



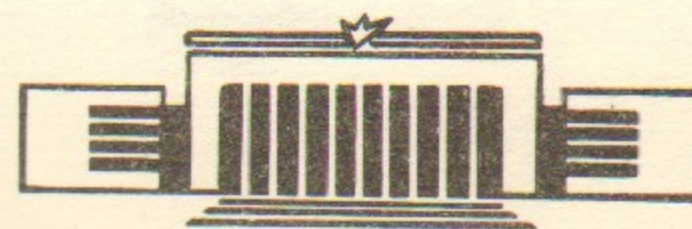
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

46

А.Г. Грозин, Н.А. Грозина

**МОНТЕ-КАРЛОВСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СИСТЕМ ТОЖДЕСТВЕННЫХ БОЗОНОВ**

ПРЕПРИНТ 85-141



НОВОСИБИРСК

МОНТЕ-КАРЛОВСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ ТОЖДЕСТВЕННЫХ
БОЗОНОВ

А.Г.Грозин, Н.А.Грозина

А Н Н О Т А Ц И Я

Рассматривается методика Монте-Карловского моделирования квантовомеханических систем. Теоретически найдена оптимальная величина максимального смещения на одном шаге алгоритма Метрополиса. В одномерном случае она равна $2.62 \sqrt{a/m}$ (a - шаг по времени, m - масса частицы); в трехмерном случае - $1.7 \sqrt{a/m}$. Предложено обобщение стандартного алгоритма Метрополиса на случай систем тождественных частиц. Для фермионов этот метод имеет довольно ограниченную область применимости: небольшое число частиц при не очень сильном вырождении. Для бозонов же он позволяет исследовать многочастичные системы со взаимодействием при любой температуре непосредственно из первых принципов. Работоспособность предложенного метода проверена на ряде простых примеров: две тождественных частицы во внешнем поле, одномерный и трехмерный бозе-газ. В последнем случае наблюдается бозе-конденсация.

MONTE-CARLO SIMULATION OF THE SYSTEMS
OF IDENTICAL BOSONS

A.G.Grozin, N.A.Grozina

Institute of Nuclear Physics,
630090, Novosibirsk, U S S R

Abstract

Methodical questions of the Monte-Carlo simulation of quantum mechanical systems are discussed. The optimum value of the maximum shift on one step of the Metropolis algorithm is found theoretically. In the one-dimensional case it equals $2.62 \sqrt{a/m}$ (here a is the time step and m is the mass); in the three-dimensional case it equals $1.7 \sqrt{a/m}$. The generalization of the standard Metropolis algorithm to the case of the systems of identical particles is suggested. This method has rather restricted applicability region for fermions (not large number of particles and not strong degeneracy). In the case of bosons, however, it enables one to investigate many-particle interacting systems at any temperature, starting from the first principles. The workability of the method is tested on some simple examples: two identical particles in the external field, one- and three-dimensional bose-gas. In the last case the bose-condensation has been seen.

I. Монте-Карловское моделирование является мощным и универсальным методом численного решения задач квантовой механики [1-2] и квантовой теории поля [3-4]. Он используется для приближенного вычисления Фейнмановских интегралов по траекториям. Амплитуда перехода системы из точки x_0 в точку x_1 за время t дается интегралом по траекториям, начинающимся в x_0 и оканчивающимся в x_1 (x обозначает совокупность координат всех частиц системы) [5] (рис.1а)

$$\langle t x_1 | 0 x_0 \rangle = \sum_n e^{-iE_n t} \langle x_1 | n \rangle \langle n | x_0 \rangle = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x_1} \mathcal{D}x e^{iS}, \quad (1)$$

$$S = \int_0^t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - U(x) \right] dt$$

Здесь $|n\rangle$ - полный набор собственных состояний гамильтониана с энергиями E_n . Для того, чтобы приближенное вычисление интеграла (1) стало возможным, необходимо превратить осциллирующую экспоненту в убывающую. Это достигается переходом к мнимому времени $t = -i\tau$

$$\langle \tau x_1 | 0 x_0 \rangle = \sum_n e^{-E_n \tau} \langle x_1 | n \rangle \langle n | x_0 \rangle = \int_{x(0)=x_0}^{x(\tau)=x_1} \mathcal{D}x e^{-S}, \quad (2)$$

$$S = \int_0^\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + U(x) \right] d\tau$$

Средние от любых функций координат $A(x)$ по каноническому ансамблю при температуре T могут быть выражены через интегралы по траекториям, периодическим по мнимому времени с периодом $\beta = 1/T$ (рис.1б)

$$\langle A(x) \rangle_{T=1/\beta} = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{A} | n \rangle}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = \frac{\int A(x) \langle \beta x | 0 x \rangle dx}{\int \langle \beta x | 0 x \rangle dx} = \quad (3)$$

$$= \frac{\int dx \int_{x(0)=x}^{x(\tau)=x} \mathcal{D}x A(x) e^{-S}}{\int dx \int_{x(0)=x}^{x(\tau)=x} \mathcal{D}x e^{-S}} = \frac{\int \mathcal{D}x A(x(\tau)) e^{-S}}{\int \mathcal{D}x e^{-S}}$$

В последней форме записи подразумевается интеграл по всем замкнутым траекториям. В силу однородности по времени, $A(x(\tau))$ можно вычислять в произвольный момент τ , или усреднить $A(x(\tau)) \rightarrow \frac{1}{\beta} \int_0^\beta A(x(\tau)) d\tau$.

Если $T \ll \Delta E$, где $\Delta E = E_1 - E_0$ — энергетическая щель, т.е. $\beta \gg 1/\Delta E$, то средние по каноническому ансамблю сводятся к средним по основному состоянию. Изучая корреляционные функции типа $\langle \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle$, можно получить информацию о низших возбужденных состояниях в различных каналах. Среднее

$$\langle \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle = \langle e^{\hat{H}\tau} \hat{A} e^{-\hat{H}\tau} \hat{B} \rangle = \frac{\sum_{nm} e^{-E_n(\beta-\tau) - E_m\tau} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle}{\sum_n e^{-E_n\beta}} \quad (4)$$

при $\Delta E \cdot (\beta - \tau) \gg 1$ и $\Delta E_2 \cdot \tau \gg 1$ сводится к виду ($\Delta E_1 = E_1 - E_0$, $\Delta E_2 = E_2 - E_1$)

$$\langle \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = e^{-\Delta E_1 \tau} \langle 0 | \hat{A} | 1 \rangle \langle 1 | \hat{B} | 0 \rangle \quad (5)$$

Здесь $|1\rangle$ — низшее возбужденное состояние, получаемое из $|0\rangle$ действием операторов \hat{A}, \hat{B} , E_1 — его энергия; E_2 — энергия следующего возбужденного состояния в том же канале. Таким образом, $1/\Delta E_1$ является длиной корреляции операторов \hat{A} и \hat{B} , а коэффициент при экспоненте дает информацию о матричных элементах.

Для приближенного вычисления интеграла (3) непрерывное мнимое время τ заменяется дискретной решеткой $\tau_i = a i$, $i = 0, 1, \dots, n$, $x_0 = x_n, a n = \beta$ (рис. 1в)

$$\langle A(x) \rangle_\tau \approx \frac{\int \prod_i dx_i A(x_i) e^{-S}}{\int \prod_i dx_i e^{-S}}, \quad S = \sum_i \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{a} + U(x_i) a \right] \quad (6)$$

Эту формулу можно интерпретировать как среднее по классическому каноническому ансамблю траекторий, у которых S играет роль энергии, а $\hbar = 1$ — роль температуры. Систему траекторий можно представлять себе как систему полимерных молекул, соседние атомы которых взаимодействуют через кинетический член в (6), а атомы разных молекул на одном временном слое взаимодействуют друг с другом и с внешним полем через

потенциальный член. Для приближенного вычисления среднего (6) можно применить известный из классической статистической механики метод Монте-Карло [6]. А именно, для генерации равновесного ансамбля систем с распределением вероятностей состояний α вида $P(\alpha) \sim e^{-S(\alpha)}$ организуется случайный процесс переходов между этими состояниями. Этот процесс вызывает релаксацию ансамбля к состоянию равновесия при выполнении двух условий:

- 1) любое состояние в принципе достижимо, и
- 2) вероятности переходов за 1 шаг $W(\alpha \rightarrow \beta)$ удовлетворяют принципу детального равновесия

$$P(\alpha) W(\alpha \rightarrow \beta) = P(\beta) W(\beta \rightarrow \alpha) \quad (7)$$

Практически на каждом шаге производятся элементарные локальные изменения одного из участков системы, остальная ее часть остается замороженной. Многократное повторение таких шагов для различных участков системы в конце концов приводит ее в состояние равновесия.

Существуют 2 основных алгоритма элементарных изменений:

- 1) Алгоритм тепловой ванны Крёйца [7], в котором выбранный участок системы приводится в равновесие с термостатом при замороженных остальных

$$W(\alpha \rightarrow \beta) \sim e^{-S(\beta)} \quad (8)$$

- 2) Алгоритм Метрополиса [8], в котором сначала выбирается пробное изменение состояния $\alpha \rightarrow \beta$ равновероятно из некоторой симметричной окрестности точки α . Вероятность такого перехода $W_0(\alpha \rightarrow \beta)$ симметрична $W_0(\alpha \rightarrow \beta) = W_0(\beta \rightarrow \alpha)$. Затем это пробное изменение принимается или отвергается. Вероятность его принятия при $\Delta S = S(\beta) - S(\alpha) < 0$ равна 1, а при $\Delta S > 0$ — $e^{-\Delta S}$:

$$W(\alpha \rightarrow \beta) = W_0(\alpha \rightarrow \beta) \times \begin{cases} \Delta S < 0 : 1 \\ \Delta S > 0 : e^{-\Delta S} \end{cases} \quad (9)$$

Алгоритм Метрополиса не приводит выбранный участок системы в равновесие с термостатом за один раз. Если над данным участком проводится большое число шагов этого алгоритма подряд, он сводится к алгоритму тепловой ванны. Поэтому очевидно, что он требует большего числа шагов для установления равновесия. Однако один шаг алгоритма Метрополиса легко реализу-

ется на ЭВМ, для этого достаточно генерации небольшого количества случайных чисел с равномерным распределением, что занимает мало времени. Один шаг алгоритма тепловой ванны требует генерации нового состояния в соответствии со сложным распределением (8). Реализовать его может быть сложно, и он может потребовать большого времени.

Алгоритм тепловой ванны легко реализуется в том случае, когда из каждого состояния a допускается лишь конечное и небольшое число переходов $a \rightarrow b$. Тогда можно вычислить все вероятности $W(a \rightarrow b)$, после чего генерация b становится элементарной. Другой случай — это когда есть простой алгоритм генерации случайного числа с распределением (8). Например, если это распределение гауссово, то можно использовать сумму достаточно большого количества независимых равномерно распределенных случайных чисел, которая, как известно, распределена по гауссу.

