

ЕФИКАСНО ИЗРАЧУНАВАЊЕ ФУНКЦИОНАЛНИХ ИНТЕГРАЛА МОНТЕ КАРЛО МЕТОДОМ

А. Балаж, А. Белић и А. Богојевић

*Институт за физику
Прегревица 118, Земун 11080*

Апстракт

Генеришући функционал за анхармонијски осцилатор израчунат је Монте Карло методом. Испитане су разне могућности генерирања трајекторија и показано је да корелисани гаусијан центриран на очекиваној вредности поља представља оптималан избор.

Увод

Функционални интегрални су веома значајни у многим областима физике, а посебно у квантној теорији поља и статистичкој физици где представљају природан језик за формулисање теорије. Осим у ретким случајевима, функционални интегрални могу егзактно да се рачунају само нумерички. Сви нумерички методи за њихово израчунавање уводе неку врсту дискретизације у реалном или инверзном простору/простор–времени. Она се обично изводи у два корака: прво се функционални интеграл апроксимира вишеструким интегралом, а затим се добијени интеграл рачуна стандардном дискретизацијом. Најекономичнији начин за рачунање оваквих интеграла је Монте Карло метод који, у овом случају, своди проблем израчунавања функционалног интеграла на сумирање по коначном броју репрезентативних трајекторија.

Уколико није потребна вредност генеришућег функционала већ су довољне само очекиване вредности неких физичких величина, израчунавање се може спровести ефикасним $M(RT)^2$ алгоритмом. На жалост, израчунавање самог генеришућег функционала је значајно сложеније и за решавање овог проблема још нису разрађени ефикасни алгоритми. У светлу изузетног значаја овог проблема и његових многобројних примена започето је истраживање на конструкцији општег ефикасног алгоритма [1]. У овом раду су презентовани резултати за случај $d = 1 + 0$ димензија.

Формализам

У $d = 1 + 0$ димензија квантна теорија поља је еквивалентна квантној механици, па смо поље обележавали са $q(t)$. Разматрали смо еуклидско дејство анхармонијског осцилатора у присуству константне спољашње струје j

$$S[q; g, j] = \int_0^T dt \left(\frac{1}{2} \dot{q}^2 + \frac{1}{2} q^2 + 16gq^4 + jq \right). \quad (1)$$

Може се показати [2] да је амплитуда за прелазак овог система из стања $|q = 0\rangle$ у тренутку $t = 0$ у стање $|q = a\rangle$ у тренутку $t = T$ једнака генеришућем функционалу за дејство (1), уз исте граничне услове за трајекторије. Користили смо стандардну Фајнман–Кац дискретизацију [2] која се добија поделом интервала пропагације $(0, T)$ на N подинтервала дужина $\varepsilon = T/N$. У систему јединица у којем је $\hbar = 1$, она је дата изразом

$$Z(a, T; g, j) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 \cdots dq_{N-1}}{(2\pi\varepsilon)^{N/2}} \exp \left\{ -\varepsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right)^2 + g(q_{n+1} + q_n)^4 + j \frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right] \right\}. \quad (2)$$

Најважнији корак при рачунању општег интеграла $\int d^d x f(x)$ Монте Карло методом [3] је избор функције расподеле p у изразу

$$\int d^d x f(x) = \int d^d x \frac{f(x)}{p(x)} p(x) \equiv \left\langle \frac{f}{p} \right\rangle_p \approx \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \frac{f(x_i)}{p(x_i)}, \quad (3)$$

где је N_{mc} број Монте Карло узорака, а x_i су тачке разигране из p . Квадрат грешке ове оцене интеграла је дат варијансом

$$\sigma_{f/p}^2 = \frac{1}{N_{mc} - 1} \left[\left\langle \left(\frac{f}{p} \right)^2 \right\rangle_p - \left\langle \frac{f}{p} \right\rangle_p^2 \right], \quad (4)$$

а функцију p бирамо тако да минимизирамо грешку. У овом раду је коришћен вишедимензионални гаусијан

$$p(q_1, \dots, q_{N-1}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N-1} \det A}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{m, n=1}^{N-1} (q_m - \bar{q}_m) A_{mn} (q_n - \bar{q}_n) \right\}, \quad (5)$$

где је A позитивно дефинитна симетрична матрица, а \bar{q}_m су центри гаусијана. Како интегранд у (2) може добро да се апроксимира изразом (5), функција f/p је после оптимизације гаусијана скоро константна, па је и грешка мала.

