

# Path Integral Monte Carlo Methods

Tue Herlau. 241282-1613

Vejleder: Karsten Flensberg. Ekstern Vejleder: Olav Syljuåsen

16. juni 2006

# Indhold

<b>1</b>	<b>Introduktion</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Teori</b>	<b>2</b>
2.1	Det Fysiske System . . . . .	2
2.1.1	Tæthedsmatricen . . . . .	2
2.1.2	Egenskaber for Tæthedsmatricen . . . . .	3
2.2	Virkningen . . . . .	3
2.2.1	Den Primitive Tilnærmelse . . . . .	4
2.2.2	Chin Tilnærmelsen . . . . .	5
2.2.3	Polymerbilledet . . . . .	6
2.3	Metropolis Algoritme . . . . .	7
2.3.1	Mange-Niveau Metropolis Algoritme . . . . .	9
2.3.2	Mange-Niveau Metropolis og Lévy-konstruktionen . . . . .	10
2.4	Sampling af bosoner . . . . .	12
2.4.1	Regler for sampling af bosoner . . . . .	13
2.5	Estimatorer . . . . .	14
2.5.1	Energiestimatorer . . . . .	14
2.5.2	Varmekapacitetsestimator . . . . .	14
2.6	Sammenfatning . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Superfluiditet</b>	<b>16</b>
3.1	Teoretisk Behandling . . . . .	16
3.2	Sampling af Windingtallet . . . . .	19
3.2.1	Øgning af Acceptraten for Mange-Partikel Permutationstræk . . . . .	20
3.2.2	En Note om Detaljeret Balance . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Forsøg</b>	<b>23</b>
4.1	Note om Enheder . . . . .	23
4.2	Harmonisk Osscillator i 3 Dimensioner . . . . .	23
4.3	Helium i 3 Dimensioner . . . . .	24
4.4	Helium i 2 Dimensioner . . . . .	25
4.5	Acceptsandsynligheder for Mangepartikelpermutationer . . . . .	26
4.5.1	Resultater Uden Brug af FILL . . . . .	27
4.6	Resultater af Winding-Estimatoren . . . . .	27
<b>5</b>	<b>Konklusion</b>	<b>28</b>
<b>6</b>	<b>Appendixes</b>	<b>30</b>
6.1	Appendix A - Helium-Potentialet . . . . .	30
6.2	Appendix B - Udregning af $C$ i Liniær Tid . . . . .	30
6.3	Appendix C - Billeder af programmet . . . . .	31
6.4	Appendix D - Worm Algoritme . . . . .	33

6.4.1	Definitioner . . . . .	33
6.4.2	Orme-delen af konfigurationsrummet . . . . .	34
6.4.3	Transitionsregler . . . . .	35
6.4.4	Resultater . . . . .	37

## Resumé

In the following work, a self-contained documentation of the steps required to construct a *Path Integral Monte Carlo* (PIMC) simulation of the superfluid transition of  $^4\text{He}$  is presented. Hereunder the formulation of the partition function in terms of a high-temperature density matrix, a symplectic factorization scheme of the action, Metropolis and Multi-Level Metropolis Algorithm, problems related to sampling of bosonic systems, thermodynamic estimators, a formulation of the superfluid transition in terms treatable by PIMC and finally an implementation of the Winding Number Estimator.

Calculations of thermodynamical properties of the harmonic oscillator and Helium in 2 and 3 dimensions are carried out in order of testing the simulations, and the results are documented.

The problems related to sampling of many-particle permutation moves are extensively documented, and an optimization strategy of many-particle permutation moves are constructed and tested. It is shown, that the optimization strategy allows good calculations of the Winding number, and thereby the superfluid density. The results are documented and are in good agreement with those reported elsewhere.

Finally, the source code, which can potentially save newcomers to the field months of work, is made available. It can be found at <http://www.kubusnet.dk/bachelor/>.

# Kapitel 1

## Introduktion

Denne opgave har til formål at studere en metode til at studere bosoniske systemer kaldet *Path Integral Monte Carlo* (PIMC). PIMC udmærker sig ved at være eksakt, dvs. de statistiske og systematiske fejl er under kontrol, og have et anvendelsesfelt der stort set dækker alle bosoniske systemer forskellig fra 0. Det er i øjeblikket den *eneste* ab-initio metode til at studere bestemte fysiske fænomener, heriblandt superfluiditet, ved temperaturer forskellig fra 0.

PIMC er fællesnævner for en metode, der tillader et utal af mindre modifikationer, der vil øge effektiviteten i den problemstilling man beskæftiger sig med. Dette er også en medvirkende faktor til at der ikke er *færdige* programmer man kan købe til at simulere PIMC, som det er tilfældet med andre metoder som fx. Density Functional Theory. En studerende eller forsker der vil bruge PIMC skal beside kendskab til metoden og evner udi at programmere, hvis han eller hun vil give sig i kast med et problem en anden ikke allerede har simuleret.

Formålet med denne opgave er, at give en grundig og selvindeholdt gennemgang af alle de skridt, der er nødvendige for at konstruere en fungerende PIMC-simulering. Yderligere undersøges tilføjelser der *skal* gøres til den basale PIMC-metode for at kunne simulere superfluiditet i  $^4\text{He}$ , muligvis det største enkeltresultat indenfor feltet til dato.

Fokus har ikke været på den numeriske nøjagtighed af uddata. Dette ville kræve en længere gennemgang og undersøgelse af korrelation af målingerne, der vil overskride denne rapporterings muligheder. Derudover kræver gode målinger i størrelsesordenen flere ugers søgen efter optimale parametre og modifikation af metoderne. Der vedlægges dog simuleringsresultater, der underbygger rigtigheden af implementeringen, samt relativt gode data for den superflydende densitet for helium i 2 dimensioner.

En diskussion af superfluiditet er ikke fuldendt uden en kort fysisk beskrivelse, hvilket også er en stor hjælp i diskussionen om optimeringer af *Windingtallet* der er relateret til superfluiditet. Jeg håber også det vil være med til at gøre rapporten mere underholdende for en læser der ikke selv vil implementere metoderne.

Endeligt vil jeg takke min vejleder Karsten Flensberg for med stor tålmodighed at forsøge at holde mig indenfor tidsrammerne og afhjælpe tekniske problemer, og Olav Syljuasen for udpegning af litteratur og til at skabe overblik indenfor metoderne. Endelig en sidste tak fra min familie og kæreste fordi de har været mig foruden det sidste stykke tid.

# Kapitel 2

## Teori

### 2.1 Det Fysiske System

I de problemer som vil blive behandlet her, vil partikelantal og volumen være fastsat, og de vil således kunne beskrives med det kanoniske ensemble, hvor energien er den eneste størrelse som vil variere.

Ideen som ligger til grund for PIMC er, at et system af  $N$  partikler ved en lav temperatur  $T$  kan erstattes af et nyt system af  $NM$  partikler, hvor de enkelte dele af det nye system opfører sig, som om temperaturen er  $TM$ .

Programmet for dette afsnit vil være som følger: Først en formulering af problemet i kvantestatistisk mekanik, og en enkel omskrivning af tilstandssummen  $\mathcal{Z}$  til et integral over indgange af tæthedsmatricen  $\rho$ .

Hernæst et afsnit, hvor disse  $\rho$ -funktioner (virkningen) tilnærmes og problemet finder en omformulering som  $N$  polymerkæder med  $M$  perler i hver, og en udvidelse så metoderne også omfatter bosoner.

Endeligt et afsnit om *Metropolis* og *Mange-Niveau Metropolis* algoritme der kan bruges til at udregne integralet der indgår i tilstandssummen  $\mathcal{Z}$ . Men først en gennemgang af den kvantestatistiske mekanik.

#### 2.1.1 Tæthedsmatricen

Antag at egenfunktionerne og egenverdierne af Hamiltonen  $\mathcal{H}$  er  $\phi_i$  og  $E_i$ . I termisk ækvilibrium er sandsynligheden for, at en given tilstand  $i$  er optaget givet ved  $\exp(-\beta E_i)/\mathcal{Z}$ , hvor  $\mathcal{Z} = \sum_i \exp(-\beta E_i)$  er den vanlige normeringskonstant og  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Hermed bliver den forventede værdi af en operator  $\mathcal{O}$  i termisk ligevægt

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_i \langle \phi_i | \mathcal{O} | \phi_i \rangle e^{-\beta E_i}$$

Idet  $\langle \phi_i | \mathcal{O} | \phi_i \rangle$  er forventningen på  $\mathcal{O}$  for tilstand  $\phi_i$ . Dette inspirerer os til at indføre *tæthedsmatricen*  $\rho = \exp(-\beta \mathcal{H})$ , hvorved  $\langle \mathcal{O} \rangle$  kan udtrykkes som

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr}(\rho \mathcal{O}) \quad \text{hvor } \mathcal{Z} = \text{tr} \rho \quad (2.1)$$

Her er det nødvendigt at foretage et valg af basis. Selvom alle valg i princippet ville føre til resultater, så er det nødvendigt for at en monte-carlo metode skal være effektiv, at alle indgangene i tæthedsmatricen er ikke-negative. Et naturligt valg vil være positionsbasen  $\{\mathbf{R}\}$ , hvor  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  og hver  $\mathbf{r}_n$  den  $d$ -dimensionelle koordinat af partikkel  $n$ .

I denne basis er et givet element af tæthedsmatricen

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = \langle \mathbf{R} | \rho | \mathbf{R}' \rangle \quad (2.2)$$

Og forventningen på  $\mathcal{O}$  fra 2.1

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | \rho \left( \int d\mathbf{R}' | \mathbf{R}' \rangle \langle \mathbf{R}' | \right) \mathcal{O} | \mathbf{R} \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \langle \mathbf{R}' | \mathcal{O} | \mathbf{R} \rangle \\ \text{hvor } \mathcal{Z} &= \int d\mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}, \beta) \end{aligned} \quad (2.3)$$

### 2.1.2 Egenskaber for Tæthedsmatricen

Der gælder  $\exp(-(\beta_1 + \beta_2)\mathcal{H})\phi_i = \exp(-\beta_1 E_i - \beta_2 E_i)\phi_i = \exp(-\beta_1 \mathcal{H}) \exp(-\beta_2 \mathcal{H})\phi_i$  og hermed  $\exp(-(\beta_1 + \beta_2)\mathcal{H}) = \exp(-\beta_1 \mathcal{H}) \exp(-\beta_2 \mathcal{H})$ . Det giver

$$\rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_3, \beta_1 + \beta_2) = \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\beta_1 \mathcal{H}} e^{-\beta_2 \mathcal{H}} | \mathbf{R}_3 \rangle$$

Indsættes identitetsoperatoren imellem exponentialfunktionerne giver det

$$\rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_3, \beta_1 + \beta_2) = \int d\mathbf{R}_2 \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \beta_1) \rho(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \beta_2)$$

Nu defineres  $\tau \equiv \beta/M$  hvor  $M$  er et heltal. Anvendes denne regel  $M - 1$  gange på 2.3 giver det

$$\rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_{M+1}, \beta) = \int d\mathbf{R}_2 \cdots \int d\mathbf{R}_M \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \tau) \cdots \rho(\mathbf{R}_M, \mathbf{R}_{M+1}, \tau) \quad (2.4)$$

Således er problemet reduceret til at bestemme en sandsynlighedsfordeling af  $dMN$  koordinater givet ved følgende udtryk

$$\boxed{\frac{\prod_{m=1}^M \rho(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \tau)}{\mathcal{Z}}, \mathcal{Z} = \int d\mathbf{R}_1 \cdots d\mathbf{R}_M \prod_{m=1}^M \rho(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \tau)} \quad (2.5)$$

Hvor der antages, at koordinaterne  $\mathbf{R}_m$  er periodiske i  $M$ , således at  $\mathbf{R}_M = \mathbf{R}_0$ . Se endvidere 2.38 for hvordan dette udføres i praksis.

Problemet er blevet udvidet fra at bestemme et til  $M$   $\rho$ -led, formålet med denne omskrivning er, at  $\rho$ -ledene er angivet med en højere temperatur  $\tau$ , og ved tilstrækkeligt mange  $M$ -led kan de tilnærmes.<sup>1</sup>

## 2.2 Virkningen

I ligning 2.5 er det blevet anskueliggjort, hvorledes problemet med at evaluere tæthedsmatricen ved temperaturen  $\beta$  kan omformuleres til en evaluering af et integral over  $M$  tæthedsmatricer af temperatur  $\beta/M$ . Men for at få tal ud af dette, er det nødvendigt at have en metode til at evaluere tæthedsmatricen i højtemperaturgrænsen, og det er netop hvad der vil blive behandlet her. Problemet med at beregne selve integralet vil blive behandlet andetsteds.

Det grundlæggende problem er at finde et godt estimat for 2.3:

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \tau) = \langle \mathbf{R} | e^{-\tau \mathcal{H}} | \mathbf{R}' \rangle$$

<sup>1</sup>I det følgende bruges standardnotation hvor  $\mathbf{R}_m = (\mathbf{r}_{n,m})_{n=1}^N = (\mathbf{r}_{1,m}, \dots, \mathbf{r}_{N,m})$ . Særligt  $n$ -Koordinaterne vil nogen gange underforstås.

For  $\tau \ll 1$ . I vores problem vil  $\mathcal{H}$  have formen  $\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$  hvor  $\mathcal{T}$  er den kinetiske energi

$$\mathcal{T} = -\lambda \sum_{i=1}^N \nabla_i^2, \quad \lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (2.6)$$

og  $\mathcal{V}$  det potentielle bidrag, som kun afhænger af positionen. Med  $\mathcal{V}(\mathbf{R})$  angives i det følgende totale potentielle energi i tilstand  $\mathbf{R}$ . Ideen er nu, at bruge dette til at faktorisere  $\exp(-\beta \mathcal{H})$  til produkter af eksponentialfunktioner, som kan udregnes hver for sig. Dette er *ikke* trivielt idet  $\mathcal{H}$  er en operator.

Det vil blive gjort i to tempi. Først den *primitive tilnærmelse*, som er medtaget for dels at illustrere metoden, dels fordi den giver en umiddelbar fysisk fortolkning af systemet, og dels en højere ordens metode, *Chin Tilnærmelsen*<sup>2</sup>, som bygger på resultater først rapporteret i [12] og siden anvendt mange gange, se fx. [9]. Mange alternativer findes, den mest kendte er nok en matrixkvadreringsmetode rapporteret i [13]. Se [5] for mere information.

### 2.2.1 Den Primitive Tilnærmelse

Den primitive tilnærmelse bygger på den *eksakte* operatoridentitet [2]

$$e^{-\tau(\mathcal{T} + \mathcal{V}) + \frac{\tau^2}{2}[\mathcal{T}, \mathcal{V}]} = e^{-\tau \mathcal{T}} e^{-\tau \mathcal{V}}$$

For små  $\tau$  kan kommutatoren ignoreres; man kunne bekymre sig om, hvorvidt dette er sikkert, idet for at gøre  $\tau$  vilkårligt lille må tilnærmelsen gøres et tilsvarende antal gange, men ifølge [14] gælder der

$$e^{-\beta(\mathcal{T} + \mathcal{V})} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left( e^{-\frac{\beta}{M} \mathcal{T}} e^{-\frac{\beta}{M} \mathcal{V}} \right)^M$$

Forudsat at  $\mathcal{T} + \mathcal{V}$ ,  $\mathcal{T}$  og  $\mathcal{V}$  har et spektrum, der er nedadtil begrænset. Se [2] for yderligere diskussion. Hermed kan et element af tæthedsmatricen 2.2 udregnes til

$$\rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \tau) \approx \int d\mathbf{R} \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\tau \mathcal{T}} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | e^{-\tau \mathcal{V}} | \mathbf{R}_2 \rangle \quad (2.7)$$

Potentialledet er diagonalt

$$\langle \mathbf{R} | e^{-\tau \mathcal{V}} | \mathbf{R}_2 \rangle = \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}) e^{-\tau \mathcal{V}(\mathbf{R})} \quad (2.8)$$

Det kinetiske led udregnes ved at antage, at systemet befinder sig i en kube med sidelængde  $L$ . Så er egentilstandene og egenværdierne  $\phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{R}) = L^{-dN/2} \exp(iK_{\mathbf{n}} \mathbf{R})$  og  $E_{\mathbf{n}} = \lambda K_{\mathbf{n}}^2$  hvor  $K_{\mathbf{n}} = 2\pi \mathbf{n}/L$ . Her er  $\mathbf{n}$  en  $dN$ -dimensionel heltalsvektor, hvor  $d$  er antal dimensioner. Med brug af disse bliver det kinetiske bidrag

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\tau \mathcal{T}} | \mathbf{R} \rangle &= \sum_{\mathbf{n}} \phi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{R}_1) e^{-\tau E_{\mathbf{n}}} \phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{R}) \\ &= L^{-dN} \sum_{\mathbf{n}} e^{-\tau \lambda K_{\mathbf{n}}^2 - iK_{\mathbf{n}}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R})} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Summen udregnes ved at omskrive den til et integral. Dette er muligt, såfremt  $\lambda \tau \ll L^2$ , hvilket vil være gældende i de pågældende udregninger. Hermed vil

<sup>2</sup>Udtrykket Chin Tilnærmelsen er ikke standard indenfor litteraturen



(størrelsen af et interval i riemannsummen er  $2\pi/L$ )

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{R}_1 | e^{-\tau \mathcal{T}} | \mathbf{R} \rangle &= L^{-dN} \left[ \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left( - \left[ \sqrt{\tau\lambda} \frac{2\pi}{L} x + \frac{i(\mathbf{R}^i - \mathbf{R}_1^i)}{2\sqrt{\tau\lambda}} \right]^2 \right) \right]^{3N} \\
&\quad \times \exp \left[ - \frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1)^2}{4\tau\lambda} \right] \\
&= (4\pi\lambda\tau)^{-dN/2} \exp \left[ - \frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1)^2}{4\tau\lambda} \right] \\
&\equiv \rho_0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}, \tau)
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Lad os forsøge at udnytte dette maskineri til at opnå indsigt i tilstandssummen. Bruges tricket med at reducere tæthedsmatricen fra temperatur  $\beta$  til  $\tau = \beta/M$  (2.5) samt den primitive approximation (2.7) med udtrykkene for potentiel (2.8) og kinetisk (2.10) energi indsat giver dette