Существует также алгоритм "демона" Крёйца, который генерирует микроканонический ансамбль систем [9]. Демон прыгает по системе, имея некоторый запас энергии, и на каждом участке делает пробные изменения, как в алгоритме Метрополиса. Если энергия системы уменьшилась, $\Delta S < 0$, то изменение принимается, и демон забирает себе освободившуюся энергию. Изменения с $\Delta S > 0$ принимаются только тогда, когда у демона хватает энергии для передачи её системе. Энергия системы сохраняется с точностью до средней энергии демона. Вероятности переходов симметричны $W(a \rightarrow b) = W(b \rightarrow a)$, т.е. согласуются с принципом детального равновесия (7) для микроканонического ансамбля $P(a) = \text{const}$ в тонком энергетическом слое. В случае большой системы (например, траектории с $\beta \rightarrow \infty$) микроканонический ансамбль эквивалентен каноническому. При применении этого алгоритма возникает трудность: вместо температуры нужно фиксировать (через начальные условия) энергию системы, равную средней энергии при температуре $\beta = 1$. Достоинство его состоит в том, что если демон прыгает далеко, он может переносить энергию на большие расстояния, ускоряя релаксацию крупномасштабных флуктуаций. В предельном случае большого числа демонов, суммарная энергия которых много больше энергии системы, демоны образуют термостат, и распределение становится каноническим.

Еще один подход — это стохастическое квантование Паризи-Ву [10]. В этом случае вводится дополнительное время t , и система эволюционирует в нём под действием случайной силы F в соответствии с уравнением Ланжевена

$$\frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial S}{\partial x_i} = F_i(t), \quad \overline{F_i(t)} = 0, \quad \overline{F_i(t)F_j(t')} = 2\delta_{ij}\delta(t-t') \quad (10)$$

Функция распределения $P(t, x)$, как известно, удовлетворяет уравнению Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial j_i}{\partial x_i} = 0, \quad j_i = A_i P - \frac{1}{2} B_{ij} \frac{\partial P}{\partial x_j} \quad (11)$$

где в потоке вероятности j_i первый член описывает среднюю скорость дрейфа

$$A_i = \frac{\overline{\Delta x_i}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \left[-\frac{\partial S}{\partial x_i} + F_i(t) \right] dt = -\frac{\partial S}{\partial x_i} \quad (12)$$

а второй — диффузию

$$B_{ij} = \frac{\overline{\Delta x_i \Delta x_j}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} dt \int_0^{\Delta t} dt' \left[-\frac{\partial S}{\partial x_i} + F_i(t) \right] \left[-\frac{\partial S}{\partial x_j} + F_j(t') \right] = 2\delta_{ij} \quad (13)$$

По прошествии достаточно большого времени t , устанавливается равновесное распределение вероятностей $P(x)$, и поток

$$j_i = 0 : \\ j_i = -\frac{\partial S}{\partial x_i} P - \frac{\partial P}{\partial x_i} = 0, \quad P \sim e^{-S} \quad (14)$$

Прямое решение уравнения Ланжевена (10) малыми шагами по времени близко напоминает алгоритм Метрополиса с малой величиной пробных смещений атомов, и потому требует существенно больше шагов для установления равновесия, чем алгоритм Метрополиса с оптимальным выбором смещения. Однако в этом случае существует возможность одновременно моделировать исходную систему с действием S и систему с действием $S + \Delta S$ в одном и том же поле случайных сил $F_i(t)$, и наблюдать малые изменения средних $S < A >$, в которых сокращен статистический шум. Так, выбирая $\delta S = \epsilon x_i$, мы получим

$$\overline{Sx_j} = \frac{\int \mathcal{D}x e^{-S(1-\epsilon x_i)x_j}}{\int \mathcal{D}x e^{-S(1-\epsilon x_i)}} - \frac{\int \mathcal{D}x e^{-S} x_j}{\int \mathcal{D}x e^{-S}} = -\epsilon(\overline{x_i x_j} - \overline{x_i} \overline{x_j}) \quad (15)$$

Этот способ измерения $\overline{x_i x_j}$ дает много меньшую статистическую ошибку в случае малых корреляций [II].

2. Условия применимости дискретизации времени (4) состоят в следующем:

- 1) шаг по времени $a \ll T \sim \frac{1}{\omega} \sim \frac{1}{\Delta E}$, где T - характерный период движения частицы, и
- 2) смещение на одном шаге $\Delta x \sim \sqrt{\frac{a}{m}} \ll L$, где L - характерная длина изменения потенциала U (на которой он меняется на величину порядка полной энергии E).

При этих условиях, что вполне естественно, на малых интервалах времени $T \sim a$ траектория выглядит как в случае свободной частицы. Действительно, изменение потенциального члена действия (6) $\Delta S_{\text{пот}} \sim \Delta U \cdot a \sim E \frac{\Delta x}{L} \cdot a$. Учитывая также $E \sim mL^2\omega^2$, найдем $\Delta S_{\text{пот}} \sim E/\omega \sqrt{a/mL^2} \omega a$. Два последних множителя малы в силу условий применимости. Поэтому, если исключить глубоко классическую область огромных значений E/ω , $\Delta S_{\text{пот}} \ll 1$.

Типичная траектория представляет собой дрожащую ломаную линию (рис.1в) с характерной длиной звена

$$\overline{(x_{i+1} - x_i)^2} = a/m \quad (16)$$

и слабой корреляцией между соседними звеньями

$$\overline{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} = a^2 \overline{v^2} \quad (17)$$

где $\overline{v^2}$ - средний квадрат скорости частицы [I]. В силу слабости корреляций ($a \cdot m \overline{v^2} \sim a \omega \cdot E/\omega \ll 1$) каждое звено распределено практически независимо от соседних как $e^{-S} \sim \exp(-m(x_{i+1} - x_i)^2/2a)$, откуда следует (16). Формула (17) позволяет, в принципе, измерить среднюю кинетическую энергию, однако (17) есть малое среднее больших слагаемых порядка (16), так что велики статистические ошибки. Когда это возможно, лучше пользоваться теоремой вириала.

В качестве элементарных изменений в алгоритме Метрополиса берутся сдвиги $x_i \rightarrow x'_i = x_i + \xi$ (рис.2а). При этом

$$\Delta S = \frac{m}{a} (x'_i - x_i)(x'_i + x_i - x_{i+1} - x_{i-1}) \quad (18)$$

Алгоритм содержит свободный параметр - максимальную величину пробного смещения ξ_{max} . В принципе, его значение несущественно, т.к. система в любом случае придет в равновесие. Однако он сильно влияет на скорость релаксации. Ясно, что его следует выбирать из условия $\Delta S \sim 1$, откуда $\xi_{\text{max}} \sim \sqrt{a/m}$. При слишком большом ξ_{max} почти все предлагаемые изменения будут отвергаться, а при слишком малом состояние системы будет меняться слишком медленно. В последнем случае алгоритм Метрополиса переходит в решение уравнения Ланжевена (10) малыми шагами Δt , причем из (13) следует $\overline{\xi^2} = 2\Delta t$. Поэтому величину $\overline{\xi^2}/2$ качественно можно рассматривать как промежуток Ланжевеновского времени, эквивалентный 1 шагу алгоритма, т.е. как меру скорости релаксации. Рассмотрим вопрос об оптимальном выборе ξ_{max} количественно.

Перейдем к безразмерным переменным $\xi = \sqrt{a/m} x$, $\xi_{\text{max}} = \sqrt{a/m} 2z$. Действие уменьшается при сдвиге, когда x лежит между 0 и $2y$, где $x_i = (x_{i+1} + x_{i-1})/2 = \sqrt{a/m} y$ (рис.3). В зависимости от соотношения максимального смещения z и величины изгиба траектории y , распределение вероятности сдвига x будет таким, как показано на рис.4а или 4б. Недостающая площадь, отрезанная экспонентами $e^{-\Delta S}$, сосредоточена в виде δ -функции при $x=0$. Для сравнения на рисунках пунктиром изображено распределение для алгоритма тепловой ванны. Для среднеквадратичного изгиба мы имеем

$$\overline{y^2} = \frac{m}{a} \left(\frac{x_i - x_{i+1}}{2} + \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \right)^2 = \frac{m}{a} \cdot 2 \frac{(x_i - x_{i+1})^2}{4} = \frac{1}{2} \quad (19)$$

Распределение по y всегда должно приближенно совпадать с распределением в случае свободной частицы, т.е. являться гауссовым $\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2} dy$. На плоскости x, y (рис.4в) область B соответствует $\Delta S < 0$, т.е. единичной вероятности принятия сдвига. Области A и C соответствуют $\Delta S > 0$, и вероятность $e^{-\Delta S} = e^{-x^2 + 2xy}$. Поэтому для среднеквадратичного смещения частицы на одном шаге алгоритма Метрополиса, усредненного дополнительно по ансамблю траекторий, т.е. фактически по y , мы получим

$$\overline{x^2} = \frac{1}{4z\sqrt{\pi}} \left(\int_B e^{-y^2} + \int_{A+C} e^{-(x-y)^2} \right) x^2 dx dy \quad (20)$$

Вычисляя интегралы, найдем (рис.5)

$$\overline{x^2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} z \left[1 - (1+z^2)e^{-z^2} + \sqrt{\pi} z^3 \operatorname{erfc}(z) \right] \quad (21)$$

Эта функция стремится к 0 как при малых z

$$\overline{x^2} = \frac{4}{3} z^2 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} z^3 + O(z^5) \quad (22)$$

так и при больших

$$\overline{x^2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{1}{z} \left[1 + O(e^{-z^2}) \right] \quad (23)$$

что подтверждает сделанные выше качественные выводы. Она имеет максимум в точке $z_m = 1.31$, составляющий $\overline{x_m^2} = 0.44$. Для сравнения отметим, что в алгоритме тепловой ванны $\overline{x^2} = 1$, т.е. он более чем вдвое превосходит оптимизированный алгоритм Метрополиса.

Сформулируем выводы, возвращаясь к обычным единицам. Оптимальная величина максимального сдвига на шаге алгоритма Метрополиса составляет

$$\overline{z}_m = 2 z_m \sqrt{\frac{a}{m}} = 2.62 \sqrt{\frac{a}{m}} \quad (24)$$

При этом среднеквадратичное смещение $\overline{z^2} = 0.44 \frac{a}{m}$, по сравнению с $\overline{z^2} = \frac{a}{m}$ для алгоритма тепловой ванны.