Испитали смо два могућа избора за тачке \bar{q}_m . Семикласична апроксимација сугерише $\bar{q}_m = q^{cl}(m\varepsilon)$, где је $q^{cl}(t)$ решење класичне једначине кретања. Како је у [1] показано да је у $d = 0 + 0$ димензија центрирање гаусијана на очекивану вредност поља боље од семикласичне апроксимације, испитали смо и избор $\bar{q}_m = q^q(m\varepsilon)$, где је $q^q(t)$ очекивана вредност поља q у тренутку t .

Најједноставнији избор за матрицу A је некорелисани гаусијан $A = I/\sigma^2$, где се σ^2 бира тако да минимизира грешку. Ако матрицу A одаберемо тако да у функцији f/p не остане ниједан квадратни члан (корелисани гаусијан), онда се у расподели p налази дејство слободне теорије, па генерисане вредности q_m одговарају динамици. Тако добијени скуп трајекторија је репрезентативнији, па је и грешка мања него код некорелисаног гаусијана.

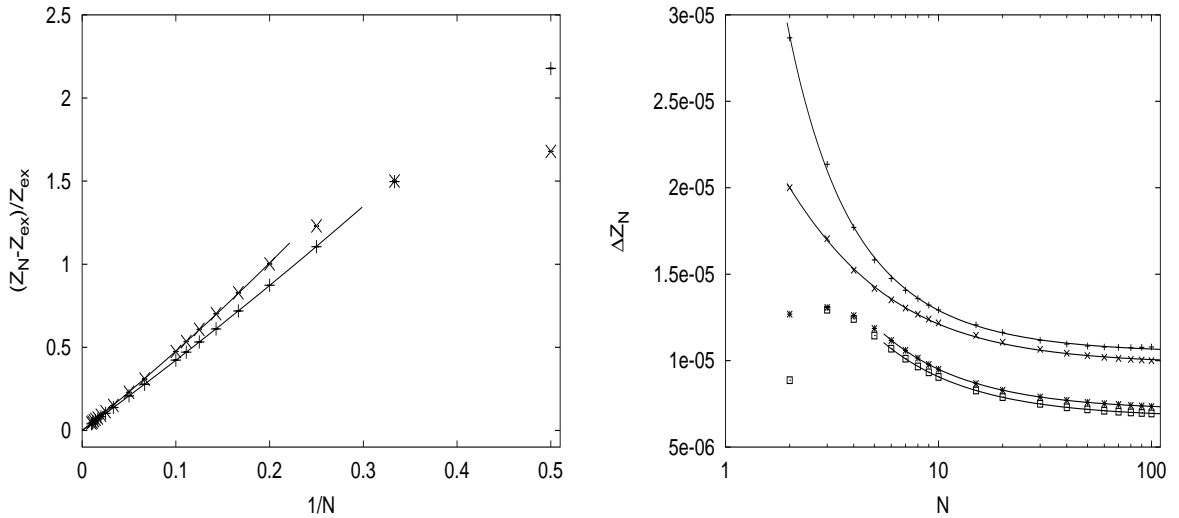
Резултати

Коришћењем некорелисаног гаусијана са оптимизованом вредношћу параметра σ^2 добили смо да грешка расте експоненцијално са повећањем N . Ово ограничава рад на $N \lesssim 10$ и даје лоше оцене за генеришући функционал приликом екстраполације $N \rightarrow \infty$. Коришћење корелисаног гаусијана је далеко ефикасније. У том случају грешка опада са повећањем N , па смо били у могућности да радимо са $N \sim 100$.

Алгоритам смо верификовали за $g = 0$, пошто за слободну теорију имамо аналитички резултат. Добијене оцене генеришућег функционала Z_N за различите вредности N су фитоване на

