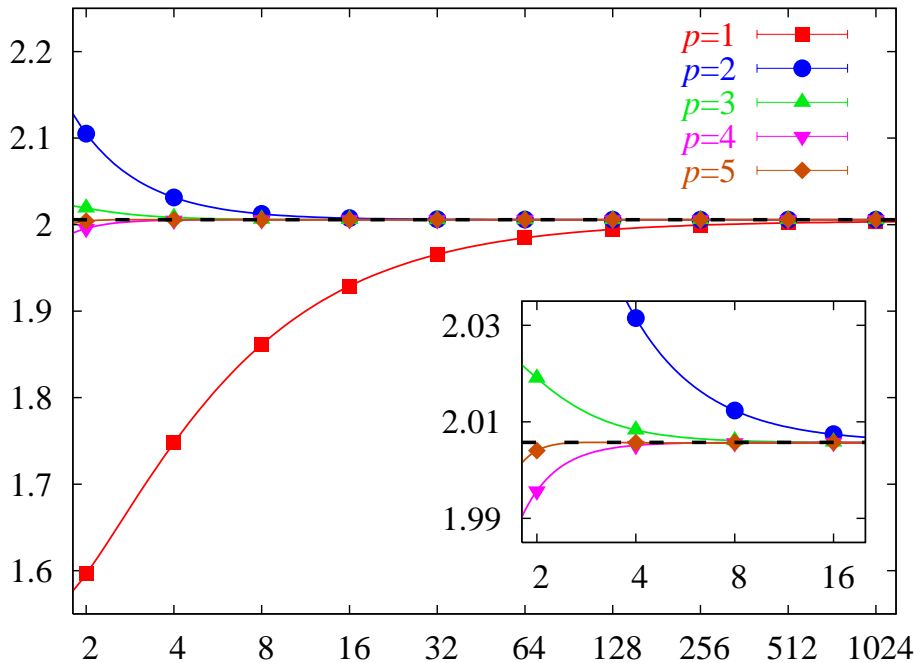
a funkcije koje ćemo fitovati imaće sličan oblik kao i ranije,

$$f_{(n)}(\beta_t) = E_n - \frac{D}{\beta_t} - \frac{1}{\beta_t} \ln(1 + C_1 e^{-C_2 \beta_t}), \quad (7.18)$$

s tim da će sada konstanta D imati fizički smisao logaritma degeneracije d_n nivoa E_n . Ukoliko je vrednost degeneracije nivoa poznata iz simetrijskih razmatranja, onda parametar D nećemo tretirati kao nepoznat, nego ćemo njegovu analitičku vrednost uneti prilikom fitovanja u funkciju (7.18), što će nam omogućiti da preciznije odredimo ostale parametre, a posebno energetski nivo E_n . Ovo potvrđuje poznatu činjenicu da što više analitički znamo o sistemu koji proučavamo, numeričke simulacije i procedure možemo da profinimo tako da nam daju preciznije rezultate za nepoznate fizičke veličine.

Naravno, ukoliko ne znamo degeneracije d_n analitički, možemo da ih odredimo i iz fitovanja gornje funkcije na numerički dobijene rezultate za slobodnu energiju i odgovarajuće pridružene funkcije $F_{(n)}$. Pri tome je preporučljivo koristiti dvostepenu proceduru, u kojoj se prvo dopusti da parametar D bude potpuno neodređen, pa se iz rezultata takvog fita odredi celobrojna vrednost za degeneraciju d_n koja se onda drži fiksirana u novom fitovanju za preostale vrednosti parametara. Činjenica da konstanta D ima oblik $D = \ln d_n$ gde je d_n prirodan broj se na taj način uzima u obzir kao dodatna analitička informacija i koristi za poboljšanje preciznosti procedure fitovanja.

Na slikama 7.12 i 7.13 su prikazani numerički rezultati dobijeni pomoću SPEEDUP programskog koda za sistem dve četice koje interaguju kvartičnim potencijalom (7.5). Na slici 7.12 se vidi ubrzana konvergencija slobodne energije sa povećanjem nivoa efektivnog



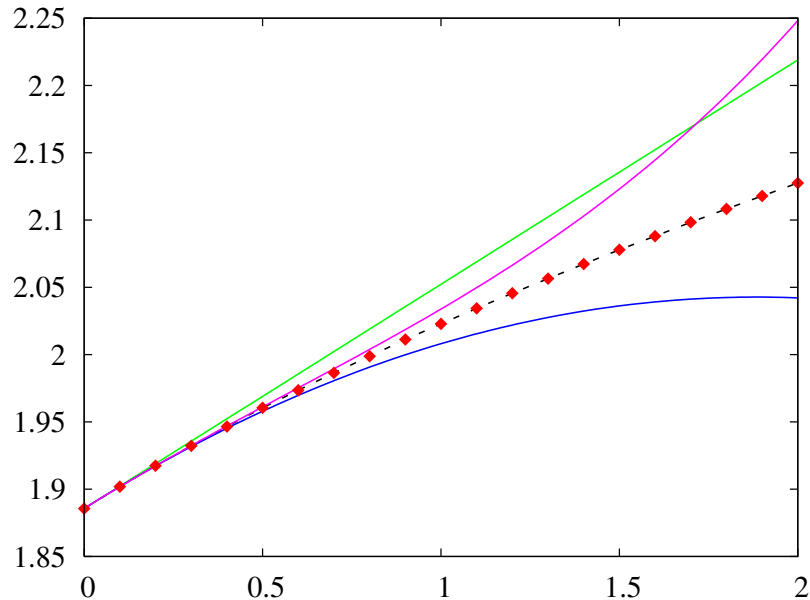
Slika 7.12: Konvergencija diskretizovanih vrednosti slobodne energije $F_N^{(p)}(\beta_t)$ ka kontinuum vrednosti kao funkcija od gustine diskretiacije N za $p = 1, 2, 3, 4, 5$ za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije koje se kreću u kvartičnom potencijalu (7.5) za parametre $g_1 = 1$, $g_2 = 1$, $\beta_t = 1$, $N_{MC} = 10^7$. Horizontalna isprekidana linija predstavlja egzaktну vrednost slobodne energije dobijenu fitovanjem, kao slobodni član u polinomijalnom razvoju po $1/N$.

g_1	E_0	E_1	E_2	E_3
0.0	1.8857(1)	2.3571(6)	2.83(1)	3.3(2)
0.1	1.9019(2)	2.374(2)	2.82(1)	—
1.0	2.0228(2)	2.497(3)	2.94(3)	—
10	2.6327(6)	3.098(4)	3.57(3)	—

Tabela 7.3: Niži energetske nivoi za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije koje se kreću u kvartičnom potencijalu (7.5), gde su konstante interakcije g_1 i $g_2 = 1/9$. Numerički rezultati su dobijeni za parametre $N_{MC} = 10^9$, $p = 5$ i $N = 64$. Degeneracije izračunatih energetskih nivoa su nađene fitovanjem i iznose $d_0 = 1$, $d_1 = 2$, $d_2 = 3$, $d_3 = 6$.

dejstva p . Kao i ranije, dobijamo očekivanu $1/N^p$ konvergenciju. U tabeli 7.3 su dati energetske nivoi koje smo izračunali za ovu teoriju u opsegu od $g_1 = 0$ (slobodna teorija, odnosno harmonijski oscilator) do $g_1 = 10$ (jako interagujuća teorija), pri čemu je vrednost konstante u harmonijskom delu interakcije $g_2 = 1/9$.

Slika 7.13 daje poređenje energije osnovnog stanja razmatranog dvočestičnog modela izračunatog pomoću efektivnog dejstva visokog nivoa p i rezultata koji se dobijaju iz perturbativnog razvoja. Na slici je prikazana zavisnost energije E_0 kao funkcije od kvartične konstante interakcije g_1 za fiksiranu vrednost $g_2 = 1/9$, kao i na prethodnoj slici. Slaganje sa perturbativnim rezultatima je odlično za malu vrednost konstante interakcije, kao što i očekujemo. Međutim, oko vrednosti $g_1 \sim 1$ perturbativni rezultati počinju da divergiraju od egzaktno vrednosti, a za veće vrednosti g_1 se nalazimo potpuno u neperturbativnom režimu gde je ovaj razvoj neprimenljiv. Numerički dobijene vrednosti nemaju ovakve probleme,



Slika 7.13: Energija osnovnog stanja kao funkcija konstante interakcije g_1 za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije koje se kreću u kvartičnom potencijalu (7.5) za $g_2 = 1/9$. Numerički rezultati su dobijeni za parametre $N_{MC} = 10^9$, $p = 5$ i $N = 64$. Krive date punim linijama predstavljaju perturbativne rezultate prvog reda (zeleno), drugog reda (plavo) i trećeg reda (ljubičasto).

kao što se vidi na slici. Opisani pristup omogućava računanje energije osnovnog stanja i više energetske nivoe za velike vrednosti konstanti interakcije, odnosno u duboko neperturbativnom sektoru i to korišćenjem relativno grubih diskretizacija.

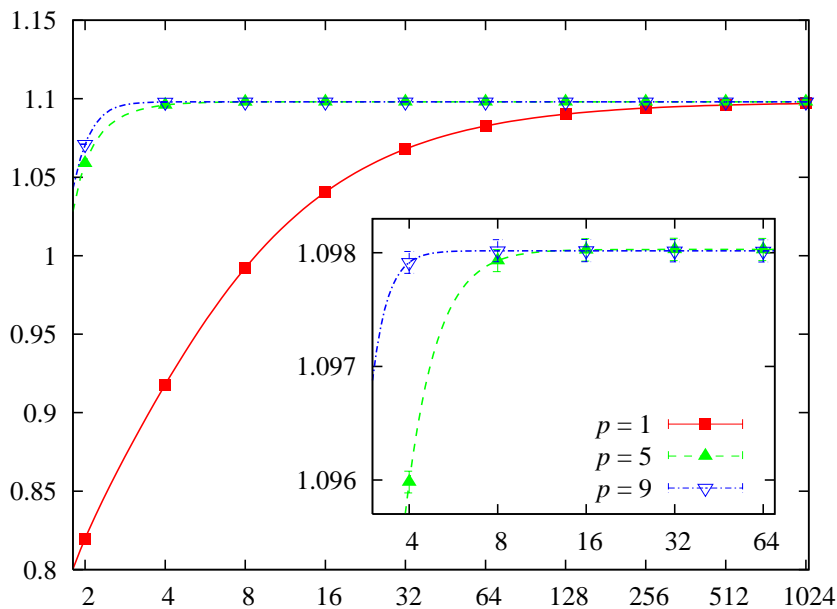
7.3 Termalne očekivane vrednosti

U ovoj sekciji ćemo prikazati numeričke rezultate za termalne očekivane vrednosti koje smo dobili primenom SPEEDUP programskog koda za nekoliko karakterističnih fizičkih modela.

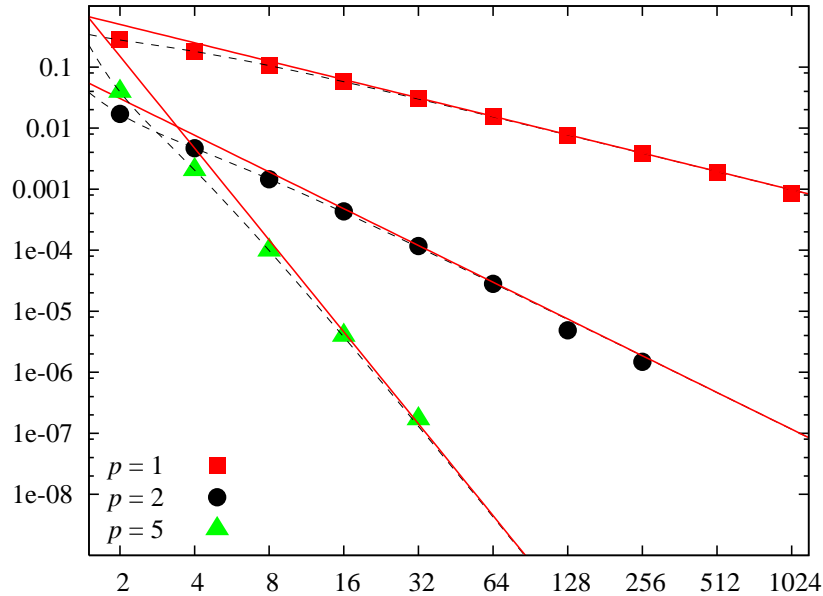
7.3.1 Očekivane vrednosti za jednočestične teorije u $d = 1$

Termalne očekivane vrednosti smo numerički računali za sve prethodno pomenute modele: harmonijski oscilator, anharmonijski oscilator sa kvartičnom interakcijom, modifikovani Pošl-Teler potencijal, Morzeov potencijal [46]. Za sve njih je dobijeno isto kvalitativno ponašanje, odnosno konvergencija odgovarajućih diskretizovanih izraza za termalne očekivane vrednosti je bila ϵ_N^p kada su korišćena izvedena efektivna dejstva i estimatori odgovarajućeg nivoa p .

Na slici 7.14 je prikazano kako diskretizovane vrednosti očekivane vrednosti energije U_N konvergiraju ka kontinuum vrednosti za veliku konstantu interakcije $\lambda = 24$ za anharmonijski oscilator. Numerički rezultati su dobijeni korišćenjem virijalnog estimatora za energiju sistema, koji je izveden u prethodnim poglavljima. Kao što vidimo, naivno diskretizovano dejstvo ($p = 1$) ima očekivano sporu konvergenciju, dok viši nivoi p daju brzu konvergenciju i omogućavaju da praktično dobijemo kontinuum vrednosti već i za male vrednosti gustine



Slika 7.14: Diskretizovane termalne očekivane vrednosti energije $U_N^{(p)}$ kao funkcije gustine diskretizacije N za $p = 1, 5, 9$ za slučaj anharmonijskog oscilatora sa kvartičnom interakcijom $\lambda = 24$ za inverznu temperaturu $\beta_t = 1$ i $N_{MC} = 10^9$. Korišćeni su izvedeni izrazi za virijalni estimator nivoa p . Krive date punim linijama predstavljaju odgovarajuće polinomialne funkcije po $1/N$ fitovane na numeričke rezultate. Krive nivoa p imaju vodeće $1/N^p$ ponašanje.



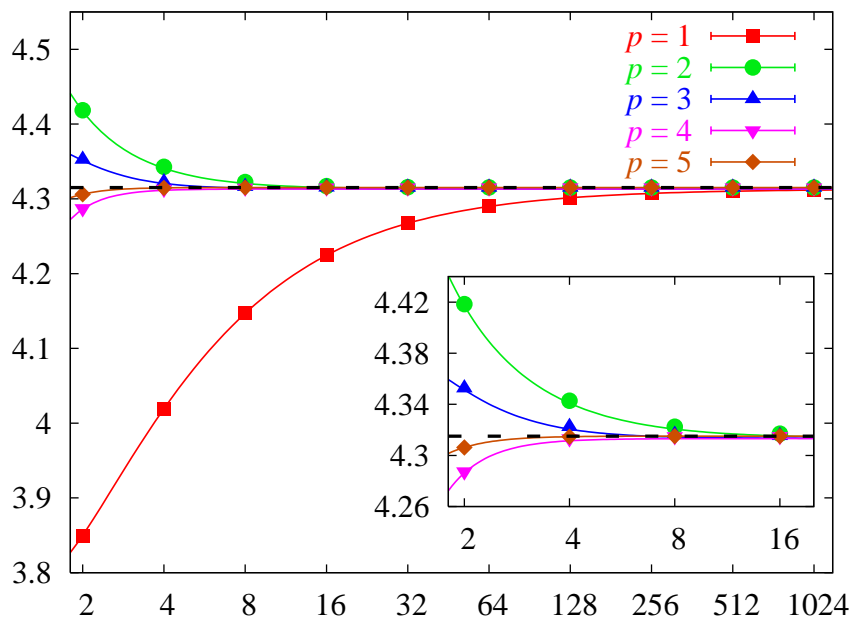
Slika 7.15: Odstupanja diskretizovanih očekivanih vrednosti od kontinuum limesa $|U_N^{(p)} - U|$ kao funkcije gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 5$ za slučaj anharmonijskog oscilatora sa kvartičnom interakcijom $\lambda = 24$ za inverznu temperaturu $\beta_t = 1$ i $N_{MC} = 10^9$. Krive date isprekidanim linijama predstavljaju odgovarajuće polinomijalne funkcije po $1/N$ fitovane na numeričke rezultate, a pune linije daju vodeće $1/N^p$ ponašanje.

diskretizacije N . Na uvećanom delu grafika se vidi kako $p = 9$ rezultati ekstremno brzo konvergiraju kontinuum vrednosti, pri čemu možemo da dobijemo pet značajnih cifara za veoma grubu diskretizaciju sa $N = 4$.

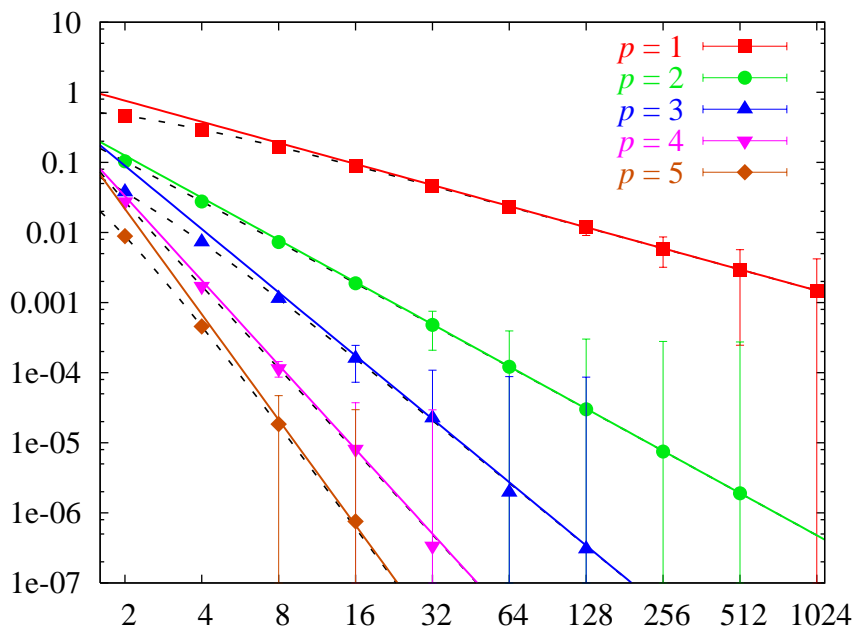
Da diskretizovane očekivane vrednosti zaista konvergiraju ka svojim kontinuum vrednostima se može precizno videti na slici 7.15. Na ovom grafiku su prikazana odstupanja diskretizovanih od kontinuum limesa na log-log skali kao funkcije od gustine diskretizacije N . Isprekidane linije su fitovani polinomi po $1/N$ koji započinju članom proporcionalnim sa $1/N^p$, a ovi vodeći članovi su prikazani i dodatno punom linijom. Za visoke vrednosti nivoa p odstupanja od kontinuum vrednosti postaju ekstremno mala za veće vrednosti N , pa su maskirana statističkim greškama Monte Karlo algoritma, kao što je diskutovano ranije. Čak i za veliku vrednost broja Monte Karlo uzoraka $N_{MC} = 10^9$ su dobijeni rezultati za $p = 9$ i $N = 4$ unutar statističke greške, pa ih na grafiku nismo ni prikazali. Slično ponašanje pokazuju i drugi razmatrani modeli.

7.3.2 Očekivane vrednosti za višečestične teorije

Analitički izvedeno ubrzanje konvergencije termalnih očekivanih vrednosti za višečestične teorije je verifikovanom serijom numeričkih Monte Karlo simulacija [10] za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije u potencijalu (7.5) za različite vrednosti konstanti interakcije i širok opseg vrednosti inverzne temperature β_t . Tipični rezultati su prikazani na slikama 7.16 i 7.17. Na slici 7.16 je prikazana konvergencija diskretizovanih očekivanih vrednosti ka kontinualnim termalnim očekivanim vrednostima za različite nivoe efektivnih dejstava i virijalnih estimatora p . Sa slike 7.17 se može eksplicitno videti da je analitički izvedena konvergencija $1/N^p$ zaista prisutna u dobijenim numeričkim rezultatima.



Slika 7.16: Konvergencija diskretizovanih termalnih očekivanih vrednosti $U_N^{(p)}$ ka kontinuum limesu u funkciji od gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 3, 4, 5$ za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije u potencijalu (7.5), sa $g_1 = 1$, $g_2 = 1/9$, $\beta_t = 1$, $N_{MC} = 10^7$. Horizontalna linija odgovara egzaktnej očekivanoj vrednosti, a dobijena je fitovanjem kao slobodni član odgovarajućeg polinoma po $1/N$.



Slika 7.17: Odstupanje diskretizovanih očekivanih vrednosti od kontinuum limesa $|U_N^{(p)}(\beta) - U(\beta)|$ u funkciji od gustine diskretizacije N za $p = 1, 2, 3, 4, 5$ za sistem dve čestice u dve prostorne dimenzije u potencijalu (7.5), sa $g_1 = 1$, $g_2 = 1/9$, $\beta_t = 1$, $N_{MC} = 10^7$ ($p = 1$), 10^9 ($p = 2$), 10^{10} ($p = 3$), 10^{11} ($p = 4, 5$). Krive date isprekidanim linijama predstavljaju odgovarajuće polinomijalne funkcije po $1/N$ fitovane na numeričke rezultate, a pune linije daju vodeće $1/N^p$ ponašanje.

8

Zaključak

U ovom radu je predstavljen novi metod za računanje funkcionalnih integrala i očekivanih vrednosti za opštu nerelativističku višečestičnu kvantnu teoriju. Izvedena su diskretizovana efektivna dejstva koja omogućavaju da analitički bolje razumemo suštinu funkcionalnog formalizma, a u numeričkom smislu daju suštinsko ubrzanje Monte Karlo algoritma za računanje funkcionalnih integrala. Konvergencija numerički izračunatih funkcionalnih integrala korišćenjem izvedenih efektivnih dejstava nivoa p je sistematski ubrzana na $1/N^p$, gde je N broj vremenskih koraka, a p je prirodan broj koji nije suštinski ograničen i zavisi od broja članova u razvoju koje smo uzeli u obzir prilikom analitičkog izvođenja. Za jednočestične teorije izveli smo diskretizovana efektivna dejstva do nivoa $p = 35$, a za opšte višečestične teorije do nivoa $p = 10$. Opšti izrazi do nivoa $p = 6$ se mogu naći u dodatku A, a dejstva višeg nivoa su dostupna u elektronskom obliku [13]. Svi ovi izrazi su dobijeni pomoću Mathematica programskih kodova predstavljenih u dodatku B.

Zbog kompletnosti, u ovom radu je prvo na standardan način uveden funkcionalni formalizam u kvantnoj mehanici i rešen je problem slobodne čestice i harmonijskog oscilatora. Zatim je dat kratak pregled opštih analitičkih aproksimativnih metoda, čiji su rezultati upoređeni sa nekim od naših numeričkih rezultata. U radu je zatim dat uvod u primenu Monte Karlo metoda za računanje funkcionalnih integrala (detaljan pregled se nalazi u dodatku C) i definisana su diskretizovana efektivna dejstva.