Этот результат тривиально обобщается на квантовую теорию поля. Если поле ψ нормировано так, что кинетический член равен $\frac{1}{2}(\partial_\mu \psi)^2$, то в d -мерном случае оптимальная величина максимального смещения ψ равна $2.62/\sqrt{da^{d-2}}$.

Для квантовой частицы в d -мерном пространстве существуют различные модификации алгоритма Метрополиса. Если на каждом шаге производить сдвиг лишь по одной координате, то все сводится к рассмотренному случаю. Пробный сдвиг \overline{z} можно равновероятно выбирать из куба со стороной $2 \overline{z}_m$, шара с радиусом \overline{z}_m или, вообще говоря, любой центрально-симметричной области. Проще всего реализуется выборка из куба. В этом случае области $\Delta S < 0$ и $\Delta S > 0$ разделяются частью сферы $|\Delta S| = \overline{x}^2 - 2\overline{x} \cdot \overline{y}$ с центром в точке \overline{y} , лежащей внутри куба. Поэтому $2d$ -мерные области B и $A+C$ имеют довольно сложную форму, и интеграл в общем виде не вычисляется. В предельном случае $z \ll 1$

$$\overline{x^2} = \frac{4d}{3} z^2 \quad (25)$$

а при $z \gg 1$

$$\overline{x^2} = \frac{\pi^{d/2} \Gamma(d+2)}{2^{2d-3} d(d+2) \Gamma^2(d/2)} \frac{1}{z^d} \quad (26)$$

В наиболее важном практически трехмерном случае функция $\overline{x^2}(z)$ была определена численно, результат представлен на рис.5. Она имеет максимум при $z_m = 0.85$, составляющий $\overline{x_m^2} = 0.58$, то есть ($d = 3$)

$$\overline{z}_m = 1.7 \sqrt{\frac{a}{m}}, \quad \overline{z^2} = 0.58 \frac{a}{m} \quad (27)$$

(для алгоритма тепловой ванны $\overline{z^2} = d \frac{a}{m}$).

3. До сих пор рассматривались задачи об одной частице или системе нетождественных частиц. В случае системы N тождественных частиц в формулах, аналогичных (1-2), необходимо суммирование по всем способам соединения начальных точек траекториями с конечными точками, т.е. по всем перестановкам P этих N частиц (рис.6а)

$$\langle \tau x_1 | 0 x_0 \rangle = \frac{1}{N!} \sum_P (\pm 1)^P \int_{x(0)=x_0}^{x(\tau)=px_1} \mathcal{D}x e^{-S} \quad (28)$$

где Px_1 - результат действия перестановки P на набор координат частиц x_1 , $(-1)^P$ - четность перестановки, знак + берется для бозонов, знак - для фермионов. В формулах, аналогичных (3, 6), необходимо суммирование по всем способам замыкания траекторий (с множителем $(\pm 1)^P$), (рис.6б)

$$\langle A(x) \rangle_T = \frac{\sum_P (\pm 1)^P \int_P \mathcal{D}x A(x(\tau)) e^{-S}}{\sum_P (\pm 1)^P \int_P \mathcal{D}x e^{-S}} \quad (29)$$

где, конечно, функция $A(x)$ должна быть симметрична: $A(Px) = A(x)$. Комплекс из k частиц, объединенных общей траекторией, k раз обвивающейся вокруг цилиндра, следуя [12], называют тором порядка k .

В случае системы тождественных бозонов формулу (29) можно по-прежнему интерпретировать как среднее по классическому каноническому ансамблю замкнутых траекторий на цилиндре, только теперь в этот ансамбль помимо одновитковых траекторий входят многовитковые. Поэтому для того, чтобы любое состояние системы было в принципе достижимо, нужен новый тип элементарных изменений в дополнение к сдвигам (рис.2а). Таким элементарным изменением является перекрест траекторий, или *crossing over*, если воспользоваться очень удачным термином из генетики (рис.2б). Для него

$$\Delta S = \frac{m}{a} (x_i - x_{i'}) (x_{i+1} - x_{i'+1}) \quad (30)$$

Разумно делать попытку перекреста по алгоритму Метрополиса не для любой пары частиц, а только для достаточно близких пар, скажем с $|x_i - x_{i'}| < \xi_{max}$, т.к. попытки перекреста далеких пар будут почти наверняка отвергаться. Из условия $\Delta S \sim 1$ получим $\xi_{max} \sim \sqrt{a/m}$, т.е. эта величина того же порядка, что и максимальный сдвиг на обычном шаге алгоритма Метрополиса.

В случае же системы тождественных фермионов $(-1)^P e^{-S}$ невозможно интерпретировать как вероятность. Можно, однако, разделить числитель и знаменатель формулы (29) на аналогичный знаменатель для бозонов, и получить

$$\langle A \rangle_F = \frac{\langle (-1)^P A \rangle_B}{\langle (-1)^P \rangle_B} \quad (31)$$

где $\langle \rangle_F$ обозначает среднее для ферми-системы, а $\langle \rangle_B$ — для бозе-системы, т.е. по описанному выше ансамблю траекторий. Такой метод вычисления средних для ферми-систем практически применим только тогда, когда в среднем $\langle (-1)^P \rangle_B$ не происходит сильной компенсации, т.е. для небольшого числа частиц при не очень сильном вырождении (см. пункт 4).

4. В качестве простейшего примера рассмотрим систему из двух тождественных частиц во внешнем поле, не взаимодействующих друг с другом. Их траектории могут быть отдельными или сцепленными в 2-торон (рис.6б). Вклады этих классов траекторий в статсумму $Z(\beta) = \int \mathcal{D}x e^{-S}$ равны $Z_1^2(\beta)$ и $Z_1(2\beta)$, где $Z_1(\beta)$ — статсумма для одной частицы в том же внешнем по-

ле, потому что период сцепленной траектории составляет 2β . Статсумма $Z(\beta)$ и вероятность сцепления траекторий $P(\beta)$ равны

$$2Z(\beta) = Z_1^2(\beta) + Z_1(2\beta), \quad P(\beta) = \frac{Z_1(2\beta)}{Z_1^2(\beta) + Z_1(2\beta)} \quad (32)$$

При высоких температурах $T \gg \Delta E$ тождественность не существенна, и $P \rightarrow 0$. При низких температурах $T \ll \Delta E$ частицы находятся в основном состоянии, $Z_1(\beta) = e^{-\beta E_0}$ и $P \rightarrow 1/2$. Поэтому для фермионов нельзя получать средние по формуле (31) при $T \ll \Delta E$; однако это возможно при $T \gtrsim \Delta E$, когда эффекты тождественности могут быть порядка I. Среднее от любой функции координат $A(x)$ выражается для пары бозонов или фермионов через среднее для различных частиц в том же поле $\langle A \rangle_D(\beta)$:

$$\langle A \rangle_B(\beta) = (1-P) \langle A \rangle_D(\beta) + P \langle A \rangle_D(2\beta) \quad (33)$$

$$\langle A \rangle_F(\beta) = \frac{(1-P) \langle A \rangle_D(\beta) - P \langle A \rangle_D(2\beta)}{(1-P) - P}$$

Поскольку средняя энергия выражается по теореме вириала через среднее от функции координат, для нее также справедлива формула (33).

В случае двух частиц равновесие относительно перекрестов удобно поддерживать с помощью алгоритма тепловой ванны, т.к. есть только одна вероятность перехода $W(a \rightarrow b)$.

Для проверки работоспособности изложенного метода проводилось моделирование пары тождественных частиц в осцилляторном потенциале. В этом случае

$$P(\beta) = \frac{1}{2} (1 - e^{-\omega\beta}), \quad \frac{E_D}{\omega} = \text{cth} \frac{\omega\beta}{2}, \quad (34)$$

$$\frac{E_{B,F}}{\omega} = \frac{1}{2} \text{th} \frac{\omega\beta}{2} + \text{th} \omega\beta \mp \frac{1}{2}$$

Условие применимости дискретизации времени (6) очевидно: $a \ll 1/\omega$. Возникающие систематические ошибки можно определить из сравнения (34) с точными формулами для $a \neq 0$, полученными в [1] *

*Примечание см. на следующей странице

$$z_1 = \frac{(2\pi a R)^{n/2}}{1-R^n}, \quad \overline{x_i x_{i+j}} = \frac{a}{m} \frac{1}{R^{1-R}} \frac{R^i + R^{n-j}}{1-R^n}, \quad \overline{x^2} = \frac{a}{m} \frac{1}{R^{1-R}} \frac{1+R^n}{1-R^n} \quad (35)$$

где $R = 1 + \frac{(wa)^2}{2} - wa \sqrt{1 + \frac{(wa)^2}{4}}$, $A = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{(wa)^2}{4}}}$, $\tilde{\omega} a = -\ln R = wa \left[1 - \frac{(wa)^2}{24} + O((wa)^4) \right]$;
 $P = \frac{1}{2}(1-R^n) = \frac{1}{2}(1 - e^{-\tilde{\omega}\beta}) = \frac{1}{2}(1 - e^{-\omega\beta}) \left[1 - \frac{\omega\beta}{1 - e^{-\omega\beta}} \frac{(wa)^2}{24} + O((wa)^4) \right]$,

$$\frac{E_D}{\omega} = A \frac{1+R^n}{1-R^n} = A \operatorname{cth} \frac{\tilde{\omega}\beta}{2} = \operatorname{cth} \frac{\omega\beta}{2} \left[1 - \left(1 - \frac{\omega\beta}{3 \operatorname{sh} \omega\beta} \right) \frac{(wa)^2}{8} + O((wa)^4) \right],$$

$$\frac{E_{B,F}}{\omega} = A \left[\frac{1}{2} \frac{1+R^n}{1-R^n} + \frac{1+R^{2n}}{1-R^{2n}} + \frac{1}{2} \right] = A \left[\frac{1}{2} \operatorname{cth} \frac{\tilde{\omega}\beta}{2} + \operatorname{cth} \tilde{\omega}\beta + \frac{1}{2} \right] \\ = \left[\frac{1}{2} \operatorname{cth} \frac{\omega\beta}{2} + \operatorname{cth} \omega\beta + \frac{1}{2} \right] \left[1 - \left(1 - \frac{2\omega\beta}{3 \operatorname{sh} \omega\beta} \frac{e^{\omega\beta/2}}{1 + e^{\omega\beta/2}} \right) \frac{(wa)^2}{8} + O((wa)^4) \right] \quad (36)$$

$$2m\omega \overline{x_i x_{i+j}} = A \frac{R^i + R^{n-j}}{1-R^n} = A \frac{\operatorname{ch} \tilde{\omega}(\frac{\beta}{2} - \tau)}{\operatorname{sh} \tilde{\omega} \frac{\beta}{2}} \\ = \frac{\operatorname{ch} \omega(\frac{\beta}{2} - \tau)}{\operatorname{sh} \omega \frac{\beta}{2}} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{3} \omega(\frac{\beta}{2} - \tau) \operatorname{th} \omega(\frac{\beta}{2} - \tau) - \frac{1}{3} \omega \frac{\beta}{2} \operatorname{cth} \omega \frac{\beta}{2} \right) \frac{(wa)^2}{8} + O((wa)^4) \right], \quad \tau = \alpha j.$$