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \left( \frac{1}{4\pi\lambda\tau} \right)^{dNM/2} \int d\mathbf{R}_1 \cdots d\mathbf{R}_{M-1} \\
&\quad \times \exp \left[ - \sum_{m=1}^M \left( \frac{(\mathbf{R}_{m+1} - \mathbf{R}_m)^2}{4\tau\lambda} + \tau \mathcal{V}(\mathbf{R}_m) \right) \right].
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Dette udtryk kan yderligere forsimples ved at introducere  $\mathbf{X} = (\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_M)$  og  $\Omega(\mathbf{X}, \tau) = \prod_{k=0}^{M-1} \rho_0(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_{k+1}, \tau)$ . Hermed bliver 2.12

$$\mathcal{Z} = \int d\mathbf{X} \Omega(\mathbf{X}, \tau) e^{-U(\mathbf{X})}, \text{ hvor } U(\mathbf{X}) = \sum_{m=1}^M \tau \mathcal{V}(\mathbf{R}_m) \tag{2.12}$$

## 2.2.2 Chin Tilnærmelsen

Hele afsnittet om den primitive tilnærmelse byggede på faktoriseringen  $e^{-\tau(\mathcal{T} + \mathcal{V})} \approx e^{-\tau \mathcal{T}} e^{-\tau \mathcal{V}}$ . Denne tilnærmelse er *god nok* fra et teoretisk perspektiv: Med tilstrækkeligt fin tidsinddeling vil den give nøjagtige resultater. Uheldigvis viser det sig, at antallet af partikler med tilstrækkelig fin inddeling er beregningsmæssigt uhåndterbart ved de temperaturer der ønskes behandlet i dette arbejde, og derfor er det nødvendigt at benytte en mere nøjagtig tilnærmelse. I lighed med [3] vil der her benyttes en faktorisering først introduceret af Siu A. Chin i [12]

$$e^{-2\tau(\mathcal{T} + \mathcal{V})} = e^{-\tau \frac{1}{3} \mathcal{V}_e} e^{-\tau \mathcal{T}} e^{-\tau \frac{4}{3} \mathcal{V}_m} e^{-\tau \mathcal{T}} e^{-\tau \frac{1}{3} \mathcal{V}_e} + O(\tau^5) \tag{2.13}$$

Her er

$$\mathcal{V}_e = \mathcal{V} + \frac{\tau^2 \alpha}{6} \mathcal{C}, \quad \mathcal{V}_m = \mathcal{V} + \frac{\tau^2(1-\alpha)}{12} \mathcal{C}, \quad \mathcal{C} = [\mathcal{V}, [\mathcal{T}, \mathcal{V}]] \tag{2.14}$$

Hvor  $\alpha \in [0, 1]$  er en fri parameter, i simuleringerne valgt til 0. Samme fremgangsmåde som i den primitive tilnærmelse kan anvendes. Hermed bliver 2.13

$$\langle \mathbf{R}_{2k-1} | e^{-2\tau \mathcal{H}} | \mathbf{R}_{2k+1} \rangle = \int d\mathbf{R}_{2k} \tilde{\rho}(\mathbf{R}_{2k-1}, \mathbf{R}_{2k}, \tau) \tilde{\rho}(\mathbf{R}_{2k}, \mathbf{R}_{2k+1}, \tau) \tag{2.15}$$

Hvor der defineres

$$\tilde{\rho}(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_{k+1}, \tau) = \begin{cases} \rho_0(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_{k+1}, \tau) e^{-\frac{\tau}{3} \mathcal{V}_e(\mathbf{R}_k)} & \text{k Ulige} \\ \rho_0(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_{k+1}, \tau) e^{-\frac{4\tau}{3} \mathcal{V}_m(\mathbf{R}_k) - \frac{\tau}{3} \mathcal{V}_e(\mathbf{R}_{k+1})} & \text{k Lige} \end{cases} \tag{2.16}$$

Tilstandssummen lader sig nu behandle, ideen er, kun i første omgang at medtage halvt så mange led i ekspansionen af  $\mathcal{Z}$ , og så lade de ekstra integraler der kommer

af 2.13 indgå som resten. Hermed, for lige  $M$ , og under indsættelse af 2.16 og 2.13 i 2.3 bliver  $\mathcal{Z}$

$$\mathcal{Z} = \int d\mathbf{X} \Omega(\mathbf{X}, \tau) e^{-U(\mathbf{X})} \quad (2.17)$$

$$U(\mathbf{X}) = \sum_{m=1}^{M/2} \left[ \frac{2\tau}{3} \mathcal{V}(\mathbf{R}_{2m+1}) + \frac{\tau^3 \alpha}{9} \mathcal{C}(\mathbf{R}_{2m+1}) \right] \quad (2.18)$$

$$+ \frac{4\tau}{3} \mathcal{V}(\mathbf{R}_{2m}) + \frac{\tau^3(1-\alpha)}{9} \mathcal{C}(\mathbf{R}_{2m}) \quad (2.19)$$

For at bringe udtrykket på en lukket form, der egner sig til et program, må  $\mathcal{C}$  fra 2.14 udregnes. Idet  $\mathcal{T} = -\lambda \sum_{i=1}^N \nabla_i^2$  vil:

$$\begin{aligned} [\mathcal{V}, [\mathcal{T}, \mathcal{V}]] &= -\mathcal{T} \mathcal{V} \mathcal{V} - \mathcal{V} \mathcal{V} \mathcal{T} + 2\mathcal{V} \mathcal{T} \mathcal{V} \\ &= -\lambda \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}} [-\nabla_{i\alpha}^2 \mathcal{V} \mathcal{V} - \mathcal{V} \mathcal{V} \nabla_{i\alpha}^2 + 2\mathcal{V} \nabla_{i\alpha}^2 \mathcal{V}] \end{aligned} \quad (2.20)$$

Her er  $\nabla_{i\alpha}$  blot en sædvanlig differentialoperator, der virker på  $\alpha$ -koordinaten af den  $i$ te partikel. Anvendes kædereglene på udtrykket i parenteser giver det (med  $\dot{\mathcal{V}} \equiv \nabla_{i\alpha} \mathcal{V}$  og  $\ddot{\mathcal{V}} \equiv \nabla_{i\alpha}^2 \mathcal{V}$ )

$$\begin{aligned} -\nabla_{i\alpha}^2 \mathcal{V} \mathcal{V} - \mathcal{V} \mathcal{V} \nabla_{i\alpha}^2 + 2\mathcal{V} \nabla_{i\alpha}^2 \mathcal{V} &= -[2\ddot{\mathcal{V}} \mathcal{V} + 2\dot{\mathcal{V}}^2 + 4\dot{\mathcal{V}} \mathcal{V} \nabla_{i\alpha} + \mathcal{V}^2 \nabla_{i\alpha}^2] \\ &\quad - [\mathcal{V}^2 \nabla_{i\alpha}^2] \\ &\quad + [2\ddot{\mathcal{V}} \mathcal{V} + 4\dot{\mathcal{V}} \mathcal{V} \nabla_{i\alpha} + 2\mathcal{V}^2 \nabla_{i\alpha}] \\ &= -2\dot{\mathcal{V}}^2 \end{aligned} \quad (2.21)$$

Herfra kræves yderligere kendskab til  $\mathcal{V}$ . Der medtages kun parinteraktion og ingen angulær afhængighed. Hermed bliver

$$\mathcal{V}(\mathbf{R}) = \sum_{i < j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (2.22)$$

Og derfor

$$\dot{\mathcal{V}} = \nabla_{i\alpha} \mathcal{V} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\partial V}{\partial r} (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \equiv \mathbf{F}_i^\alpha \quad (2.23)$$

Hvor der med  $\mathbf{F}^\alpha$  menes den  $\alpha$ te komponent af den generaliserede kraft  $\mathbf{F}_i = (\mathbf{F}_i^{\hat{x}}, \mathbf{F}_i^{\hat{y}}, \mathbf{F}_i^{\hat{z}})$ . Hermed bliver 2.20 under brug af 2.21 med 2.23 indsat

$$[\mathcal{V}, [\mathcal{T}, \mathcal{V}]] = 2\lambda \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{F}_i \quad (2.24)$$

### 2.2.3 Polymerbilledet

Et udtryk som 2.12 kan opfattes som en formel beskrivelse af et særligt system af polymerer. Systemet i sig selv er en anelse ufysisk, men da mange af fagudtrykkene fra PIMC metoder taget herfra, er det nyttigt at introducere det. Hvis man blot var givet udtrykket for tilstandssummen kunne man opfatte den som at beskrive et klassisk system af  $NM$  perler og  $NM$  fjedre - hvor hver perle er identisk med en

integrationsvariabel  $\mathbf{r}_{n,m}$ . Systemet er arrangeret som  $N$  perlekæder (verdenslinier) med  $M$  perler i, og fjedrene udgør så at sige snoren i perlekæden, således at hver perle har to fjedre forbundet til sig. En fjeder mellem perlerne  $\mathbf{r}$  og  $\mathbf{r}'$  bidrager med energien

$$\frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2}{4\tau^2\lambda}$$

Yderligere er perlerne nummereret med deres tidsindex, dvs.  $m$ -koordinaten, således at alle perlerne med et bestemt index interagerer med hinanden igennem  $U(\mathbf{X})$ . Disse mængder af perler med samme tidsindex,  $\mathbf{R}_m$ , kaldes den  $m$ 'te *tidsflade*.

Det er en anelse ufysisk, at interaktionen er arrangeret således for systemer med parinteraktion, men for fx. den harmoniske oscillator giver det bedre mening. Bemærk, at  $U$  kun er det faktiske potentiale i tilfælde af den primitive tilnærmelse - fx. under Chin-tilnærmelsen indeholder  $U$  korrektioner af højere orden.

## 2.3 Metropolis Algoritme

I 2.5 blev det anskueliggjort, at systemets tilstandssum, og hermed fordelingen af tilstande, kan findes som et mangedimensionelt integral over et produkt af  $\rho$ -funktioner. Herefter blev en metode til at tilnærme  $\rho$ -ledene gennemgået i 2.12, sådan at de blev bragt på lukket form. Tilbage er kun en måde at udregne det multidimensionelle integral i 2.12 og herved finde normeringen i 2.5.

Metropolis Algoritme er netop en metode, der gør det muligt på en effektiv måde at få indblik i en sandsynlighedsfordeling hvis normering er ukendt. Det er et problem man automatisk støder på i statistisk mekanik. Betragt et system beskrevet ved en konfiguration  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n$  og energifunktionen  $E(\mathbf{r})$ . Antages systemet ergodisk, i ligevægt og beskrevet ved det kanoniske ensemble. Hermed er sandsynligheds målet for en given tilstand  $\mathbf{r}$

$$p(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\mathbf{r})}, \quad \text{hvor} \quad Z = \int d\mathbf{r} e^{-\beta E(\mathbf{r})} \quad (2.25)$$

Ofte er det sådan, at energifunktionen er let at bestemme og har et klart analytisk udtryk, men normeringen volder store problemer numerisk. For lavdimensionelle systemer kan integralet udføres vha. gausskvadrature eller (jeg håber ikke at fornærme nogen numerikere!) med Riemannsummer. Men er systemet af høj dimensionalitet bliver disse metoder ineffektive, og det er nødvendigt at tænke i nye baner.

Metropolis Algoritme er brugbar i dette tilfælde, betragt en mere generel problemstilling end den fra ovenfor. Antag kendskab til en unormeret sandsynlighedsfordeling  $q : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}_+$ , ud fra denne søges kendskab til den normerede sandsynlighedsfordeling  $p(\mathbf{x}) = q(\mathbf{x}) / \int d\mathbf{x}' q(\mathbf{x}')$ . Metropolis Algoritme giver ikke sandsynlighedsfordelingen som et lukket udtryk, men den giver en vilkårlig lang følge af tilstande i faserummet  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots) \in \mathbf{X}^\infty$  fordelt efter  $p$ . Dette er i langt de fleste tilfælde godt nok, idet ønskes fx. at beregne forventningen af en funktion  $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$  kan denne findes til

$$\langle f \rangle = \int d\mathbf{x} p(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^N p(\mathbf{x}_i) f(\mathbf{x}_i)$$

Dette problem er netop ækvivalent med det formuleret i det indledende afsnit, se 2.3. Godheden af denne tilnærmelse er afhængig af antallet af punkter  $N$ , men præcis i uendeligt. Vi vil ikke føre bevis herfor, men henviser til [10].

Følgen af konfigurationer  $(\mathbf{x}_i)$  genereres vha. en *Markovkæde*. Kort fortalt er en Markovkæde defineret ved en *transitionssandsynlighed*  $T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') \in [0, 1]$ , som er sandsynligheden for at tilstand  $\mathbf{x}'$  følger tilstand  $\mathbf{x}$  i følgen af tilstande  $(\mathbf{x}_i)$ .

Sandsynligheden for at have en bestemt sekvens af tilstande  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$  bliver således

$$p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = p(\mathbf{x}_1)T(\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_2)T(\mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{x}_3) \cdots T(\mathbf{x}_{n-1} \rightarrow \mathbf{x}_n)$$

For at rekapitulere. Opgave er, at generere en Markovkæde som er fordelt efter sandsynlighedsfordelingen  $p$ . At introducere en Markovkæde i problemstillingen virker måske ikke umiddelbart som nogen lettere løsning - transitionssandsynligheden virker på  $\mathbf{X}^2$  hvor  $p$  "kun" virkede på  $\mathbf{X}$ , men det viser sig at være lettere. Antag at transitionssandsynligheden opfylder *detaljeret balance*, dvs.

$$T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')p(\mathbf{x}) = T(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})p(\mathbf{x}') \quad (2.26)$$

Summeres over  $\mathbf{x}$  og bruges  $\sum_{\mathbf{x}} T(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) = 1$  giver det

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}') \quad (2.27)$$

Med andre ord: *Hvis transitionssandsynligheden  $T$  opfylder detaljeret balance, så vil den kæde af tilstande den genererer være fordelt efter  $p$ .* Følgende illustration kan være nyttig: Hver tilstand  $\mathbf{x} \in \mathbf{X}$  kan tænkes at være en tønde, og  $p(\mathbf{x})$  den mængde vand der er i tønden. Nu forbindes alle tønderne med hinanden med rør og pumper, således at  $T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$  er den brøkdelt af vandet i tønde  $\mathbf{x}$  der pumpes over i tønde  $\mathbf{x}'$  per tidsenhed.

Detaljeret balance siger så netop, at mængden af vand der pumpes fra tønde  $\mathbf{x}$  til tønde  $\mathbf{x}'$ ,  $T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')p(\mathbf{x})$  er lig mængden der pumpes tilbage,  $T(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})p(\mathbf{x}')$ , og systemet er hermed i balance. Samplingen af Markovkæden kan også let forstås i dette sprog, hvis et enkelt fremmedmolekyle puttes i en af tønderne, så er det klart, at det vil besøge alle tønderne med en hyppighed proportionel med vandstanden i dem,  $p$ , forudsat at alle tønderne er forbundne - det er netop det som ligning 2.27 siger.

Problemstillingen er reduceret til at bestemme  $T$  således at detaljeret balance er opfyldt. Antag at  $T$  kan skrives som

$$T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') \quad (2.28)$$

Hvor  $D$  er en ny (kendt) transitionssandsynlighed og  $A$  en sandsynlighedsfordeling - sandsynligheden for accept.  $D$  behøver ikke være særligt nøjagtig, det eneste krav til den er blot at den opfylder ergodisitetetsbetingelserne, men valget af den har stor indflydelse på effektiviteten og valget af den vil blive behandlet i detaljer i denne opgave.

Vælges  $A$  til

$$A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') \equiv \min \left[ 1, \frac{D(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})q(\mathbf{x}')}{D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')q(\mathbf{x})} \right] = \min \left[ 1, \frac{D(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})p(\mathbf{x}')}{D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')p(\mathbf{x})} \right]$$

Så er kravet om detaljeret balance 2.26 opfyldt

$$p(\mathbf{x})T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \min [D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')p(\mathbf{x}), D(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})p(\mathbf{x}')] = p(\mathbf{x}')T(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})$$

Og hermed er den ønskede konvergens vist. Lad os samle disse betragtninger til en færdig algoritme, i tilfældet af at problemet har den form som det i 2.25. Antag at *gættet* på transitionsandsynlighederne har en symmetrisk form (fx. blot en uniform perturbation af koordinaterne) og hermed bliver  $A(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}') = \min [1, \exp(-\beta(E(\mathbf{r}) - E(\mathbf{r}')))]$  og Metropolis Algoritme tager formen af Algoritme 1 hvor  $\delta \mathbf{x}$  er en lille forskydning i  $\mathbf{x}$  og  $\text{random}(0, 1)$  er et tilfældigt tal mellem 0 og 1.

---

**Algorithm 1** Metropolis Algoritme

---

**Require:** En startposition  $\mathbf{x}_1$

**Ensure:** En følge  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots)$  fordelt efter  $p$

```
1: for  $i = 1$  til  $\infty$  do
2:    $\mathbf{x}' \leftarrow \mathbf{x}_i + \delta \mathbf{x}$ 
3:   if  $\text{random}(0, 1) < e^{-\beta(E(\mathbf{x}) - E(\mathbf{x}'))}$  then
4:      $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}'$ 
5:   else
6:      $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i$ 
7:   end if
8: end for
```

---

### 2.3.1 Mange-Niveau Metropolis Algoritme

En generel egenskab ved polymerkæder som dem der betragtes her er, at flytning af enkelte partikler sjældent er nok til at komme tilstrækkeligt hurtigt rundt i konfigurationsrummet. Omvendt vil træk hvor mange partikler flyttes ad gangen sjældent blive accepteret. Mange-Niveau Metropolis er en generel metode der egner sig i denne situation.