Nakon pregleda poznatih ranijih rezultata o diskretizovanim efektivnim dejstvima, predstavljeni su centralni doprinosi naših istraživanja. Prvo je prikazan metod polovljenja, koji omogućava izvođenje integralne jednačine za efektivni potencijal za jednočestične teorije. Nakon toga je pokazano kako se ova jednačina rešava i izvedeni su popravljani estimatori očekivanih vrednosti energije koji daju ubranu numeričku konvergenciju kada se koriste paralelno sa izvedenim diskretizovanim efektivnim dejstvima. Drugi važan doprinos je uopštenje prethodno uvedenog metoda na slučaj opšte nerelativističke višečestične teorije, kao i izvođenje odgovarajućih efektivnih dejstava razvojem u red po kratkom vremenu propagacije. Nakon toga je predstavljen pristup baziran na izvođenju rekurzivnih jednačina za efektivno dejstvo korišćenjem Šredingerove jednačine za opšte amplitude. Ovaj rezultat daje daleko najefikasniji metod za izvođenje efektivnih dejstava, kako za jednočestične tako i za višečestične teorije. Izvedene rekurzivne relacije su nakon toga prikazane i u obliku Fajnmanovih dijagrama, a diskretizovana efektivna dejstva su najkompaktnije zapisana pomoću topološke notacije bazirane na uvedenim Fajnmanovim dijagramima. Primenom ovog pristupa izvedene su i rekurzivne relacije za estimatore očekivanih vrednosti energije za opšte višečestične sisteme. U posebnom poglavlju su detaljno prikazani rezultati sprovedenih numeričkih simulacija koji verifikuju sve izvedene analitičke rezultate na nekoliko relevantnih

fizičkih modela za jednočestične i višečestične teorije. U dodatku D je dat programski kod SPEEDUP koji smo razvili za potrebe ovog rada.

Predstavljeni metodi za izvođenje efektivnih dejstava daju ekvivalentne rezultate, što je ujedno nezavisna provera konzistentnosti ovog pristupa. Međutim, u heurističkom smislu je svaki od ovih metoda predstavljao značajan korak napred, omogućavajući ranije nedostupno uopštenje: metod polovljenja je omogućio sistematsko izvođenje efektivnih dejstava za jednočestične jednodimenzionalne teorije, metod direktnog računanja kratkovremenog propagatora je omogućio uopštenje na višečestične teorije, a metod baziran na Šredingerovoj jednačini je dao efikasne rekurzivne relacije i dijagramatski prikaz pristupa.

Ovo istraživanje biće nastavljeno primenom izvedenih diskretizovanih efektivnih dejstava na veliki broj relevantnih fizičkih modela, a veće u toku primena na proučavanje Boze-Ajnštajn kondenzacije u anharmonijskoj zamci. Takođe, ovaj pristup će biti proširen i na analitičko izvođenje estimatora za druge fizičke veličine (toplotni kapacitet, susceptibilnost itd.). Poseban pravac u daljem istraživanju je $N = 1$ aproksimacija za fizičke veličine koje se mogu izračunati za kratko vreme propagacije. U tom slučaju izvedena efektivna dejstva daju analitičke izraze za fizičke veličine (pošto nema nikakvih integracija u izrazima za funkcionalne integrale u slučaju $N = 1$) sa visokom tačnošću. Korišćenjem različitih resumacionih tehnika (Pade, Borel) primena ovog pristupa može da se proširi i za duža vremena propagacije.

Dodatak A

Efektivna dejstva i estimatori

U ovom dodatku ćemo dati izvedene izraze za efektivna dejstva i virijalne estimatore energije za više nivoa konvergencije p . Za jednočestične teorije u jednoj prostornoj dimenziji daćemo izraze do nivoa $p = 6$, a za višestetične teorije u proizvoljnom broju dimenzija izraze do nivoa $p = 5$. Analitički izvedeni izrazi do nivoa $p = 35$ za jednočestične teorije, odnosno do $p = 10$ za višestetične teorije se mogu preuzeti u obliku Mathematica input fajlova [13].

A.1 Efektivna dejstva za jednočestične teorije u $d = 1$

Kao što smo pokazali, idealno efektivno dejstvo za jednočestične teorije u jednoj prostornoj dimenziji se može napisati u obliku

$$S_N^* = \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon_N} + \epsilon_N W^*(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) \right), \quad (\text{A.1})$$

gde je efektivni potencijal dat razvojem

$$W^*(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon_N) = \sum_{k=0}^{\infty} \delta_n^{2k} g_k(\bar{q}_n; \epsilon_N), \quad (\text{A.2})$$

a funkcije g_k su dalje date odgovarajućim Tejlorovim razvojem po ϵ_N . Da bismo odredili efektivno dejstvo na željenom nivou p neophodno je uzimanje u obzir svih članova koji daju doprinos do reda ϵ_N^p u efektivnom dejstvu, odnosno do reda ϵ_N^{p-1} u efektivnom potencijalu. Ovo podrazumeva da treba da izračunamo sve funkcije g_k zaključno sa $k = p - 1$. Pri tome, svaku od funkcija g_k treba izračunati po stepenima od ϵ_N do ϵ_N^{p-k-1} . Na nivou $p = 6$ za opšti potencijal V funkcije g_0, \dots, g_5 su određene izrazima:

$$\begin{aligned} g_0^{(p=6)} = & V + \epsilon_N \frac{V''}{12} + \epsilon_N^2 \left[-\frac{V'^2}{24} + \frac{V^{(4)}}{240} \right] + \epsilon_N^3 \left[-\frac{V''^2}{360} - \frac{V' V^{(3)}}{120} + \frac{V^{(6)}}{6720} \right] + \\ & + \epsilon_N^4 \left[\frac{V'^2 V''}{240} - \frac{23 V^{(3)2}}{40320} - \frac{V'' V^{(4)}}{1680} - \frac{V' V^{(5)}}{2240} + \frac{V^{(8)}}{241920} \right] + \\ & + \epsilon_N^5 \left[\frac{V''^3}{5670} + \frac{29 V' V'' V^{(3)}}{20160} + \frac{V'^2 V^{(4)}}{2240} - \frac{47 V^{(4)2}}{1209600} - \frac{19 V^{(3)} V^{(5)}}{241920} - \right. \\ & \left. - \frac{V'' V^{(6)}}{30240} - \frac{V' V^{(7)}}{60480} + \frac{V^{(10)}}{10644480} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g_1^{(p=6)} &= \frac{V''}{24} + \epsilon_N \frac{V^{(4)}}{480} + \epsilon_N^2 \left[-\frac{V''^2}{1440} - \frac{V' V^{(3)}}{480} + \frac{V^{(6)}}{13440} \right] + \\
&+ \epsilon_N^3 \left[-\frac{V^{(3)^2}}{4032} - \frac{V'' V^{(4)}}{5040} - \frac{V' V^{(5)}}{6720} + \frac{V^{(8)}}{483840} \right] + \\
&+ \epsilon_N^4 \left[\frac{V''^3}{60480} + \frac{V' V'' V^{(3)}}{3360} + \frac{V'^2 V^{(4)}}{13440} - \frac{13 V^{(4)^2}}{806400} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{V^{(3)} V^{(5)}}{26880} - \frac{V'' V^{(6)}}{80640} - \frac{V' V^{(7)}}{161280} + \frac{V^{(10)}}{21288960} \right], \\
g_2^{(p=6)} &= \frac{V^{(4)}}{1920} + \epsilon_N \frac{V^{(6)}}{53760} + \epsilon_N^2 \left[-\frac{V^{(3)^2}}{32256} - \frac{V'' V^{(4)}}{40320} - \frac{V' V^{(5)}}{53760} + \frac{V^{(8)}}{1935360} \right] + \\
&+ \epsilon_N^3 \left[-\frac{V^{(4)^2}}{345600} - \frac{V^{(3)} V^{(5)}}{138240} - \frac{V'' V^{(6)}}{483840} - \frac{V' V^{(7)}}{967680} + \frac{V^{(10)}}{85155840} \right], \\
g_3^{(p=6)} &= \frac{V^{(6)}}{322560} + \epsilon_N \frac{V^{(8)}}{11612160} + \\
&+ \epsilon_N^2 \left[-\frac{V^{(4)^2}}{4147200} - \frac{V^{(3)} V^{(5)}}{1658880} - \frac{V'' V^{(6)}}{5806080} - \frac{V' V^{(7)}}{11612160} + \frac{V^{(10)}}{510935040} \right], \\
g_4^{(p=6)} &= \frac{V^{(8)}}{92897280} + \epsilon_N \frac{V^{(10)}}{4087480320}, \\
g_5^{(p=6)} &= \frac{V^{(10)}}{40874803200}.
\end{aligned}$$

U gornjim izrazima smo podrazumevali $V = V(\bar{q}_n)$. Ove funkcije možemo da iskoristimo kako bismo napisali efektivno dejstvo S_N^* u pogodnijem obliku (6.43),

$$S_N^* = S_N^{(p=1)} + \sum_{p=2}^{\infty} \sigma^{(p)}, \quad (\text{A.3})$$

gde je $S_N^{(p=1)}$ naivno diskretizovano dejstvo u preskripciji srednje tačke, a $\sigma^{(p)}$ predstavlja popravku odgovarajućeg reda, koja je data kao suma po diskretizovanim vremenskim koracima,

$$\sigma^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} \sigma_n^{(p)}.$$

Za nivo konvergencije $p = 6$, uz uobičajene skraćene oznake $V = V(\bar{q}_n)$ i $\delta = \delta_n$, izrazi za $\sigma_n^{(p)}$ su dati sa

$$\begin{aligned}
\sigma_n^{(2)} &= \epsilon_N^2 \frac{V''}{12} + \epsilon_N \delta^2 \frac{V''}{24}, \\
\sigma_n^{(3)} &= \epsilon_N^3 \left[-\frac{V'^2}{24} + \frac{V^{(4)}}{240} \right] + \epsilon_N^2 \delta^2 \frac{V^{(4)}}{480} + \epsilon_N \delta^4 \frac{V^{(4)}}{1920}, \\
\sigma_n^{(4)} &= \epsilon_N^4 \left[-\frac{V''^2}{360} - \frac{V' V^{(3)}}{120} + \frac{V^{(6)}}{6720} \right] + \epsilon_N^3 \delta^2 \left[-\frac{V''^2}{1440} - \frac{V' V^{(3)}}{480} + \frac{V^{(6)}}{13440} \right] + \\
&+ \epsilon_N \delta^4 \frac{V^{(6)}}{53760} + \epsilon_N \delta^6 \frac{V^{(6)}}{322560},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_n^{(5)} &= \epsilon_N^5 \left[\frac{V'^2 V''}{240} - \frac{23 V^{(3)2}}{40320} - \frac{V'' V^{(4)}}{1680} - \frac{V' V^{(5)}}{2240} + \frac{V^{(8)}}{241920} \right] + \\
&+ \epsilon_N^4 \delta^2 \left[-\frac{V^{(3)2}}{4032} - \frac{V'' V^{(4)}}{5040} - \frac{V' V^{(5)}}{6720} + \frac{V^{(8)}}{483840} \right] + \\
&+ \epsilon_N^3 \delta^4 \left[-\frac{V^{(3)2}}{32256} - \frac{V'' V^{(4)}}{40320} - \frac{V' V^{(5)}}{53760} + \frac{V^{(8)}}{1935360} \right] + \epsilon_N^2 \delta^6 \frac{V^{(8)}}{11612160} + \\
&+ \epsilon_N \delta^8 \frac{V^{(8)}}{92897280}, \\
\sigma_n^{(6)} &= \epsilon_N^6 \left[\frac{V''^3}{5670} + \frac{29 V' V'' V^{(3)}}{20160} + \frac{V'^2 V^{(4)}}{2240} - \frac{47 V^{(4)2}}{1209600} - \frac{19 V^{(3)} V^{(5)}}{241920} - \frac{V'' V^{(6)}}{30240} - \right. \\
&- \frac{V' V^{(7)}}{60480} + \left. \frac{V^{(10)}}{10644480} \right] + \epsilon_N^5 \delta^2 \left[\frac{V''^3}{60480} + \frac{V' V'' V^{(3)}}{3360} + \frac{V'^2 V^{(4)}}{13440} - \right. \\
&- \frac{13 V^{(4)2}}{806400} - \frac{V^{(3)} V^{(5)}}{26880} - \frac{V'' V^{(6)}}{80640} - \frac{V' V^{(7)}}{161280} + \left. \frac{V^{(10)}}{21288960} \right] + \\
&+ \epsilon_N^4 \delta^4 \left[-\frac{V^{(4)2}}{345600} - \frac{V^{(3)} V^{(5)}}{138240} - \frac{V'' V^{(6)}}{483840} - \frac{V' V^{(7)}}{967680} + \frac{V^{(10)}}{85155840} \right] + \\
&+ \epsilon_N^3 \delta^6 \left[-\frac{V^{(4)2}}{4147200} - \frac{V^{(3)} V^{(5)}}{1658880} - \frac{V'' V^{(6)}}{5806080} - \frac{V' V^{(7)}}{11612160} + \frac{V^{(10)}}{510935040} \right] + \\
&+ \epsilon_N^2 \delta^8 \frac{V^{(10)}}{4087480320} + \epsilon_N \delta^{10} \frac{V^{(10)}}{40874803200}.
\end{aligned}$$

A.2 Virijalni estimatori za jednočestične teorije u $d = 1$

Idealni diskretizovani virijalni estimator za energiju sistema se može napisati u obliku (6.44),

$$E_V^* = E_V^{(p=1)} + \sum_{p=2}^{\infty} e_V^{(p)}, \quad (\text{A.4})$$

gde je $E_V^{(p=1)}$ naivni virijalni estimator dat jednačinom (6.42),

$$E_V^{(p=1)} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[V(\bar{q}_n) + \frac{\bar{q}_n V'(\bar{q}_n)}{2} \right],$$

a $e_V^{(p)}$ predstavlja popravku odgovarajućeg reda, koja je data kao suma po diskretizovanim vremenskim koracima,

$$e_V^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} e_{V,n}^{(p)}.$$

Za nivo konvergencije $p = 6$, uz uobičajene skraćene oznake $V = V(\bar{q}_n)$, $\delta = \delta_n$ i $q = \bar{q}_n$, izrazi za $e_{V,n}^{(p)}$ su dati sa

$$e_{V,n}^{(2)} = \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon_N V''}{6} + \frac{\delta^2 V''}{12} + \frac{q \epsilon_N V^{(3)}}{24} + \frac{q \delta^2 V^{(3)}}{48} \right],$$

$$\begin{aligned}
e_{V,n}^{(3)} &= \frac{1}{N} \left[-\frac{\epsilon_N^2 V'^2}{8} - \frac{\epsilon_N^2 q V' V''}{24} + \frac{\epsilon_N^2 V^{(4)}}{80} + \frac{\epsilon_N^2 q V^{(5)}}{480} + \frac{\epsilon_N \delta^2 V^{(4)}}{160} + \frac{\epsilon_N \delta^2 q V^{(5)}}{960} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\delta^4 V^{(4)}}{640} + \frac{\delta^4 q V^{(5)}}{3840} \right], \\
e_{V,n}^{(4)} &= \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon_N^3 V^{(6)}}{1680} - \frac{\epsilon_N^3 V' V^{(3)}}{30} - \frac{\epsilon_N^3 V''^2}{90} - \frac{\epsilon_N^3 q V' V^{(4)}}{240} + \frac{\epsilon_N^3 q V^{(7)}}{13440} - \frac{\epsilon_N^3 q V'' V^{(3)}}{144} - \right. \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^2 \delta^2 V''^2}{360} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^2 V' V^{(3)}}{120} + \frac{\epsilon_N^2 \delta^2 V^{(6)}}{3360} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^2 q V'' V^{(3)}}{576} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^2 q V' V^{(4)}}{960} + \\
&\quad \left. + \frac{\epsilon_N^2 \delta^2 q V^{(7)}}{26880} + \frac{\epsilon_N \delta^4 V^{(6)}}{13440} + \frac{\epsilon_N \delta^4 q V^{(7)}}{107520} + \frac{\delta^6 V^{(6)}}{80640} + \frac{\delta^6 q V^{(7)}}{645120} \right], \\
e_{V,n}^{(5)} &= \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon_N^4 V'^2 V''}{48} - \frac{23 \epsilon_N^4 V^{(3)^2}}{8064} + \frac{\epsilon_N^4 V^{(8)}}{48384} - \frac{\epsilon_N^4 V' V^{(5)}}{448} - \frac{\epsilon_N^4 V'' V^{(4)}}{336} + \frac{\epsilon_N^4 q V' V''^2}{240} - \right. \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^4 q V^{(3)} V^{(4)}}{1152} - \frac{\epsilon_N^4 q V' V^{(6)}}{4480} - \frac{\epsilon_N^4 q V'' V^{(5)}}{1920} + \frac{\epsilon_N^4 q V^{(9)}}{483840} + \frac{\epsilon_N^4 V'^2 q V^{(3)}}{480} - \\
&\quad - \frac{5 \epsilon_N^3 \delta^2 V^{(3)^2}}{4032} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 V'' V^{(4)}}{1008} + \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 V^{(8)}}{96768} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 V' V^{(5)}}{1344} - \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 q V^{(3)} V^{(4)}}{2880} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 q V'' V^{(5)}}{5760} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 q V' V^{(6)}}{13440} + \frac{\epsilon_N^3 \delta^2 q V^{(9)}}{967680} - \\
&\quad - \frac{5 \epsilon_N^2 \delta^4 V^{(3)^2}}{32256} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 V'' V^{(4)}}{8064} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 V' V^{(5)}}{10752} + \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 V^{(8)}}{387072} - \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 q V^{(3)} V^{(4)}}{23040} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 q V'' V^{(5)}}{46080} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 q V' V^{(6)}}{107520} + \frac{\epsilon_N^2 \delta^4 q V^{(9)}}{3870720} + \\
&\quad \left. + \frac{\epsilon_N \delta^6 V^{(8)}}{2322432} + \frac{\epsilon_N \delta^6 q V^{(9)}}{23224320} + \frac{\delta^8 V^{(8)}}{18579456} + \frac{\delta^8 q V^{(9)}}{185794560} \right], \\
e_{V,n}^{(6)} &= \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon_N^5 V''^3}{945} - \frac{\epsilon_N^5 V'' V^{(6)}}{5040} + \frac{3 \epsilon_N^5 V'^2 V^{(4)}}{1120} - \frac{\epsilon_N^5 V' V^{(7)}}{10080} + \frac{\epsilon_N^5 V^{(10)}}{1774080} - \right. \\
&\quad - \frac{19 \epsilon_N^5 V^{(3)} V^{(5)}}{40320} + \frac{29 \epsilon_N^5 V' V'' V^{(3)}}{3360} - \frac{47 \epsilon_N^5 V^{(4)^2}}{201600} + \frac{47 \epsilon_N^5 q V' V'' V^{(4)}}{40320} + \\
&\quad + \frac{\epsilon_N^5 q V'^2 V^{(5)}}{4480} - \frac{\epsilon_N^5 q V^{(3)} V^{(6)}}{17920} - \frac{\epsilon_N^5 q V^{(4)} V^{(5)}}{12800} - \frac{\epsilon_N^5 q V'' V^{(7)}}{40320} - \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^5 q V' V^{(8)}}{120960} + \frac{\epsilon_N^5 q V^{(11)}}{21288960} + \frac{29 \epsilon_N^5 q V' V^{(3)^2}}{40320} + \frac{17 \epsilon_N^5 q V''^2 V^{(3)}}{17280} + \\
&\quad + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V''^3}{10080} + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V' V'' V^{(3)}}{560} - \frac{13 \epsilon_N^4 \delta^2 V^{(4)^2}}{134400} + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V'^2 V^{(4)}}{2240} - \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V^{(3)} V^{(5)}}{4480} - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V'' V^{(6)}}{13440} - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V' V^{(7)}}{26880} + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 V^{(10)}}{3548160} + \\
&\quad + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V''^2 V^{(3)}}{5760} + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V' V^{(3)^2}}{6720} + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V'^2 V^{(5)}}{26880} + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V' V'' V^{(4)}}{4480} - \\
&\quad - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V'' V^{(7)}}{107520} - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V^{(4)} V^{(5)}}{28800} - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V^{(3)} V^{(6)}}{40320} - \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V' V^{(8)}}{322560} + \\
&\quad \left. + \frac{\epsilon_N^4 \delta^2 q V^{(11)}}{42577920} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 V^{(4)^2}}{57600} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 V^{(3)} V^{(5)}}{23040} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 V'' V^{(6)}}{80640} - \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\epsilon_N^3 \delta^4 V' V^{(7)}}{161280} + \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 V^{(10)}}{14192640} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 q V^{(4)} V^{(5)}}{153600} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 q V^{(3)} V^{(6)}}{215040} - \\
& -\frac{\epsilon_N^3 \delta^4 q V'' V^{(7)}}{645120} - \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 q V' V^{(8)}}{1935360} + \frac{\epsilon_N^3 \delta^4 q V^{(11)}}{170311680} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^6 V^{(4)^2}}{691200} - \\
& -\frac{\epsilon_N^2 \delta^6 V^{(3)} V^{(5)}}{276480} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^6 V'' V^{(6)}}{967680} - \frac{\epsilon_N^2 \delta^6 V' V^{(7)}}{1935360} + \frac{\epsilon_N^2 \delta^6 V^{(10)}}{85155840} - \\
& -\frac{\epsilon_N^2 q \delta^6 V^{(4)} V^{(5)}}{1843200} - \frac{\epsilon_N^2 q \delta^6 V^{(3)} V^{(6)}}{2580480} - \frac{\epsilon_N^2 q \delta^6 V'' V^{(7)}}{7741440} - \frac{\epsilon_N^2 q \delta^6 V' V^{(8)}}{23224320} + \\
& + \frac{\epsilon_N^2 q \delta^6 V^{(11)}}{1021870080} + \frac{\epsilon_N \delta^8 V^{(10)}}{681246720} + \frac{\epsilon_N q \delta^8 V^{(11)}}{8174960640} + \frac{\delta^{10} V^{(10)}}{6812467200} + \frac{\delta^{10} q V^{(11)}}{81749606400} \Big].
\end{aligned}$$

A.3 Efektivna dejstva za višečestične teorije

Efektivno dejstvo S_N^* za višečestične teorije u proizvoljnom broju dimenzija možemo takođe da napišemo u obliku (6.43),

$$S_N^* = S_N^{(p=1)} + \sum_{p=2}^{\infty} \sigma^{(p)}, \quad (\text{A.5})$$

gde je $S_N^{(p=1)}$ naivno diskretizovano dejstvo u preskripciji srednje tačke, a $\sigma^{(p)}$ predstavlja popravku odgovarajućeg reda, koja je data kao suma po diskretizovanim vremenskim koracima,

$$\sigma^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} \sigma_n^{(p)}.$$