Для оценки статистической ошибки необходимо оценить число статистически независимых вкладов в $\overline{x^2}$. Длина корреляции по оси τ составляет $1/\Delta E = 1/\omega$ (см. пункт 1), так что число статистически независимых областей $\sim \beta/\omega$. Время релаксации легко определить из уравнения Ланжевена (10). Поскольку для осциллятора оно линейно, можно перейти от x_i к Фурье-компонентам x_k . Для $x_{k=0} = x_c$ - центра тяжести траектории - вклад в действие $S_c = \beta m \omega^2 x_c^2/2$, уравнение Ланжевена $\dot{x}_c + m\omega^2 \beta x_c = F_c$, поэтому время релаксации $t_z = 1/m\omega^2 \beta$. Для других мод оно меньше: $\omega^2 \rightarrow \omega^2 + \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{\pi k}{n}$, где k - номер гармоники. Учитывая, что 1 шаг алгоритма моделирования соответствует промежутку Ланжевеновского времени $\frac{1}{2} \tau^2/2$ (см. пункт 2), для N шагов получим $\sim N \cdot 0.44 \frac{a}{m} \cdot \frac{1}{2} \cdot m\omega^2 \beta$ статистически независимых вкладов.

Результаты моделирования приведены на рис.7-8: на рис.7 показана средняя энергия различных частиц, бозонов и фермионов в зависимости от температуры, а на рис.8 - вероятность сцепления траекторий.

5. В случае большого числа тождественных бозонов, они могут различными способами группироваться в тороны различных кратностей k . Для невзаимодействующих бозонов (возможно, во

ж) Отметим еще одно интересное следствие формул (35). Координата центра тяжести траектории осциллятора $x_c = \frac{1}{n} \sum x_i$ распределена как $e^{-S_c} = \exp(-m\omega^2 \beta x_c^2/2)$. т.е. $\overline{x_c^2} = T/m\omega^2$ равно $\overline{x^2}$ для классической частицы в осцилляторном потенциале. С учетом этого, при $\omega \rightarrow 0$ получим из (35) среднеквадратичный размер траектории свободной частицы $(x - x_c)^2 = \frac{\beta}{12m} (1 - \frac{1}{n^2})$ и корреляцию $(x_{i+j} - x_i)^2 = \frac{\beta}{m} \frac{j(n-j)}{n^2}$.

внешнем поле) тороны каждой кратности k образуют бозе-газ при обратной температуре $\beta_k = \beta k$, равной периоду траекторий. Когда число частиц $N \gg 1$, канонический ансамбль эквивалентен большому каноническому, и можно пользоваться распределением Бозе-Эйнштейна. Разлагая его в ряд, можно записать его как сумму распределений Больцмана с обратными температурами $\beta_k = \beta k$:

$$\frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} = \sum_{k=1}^{\infty} z^k e^{-\beta k \epsilon} \quad (37)$$

где $z = e^{\beta\mu} \leq 1$ - активность. Отсюда получаем число частиц, объединенных в тороны кратности k :

$$N_k = z^k \int e^{-\beta k \epsilon} \nu(\epsilon) d\epsilon \quad (38)$$

где $\nu(\epsilon)$ - плотность одночастичных уровней. Для многих систем $\nu(\epsilon) = N \epsilon^{\alpha-1} / \epsilon_0^\alpha$, например, для d -мерного бозе-газа с $\epsilon \sim p^2$ имеем $\alpha = d/2$. Тогда

$$\frac{N_k}{N} = \Gamma(\alpha) \left(\frac{T}{\epsilon_0} \right)^\alpha \frac{z^k}{k^\alpha} = \frac{1}{\zeta(\alpha)} \left(\frac{T}{T_B} \right)^\alpha \frac{z^k}{k^\alpha} \quad (39)$$

Вторая форма записи пригодна при $\alpha > 1$. В этом случае при температуре T_B происходит Бозе-конденсация. Действительно, при $T = T_B$ и $z = 1$ ($\mu = 0$) мы имеем $N = \sum_k N_k$. При $T < T_B$ не все частицы "помещаются" в тороны конечной кратности $\sum_k N_k$. Оставшиеся частицы образуют конденсат - макроскопически большие тороны с $k \sim N$, находящиеся при практически нулевой температуре $T_k = T/k \sim T/N$ и потому не дающие вклада в энергию и давление. Он аналогичен бесконечному кластеру в теории протекания: с понижением T увеличивается расстояние, на котором велика вероятность сцепления траекторий (оно порядка тепловой длины волны), и при $T = T_B$ образуется бесконечный кластер сцепленных траекторий - макроскопический торон (конденсат).

В идеальном бозе-газе во внешнем поле $U(x)$ тороны каждой кратности k имеют свое распределение Больцмана $\sim e^{-\beta k U(x)}$. При $T < T_B$ макроскопически большие тороны сосредоточены в минимуме $U(x)$ и образуют конденсат в координатном пространстве.

Условие применимости дискретизации времени (6) $a \ll \tau_{\text{шаг}}$ $\sim \frac{L}{v_{\text{шаг}}} \sim \frac{L}{\sqrt{mT/m}}$ можно, вводя температуру вырождения T_0 (при которой среднее расстояние между частицами $n^{-1/d}$, где $n = N/L^d$ - плотность, становится порядка тепловой длины волны $(mT_0)^{-1/2}$, откуда $T_0 \sim n^{2/d}/m$), записать в виде

$$\frac{\alpha}{\beta} \ll \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/2} N^{1/d} \quad (40)$$

Отсюда видно, что при $T \sim T_0$ и $N^{1/d} \gg 1$ допустимо использовать $\alpha = \beta$, т.е. один шаг по мнимому времени.

На рис.9 показаны теоретические и "экспериментальные" (из моделирования) значения N_k/N в зависимости от k (от 1 до 10), а также $\sum_{k>10} N_k/N$ для разных значений T/T_0 для одномерного бозе-газа. Наблюдается прекрасное согласие "эксперимента" с теорией; бозе-конденсации нет. На рис.10 изображено то же для трехмерного бозе-газа. В данном случае ошибки больше: систематические - потому что использовалось $N^{1/3} = 6$, так что условие $(T/T_0)^{1/2} N^{1/3} \gg 1$ выполняется не очень хорошо (особенно при низких T), и статистические - потому что набор большой статистики потребовал бы большого времени счета. Однако ясно видна бозе-конденсация. На рис.11 изображена парная корреляционная функция; она стремится к 1 при больших z и к 2 при малых. Наконец, на рис.12 изображено распределение частиц по $\beta x/T$ для одномерного бозе-газа в потенциале $U = \beta x$, и наблюдается бозе-конденсация в координатном пространстве.

Не возникает особых трудностей при включении взаимодействия между частицами бозе-газа. В настоящее время проводится моделирование бозе-газа твердых шаров.

Нам приятно поблагодарить О.В.Лирова за обсуждение методики Монте-Карловского моделирования.

ЛИТЕРАТУРА:

1. M.Creutz, B.Freedman. Ann. Phys. 132, 427 (1981).
2. E.V.Shuryak, O.V.Zhirov. Nucl. Phys. B242, 394 (1984).
3. M.Creutz, L.Jacobs, C.Rebbi. Phys. Reports 95, 201 (1983); M.Creutz. Quarks, gluons and lattices. Cambridge University Press (1983).
4. Ю.М.Макеенко. УФН 143, 161 (1984); IO школа ИТЭФ, вып.3, с.3, Атомиздат (1983).
5. R.P.Feynman, A.R.Hibbs. Quantum mechanics and path integrals. McGraw-Hill, New York (1965).
6. Monte Carlo methods in statistical physics, ed. K.Binder. Springer Verlag, Berlin (1979); Applications of the Monte Carlo methods in statistical physics, ed. K.Binder. Springer Verlag, Berlin (1984).
7. M.Creutz, L.Jacobs, C.Rebbi. Phys. Rev. Lett. 42, 1390 (1979); Phys. Rev. D20, 1915(1979); M.Creutz. Phys. Rev. D21, 2308(1980); Phys. Rev. Lett. 43, 553 (1979).
8. N.Metropolis a.o. J. Chem. Phys. 21, 1087(1953).
9. M.Creutz. Phys. Rev. Lett. 50, 1411(1983).
10. G.Parisi, Y.-S.Wu. Sci. Sin. 14, 483(1981).
11. G.Parisi. Nucl. Phys. B180, 337, 378(1981).
12. E.W.Montroll, J.C.Ward. Phys. Fluids 1, 55(1958).

Подписи к рисункам:

Рис.1. а) Примеры траекторий, дающих вклад в амплитуду перехода из $0, x_0$ в τ, x_1 .

б) Примеры траекторий, дающих вклад в средние по каноническому ансамблю; время τ периодически с периодом $\beta = 1/T$.

в) Примеры траекторий с дискретным временем $\tau_i = ai$.

Рис.2. Элементарные изменения в алгоритме Метрополиса:

а) сдвиг

б) перекрест (crossing over)

Рис.3. Область сдвигов x , в которой $\Delta S < 0$.

Рис.4. а, б) Распределение вероятностей сдвигов на шаге алгоритма Метрополиса; пунктиром изображено распределение для алгоритма тепловой ванны с произвольной относительной нормировкой.

в) Области интегрирования в формуле (20).

Рис.5. Зависимость \bar{x}^2 от Z в одномерном и трехмерном случае.

Рис.6. Траектории системы тождественных частиц

а) незамкнутые

б) замкнутые (тороны)

Рис.7. Зависимость средней энергии пары различных частиц (\mathcal{D}), бозонов (B) и фермионов (F) в осцилляторном потенциале от температуры: теоретические кривые и экспериментальные точки.