Kort fortalt går den ud på, at dele perturbationen af  $S$  partikler op i  $l$  niveauer, således at de groveste flytninger bliver foretaget på niveau 1, de næstgroveste på niveau 2 etc. op til  $l$ . På denne måde kan de træk der har ringe chance for at blive accepteret, blive luget ud på et lavt niveau, inden for mange beregninger er blevet foretaget.

Som før vil problemet blive gennemgået i fuld generalitet. Antag at systemet som før er beskrevet ved en række koordinater  $\mathbf{x}$ . Før hvert forsøgt træk antages koordinaterne inddelt i  $l + 1$  mængder, dvs.  $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l)$  således at koordinaterne  $\mathbf{x}_0$  ikke vil blive flyttet, mens  $\mathbf{x}_k$  vil blive flyttet i skridt  $k$ . Vi vil med  $\mathbf{x}' = (\mathbf{x}'_0, \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_l)$  angive de nye koordinater, her er  $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}'_0$ .

I det følgende vil  $T_k(\mathbf{x}_k | \tilde{\mathbf{x}}_k)$  angive sandsynligheden for i skridt  $k$  opnår koordinaterne  $\mathbf{x}_k$ , forudsat at koordinaterne  $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1} = \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}$  allerede er blevet placeret. Der må således gælde

$$T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \prod_{k=1}^l T_k(\mathbf{x}'_k | \tilde{\mathbf{x}}'_{k-1}) \quad (2.29)$$

Bemærk, at udtrykket på højresiden er en funktion af  $\mathbf{x}_0$  idet  $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}'_0$ .

$T_k$  lader sig let udtrykke ved sandsynlighedsfordelingen  $p$ . Først defineres

$$p_k(\tilde{\mathbf{x}}_k) = \int d\mathbf{x}_{k+1} \cdots d\mathbf{x}_l p(\mathbf{x}) \quad (2.30)$$

Dvs.  $p$  restrikeret til  $\tilde{\mathbf{x}}_k$ . Hermed er den normerede sandsynlighed for, fra en position  $\tilde{\mathbf{x}}_{k-1}$ , at observere koordinaterne  $\mathbf{x}_k$  givet ved  $p_k(\tilde{\mathbf{x}}_k)/p_{k-1}(\tilde{\mathbf{x}}_{k-1})$ , men dette lyder bekendt, og det er derfor nærliggende at *definere*

$$T_k(\mathbf{x}_k | \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}) \equiv \frac{p_k(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{p_{k-1}(\tilde{\mathbf{x}}_{k-1})} \quad (2.31)$$

Og det er let at se ved indsættelse af 2.31 i 2.29 at detaljeret balance er opfyldt.

Situationen nu minder om den for den normal Metropolis metode: Problemet er formuleret som nogle transitionssandsynligheder, som er *upraktiske* faktisk at udregne. Det viser sig dog, at det ikke er nødvendigt at udregne integralet i 2.30.

Alt dette er meget notationstungt og virker som unødvendigt arbejde, men antag at det er muligt at bestemme *tilnærmelser*  $p_k^{TI}$  og  $T_k^{TI}$  til  $p_k$  hhv.  $T_k$ , hvorom det

eneste krav er at  $p_l^{TI} = p_l = p$ , hvor det sidste lighedstegn følger af definitionen 2.30.

I lighed med 2.28 skrives sandsynligheden for at sample fra niveau  $k - 1$  til  $k$  som

$$T_k^{TI}(\mathbf{x}_k | \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}) A_k(\tilde{\mathbf{x}}_k)$$

Her er  $T_k^{TI}$  sandsynligheden for at *vælge* koordinaterne  $\mathbf{x}_k$  i tilstand  $\tilde{\mathbf{x}}_k$  og spiller hermed samme rolle som  $D$  i 2.28 og  $A_k(\tilde{\mathbf{x}}_k)$  sandsynligheden for at acceptere de nye koordinater  $\mathbf{x}_k$ . Nu foretages følgende *valg* af  $A_k$

$$A_k(\tilde{\mathbf{x}}_k) \equiv \min \left[ 1, \frac{T_k^{TI}(\mathbf{x}_k | \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}) p_k^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}'_k) p_{k-1}^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}_{k-1})}{T_k^{TI}(\mathbf{x}'_k | \tilde{\mathbf{x}}'_{k-1}) p_k^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}_k) p_{k-1}^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}'_{k-1})} \right] \quad (2.32)$$

Hermed bliver den samlede sandsynlighed for at gå fra koordinater  $\mathbf{x}$  til  $\mathbf{x}'$  fra 2.29

$$T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \prod_{k=1}^l T_k^{TI}(\mathbf{x}'_k | \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}) A_k(\tilde{\mathbf{x}}'_k)$$

Denne ses vha. 2.32 at opfylde kravet om detaljeret balance 2.26, idet

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}) T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') &= \prod_{k=1}^l \left[ \frac{p_k^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{p_{k-1}^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}_{k-1})} T_k^{TI}(\mathbf{x}'_k | \tilde{\mathbf{x}}'_{k-1}) A_k(\tilde{\mathbf{x}}'_k) \right] \\ &= \prod_{k=1}^l \left[ \frac{p_k^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}'_k)}{p_{k-1}^{TI}(\tilde{\mathbf{x}}'_{k-1})} T_k^{TI}(\mathbf{x}_k | \tilde{\mathbf{x}}_{k-1}) A_k(\tilde{\mathbf{x}}_k) \right] \\ &= p(\mathbf{x}') T(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) \end{aligned}$$

og vil hermed, automatisk, sample den korrekte sandsynlighedsfordeling som bemærket tidligere, *så godt som uafhængigt* af godheden af  $T_k^{TI}$  og  $p_k^{TI}$ , så længe de ikke er valgt helt umulige, dvs. alle konfigurationer skal kunne nås etc; en reduktion af godheden vil kun betyde et større antal afslag fra  $A_k$ . Under brug af 2.31 er det en overskuelig opgave at se, at hvis  $T_k$  og  $p_k$  indsættes i  $A_k$  vil  $A_k = 1$ , helt som forventet.

### 2.3.2 Mange-Niveau Metropolis og Lévy-konstruktionen

I foregående afsnit blev Mange-Niveau Metropolis reduceret til at bestemme dels valget af opdelingen af koordinater  $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_l$  og tilnærmelserne  $T_k^{TI}$  og  $p_k^{TI}$ . Dette vil blive behandlet i dette afsnit ved hjælp af en metode kaldet *Lévy-konstruktionen*.

Først forklares valget af  $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_l$ . Antag  $l$  givet. Nu udvælges en tilfældig partikel og en tilfældig perle hørende til en tidsflade. Tidsfladerne antages nummereret således, at det svarer til den 0te tidsflade, og hermed har perlen koordinater  $\mathbf{r}_0$  idet partikelkoordinaten udelades. Vi kalder  $\mathbf{r}_0$  for *startpunktet* og  $\mathbf{r}_{2^l}$  for *slutpunktet*. Nu udvælges midterpunktet,  $\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_{2^l-1}$ , og  $\mathbf{x}_1$  defineres til  $\mathbf{x}_1 = \{\mathbf{r}_m\}$ . Koordinaterne for  $\mathbf{r}_m$  opdateres ved

$$\mathbf{r}'_m \leftarrow \frac{\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_{2^l}}{2} + \eta_l \quad (2.33)$$

Hvor  $\eta_l$  er en perturbation. Nu starter algoritmen forfra på hver af de to stykker af perlekæden, nemlig  $\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_m$  og  $\mathbf{r}_m, \dots, \mathbf{r}_{2^l}$ , og der konstrueres 2 nye midtpunkter således at  $\mathbf{x}_2 = \{\mathbf{r}_{2^{l-2}}, \mathbf{r}_{3 \cdot 2^{l-2}}\}$  og algoritmen forsætter på de nu 4 endestykker indtil  $k$  når  $l$ . Hermed vil hvert  $\mathbf{x}_k$  for  $k > 0$  indeholde  $2^{k-1}$  elementer og  $\mathbf{x}_0$  indeholde alle de resterende inklusive  $\mathbf{r}_0$  og  $\mathbf{r}_{2^l}$ . Algoritmen er sammenfattet i Algoritme 2.

I figur 2.1 er der givet et eksempel på, hvordan algoritmen udvælger og nummererer delpunkterne for  $l = 3$ . Her er det antaget, at  $\eta_l = 0$ .

---

**Algorithm 2** LEVY( $l, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{2^l}$ )

---

**Require:** En startposition  $\mathbf{r}_0$  og en slutposition  $\mathbf{r}_{2^l+1}$ .

**Ensure:** En følge  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{2^l})$  der forbinder dem.

- 1: **if**  $l > 0$  **then**
  - 2:    $r_m \equiv \mathbf{r}_{2^{l-1}} \leftarrow \frac{1}{2}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_{2^l}) + \eta_l$
  - 3:    $\mathbf{x}_l \leftarrow \mathbf{x}_l \cup \{\mathbf{r}_m\}$
  - 4:   LEVY( $l - 1, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_m$ )
  - 5:   LEVY( $l - 1, \mathbf{r}_m, \mathbf{r}_{2^l}$ )
  - 6: **end if**
- 

**Bestemmelse af  $p^{\text{TI}}_k$  og  $T^{\text{TI}}_k$** 

Opgaven er at finde en tilnærmelse til

$$p_k(\tilde{\mathbf{x}}_k) = \int d\mathbf{x}_{k+1} \cdots d\mathbf{x}_l p(\mathbf{x})$$

Husk at  $\mathbf{x}_k$  er en mængde af positioner for en bestemt partikel  $n$  ved givne timeslices, helt eksplecit, og hvis den oprindelige partikels index  $n$  medtages, bliver

$$\mathbf{x}_k = \{\mathbf{r}_{n, 2^{l-k}(1+2m)} \mid m = 0, \dots, 2^{k-1} - 1\}$$

Det anbefales at konsultere figur 2.1 for rigtigheden af dette udtryk. Dette bruges til at konstruere mængder af *fulde* konfigurationer af systemet

$$\mathbf{x}_k^f \equiv \{\mathbf{R}_{2^{l-k}(1+2m)} \mid m = 0, \dots, 2^{k-1} - 1\}$$

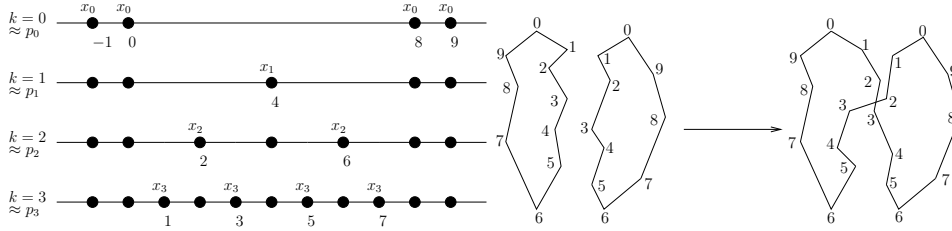
Og ud fra dette tilnærmes 2.30 med

$$\begin{aligned} p^{\text{TI}}_k(\tilde{\mathbf{x}}_k) &\equiv \int d\mathbf{x}_{k+1}^f \cdots d\mathbf{x}_l^f p(\mathbf{x}) \\ &= \prod_{m=0}^{2^k-1} \rho(\mathbf{R}_{2^{l-k}m}, \mathbf{R}_{2^{l-k}(m+1)}, 2^{l-k}\tau) \prod_{m=2^l}^M \rho(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_{m+1}, \tau) \end{aligned} \quad (2.34)$$

og som før tilnærmes hvert led med Chin-tilnærmelsen. Hermed kan transitionssandsynligheden  $T_k = p_k/p_{k-1}$  tilnærmes

$$\begin{aligned} T^{\text{TI}}_k(\tilde{\mathbf{x}}_k) &= \frac{p^{\text{TI}}(\tilde{\mathbf{x}}_k)}{p^{\text{TI}}(\tilde{\mathbf{x}}_{k-1})} \\ &= \frac{\prod_{m=0}^{2^k-1} \rho(\mathbf{R}_{2^{l-k}m}, \mathbf{R}_{2^{l-k}(m+1)}, 2^{l-k}\tau)}{\prod_{m=0}^{2^{k-1}-1} \rho(\mathbf{R}_{2^{l-k+1}m}, \mathbf{R}_{2^{l-k+1}(m+1)}, 2^{l-k+1}\tau)} \\ &= \prod_{m=0}^{2^{k-1}-1} \frac{\rho(\mathbf{R}_{2^{l-k}2m}, \mathbf{R}_{2^{l-k}(2m+1)}, 2^{l-k}\tau) \rho(\mathbf{R}_{2^{l-k}(2m+1)}, \mathbf{R}_{2^{l-k}(2m+2)}, 2^{l-k}\tau)}{\rho(\mathbf{R}_{2^{l-k+1}m}, \mathbf{R}_{2^{l-k+1}(m+1)}, 2^{l-k+1}\tau)} \end{aligned}$$

Bemærk at  $\mathbf{R}_{2^{l-k}(2m+1)} \in \mathbf{x}_k^f$  og transitionssandsynligheden netop ønskes bestemt for disse koordinater. Hermed er den totale sandsynlighed for en konfiguration  $\mathbf{x}_k$  givet (i denne tilnærmelse) som produktet af sandsynligheder for placering af de enkelte perler i  $\mathbf{x}_k$ . Det er dog ønskværdigt at forsimple udtrykket yderligere. Antag, at der ikke er nogen interaktion, og definer  $s \equiv 2^{l-k+1}m$ ,  $t \equiv 2^{l-k}(2m+1)$  og  $e \equiv 2^{l-k+1}(m+1)$ , hermed kan transitionssandsynligheden for et enkelt koordinat



Figur 2.1: Placering af delkoordinater for Figur 2.2: Permuteringstræk, hvori to ver-  
 $l = 1$  samt hvilke mængder  $\mathbf{x}_k$  de vil blive denslinier indgår. Tidskoordinaten er angivet med tal. I notationen i opgaven er  $M = 10$  og tidskoordinaten  $m = 1$  er udvalgt. To  $l = 2$  Lévy-konstruktion foregår imellem de to verdenslinier.

$\mathbf{r}_t$  under brug af 2.10 tilnærmes med

$$\begin{aligned}
 T^{\text{TI}}_k(\mathbf{r}_t) &\equiv \frac{\rho_0(\mathbf{R}_s, \mathbf{R}_t, 2^{l-k}\tau)\rho_0(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_e, 2^{l-k}\tau)}{\rho_0(\mathbf{R}_s, \mathbf{R}_e, 2^{l-k+1}\tau)} \\
 &= \frac{(4\pi\lambda 2^{l-k}\tau)^{-d} \exp\left[-\frac{(\mathbf{R}_t - \mathbf{R}_s)^2 + (\mathbf{R}_t - \mathbf{R}_e)^2}{4 \cdot 2^{l-k}\tau\lambda}\right]}{(4\pi\lambda 2^{l-k+1}\tau)^{-d/2} \exp\left[-\frac{(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_e)^2}{4 \cdot 2^{l-k+1}\tau\lambda}\right]} \\
 &= (\pi\lambda 2^{l-k+1}\tau)^{-d/2} \exp\left[-\frac{(\mathbf{R}_t - \mathbf{R}_m)^2}{2^{l-k+1}\tau\lambda}\right] \quad (2.35)
 \end{aligned}$$

Hvor  $\mathbf{r}_m = (\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_s)/2$ . Altså blot en gaussisk fordeling med varians  $\sqrt{2^{l-k}\lambda\tau}$

## 2.4 Sampling af bosoner

I de foregående afsnit er teorien blevet udviklet under den antagelse, der er at gøre med ikke-identiske partikler. Denne antagelse er naturligvis ikke korrekt, og dette kapitel vil blive brugt til at behandle identiske partikler. Først defineres en permutation af partikkelkoordinaterne  $\mathcal{P}$  ved

$$\mathcal{P}\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}_{P(1)}, \mathbf{r}_{P(2)}, \dots, \mathbf{r}_{P(N)}) \quad (2.36)$$

Hvor  $P: \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \{1, 2, \dots, N\}$  er bijektiv. Antag systemet er beskrevet ved en bølgefunktion  $\Psi$ . Det er nu en imperisk kendsgerning, at alle bølgefunktioner er enten fuldstændigt symmetriske eller antisymmetriske ved ombytning af partikler, dvs.

$$\Psi_{B/F}(\mathbf{R}) = (\pm 1)^{\mathcal{P}} \Psi_{B/F}(\mathcal{P}\mathbf{R})$$

De partikler der beskrives ved fuldstændigt symmetriske bølgefunktioner kaldes *bosoner* og dem der beskrives ved fuldstændigt antisymmetriske bølgefunktioner *fermioner*. Vi vil i det følgende se, hvorledes minuset for fermioner gør dem umulige at regne på med de metoder der beskrives her uden modifikationer; dette problem kaldes *fermion fortegns problemet*.

Denne symmetriegenskab kan blive realiseret ved at anvende symmetrisering eller antisymmetriseringsoperatoren på en bølgefunktion for forskellige partikler  $\Psi_D$

$$\Psi_{B/F}(\mathbf{R}) = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{\mathcal{P}} \Psi_D(\mathcal{P}\mathbf{R})$$



Tæthedsmatricen konstrueret ud fra disse tilstande får udseendet

$$\rho_{B/F}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{\mathcal{P}} \rho(\mathbf{R}_1, \mathcal{P} \mathbf{R}_2, \beta)$$

Og  $\mathcal{Z}$  bliver hermed for bosoner

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \int d\mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, \mathcal{P} \mathbf{R}, \beta) \\ &= \int d\mathbf{X} \prod_{m=1}^{M-1} \rho_0(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \tau) \rho_0(\mathbf{R}_{M-1}, \mathcal{P} \mathbf{R}_0, \tau) e^{-U(\mathbf{X})} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$U(\mathbf{X})$  ændrer sig ikke ved at det sidste koordinatsæt permuteres, idet  $U$  antages symmetrisk i hver tidsflade.