Za nivo konvergencije $p = 5$, uz uobičajene skraćene oznake $V = V(\bar{q}_n)$ i $\delta = \delta_n$, i uz raniju konvenciju da svi nemi indeksi uzimaju vrednosti od 1 do dM i da se podrazumeva sumiranje po ponovljenim indeksima, izrazi za $\sigma_n^{(p)}$ su dati sa

$$\begin{aligned}
\sigma_n^{(2)} &= \frac{\epsilon^2}{12} \partial^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j}{24} \partial_{ij}^2 V, \\
\sigma_n^{(3)} &= -\frac{\epsilon^3}{24} \partial_i V \partial_i V + \frac{\epsilon^3}{240} \partial^4 V + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j}{480} \partial_{ij}^2 \partial^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{1920} \partial_{ijkl}^4 V, \\
\sigma_n^{(4)} &= \frac{\epsilon^4}{6720} \partial^6 V - \frac{\epsilon^4}{120} \partial_i V \partial_i \partial^2 V - \frac{\epsilon^4}{360} \partial_{ij}^2 V \partial_{ij}^2 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{480} \partial_k V \partial_{kij}^3 V + \\
&+ \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{13440} \partial_{ij}^2 \partial^4 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{1440} \partial_{ik}^2 V \partial_{kj}^2 V + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{53760} \partial_{ijkl}^4 \partial^2 V + \\
&+ \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n}{322560} \partial_{ijklmn}^6 V, \\
\sigma_n^{(5)} &= \frac{\epsilon^5}{241920} \partial^8 V - \frac{\epsilon^5}{1680} \partial_{ij}^2 V \partial_{ij}^2 \partial^2 V - \frac{17\epsilon^5}{40320} \partial_i \partial^2 V \partial_i \partial^2 V - \\
&- \frac{\epsilon^5}{2240} \partial_i V \partial_i \partial^4 V - \frac{\epsilon^5}{6720} \partial_{ijk}^3 V \partial_{ijk}^3 V + \frac{\epsilon^5}{240} \partial_i V \partial_j V \partial_{ij}^2 V + \\
&+ \frac{\epsilon^4 \delta_i \delta_j}{483840} \partial_{ij}^2 \partial^6 V - \frac{\epsilon^4 \delta_i \delta_j}{6720} \partial_k V \partial_{ijk}^3 \partial^2 V - \frac{\epsilon^4 \delta_i \delta_j}{10080} \partial_{ik}^2 V \partial_{kj}^2 \partial^2 V - \\
&- \frac{\epsilon^4 \delta_i \delta_j}{10080} \partial_{kl}^2 V \partial_{ijkl}^4 V - \frac{\epsilon^4 \delta_i \delta_j}{5040} \partial_k \partial^2 V \partial_{ijk}^3 V - \frac{\epsilon^4 \delta_i \delta_j}{20160} \partial_{ikl}^3 V \partial_{klj}^3 V +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{1935360} \partial_{ijkl}^4 \partial^4 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{53760} \partial_m V \partial_{mijkl}^5 V - \\
& - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{40320} \partial_{im}^2 V \partial_{mjkl}^4 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{32256} \partial_{ijm}^3 V \partial_{mkl}^3 V + \\
& + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n}{11612160} \partial_{ijklmn}^6 \partial^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n \delta_p \delta_q}{92897280} \partial_{ijklmnpq}^8 V.
\end{aligned}$$

A.3.1 Efektivna dejstva u topološkoj notaciji

Koristeći topološku notaciju uvedenu u sekciji 6.4, ovde ćemo dati izraze sa efektivno dejstvo do nivoa konvergencije $p = 6$ za opštu višestetičnu teoriju. U ovoj sekciji je pokazano da se efektivno dejstvo može izraziti preko efektivnog potencijala W u obliku dvostrukog Tejlorovog reda po kratkom vremenu propagacije ϵ i parnim stepenima diskretizovane brzine $x = \delta/2$,

$$W(x, \bar{x}; \epsilon) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m W_{m,k}(x, \bar{x}) \epsilon^{m-k}. \quad (\text{A.6})$$

U gornjem izrazu je uvedena oznaka za kontrahovane koeficijente

$$W_{m,k}(x, \bar{x}) = x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_{2k}} c_{m,k}^{i_1, \dots, i_{2k}}(\bar{x}) = \frac{1}{2^{2k}} \delta_{i_1} \delta_{i_2} \cdots \delta_{i_{2k}} c_{m,k}^{i_1, \dots, i_{2k}}(\bar{x}).$$

Do nivoa $p = 6$ efektivni potencijal je određen sumom u jednačini (A.6) u kojoj su granice $0 \leq m \leq p - 1 = 5$. Izrazi za koeficijente $W_{m,k}$ koji određuju efektivni potencijal do nivoa $p = 6$ su dati sledećim izrazima u topološkoj notaciji:

$$\begin{aligned}
W_{0,0} &= V, \\
W_{1,1} &= \frac{1}{6} (1)^2, \\
W_{1,0} &= \frac{1}{12} (11), \\
W_{2,2} &= \frac{1}{120} (1)^4, \\
W_{2,1} &= \frac{1}{120} (1)^2 (11), \\
W_{2,0} &= \frac{1}{240} (11)^2 - \frac{1}{24} (12), \\
W_{3,3} &= \frac{1}{5040} (1)^6, \\
W_{3,2} &= \frac{1}{3360} (1)^4 (11), \\
W_{3,1} &= \frac{1}{3360} (1)^2 (11)^2 - \frac{1}{120} (1)^2 (12) - \frac{1}{360} (1)(2)(12), \\
W_{3,0} &= \frac{1}{6720} (11)^3 - \frac{1}{120} (11)(12) - \frac{1}{360} (12)^2, \\
W_{4,4} &= \frac{1}{362880} (1)^8, \\
W_{4,3} &= \frac{1}{181440} (1)^6 (11),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{4,2} &= \frac{1}{120960} (1)^4(11)^2 - \frac{1}{3360} (1)^4(12) - \frac{1}{2520} (1)^3(2)(12) - \frac{1}{2016} (1)^2(2)^2(12), \\
W_{4,1} &= \frac{1}{120960} (1)^2(11)^3 - \frac{1}{1680} (1)^2(11)(12) - \frac{1}{2520} (1)^2(12)^2 - \frac{1}{1260} (1)^2(22)(12) - \\
&\quad - \frac{1}{2520} (1)(2)(11)(12) - \frac{1}{5040} (1)(2)(12)^2, \\
W_{4,0} &= \frac{1}{241920} (11)^4 - \frac{1}{2240} (11)^2(12) - \frac{1}{1680} (11)(12)^2 - \frac{17}{40320} (11)(22)(12) - \\
&\quad - \frac{1}{6720} (12)^3 + \frac{1}{240} (12)(13), \\
W_{5,5} &= \frac{1}{39916800} (1)^{10}, \\
W_{5,4} &= \frac{1}{15966720} (1)^8(11), \\
W_{5,3} &= \frac{1}{7983360} (1)^6(11)^2 - \frac{1}{181440} (1)^6(12) - \frac{1}{90720} (1)^5(2)(12) - \\
&\quad - \frac{1}{25920} (1)^4(2)^2(12) - \frac{1}{64800} (1)^3(2)^3(12), \\
W_{5,2} &= \frac{1}{5322240} (1)^4(11)^3 - \frac{1}{60480} (1)^4(11)(12) - \frac{1}{36288} (1)^4(22)(12) - \\
&\quad - \frac{1}{90720} (1)^4(12)^2 - \frac{1}{45360} (1)^3(2)(11)(12) - \frac{1}{45360} (1)^3(2)(12)^2 - \\
&\quad - \frac{1}{37800} (1)^3(2)(22)(12) - \frac{1}{15120} (1)^2(2)^2(11)(12) - \frac{1}{50400} (1)^2(2)^2(12)^2, \\
W_{5,1} &= \frac{1}{5322240} (1)^2(11)^4 - \frac{1}{40320} (1)^2(11)^2(12) - \frac{1}{30240} (1)^2(11)(12)^2 - \\
&\quad - \frac{1}{17280} (1)^2(11)(22)(12) - \frac{1}{24192} (1)^2(22)^2(12) - \frac{1}{25200} (1)^2(22)(12)^2 - \\
&\quad - \frac{1}{60480} (1)^2(12)^3 - \frac{1}{60480} (1)(2)(11)^2(12) - \frac{1}{30240} (1)(2)(11)(12)^2 - \\
&\quad - \frac{1}{67200} (1)(2)(11)(22)(12) - \frac{1}{100800} (1)(2)(12)^3 + \frac{1}{3360} (1)^2(12)(13) + \\
&\quad + \frac{1}{1260} (1)^2(12)(23) + \frac{1}{2520} (1)(2)(12)(13) + \frac{1}{15120} (1)(2)(13)(23), \\
W_{5,0} &= \frac{1}{10644480} (11)^5 - \frac{1}{60480} (11)^3(12) - \frac{1}{30240} (11)^2(12)^2 - \frac{1}{30240} (11)(12)^3 - \\
&\quad - \frac{1}{151200} (12)^4 - \frac{13}{403200} (11)(22)(12)^2 - \frac{11}{241920} (11)^2(22)(12) + \\
&\quad + \frac{1}{2240} (11)(12)(13) + \frac{17}{20160} (11)(12)(23) + \frac{1}{1680} (12)^2(13) + \frac{1}{5670} (12)(23)(13).
\end{aligned}$$

A.4 Virijalni estimatori za višečestične teorije

Idealni diskretizovani virijalni estimator energije višečestičnog sistema se može napisati u obliku (6.44),

$$E_V^* = E_V^{(p=1)} + \sum_{p=2}^{\infty} e_V^{(p)}, \quad (\text{A.7})$$

gde je $E_V^{(p=1)}$ naivni virijalni estimator dat jednačinom (6.42),

$$E_V^{(p=1)} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[V(\bar{q}_n) + \frac{1}{2} \bar{q}_{n,i} \partial_i V(\bar{q}_n) \right],$$

a $e_V^{(p)}$ predstavlja popravku odgovarajućeg reda, koja je data kao suma po diskretizovanim vremenskim koracima,

$$e_V^{(p)} = \sum_{n=0}^{N-1} e_{V,n}^{(p)}.$$

Za nivo konvergencije $p = 5$, uz uobičajene skraćene oznake $V = V(\bar{q}_n)$, $\delta = \delta_n$ i $q = \bar{q}_n$, i uz raniju konvenciju da svi nemi indeksi uzimaju vrednosti od 1 do dM , da se podrazumeva sumiranje po ponovljenim indeksima i $\partial_{i,i}^2 = \Delta$, izrazi za $e_{V,n}^{(p)}$ su dati sa

$$\begin{aligned} e_{V,n}^{(2)} &= \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon}{6} \Delta V + \frac{\delta_i \delta_j}{12} \partial_{i,j}^2 V + \frac{\epsilon q_k}{24} \partial_k \Delta V + \frac{\delta_i \delta_j q_k}{48} \partial_{i,j,k}^3 V \right], \\ e_{V,n}^{(3)} &= \frac{1}{N} \left[-\frac{\epsilon^2}{8} \partial_i V \partial_i V + \frac{\epsilon^2}{80} \Delta^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j}{160} \partial_{i,j}^2 \Delta V + \frac{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{640} \partial_{i,j,k,l}^4 V - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\epsilon^2 q_k}{24} \partial_{i,k} V \partial_i V + \frac{\epsilon^2 q_k}{480} \partial_k \Delta^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j q_m}{960} \partial_{i,j,m}^3 \Delta V + \frac{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_m}{3840} \partial_{i,j,k,l,m}^5 V \right], \\ e_{V,n}^{(4)} &= \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon^3}{1680} \Delta^3 V - \frac{\epsilon^3}{30} \partial_i V \partial_i \Delta V - \frac{\epsilon^3}{90} \partial_{i,j}^2 V \partial_{i,j}^2 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j}{120} \partial_k V \partial_{k,i,j}^3 V + \right. \\ &\quad + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j}{3360} \partial_{i,j}^2 \Delta^2 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j}{360} \partial_{i,k}^2 V \partial_{k,j}^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{13440} \partial_{i,j,k,l}^4 \Delta V + \\ &\quad + \frac{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n}{80640} \partial_{i,j,k,l,m,n}^6 V + \frac{\epsilon^3 q_k}{13440} \partial_k \Delta^3 V - \frac{\epsilon^3 q_k}{240} \partial_{i,k}^2 V \partial_i \Delta V - \\ &\quad - \frac{\epsilon^3 q_k}{240} \partial_i V \partial_{i,k}^2 \Delta V - \frac{\epsilon^3 q_k}{360} \partial_{i,j,k}^3 V \partial_{i,j}^2 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j q_m}{960} \partial_{k,m}^2 V \partial_{k,i,j}^3 V - \\ &\quad - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j q_m}{960} \partial_k V \partial_{m,k,i,j}^4 V + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j q_m}{26880} \partial_{i,j,m}^3 \Delta^2 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j q_m}{1440} \partial_{i,k,m}^3 V \partial_{k,j}^2 V + \\ &\quad \left. + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_m}{107520} \partial_{m,i,j,k,l}^5 \Delta V + \frac{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n q_p}{645120} \partial_{p,i,j,k,l,m,n}^7 V \right], \\ e_{V,n}^{(5)} &= \frac{1}{N} \left[\frac{\epsilon^4}{48384} \Delta^4 V - \frac{\epsilon^4}{336} \partial_{i,j}^2 V \partial_{i,j}^2 \Delta V - \frac{17\epsilon^4}{8064} \partial_i \Delta V \partial_i \Delta V - \frac{\epsilon^4}{448} \partial_i V \partial_i \Delta^2 V - \right. \\ &\quad - \frac{\epsilon^4}{1344} \partial_{i,j,k}^3 V \partial_{i,j,k}^3 V + \frac{\epsilon^4}{48} \partial_i V \partial_j V \partial_{i,j}^2 V + \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{96768} \partial_{i,j}^2 \Delta^3 V - \\ &\quad - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{1344} \partial_k V \partial_{i,j,k}^3 \Delta V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{2016} \partial_{i,k}^2 V \partial_{k,j}^2 \Delta V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{2016} \partial_{k,l}^2 V \partial_{i,j,k,l}^4 V - \\ &\quad - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{1008} \partial_k \Delta V \partial_{i,j,k}^3 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{4032} \partial_{i,k,l}^3 V \partial_{k,l,j}^3 V + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{387072} \partial_{i,j,k,l}^4 \Delta^2 V - \\ &\quad - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{10752} \partial_m V \partial_{m,i,j,k,l}^5 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{8064} \partial_{i,m}^2 V \partial_{m,j,k,l}^4 V - \\ &\quad - \frac{5\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{32256} \partial_{i,j,m}^3 V \partial_{m,k,l}^3 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n}{2322432} \partial_{i,j,k,l,m,n}^6 \Delta V + \\ &\quad \left. + \frac{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n \delta_p \delta_q}{18579456} \partial_{i,j,k,l,m,n,p,q}^8 V + \frac{\epsilon^4 q_k}{483840} \partial_k \Delta^4 V - \frac{\epsilon^4 q_k}{3360} \partial_{i,j,k}^3 V \partial_{i,j}^2 \Delta V - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\epsilon^4 q_k}{3360} \partial_{i,j}^2 V \partial_{i,j,k}^3 \Delta V - \frac{17\epsilon^4 q_k}{40320} \partial_{i,k}^2 \Delta V \partial_i \Delta V - \frac{\epsilon^4 q_k}{4480} \partial_{i,k}^2 V \partial_i \Delta^2 V - \\
& -\frac{\epsilon^4 q_k}{4480} \partial_i V \partial_{i,k}^2 \Delta^2 V - \frac{\epsilon^4 q_m}{6720} \partial_{i,j,k,m}^4 V \partial_{i,j,k}^3 V + \frac{\epsilon^4 q_m}{240} \partial_{i,m}^2 V \partial_j V \partial_{i,j}^2 V + \\
& + \frac{\epsilon^4 q_m}{480} \partial_i V \partial_j V \partial_{i,j,m}^3 V + \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{967680} \partial_{i,j,m}^3 \Delta^3 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{13440} \partial_{k,m}^2 V \partial_{i,j,k}^3 \Delta V - \\
& -\frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{13440} \partial_k V \partial_{i,j,k,m}^4 \Delta V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{20160} \partial_{m,i,k}^3 V \partial_{k,j}^2 \Delta V - \\
& -\frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{20160} \partial_{i,k}^3 V \partial_{m,k,j}^3 \Delta V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{20160} \partial_{k,l,m}^3 V \partial_{i,j,k,l}^4 V - \\
& -\frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{20160} \partial_{k,l}^2 V \partial_{i,j,k,l,m}^5 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{10080} \partial_{k,m}^2 \Delta V \partial_{i,j,k}^3 V - \\
& -\frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{10080} \partial_k \Delta V \partial_{i,j,k,m}^4 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j q_m}{20160} \partial_{i,k,l,m}^4 V \partial_{k,l,j}^3 V + \\
& + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_m}{3870720} \partial_{i,j,k,l,m}^5 \Delta^2 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_n}{107520} \partial_{m,n}^2 V \partial_{m,i,j,k,l}^5 V - \\
& -\frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_n}{107520} \partial_m V \partial_{n,m,i,j,k,l}^6 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_n}{80640} \partial_{i,m,n}^3 V \partial_{m,j,k,l}^4 V - \\
& -\frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_n}{80640} \partial_{i,m}^2 V \partial_{n,m,j,k,l}^5 V - \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l q_n}{32256} \partial_{i,j,m,n}^4 V \partial_{m,k,l}^3 V - \\
& -\frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n q_r}{23224320} \partial_{i,j,k,l,m,n,r}^7 \Delta V + \\
& + \frac{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n \delta_p \delta_q q_r}{185794560} \partial_{i,j,k,l,m,n,p,q,r}^9 V \Big].
\end{aligned}$$

Dodatak B

Programski kod razvijen za paket Mathematica

U ovom dodatku ćemo prikazati programske kodove za analitičko izvođenje efektivnih dejstava koje smo razvili u programskom paketu Mathematica [12] za teorije koje su razmatrane u ovom radu. Za izvršavanje navedenih programa jedini neophodan uslov je da je paket Mathematica instaliran na vašem računaru, nezavisno od operativnog sistema. Za izvršavanje programa za računanje efektivnih dejstava višestrukih teorija još je neophodno instalirati i poseban Mathematica paket MathTensor [70] koji se koristi za tenzorske operacije neophodne za rešavanje rekurzivnih relacija u ovom slučaju. Svi prikazani programi su slobodno dostupni [13].

B.1 Jednočestične teorije u $d = 1$

Za slučaj jedne čestice u jednoj prostornoj dimenziji, razvijeni su kodovi za računanje efektivnog potencijala W za opšti potencijal V do zadatog nivoa konvergencije p , kao i efektivnog potencijala $W_0(\bar{x}; \epsilon_N) = W(\delta = 0, \bar{x}; \epsilon_N)$ za dijagonalne amplitude, koji ne sadrži članove sa diskretizovanom brzinom. Takođe, za posebno razmatrane slučajeve anharmonijskog oscilatora i modifikovanog Pošl-Teler potencijala smo dali programe koji direktno računaju efektivne potencijale, umesto zamene funkcionalne zavisnosti potencijala u opšte formule.

Opšte izraze za efektivne potencijale na datom nivou konvergencije p za jednu česticu u jednoj prostornoj dimenziji smo računali pomoću pristupa baziranog na rešavanju integralne jednačine uvedene u sekciji 4.1, kao i rešavanjem rekurzivnih relacija iz sekcije 6.1. Mathematica programski kod za prvi pristup je dat samo iz heurističkih razloga, pošto daje efektivna dejstva samo do nivoa $p = 9$ za razumno vreme izvršavanja (1-2 dana). Drugi pristup je daleko efikasniji i omogućio nam je računanje efektivnih dejstava čak do nivoa $p = 35$.

Rešavanje integralne jednačine (4.5) za efektivno dejstvo jednočestičnih teorija u jednoj dimenziji je implementirano u programu `EffectiveAction-1d-Integral.nb` koji je dat ispod. Ulazni parametar je željeni nivo konvergencije p , a rezultat rada ovog programa su funkcije g_k koje definišu efektivni potencijal u jednačini (4.8), odnosno njihov razvoj po vremenskom koraku ϵ_N do potrebnog stepena. Ove funkcije su u programu označene sa `gkepsn` i za fiksirano k i n predstavljaju odgovarajući koeficijent koji stoji u razvoju funkcije g_k uz član proporcionalan sa ϵ_N^n . Koristeći ovaj program smo izračunali efektivno dejstvo

za opštu jednočestičnu teoriju do nivoa $p = 9$.

```

p=9;

CurrentTime = FromDate[Date[]];
StartTime = CurrentTime;

g0eps0 = V;

For[n = 1, n < p, n++, F[2 n] = D[Exp[-eps f[q+y] + eps f[q]], y, 2 n] /. y -> 0]
For[n = 1; FSeries = 1, n < p, n++, FSeries += F[2 n] eps^n (2 n - 1)!! / (2 n)! / 4^n]

FSeriesLog = -Log[Series[FSeries, eps, 0, p + 1]] / eps;

For[n = 0; RHS = f[q], n<p, n++,
  RHS += ExpandAll[Coefficient[FSeriesLog, eps, n]] eps^n
]

For[n = 0, n < 2 p - 1, n++, RHS= (RHS /. f^(n)[q] -> fder[n])]

Wfunstring = "Wfun[x, q, delta] = ";

For[n = 0, n < p, n++,
  Wfunstring = StringJoin[Wfunstring, "(delta / 2 - x)^", ToString[2 n], " g",
    ToString[n], "[q + delta / 4 + x / 2] / 2 + (x + delta / 2)^", ToString[2 n],
    " g", ToString[n], "[q - delta / 4 + x / 2] / 2"];
  If[n < p - 1, Wfunstring = StringJoin[Wfunstring, " + "],
    Wfunstring = StringJoin[Wfunstring, ";"]
  ]
]

ToExpression[Wfunstring]

For[n = 0, n < 2 p - 1, n++,
  f[n, q, delta]=(D[Wfun[x, q, delta], x, n] /. x -> 0);
  fder[n]=Series[f[n, q, delta], delta, 0, 2 p - 2]
]

For[n = 0, n < p, n++,
  gtilde[eps_, n, q_] = Normal[Series[Coefficient[Normal[RHS], delta, 2 n],
    eps, 0, p - n - 1]]
]

For[n = 0, n < p, n++,
  gstring = StringJoin["g", ToString[n], "[q_] = "];

  For[m = 0, m < p - n, m++,
    gstring = StringJoin[gstring, "g", ToString[n], "eps", ToString[m],
      "[q] eps^", ToString[m], " (2^", ToString[m], ")^(s - k)"];
    If[m < p - n - 1, If[p - n > 1, gstring = StringJoin[gstring, " + "]],
      gstring = StringJoin[gstring, ";"]
    ]
  ]

ToExpression[gstring]
]

```

```

For[n = 0, n < p, n++,
  gSeries[n] = Normal[Series[gtilde[eps / 2^(s - k - 1), n, q],
    eps, 0, p - n - 1] /. s -> k]
]

For[n = 0; EQlist = ; EQvariables = ; EQSolve = "", n < p, n++,
  For[m = 0, m < p - n, m++,
    If[m + n > 0, EQSolve = StringJoin[EQSolve, " EQlist = Append[EQlist, 2^",
      ToString[m], " g", ToString[n], "eps", ToString[m],
      "[q] == Coefficient[gSeries["", ToString[n], ""], eps, "", ToString[m], "]];
      EQvariables = Append[EQvariables, g", ToString[n], "eps", ToString[m], "[q]];"]
    ]
  ]
]

ToExpression[EQSolve]
EQ = Solve[EQlist, EQvariables][[1]];

For[n = 0; greplace = "", n < p, n++, For[m = 0, m < p - n, m++,
  If[m + n > 0, greplace = StringJoin[greplace, "g", ToString[n], "eps", ToString[m],
    "[q_] = (g", ToString[n], "eps", ToString[m], "[q] /. EQ); "]
  ]
]]

ToExpression[greplace]

For[n = 0, n < p, n++, For[m = 0, m < p - n, m++,
  If[m + n > 0, Print["g", n, "eps", m, "[q] = ",
    ExpandAll[ToExpression[StringJoin["g", ToString[n], "eps", ToString[m], "[q]"]]]]
  ]
]]

CalculationEndTime = FromDate[Date[]];
CalculationTime = CalculationEndTime - StartTime;
Print["Calculation time = ", CalculationTime, " seconds."];
Print["Memory used: ", N[MaxMemoryUsed[] / 1024 / 1024], " MB"];
Print[]

```

Opšti izrazi za efektivne potencijale na datom nivou konvergencije p za jednu česticu u jednoj prostornoj dimenziji se mogu dobiti na mnogo efikasniji način pomoću programa `EffectiveAction-1d.nb`, baziranog na rešavanju rekurzivne relacije (6.12) iz sekcije 6.1. Jedini parametar koji treba specificirati je i dalje nivo konvergencije p , a program računa koeficijente $c_{m,k}$ koji stoje uz odgovarajući član proporcionalan sa $\epsilon_N^{m-k} \delta^{2k}$ u razvoju efektivnog potencijala. Za razliku od prethodnog programa u kome je računanje efektivnog potencijala zavisilo od razvoja u red člana sa logaritmom do potrebnog stepena, ovde se viši nivoi efektivnog dejstva dobijaju na osnovu prethodno izračunatih članova, pa se program može prekinuti u svakom trenutku i do tada izračunate vrednosti koeficijenata iskoristiti na dostignutoj vrednosti p . Druga prednost ovog programa je njegova očigledna jednostavnost u odnosu na raniji pristup.