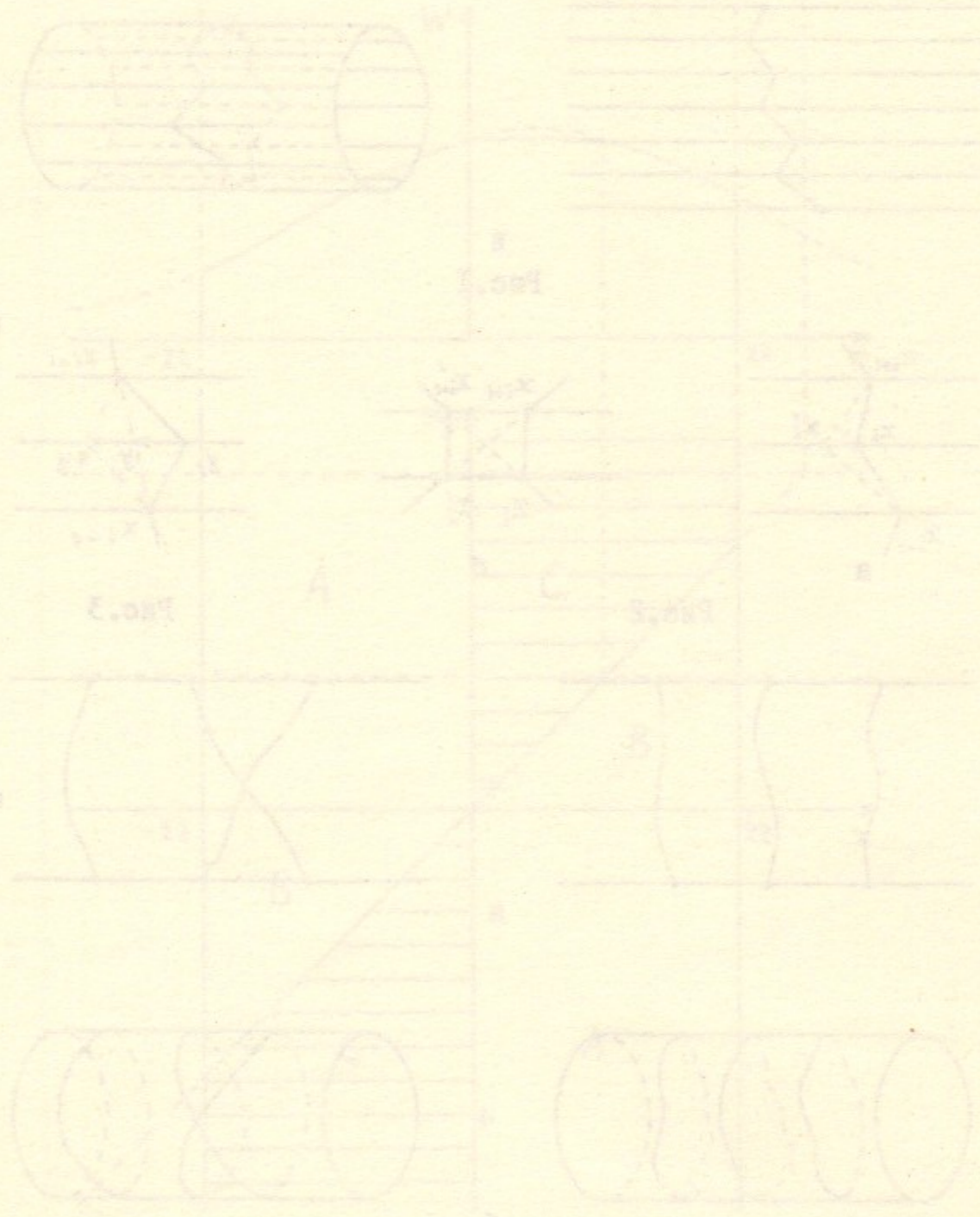
Рис.8. Зависимость вероятности сцепления траекторий от температуры.

Рис.9. Распределение частиц по торонам кратности $k \in [1, 10]$ и сумма по торонам с $k > 10$ для одномерного идеального бозе-газа при различных температурах T/T_0 : теоретические кривые и экспериментальные точки.

Рис.10. То же для трехмерного идеального бозе-газа. При $T < T_B$ большая часть частиц образуют макроскопические тороны - конденсат.

Рис.11. Парная корреляционная функция трехмерного бозе-газа. Она стремится к 1 при больших r и к 2 при малых. Кривая на рисунке - интерполяция экспериментальных данных с учетом этого требования.

Рис.12. Распределение частиц по $\beta x/T$ для одномерного бозе-газа в потенциале βx при различных T/T_0 ; для сравнения изображено бoльцмановское распределение $e^{-\beta x/T}$ ($T \rightarrow \infty$). При $T < T_B$ виден бозе-конденсат в координатном пространстве. В этом газе $\nu(\xi) \sim \xi^{1/2}$, поэтому все его термодинамические свойства такие же, как у трехмерного бозе-газа без поля.



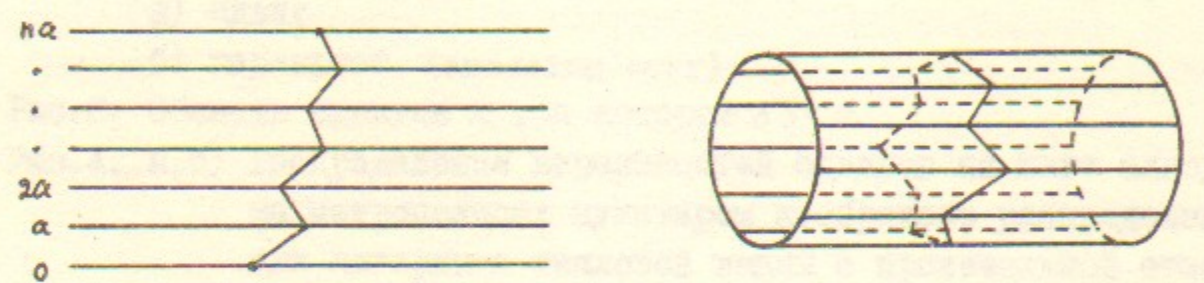
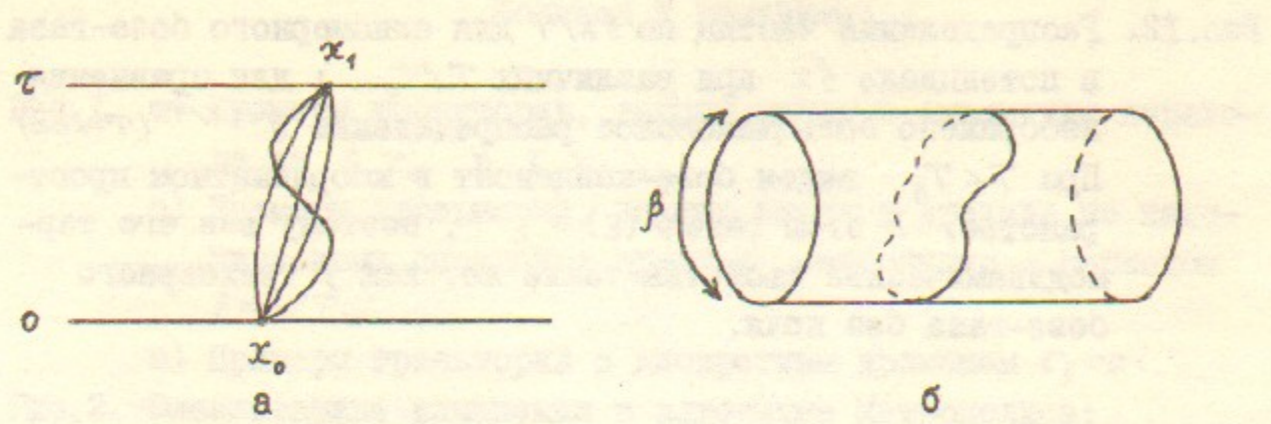


Рис.1

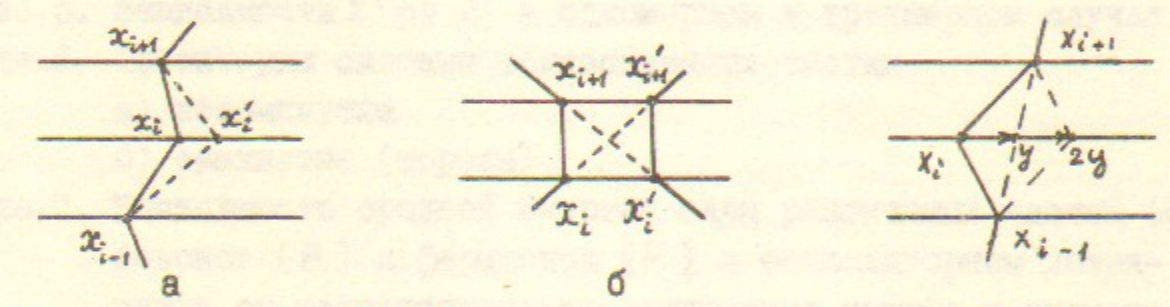
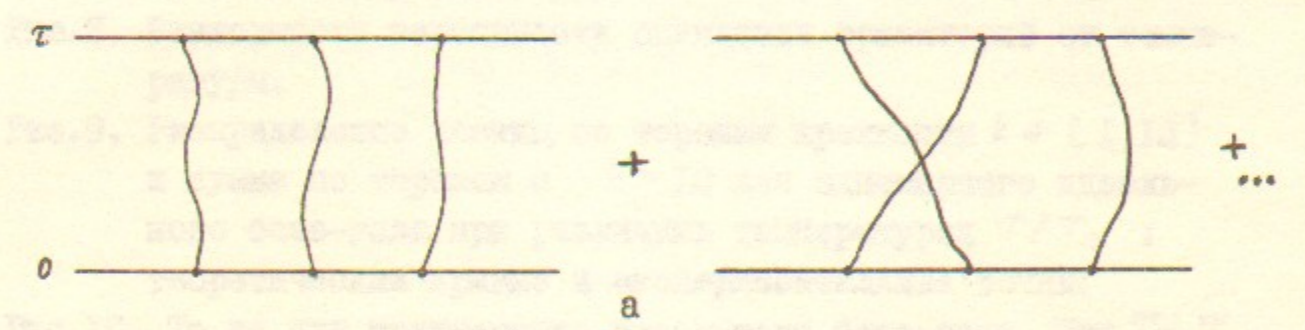
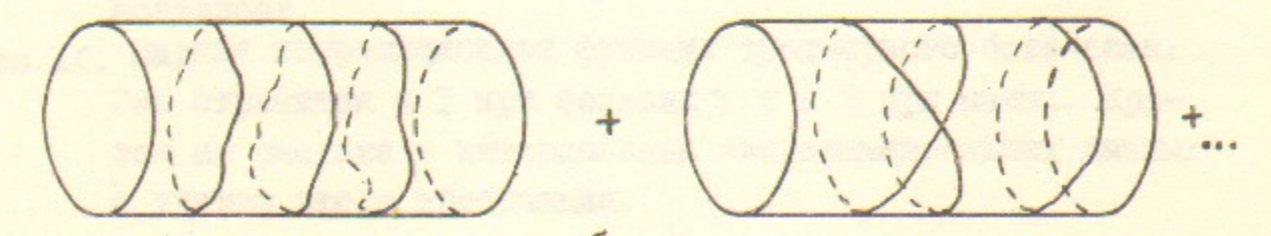