I polymerbilledet kan tilføjelsen af permutationer fortolkes som følger: Identitetspermutationen svarer til  $N$  kæder med  $M$  perler præcis som før, men hvis nu to partikler, 1 og 2 permuteres sker følgende illustreret i figur 2.2: i stedet for at koordinaten  $\mathbf{r}_{1,M-1}$  forbindes med  $\mathbf{r}_{1,0}$ , så vil den, via det sidste  $\rho_0$ -led, forbindes med  $\mathbf{r}_{2,0}$ , som igen er forbundet med  $\mathbf{r}_{2,1}, \dots, \mathbf{r}_{2,M-1}$  der igen er forbundet med  $\mathbf{r}_{1,0}$ . Hermed fås et system bestående af  $N - 1$  perlekæder, de  $N - 2$  med længde  $M$ , og den sidste med længde  $2M$ .

Tilstedeværelsen af ikke-identitetspermutationer svarer således til, at kæderne klistres sammen til kæder af længde  $kM$ , i så mange kæder at der hele tiden er netop  $NM$  perler i systemet.

En tilstand hvor verdenslinierne er sat sammen vil kaldes en *mangepartikkeludveksling*, eller en *n-partikkeludveksling* hvis netop  $n$  partikler indgår, og systemet vil siges at befinde sig i en *permuteret* tilstand.

I 2.37 er permutationen placeret ved sidste koordinat, men inspektion af 2.37 viser, at der ikke er noget særligt ved denne koordinat - hvilket også er oplagt ud fra polymerisomorfien. Derfor, når tilstandsrummet samples, kan permutation af partiklerne foregå på vilkårlige tidsflader. Så længe detaljeret balance er opfyldt vil det at tillade permutationer på alle tidsflader blot øge ergodisiteten af samlingen.

### 2.4.1 Regler for sampling af bosoner

Samlingen af bosoner kan realiseres ved følgende udvidelse af Lévy-konstruktionen. Først vælges et antal partikler,  $k$ , som skal indgå i en permutationsudveksling.  $k = 1$  svarer til at ingen udveksling finder sted. Herefter udvælges  $k$  partikler  $i_1, \dots, i_k$  fra tidsfladen  $m$  med koordinaterne  $(\mathbf{r}_{i_1 m}, \mathbf{r}_{i_2 m}, \dots, \mathbf{r}_{i_k m})$  og en permutation  $\mathcal{P} : \{1, 2, \dots, k\} \mapsto \{1, 2, \dots, k\}$ , og der udføres  $k$  Lévy-konstruktioner mellem partikelparene

$$\mathbf{r}_{i_1 m} \text{ og } \mathbf{r}_{i_{\mathcal{P} 1} m'}, \dots, \mathbf{r}_{i_k m} \text{ og } \mathbf{r}_{i_{\mathcal{P} k} m'}$$

Hvor  $m' = m + 2^l$ . Det skal her forstås, at hver af endekoordinaterne, dvs. dem i tidsflade  $m$  og  $m'$  ej flyttes, og Lévy-konstruktionen foregår på de mellemliggende tidsflader. En sådan konstruktion mellem to partikler er foretaget i figur 2.2, her er  $m = 1$  udvalgt og  $l = 2$ .

Denne udvidelse opfylder automatisk detaljeret balance: Transitionssandsynligheden for den samlede  $k$ -konstruktion er produktet af transitionssandsynligheden for hver af de enkelte konstruktioner ganget med sandsynligheden for, at der udvælges netop  $k$  partikler, ganget med sandsynligheden for der udvælges den valgte permutation af de  $k$  partikler. De sidste to størrelser vil være faste, og da en given  $k$ -konstruktion kun kan gøres om ved en anden  $k$ -konstruktion vil de divideres, ud når detaljeret balance udregnes.

## 2.5 Estimatorer

Efter at have beskrevet metoder til at sample tilstandssummen  $\mathcal{Z}$ , er det åbenlyse spørgsmål hvorledes thermodynamiske størrelser, som fx. energi, kan bestemmes af den, og det er netop målet for dette afsnit. Heri vil en metode til at bestemme en fysisk målbar størrelse (typisk energi) fra en PIMC-sampling af tilstandssummen blive kaldt en *estimator*. I det følgende vil estimatorer for 4 thermodynamiske størrelser, energien  $E$ , den kinetiske energi  $K$  og den potentielle energi  $U$  og endeligt varmekapaciteten  $C_V$  blive udledt.

Det er vigtigt at holde sig for øje, at der er flere forskellige typer estimatorer som måler samme størrelse, alle konvergerende mod den korrekte værdi i grænsen af uendeligt mange tidsflader og samplings, og valget mellem de forskellige estimatorer skal ske efter selve situationen og vanskeligheden ved at implementere en given estimator, se [5] og kørselsresultaterne.

### 2.5.1 Energiestimatorer

Det er velkendt at den totale energi kan findes ved at differentiere logaritmen af tæthedsmatricen efter temperaturen. Det giver af 2.5

$$\langle E \rangle = -\frac{d \ln \mathcal{Z}}{d\beta} = \int d\mathbf{X} \frac{d}{d\beta} \frac{\prod_{m=1}^M \rho(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \tau)}{|\mathcal{Z}|} \quad (2.38)$$

Hvor der med  $|\mathcal{Z}|$  menes *tallet*  $\mathcal{Z}$ , og den skal hermed *ikke* differentieres. Men sandsynlighedsfordelingen givet ved produktet af  $\rho$ -funktionerne er netop hvad Metropolis Algoritme vil sample, og hermed kan energien bestemmes, ved at differentiere de enkelte  $\rho$ -udtryk samlet ved hjælp af Metropolis Algoritme. Ved at udføre differentiationen bliver energien i hvert målepunkt

$$\langle E \rangle = -\frac{d \ln \mathcal{Z}}{d\beta} = \frac{dN}{2\tau} - \sum_{n,m} \frac{(\mathbf{r}_{n,m} - \mathbf{r}_{n,(m+1)})^2}{4\lambda\tau^2} + \sum_m \frac{dU(\mathbf{R}_m)}{d\tau} \quad (2.39)$$

Den kinetiske energi kan findes ved at differentiere mth. massen [5]

$$\langle K \rangle = -\frac{m}{\beta} \frac{d \ln \mathcal{Z}}{dm} = \frac{dN}{2\tau} - \sum_{n,m} \frac{(\mathbf{r}_{n,m} - \mathbf{r}_{n,(m+1)})^2}{4\lambda\tau^2} + \sum_m \frac{\lambda}{\tau} \frac{dU(\mathbf{R}_m)}{d\lambda}$$

Hvilket giver den potentielle energi som

$$\langle U \rangle = \langle E \rangle - \langle K \rangle = \sum_m \left[ \frac{dU(\mathbf{R}_m)}{d\tau} - \frac{\lambda}{\tau} \frac{dU(\mathbf{R}_m)}{d\lambda} \right]$$

Estimatorerne skal således forstås, som at de måler en størrelse i de enkelte konfigurationer. Hermed findes den ønskede størrelse ved at midle over et stort antal målinger af estimatorerne, hvor de enkelte målingers hyppighed er bestemt ved hjælp af Metropolis Algoritme.

### 2.5.2 Varmekapacitetsestimator

Der er flere måder at bestemme varmekapaciteten, se [8] for en gennemgang. I denne opgave forsøges den enkleste, nemlig hvor  $C_V = \partial U / \partial T$ . Det er dog ikke tilstrækkeligt blot at differentiere 2.39, idet den kun udgør et udtryk der skal integreres op over sandsynlighedsfordelingen givet ved  $\mathcal{Z}$ . Derimod skal 2.38 differentieres (uden fastholdt  $\mathcal{Z}$ ), hvilket efter en række udregninger giver

$$\langle C_V \rangle = k_B \beta^2 \left[ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 - \left\langle \frac{\partial E}{\partial \beta} \right\rangle \right]$$

Hvor der med  $E$  forstås værdien af estimatoren for den totale energi i den givne konfiguration.

## 2.6 Sammenfatning

De systemer der her vil blive behandlet vil være gasser, det er derfor fordelagtigt, at anvende periodiske randbetingelser. Den mængde af information der derfor er nødvendig for en PIMC-simulering er således: Antallet af partikler, densiteten (til at bestemme størrelsen af de periodiske randbetingelser), partiklernes potentiale og første afledede af potentialet og endeligt temperaturen.

Herudfra vælger fysikeren antallet af tidsflader, typisk ud fra et krav om tilnærmelserne til tæthedsmatricen bliver gjort ved en bestemt temperatur, fx.  $\tau = 150K$ , hvilke estimatorene der skal bruges og hvor lang tid simuleringen skal foregå. Herefter køres et større Mange-Niveau Metropolis - samplinger (eller *skridt* i det følgende), og estimatorerne anvendes, hvorefter simuleringen kører i ring. Årsagen til de mange Lévy-Konstruktioner er, at systemet bør perturberes over i tilstande som ligger langt fra hinanden i konfigurationsrummet, således at estimatorerne foretager ukorrigerede målinger. For mange partikler kræver det stor tålmodighed.

Alle disse ting er implementeret i programmeringssproget `java`. Programmet er at finde på <http://www.kubusnet.dk/bachelor/>. Der er blevet gjort tests på udregningerne af virkningen, på om periodiske randbetingelser er opretholdt, og en Lévy-konstruktion for  $l = 2$  er blevet explicit gennemført i hånden og i programmet, og resultaterne er blevet sammenlignet til sidst. Datastrukturen er blevet afprøvet explicit, og programmet er blevet grundigt optimeret over  $1\frac{1}{2}$  uge ved hjælp af en profiler.

Dobbeltkommutatoren  $\mathcal{V}$  fra Chin-tilnærmelsen er blevet omskrevet fra at blive udregnet med en tidskomplexitet af  $\mathcal{O}(N^3)$  til  $\mathcal{O}(N)$ , dette er dokumenteret i Appendix B og er strengt nødvendigt for alle programmører der vil bruge Chin-tilnærmelsen. Potentialet og dets afledte extrapoleres med  $10^5$  førstegradspolynomier, og datastrukturen er optimeret til at køre med konstant hukommelsesforbrug. Tidskomplexiteten af hvert Monte-Carlo skridt er kun  $\mathcal{O}(N)$ .

Alle forsøgsdata gemmes i en central `PostgreSQL` database, det betyder, at udregningerne *uden* spild kan distribueres ud på vilkårligt mange computere, såfremt disse computere har internetadgang. Eksterne programmer kobler sig så til den centrale database og genererer plots, etc. asynkront i forhold til beregningerne. Der er skrevet diverse visualiseringsværktøjer af verdenslinierne, og billeder heraf kan ligeledes ses i Appendix C samt i figur 4.4. Det samlede antal linier kode i forbindelse med dette projekt (heri medtages ikke kode der er blevet smidt væk undervejs) beløber sig til godt  $10'000$  linier eller mere end  $300'000$  tegn.

Programmet kan på [kubusnet.dk](http://kubusnet.dk) findes i filen `program.tar.gz`, og mange af artiklerne fra litteraturlisten som `litteratur.tar.gz`, ligesom dette arbejde også kan findes elektronisk som `pimc.pdf`.

## Kapitel 3

# Superfluiditet

Et af hovedmålene med denne opgave er at vise, hvorledes PIMC-metoder kan bruges til at simulere superfluiditet i  $^4\text{He}$ . Det vil ikke være komplet uden en beskrivelse af superfluiditet som fænomen, hvilket også er nødvendigt for at diskutere de praktiske vanskeligheder der opstår i forbindelse med simulering af superfluiditet

### 3.1 Teoretisk Behandling

Hvis man fylder en spand med vand og begynder at dreje den med konstant hastighed, vil væsken også begynde at rotere så det bevæger sig rundt med samme rotationshastighed som spandens kant. Arbejdet nødvendigt for at bringe væsken i bevægelse er  $E = \frac{1}{2}I\omega^2$  hvor  $I$  er inertimomentet og  $\omega$  den angulære hastighed. For en superflydende væske er billedet dog anderledes; hvis spanden bringes i bevægelse langsomt vil væsken ikke begynde at rotere i forhold til laboratoriet, således at det synes som om væsken har lavere inertimoment. Forholdet mellem den klassiske (forventede) inertimoment  $I_c$ , og det faktiske inertimoment,  $I$ , definerer den *superflydende densitet*  $\rho_S$  igennem

$$\frac{\rho_S}{\rho} = 1 - \frac{I}{I_c} \quad (3.1)$$

Og den *normale densitet* af væsken ved  $\rho_S + \rho_N = \rho$ . Projektet er nu, igennem et tankeeksperiment, at knytte  $\rho_S$  til en størrelse kaldet *Windingtallet* der er let at beregne ud fra PIMC-maskineriet beskrevet i de foregående afsnit.

Det vil ske igennem følgende skridt, først knyttes den superfluide densitet til den frie energi af et system i bevægelse, hernæst vises det, hvorledes tæthedsmatricen af et stillestående system kan knyttes til tæthedsmatricen af et system i bevægelse igennem igennem særlige randbetingelser, og disse randbetingelser tillader endeligt formulering af en estimator for den superfluide densitet, *Windingestimatoren*.

Betragt et system af en væske som befinder sig imellem to cylindere af radius  $R$  og  $R + d$  som begge roterer med angulær hastighed  $\omega$ . Hvis centrifugale effekter ignoreres er systemet ækvivalent med et 2-dimensionelt system givet ved to plader, som hver bevæger sig retlinet med hastighed  $v = R\omega$  i forhold til laboratoriet, og er periodisk i en dimension med perioden  $2\pi R = L$ . Det er dog fordelagtigt at behandle systemer periodisk i flere dimensioner, og systemet antages derfor periodisk i  $d$  dimensioner. For 2 dimensioner vil sådanne randbetingelser svare til en doughnut, og for 3 en tilvarende 4-dimensionel topologi.

Den superflydende densitet i et sådan system svarer til den del af væsken der ikke bidrager til ændringen af impulsen, dvs. 3.1 bliver

$$\frac{\rho_N}{\rho} \hat{\mathbf{P}}_c = \hat{\mathbf{P}}_m \quad (3.2)$$

Hvor  $\hat{\mathbf{p}}_c$  er den klassiske forventede impuls og  $\hat{\mathbf{p}}_m$  er den målte impuls. Hamiltonen for dette system er, i væggenes koordinater, givet ved

$$\mathcal{H}' = \sum_{n=1}^N \frac{(\hat{\mathbf{p}}_n - m \mathbf{v})^2}{2m} + \mathcal{V}$$

Med tilhørende tæthedsmatrice

$$\rho' = e^{-\beta \mathcal{H}'} \quad (3.3)$$

Men tæthedsmatricen i væggenes referencesystem og tæthedsmatricen i laboratoriesystemet må være den samme, idet tæthedsmatricen kun er et udtryk for hvilke tilstande der er besatte som nødvendigvis må være ens. Tæthedsmatricen i laboratoriesystemet angives med  $\rho_v$ , og altså må  $\rho_v = \rho'$ .

Dette kan bruges i definitionen af  $\rho_S$  fra 3.2. Her vil den faktiske impuls være  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_v$  og den klassiske  $Nm \mathbf{v}$ , dvs.

$$\frac{\rho_N}{\rho} Nm \mathbf{v} = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_v = \frac{\text{tr}[\hat{\mathbf{p}} \rho_v]}{\text{tr}[\rho_v]} \quad (3.4)$$

Bemærk nu at

$$\frac{d \mathcal{H}'}{d \mathbf{v}} = \sum_{n=1}^N -[\hat{\mathbf{p}}_n - m \mathbf{v}] = -\hat{\mathbf{p}} + Nm \mathbf{v}$$

Og hermed

$$\frac{d}{d \mathbf{v}} \rho_v = (-\beta)(-\hat{\mathbf{p}} + Nm \mathbf{v}) \rho_v$$

Ved indsættelse kan 3.4 nu omskrives til

$$\frac{\rho_N}{\rho} Nm \mathbf{v} = \frac{d}{\beta d \mathbf{v}} \ln \text{tr}[\rho_v] + Nm \mathbf{v} \quad (3.5)$$

Den fri energi  $F_v$  er defineret ved  $e^{-\beta F_v}$ , Under brug af  $\partial/\partial(\frac{1}{2}m \mathbf{v}^2) = 1/(m \mathbf{v})\partial/\partial \mathbf{v}$  bliver 3.5

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{1}{N} \frac{\partial F_v}{\partial(\frac{1}{2}m \mathbf{v}^2)} \quad (3.6)$$

Dette er så at sige første del af programmet: Den dynamiske størrelse  $\rho_S$  er blevet udtrykt ved den termodynamiske størrelse  $F_v$ . Næste del af programmet bliver at vise, hvorledes  $F_v$  kan beregnes ved hjælp af det stillestående system.

Hvert element af tæthedsmatricen  $\rho_v$  fra 3.3,  $\rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)$  opfylder en Bloch-ligning

$$-\frac{\partial \rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)}{\partial \beta} = \left[ \frac{1}{2m} \sum_{m=1}^M (-i\hbar \nabla_m - m \mathbf{v})^2 + \mathcal{V} \right] \rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \quad (3.7)$$

Med periodiske randbetingelser. Periodiske randbetingelser betyder, at hvis der adderes en latticevektor  $\mathbb{L} = L(i, j, k)$  hvor  $i, j, k$  er heltal og  $L$  længden af de periodiske randbetingelser, til en af koordinaterne i  $\mathbf{R}'$ , vil der for den fremkomne vektor  $\mathbf{R}'' = (\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_i + \mathbb{L}, \dots, \mathbf{r}'_N)$  gælde at  $\rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}'', \beta) = \rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)$ .