Čak i efektivni potencijali za velike vrednosti nivoa konvergencije kao što je $p = 20$ se mogu dobiti na standardnom PC računaru za 2-3 minuta, uz potrošnju male količine RAM memorije (do 40 MB). Za znatno veće vrednosti p neophodno je obezbediti i veće količine memorije. Maksimalna vrednost $p = 35$ koju smo dostigli zahtevala je računar sa 8 GB RAM memorije i 1-2 dana procesorskog vremena. Opšti izrazi za efektivni potencijal na

nivou $p = 35$ su slobodno dostupni u obliku input fajla `EffectiveAction-1d-p35.m` [13] i mogu se direktno koristiti kao input za druge Mathematica programe.

```
p = 35;

CurrentTime = FromDate[Date[]];
StartTime = CurrentTime;
c[i_, j_]=0;

For[m = 0, m < p, m++, c[m, m] = D[V[x], {x, 2 m}] / (2 m + 1)!;
  For[k = m-1, k >= 0, k--,
    c[m, k] = Expand[((2 k + 2) (2 k + 1) c[m, k + 1] + D[c[m - 1, k], {x, 2}] -
      Sum[D[c[l, r], {x, 1}] D[c[m - 1 - 2, k - r], {x, 1}],
        {1, 0, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}] -
      Sum[2 r (2 k - 2 r + 2) c[l, r] c[m - 1 - 1, k - r + 1],
        {1, 1, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}]) / (8 (m + k + 1))]
  ];

  Print["p = ", m + 1, " contribution calculated."];
  CalculationEndTime = FromDate[Date[]];
  CalculationTime = CalculationEndTime - StartTime;
  Print["Calculation time = ", CalculationTime, " seconds."];
  Print["Memory used: ", N[MaxMemoryUsed[] / 1024 / 1024], " MB"];
  Print[]
]

Definition[c] >>> "EffectiveAction-1d-p35.m";
```

Za računanje efektivnog potencijala za specijalni slučaj anharmonijskog oscilatora sa kvartičnom interakcijom koji smo razmatrali u radu prethodi program treba promeniti na jednostavan način, specificiranjem potencijala V . Izmenjeni programski kod je dat ispod, u fajlu `EffectiveAction-Phi4-1d.nb`. Pošto se viši izvodi potencijala pojednostavljaju, našli smo efektivno dejstvo do ekstremno visokog nivoa $p = 144$. Izvedeni izrazi su dostupni u obliku Mathematica input fajla `EffectiveAction-Phi4-1d-p144.m` [13].

```
p = 144;
V[x] = A x^2 / 2 + kn x^4 / 24;

CurrentTime = FromDate[Date[]];
StartTime = CurrentTime;
c[i_, j_]=0;

For[m = 0, m < p, m++, c[m, m] = D[V[x], {x, 2 m}] / (2 m + 1)!;
  For[k = m-1, k >= 0, k--,
    c[m, k] = Expand[((2 k + 2) (2 k + 1) c[m, k + 1] + D[c[m - 1, k], {x, 2}] -
      Sum[D[c[l, r], {x, 1}] D[c[m - 1 - 2, k - r], {x, 1}],
        {1, 0, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}] -
      Sum[2 r (2 k - 2 r + 2) c[l, r] c[m - 1 - 1, k - r + 1],
        {1, 1, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}]) / (8 (m + k + 1))]
  ];

  Print["p = ", m + 1, " contribution calculated."];
  CalculationEndTime = FromDate[Date[]];
```

```

CalculationTime = CalculationEndTime - StartTime;
Print["Calculation time = ", CalculationTime, " seconds."];
Print["Memory used: ", N[MaxMemoryUsed[] / 1024 / 1024], " MB"];
Print[]
]

```

```

Definition[c] >>> "EffectiveAction-Phi4-1d-p144.m";

```

Za slučaj modifikovanog Pošl-Teler potencijala, rešavanje rekurzivnih relacija je pojednostavljeno uzimanjem u obzire strukture rešenja. Mathematica program je dat u fajlu `EffectiveAction-MPT-1d.nb`. Ako potencijal napišemo kao

$$V(x) = -\frac{c}{\cosh^2 ax}, \quad (\text{B.1})$$

može se pokazati da koeficijenti $c_{m,k}$ za ovu teoriju imaju oblik

$$c_{m,k} = \sum_{i=0}^m d_{m,k,i} \frac{(\tanh ax)^{2i}}{(\cosh ax)^{2m-2i+2}}. \quad (\text{B.2})$$

Zamenom gornjeg izraza u rekurzivne relacije za koeficijente $c_{m,k}$ dobijaju se nove rekurzivne relacije za brojeve $d_{m,k,i}$, a implementirane su u Mathematica programu datom ispod. Iako rekurzivne relacije za koeficijente $d_{m,k,i}$ imaju komplikovaniji oblik, njihovo računanje je memorijski manje zahtevno, pošto su u pitanju brojevi, a ne funkcije. Zbog toga smo uspeli da nađemo efektivno dejstvo za ovu teoriju do visokog nivoa $p = 41$. Izvedeni izrazi su dostupni u obliku Mathematica input fajla `EffectiveAction-MPT-1d-p41.m` [13].

```

p=41;

CurrentTime=FromDate[Date[]];
StartTime=CurrentTime;

d[ii_, jj_, kk_] = 0;
d[0, 0, 0] = -c;

For[m = 1, m < p, m++,
  d[m, m, m] = Expand[4 a^2 d[m - 1, m - 1, m - 1] / (2 m (2 m + 1))];
  d[m, m, 0] = Expand[(-2 a^2 m d[m - 1, m - 1, 0] +
    2 a^2 d[m - 1, m - 1, 1]) / (2 m (2 m + 1))];

  If[m > 1,
    d[m, m, m - 1] = Expand[(16 a^2 d[m - 1, m - 1, m - 2] -
      a^2 (12 m - 10) d[m - 1, m - 1, m - 1]) / (2 m (2 m + 1))]
  ];

  If[m > 2,
    For[i = 1, i <= m - 2, i++,
      d[m, m, i] = Expand[(2 a^2 (2 (m - i + 1)^2 d[m - 1, m - 1, i - 1] -
        (4 i (m - i) + m + i) d[m - 1, m - 1, i] +
        (i + 1) (2 i + 1) d[m - 1, m - 1, i + 1])) / (2 m (2 m + 1))]
    ]
  ];
];

```

```

For[k = m - 1, k >= 0, k--, For[i = 0, i <= m, i++,
  d[m, k, i] = Expand[(2 (k + 1) (2 k + 1) d[m, k + 1, i] +
    2 a^2 (-(m - i) (2 i + 1) + i (2 m - 2 i + 2)) d[m - 1, k, i] +
    2 (m + 1 - i)^2 d[m - 1, k, i - 1] + (i + 1) (2 i + 1) d[m - 1, k, i + 1]) -
    Sum[4 r (k - r + 1) d[1, r, n] d[m - 1 - 1, k - r + 1, i - n],
      {1, 1, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}, {n, 0, i}] - 4 a^2
    Sum[((1 + 1 - n) (m - 1 - i + n) d[1, r, n] d[m - 1 - 2, k - r, i - 1 - n] -
      ((1 + 1 - n) (i - n) + n (m - 1 - 1 - i + n)) d[1, r, n]
      d[m - 1 - 2, k - r, i - n] +
      n (i + 1 - n) d[1, r, n] d[m - 1 - 2, k - r, i + 1 - n]),
      {1, 0, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}, {n, 0, i + 1}]] /
    (8 (m + k + 1))]
]];

Print["p = ", m + 1, " contribution calculated."];
CalculationEndTime = FromDate[Date[]];
CalculationTime = CalculationEndTime - StartTime;
Print["Calculation time = ", CalculationTime, " seconds."];
Print["Memory used: ", N[MaxMemoryUsed[] / 1024 / 1024], " MB"];
Print[]
]

Definition[d] >>> "EffectiveAction-MPT-1d-p41.m";

```

Ukoliko je potrebno, koeficijenti $c_{m,k}$ se mogu izračunati pomoću sledeće Mathematica komande:

```

For[m = 0, m < p, m++, For[k = m, k >= 0, k--,
  For[c[m, k] = 0; i = 0, i <= m, i++,
    c[m, k] += d[m, k, i] Sech[a x]^(2 m - 2 i + 2) Tanh[a x]^(2 i)
  ]
]]

```

U sekciji 6.2 smo definisali efektivni potencijal W_0 za kratko vreme propagacije za dijagonalne amplitude koji ne zavisi od diskretizovanih brzina na sledeći način: $W_0(\bar{x}; \epsilon_N) = W(\delta = 0, \bar{x}; \epsilon_N)$. Ova veličina je značajna za direktno numeričko računanje dijagonalnih amplitude, kao i drugih fizičkih veličina, kao što je gustina čestica. Efektivni potencijal W_0 se može se naći pomoću Mathematica programskog koda **EffectiveAction-Diagonal-1d.nb** koji je dat ispod. Mi smo izračunali efektivno dejstvo W_0 za opštu jednočestičnu teoriju u jednoj prostornoj dimenziji do nivoa $p = 37$. Izvedeni izrazi su dostupni u obliku Mathematica input fajla **EffectiveAction-Diagonal-1d-p37.m** [13].

```
p = 37;
```

```
CurrentTime = FromDate[Date[]];
StartTime = CurrentTime;
```

```
c[i_] = 0;
c[0] = V[x];
```

```
For[m = 1, m < p, m++,
  c[m] = Expand[Integrate[Expand[D[c[m - 1], {x, 3}] / 4 - 2 V[x] D[c[m - 1], {x, 1}] +
```



```

2 Sum[D[c[k], {x, 1}] c[m - k - 1], {k, 0, m - 1}] +
2 Sum[k c[k] D[c[m - k - 1], {x, 1}], {k, 1, m - 1}] -
3 Sum[D[c[k], {x, 1}] D[c[m - k - 2], {x, 2}], {k, 0, m - 2}] / 4 +
Sum[D[c[k], {x, 1}] D[c[1], {x, 1}] D[c[m - k - 1 - 3], {x, 1}],
{k, 0, m - 3}, {1, 0, m - k - 3}] / 4] / (2 m + 1), x]];

Print["p = ", m + 1, " contribution calculated."];
CalculationEndTime = FromDate[Date[]];
CalculationTime = CalculationEndTime - StartTime;
Print["Calculation time = ", CalculationTime, " seconds."];
Print["Memory used: ", N[MaxMemoryUsed[] / 1024 / 1024], " MB"];
Print[]
]

Definition[c] >>> "EffectiveAction-Diagonal-1d-p37.m";

```

B.2 Višečestične teorije

Za slučaj opšte višečestične u proizvoljnom broju prostornih dimenzija, efektivno dejstvo je dato pomoću kontrahovanih veličina $W_{m,k}$. Za njihovo računanje razvijen je Mathematica program dat u fajlu `EffectiveAction-ManyBody.nb`. On koristi poseban Mathematica paket `MathTensor` [70] koji olakšava rad sa tenzorskim veličinama. Opšte efektivno dejstvo za višečestične teorije smo našli do nivoa $p = 10$. Izvedeni izrazi su dostupni u obliku Mathematica input fajla `EffectiveAction-ManyBody-p10.m` [13].

Prvi korak je inicijalizacija paketa `MathTensor`:

```

Off[Syntax::com]
Off[SetDelayed::write]
Off[Set::write]
Off[General::spell]
Off[General::spell1]
<< MathTens.m
MakeMetricFlat[Euclid]
On[EvaluateODFlag]

```

Nakon toga je neophodno učitati definicije novih funkcija koje smo uveli u ovom kodu, a koje će se koristiti za računanje efektivnih dejstava:

```

DumIndCountl = 0;
DumIndCountu = 0;
DefineTensor[d, {{1}, 1}]
GenNewInd[nnn_] := tt /.
{
  DumIndCountl = DumIndCountu + 1;
  DumIndCountu = DumIndCountl + nnn - 1;
  nn = DumIndCountl;
  mm = DumIndCountu;

  For[kk = nn, kk <= mm, kk++,
    upi[kk] = StringJoin["up", ToString[kk]];
    loi[kk] = StringJoin["lo", ToString[kk]]
  ];

```

```

For[kk = nn; upil = {}; loil = {}, kk <= mm, kk++,
  ToExpression[StringJoin["AppendTo[upil, up", ToString[kk], "]"]];
  ToExpression[StringJoin["AppendTo[loil, lo", ToString[kk], "]"]];
];

For[kk = nn; upils[kk - 1] = ""; loils[kk - 1] = "", kk <= mm, kk++,
  upils[kk] = StringJoin[upils[kk - 1], If[kk > nn, ", ", ""], "up", ToString[kk]];
  loils[kk] = StringJoin[loils[kk - 1], If[kk > 1, ", ", ""], "lo", ToString[kk]];
];

UpLo[upil, loil];
tt -> 1
}

NewDefUnique[contr_] := tempnew /.
{
  temptemp = contr;
  temp1 = Union[Arglist[temptemp]];
  temp2 = Length[temp1];

  For[templow = {}; tempup = {}; kkk = 1, kkk <= temp2, kkk++,
    If[LowerIndexQ[temp1[[kkk]]], AppendTo[templow, temp1[[kkk]]],
      AppendTo[tempup, temp1[[kkk]]]
    ]
  ];

  temp1 = Intersection[templow, Lower[tempup]];
  temp2 = Length[temp1];
  GenNewInd[temp2];

  For[mcount = 1; mcountt = DumIndCount1, mcount <= temp2, mcount++; mcountt++,
    temptemp = temptemp /.
    {
      temp1[[mcount]] -> ToExpression[loi[mcountt]],
      Pair[temp1[[mcount]]] -> ToExpression[upi[mcountt]]
    }
  ];

  tempnew -> temptemp
}

NewDerivativeVec[contr_, vec_, ind_] := ttt /.
{
  d1 = contr;
  d2 = Union[Arglist[d1]];
  d3 = Length[d2];

  For[dlow = {}; dup = {}; dk = 1, dk <= d3, dk++,
    If[LowerIndexQ[d2[[dk]]], AppendTo[dlow, d2[[dk]]], AppendTo[dup, d2[[dk]]]]
  ];

  d2 = Intersection[dlow, Lower[dup]];
  d3 = Length[d2];
  ttt1 = 0;

  For[mt = 1, mt <= d3, mt++,
    ttt1 += (D[contr, vec[d2[[mt]]]] + D[contr, vec[Raise[d2[[mt]]]]]) /.
    {

```

```

        Raise[d2[[mt]]] -> Pair[ind],
        d2[[mt]] -> Pair[ind],
        OD[vec[_], _] -> 0
    }
];

t11 += D[contr, vec[ind]] /. OD[vec[_], _] -> 0;
t11 -> t11
}

NewLaplacianVec[contr_, vec_] := t12 /.
{
    GenNewInd[1];
    t13 = NewDerivativeVec[NewDerivativeVec[contr, vec,
        ToExpression[upi[DumIndCount1]]], vec, ToExpression[loi[DumIndCount1]]];
    t12 -> t13
}

```

Za računanje veličina $W_{m,k}$ se koristi sledeći programski kod:

```

p = 10;

CurrentTime = FromDate[Date[]];
StartTime = CurrentTime;

W[i_, j_] = 0;
m = 0;
k = 0;
W[m, k] = V;
GenNewInd[2 p + 2];

For[m = 1, m < p, m++,
    temp = "";

    For[k1 = DumIndCount1, k1 <= DumIndCount1 + 2 m - 1, k1++,
        temp = StringJoin[temp, " d[" , upi[k1], "]" ]
    ];

    temp = StringJoin[temp, " OD[V, ", loils[DumIndCount1 + 2 m - 1], "]" ];
    W[m, m] = ToExpression[temp] / (2 m + 1)!
]

For[m = 1, m < p, m++, For[k = m - 1, k >= 0, k--,
    GenNewInd[1];
    tempnum = DumIndCount1;
    W[m, k] = CanAll[CanAll[(OD[W[m - 1, k], ToExpression[upi[tempnum]],
        ToExpression[loi[tempnum]]] + NewLaplacianVec[W[m, k + 1], d] -
        Sum[OD[W[1, r], ToExpression[upi[tempnum]]]
            NewDefUnique[OD[W[m - 1 - 2, k - r], ToExpression[loi[tempnum]]]],
            {1, 0, m - 2}, {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}] -
        Sum[NewDerivativeVec[W[1, r], d, ToExpression[upi[tempnum]]]
            NewDefUnique[NewDerivativeVec[W[m - 1 - 1, k - r + 1], d,
            ToExpression[loi[tempnum]]], {1, 1, m - 2},
            {r, Max[0, k - m + 1 + 2], Min[k, 1]}]) / 8 / (m + k + 1) /.
        {OD[d[_], _] -> 0, OD[d[_], _, _] -> 0}]];
    n1 = W[m, k];

```

```

n2 = Union[Arglist[n1]];
n3 = Length[n2];

For[nlow = {}; nup = {}; nk = 1, nk <= n3, nk++,
  If[LowerIndexQ[n2[[nk]]], AppendTo[nlow, n2[[nk]], AppendTo[nup, n2[[nk]]]]
];

n2 = Intersection[nlow, Lower[nup]];
n3 = Length[n2];
GenNewInd[n3];

For[mn = 1, mn <= n3, mn++,
  n1 = n1 /.
  {
    n2[[mn]] -> ToExpression[loi[DumIndCount1 + mn - 1]],
    Pair[n2[[mn]]] -> ToExpression[upi[DumIndCount1 + mn - 1]]
  }
];

For[mn = 1, mn <= n3, mn++,
  n1 = n1 /.
  {
    ToExpression[loi[DumIndCount1 + mn - 1]] -> ToExpression[loi[mn]],
    ToExpression[upi[DumIndCount1 + mn - 1]] -> ToExpression[upi[mn]]
  }
];

W[m, k] = n1
];

EndTime = FromDate[Date[]];
CalculationTime = EndTime - StartTime;
Print[];
Print["End of p = ", m + 1, " calculation."];
Print["Calculation time = ", CalculationTime, " seconds."];
Print["Memory used: ", N[MaxMemoryUsed[] / 1024 / 1024], " MB."];
Print[]
]

Definition[W] >>> "EffectiveAction-ManyBody-p10.m";

```

U fajlu `EffectiveAction-ManyBody-p10.m` koji se može kasnije koristiti kao input za druge Mathematica programe neophodno je izvršiti zamenu `uu -> up` i `ll -> lo` kako bi to bilo moguće. Nakon toga, za korišćenje input fajla `EffectiveAction-ManyBody-p10.m` neophodno je prethodno inicijalizovati `MathTensor` i učitati sve definicije, kao u gornjem programu. Nakon toga neophodno je definisati vrednost nivoa p i pozvati funkciju `GenNewInd` sa vrednošću argumenta $2p+2$, kao bi se generisalo dovoljno nemih indeksa. Sada je moguće učitati izraze za izvedena efektivna dejstva iz input fajla. Primer je dat ispod (inicijalizacija paketa `MathTensor` i definicije su date u gornjem programu i nisu ponavljane).

```

p = 10;
GenNewInd[2 p + 2];
<< "EffectiveAction-ManyBody-p10.m";

```

Dodatak C

Elementarni uvod u Monte Karlo metod

Sredinom XX veka razvijen je Monte Karlo metod, numerički metod koji je, zahvaljujući brzom razvoju računara, postao jedan od najmoćnijih i najvažnijih metoda za rešavanje komplikovanih matematičkih problema. Razvoj generatora slučajnih brojeva, koji je kulminirao u Metropolis algoritmu (ili, preciznije, u (MRT)² algoritmu [76]) omogućio je njegovu primenu u skoro svim oblastima fizike. Najjednostavnija definicija Monte Karlo metoda glasi: to je numerički metod za rešavanje matematičkih problema pomoću slučajnih brojeva. Formulacija kvantne mehanike i kvantne teorije polja preko funkcionalnog integrala spada u klasu tipičnih problema koje veoma uspešno rešava Monte Karlo metod. Naime, iz definicije funkcionalnog integrala date u Uvodu, jasno je da je za njegovo računanje potrebno rešavati višestruke određene integrale, a Monte Karlo metod dominira nad svim drugim metodima baš u tom slučaju. Pokazaćemo to pomoću jednostavnog argumenta. Osnova klasičnih numeričkih metoda računanja određenih integrala je u podeli domena integracije na N delova i aproksimiranju integrala sumom

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \sum_{n=1}^N f(x_n)\Delta x_n,$$

gde je Δx_n širina n -tog dela u datoj podeli domena integracije definisanoj podeonim tačkama x_n . Greška ΔI koja se na ovaj način čini je proporcionalna tipičnoj vrednosti Δx_n , odnosno $\Delta I \sim \Delta x_n \sim 1/N$. Ako umesto vrednosti $f(x_n)$ u gornjoj formuli koristimo bolje odabranu vrednost, možemo da postignemo da greška ΔI bude proporcionalna sa $1/N^3$ (trapezoidna formula), sa $1/N^5$ (Simpsonova formula), ili sa $1/N^7$ (Bodeova formula). Postoje i druge formule, ali svima njima je zajednička osobina da je greška koju činimo pri računanju integrala proporcionalna nekom stepenu tipične veličine koraka integracije, $\Delta I \sim 1/N^a$. Ovo važi kako za jednostruke, tako i za višestruke integrale. Sa druge strane, vreme izvršavanja algoritma T proporcionalno je sa brojem integracionih koraka, pa je za D -tostruki integral $T \sim N^D$. Odavde sledi da je $N \sim T^{1/D}$, odnosno $\Delta I \sim 1/N^a \sim 1/T^{a/D}$. Pri računanju višestrukih integrala velike dimenzionalnosti važi $a/D \ll 1$, pa vreme izvršavanja algoritma koje je neophodno uložiti da bi se greška smanjila rapidno raste. Na primer, ukoliko smo izračunali integral sa procenjenom greškom ΔI za vreme T i želimo da grešku smanjimo na $\Delta I/2$, tada je vreme potrebno za to $2^{D/a}T$, a kako je $D/a \gg 1$, vidimo da je za izvršavanje algoritma koji bi dao dvostruko manju grešku potrebno uložiti značajno duže vreme. Za razliku od ovoga, kod Monte Karlo metoda uvek važi $\Delta I \sim 1/\sqrt{T}$, pa za dvostruko smanje-

nje greške treba uložiti četiri puta više vremena, pri čemu to ne zavisi od dimenzionalnosti integrala. Kako je dimenzionalnost integrala kojima aproksimiramo funkcionalni integral veoma velika (tipično reda veličine 10^2 u našim simulacijama), jasno je da je Monte Karlo metod jedini primenljivi numerički metod u ovom slučaju.