$$Z_N = Z_{ex} + \frac{c_1}{N} + \frac{c_2}{N^2}, \quad (6)$$

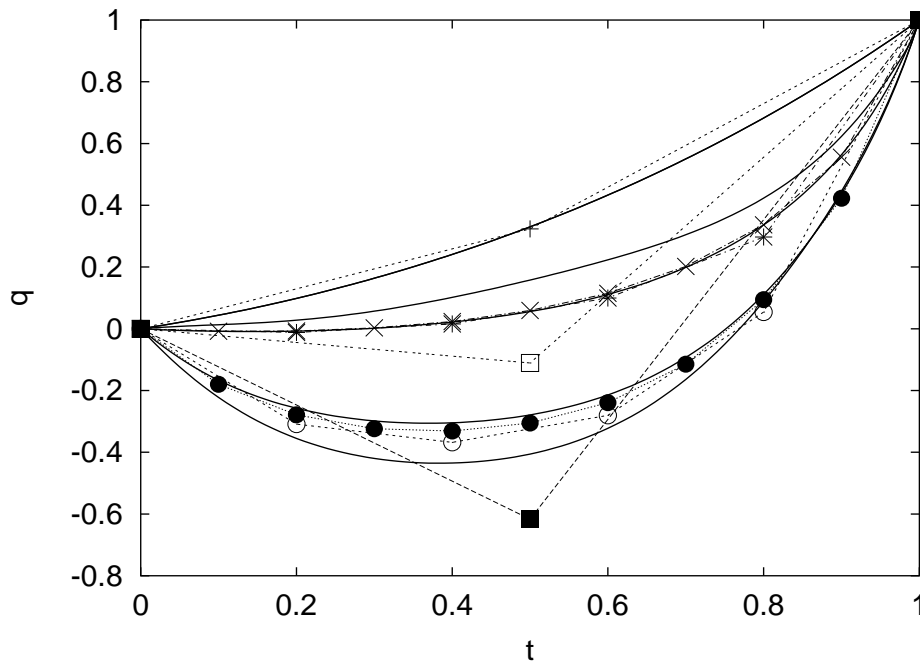
што је илустровано за $a = T = g = 1$, $j = 1$ и $j = 10$ на слици 1а. Видимо да је релативно одступање Z_N од оцене Z_{ex} глатка функција, што оправдава $N \rightarrow \infty$ екстраполацију. За $g \neq 0$ сви резултати добијени су на овај начин. Са слике 1б видимо да грешке опадају са повећањем N . При томе, центрирање гаусијана на очекивану вредност поља $q^q(t)$ увек даје боље резултате (мању грешку) од гаусијана центрираног на решењу класичне једначине кретања $q^{cl}(t)$, у сагласности са [1]. За велико N грешке се такође могу фитовати полиномом по $1/N$, као на слици 1б. Наравно, за сваку фиксирану вредност N грешка Монте Карло симулације се може произвољно смањити повећањем броја узорака N_{mc} . Резултати приказани на слици 1 су добијени за $N_{mc} = 10^6$.



Слика 1: (а) Релативно одступање оцена генеришућег функционала од егзактне вредности за $a = T = g = 1$, $j = 10$ (горња крива) и $j = 1$ (доња крива). (б) Грешка оцене генеришућег функционала за $a = T = g = 1$ и редом од горе: $j = 1$, $\bar{q}_m = q^{cl}(m\varepsilon)$; $j = 1$, $\bar{q}_m = q^q(m\varepsilon)$; $j = 10$, $\bar{q}_m = q^{cl}(m\varepsilon)$; $j = 10$, $\bar{q}_m = q^q(m\varepsilon)$.

У овом раду смо показали да је центрирање функције расподеле p на квантну очекивану вредност поља q^q увек ефикаснија од центрирања на кла-

сичну вредност q^{cl} . На слици 2 су приказане трајекторије коришћене за рачунање генеришућег функционала у горе наведеним примерима. За $a = T = 1$ и $g = 0, j = 1$ разлика између q^{cl} и q^q је занемарљива, док за $g = 1, j = 1$ као и за $g = 1, j = 10$ постоји приметна разлика, па је и повећање ефикасности осетно.



Слика 2: Решења класичне једначине кретања $q^{cl}(t)$, очекиване вредности $q^q(t)$ и средње вредности $\langle q_m \rangle$ за $N = 2, 5, 10$ при $a = T = 1$ и $j = 1, g = 0$ (горњи скуп кривих), $j = g = 1$ (скуп у средини) и $j = 10, g = 1$ (доњи скуп).

У даљем истраживању ћемо размотрити могућности побољшавања ефикасности алгорита додатном оптимизацијом избора матрице A , као и коришћењем другачијих дискретизација дејства.

Нумеричке симулације у овом раду су изведене у Институту за физику на супер-рачунару SGI Origin 2000. Желимо да се захвалимо особљу IPCF на помоћи. Рад је финансирало Министарство за науку и технологију републике Србије у оквиру истраживачких пројеката 01M01 и 01E15.

Литература

- [1] A. Balaž, A. Belić, A. Bogojević, SFIN A2 (1998); Facta Universitatis **1** (1998), 113.; Phys. Low-Dim. Struct. **5/6** (1999), 1.; Phys. Low-Dim. Struct. **9/10** (1999), 149.
- [2] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [3] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods*, Vol. 1: Basics, John Wiley and Sons, New York, 1986.