Nu defineres  $\rho_s$  ud fra  $\rho_v$  ud fra følgende konstruktion

$$\rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = \exp \left[ \frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \sum_{m=1}^M (\mathbf{r}_m - \mathbf{r}'_m) \right] \rho_s(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \quad (3.8)$$

Indsættes 3.8 i 3.7 ses det at  $\rho_s$  opfylder Bloch-ligningen for stationære vægge

$$-\frac{\partial \rho_s(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)}{\partial \beta} = \left[ \frac{1}{2m} \sum_{m=1}^M (-i\hbar \nabla_m)^2 + \mathcal{V} \right] \rho_s(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \quad (3.9)$$

Men nu til en vigtig pointe,  $\rho_s$  opfører sig *anderledes* under periodisk translation i  $\mathbf{L}$ . Helt specifikt giver 3.8

$$\rho_s(\mathbf{R}, \mathbf{R}'', \beta) = \exp \left[ \frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \mathbf{L} \right] \rho_s(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \quad (3.10)$$

Hermed er det muligt at beregne det roterende system specificeret ved  $\rho_v$  ved tæthedsmatricen for det stationære system givet ved  $\rho_s$ , så længe der inkluderes en vægtfaktor specificeret ved fasen i 3.10 De tilstande der skal have ovenstående fasefaktor tilføjet er netop dem som slutter - ikke hvor de starter - men i et punkt forskudt med *latticevektoren*  $\mathbf{L}$ . En måde at holde styr på dette er ved at definere *Windingtallet* igennem

$$\mathbf{W} L \equiv \sum_{n=1}^N \int_0^\beta dt \left[ \frac{d\mathbf{r}_n(t)}{dt} \right] = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M P(\mathbf{r}_{n,m} - \mathbf{r}_{n,m-1}) \quad (3.11)$$

Hvor det første udtryk er grænsen  $m \rightarrow \infty$  af det sidste. Udtrykket forstås som, at hver af koordinaterne  $\mathbf{r}_{n,m}$  lever i et rum med periodiske randbetingelser, og  $P$  sørger for at ingen vektor vil bevæge sig uden for dette rum. Man kan eksempelvis tænke sig et system i to dimensioner med sidelængde  $L = 10$  placeret om origo. Hvis nu

$$\mathbf{r}_{n,m} = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{og} \quad \mathbf{r}_{n,m-1} = \begin{bmatrix} -4 \\ 0 \end{bmatrix}$$

vil den virkelige afstand imellem dem være  $(-2, 0)$ , men i tal  $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}_{n,m} - \mathbf{r}_{n,m-1} = (8, 0)$ . Det er hvad  $P$  funktionen retter op på, den noterer at  $\Delta \mathbf{r}$  ligger uden for den periodiske box, og adderer en vektor  $(-L, 0)$  således at resultatet ligger indenfor igen. Med andre ord skal summen i 3.11 modificeres og der skal adderes en vektor  $(-L, 0)$ , med det resultat at  $\mathbf{W} = (-1, 0)$  (forudsat at de andre mellemliggende vektorsekvenser alle ligger inde i boxen).

Windingtallet er således blot en måde at holde styr på dels i hvilken retning en perlekæde vikler sig rundt om systemet (i periodisk forstand), og dels hvor mange gange. Nu er al maskineriet på plads. Rækkeudvikling af udtrykket for den fri energi fra 3.6 giver

$$\frac{\Delta F_v}{N} \approx \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \frac{\rho_s}{\rho} \quad (3.12)$$

Ændringen af den fri energi  $\Delta F_v = F_v - F_{v=0}$  ved en infinitesimal ændring i omdrejningshastigheden findes igennem

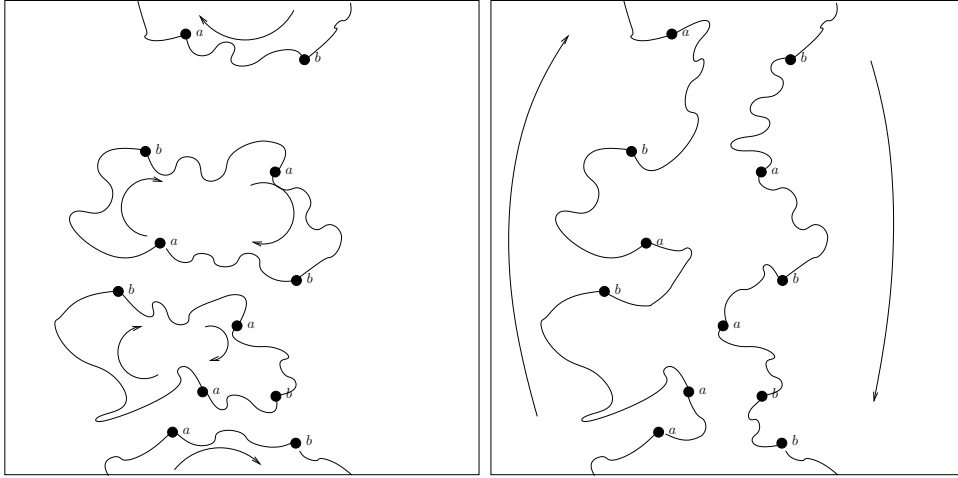
$$e^{-\beta \Delta F_v} = \frac{e^{-\beta F_v}}{e^{-\beta F_{v=0}}} \quad (3.13)$$

Ledet i tælleren udregnes ved hjælp af 3.8

$$\int d\mathbf{R} \rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}, \beta) = \int d\mathbf{R}_1, \dots, d\mathbf{R}_M \prod_{m=1}^M \rho_s(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_{m+1}, \tau)$$

Men hver gang periodiske randbetingelser anvendes, vil der af 3.10 skulle ganges et led  $\exp \left[ \frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \mathbf{L} \right]$  på udtrykket, men dette stykke information kan netop beskrives ved Windingtallet, således at

$$\int d\mathbf{R} \rho_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}, \beta) = \int d\mathbf{R}_1, \dots, d\mathbf{R}_M \exp \left[ \frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \mathbf{W} \right] \prod_{m=1}^M \rho_s(\mathbf{R}'_m, \mathbf{R}'_{m+1}, \tau)$$



Figur 3.1: Konfiguration med 3 partikler Figur 3.2: Samme figur efter 3 to-i periodiske randbetingelser. 12 perler er partikels-udvekslinger. Der er to partikel-udvalgt til permutation, indikeret med  $a$  baner som omspænder systemet, men idet og  $b$ . Pilene angiver den imaginære tids de er modsat rettet er  $\mathbf{W}$  stadig 0 retning.

Hvor de mærkede koordinater indikerer, at periodiske randbetingelser er brugt. Hermed bliver 3.13

$$\begin{aligned}
 e^{-\beta\Delta F_v} &= \frac{\int d\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_M e^{\frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \mathbf{W} L} \prod_{m=1}^M \rho_s(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_{m+1}, \tau)}{\int d\mathbf{R} \rho_s(\mathbf{R}, \mathbf{R}, \beta)} \\
 &= \langle e^{\frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \mathbf{W} L} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

hvor der midles over tæthedsmatricen som beskriver det stillestående system  $\rho_s$ . Ideen er nu, at rækkeudvikle udtrykket på højre side, alle ulige led må forsvinde idet de er imaginære, og hermed vil

$$\beta F_v = -\langle (\frac{im}{\hbar} \mathbf{v} \cdot \mathbf{W} L)^2 \rangle = \frac{m^2 L^2}{3\hbar^2} v^2 \langle \mathbf{W}^2 \rangle$$

Faktoren 1/3 kommer af, at hastigheden kan antages parallel med fx  $\hat{x}$  og hermed vil  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{W} = vW_x$ . Under brug af 3.12 bliver 3.14 således i  $d$  dimensioner

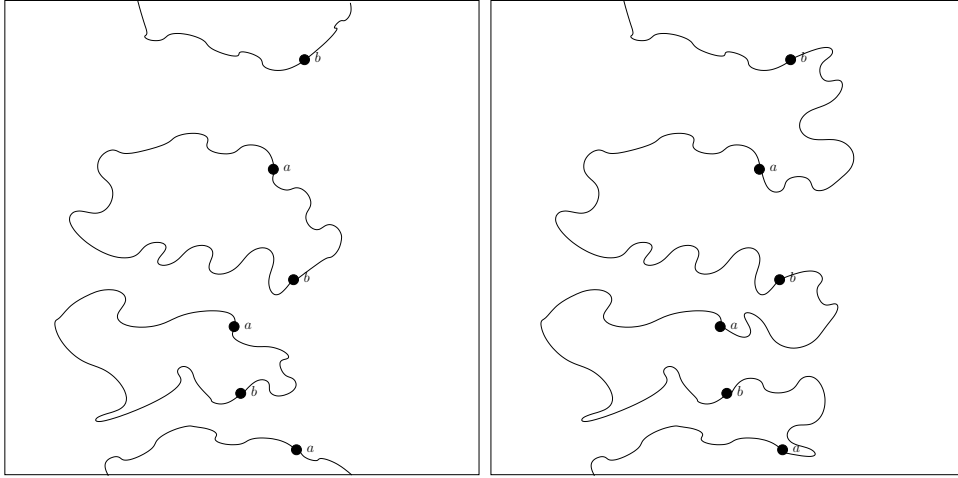
$$\boxed{\frac{\rho_S}{\rho} = \frac{m \langle \mathbf{W}^2 \rangle L^{2-d}}{\hbar^2 d \rho \beta}}$$

## 3.2 Sampling af Windingtallet

I sidste afsnit blev det anskueliggjort, hvorledes Windingtallet er knyttet til den superflydende densitet  $\rho_s$ , således at den superflydende densitet kan beregnes af den enkle estimator 3.11.

Men heri ligger dagens dårlige nyhed: opdateringer der kun involverer permutation af 1 og 2 partikler vil ikke være ergodiske i større systemer, med større forstås alle systemer større end et par partikler.

Årsagen er subtil, permutationer der involverer to partikler *vil* sample alle permutationer over tilstrækkelig lang tid, men ikke partikelkonfigurationer der omspænder hele systemet.



Figur 3.3: Konfiguration med 3 partikler i Figur 3.4: Samme figur efter 1 tre-periodiske randbetingelser. 6 perler er ud-partikels-udvekslinger. Der er nu kun een valgt til permutation, indikeret med  $a$  og partikelbane og hermed er  $\mathbf{W}$  øget med 1  $b$ . Pile angiver den imaginære tids retning.

Forskellen kan illustreres i følgende figurer. I figur 3.1 ses 3 partikler i et 2D system med periodiske randbetingelser. Der sker 3 permutationstræk imellem de markerede perler, og systemet ender som det i figur 3.2. Selvom der i denne figur er 2 baner der omspænder systemet, er det samlede windingtal stadig 0, idet de to baner er modsatrettede.

En permutationsudveksling hvor Windingtallet ændrer sig, er illustreret med samme system i figur 3.3 og 3.4, her sker en enkelt 3-partikels-udveksling, og der dannes en partikelbane som omspænder systemet, og Windingtallet ændres derfor med 1. Et billede fra kørslen af programmet hvor en tilstand som den i figur 3.4 optræder, er illustreret i figur 4.4.

De to eksempler skulle vise, at det er tvingende nødvendigt at have permutationstræk som involverer mange partikler for at sample alle konfigurationer. Uheldigvis vil acceptraten af sådanne træk være meget lille, der er ikke nogen garanti for at partiklerne ligger indenfor en afstand, hvor de kan forbindes. Det vil netop være målet for næste sektion at rette op på dette.

### 3.2.1 Øgning af Acceptraten for Mange-Partikel Permutationstræk

Fjedrenes udstrækning vil typisk have en størrelse så afstanden mellem to perler adskilt af  $s$  fjedre opfylder

$$\frac{(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{m+s-1})^2}{4s\lambda\tau} < \delta \quad (3.15)$$

hvor  $\delta$  er af størrelsesorden 1. Ideen er nu simpelthen at afvise alle træk hvor Lévykonstruktionen skal dække en afstand hvor 3.15 ikke gælder.

Dette gøres ved på forhånd at udvælge de  $k$  partikler der skal indgå i permutationsudvekslingen, således at de på forhånd opfylder kravet i 3.15 - det kræver naturligvis kendskab til permutationen, og derfor restrikeres til cykliske permutationer, dvs. permutationer  $C_k : i \mapsto (i + 1) \bmod k$ .

Algoritmen hertil er beskrevet detaljeret i programstumpen FILL som kan ses i Algoritme 3. Kort fortalt udvælges på forhånd en partikel  $n$  og et timeslice  $m$ , så ses



---

**Algorithm 3** FILL( $U$ )

---

**Require:**  $m \in [1, M]$ ,  $n \in [1, N]$  og antal partikler i permutationen,  $k$ . Kaldes som FILL( $U$ ) hvor  $U = \{\mathbf{r}_{n,m}\}$ .

**Ensure:** En mængde af partikler der kan indgå i permutationen og som opfylder 3.15, eller NULL hvis konstruktionen er umulig.

```
1:  $\mathbf{r}_{n',m} \leftarrow \text{LAST } U$ 
2: if  $|U| = k$  then
3:    $\mathbf{r}_{n_0,m} \leftarrow \text{FIRST } U$ 
4:   if  $\frac{(\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_{n_0,m+s-1})^2}{4s\lambda\tau} < \delta$  then
5:     return  $U$ 
6:   else
7:     return NULL
8:   end if
9: end if
10: for all  $n \in [1, N]$  do
11:   if  $(\mathbf{r}_{n,m} \notin U)$  og  $\left[ \frac{(\mathbf{r}_{n,m+s-1} - \mathbf{r}_{n',m})^2}{4s\lambda\tau} < \delta \right]$  then
12:      $U' \leftarrow U \setminus \{\mathbf{r}_{n,m}\}$ 
13:     if FILL( $U'$ )  $\neq$  NULL then
14:       return  $U'$ 
15:     end if
16:   end if
17: end for
18: return NULL
```

---

på alle andre perler  $\mathbf{r}_{n',m+s-1}$  og der undersøges om afstanden imellem  $\mathbf{r}_{n',m+s-1}$  og  $\mathbf{r}_{n,m}$  er for stor i forhold til  $\delta$ .

Hvis ikke, godtages denne perle, og der forsøges at vælge en ny på samme vis. Når  $k$  perler er valgt på denne måde ses det om den første kan forbindes med den sidste, og hvis ikke forsøges en ny konstruktion.

### 3.2.2 En Note om Detaljeret Balance

For  $k = 2$  vil  $C_k^{-1} = C_k$ , og detaljeret balance er næsten opfyldt. Det skal forstås, som i særtilfældet at  $\mathbf{r}_{1,m}$  udvælges, og FILL hernæst kaldet med  $\mathbf{r}_{1,m}$  perle som argument udvælger  $\mathbf{r}_{2,m}$ , er det kun garanteret at afstandene

$$(\mathbf{r}_{1,m} - \mathbf{r}_{2,m+s-1}) \text{ og } (\mathbf{r}_{1,m+s-1} - \mathbf{r}_{2,m})$$

opfylder 3.15. Hvis permutationen udføres, vil FILL kun udvælge  $\mathbf{r}_{2,m}$  igen (og hermed opretholde detaljeret balance) hvis afstandene

$$(\mathbf{r}_{1,m} - \mathbf{r}_{1,m+s-1}) \text{ og } (\mathbf{r}_{2,m} - \mathbf{r}_{2,m+s-1})$$

igen opfylder 3.15. I langt de fleste tilfælde er dette opfyldt, idet Lévy-konstruktionen kun meget sjældent vil fjerne partikler længere fra hinanden end 3.15 tillader, og disse påstande vil blive underbygget af kørsesresultaterne nedenfor. Hermed kan det - med god vilje - siges, at for  $k = 2$  er detaljeret balance opfyldt.

For  $k > 2$  er billedet dog noget anderledes. Her vil  $C_k^{-1} = i \mapsto (i-1) \bmod k \neq C_k$ , og hermed er detaljeret balance ikke opfyldt. Problemet kan overkommes, ved at med sandsynlighed  $\frac{1}{2}$  vælge permutationen  $C_k$ , og udføre konstruktionen ovenfor, dog med FILL modificeret til at håndtere, at den skal teste afstande for baner der

vil blive forbundet ved en permutation som  $C_k^{-1}$  og ikke  $C_k$ . Samme indsigelser om at algoritmen ikke tillader, at man rykker tilbage til en tilstand der ikke opfylder 3.15 gør sig igen gældende.

Disse problemer kan ret let overkommes, en simpel test for om tilstanden der flyttes fra ikke opfylder 3.15 (og afvisning hvis dette er tilfældet), og indførslen af træk svarende til  $C_k^{-1}$  er ligeledes enkle at indføre. Det er dog ikke nødvendigt! For  $k > 2$  vil transitionssynligheden under alle omstændigheder så forsvindende lille, at detaljeret balance er ligegyldig. Disse påstande vil blive dokumenteret i kørselsresultaterne.

# Kapitel 4

## Forsøg

### 4.1 Note om Enheder

Alle udregninger foretages i enheder hvor  $\hbar = 1$ ,  $k_B = 1$  og  $m = 1\text{\AA}$  og disse fastsætter energi og masseenheden igennem

$$[k_B] = \frac{[m]^2[kg]}{[s]^2[K]} \text{ og } [\hbar] = \frac{[m]^2[kg]}{[s]} = [J][s]$$

Tidsenheden er ligegyldig og kan sættes til 1. I disse enheder er massen for  ${}^4\text{He}$  0.082473.