Pre nego što pređemo na opis Monte Karlo metoda, definisaćemo nekoliko pojmova iz teorije verovatnoće i matematičke statistike, koji će nam biti neophodni.

Diskretna slučajna promenljiva ξ je veličina koja uzima vrednosti iz nekog diskretnog skupa $\{x_i\}$ sa određenom verovatnoćom. Verovatnoću p_i da diskretna promenljiva ξ uzme vrednost x_i iz ovog skupa označavamo sa $p_i = V(\xi = x_i)$.

Neprekidna slučajna promenljiva ξ je veličina koja uzima vrednosti iz nekog intervala $[\alpha, \beta] \subset \mathbb{R}$. Zatvoreni interval može biti zamenjen otvorenim intervalom (ili intervalom sa jednom otvorenim, a drugom zatvorenim granicom), kao i unijom ovakvih intervala. Zbog jednostavnosti, podrazumevaćemo da je $\xi \in [\alpha, \beta]$.

Raspodela (gustina verovatnoće) p neprekidne slučajne promenljive ξ je funkcija definisana sa $p(x)dx = V\{\xi \in (x, x + dx)\}$, gde je sa $V\{\xi \in (x, x + dx)\}$ označena verovatnoća da slučajna promenljiva uzme vrednost iz intervala $(x, x + dx)$. Gustina verovatnoće može da se definiše i za diskretne slučajne promenljive, $p(x) = \sum_i p_i \delta(x - x_i)$. Mi ćemo koristiti samo neprekidne slučajne promenljive. Najvažnije osobine svake raspodele su date sa $(\forall x) p(x) > 0$ i $\int_{\alpha}^{\beta} p(x)dx = 1$. Prva od ovih osobina je posledica pozitivnosti verovatnoće, a druga je posledica činjenice da slučajna promenljiva mora da uzme neku vrednost iz intervala $[\alpha, \beta]$, u skladu sa definicijom. Navešćemo dva primera raspodele koje ćemo kasnije koristiti.

Uniformna raspodela na intervalu $[\alpha, \beta]$ data je sa $u(x) = 1/(\beta - \alpha)$. Slučajna promenljiva čija je raspodela uniformna sa istom verovatnoćom može da uzme bilo koju vrednost iz intervala $[\alpha, \beta]$.

Gausova (normalna) raspodela, definisana na celom skupu realnih brojeva \mathbb{R} , data je dvoparametarskom funkcijom

$$\mathcal{N}(x; x_0, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (\text{C.1})$$

U tački x_0 Gausova raspodela ima maksimum i simetrična je u odnosu na ovu tačku, pa se ona zove centar raspodele. Veličina σ^2 se zove varijansa, a σ je standardna devijacija ili širina raspodele. Ona ima korisnu interpretaciju: verovatnoća da slučajna promenljiva ξ uzme vrednost iz intervala $[x_0 - \sigma, x_0 + \sigma]$ je 68.3% (ovaj interval se obično zove 1- σ interval), za 2- σ interval $[x_0 - 2\sigma, x_0 + 2\sigma]$ verovatnoća je 95.4%, za 3- σ interval verovatnoća je 99.7% itd. Ove verovatnoće se dobijaju integracijom Gausove raspodele po odgovarajućem intervalu.

Kumulativna raspodela C slučajne promenljive ξ predstavlja verovatnoću da slučajna promenljiva uzme vrednost koja je manja ili jednaka unapred zadatoj vrednosti x iz intervala $[\alpha, \beta]$, odnosno $C(x) = V(\xi \leq x) = \int_{\alpha}^x p(x')dx'$. Za uniformnu raspodelu kumulativna funkcija je linearna, dok je za Gausovu raspodelu kumulativna funkcija jedna od specijalnih funkcija (funkcija greške, "error function").

Srednja vrednost funkcije g u odnosu na raspodelu p je $\langle g \rangle_p = \int_{\alpha}^{\beta} g(x)p(x)dx$. Na primer, srednja vrednost $\langle x \rangle_p$ slučajne promenljive ξ dobija se kada za funkciju g uvrstimo $g(x) = x$, i tada je $\langle x \rangle_p = \int_{\alpha}^{\beta} x p(x)dx$. Za Gausovu raspodelu (C.1) centar raspodele x_0 je jednak srednjoj vrednosti slučajne promenljive $x_0 = \langle x \rangle_{\mathcal{N}}$, a varijansa je data sa $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle_{\mathcal{N}} - \langle x \rangle_{\mathcal{N}}^2$.

Ocena srednje vrednosti Ξ_N slučajne promenljive ξ definiše se kao aritmetička sredina $\Xi_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i$ skupa N nezavisnih uzoraka slučajne promenljive $\{\xi_i\}$. Veličina Ξ_N je, za fiksiranu vrednost N , slučajna promenljiva koja uzima vrednosti $X_N \in [\alpha, \beta]$ ²⁴. Na osnovu zakona velikih brojeva sledi da je, u limesu velikog broja uzoraka N , ocena srednje vrednosti jednaka srednjoj vrednosti slučajne promenljive ξ , $\lim_{N \rightarrow \infty} \Xi_N = \langle x \rangle_p$. Ovde je, kao i ranije, sa p označena raspodela slučajne promenljive ξ . Centralna granična teorema nam daje detaljnije informacije o asimptotskom ponašanju raspodele slučajne promenljive Ξ_N . Iz ove teoreme sledi da je raspodela P slučajne promenljive Ξ_N za velike vrednosti broja uzoraka N data Gausovom raspodelom,

$$P(X_N) \xrightarrow{N \gg 1} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_p^2/N}} \exp \left\{ -\frac{(X_N - \langle x \rangle_p)^2}{2\sigma_p^2/N} \right\} \equiv \mathcal{N} \left(X_N; \langle x \rangle_p, \frac{\sigma_p^2}{N} \right), \quad (\text{C.2})$$

gde je $\sigma_p^2 = \langle x^2 \rangle_p - \langle x \rangle_p^2$. Kako je varijansa σ_p^2 određena samo raspodelom p slučajne promenljive ξ , jasno je da se sa povećanjem broja uzoraka N smanjuje širina σ_p/\sqrt{N} Gausove raspodele (C.2). U limesu $N \rightarrow \infty$ gornja raspodela postaje δ -funkcija centrirana na vrednosti $x_0 = \langle x \rangle_p$, kao što sledi iz zakona velikih brojeva.

Ukoliko na osnovu statističkog uzorka ocenjujemo vrednost neke veličine A (kao što, na primer, veličinom Ξ_N ocenjujemo srednju vrednost slučajne promenljive ξ), jasno je da ocena ne mora da se poklapa sa pravom vrednošću veličine A (pretpostavljamo da je veličina A takva da je njena vrednost dobro definisana i da se ne menja tokom uzimanja uzoraka). Zbog toga je neophodno oceniti i grešku koju smo učinili prilikom ocenjivanja veličine A , odnosno oceniti interval u kome se prava vrednost veličine A nalazi. Kada je raspodela ocena koje za veličinu A dobijamo na osnovu različitih statističkih uzoraka jednaka Gausovoj raspodeli, tada postoji standardan način za ocenu greške sa jednostavnom interpretacijom. Za ocenu greške dobijene vrednosti uzimamo standardnu devijaciju σ Gausove raspodele ocena vrednosti veličine A . Na osnovu osobina Gausove raspodele možemo da damo interpretaciju ovakve ocene greške: prava vrednost veličine A nalazi se u $1-\sigma$ intervalu oko ocenjene vrednosti sa verovatnoćom od 68.3%, u $2-\sigma$ intervalu oko ocenjene vrednosti sa verovatnoćom od 95.4% itd. Naravno, ukoliko veličinu A ocenjujemo samo na osnovu jednog uzorka, tada ne možemo utvrditi da li ocene koje odgovaraju različitim uzorcima imaju Gausovu raspodelu, niti kolika je njena širina. Zbog toga se za ocenu uvek koristi ansambl različitih statističkih uzoraka, koji će nam dati skup ocena $\{A_i\}$ vrednosti veličine A , po jednu za svaki uzorak iz ansambla. Čak i ako raspodela ovih ocena nije Gausova, ovaj problem možemo lako da rešimo tako što ćemo sve uzorke iz ansambla podeliti u grupe od po N uzoraka, a prethodno dobijeni skup ocena veličine A zamenićemo aritmetičkim sredinama ocena dobijenim iz pojedinih grupa uzoraka (dakle, imaćemo po jednu ocenu za svaku grupu uzoraka, jednaku aritmetičkoj vrednosti ocena koje se dobijaju na osnovu uzoraka iz grupe). Na ovaj način smo ocenjivanje veličine A zamenili ocenjivanjem srednje vrednosti veličine A na N uzoraka, a na osnovu centralne granične teoreme znamo da je odgovarajuća raspodela dobijenih ocena Gausova i da je data gornjom formulom (C.2). Zbog toga ćemo u daljem tekstu pretpostaviti da ocene $\{A_i\}$ vrednosti veličine A imaju Gausovu raspodelu.

Pošto smo principijelno rešili problem ocene greške, ostaje nam još praktičan problem: iako znamo da dobijene ocene vrednosti veličine A imaju Gausovu raspodelu (C.2), kako

²⁴Ukoliko slučajna promenljiva ξ uzima vrednosti iz unije intervala, situacija je nešto složenija: u tom slučaju promenljiva Ξ_N uzima vrednosti iz nadintervala čija je donja (gornja) granica jednaka najnižoj (najvišoj) od donjih (gornjih) granica svih intervala koji čine uniju.

izračunati parametre te raspodele? Jasno je da na osnovu statističkih uzoraka koji su nam poslužili da ocenimo vrednost veličine A moramo da ocenimo i parametre tražene Gausove raspodele. Očigledno je da centar raspodele možemo da ocenimo aritmetičkom sredinom svih dobijenih ocena $\{A_i\}$ za veličinu A , kao što smo ranije pokazali na osnovu zakona velikih brojeva i, nezavisno, na osnovu centralne granične teoreme. Na prvi pogled, pogodna ocena varijanse raspodele veličine A je data sa

$$\tilde{\sigma}_A^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \right)^2,$$

ali se može pokazati da ova ocena nije nepristrasna (njena srednja vrednost u limesu velikog broja uzoraka nije jednaka pravoj vrednosti veličine koja se ocenjuje, σ_A^2). Detaljnija analiza [33, 77] pokazuje da je bolja, nepristrasna ocena za varijansu σ_A^2 data sa

$$\sigma_A^2 = \frac{N}{N-1} \tilde{\sigma}_A^2 = \frac{N}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \right)^2 \right).$$

Broj uzoraka N je obično dovoljno veliki, pa se ova popravka često može zanemariti.

Monte Karlo metod za računanje integrala oblika $I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx$ se bazira na jednostavnom identitetu

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx. \quad (\text{C.3})$$

Ukoliko za funkciju p u gornjem izrazu odaberemo nenegativnu funkciju čiji je integral na intervalu $[\alpha, \beta]$ jednak jedan, onda ovu funkciju možemo da interpretiramo kao raspodelu neke slučajne promenljive i gornji izraz možemo da prepisemo u obliku $I = \langle f/p \rangle_p$. Dakle, vidimo da je traženi integral jednak srednjoj vrednosti $\langle f/p \rangle_p$ funkcije f/p u odnosu na raspodelu p . Na osnovu pojmova koje smo prethodno uveli, suštinu Monte Karlo metoda možemo da iskažemo u četiri koraka:

1. generiše se N slučajnih brojeva (x_1, \dots, x_N) čija je raspodela data funkcijom p ,
2. izračunaju se vrednosti $f_i/p_i = f(x_i)/p(x_i)$ za $i \in \{1, \dots, N\}$,
3. vrednost integrala I se oceni sa

$$I_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{p_i}, \quad (\text{C.4})$$

4. greška ΔI_{MC} gornje ocene vrednosti integrala se oceni sa

$$\Delta I_{MC} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{f_i}{p_i} \right)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{p_i} \right)^2 \right]}. \quad (\text{C.5})$$

Rezultate Monte Karlo metoda citiramo u obliku $I = I_{MC} \pm \Delta I_{MC}$, uz interpretaciju greške na standardan način, kao širine odgovarajuće Gausove raspodele.

Da bismo uspešno primenili Monte Karlo strategiju, ostaje da rešimo još dva problema: izbor raspodele p u identitetu (C.3) i način generisanja slučajnih brojeva iz ove raspodele.

Što se izbora raspodele p tiče, pošto imamo potpunu slobodu, iskoristićemo je za minimiziranje greške, odnosno za minimiziranje izraza (C.5). Kada bi funkcija f/p bila konstantna, onda bi odgovarajuća standardna devijacija $\sigma_{f/p}$ bila jednaka nuli, pa bi i greška bila jednaka nuli. To bi značilo da slučajne brojeve generišemo iz raspodele $p(x) \sim f(x)$, pa iz uslova normiranja $\int_{\alpha}^{\beta} p(x)dx = 1$ dobijamo $p(x) = f(x)/I$, odnosno za normiranje takve raspodele većoramo da znamo vrednost integrala I koji pokušavamo da izračunamo. Dakle, ovakav pristup ne daje rešenje (a i podrazumevali smo da je funkcija f nenegativna, što ne mora da bude slučaj). Međutim, primetili smo da je za minimizaciju greške ključno obezbediti da se funkcija f/p što manje menja na domenu integracije. Izbor raspodele p je praktično ograničen i zahtevom za generisanje slučajnih brojeva iz te raspodele. Naime, potrebno je razviti algoritam koji će generisati te slučajne brojeve²⁵. Iako je ovaj problem rešen u opštem obliku (Metropolis algoritam, [76]), potrebno je izvršiti optimizaciju u svakom pojedinom slučaju. Često se ispostavlja da je kompleksnost Metropolis algoritma suviše velika za generisanje slučajnih brojeva iz idealne raspodele p , pa je efikasnije odabrati neku drugu raspodelu iz koje se slučajni brojevi lakše i brže generišu, i pri tom povećati broj uzoraka N . Povećanje broja uzoraka može da kompenzuje povećanje greške usled korišćenja neidealne raspodele p , tako da se ponekad na ovaj način dobijaju za redove veličina efikasniji algoritmi. U numeričkim simulacijama pogodno je uvesti efikasnost simulacije

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\sigma_{f/p}^2 T_1},$$

gde je T_1 vreme potrebno da se generiše jedan broj iz raspodele p i izračuna vrednost funkcije f/p za dobijeni broj. Tek se maksimiziranjem efikasnosti dobija optimalan algoritam.

²⁵U pitanju su zapravo pseudoslučajni brojevi, pošto se generišu na osnovu nekog algoritma i samo su prividno slučajni. Međutim, postoji niz testova [77] koji nam omogućavaju da identifikujemo algoritme koji daju pseudoslučajne brojeve dovoljnog kvaliteta za primenu u Monte Karlo algoritmima.

Dodatak D

Programski kod SPEEDUP

Programski kod za numeričke Monte Karlo simulacije koje su korišćene u ovom radu razvili smo u programskom jeziku C, uz poštovanje ANSI standardizacije. Tipično vreme izvršavanja koda sa $N = 2^7 = 128$ vremenskih koraka (što istovremeno znači i računanje 127-ostrukog određenog integrala) i $N_{MC} = 10^7$ Monte Karlo koraka iznosi 15-ak minuta na novijem PC računaru. Prema tome, jasno je da je za nesmetano korišćenje koda u istraživačke svrhe (pri čemu je neophodno mnogostruko računanje diskretizovanih funkcionalnih integrala kako bi se verifikovale izvedene zavisnosti i formule na širokom opsegu parametara teorije) potrebno obezbediti računar visokih performansi. Sve numeričke simulacije čiji su rezultati prikazani u ovom radu su izvršene na klasteru Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu [71].

U ovom dodatku ćemo detaljno prikazati serijsku verziju SPEEDUP koda, koja je slobodno dostupna [13]. Paralelizacija ovog koda je jednostavna, a paralelna verzija (zasnovana na standardnoj MPI implementaciji koja se koristi na većini računarskih klastera) je takođe slobodno dostupna [13]. Originalni delovi koda su dati crnom bojom, a pomoćne funkcije preuzete iz [33] su date **plavom bojom**. Programski kod sadrži komentare na engleskom jeziku, koji su takođe dati zbog kompletnosti. Ovde je prikazan programski kod za jednočestični slučaj u jednoj prostornoj dimenziji, a uopštenja na višestestične teorije su pravolinijska.

Ceo kod je organizovan u pet fajlova, od kojih tri sadrže definicije svih korišćenih funkcija (`main.c`, `p.c`, `nr.c`), a dva fajla sadrže zaglavlja i dodatne deklaracije promenljivih i funkcija (`main.h`, `p.h`). Uz kod se standardno distribuira i `README` fajl koji sadrži osnovne informacije o kompajliranju i korišćenju programa.

U prvom fajlu, `main.c`, nalazi se glavna funkcija `main()`, u okviru koje se prvo učitavaju parametri teorije za koju se računa amplituda, što podrazumeva vreme propagacije, koordinate početne i krajnje tačke, maksimalni željeni broj vremenskih koraka (u obliku 2^s , pošto se koristi bisekcionni metod za generisanje trajektorija [35]; programu će izračunati diskretizovane amplitude za sve vrednosti $N = 2^0, 2^1, \dots, 2^s$), broj Monte Karlo uzoraka, broj za inicijalizaciju generatora slučajnih brojeva SPRNG, kao i parametri dejstva teorije u redosledu koji korisnik odabere. Zatim se, nakon inicijalizacije promenljivih i alociranja neophodne memorije, poziva funkcija `mc()`, koja realizuje Monte Karlo proceduru, istovremeno za sve pomenute gustine diskretizacije $N = 2^0, 2^1, \dots, 2^s$. Nakon izvršavanja ove funkcije, program se nastavlja u funkciji `main()` izračunavanjem vrednosti diskretizovanih amplituda i odgovarajućih ocena grešaka sa sve navedene vrednosti broja podeonih tačaka N , ispisuju se rezultati, dealocira sva prethodno alocirana memorija i program se konačno završava.

Funkcija `mc()` se takođe nalazi u fajlu `main.c`. Ona u petlji po broju Monte Karlo

uzoraka poziva funkciju `distr()`, koja generiše trajektoriju sa 2^s segmenata, uz fiksirane granične uslove. Glavni deo petlje, nakon generisanja pojedinačne trajektorije, predstavlja računanje podintegralne veličine f/p i akumuliranje sume iz jednačine (C.4), koja služi za računanje ocene vrednosti integrala, kao i akumuliranje sume kvadrata podintegralne veličine, koja se koristi za ocenu greške na osnovu formule (C.5). Pri tome, ovo se radi za sve razmatrane vrednosti broja vremenskih koraka $N = 2^0, 2^1, \dots, 2^s$, pa se ove sume smeštaju u odgovarajuće prethodno deklarirane nizove `amp` i `err`. Fajl `main.c` sadrži i definiciju funkcije `distr()`, koja generiše trajektorije sa zadatim brojem segmenata 2^s i uz zadate granične uslove, korišćenjem bisekcionog metoda [35] koji radi rekurzivno. Na nivou $N = 2^0$ imamo samo jedan segment koji čine fiksirana početna i krajnja tačka. Na nivou $N = 2^1$ se generiše jedna dodatna tačka u sredini vremenskog intervala, iz gausijana centriranog na srednjoj tački između početne i krajnje tačke intervala. Ovaj proces se onda nastavlja rekurzivno do nivoa $N = 2^s$. Pri tome je širina gausijana na nivou $N = 2^n$ data formulom $2\sigma^2 = T/2^n$, gde je T ukupno vreme propagacije. Za generisanje brojeva iz Gausove raspodele koristi se Boks-Milerov metod [33], a generator slučajnih brojeva je SPRNG [73]. Sadržaj fajla `main.c` je dat ispod.

```

/* NO USER CONFIGURABLE PARAMETERS HERE! */

/* The function main() reads command line parameters, initializes variables,
   calls the Monte Carlo function mc(), and prints the output.
*/

#include <main.h>

int main(int argc, char **argv)
{
    double a, b; /* Initial and final position. */

    int s, n; /* Maximal number of time steps is 2^s; n is the loop variable that
               runs from 0 (or 1) to s, and corresponds to the current
               number of time steps 2^n. */

    double Nmc; /* Nmc is the number of Monte Carlo samples. */

    long seed; /* Initialization seed for the SPRNG random number generator. */

    int npar; /* Number of parameters of the potential entered by the user. */

    double *amp, *err; /* Arrays of amplitudes and Monte Carlo errors for the
                       numbers of time steps 2^0, ..., 2^s. */

    double *q; /* Array that will hold the generated paths. */

    int i; /* Loop variable used during the initialization of *norm. */

    double tcpu; /* Overall time of execution. */

    struct timeval tv; /* Structures defined in sys/time.h, used for the calculation */
    struct timezone tz; /* of the execution time. */

    if(argc < 7) /* Prints the usage if the number of */
    {
        /* command line arguments is < 7. */
        fprintf(stderr, "Usage: %s T a b s Nmc seed par[0] ...\n", argv[0]);
    }
}