Рис.2

Рис.3



а



б
Рис.6

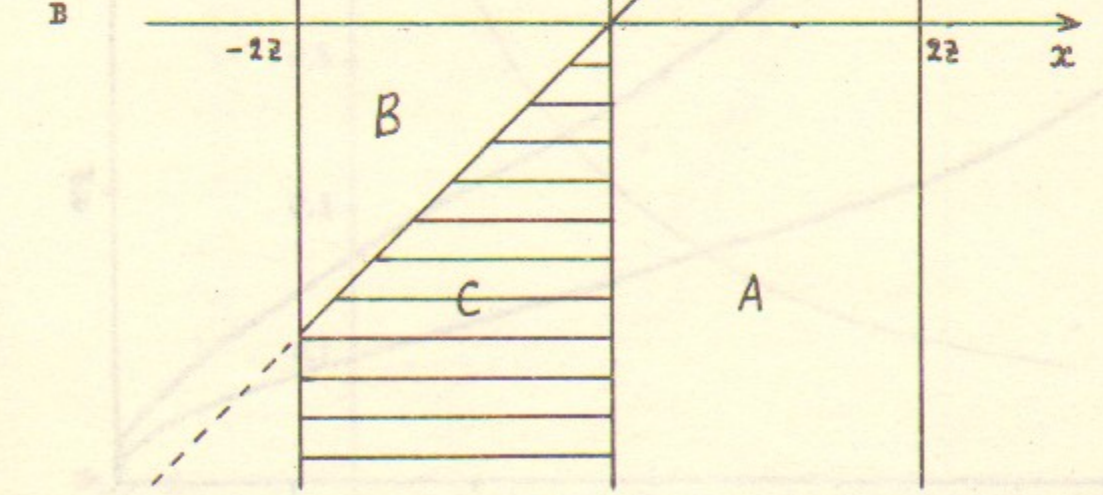
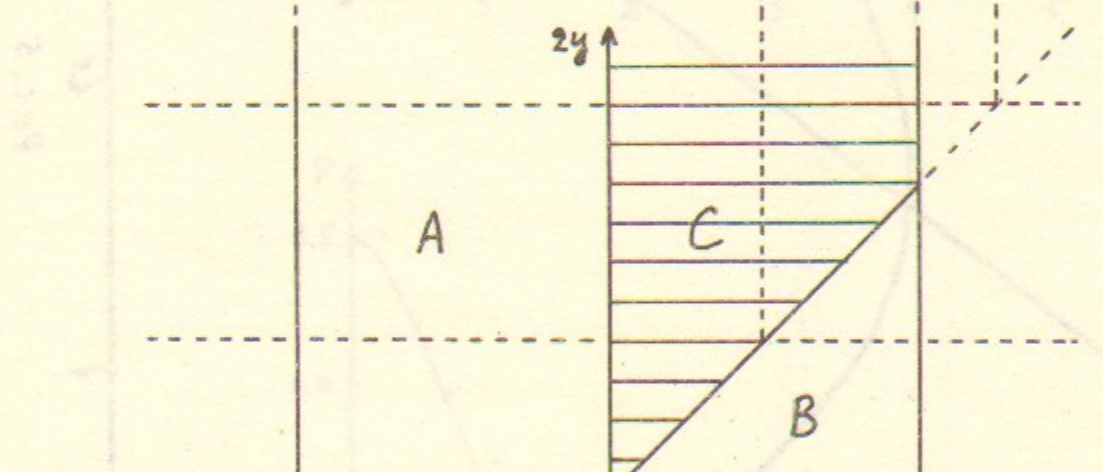
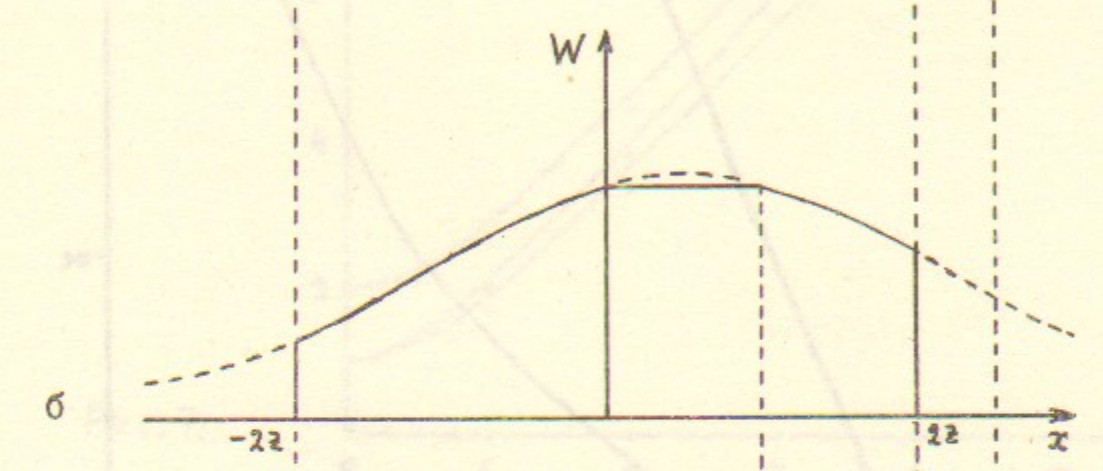
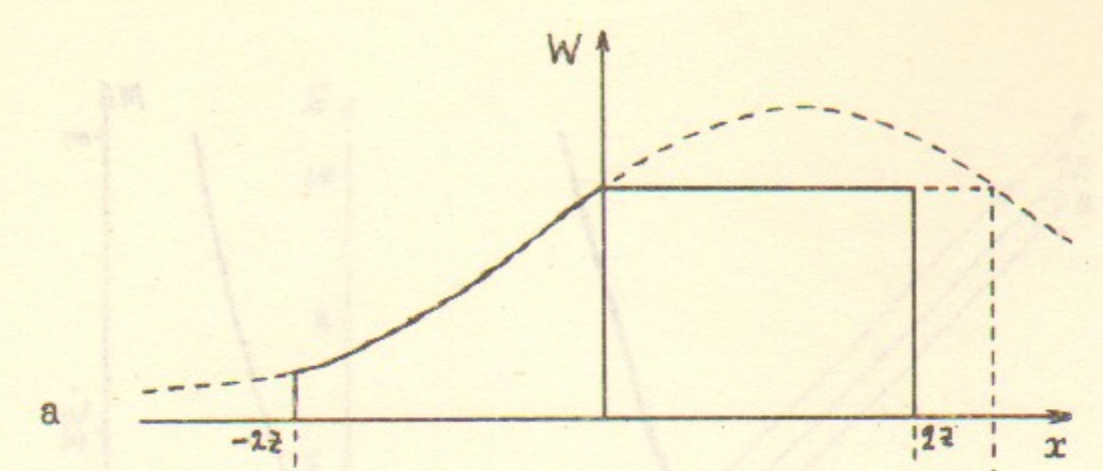
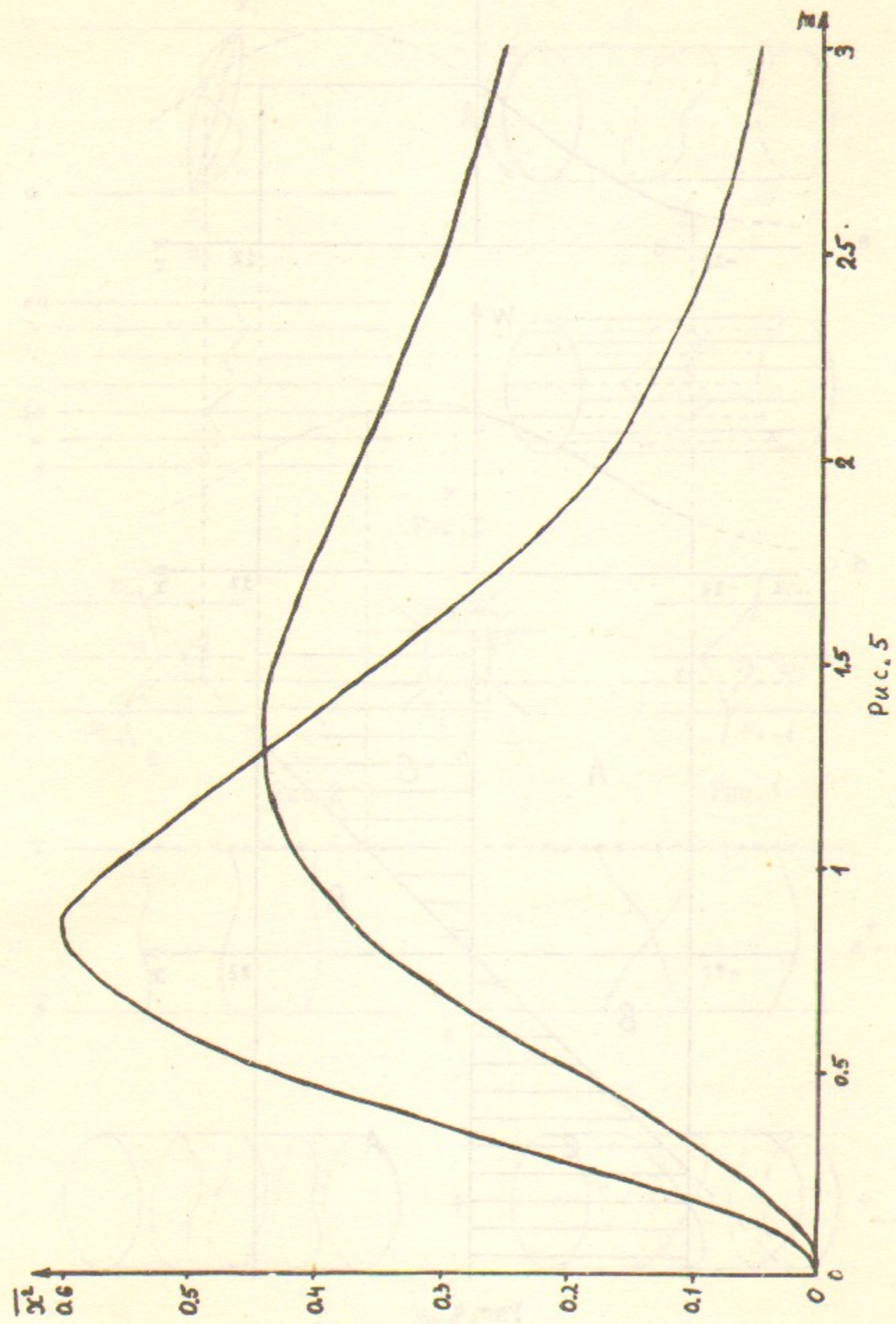
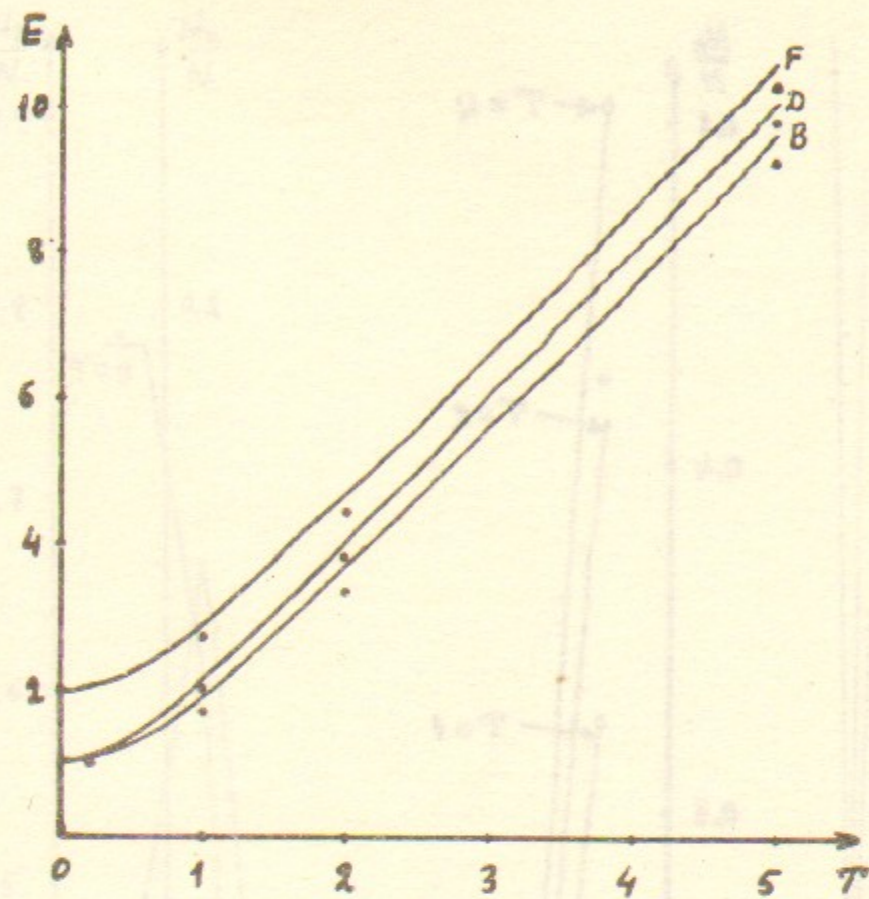