### 4.2 Harmonisk Osscillator i 3 Dimensioner

Den harmoniske oscilator udgør en naturlig afprøvningsbase, de thermodynamiske størrelser kan udregnes analytisk. Helt nøjagtigt studeres Hamiltonen

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Energien er udregnet i enhver introducerende bog om statistisk mekanik, så resultatet vil blot blive gentaget

$$E = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right)$$

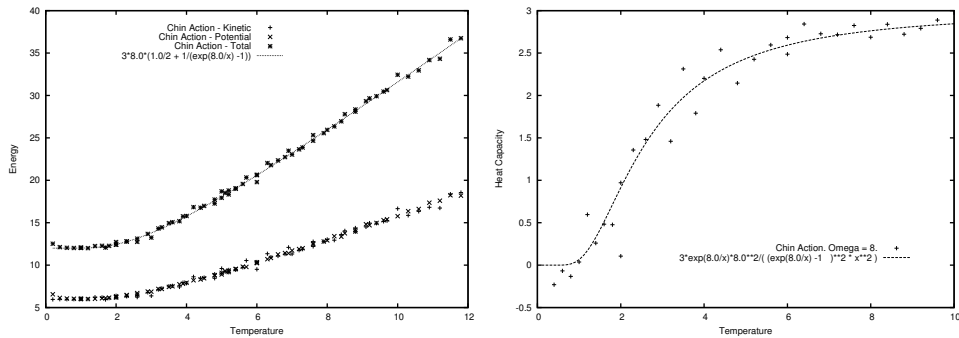
Energien er yderligere fordelt ligeligt på det kinetiske og potentielle bidrag. Dobbeltkommutatoren  $\mathcal{C}$  i Chin-tilnærmelsen udregnes let, idet de eneste bidrag fra de generaliserede kræfter vil være de diagonale. For en partikel giver det

$$\mathcal{C} = 2\lambda(m\omega^2 x)^2.$$

Og for  $N$  partikler blot en sum af led som dette. Udregnes den totale energi giver det et plot som i figur 4.1.

Plottet er gjort for  $\omega = 8$  og tilstrækkelig stor simuleringskasse - det er vigtigt at gøre kassen så stor at der ikke er chance for at oscilatoren kan nå ud til kanten af den, ellers vil den potentielle energi blive underestimeret. Der er en god overensstemmelse mellem den forventede energi og den udregnet analytisk.

Yderligere ses det, at den kinetiske og potentielle energi ligger oveni hinanden som et yderligere integritetscheck. Den svage afvigelse for energien ved meget lave temperaturer kommer af, at den fysiske afstand mellem hver perle i tidsfladerne vokser



Figur 4.1: Energi efter temperatur for den harmoniske oscillator  
 Figur 4.2: Varmekapacitet for harmoniske oscillator

til en størrelse der svarer til middelfastheden af perlerne i forhold til origo - dvs. perlerne bliver tvunget ud i energitilstande der er ufysisk store. Effekten kan let overkommes ved at øge antallet af tidsflader.

Opmuntret af disse resultater udregnes varmekapaciteten. Faseovergange er ofte karakteriseret ved en ændring i varmekapaciteten, og det gælder også transitionen til superfluiditet, og derfor er det naturligt at teste varmekapacitetsestimatoren på den harmoniske oscillator.

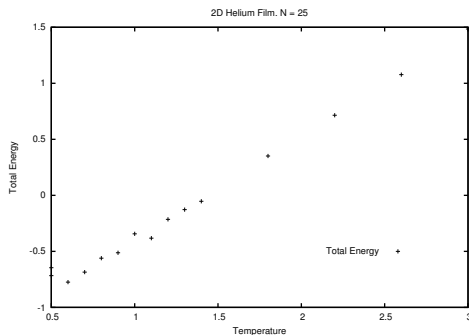
Resultatet er dog noget nedslående og ses i figur 4.2. Omend varmekapaciteten konvergerer mod den rigtige værdi, sker konvergenen utroligt langsomt særligt for mange tidsflader, dvs. lave temperaturer, som det med tydelighed ses af dette plot baseret på omkring  $10^6$  Mange-Niveau Metropolis skridt. Dette plot er tilmed lavet med kun omkring  $M = 50$  tidsflader. I fx. helium vil simuleringerne ofte foregå med op til 200 tidsflader og divergensen vil være endnu mere udbredt. Problemet opstår, idet der i estimatoren for varmekapacitet indgår et led som  $\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2$ , dvs. kvadratet af variansen af energien, som vokser ved lave temperaturer.

### 4.3 Helium i 3 Dimensioner

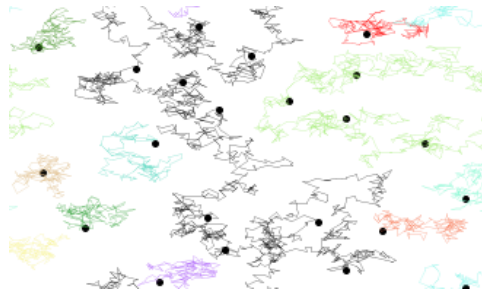
Helium i 3 dimensioner med 64 atomer er et klassisk testsystem, og banebrydende beregninger af dette system blev gjort af Ceperly and Pollock tilbage i midten af 80erne [5], [11] og udgør derfor et godt testsystem. Formelt består systemet af  $N = 64$   $^4\text{He}$ -atomer der interakterer med potentialet beskrevet i Appendix A. De er placeret i en kasse med sidelængde  $14.3062\text{\AA}$  og periodiske randbetingelser, og systemet bliver superflydende omkring  $2.7K$ . I simuleringerne valgtes  $l$  til 4 og  $M = 40$  og målinger blev udtaget ved hver 2000 forsøgte monte-carlo skridt. Måledata er baseret på 1000 sådanne målinger, hvilket svarer til ca. 20 minutters kørselstid. Resultaterne ses af tabel 4.3 Som det kan ses, er resultaterne i god

Tabel 4.1: Tabel over måleresultater for 64 Helium-atomer,  $M = 40$ . Resultater ved brug af Chin-tilnærmelsen, samt resultater fra [11] er angivet. Paranteser angiver bedste gæt.

$T$	Egne Data (Chin)		Ceperly & Pollock 1984 [11]	
	$\langle K \rangle$	$\langle V \rangle$	$\langle K \rangle$	$\langle V \rangle$
51.1	83.(5)	-16.(5)	84.0	-16.39
5.11	18.(2)	-20.(2)	18.0	-20.69



Figur 4.3: Energi efter temperatur for 2D  ${}^4\text{He}$  for  $N = 25$



Figur 4.4: Billede af konfigurationsrummet i  $x, y$  plan for 2D  ${}^4\text{He}$  film ved  $0.8K$ . Verdenslinier der indgår i samme permutationscyklus er i samme farve. Lodret ses en permutationsudveksling der omspænder systemet.

overensstemmelse med kilden<sup>1</sup>.

Det skal noteres, at forskellige antal tidsflader, tilnærmelsesmetoder og estimatorer er brugt, og en direkte sammenligning decimal for decimal er derfor meningsløs; det konkluderes derfor, at resultaterne underbygger rigtigheden af programmet.

Egne måledata er opgivet med 3 decimalers nøjagtighed og variansen er relativ lille, men idet 2000 skridt ikke er nok til at skabe ukorrollerede målinger, vil det være at forlede læseren at angive den, desuden er der ikke angivet varians i [11] til sammenligning.

Måleresultater opnået ved brug af den primitive tilnærmelse og dertil hørende estimator giver resultater svarende til dem angivet i [11] beregnet med meget få tidsflader, og underbygger nødvendigheden for at bruge metoder af højere orden til at tilnærme tæthedsmatricen i højtemperaturgrænsen.

## 4.4 Helium i 2 Dimensioner

Helium i 2 dimensioner med 25 atomer udgør også et klassisk system til at studere superfluiditet, og er blevet udførligt undersøgt i bla. [7].

Mere udførligt består systemet af en todimensionel film af helium med densiteten  $\rho = 0.0432\text{\AA}^{-2}$ . I simuleringerne anvendes periodiske randbetingelser og kun  $N = 25$  atomer. Temperaturen af tæthedsmatricen i højtemperaturgrænsen fastsættes til  $\tau = 150K$  og antallet af tidsflader udregnes ud fra dette. De thermodynamiske værdier stemmer godt overens med dem rapporteret i [7], men i stedet for at bringe dem som tabel, forsøges et plot af energi mod temperatur bragt i [7] genskabt.<sup>2</sup> I [7] er det beskrevet, hvorledes gentaget der sker en faseovergang ved  $T \approx 0.8K$ , hvilket skulle give sig udslag i en eksponentiel stigning af energien. Resultatet ses i figur 4.3. Numerisk er værdierne i god overensstemmelse med [7], men afvigelserne er for store til at faseovergangen er synlig.

En åbenbar konklusion kunne være, at det blot er et spørgsmål om at øge antallet af beregninger indtil fejlbarene falder og knækket af energikurven, i hvert fald i teorien, viser sig, men der er gode grunde til at forvente, at sådanne beregninger vil være meget tidskrævende, og vil kræve megen filen med parametrene. I stedet

<sup>1</sup>Resultaterne for helium i 2 og 3 dimensioner er i lighed med dem i [11] blevet korrigeret for at tage forbehold for den endelige systemstørrelse. Dette er beskrevet i [5]. Korrektionen er naturligvis kun på den potentielle energi, og beløber sig til ca.  $-1.4$

<sup>2</sup>Plottet er ikke kopieret i denne rapport, idet der er tvivl om hvorledes det forholder sig med ophavsretten.

vælges det at undersøge faseovergangen ved at se på Windingtallet.

## 4.5 Acceptsandsynligheder for Mangepartikelpermutationer

For at beregne Windingtallet er det vigtigt at sikre sig, at der foretages tilstrækkeligt med mangepartikelpermutationer som dem beskrevet i figur 3.3 og 3.4, og det samt en diskussion af de optimale parametervalg vil blive gjort her.

Testsystemet er (som før) Helium i to dimensioner ved  $0.5K$ . Dette er under den grænse, hvor en fasetransition er indtruffet, og den superflydende densitet burde være større end 0. Til udregningerne vælges et tal  $K$ , der angiver det maksimale antal partikler i permutationer, og ved hver kørsel vælges et  $k \in [1, K]$  og en tilfældig startperle til at seede FILL med. Sandsynligheden for at FILL fejler noteres i  $P_{\text{FILL}}$  og sandsynligheden for at hele trækket accepteres eller afvises forudsat at FILL er succesfuld, noteres i  $P_{\text{ACC}}$  og  $P_{\text{REJ}}$  sådan at  $P_{\text{FILL}} + P_{\text{ACC}} + P_{\text{REJ}} = 1$ . Antallet af tidsflader vælges til  $M = 300$ , svarende til  $\tau = 150K$ .  $l$  vælges til 5 svarende til en Lévy-konstruktion hvor 31 perler skal sættes. Programmet kørte nu i over  $10^7$  skridt, svarende til 10 minutters kørsel, på en tilstand der allerede var thermaliseret. Resultatet ses i tabel 4.2.

Resultaterne underbygger at detaljeret balance kun sjældent vil blive brudt: Sandsynligheden for at to perler har en afstand større end den givet ved  $3.15 < 0.005$ , og hermed vil sandsynligheden for at dette skulle bryde detaljeret balance af størrelsesorden  $10^{-5}$ . Sandsynligheden for at detaljeret balance skulle blive brudt pga. en  $k > 2$ -permutationsudveksling er af samme størrelsesorden.

Tabel 4.2: Resultater for permutationsudvekslinger.  $l = 5, \delta = 5$

$k$	$\delta = 4$		$\delta = 4.5$		$\delta = 5$	
	$P_{\text{ACC}}$	$P_{\text{FILL}}$	$P_{\text{ACC}}$	$P_{\text{FILL}}$	$P_{\text{ACC}}$	$P_{\text{FILL}}$
1	0.31915	0.00476	0.3217	0.0026	0.3198	0.0013
2	0.00114	0.40245	0.0012	0.2700	0.0012	0.1630
3	$4.2847 \cdot 10^{-4}$	0.67824	$5.8766 \cdot 10^{-4}$	0.5215	$4.3533 \cdot 10^{-4}$	0.3635
4	$1.5383 \cdot 10^{-4}$	0.75576	$1.4919 \cdot 10^{-4}$	0.5883	$1.4228 \cdot 10^{-4}$	0.4144
5	$3.4526 \cdot 10^{-5}$	0.77261	$3.9607 \cdot 10^{-5}$	0.5759	$6.9664 \cdot 10^{-5}$	0.3684

Lidt overraskende er sandsynligheden for accept af et permutationstræk med 2 perler, naivt kunne man udregne den til at være sandsynligheden for to Lévy-konstruktioner ganget med  $P_{\text{FILL}}$  dvs. ca.  $\frac{1}{3} \frac{0.4}{3} \approx 0.04$ . Den faktiske accept-sandsynlighed er derimod 0.001, ca. 40 gange mindre!

Umiddelbart kan man forestille sig, at det er et bidrag fra to fænomener, nemlig dels at idet Lévy-konstruktionerne skal foregå *i det fri*, dvs. ikke inde i en perlekæde, vil de lettere komme i karambolage med andre partikler, og dels at afstanden de skal dække typisk er større end den givet ved  $\delta = 4$ . De andre måleresultater synes dog ikke at underbygge disse hypoteser, idet deres acceptsandsynlighed ville udvise tilsvarende dramatiske fald: De falder dog pænt med ca. en faktor 0.3 svarende til en ekstra Lévy-konstruktion.

Der er ikke nogen *nem* måde at øge acceptsandsynlighederne ved at fifle med parametrene. En ændring så  $l = 4$  og tilhørende justering af  $\delta$  betyder, at sandsynligheden for een succesfuld Lévy-konstruktion stiger til  $\approx 0.6$ , men sandsynligheden for accept af partikeludvekslinger hvor  $k = 2$  falder til størrelsesorden  $10^{-5}$ . Justering af  $\delta$  syntes ikke at ændre herpå.

Omvendt, en ændring så  $l = 6$  betyder, at acceptsandsynligheden for en enpartikeludveksling falder til blot 0.075, derimod forbliver acceptsandsynligheden for partikeludvekslinger med  $k > 1$  næsten de samme som før, men ikke helt så gode. Det, sammen med det faktum, at  $l = 6$  er næsten dobbelt så omkostningsfuld beregningsmæssig som  $l = 5$  betyder, at det ikke er et godt valg, og de acceptsandsynligheder der er angivet i tabel 4.2 må siges at være tæt på de optimale værdier.

### 4.5.1 Resultater Uden Brug af FILL

En kørsel uden brug af 3, men med samme (optimerede) parametre betød, *at over en kørsel på mere end en million skridt blev der ikke foretaget partikeludvekslinger med mere end 2 partikler*, svarende til at en to-partikeludveksling har acceptsandsynlighed på ca.  $6.3 \cdot 10^{-5}$ .

Det stemmer godt overens med resultaterne i tabel 4.2, idet det svarer til det deri angivne resultat divideret med ca. 25, altså at hver perle har omkring 1 anden den kan indgå i en permutationsudveksling med. Forskellen er blot, at FILL automatisk udvælger den, hvorimod hvis partiklerne der skal indgå i en permutationsudveksling udvælges med lige hyppighed, vil et godt valg kun ske med sandsynlighed omkring  $1/25$ .

Dette burde understrege det enorme behov der er for at bruge diverse tricks til at optimere udvælgelsen.

## 4.6 Resultater af Winding-Estimatoren

Med ovenstående overvejelser i mængde forsøges den superflydende densitet  $\rho_S$  nu beregnet. Idet lange permutationscykler synes et krav sættes  $k = 5$ . For at producere blot nogenlunde ukorrulerede måledata er det et krav at sætte antallet af forsøgte PIMC-skridt mellem hver måling meget højt, i simuleringerne her vælges det til  $100'000$ . Programmet gennemkørte så mere end  $10^7$  skridt per målepunkt, svarende til ca. 7 timers kørsel. Resultater ses i tabel 4.3 Og et skærmbillede af

Tabel 4.3: Resultater for Windingestimatoren. 2D Helium,  $N = 25$ . Paranteser angiver bedste gæt på næste ciffer.

T	0.5	0.8	1	1.177
$\rho_S/\rho$	1.0	0.8(2)	0.5(4)	0.2(6)
Ceperly & Pollock [7]	0.94	0.82(7)	0.59(5)	0.27(5)

kørslen for  $0.8K$  hvor windingtallet er forskellig fra 0 ses i figur 4.4. Disse resultater er de mest opmuntrende indtil videre, og ligger let indenfor dem rapporteret i [7]. Som beskrevet i [7] er  $\lambda$ -transitionen kendetegnet ved en pludselig stigning af den superflydende densitet, og udfra de metoder beskrevet i [7], vil det, på basis af data som ovenfor, være muligt at fastsætte den superflydende densitet til omkring den eksperimentielle værdi omkring  $0.8K$  - dog med tilsvarende større margener.

Ligeledes viser resultaterne, at metoden FILL er tilstrækkelig til at øge acceptraten af mangepartikkeltræk til et regime, hvor den superflydende densitet kan beregnes, og må hermed betegnes som en succesfuld og nødvendig udvidelse til den elementære PIMC-procedure.

## Kapitel 5

# Konklusion

I de ovenstående sider er to adskilte hovedlinier iagttaget. Dels den teoretiske, hvor PIMC og dertil hørende overvejelser er blevet gennemgået, og dels kørselsresultater af programmet, og det vil være rimeligt at adressere dem separat.

### Kørselsresultater

Ud fra resultaterne af testkørslerne konkluderes, at programmet er korrekt, i den forstand, at det i grænsen af uendeligt mange tidsflader og kørselstid vil konvergere mod de nøjagtige resultater indenfor hvad potentialet, størrelsen af simuleringskassen og lignende inputparametre tillader.

Men herudover er de fremkomne resultater, med undtagelse af den superflydende densitet, ikke prangende, og de anslås typisk at være et til to decimaler dårligere end de tilsvarende rapporteret i kilderne, omend der i kilderne sjældent er angivet varians og diskussion af korrelation af måledata, så en direkte sammenligning er vanskelig<sup>1</sup>.

Jeg vil primært tillægge de dårlige resultater af de thermodynamiske målinger til valget af thermodynamiske estimatorer, særligt estimatorern for den kinetiske energi vil være udsat for stor varians, som følge af at den udregnes som differensen imellem to positive udtryk.

En anden klasse af estimatorer går under betegnelsen Viriali-estimatorer [8], og omend der ikke er noget generelt konsensus i litteraturen om hvilken der er at foretrække, har jeg en kraftig mistanke til at måleresultaterne rapporteret i [7] og [11] er beregnet på basis af andre estimatorer end thermodynamiske. Årsagen til at jeg valgte thermodynamiske estimatorer skal ses i lyset af, at valget blev foretaget relativt tidligt, og de viste gode konvergenssegenskaber for den harmoniske oscillator. Jeg vil derfor på det kraftigste anbefale, at andre typer estimatorer afprøves før et sådan valg træffes.