```

```

    fprintf(stderr, "This simulation calculates the probability amplitude\n");
    fprintf(stderr, "in imaginary time for the transition from the\n");
    fprintf(stderr, "initial state  $q(t=0)=a$  to the final state  $q(t=T)=b$ .\n");
    fprintf(stderr, "The number of time steps  $N$  will be  $2^0, \dots, 2^s$ .\n");
    fprintf(stderr, "Nmc is the number of MC samples\n");
    fprintf(stderr, "seed is used by the SPRNG (random number generator).\n");
    fprintf(stderr, "par[0], ... are additional parameters defining the potential\n");
    fprintf(stderr, "(initialize as many as needed and use them in the same order\n");
    fprintf(stderr, "in the user supplied function V0 in file p.c)\n");
    exit(EXIT_FAILURE);
}

T = atof(argv[1]); /* Initialization of variables entered on the command line. */
a = atof(argv[2]);
b = atof(argv[3]);
s = atol(argv[4]);
Nmc = atof(argv[5]);

seed = atol(argv[6]);

par = dvector(0, argc - 7); /* Allocation of memory for the parameters
                             of the potential. */

for(npar = 0; npar < argc - 7; npar ++)
    par[npar] = atof(argv[7 + npar]); /* Initialization of *par. */

dpi = 8. * atan(1.); /* Initialization of  $dpi = 2 \pi = 8 * atan(1)$ . */

amp = dvector(0, s); /* Allocation of memory for amplitudes. */

err = dvector(0, s); /* Allocation of memory for errors. */

two = ivector(0, s); /* Allocation of memory for array with powers of 2. */

norm = dvector(0, s); /* Allocation of memory for norms of discretized path integrals
                       with the number of time steps  $2^0, \dots, 2^s$ , used in func(). */

two[0] = 1; /* Initialization of array with powers of 2. */

for(n = 1; n <= s; n ++)
{
    two[n] = 2 * two[n - 1];
}

distrexp = dvector(0, two[s]); /* Allocation of memory for exponents of the Gaussian
                               probability distribution functions, used in func(). */

q = dvector(0, two[s]); /* Allocation of memory for paths. */

dsigma2 = dvector(0, s); /* Allocation of memory for array of  $2 \sigma^2$  values.
                          Sigmas are standard deviations of Gaussians used as
                          probability density functions. */

dsigma2inv = dvector(0, s); /* Allocation of memory for array of
                              $1 / (2 \sigma^2)$  values. */

for(n = 0; n <= s; n ++) /* Initialization of arrays *amp and *err to zeros. */
{

```

```

    amp[n] = 0;
    err[n] = 0;
}

for(n = 0; n <= s; n++) /* Initialization of array of 2 sigma^2 and inverse */
{
    /* values, where sigma^2 = eps = T / 2^n. */
    dsigma2[n] = T / two[n];
    dsigma2inv[n] = 1. / dsigma2[n];
}

for(n = 0; n <= s; n++) /* Initialization of array of the logarithms of norms. */
{
    /* Norm is a product of (2 pi T / 2^n)^(- 2^n / 2)
       (normalization of the path integral in the discretization
       with 2^n time steps) and normalization of Gaussians, i.e.
       the square root of the appropriate factor 2 pi sigma^2
       for each of path nodes. */
    norm[n] = - 0.5 * log(dpi) - 0.5 * two[n] * log(T / two[n]);

    for(i = 1; i <= n; i++) norm[n] += 0.5 * two[i - 1] * log(0.5 * dsigma2[i]);
}

q[0] = a; /* Boundary conditions. */
q[two[s]] = b;

distrexp[0] = 0; /* q[0] not generated, so distrexp[0] = 0 is introduced
                  for simplicity in distr(). */
streamnum = 0; /* Initialization of the SPRNG random number generator. */
nstreams = 1;
stream = init_sprng(SPRNG_CMRG, streamnum, nstreams, seed, SPRNG_DEFAULT);

/* Printing the header of the output. */
fprintf(stdout, "N amplitude error time[s]\n");
fflush(stdout);

gettimeofday(&tv, &tz); /* The initial time. Saving it here, we will avoid taking */
tcpu = tv.tv_sec + tv.tv_usec * 1e-6; /* into account the initialization time. */

mc(Nmc, q, amp, err, s); /* Calling the function that will carry out the Monte Carlo
                          calculation. */
gettimeofday(&tv, &tz); /* Calculates the time spent in mc(), as the difference of */
tcpu = tv.tv_sec + tv.tv_usec * 1e-6 - tcpu; /* the current and initial time. */

/* Processing the MC data. */

amp[0] /= Nmc; /* Calculation of the amplitude for n = 0, i.e. 2^0 = 1 time step. */
err[0] = 0; /* For n = 0, the MC error is zero, since there are no integrations. */

/* Printing the n = 0 output. */
fprintf(stdout, "%d %1.15le %1.15le\n", two[0], amp[0], err[0]);
fflush(stdout);

/* Calculation and printing of the amplitudes and errors for n > 0. */
for(n = 1; n <= s; n++)
{
    amp[n] /= Nmc;
    err[n] = (err[n] / Nmc - amp[n] * amp[n]) / (Nmc - 1);

    if(err[n] > 0) err[n] = sqrt(err[n]); /* Avoiding roundoff error. */
}

```

```

    else err[n] = 0;

    fprintf(stdout, "%d %1.15le %1.15le\n", two[n], amp[n], err[n]);
    fflush(stdout);
}

/* Printing tcpu and Nmc. */
fprintf(stdout, "Overall execution time: %le seconds.\n", tcpu);
fprintf(stdout, "Number of Monte Carlo samples: %le.\n", Nmc);
fflush(stdout);

/* Deallocation of memory. */
free_sprng(stream);
free_dvector(dsigma2inv, 0, s);
free_dvector(dsigma2, 0, s);
free_dvector(q, 0, two[s]);
free_dvector(distrexp, 0, two[s]);
free_dvector(norm, 0, s);
free_ivector(two, 0, s);
free_dvector(err, 0, s);
free_dvector(amp, 0, s);
free_dvector(par, 0, argc - 7);

exit(EXIT_SUCCESS);
}

/* The function mc() does the main Monte Carlo loop. In the loop it calls the
function distr() to generate the path, and enters the loop over the number
of time steps. In this loop it calls the function func() to calculate
f / p (for a given n), the quantity we are averaging to obtain the integral
of the function f. The array *amp accumulates f / p values for each n, while the
array *err accumulates (f / p)^2 values, needed in order to calculate the error.
*/

void mc(double Nmc, double *q, double *amp, double *err, int s)
{
    double i; /* Loop variable for MC samples. It is of the double type to allow for
               large Nmc values. */
    int n; /* Loop variable for the number of time steps. */
    double foverp; /* f / p value, returned by the func(). */

    for(i = 0; i < Nmc; i++) /* Loop over the MC samples. */
    {
        distr(q, s); /* Generating the path, with 2^s time steps. */

        for(n = 0; n <= s; n++) /* Loop over the number of time steps, 2^0, ..., 2^s. */
        {
            foverp = func(q, T, s, n); /* Calculates f / p for a given n. */
            amp[n] += foverp; /* Accumulates f / p for a given n. */
            err[n] += foverp * foverp; /* Accumulates (f / p)^2 for a given n. */
        }
    }

    return;
}

```

```

/* Function distr() generates the paths as arrays (q[0], ..., q[2^s]) using
the bisection algorithm.
*/

void distr(double *q, int s)
{
    int n; /* Loop variable for bisection level. */
    int i; /* Loop variable for path nodes to be generated at bisection level n. */
    double temp; /* Temporary variable. */

    for(n = 1; n <= s; n++) /* Loop over bisection level. */
    {
        for(i = 0; i < two[n - 1]; i++) /* Loop over path nodes to be generated at */
        {
            /* bisection level n. */

            /* Using the Box-Mueller method to generate the random number temp from the
            Gaussian centered at zero, with  $2 \text{ sigma}^2 = \text{dsigma2}[n]$ . */
            temp = sqrt( - dsigma2[n] * log(sprng(stream))) * cos(dpi * sprng(stream));

            /* At bisection level n, the path node is centered at the mid-point of the
            nearest path nodes generated at bisection level n - 1. */
            q[(1 + 2 * i) * two[s - n]] = temp + 0.5 * (q[i * two[s - n + 1]] +
                q[(1 + i) * two[s - n + 1]]);

            /* The exponent of the Gaussian probability density function. It will be
            subtracted from the action in func(), which should return f / p.
            The normalization of the Gaussian is taken care of in *norm. */
            distrexp[(1 + 2 * i) * two[s - n]] = temp * temp * dsigma2inv[n];
        }
    }

    return;
}

```

U nastavku je dat fajl main.h koji sadrži zaglavlja i deklaracije relevantne za funkcije u fajlu main.c.

```

/* NO USER CONFIGURABLE PARAMETERS HERE! */

/* This is the header for the main.c file.*/

/* Necessary headers that should be included. */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <sys/time.h>
#include <sprng.h>

/* Declarations of Numerical Recipes' functions used. */
int *ivector(long, long);
double *dvector(long, long);
double **dmatrix(long, long, long, long);
void free_ivector(int *, long, long);
void free_dvector(double *, long, long);
void free_dmatrix(double **, long, long, long, long);
void nrerror(char *);

```



```

/* Declarations of functions used in main.c. */
double func(double *, double, int, int); /* Calculates the function that is averaged. */
void distr(double *, int); /* Generates the paths. */
void mc(double, double *, double *, double *, int); /* Implements the Monte Carlo. */

/* Variables needed for using the SPRNG random number generator. */
int streamnum, nstreams, *stream;

/* Time of propagation, defined in main(). */
double T;

/* Parameters of the potential, defined in main(), used in V0(). */
double *par;

/* Array with powers of 2 (two[n] = 2^n), defined in main(), used in func(). */
int *two;

/* Array of path integral norms, defined in main(), used in func(). */
double *norm;

/* Array of the exponents of Gaussian probability distribution functions,
   defined in distr(), used in func(). */
double *distrexp;

/* Array of 2 sigma^2 and 1 / (2 sigma^2) values, where sigma^2 = eps = T / 2^n. */
double *dsigma2, *dsigma2inv;

/* dpi = 2 pi */
double dpi;

```

U fajlu `p.c` su definisane funkcije `V0`, `func()` i `Wp()`. Korisnik treba da odabere željeni nivo konvergencije p (ovde je naveden programski kod za $p \leq 9$). To se ostvaruje pomoću definisanja odgovarajuće pretprocesorske promenljive (na primer, za $p = 9$ treba definisati pretprocesorku promenljivu `p9`, kao u kodu navedenom ispod), što automatski u kompajliranje uključuje odgovarajuće funkcije `Wp()`. Korisnik takođe treba da obezbedi da funkcija `V0()` inicijalizuje vrednost potencijala V i njegovih izvoda do traženog nivoa $(2p - 2)$ za zadatu vrednost argumenta. Vrednost potencijala i njegovih izvoda se smešta redom u promenljive `V00`, `V01` itd. U nastavku je dat primer za anharmonijski oscilator sa kvartičnom interakcijom. Svi parametri teorije (konstante interakcije) uneti na komandnoj liniji nakon broja za inicijalizaciju generatora slučajnih brojeva se redom prenose u ovu funkciju u nizu `par` i mogu se koristiti kao `par[0]`, `par[1]` itd. Funkcija `func()` vraća vrednost podintegralne veličine iz jednačine (C.4), odnosno vrednost $\exp(-S_N)$ podeljenu sa vrednošću korišćene Gausove funkcije raspodele. Sadržaj fajla `p.c` je dat ispod.

```
#include <p.h>
```

```
/* USER CONFIGURABLE SECTION:
```

- 1) Defining the level parameter p ($0 < p < 10$).
- 2) Supplying the C function for the evaluation of the potential V and its nonvanishing derivatives up to the order $2p - 2$ (without the derivative of the order $2p - 3$).

```
*/
```

```

/* 1) Defining the level parameter p (0 < p < 10)

    The level parameter p corresponds to the function Wp()
    (effective potential) which will be compiled. You need to adjust
    the following preprocessor variable. The value below is for p = 9.
*/

#define p9

/* 2) Supplying the C function for the evaluation of the potential V
    and its nonvanishing derivatives up to the order 2 p - 2 (without
    the derivative of the order 2 p - 3).

    Function V0(x) provides the value of the potential (variable V00),
    and all its nonvanishing derivatives up to the order 2 p - 2,
    (without the derivative of order 2 p - 3, since it is not present),
    variables V01, V02, ..., V16, at the point x. The default
    value for all these variables is zero, i.e. you need to
    define only nonzero derivatives.

    Parameters of the potential are par[0] ..., as entered by
    you on the command line.  $\phi^4$  example is given below for p = 9.
*/

/* Example of the user supplied function V0() for the  $\phi^4$  theory. */
void V0(double x)
{
    double x2, x4;

    x2 = x * x;
    x4 = x2 * x2;
    V00 = par[0] * x4 / 24. + 0.5 * x2;
    V01 = par[0] * x2 * x / 6. + x;
    V02 = par[0] * x2 / 2. + 1.;
    V03 = par[0] * x;
    V04 = par[0];

    return;
}

/* END OF THE USER CONFIGURABLE SECTION! */

/* Function func(q[]) returns exp(- action + norm), where the variable action is
the action for the given path (q[0], q[step], ..., q[N]) plus the exponent of
the Gaussian probability density function (*distrexp), and norm is the normalization
(*norm) of the path integral (which also includes the normalization of Gaussians).
Array *norm is defined in main(), array *distrexp in distr().
The effective potential Wp() for every pair of points (q[i], q[i + step])
is evaluated at the mid-point qbar.
*/

double func(double *q, double T, int s, int n)
{
    void V0(double); /* The user supplied function that returns the potential V
and its derivatives. */
    double Wp(void); /* The function that returns the effective potential. */

```

```

int i; /* Loop variable for the loop over the time steps. */

action = 0; /* Initialization of the action. */
Nmax = two[s]; /* The maximal number of time steps. */
Nc = two[n]; /* The current number of time steps. */
step = two[s - n]; /* Index distance of path nodes at current bisection level. */
eps = T / Nc; /* Current time step and related variables. */
epsinv = 1. / eps;
eps2 = eps * eps;
eps3 = eps * eps2;
eps4 = eps * eps3;
eps5 = eps * eps4;
eps6 = eps * eps5;
eps7 = eps * eps6;
eps8 = eps * eps7;

for(i = 0; i < Nmax; i += step) /* Loop over path nodes at bisection level n. */
{
    qbar = (q[i + step] + q[i]) * 0.5; /* Mid-point for nearest nodes. */
    delta = q[i + step] - q[i]; /* Distance between nearest nodes. */
    delta2 = delta * delta; /* Square of delta. */
    V0(qbar); /* Initialization of the potential and its derivatives at qbar. */
    /* Accumulation of the action minus the exponent of the Gaussian. */
    action += 0.5 * delta2 * epsinv + eps * Wp() - distrexp[i];
}

return exp(- action + norm[n]); /* norm[n] includes the path integral norm for a
                                given number of time steps 2^n and normalization of
                                Gaussians used as probability density functions. */
}

/* For a chosen p, the function Wp() returns the value of the effective potential.
   This function uses the values of the potential and all its nonvanishing
   derivatives up to order 2p-2, defined in V0(), supplied by the user.

   V00 is the value of the potential, and Vnm (nm = 01, 02, ..., 16) are the
   derivatives of the potential. Additional variables Vnmk = (Vnm)^k and
   deltan = delta^n are introduced for optimization purposes.
*/

#ifdef p1 /* Uses: V00. */
double Wp(void)
{
    return V00;
}
#endif

#ifdef p2 /* Uses: V00, V02. */
double Wp(void)
{
    g0eps1 = V02 / 12.;
    g1eps0 = V02 / 24.;

    return V00 + eps * g0eps1 + delta2 * g1eps0;
}
#endif

```

```

#ifdef p3 /* Uses: V00, V01, V02, V04. */
double Wp(void)
{
    g0eps1 = V02 / 12.;

    g0eps2 = - V01 * V01 / 24. + V04 / 240.;

    g1eps0 = V02 / 24.;

    g1eps1 = V04 / 480.;

    g2eps0 = V04 / 1920.;

    return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1) +
           delta2 * delta2 * g2eps0;
}
#endif

```

```

#ifdef p4 /* Uses: V00, V01, V02, V03, V04, V06. */
double Wp(void)
{
    V022 = V02 * V02;
    delta4 = delta2 * delta2;

    g0eps1 = V02 / 12.;

    g0eps2 = - V01 * V01 / 24. + V04 / 240.;

    g0eps3 = - V022 / 360. - V01 * V03 / 120. + V06 / 6720.;

    g1eps0 = V02 / 24.;

    g1eps1 = V04 / 480.;

    g1eps2 = - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.;

    g2eps0 = V04 / 1920.;

    g2eps1 = V06 / 53760.;

    g3eps0 = V06 / 322560.;

    return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 +
           delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1 + eps2 * g1eps2) +
           delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1) +
           delta2 * delta4 * g3eps0;
}
#endif

```

```

#ifdef p5 /* Uses: V00, V01, V02, V03, V04, V05, V06, V08. */
double Wp(void)
{
    V012 = V01 * V01;
    V022 = V02 * V02;
    V032 = V03 * V03;
    delta4 = delta2 * delta2;
    delta6 = delta2 * delta4;

```

```

g0eps1 = V02 / 12.;

g0eps2 = - V012 / 24. + V04 / 240.;

g0eps3 = - V022 / 360. - V01 * V03 / 120. + V06 / 6720.;

g0eps4 = V012 * V02 / 240. - 23 * V032 / 40320. - V02 * V04 / 1680. -
        V01 * V05 / 2240. + V08 / 241920.;

g1eps0 = V02 / 24.;

g1eps1 = V04 / 480.;

g1eps2 = - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.;

g1eps3 = - V032 / 4032. - V02 * V04 / 5040. - V01 * V05 / 6720. +
        V08 / 483840.;

g2eps0 = V04 / 1920.;

g2eps1 = V06 / 53760.;

g2eps2 = - V032 / 32256. - V02 * V04 / 40320. - V01 * V05 / 53760. +
        V08 / 1.93536e6;

g3eps0 = V06 / 322560.;

g3eps1 = V08 / 1.161216e7;

g4eps0 = V08 / 9.289728e7;

return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 + eps4 * g0eps4 +
        delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1 + eps2 * g1eps2 + eps3 * g1eps3) +
        delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1 + eps2 * g2eps2) +
        delta6 * (g3eps0 + eps * g3eps1) +
        delta2 * delta6 * g4eps0;
}
#endif

#ifdef p6 /* Uses: V00, V01, V02, V03, V04, V05, V06, V07, V08, V10. */
double Wp(void)
{
    V012 = V01 * V01;
    V022 = V02 * V02;
    V032 = V03 * V03;
    V042 = V04 * V04;
    delta4 = delta2 * delta2;
    delta6 = delta2 * delta4;
    delta8 = delta4 * delta4;

    g0eps1 = V02 / 12.;

    g0eps2 = - V012 / 24. + V04 / 240.;

    g0eps3 = - V022 / 360. - V01 * V03 / 120. + V06 / 6720.;

    g0eps4 = V012 * V02 / 240. - 23 * V032 / 40320. - V02 * V04 / 1680. -

```

```

    V01 * V05 / 2240. + V08 / 241920.;

g0eps5 = V022 * V02 / 5670. + 29 * V01 * V02 * V03 / 20160. + V012 * V04 / 2240. -
    47 * V042 / 1.2096e6 - 19 * V03 * V05 / 241920. - V02 * V06 / 30240. -
    V01 * V07 / 60480. + V10 / 1.064448e7;

g1eps0 = V02 / 24.;

g1eps1 = V04 / 480.;

g1eps2 = - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.;

g1eps3 = - V032 / 4032. - V02 * V04 / 5040. - V01 * V05 / 6720. + V08 / 483840.;

g1eps4 = V022 * V02 / 60480. + V01 * V02 * V03 / 3360. + V012 * V04 / 13440. -
    13 * V042 / 806400. - V03 * V05 / 26880. - V02 * V06 / 80640. -
    V01 * V07 / 161280. + V10 / 2.128896e7;

g2eps0 = V04 / 1920.;

g2eps1 = V06 / 53760.;

g2eps2 = - V032 / 32256. - V02 * V04 / 40320. - V01 * V05 / 53760. + V08 / 1.93536e6;

g2eps3 = - V042 / 345600. - V03 * V05 / 138240. - V02 * V06 / 483840. -
    V01 * V07 / 967680. + V10 / 8.515584e7;

g3eps0 = V06 / 322560.;

g3eps1 = V08 / 1.161216e7;

g3eps2 = - V042 / 4.1472e6 - V03 * V05 / 1.65888e6 - V02 * V06 / 5.80608e6 -
    V01 * V07 / 1.161216e7 + V10 / 5.1093504e8;

g4eps0 = V08 / 9.289728e7;

g4eps1 = V10 / 4.08748032e9;

g5eps0 = V10 / 4.08748032e10;

return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 + eps4 * g0eps4 +
    eps5 * g0eps5 + delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1 + eps2 * g1eps2 +
    eps3 * g1eps3 + eps4 * g1eps4) + delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1 +
    eps2 * g2eps2 + eps3 * g2eps3) + delta6 * (g3eps0 + eps * g3eps1 +
    eps2 * g3eps2) + delta8 * (g4eps0 + eps * g4eps1) + delta2 * delta8 * g5eps0;
}
#endif

#ifdef p7 /* Uses: V00, V01, V02, V03, V04, V05, V06, V07, V08, V09, V10, V12. */
double Wp(void)
{
    V012 = V01 * V01;
    V022 = V02 * V02;
    V032 = V03 * V03;
    V042 = V04 * V04;
    V052 = V05 * V05;
    V023 = V022 * V02;
    delta4 = delta2 * delta2;

```

```

delta6 = delta2 * delta4;
delta8 = delta4 * delta4;

g0eps1 = V02 / 12.;

g0eps2 = - V012 / 24. + V04 / 240.;

g0eps3 = - V022 / 360. - V01 * V03 / 120. + V06 / 6720.;

g0eps4 = V012 * V02 / 240. - 23 * V032 / 40320. - V02 * V04 / 1680. -
V01 * V05 / 2240. + V08 / 241920.;

g0eps5 = V023 / 5670. + 29 * V01 * V02 * V03 / 20160. + V012 * V04 / 2240. -
47 * V042 / 1.2096e6 - 19 * V03 * V05 / 241920. - V02 * V06 / 30240. -
V01 * V07 / 60480. + V10 / 1.064448e7;

g0eps6 = - 17 * V012 * V022 / 40320. - V012 * V01 * V03 / 6720. +
V02 * V032 / 6912. + V022 * V04 / 12600. + 19 * V01 * V03 * V04 / 100800. +
V01 * V02 * V05 / 8960. - 71 * V052 / 2.128896e7 + V012 * V06 / 40320. -
17 * V04 * V06 / 3.3264e6 - 19 * V03 * V07 / 5.32224e6 -
V02 * V08 / 798336. - V01 * V09 / 2.128896e6 + V12 / 5.5351296e8;

g1eps0 = V02 / 24.;

g1eps1 = V04 / 480.;

g1eps2 = - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.;

g1eps3 = - V032 / 4032. - V02 * V04 / 5040. - V01 * V05 / 6720. + V08 / 483840.;

g1eps4 = V023 / 60480. + V01 * V02 * V03 / 3360. + V012 * V04 / 13440. -
13 * V042 / 806400. - V03 * V05 / 26880. - V02 * V06 / 80640. -
V01 * V07 / 161280. + V10 / 2.128896e7;

g1eps5 = 5 * V02 * V032 / 96768. + 11 * V022 * V04 / 604800. +
7 * V01 * V03 * V04 / 115200. + V01 * V02 * V05 / 32256. - V052 / 608256. +
V012 * V06 / 161280. - 61 * V04 * V06 / 2.66112e7 -
37 * V03 * V07 / 2.128896e7 - V02 * V08 / 1.99584e6 -
V01 * V09 / 5.32224e6 + V12 / 1.10702592e9;

g2eps0 = V04 / 1920.;

g2eps1 = V06 / 53760.;

g2eps2 = - V032 / 32256. - V02 * V04 / 40320. - V01 * V05 / 53760. + V08 / 1.93536e6;

g2eps3 = - V042 / 345600. - V03 * V05 / 138240. - V02 * V06 / 483840. -
V01 * V07 / 967680. + V10 / 8.515584e7;

g2eps4 = V02 * V032 / 193536. + V022 * V04 / 806400. + V01 * V03 * V04 / 172800. +
V01 * V02 * V05 / 322560. - 7 * V052 / 1.824768e7 + V012 * V06 / 1.93536e6 -
151 * V04 * V06 / 3.193344e8 - 97 * V03 * V07 / 2.5546752e8 -
V02 * V08 / 1.064448e7 - V01 * V09 / 2.838528e7 + V12 / 4.42810368e9;

g3eps0 = V06 / 322560.;

g3eps1 = V08 / 1.161216e7;