Рис.4

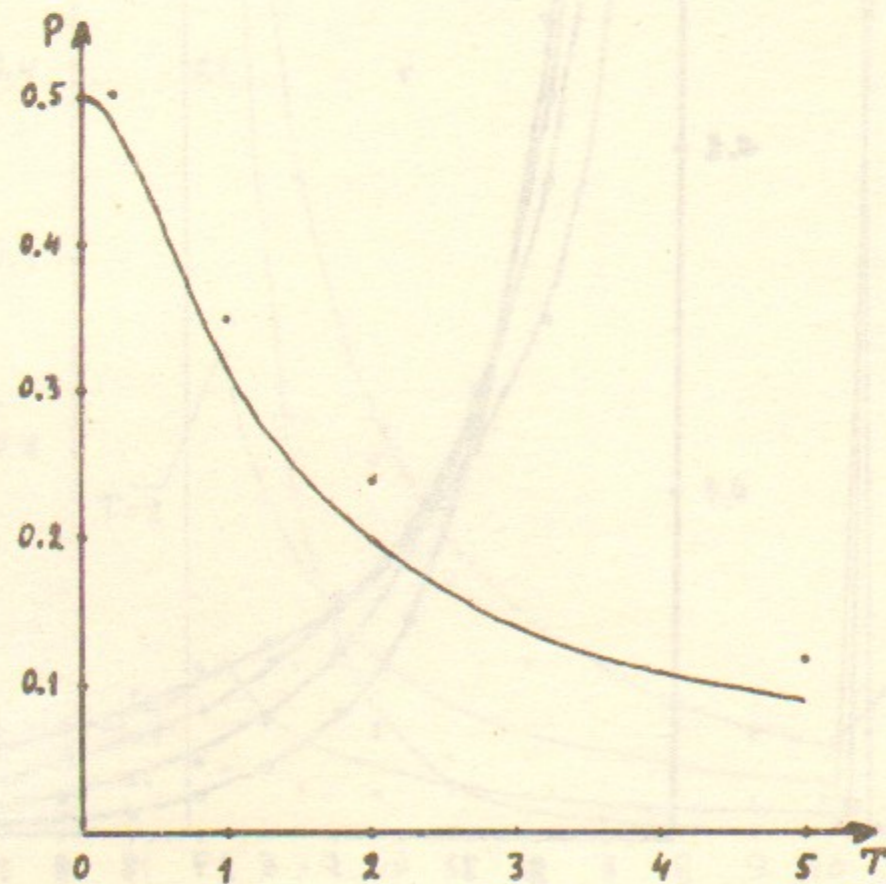


Puc. 5

Puc. 7.



Puc. 8.



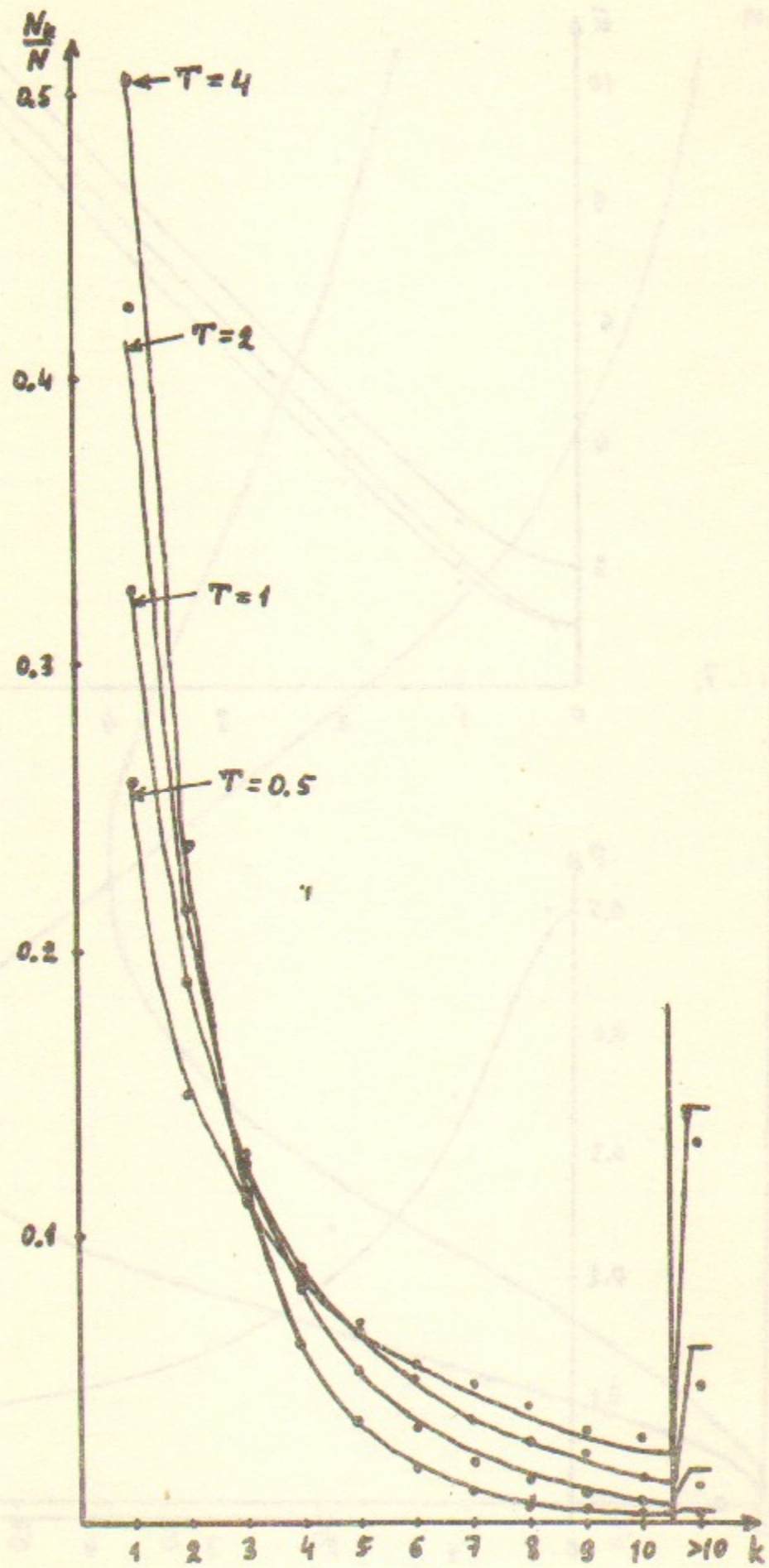


Рис. 9.