Varmekapacitetsestimatoren udviste de dårligste karakteristika af dem alle, og måleresultaterne er lige på grænsen til, at man kan sige den konvergerer. Dette skyldes, at den er afhængig af kvadratet af variansen på energien, og det er måske her med størst tydelighed at andre og bedre energi-estimatorer vil være interessante. I kilderne er der ikke givet eksempler på brug af estimatorer af varmekapaciteten, derimod bestemmes den ved at differentiere energikurverne, typisk igennem Padé fits ([7]). I [8] gennemgås dog en højereordens metode der, omend beregningstung, kunne være spændende at implementere, idet den så vidt vides ikke er blevet an-

---

<sup>1</sup>Jeg vil tilmed vove påstanden, at måledata fra før ca. 1985 omkring  $\lambda$ -punktet *vil* være korrollerede, idet udtag af ukorrollerede målinger ved den temperatur er af omtrent samme vanskelighed som beregning af den superflydende densitet, der først blev udført senere og med -antageligt- mere kraftfulde metoder.



vendt på systemer som dette før, og en estimator for varmekapaciteten med omtrent samme konvergenssegenskaber som energiestimatorerne vil være meget værdifuld.

Resultaterne for beregning af den superflydende tæthed er væsentligt bedre og i særdeles god overensstemmelse med dem rapporteret andetsteds, og den del af kørslerne må siges at være en success. Som bemærket tidligere, vil disse måledata, vha. metoderne i [7], gøre det muligt at anslå  $\lambda$ -transitionen til omkring  $0.8K$ , og det synes kun et spørgsmål om yderligere beregningstid før resultater helt på højde med dem rapporteret i [7] kan genskabes.

Efter min mening taler det meget til PIMCs styrke, at det med midler der kan beskrives på under 30 sider på bachelorniveau, er muligt at simulere et så kompliceret og eksotisk makroskopisk kvantemekanisk fænomen som superfluiditet.

### **Teoretisk Resultater**

I opgaven er givet en dybdegående og selvindeholdt teoretisk gennemgang af PIMC. Særligt vil jeg fremhæve afsnittet om den symplektiske faktoriserings af  $\exp[-\tau\mathcal{H}]$ , der indeholder mange detaljer jeg har savnet i kilderne, og afsnittet om Monte Carlo, Metropolis og Mange-Niveau Metropolis Algoritme, som er udarbejdet i detaljer og uden det genbrug af notation som mange andre fremstillinger lider under.

Afsnittet om superfluiditet indeholder flere detaljer udeladt i [6], og så vidt vides er denne opgave det eneste sted hvor en samlet fremstilling af PIMC, der leder op til en udledning af Windingtallet er givet.

Det som jeg dog mener vil være mest interessant for en læser som vil konstruere sin egen PIMC-simulering, er diskussionen om acceptsandsynlighed og nødvendigheden af mange-partikkeltræk.

Mangepartikkeltræk er PIMCs absolutte achilleshæl i forbindelse med simulering af superfluiditet og lignende fænomener, og disse problemer og deres løsning er sjældent dokumenteret.

Ligeledes er det blevet dokumenteret, at en metode i lighed med FILL er absolut nødvendig i fremtidige implementationer. I de værker jeg har gennemlæst i forbindelse med denne opgave, er der ikke nogetsteds beskrevet en metode i stil med FILL, omend de alle nødvendigvis må benytte sig af noget lignende. Det skal på ingen måde siges, at FILL udgør den bedste eller en unik løsning på problemet, men er det dog igennem kørselsresultater blevet vist, at FILL giver en forøgning af acceptraterne på op til flere størrelsesordener, og at den er *tilstrækkelig* til simulering af superfluiditet.

Det er på ingen måde sagt at diskussionen om acceptrater er tilendebragt, de vil i sagens natur være afhængig af temperaturen og det fysiske systems udformning, og et utal af tilføjelser kan gøres. Diskussionen i dette værk burde dog give et indtryk i de undersøgelser og løsningsmetoder der er nødvendige.

PIMC er i øjeblikket ikke bare den bedste, men også den eneste, simuleringstype til fænomener som superfluiditet, og udgør en enestående og *eksakt* metode til simulering af bosoniske systemer ved endelig temperatur, og der er al mulig grund til at forvente, det vedbliver sådan i mange år fremover.

I øjeblikket sker der tiltag som, hvis de holder hvad de lover, delvis vil overkomme problemet med sampling af lange permutationskæder, og hermed øge størrelsen af de systemer der kan simuleres med en faktor 100, se [4] og appendix C.

På trods af dette er PIMC ikke særligt velkendt, og modsat fx. Density Functional Theory findes der ikke standardprogrampakker. Jeg håber, med denne opgave, at have givet en læselig og spændende gennemgang af PIMC og de nærmest magiske fænomener den giver adgang til, og hermed at bidrage til mere interesse for emnet.

# Kapitel 6

## Appendixes

### 6.1 Appendix A - Helium-Potentialet

Meget arbejde er lagt i at bestemme det intermolekylære potentiale for helium, overordnet har det en Lennard-Jones-lignende facon, men mange mindre rettelser er blevet foreslået. Vi vil bruge potentialet fra [1] som er givet nedenfor Bemærk

Tabel 6.1: Form og Parametre af HFDHE2-Helium Potentialet

$V_{He}(r) = \epsilon V_{He}^* \left( \frac{r}{r_m} \right)$	$\epsilon$ 10.8k <sub>B</sub> K
$V_{He}^*(x) = Ae^{-\alpha x}$	$r_m$ 2.9673Å
$- \left[ \frac{C_6}{x^6} + \frac{C_8}{x^8} + \frac{C_{10}}{x^{10}} \right] F(x)$	$A$ 0.5448504
$F(x) = \begin{cases} e^{-(\frac{x}{D}-1)^2} & \text{for } x < D \\ 1 & \text{for } x \geq D \end{cases}$	$\alpha$ 13.353384
	$C_6$ 1.3732412
	$C_8$ 0.4253785
	$C_{10}$ 0.178100
	$D$ 1.241314

at ikke alle cifre er betydende, men de er medtaget for at undgå afrundingsfejl og i overensstemmelse med kilden [1].

### 6.2 Appendix B - Udregning af $\mathcal{C}$ i Linjær Tid

Den størrelse der skal udregnes kan skrives som

$$\sum_i F_i F_i = \sum_{ijk} v_{ij} v_{ik}$$

I hvert PIMC-skridt vil en række af koordinaterne blive modificeret, her angivet med  $l_n$  der altså er en række heltal. Hvis vi i første omgang kun medtager en koordinat  $l$  vil der være 3 bidrag i summen ovenfor der vil ændre sig. For det første

$$\sum_{kj} v_{lj} v_{lk}$$

Dvs. med

$$U_l = \sum_i v_{li}$$

giver det

$$U_l U_l$$

Og dernæst

$$\sum_{i \neq l, j} v_{ij} v_{il} = \sum_{i \neq l} U_i v_{il}$$

Og endeligt

$$\sum_{i \neq l, k \neq l} v_{il} v_{ik} = \sum_{i \neq l} v_{il} (U_i - v_{il}) = \sum_{i \neq l} [U_i v_{il} - v_{il} v_{il}]$$

Hermed bliver den endelige ændring

$$U_l U_l + \sum_{i \neq l} [2U_i v_{il} - v_{il} v_{il}]$$

### Fulde Tilfælde

Betragte det fulde tilfælde. Her vil der være  $l_1, \dots, l_N$  ( $N$  angiver antallet af perler der indgår i permutationen og ikke antallet af partikler). Der er stadig bidraget

$$U_{l_n} U_{l_n}$$

for alle  $n$ . Lad os så se på  $l_n$ . Her er

$$\sum_{i \neq l_1, \dots, l_N, j} v_{ij} v_{il_1} = \sum_{i \neq l_1, \dots, l_N} U_i v_{il_n}$$

og endeligt

$$\sum_{i, k \neq l_1, \dots, l_N} v_{il_n} v_{ik} = \sum_{i \neq l_1, \dots, l_N} v_{il_n} (U_i - (v_{i_1} + \dots + v_{i_{l_N}})) = \sum_{i \neq l_1, \dots, l_N} [U_i v_{il_n} - v_{il_n} (v_{i_1} + \dots + v_{i_{l_N}})]$$

Dvs. ialt

$$\sum_n \left( U_{l_n} U_{l_n} + \sum_{i \neq l_1, \dots, l_N} [2U_i v_{il_n} - v_{il_n} (v_{i_1} + \dots + v_{i_{l_N}})] \right)$$

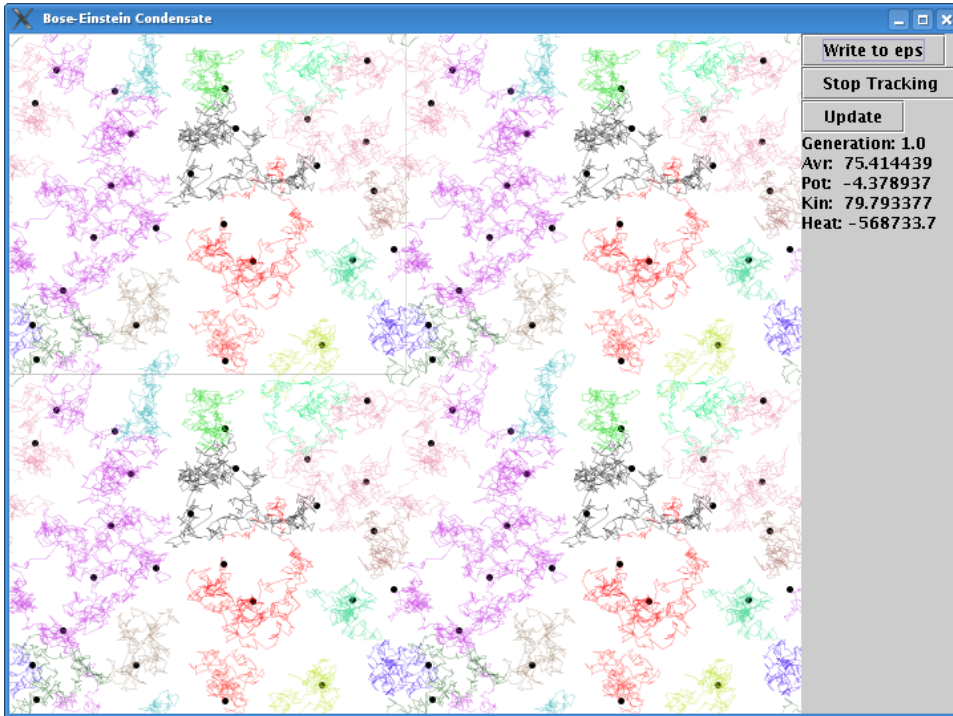
eller

$$\sum_n U_{l_n} U_{l_n} + \sum_{i \neq l_1, \dots, l_N} \left( \sum_n [2U_i v_{il_n} - v_{il_n} (v_{i_1} + \dots + v_{i_{l_N}})] \right)$$

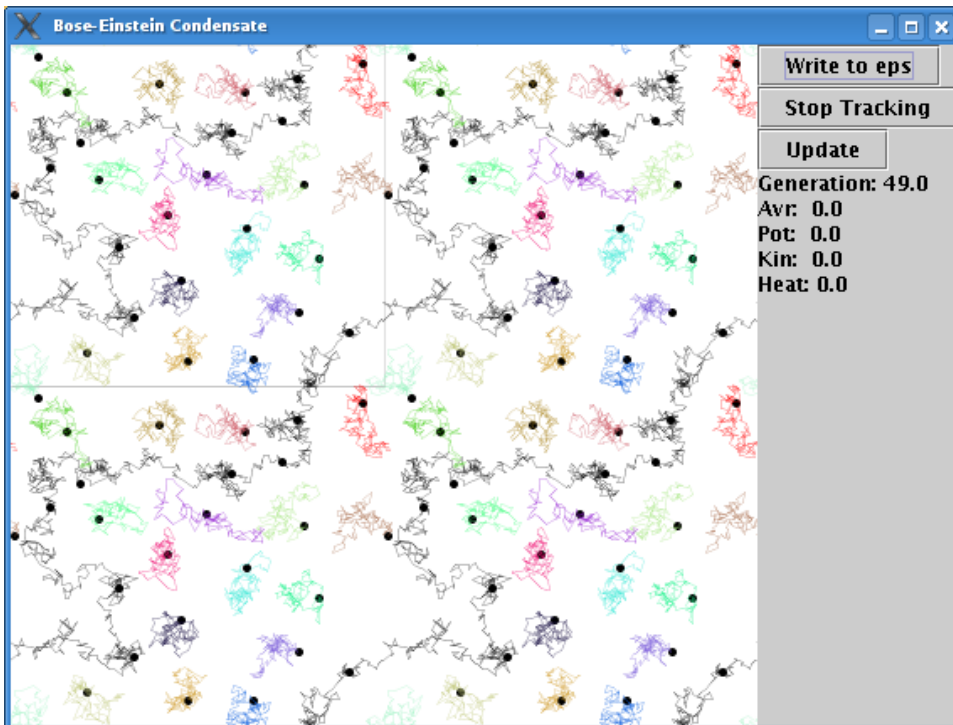
Problemet er således reduceret til at holde styr på  $U_l$ -mængderne og den totale værdi af  $\mathcal{C}$ , og således kun beregne forskellene. Det betyder nogen numerisk instabilitet hvis  $\mathcal{C}$  ændrer sig over mange størrelsesordener, men det burde ikke ske og observeres ikke ved normale kørsler, og fejlene hermed observeres til at være ca.  $10^{-7}$  gange mindre end  $\mathcal{C}$ . Bemærk at der skal holdes styr på  $U_l$  og  $\mathcal{C}$  ved hver eneste tidsflade.

## 6.3 Appendix C - Billeder af programmet

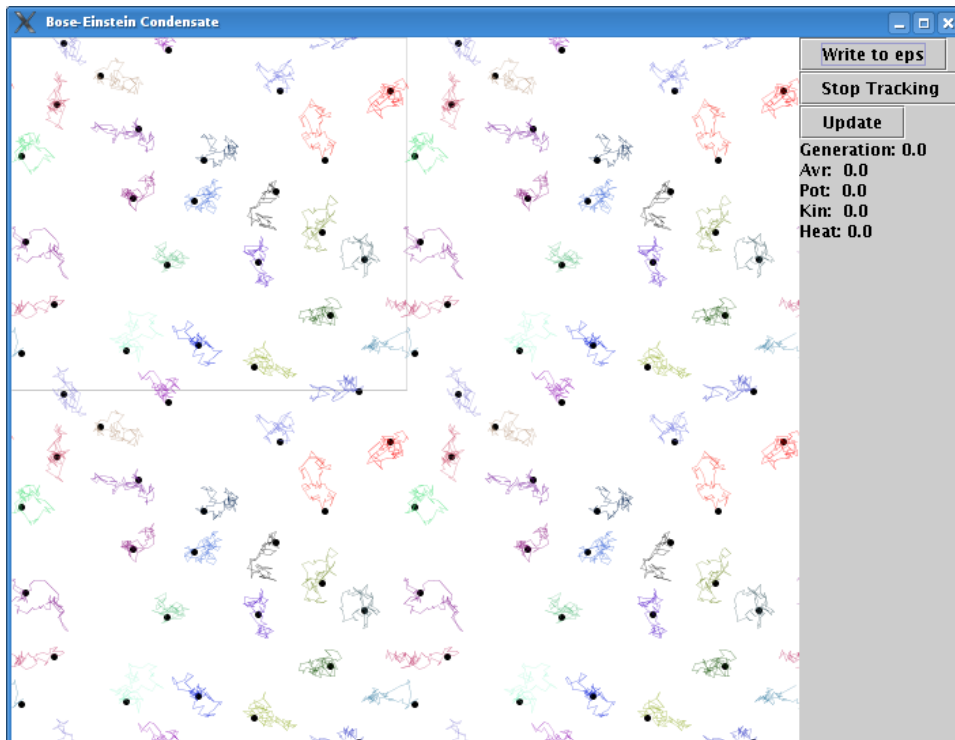
Dette appendix indeholder billeder fra PIMC-simuleringer af Helium i 2D med samme parametre som det behandlet i teksten ved forskellige temperaturer. De snoede veje er verdenslinier, og de periodiske randbetingelser er tydelige. Verdenslinierne er farvede således, at partikler der indgår i samme permutationsudveksling har samme farve. I figur 6.1, 6.2 og 6.3 er et billede af en simulering ved  $0.5K$   $1K$  og  $2K$  præsenteret.



Figur 6.1: Billede af en PIMC simulering ved  $0.5K$



Figur 6.2: Billede af en PIMC simulering ved  $1K$



Figur 6.3: Billede af en PIMC simulering ved  $2K$

## 6.4 Appendix D - Worm Algoritme

PIMC har, som beskrevet i de tidligere afsnit, flere alvorlige mangler. Proceduren hvorved lange permutatinscykler samples efter exponentielt med  $N$  hvilket gør studiet af fx. superfluiditet i store systemer umuligt.

For Lattice Monte Carlo (som ikke vil blive diskuteret her) er disse problemer bragt under kontrol ved hjælp af en *worm* algoritme. For nylig i [4] er denne metode blevet krydset med ideerne fra tidlige sådan at den også virker på kontinuære systemer, og det er netop formålet med dette appendix at give en introduktion til hvorledes det foregår.

### 6.4.1 Definitioner

Man kan tillægge to syn på ormealgoritmen. Det fysiske, hvor det kanoniske ensamble fra før erstattes af det grandkanoniske (under indførsel af det kemiske potentiale  $\mu$ ), og samplingen foregår ved at studere greens funktioner, eller alternativt, det pragmatiske syn, i hvilken samplingreglerne blot ændres fra Lévy-konstruktionen til en række nye regler, hvis relative statistik kontrolleres af en ukendt parameter  $\mu$ . Begge syn er lige korekte, i denne opgave har vi valgt det første syn i den teoretiske gennemgang og forklarer ud fra det, men det er en hjælp at holde sig for øje, at ingen ny fysik som sådan er nødvendig for at se, at ormealgoritmen konvergerer.