```

```

g3eps2 = - V042 / 4.1472e6 - V03 * V05 / 1.65888e6 - V02 * V06 / 5.80608e6 -
          V01 * V07 / 1.161216e7 + V10 / 5.1093504e8;

g3eps3 = - V052 / 2.02752e7 - V04 * V06 / 1.77408e7 - V03 * V07 / 2.128896e7 -
          V02 * V08 / 9.580032e7 - V01 * V09 / 2.5546752e8 + V12 / 2.656862208e10;

g4eps0 = V08 / 9.289728e7;

g4eps1 = V10 / 4.08748032e9;

g4eps2 = - V052 / 3.244032e8 - V04 * V06 / 2.838528e8 - V03 * V07 / 3.4062336e8 -
          V02 * V08 / 1.53280512e9 - V01 * V09 / 4.08748032e9 + V12 / 2.1254897664e11;

g5eps0 = V10 / 4.08748032e10;

g5eps1 = V12 / 2.1254897664e12;

g6eps0 = V12 / 2.55058771968e13;

return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 + eps4 * g0eps4 +
        eps5 * g0eps5 + eps6 * g0eps6 + delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1 +
        eps2 * g1eps2 + eps3 * g1eps3 + eps4 * g1eps4 + eps5 * g1eps5) +
        delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1 + eps2 * g2eps2 + eps3 * g2eps3 +
        eps4 * g2eps4) + delta6 * (g3eps0 + eps * g3eps1 + eps2 * g3eps2 +
        eps3 * g3eps3) + delta8 * (g4eps0 + eps * g4eps1 + eps2 * g4eps2) +
        delta2 * delta8 * (g5eps0 + eps * g5eps1) + delta4 * delta8 * g6eps0;
}
#endif

#ifdef p8 /* Uses: V00, V01, V02, V03, V04, V05, V06, V07,
          V08, V09, V10, V11, V12, V14. */
double Wp(void)
{
  V012 = V01 * V01;
  V022 = V02 * V02;
  V032 = V03 * V03;
  V042 = V04 * V04;
  V052 = V05 * V05;
  V062 = V06 * V06;
  V013 = V012 * V01;
  V023 = V022 * V02;
  V024 = V022 * V02;
  delta4 = delta2 * delta2;
  delta6 = delta2 * delta4;
  delta8 = delta4 * delta4;

  g0eps1 = V02 / 12.;

  g0eps2 = - V012 / 24. + V04 / 240.;

  g0eps3 = - V022 / 360. - V01 * V03 / 120. + V06 / 6720.;

  g0eps4 = V012 * V02 / 240. - 23 * V032 / 40320. - V02 * V04 / 1680. -
          V01 * V05 / 2240. + V08 / 241920.;

  g0eps5 = V023 / 5670. + 29 * V01 * V02 * V03 / 20160. + V012 * V04 / 2240. -
          47 * V042 / 1.2096e6 - 19 * V03 * V05 / 241920. - V02 * V06 / 30240. -
          V01 * V07 / 60480. + V10 / 1.0644448e7;
}

```


$$\begin{aligned}
g0eps6 = & - 17 * V012 * V022 / 40320. - V013 * V03 / 6720. + V02 * V032 / 6912. + \\
& V022 * V04 / 12600. + 19 * V01 * V03 * V04 / 100800. + \\
& V01 * V02 * V05 / 8960. - 71 * V052 / 2.128896e7 + V012 * V06 / 40320. - \\
& 17 * V04 * V06 / 3.3264e6 - 19 * V03 * V07 / 5.32224e6 - \\
& V02 * V08 / 798336. - V01 * V09 / 2.128896e6 + V12 / 5.5351296e8; \\
\\
g0eps7 = & - V024 / 75600. - 41 * V01 * V022 * V03 / 201600. - \\
& 47 * V012 * V032 / 604800. - V012 * V02 * V04 / 8064. + \\
& 359 * V032 * V04 / 1.596672e7 + 179 * V02 * V042 / 1.33056e7 - \\
& V013 * V05 / 60480. + 211 * V02 * V03 * V05 / 7.98336e6 + \\
& 277 * V01 * V04 * V05 / 1.596672e7 + 19 * V022 * V06 / 3.3264e6 + \\
& 331 * V01 * V03 * V06 / 2.66112e7 - 2843 * V062 / 1.45297152e10 + \\
& 29 * V01 * V02 * V07 / 5.32224e6 - 1501 * V05 * V07 / 4.1513472e9 + \\
& V012 * V08 / 1.064448e6 - 31 * V04 * V08 / 1.3837824e8 - \\
& 5 * V03 * V09 / 4.1513472e7 - V02 * V10 / 2.7675648e7 - \\
& V01 * V11 / 9.225216e7 + V14 / 3.32107776e10; \\
\\
g1eps0 = & V02 / 24.; \\
\\
g1eps1 = & V04 / 480.; \\
\\
g1eps2 = & - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.; \\
\\
g1eps3 = & - V032 / 4032. - V02 * V04 / 5040. - V01 * V05 / 6720. + V08 / 483840.; \\
\\
g1eps4 = & V023 / 60480. + V01 * V02 * V03 / 3360. + V012 * V04 / 13440. - \\
& 13 * V042 / 806400. - V03 * V05 / 26880. - V02 * V06 / 80640. - \\
& V01 * V07 / 161280. + V10 / 2.128896e7; \\
\\
g1eps5 = & 5 * V02 * V032 / 96768. + 11 * V022 * V04 / 604800. + \\
& 7 * V01 * V03 * V04 / 115200. + V01 * V02 * V05 / 32256. - V052 / 608256. + \\
& V012 * V06 / 161280. - 61 * V04 * V06 / 2.66112e7 - \\
& 37 * V03 * V07 / 2.128896e7 - V02 * V08 / 1.99584e6 - \\
& V01 * V09 / 5.32224e6 + V12 / 1.10702592e9; \\
\\
g1eps6 = & - V024 / 2.4192e6 - 3 * V01 * V022 * V03 / 89600. - \\
& 17 * V012 * V032 / 1.2096e6 - V012 * V02 * V04 / 53760. + \\
& 631 * V032 * V04 / 6.386688e7 + 239 * V02 * V042 / 5.32224e7 - \\
& V013 * V05 / 483840. + 667 * V02 * V03 * V05 / 6.386688e7 + \\
& 2047 * V01 * V04 * V05 / 3.193344e8 + 89 * V022 * V06 / 5.32224e7 + \\
& 247 * V01 * V03 * V06 / 5.32224e7 - 10781 * V062 / 1.162377216e11 + \\
& 37 * V01 * V02 * V07 / 2.128896e7 - 2987 * V05 * V07 / 1.66053888e10 + \\
& V012 * V08 / 3.54816e6 - 433 * V04 * V08 / 4.1513472e9 - \\
& 197 * V03 * V09 / 3.32107776e9 - 5 * V02 * V10 / 3.32107776e8 - \\
& V01 * V11 / 2.21405184e8 + V14 / 6.64215552e10; \\
\\
g2eps0 = & V04 / 1920.; \\
\\
g2eps1 = & V06 / 53760.; \\
\\
g2eps2 = & - V032 / 32256. - V02 * V04 / 40320. - V01 * V05 / 53760. + V08 / 1.93536e6; \\
\\
g2eps3 = & - V042 / 345600. - V03 * V05 / 138240. - V02 * V06 / 483840. - \\
& V01 * V07 / 967680. + V10 / 8.515584e7; \\
\\
g2eps4 = & V02 * V032 / 193536. + V022 * V04 / 806400. + V01 * V03 * V04 / 172800. + \\
& V01 * V02 * V05 / 322560. - 7 * V052 / 1.824768e7 + V012 * V06 / 1.93536e6 -
\end{aligned}$$

```

151 * V04 * V06 / 3.193344e8 - 97 * V03 * V07 / 2.5546752e8 -
V02 * V08 / 1.064448e7 - V01 * V09 / 2.838528e7 + V12 / 4.42810368e9;

g2eps5 = V032 * V04 / 608256. + 13 * V02 * V042 / 2.28096e7 +
61 * V02 * V03 * V05 / 3.649536e7 + V01 * V04 * V05 / 1.01376e6 +
V022 * V06 / 4.9896e6 + 97 * V01 * V03 * V06 / 1.419264e8 -
181 * V062 / 8.6102016e9 + 61 * V01 * V02 * V07 / 2.5546752e8 -
323 * V05 * V07 / 7.3801728e9 + V012 * V08 / 2.838528e7 -
109 * V04 * V08 / 4.7443968e9 - 181 * V03 * V09 / 1.328431104e10 -
V02 * V10 / 3.32107776e8 - V01 * V11 / 1.10702592e9 + V14 / 2.656862208e11;

g3eps0 = V06 / 322560.;

g3eps1 = V08 / 1.161216e7;

g3eps2 = - V042 / 4.1472e6 - V03 * V05 / 1.65888e6 - V02 * V06 / 5.80608e6 -
V01 * V07 / 1.161216e7 + V10 / 5.1093504e8;

g3eps3 = - V052 / 2.02752e7 - V04 * V06 / 1.77408e7 - V03 * V07 / 2.128896e7 -
V02 * V08 / 9.580032e7 - V01 * V09 / 2.5546752e8 + V12 / 2.656862208e10;

g3eps4 = V032 * V04 / 9.46176e6 + 19 * V02 * V042 / 6.386688e8 +
V02 * V03 * V05 / 9.12384e6 + V01 * V04 * V05 / 1.57696e7 +
13 * V022 * V06 / 1.2773376e9 + V01 * V03 * V06 / 2.36544e7 -
19 * V062 / 6.4576512e9 + V01 * V02 * V07 / 6.386688e7 -
97 * V05 * V07 / 1.47603456e10 + V012 * V08 / 5.1093504e8 -
23 * V04 * V08 / 7.3801728e9 - 19 * V03 * V09 / 9.96323328e9 -
V02 * V10 / 2.656862208e9 - V01 * V11 / 8.85620736e9 + V14 / 1.5941173248e12;

g4eps0 = V08 / 9.289728e7;

g4eps1 = V10 / 4.08748032e9;

g4eps2 = - V052 / 3.244032e8 - V04 * V06 / 2.838528e8 - V03 * V07 / 3.4062336e8 -
V02 * V08 / 1.53280512e9 - V01 * V09 / 4.08748032e9 + V12 / 2.1254897664e11;

g4eps3 = -V062 / 3.75717888e9 - V05 * V07 / 1.61021952e9 - V04 * V08 / 3.62299392e9 -
V03 * V09 / 5.796790272e9 - V02 * V10 / 3.1882346496e10 -
V01 * V11 / 1.0627448832e11 + V14 / 1.27529385984e13;

g5eps0 = V10 / 4.08748032e10;

g5eps1 = V12 / 2.1254897664e12;

g5eps2 = - V062 / 7.51435776e10 - V05 * V07 / 3.22043904e10 -
V04 * V08 / 7.24598784e10 - V03 * V09 / 1.1593580544e11 -
V02 * V10 / 6.3764692992e11 - V01 * V11 / 2.1254897664e12 +
V14 / 1.27529385984e14;

g6eps0 = V12 / 2.55058771968e13;

g6eps1 = V14 / 1.530352631808e15;

g7eps0 = V14 / 2.1424936845312e16;

return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 + eps4 * g0eps4 +
eps5 * g0eps5 + eps6 * g0eps6 + eps7 * g0eps7 + delta2 * (g1eps0 +
eps * g1eps1 + eps2 * g1eps2 + eps3 * g1eps3 + eps4 * g1eps4 +

```

```

    eps5 * g1eps5 + eps6 * g1eps6) + delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1 +
    eps2 * g2eps2 + eps3 * g2eps3 + eps4 * g2eps4 + eps5 * g2eps5) +
    delta6 * (g3eps0 + eps * g3eps1 + eps2 * g3eps2 + eps3 * g3eps3 +
    eps4 * g3eps4) + delta8 * (g4eps0 + eps * g4eps1 + eps2 * g4eps2 +
    eps3 * g4eps3) + delta2 * delta8 * (g5eps0 + eps * g5eps1 + eps2 * g5eps2) +
    delta4 * delta8 * (g6eps0 + eps * g6eps1) +
    delta6 * delta8 * g7eps0;
}
#endif

#ifdef p9 /* Uses: V00, V01, V02, V03, V04, V05, V06, V07,
          V08, V09, V10, V11, V12, V13, V14, V16. */
double Wp(void)
{
    V012 = V01 * V01;
    V022 = V02 * V02;
    V032 = V03 * V03;
    V042 = V04 * V04;
    V052 = V05 * V05;
    V062 = V06 * V06;
    V072 = V07 * V07;
    V013 = V012 * V01;
    V023 = V022 * V02;
    V033 = V032 * V03;
    V043 = V042 * V04;
    V024 = V022 * V022;
    delta4 = delta2 * delta2;
    delta6 = delta2 * delta4;
    delta8 = delta4 * delta4;

    g0eps1 = V02 / 12.;

    g0eps2 = - V012 / 24. + V04 / 240.;

    g0eps3 = - V022 / 360. - V01 * V03 / 120. + V06 / 6720.;

    g0eps4 = V012 * V02 / 240. - 23 * V032 / 40320. - V02 * V04 / 1680. -
            V01 * V05 / 2240. + V08 / 241920.;

    g0eps5 = V023 / 5670. + 29 * V01 * V02 * V03 / 20160. + V012 * V04 / 2240. -
            47 * V042 / 1.2096e6 - 19 * V03 * V05 / 241920. - V02 * V06 / 30240. -
            V01 * V07 / 60480. + V10 / 1.064448e7;

    g0eps6 = - 17 * V012 * V022 / 40320. - V013 * V03 / 6720. + V02 * V032 / 6912. +
            V022 * V04 / 12600. + 19 * V01 * V03 * V04 / 100800. +
            V01 * V02 * V05 / 8960. - 71 * V052 / 2.128896e7 + V012 * V06 / 40320. -
            17 * V04 * V06 / 3.3264e6 - 19 * V03 * V07 / 5.32224e6 -
            V02 * V08 / 798336. - V01 * V09 / 2.128896e6 + V12 / 5.5351296e8;

    g0eps7 = - V024 / 75600. - 41 * V01 * V022 * V03 / 201600. -
            47 * V012 * V032 / 604800. - V012 * V02 * V04 / 8064. +
            359 * V032 * V04 / 1.596672e7 + 179 * V02 * V042 / 1.33056e7 -
            V013 * V05 / 60480. + 211 * V02 * V03 * V05 / 7.98336e6 +
            277 * V01 * V04 * V05 / 1.596672e7 + 19 * V022 * V06 / 3.3264e6 +
            331 * V01 * V03 * V06 / 2.66112e7 - 2843 * V062 / 1.45297152e10 +
            29 * V01 * V02 * V07 / 5.32224e6 - 1501 * V05 * V07 / 4.1513472e9 +
            V012 * V08 / 1.064448e6 - 31 * V04 * V08 / 1.3837824e8 -
            5 * V03 * V09 / 4.1513472e7 - V02 * V10 / 2.7675648e7 -

```

```

V01 * V11 / 9.225216e7 + V14 / 3.32107776e10;

g0eps8 = 31 * V012 * V023 / 725760. + 11 * V013 * V02 * V03 / 241920. -
283 * V022 * V032 / 1.064448e7 - 251 * V01 * V033 / 1.596672e7 +
V012 * V012 * V04 / 241920. - V023 * V04 / 99792. -
1091 * V01 * V02 * V03 * V04 / 1.596672e7 - 829 * V012 * V042 / 7.98336e7 +
109 * V043 / 1.28128e8 - V01 * V022 * V05 / 49280. -
59 * V012 * V03 * V05 / 3.54816e6 + 19807 * V03 * V04 * V05 / 4.1513472e9 +
557 * V02 * V052 / 3.953664e8 - 47 * V012 * V02 * V06 / 5.32224e6 +
20063 * V032 * V06 / 1.162377216e10 + 397 * V02 * V04 * V06 / 1.8162144e8 +
7757 * V01 * V05 * V06 / 5.81188608e9 - V013 * V07 / 1.064448e6 +
311 * V02 * V03 * V07 / 2.0756736e8 + 509 * V01 * V04 * V07 / 5.189184e8 -
757 * V072 / 6.64215552e10 + 83 * V022 * V08 / 3.1135104e8 +
227 * V01 * V03 * V08 / 4.1513472e8 - 571 * V06 * V08 / 2.90594304e10 +
V01 * V02 * V09 / 5.189184e6 - 157 * V05 * V09 / 1.10702592e10 +
V012 * V10 / 3.6900864e7 - 61 * V04 * V10 / 8.3026944e9 -
107 * V03 * V11 / 3.32107776e10 - V02 * V12 / 1.1860992e9 -
V01 * V13 / 4.7443968e9 + V16 / 2.2583328768e12;

g1eps0 = V02 / 24.;

g1eps1 = V04 / 480.;

g1eps2 = - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.;

g1eps3 = - V032 / 4032. - V02 * V04 / 5040. - V01 * V05 / 6720. + V08 / 483840.;

g1eps4 = V023 / 60480. + V01 * V02 * V03 / 3360. + V012 * V04 / 13440. -
13 * V042 / 806400. - V03 * V05 / 26880. - V02 * V06 / 80640. -
V01 * V07 / 161280. + V10 / 2.128896e7;

g1eps5 = 5 * V02 * V032 / 96768. + 11 * V022 * V04 / 604800. +
7 * V01 * V03 * V04 / 115200. + V01 * V02 * V05 / 32256. - V052 / 608256. +
V012 * V06 / 161280. - 61 * V04 * V06 / 2.66112e7 -
37 * V03 * V07 / 2.128896e7 - V02 * V08 / 1.99584e6 -
V01 * V09 / 5.32224e6 + V12 / 1.10702592e9;

g1eps6 = - V024 / 2.4192e6 - 3 * V01 * V022 * V03 / 89600. -
17 * V012 * V032 / 1.2096e6 - V012 * V02 * V04 / 53760. +
631 * V032 * V04 / 6.386688e7 + 239 * V02 * V042 / 5.32224e7 -
V013 * V05 / 483840. + 667 * V02 * V03 * V05 / 6.386688e7 +
2047 * V01 * V04 * V05 / 3.193344e8 + 89 * V022 * V06 / 5.32224e7 +
247 * V01 * V03 * V06 / 5.32224e7 - 10781 * V062 / 1.162377216e11 +
37 * V01 * V02 * V07 / 2.128896e7 - 2987 * V05 * V07 / 1.66053888e10 +
V012 * V08 / 3.54816e6 - 433 * V04 * V08 / 4.1513472e9 -
197 * V03 * V09 / 3.32107776e9 - 5 * V02 * V10 / 3.32107776e8 -
V01 * V11 / 2.21405184e8 + V14 / 6.64215552e10;

g1eps7 = - 83 * V022 * V032 / 1.064448e7 - V01 * V033 / 197120. -
23 * V023 * V04 / 1.33056e7 - 503 * V01 * V02 * V03 * V04 / 2.66112e7 -
29 * V012 * V042 / 1.064448e7 + 3671 * V043 / 1.0378368e10 -
83 * V01 * V022 * V05 / 1.77408e7 - 29 * V012 * V03 * V05 / 6.6528e6 +
18331 * V03 * V04 * V05 / 8.3026944e9 + 7 * V02 * V052 / 1.1860992e7 -
V012 * V02 * V06 / 506880. + 29 * V032 * V06 / 3.587584e7 +
4007 * V02 * V04 * V06 / 4.8432384e9 + 437 * V01 * V05 * V06 / 8.072064e8 -
V013 * V07 / 5.32224e6 + 1033 * V02 * V03 * V07 / 1.66053888e9 +
1613 * V01 * V04 * V07 / 4.1513472e9 - V072 / 1.757184e8 +
61 * V022 * V08 / 6.918912e8 + 607 * V01 * V03 * V08 / 2.7675648e9 -