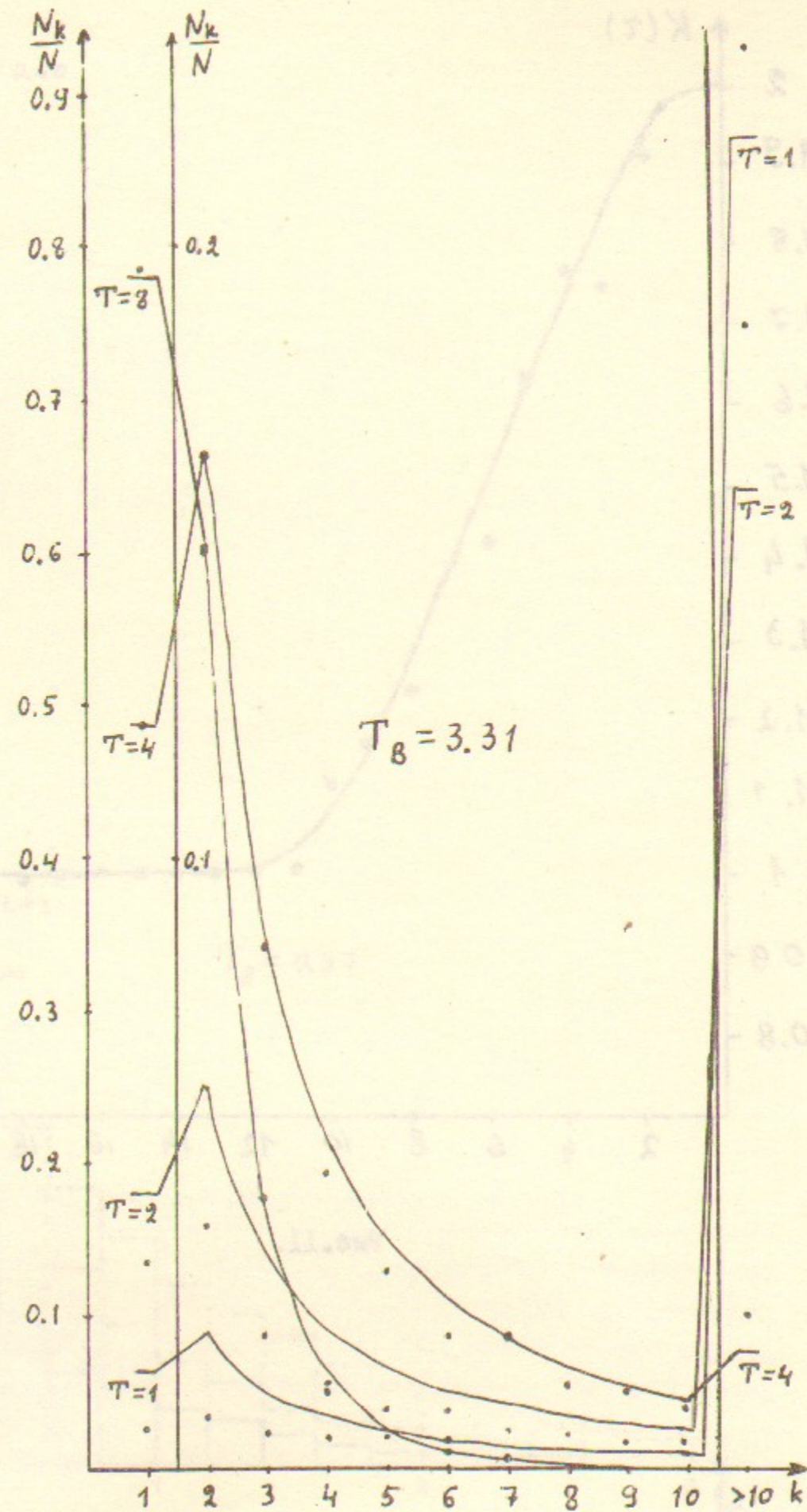


Рис. 10.

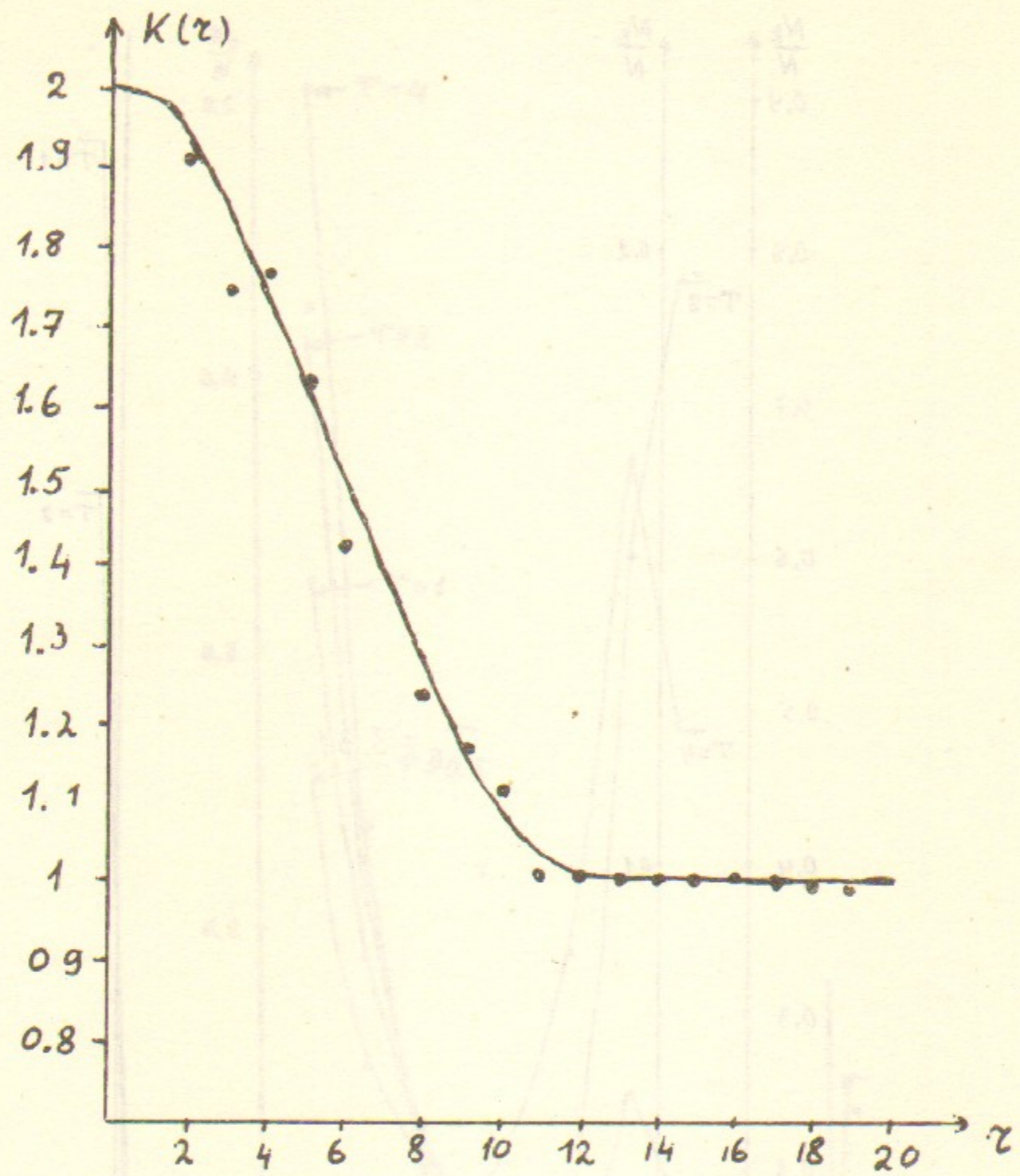


Рис. II.

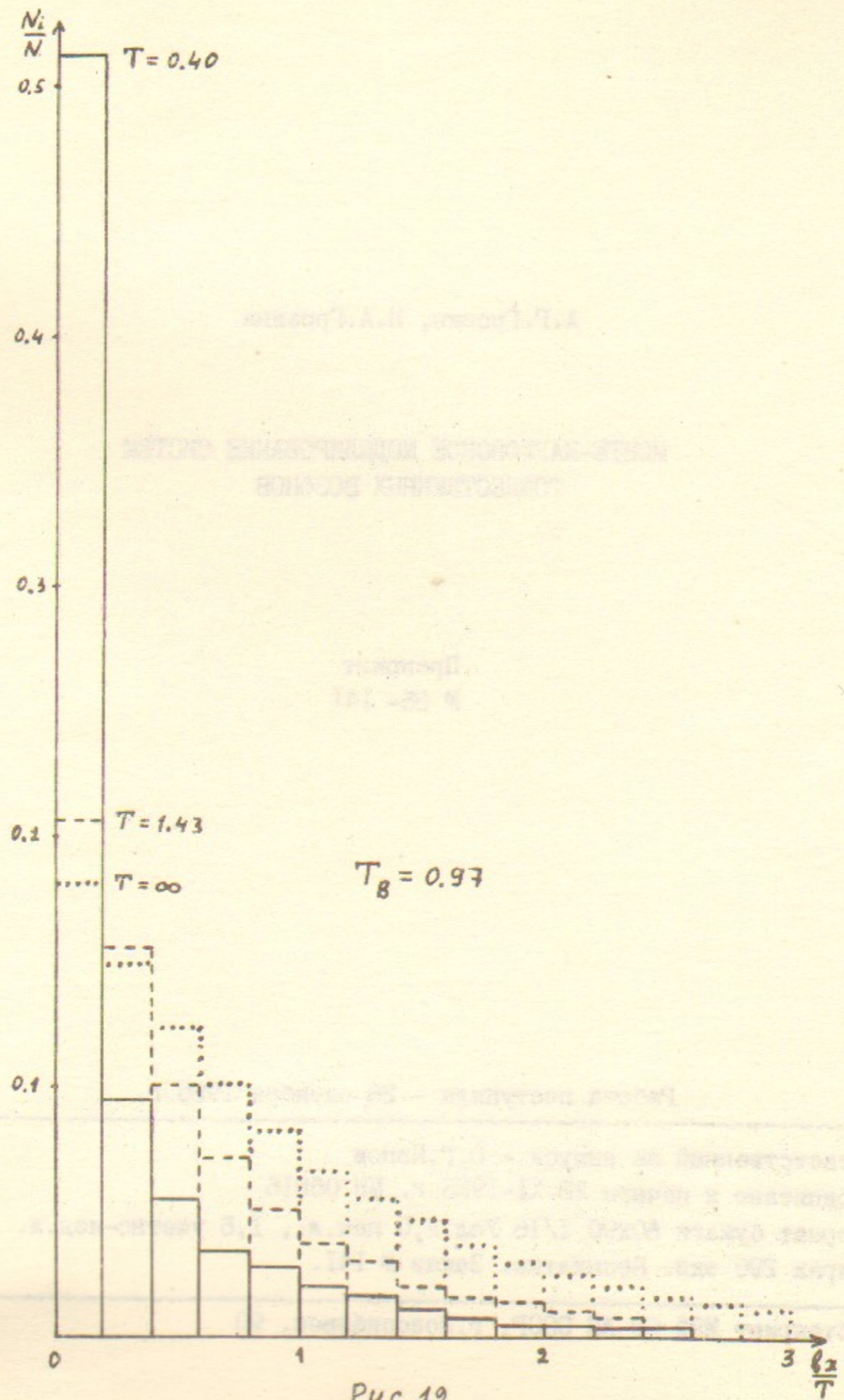


Рис. 12.

А.Г.Грозин, Н.А.Грозина

МОНТЕ-КАРЛОВСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ
ТОЖДЕСТВЕННЫХ БОЗОНОВ

Препринт
№ 85- I4I

Работа поступила - 28 октября 1985 г.

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов

Подписано к печати 28.XI-1985 г. МН 06816

Формат бумаги 60x90 I/I6 Усл.2,0 печ.л., I,6 учетно-изд.л.

Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № I4I.

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90