## Hamiltonen

I det tidligere afsnit så vi, at et system med hamilton  $\mathcal{H}$  gav anledning til en partitionsfunktion af formen

$$\mathcal{Z} = \int d\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_M \rho_F(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n+1}) e^{-U(\mathbf{X})}$$

Modificeres  $\mathcal{H}$  så  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} - \mu \hat{N}$  hvor  $\hat{N}$  er antalsoperatoren og  $\mu$  det *kemiske potentiale* kan nøjagtigt de samme udregninger som før foretages, blot med det resultat at

$$\mathcal{Z}_D = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} \int d\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_M \rho_F(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n+1}) e^{-U(\mathbf{X})}$$

(Idet  $N$  er diskret bliver integrationen over den til en sum). Første observation er, at vi grundlæggende betragter samme struktur som før. For fastholdt  $N$  er  $\mathcal{Z}$  blot den oprindelige  $\mathcal{Z}$  ganget en konstant. Dette betyder også, at de regler som før blev udledt hvad angår permutationssampling går igen, og strukturen er således stadig den samme:  $NM$  ( $N$  er antal partikler,  $M$  antal tidsflader) perler, hver perle forbundet med to andre i  $M$ -lykker, og lykkerne kan være klistret sammen, dvs. bosekondenseret, til metalykker af længde  $pNM$  helt som beskrevet tidligere. Det er dog klart, at Lévy-konstruktionen ikke er tilstrækkelig i det nye konfigurationsrum, Lévy-konstruktionen ændrer ikke partikkelantallet og vil således ikke være i stand til at sample alle partikkelkonfigurationer, men kun det underrum som indeholder et fast antal partikler.

### 6.4.2 Orme-delen af konfigurationsrummet

Som beskrevet ønskes det, at ormene skal kunne vokse med ned til en perle af gangen, for at gøre det udvides rummet af partitionsfunktioner til

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_D + \mathcal{Z}_W$$

Hvor  $\mathcal{Z}_W$  er partitionsfunktioner svarende til tilstande med åbne verdenslinier, dvs. Greens-funktioner. Antag at *ormen* har længde  $m$ , og dens hale er placeret på koordinat  $\mathcal{M} = \mathbf{r}_k^w$  og hovedet på  $\mathcal{M} = \mathbf{r}_{m+k}^w$ . Nu ændres de oprindelige integrationsvariable  $\mathbf{R}_{k+i}$  hvor  $i \in [0, m]$  således at

$$\mathbf{R}_{k+i} \rightarrow \mathbf{R}_k^w = \mathbf{R}_{k+i} \cup \{r_{k+i}^w\}$$

Tilføjes af disse ekstra perler skal forstås modulo  $M$ : Hvis  $m > M$ , dvs. ormen er længere end det totale antal timeslices, så vil nogle af koordinaterne  $\mathbf{R}_j$  blive udvidet med mere end en ekstra ormekoordinat, nemlig alle orme-koordinaterne  $\mathbf{r}_i^w$  således at  $i + k \bmod M = k$ .

Herfra er strukturen af konfigurationsrummet den samme: Ormekoordinaterne er forbundet med hinanden med frie partikkelpropegatorer, dvs. der indføres et led

$$\rho_w = \prod_{i=1}^m \rho_0(\mathbf{R}_{k+i-1}^w, \mathbf{R}_k^w k + i)$$

Og virkningen  $U$  udvides fra, at hver mangepartikelkonfiguration  $\mathbf{R}_i$  interagerede med hinanden til at hver mangepartikelkonfiguration  $\mathbf{R}_i^w$  interagerer med hinanden, en sådan udvidelse er helt trivielt idet partikler fra forskellige timeslices ikke interagerer, og således er  $U$  for så vidt ligeglåd med om koordinaten  $\mathbf{R}_i$  indeholder flere partikler (fra ormen!) end  $\mathbf{R}_j$ . Endeligt har vi altså

$$\mathcal{Z}_W = C \sum_{N=0}^{\infty} \int d\mathbf{R}_0^w, \dots, \mathbf{R}_M^w \rho_F(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n+1}) \rho_w e^{\tau \mu (m+MN) - U^w(\mathbf{X}^w)}$$

Den ekstra faktor  $C$  tilføjes af optimeringsårsager, og  $\tau\mu(m+MN)$  er valgt, således at for  $m$  delelig med  $N$  stemmer bidraget fra det kemiske potentiale overens med bidraget fra antallet af partikler, dvs. for  $m = 2M$  vil  $N \rightarrow N + 2$ . Lévy

### Fysik fra $\mathcal{Z}$

Den nye  $\mathcal{Z}$ -funktion virker som en noget formidabel og (noget!) ubegrundet størrelse, men hurtig inspektion viser to ting: For det første er det let at slippe fra en konfiguration i  $\mathcal{Z}_D$  til  $\mathcal{Z}_W$ , det er (populært sagt) blot at slette nogle koordinater og udråbe de overskydende til en orm, og ligeledes er det let at slippe fra  $\mathcal{Z}_W$  til  $\mathcal{Z}_D$ , i det tilfælde hvor alle  $\mathbf{R}_i^w$  indeholder lige mange koordinater er det blot en propegator  $\rho_0$  som adskiller dem. Yderligere er der følgende afgørende fordel: Hvor konfigurationsrummet i  $\mathcal{Z}_D$  er opdelt i mindre rum givet ved antallet af partikler i dem, hvert rum indeholder  $NM$  koordinater, så er det muligt at ændre antallet af koordinater i  $\mathcal{Z}_W$  på en mere kontinuær måde, nemlig ved at tilføje og fjerne en ormekoordinat. Hermed givet  $\mathcal{Z}_W$  netop de ønskede tilstande til at komme let rundt i  $\mathcal{Z}_D$ . I det følgende vil processen med at “fjerne en partikkel”, “indsætte en fri propegator”, etc. blive konkretiseret og formaliseret.

### 6.4.3 Transitionsregler

Transitionsreglerne kan kort fortalt opdeles i 4 klasser: Dem som ændrer antallet af orme (*insert* og *remove*), dem som ændrer størrelsen (*advance* og *recede*), dem som gør orme til lukkede verdenslinier og omvendt (*open* og *close*). Disse regler er nok til at sample hele konfigurationsrummet, men for effektiv sampling tilføjes en sidste, nemlig *swap* som dels gør samplingen af lange permutationscykler enkel, og dels gør de andre regler mere effektive, ved at sørge for hurtig transition mellem tilstande i  $\mathcal{Z}_W$  som *minder* om tilstande i  $\mathcal{Z}_D$  og tilstande som ligger fjernt fra  $\mathcal{Z}_D$ .

Reglerne er ordnet som de er, idet en anvendelse af INSERT kan gøres om *kun* ved at anvende REMOVE (og omvendt!), anvendelse af ADVANCE kan *kun* gøres om ved at anvende RECEDE (og omvendt) (tilsvarende for OPEN/CLOSE) og endeligt, en anvendelse af SWAP kan gøres om ved at anvende SWAP. Disse regler gør udregning af detaljeret balance meget enklere, idet der kun behøves at undersøge detaljeret balance for mellem hver af de fire klasser af transitionssandsynligheder.

De fire klasser af sandsynligheder er igen underopdelt efter (løst sagt) hvor mange partikler de påvirker, dvs. fx. vil INSERT( $m$ ) være i detaljeret balance med REMOVE( $m$ ) (hhv. indsætte og fjerne  $m$  perler). Tallet  $m$  vil vælges mellem 1 og  $\bar{M}$ , hvor  $\bar{M}$  er en parameter programmøren skal optimere.

OPEN( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_D \rightarrow \mathcal{Z}_W$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen er diagonal. En tilfældig perle  $\alpha_i$  udvælges (Notationen skal forstås som at  $i$  indikerer perlens timeslice, og  $\alpha$  partiklens som perlen tilhører index, dvs. at  $\alpha_i \equiv \mathbf{r}_{\alpha,i}$ ). Som beskrevet tilhører vil  $m \in [1, \bar{M}]$ . Nu fjernes perlerne  $\alpha_{i+1}, \alpha_{i+2}, \dots, \alpha_{i+m+1}$ , således at en orm opstår med hoved  $\mathcal{I} = \alpha_i$  og hale  $\mathcal{M} = \alpha_{i+m}$  og en lykke forsvinder. Sandsynligheden for at gå fra start til slutposition givet at OPEN valgt som transition er

$$D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \frac{1}{N_{\text{textbd}}} \frac{1}{\bar{M}}$$

CLOSE( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_W \rightarrow \mathcal{Z}_D$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen ikke er diagonal. Antag den åbne orm har hoved i  $\mathcal{I} = \alpha_i$  og hale i  $\mathcal{M} = \alpha_{i+m}$ . Som indikeret er  $m$  antallet

af tidskridt man skal gå fra hovedet til at nå til den tidsflade halen befinder sig på - forstået modulo  $M$  naturligvis. Hvis  $m = 0$  (svarende til at hovedet og halen befinder sig på samme tidsflade) eller  $m > \bar{M}$  er opdateringen ikke mulig. Hvis ikke, forbindes  $\mathcal{I}$  og  $\mathcal{M}$ . Er  $m > 1$  indsættes en liste af  $m-1$  perler,  $\alpha_{i+1}, \dots, \alpha_{i+m-1}$  fordelt efter

$$D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \frac{\prod_{k=1}^m \rho_0(\alpha_{i+k-1}, \alpha_{i+k}, \tau)}{\rho_0(\alpha_i, \alpha_{i+m}, m\tau)}$$

Og som indikeret er dette også transitionssandsynligheden for et sådan træk.

OPEN( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_D \rightarrow \mathcal{Z}_W$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen er diagonal. En tilfældig perle  $\alpha_i$  udvælges (Notationen skal forstås som at  $i$  indikerer perlens timeslice, og  $\alpha$  partiklens som perlen tilhører index, dvs. at  $\alpha_i \equiv \mathbf{r}_{\alpha,i}$ ). Som beskrevet tilhører vil  $m \in [1, \bar{M}]$ . Nu fjernes perlerne  $\alpha_{i+1}, \alpha_{i+2}, \dots, \alpha_{i+m+1}$ , således at en orm opstår med hoved  $\mathcal{I} = \alpha_i$  og hale  $\mathcal{M} = \alpha_{i+m}$  og en lykke forsvinder. Sandsynligheden for at gå fra start til slutposition givet at OPEN valgt som transition er

$$D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \frac{1}{N_{\text{textbd}}} \frac{1}{\bar{M}}$$

INSERT( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_D \rightarrow \mathcal{Z}_W$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen er diagonal. En tidsflade  $i$  og en position  $\mathcal{M} = \alpha_i$  vælges tilfældigt. Herefter genereres  $m$  koordinater,  $\alpha_{i+1}, \dots, \alpha_{i+m}$  fra et produkt af frie partikkel-propegatorer, således at en orm opstår med hoved  $\mathcal{I} = \alpha_m$ . Transitionssandsynligheden er

$$\frac{1}{V} \frac{1}{\bar{M}} \frac{1}{\bar{M}} \prod_{k=1}^m \rho_0(\alpha_{i-1}, \alpha_i, \tau)$$

REMOVE( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_W \rightarrow \mathcal{Z}_D$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen ikke er diagonal. En åben orm (fra  $\alpha_i, \alpha_{i+m}$  fjernes forudsat at  $m \in [1, \bar{M}]$ . udvælges tilfældigt. tidsflade  $i$  og en position  $\mathcal{M} = \alpha_i$  vælges tilfældigt. Herefter genereres  $m$  koordinater,  $\alpha_{i+1}, \dots, \alpha_{i+m}$  fra et produkt af frie partikkel-propegatorer, således at en orm opstår med hoved  $\mathcal{I} = \alpha_m$ . Transitionssandsynligheden er 1.

ADVANCE( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_W \rightarrow \mathcal{Z}_W$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen ikke er diagonal. Igen ligger  $m \in [1, \bar{M}]$ . Antag  $\mathcal{I}$  er den åbne orms hoved. Der indsættes nu  $m$  ekstra perler, præcis som i tilfældet INSERT dog med  $\mathcal{M}$  erstatter af  $\mathcal{I}$  og transitionssandsynligheden er

$$D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \frac{1}{\bar{M}} \prod_{k=1}^m \rho_0(\alpha_{i-1}, \alpha_i, \tau)$$

RECEDE( $m$ ) ( $\mathcal{Z}_W \rightarrow \mathcal{Z}_W$ )

Som ADVANCE.  $m \in [1, \bar{M}]$  er det antal forbindelser (perler) som fjernes, forudsat at antallet af perler ikke er så stort at  $\mathcal{I}$  bliver sammenfaldende med  $\mathcal{M}$  eller større end størrelsen af ormen. Transitionssandsynligheden er ganske enkelt 1.



SWAP ( $\mathcal{Z}_W \rightarrow \mathcal{Z}_W$ )

Denne opdatering er kun mulig hvis konfigurationen ikke er diagonal, og adskiller sig fra de foregående ved *ikke* at være afhængig af  $\bar{M}$ , der er således kun een SWAP-funktion.

Antag at  $\mathcal{I} = \alpha_i \equiv \alpha$ . Vælg nu en perle,  $\beta = \beta_{i+\bar{M}}$ , fra tidsfladen  $i + \bar{M}$  med sandsynlighed

$$P(\beta) = \frac{\rho_0(\beta, \mathcal{I}, \bar{M} \tau)}{\sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{R}_{i+\bar{M}}} \rho_0(\mathbf{r}, \mathcal{I}, \bar{M} \tau)} = \frac{\rho_0(\beta, \mathcal{I}, \bar{M} \tau)}{\Sigma_{\mathcal{I}}}$$

Hvor  $\mathbf{r} \in \mathbf{R}_{i+\bar{M}}$  skal forstås som at der summeres over alle perler med tidskoordinat  $i + \bar{M}$ . Antag endeligt at  $\gamma = \beta_{i+\bar{M}}$ , dvs. perlen man opnår ved at følge  $\beta$ 's verdenslinie  $\bar{M}$  links tilbage i imaginær tid. Er dette ej muligt, eller er  $\beta_i = \mathcal{M}$ , så opgives SWAP-forsøget.

Nu bruges CLOSE-metoden på stykket fra  $\mathcal{I}$  til  $\beta$ , og der genereres således  $\bar{M} - 1$  links. Samtidigt fjernes perlerne og forbindelserne mellem  $\beta$  og  $\gamma$  således at der opstår en verdenslinie med hoved i  $\gamma$  og hale i  $\beta$ . Der er to muligheder for operationen: Hvis  $\beta$  er del af en lukket verdenslinie, så vil den åbne orm forlænges med det antal links den verdenslinie indeholder, eller omvendt, hvis  $\beta$  tilhører samme verdenslinie som  $\alpha$ , så dannes en ny lukket verdenslinie, og den åbne verdenslinie forkortes med et tilsvarende stykke. Det totale partikkelantal er således bevaret. Transitionssandsynligheden bliver

$$D(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = P(\beta) \frac{\prod_{k=1}^{\bar{M}} \rho_0(\alpha_{i+k-1}, \alpha_{i+k}, \tau)}{\rho_0(\alpha_i, \alpha_{i+\bar{M}}, \bar{M} \tau)}$$

#### 6.4.4 Resultater

Simuleringen med orme-algoritmen forløber herefter næsten på samme måde som før, idet den eneste væsentlige forskel er, kun at udtage måledata i tilstande som er diagonale. Worm-Algoritmen blev forsøgt implementeret, men den blev ikke færdiggjort inden for tidsrammerne. Kun frie partikler blev udregnet, og resultaterne vedlægges ikke. Det skal dog noteres, at de foreløbige resultater med helium potentiale kvalitativt synes gode.

# Litteratur

- [1] R. A. Aziz, V. P. S. Nain, J. S. Carley, W. L. Taylor, and G. T. McConville. An accurate intermolecular potential for helium. *The Journal of Chemical Physics*, 70(9):4330–4342, 1979.
- [2] Simon B. *Functional Integration and Quantum Physics*, volume 86. Academic Press, New York, 1979.
- [3] M Boninsegni, N Prokof'ev, and B Svistunov. Worm algorithm for continuous-space path integral monte carlo simulations, 2005.
- [4] M. Boninsegni, N. Prokof'ev, and B. Svistunov. Worm algorithm for continuous-space path integral monte carlo simulations. *Physical Review Letters*, 96(7):070601–+, February 2006.
- [5] D. M. Ceperley. Path integrals in the theory of condensed helium. *Rev. Mod. Phys.*, 67(2):279–355, Apr 1995.
- [6] D. M. Ceperley and E. L. Pollock. Path-integral computation of the low-temperature properties of liquid  ${}^4\text{He}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 56(4):351–354, Jan 1986.
- [7] D. M. Ceperley and E. L. Pollock. Path-integral simulation of the superfluid transition in two-dimensional  ${}^4\text{He}$ . *Phys. Rev. B*, 39(4):2084–2093, Feb 1989.
- [8] Kurt R. Glaesemann and Laurence E. Fried. Improved heat capacity estimator for path integral simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 117(7):3020–3026, 2002.
- [9] Seogjoo Jang, Soonmin Jang, and Gregory A. Voth. Applications of higher order composite factorization schemes in imaginary time path integral simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 115(17):7832–7842, 2001.
- [10] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [11] E. L. Pollock and D. M. Ceperley. Simulation of quantum many-body systems by path-integral methods. *Phys. Rev. B*, 30(5):2555–2568, Sep 1984.
- [12] A. C. Siu. Symplectic integrators from composite operator factorizations. *Physics Letters A*, 226:344–348, February 1997.
- [13] R. G. Storer. Path-integral calculation of the quantum-statistical density matrix for attractive coulomb forces. *Journal of Mathematical Physics*, 9(6):964–970, 1968.
- [14] H. F. Trotter. *Proc. Am. Math. Soc.*, 10(545), 1959.