```

$$277 * V06 * V08 / 2.90594304e10 + 37 * V01 * V02 * V09 / 5.5351296e8 - \\ 47 * V05 * V09 / 6.64215552e9 + V012 * V10 / 1.10702592e8 - \\ 29 * V04 * V10 / 8.3026944e9 - 53 * V03 * V11 / 3.32107776e10 - \\ V02 * V12 / 2.7675648e9 - V01 * V13 / 1.10702592e10 + V16 / 4.5166657536e12;$$

$$g2eps0 = V04 / 1920.;$$

$$g2eps1 = V06 / 53760.;$$

$$g2eps2 = - V032 / 32256. - V02 * V04 / 40320. - V01 * V05 / 53760. + V08 / 1.93536e6;$$

$$g2eps3 = - V042 / 345600. - V03 * V05 / 138240. - V02 * V06 / 483840. - \\ V01 * V07 / 967680. + V10 / 8.515584e7;$$

$$g2eps4 = V02 * V032 / 193536. + V022 * V04 / 806400. + V01 * V03 * V04 / 172800. + \\ V01 * V02 * V05 / 322560. - 7 * V052 / 1.824768e7 + V012 * V06 / 1.93536e6 - \\ 151 * V04 * V06 / 3.193344e8 - 97 * V03 * V07 / 2.5546752e8 - \\ V02 * V08 / 1.064448e7 - V01 * V09 / 2.838528e7 + V12 / 4.42810368e9;$$

$$g2eps5 = V032 * V04 / 608256. + 13 * V02 * V042 / 2.28096e7 + \\ 61 * V02 * V03 * V05 / 3.649536e7 + V01 * V04 * V05 / 1.01376e6 + \\ V022 * V06 / 4.9896e6 + 97 * V01 * V03 * V06 / 1.419264e8 - \\ 181 * V062 / 8.6102016e9 + 61 * V01 * V02 * V07 / 2.5546752e8 - \\ 323 * V05 * V07 / 7.3801728e9 + V012 * V08 / 2.838528e7 - \\ 109 * V04 * V08 / 4.7443968e9 - 181 * V03 * V09 / 1.328431104e10 - \\ V02 * V10 / 3.32107776e8 - V01 * V11 / 1.10702592e9 + V14 / 2.656862208e11;$$

$$g2eps6 = - 163 * V022 * V032 / 2.5546752e8 - 19 * V01 * V033 / 4.257792e7 - \\ V023 * V04 / 1.77408e7 - 479 * V01 * V02 * V03 * V04 / 3.193344e8 - \\ 89 * V012 * V042 / 4.257792e8 + 5141 * V043 / 8.3026944e10 - \\ 163 * V01 * V022 * V05 / 4.257792e8 - 149 * V012 * V03 * V05 / 4.257792e8 + \\ 14909 * V03 * V04 * V05 / 3.32107776e10 + 3287 * V02 * V052 / 2.84663808e10 - \\ 37 * V012 * V02 * V06 / 2.5546752e8 + 5009 * V032 * V06 / 3.099672576e10 + \\ 23671 * V02 * V04 * V06 / 1.743565824e11 + \\ 5191 * V01 * V05 * V06 / 5.16612096e10 - V013 * V07 / 8.515584e7 + \\ 1139 * V02 * V03 * V07 / 9.96323328e9 + \\ 2297 * V01 * V04 * V07 / 3.32107776e10 - 5 * V072 / 3.542482944e9 + \\ 31 * V022 * V08 / 2.3721984e9 + 53 * V01 * V03 * V08 / 1.3837824e9 - \\ 349 * V06 * V08 / 1.549836288e11 + 47 * V01 * V02 * V09 / 4.42810368e9 - \\ 29 * V05 * V09 / 1.66053888e10 + V012 * V10 / 7.3801728e8 - \\ 53 * V04 * V10 / 6.64215552e10 - V03 * V11 / 2.656862208e9 - \\ V02 * V12 / 1.328431104e10 - V01 * V13 / 5.313724416e10 + \\ V16 / 1.80666630144e13;$$

$$g3eps0 = V06 / 322560.;$$

$$g3eps1 = V08 / 1.161216e7;$$

$$g3eps2 = - V042 / 4.1472e6 - V03 * V05 / 1.65888e6 - V02 * V06 / 5.80608e6 - \\ V01 * V07 / 1.161216e7 + V10 / 5.1093504e8;$$

$$g3eps3 = - V052 / 2.02752e7 - V04 * V06 / 1.77408e7 - V03 * V07 / 2.128896e7 - \\ V02 * V08 / 9.580032e7 - V01 * V09 / 2.5546752e8 + V12 / 2.656862208e10;$$

$$g3eps4 = V032 * V04 / 9.46176e6 + 19 * V02 * V042 / 6.386688e8 + \\ V02 * V03 * V05 / 9.12384e6 + V01 * V04 * V05 / 1.57696e7 + \\ 13 * V022 * V06 / 1.2773376e9 + V01 * V03 * V06 / 2.36544e7 - \\ 19 * V062 / 6.4576512e9 + V01 * V02 * V07 / 6.386688e7 -$$

$$97 * V05 * V07 / 1.47603456e10 + V012 * V08 / 5.1093504e8 - \\ 23 * V04 * V08 / 7.3801728e9 - 19 * V03 * V09 / 9.96323328e9 - \\ V02 * V10 / 2.656862208e9 - V01 * V11 / 8.85620736e9 + V14 / 1.5941173248e12;$$

$$g3eps5 = V043 / 1.79712e8 + 83 * V03 * V04 * V05 / 1.7252352e9 + \\ 7 * V02 * V052 / 5.750784e8 + 19 * V032 * V06 / 1.127153664e9 + \\ 5 * V02 * V04 * V06 / 4.22682624e8 + 19 * V01 * V05 * V06 / 1.87858944e9 + \\ V02 * V03 * V07 / 8.626176e7 + 83 * V01 * V04 * V07 / 1.20766464e10 - \\ 11 * V072 / 4.83065856e10 + 29 * V022 * V08 / 2.71724544e10 + \\ 131 * V01 * V03 * V08 / 3.62299392e10 - 43 * V06 * V08 / 1.268047872e11 + \\ V01 * V02 * V09 / 1.03514112e9 - V05 * V09 / 3.62299392e9 + \\ V012 * V10 / 8.85620736e9 - 23 * V04 * V10 / 1.992646656e11 - \\ 89 * V03 * V11 / 1.5941173248e12 - V02 * V12 / 9.96323328e10 - \\ V01 * V13 / 3.985293312e11 + V16 / 1.083999780864e14;$$

$$g4eps0 = V08 / 9.289728e7;$$

$$g4eps1 = V10 / 4.08748032e9;$$

$$g4eps2 = - V052 / 3.244032e8 - V04 * V06 / 2.838528e8 - V03 * V07 / 3.4062336e8 - \\ V02 * V08 / 1.53280512e9 - V01 * V09 / 4.08748032e9 + V12 / 2.1254897664e11;$$

$$g4eps3 = -V062 / 3.75717888e9 - V05 * V07 / 1.61021952e9 - V04 * V08 / 3.62299392e9 - \\ V03 * V09 / 5.796790272e9 - V02 * V10 / 3.1882346496e10 - \\ V01 * V11 / 1.0627448832e11 + V14 / 1.27529385984e13;$$

$$g4eps4 = V043 / 4.313088e9 + V03 * V04 * V05 / 4.313088e8 + \\ V02 * V052 / 1.68689664e9 + V032 * V06 / 1.25239296e9 + \\ 227 * V02 * V04 * V06 / 4.649508864e11 + V01 * V05 * V06 / 2.0873216e9 + \\ V02 * V03 * V07 / 1.771241472e9 + V01 * V04 * V07 / 3.0191616e9 - \\ 23 * V072 / 9.017229312e11 + 17 * V022 * V08 / 3.985293312e11 + \\ V01 * V03 * V08 / 6.0383232e9 - V06 * V08 / 2.81788416e10 + \\ V01 * V02 * V09 / 2.1254897664e10 - V05 * V09 / 3.312451584e10 + \\ V012 * V10 / 2.1254897664e11 - 37 * V04 * V10 / 3.1882346496e12 - \\ 73 * V03 * V11 / 1.27529385984e13 - V02 * V12 / 1.0627448832e12 - \\ V01 * V13 / 4.2509795328e12 + V16 / 8.671998246912e14;$$

$$g5eps0 = V10 / 4.08748032e10;$$

$$g5eps1 = V12 / 2.1254897664e12;$$

$$g5eps2 = - V062 / 7.51435776e10 - V05 * V07 / 3.22043904e10 - \\ V04 * V08 / 7.24598784e10 - V03 * V09 / 1.1593580544e11 - \\ V02 * V10 / 6.3764692992e11 - V01 * V11 / 2.1254897664e12 + \\ V14 / 1.27529385984e14;$$

$$g5eps3 = - V072 / 5.20224768e11 - V06 * V08 / 3.90168576e11 - \\ V05 * V09 / 4.45906944e11 - V04 * V10 / 1.226244096e12 - \\ V03 * V11 / 2.452488192e12 - V02 * V12 / 1.5941173248e13 - \\ V01 * V13 / 6.3764692992e13 + V16 / 8.671998246912e15;$$

$$g6eps0 = V12 / 2.55058771968e13;$$

$$g6eps1 = V14 / 1.530352631808e15;$$

$$g6eps2 = - V072 / 1.2485394432e13 - V06 * V08 / 9.364045824e12 - \\ V05 * V09 / 1.0701766656e13 - V04 * V10 / 2.9429858304e13 - \\ V03 * V11 / 5.8859716608e13 - V02 * V12 / 3.82588157952e14 -$$

```

V01 * V13 / 1.530352631808e15 + V16 / 1.04063978962944e17;

g7eps0 = V14 / 2.1424936845312e16;

g7eps1 = V16 / 1.456895705481216e18;

g8eps0 = V16 / 2.3310331287699456e19;

return V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 + eps4 * g0eps4 +
eps5 * g0eps5 + eps6 * g0eps6 + eps7 * g0eps7 + eps8 * g0eps8 +
delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1 + eps2 * g1eps2 + eps3 * g1eps3 +
eps4 * g1eps4 + eps5 * g1eps5 + eps6 * g1eps6 + eps7 * g1eps7) +
delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1 + eps2 * g2eps2 + eps3 * g2eps3 +
eps4 * g2eps4 + eps5 * g2eps5 + eps6 * g2eps6) + delta6 * (g3eps0 +
eps * g3eps1 + eps2 * g3eps2 + eps3 * g3eps3 + eps4 * g3eps4 +
eps5 * g3eps5) + delta8 * (g4eps0 + eps * g4eps1 + eps2 * g4eps2 +
eps3 * g4eps3 + eps4 * g4eps4) + delta2 * delta8 * (g5eps0 + eps * g5eps1 +
eps2 * g5eps2 + eps3 * g5eps3) + delta4 * delta8 * (g6eps0 + eps * g6eps1 +
eps2 * g6eps2) + delta6 * delta8 * (g7eps0 + eps * g7eps1) +
delta8 * delta8 * g8eps0;
}
#endif

```

Fajl p.h sadrži zaglavlja i deklaracije relevantne za funkcije u fajlu p.c.

```

/* NO USER CONFIGURABLE PARAMETERS HERE! */

/* This is the header for file p.c. */

#include <math.h>

/* Parameters of the potential, defined in main(), used in V0(). */
extern double *par;

/* Array with powers of 2 (two[n] = 2^n), defined in main(), used in func(). */
extern int *two;

/* Array of path integral norms, defined in main(), used in func(). */
extern double *norm;

/* Array of the exponents of Gaussian probability distribution functions,
   defined in distr(), used in func(). */
extern double *distrexp;

/* Variables used in the calculation of the effective potential in the function Wp().
   The general form is gmepsk, where m and k are nonnegative numbers, and g0eps0
   is the potential V. For a chosen p, m = 0, ..., p - 1, while
   k = 0, ..., p - m - 1.

   Variable gmepsk represents the coefficient multiplying the [delta^(2m) eps^k]
   term in Wp().
*/
double g0eps1, g0eps2, g0eps3, g0eps4, g0eps5, g0eps6, g0eps7, g0eps8, g1eps0, g1eps1;
double g1eps2, g1eps3, g1eps4, g1eps5, g1eps6, g1eps7, g2eps0, g2eps1, g2eps2, g2eps3;
double g2eps4, g2eps5, g2eps6, g3eps0, g3eps1, g3eps2, g3eps3, g3eps4, g3eps5, g4eps0;
double g4eps1, g4eps2, g4eps3, g4eps4, g5eps0, g5eps1, g5eps2, g5eps3, g6eps0, g6eps1;

```

```

double g6eps2, g7eps0, g7eps1, g8eps0;

/* Variables used for storing the values of the potential V (V00) and its derivatives
   (V01, ..., V16). They are here initialized to zero, and later changed (only the
   nonzero ones!) by the user supplied function V0(). V15 will never be used (it is not
   present even in the p=9 code), but just in case...
*/
double V00 = 0, V01 = 0, V02 = 0, V03 = 0, V04 = 0, V05 = 0, V06 = 0, V07 = 0, V08 = 0;
double V09 = 0, V10 = 0, V11 = 0, V12 = 0, V13 = 0, V14 = 0, V15 = 0, V16 = 0;

/* Variables used in function Wp(), for optimization purposes (powers of the derivatives
   of the potential, powers of delta, and powers of eps = T / N)
*/
double V012, V022, V032, V042, V052, V062, V072, V013, V023, V033, V043, V024;
double delta, delta2, delta4, delta6, delta8;
double eps, epsinv, eps2, eps3, eps4, eps5, eps6, eps7, eps8;

/* Variables used in the function func(). The variable qbar is the mid-point for a pair
   of points from the chosen path, variable action is the action for the given
   trajectory.
*/
double qbar, action;

/* Variables used in function func(). Variable Nmax = 2^s is the maximal number of
   time steps. Variable step is equal to 2^(s - n). In the bisection algorithm with
   Nmax = 2^s, paths are given by the arrays (q[0], ..., q[N]). If the current number
   of time steps is Nc = 2^n, the relevant paths are:
   (q[0], q[step], ..., q[2^n step = Nmax]).
*/
int Nmax, Nc, step;

```

Radi kompletnosti, u nastavku su date funkcije preuzete iz [33] koje se nalaze u fajlu nr.c.

```

/* NO USER CONFIGURABLE PARAMETERS HERE! */

/* This file contains code from the Numerical Recipes used in our simulation. */

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#define NR_END 1
#define FREE_ARG char*

int *ivector(long, long);
double *dvector(long, long);
double **dmatrix(long, long, long, long);
void free_ivector(int *, long, long);
void free_dvector(double *, long, long);
void free_dmatrix(double **, long, long, long, long);
void nrerror(char *);

int *ivector(long nl, long nh)
/* allocate an int vector with subscript range v[nl..nh] */
{
    int *v;

    v = (int *)malloc((size_t) ((nh - nl + 1 + NR_END) * sizeof(int)));

```



```

    if(!v) nrerror("allocation failure in ivector()");
    return v - nl + NR_END;
}

double *dvector(long nl, long nh)
/* allocate a double vector with subscript range v[nl..nh] */
{
    double *v;

    v = (double *)malloc((size_t) ((nh - nl + 1 + NR_END) * sizeof(double)));
    if(!v) nrerror("allocation failure in ldvector()");
    return v - nl + NR_END;
}

void free_ivector(int *v, long nl, long nh)
/* free an int vector allocated with ivector() */
{
    free((FREE_ARG) (v + nl - NR_END));
}

void free_dvector(double *v, long nl, long nh)
/* free a double vector allocated with dvector() */
{
    free((FREE_ARG) (v + nl - NR_END));
}

void nrerror(char *error_text)
/* Numerical Recipes standard error handler */
{
    fprintf(stderr, "Numerical Recipes run-time error...\n");
    fprintf(stderr, "%s\n", error_text);
    fprintf(stderr, "...now exiting to system...\n");
    exit(EXIT_FAILURE);
}
#undef NR_END
#undef FREE_ARG

```

Na kraju dajemo i README fajl, u kome su na engleskom jeziku dati osnovni detalji o izvršavanju i kompjiliranju programa, što je već objašnjeno u ranijem tekstu.

README file for the SPEEDUP Path Integral Monte Carlo code.

This serial code gives a Monte Carlo simulation that calculates imaginary time amplitudes for the transition from a to b in time T for generic theory. The Planck constant $\hbar=1$. Trajectories are generated using the bisection method. The variable s determines the level of bisection, i.e. time discretization N takes the values $2^0, 2^1, \dots, 2^s$.

The user configurable section is in file p.c. In it users need to define the level parameter p ($0 < p < 10$) and to supply the potential V and its derivatives.

COMPILING:

- 1) Supply the appropriate level p and function V0() in the file p.c.
- 2) A typical serial compiling line (for level p=9) should look as follows:

```
gcc -O5 -o speedup-p9 main.c p.c nr.c -lm -lsprng -I.
```

Note that you need to have installed SPRNG libraries, <http://sprng.cs.fsu.edu/>
(The above example [-lsprng] is for the case of system wide installation of SPRNG.
In the case of a custom installation this needs to be changed appropriatel.)

TYPICAL USAGE:

```
./speedup-p9 T a b s Nmc seed par[0] ...
```

speedup-p9 is the compile name of the simulation working at level p=9.

T is the time of propagation.

a is the position at time t=0.

b is the position at time t=T.

s is the bisection level.

Nmc is the number of Monte Carlo samples used.

seed is seed value used by the SPRNG (random number generator).

par[0], ... are additional parameters defining the potential
(initialize as many as needed and use them in the same order
in the user supplied function V0() in the file p.c).

Literatura

- [1] P. A. M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowietunion* **3**, 64 (1933)
- [2] N. Wiener, *J. Math. Phys. Sci.* **2**, 132 (1923)
- [3] R. MacKenzie, [arXiv:quant-ph/0004090](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0004090)
- [4] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948)
- [5] A. Balaž, *Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantnoj mehanici: analitičke i numeričke osobine* (magistarski rad, Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu, 2004)
- [6] A. Bogojević, A. Balaž, and A. Belić, *Phys. Rev. E* **72**, 036128 (2005)
- [7] A. Bogojević, A. Balaž, and A. Belić, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 180403 (2005)
- [8] A. Bogojević, A. Balaž, and A. Belić, *Phys. Rev. B* **72**, 064302 (2005)
- [9] A. Bogojević, A. Balaž, and A. Belić, *Phys. Lett. A* **344**, 84 (2005)
- [10] A. Bogojević, I. Vidanović, A. Balaž, and A. Belić, *Phys. Lett. A* **372**, 3341 (2008)
- [11] A. Balaž, A. Bogojević, I. Vidanović, and A. Pelster, [arXiv:0806.4774](https://arxiv.org/abs/0806.4774)
- [12] S. Wolfram, *Mathematica package for symbolic calculus*, <http://www.wolfram.com/>
- [13] Programski kod SPEEDUP, Laboratorija za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu, <http://scl.phy.bg.ac.yu/speedup/>
- [14] H. Weyl, *Zeitschrift für Physik* **46**, 1 (1927)
- [15] H. Weyl, *Theory of Groups and Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1950)
- [16] M. M. Mizrahi, *J. Math. Phys.* **16**, 2201 (1975)
- [17] J. R. Shewell, *Am. J. Phys.* **27**, 16 (1959)
- [18] F. Herbut, *Kvantna mehanika za istraživače* (Prirodno–matematički fakultet, Beograd, 1983)
- [19] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [20] A. Bogojević, *Lectures on Quantum Field Theory* (Skripta za predmet Kvantna teorija polja II, Beograd, 1998)

- [21] A. Jevicki, *Extended Particles in Quantum Field Theory* (PhD Thesis, City University of New York, 1976)
- [22] P. Ramond, *Field Theory: A Modern Primer* (Benjamin/Cummings, 1981)
- [23] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1971)
- [24] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (4th edition, Addison-Wesley, 1997)
- [25] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Facta Universitatis* **1** 113 (1998)
- [26] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Phys. Low-Dim. Struct.* **5/6** 1 (1999)
- [27] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Phys. Low-Dim. Struct.* **9/10** 149 (1999)
- [28] A. Balaž, A. Belić, and A. Bogojević, *Phys. Low-Dim. Struct.* **1/2** 65 (2000)
- [29] L. Ryder, *Quantum Field Theory* (Cambridge University Press, 1996)
- [30] M. Kac, in *Proc. 2nd Berkeley Symp. Math. Stat. Probability*, 189 (1950), Ed. J. Neyman (University of California, 1951)
- [31] E. Nelson, *J. Math. Phys.* **5**, 332 (1964)
- [32] G. C. Wick, *Phys. Rev.* **96**, 1124 (1954)
- [33] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1992)
- [34] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets* (4th edition, World Scientific, Singapore, 2006)
- [35] D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279 (1995)
- [36] F. R. Krajewski and M. H. Müser, *Phys. Rev. B* **65**, 174304 (2002)
- [37] M. Takahashi and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 3765 (1984)
- [38] X. P. Li and J. Q. Broughton, *J. Chem. Phys.* **86**, 5094 (1987)
- [39] H. De Raedt and B. De Raedt, *Phys. Rev. A* **28**, 3575 (1983)
- [40] S. Jang, S. Jang, and G. Voth, *J. Chem. Phys.* **115**, 7832 (2001)
- [41] S. D. Bond, B. B. Laird, and B. J. Leimkuhler, *J. Comp. Phys.* **185**, 472 (2003)
- [42] N. Makri and W. H. Miller, *Chem. Phys. Lett.* **151**, 1 (1988)
- [43] N. Makri and W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **90**, 904 (1989)
- [44] N. Makri, *Chem. Phys. Lett.* **193**, 435 (1992)
- [45] A. Erdelyi, *Asyptotic Expansions* (Dover, New York, 1956).
- [46] J. Grujić, A. Bogojević, and A. Balaž, *Phys. Lett. A* **360**, 205 (2006)

- [47] J. A. Barker, J. Chem. Phys. **70**, 2914 (1979)
- [48] M. Creutz and B. Freedman, Ann. Phys. **132**, 427 (1981)
- [49] M. F. Herman, E. J. Bruskin, and B. J. Berne, J. Chem. Phys. **76**, 5150 (1982)
- [50] M. Parrinello and A. Rahman, J. Chem. Phys. **80**, 860 (1984)
- [51] W. Janke and T. Sauer, J. Chem. Phys. **107**, 5821 (1997)
- [52] R. P. Feynman and H. Kleinert, Phys. Rev. A **34**, 5080 (1986)
- [53] H. Kleinert, Phys. Lett. B **280**, 251 (1992)
- [54] H. Kleinert, Phys. Lett. A **173**, 332 (1993)
- [55] H. Kleinert, W. Kürzinger, and A. Pelster, J. Phys. A **31**, 8307 (1998)
- [56] F. Weissbach, A. Pelster, and B. Hamprecht, Phys. Rev. E **66**, 036129 (2002)
- [57] A. Pelster, H. Kleinert, and M. Schanz, Phys. Rev. E **67**, 016604 (2003)
- [58] S. F. Brandt and A. Pelster, J. Math. Phys. **46**, 112105 (2005)
- [59] C. M. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev. **184**, 1231 (1969); Phys. Rev. D **7**, 1620 (1973)
- [60] W. Janke and H. Kleinert, Phys. Rev. Lett. **75**, 2787 (1995)
- [61] F. Weissbach, A. Pelster, and B. Hamprecht, Phys. Rev. E **66**, 036129 (2002)
- [62] S. F. Brandt, H. Kleinert, and A. Pelster, J. Math. Phys. **46**, 032101 (2005)
- [63] J. Dreger, A. Pelster, and B. Hamprecht, Europ. Phys. J. B **45**, 355 (2005)
- [64] M. Bachmann, H. Kleinert, and A. Pelster, Phys. Rev. D **61**, 085017 (2000)
- [65] H. Kleinert, A. Pelster, B. Kastening, and M. Bachmann, Phys. Rev. E **62**, 1537 (2000)
- [66] H. Kleinert, A. Pelster, and B. Van den Bossche, Physica A **312**, 141 (2002)
- [67] A. Pelster, H. Kleinert, and M. Bachmann: Ann. Phys. (N.Y.) **297**, 363 (2002)
- [68] A. Pelster and K. Glaum, Phys. Stat. Sol. B **237**, 72 (2003)
- [69] A. Pelster and H. Kleinert, Physica A **323**, 370 (2003)
- [70] L. Parker and S. Christensen, *MathTensor package for Tensorial Calculations in Mathematica*, <http://smc.vnet.net/mathtensor.html>
- [71] Laboratorija za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu, <http://scl.phy.bg.ac.yu/>
- [72] A. Srinivasan, M. Mascagni, and D. Ceperley, Parallel Computing, **29**, 69 (2003)
- [73] Scalable Parallel Random Number Generator, <http://sprng.cs.fsu.edu/>
- [74] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, and Y. J. Wong, Phys. Rev. Lett. **69**, 3382 (1992)

- [75] D. Stojiljković, A. Bogojević, and A. Balaž, *Phys. Lett. A* **360**, 217 (2006)
- [76] M. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953)
- [77] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods*, vol. 1: Basics (John Wiley and Sons, New York, 1986).