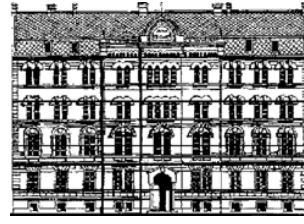




Univerzitet
u Beogradu



Fizički
fakultet

Jelena Grujić

**Očekivane vrednosti
potencijalne i kinetičke energije
u funkcionalnom formalizmu:
numerički i analitički rezultati**

diplomski rad

Mentor: dr Aleksandar Bogojević

Beograd, novembar 2005.

Želela bih da se zahvalim svom mentoru dr Aleksandru Bogojeviću koji me je izuzetno vodio kroz proces izrade ovog rada, uvek imao vremena da mi odgovori na pitanja, prodiskutuje sa mnom rezultate koje sam dobila, pojasni probleme kojima se bavim i ukaže na bitne probleme ili zaključke.

Zahvaljujem se i mr Antunu Balažu koji mi već godinama pomaže u radu, od mlađeg saradnika u IS Petnica, preko mentora na maturskom radu i asistenta na fakultetu do pomoći na ovom radu. On mi je pomogao da savladam veliki broj tehnika koje su mi bile potrebne da bih uradila ovaj rad kao što su programiranje, Monte Karlo simulacije, rad sa raznim programskim paketima.

Volela bih da zahvalim i Aleksandru Beliću, Branimiru Ackoviću i ostalima iz Laboratorije za primenu računara u nauci na Institutu za fiziku u Zemunu koji su mi obezbedili adekvatne uslove za rad, kao što su računar "Paradox", bez kojih ovaj rad ne bi bio moguć, pri tom su doprinosili jednoj izuzetno prijatnoj i podsticajnoj radnoj atmosferi.

Na moj životni put, presudnu ulogu imale su dve institucije, Matematička gimnazija u Beogradu i Istraživačka stanica Petnica. Tamo sam naučila mnogo toga i upoznala veliki broj mojih današnjih prijatelja i saradnika. Najviše sam im ipak zahvalna što su me naučile da razmišljam na naučni način i da volim fiziku.

Želela bih da se zahvalim i profesorima i asistentima sa Fizičkog fakulteta, koji su mi pomogli da savladam gradivo.

Naravno, zahvaljujem se mojim prijateljima i porodici koji su mi uvek pružali podršku i pomagali da prevaziđem teške trenutke.

Beograd, 9. novembar 2005. godine

Jelena Grujić

Sadržaj

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Uvod | 3 |
| 2 | Od operatora do funkcionalnih integrala | 5 |
| 2.1 | Očekivane vrednosti operatora u funkcionalnom formalizmu | 8 |
| 2.2 | Osnovni pojmovi o Monte Karlo metodi računanja integrala | 9 |
| 3 | Estimatori energije | 13 |
| 3.1 | Kinetički estimatori | 16 |
| 3.2 | Virijalni estimatori | 18 |
| 3.3 | Očekivane vrednosti energija za kvartičnu teoriju | 21 |
| 4 | Novi pristup za očekivane vrednosti energija | 25 |
| 5 | Zaključak | 31 |
| A | Programski kod | 33 |
| | Literatura | 41 |

1

Uvod

Prilikom nastanka kvantna mehanika je zasnovana na operatorskom formalizmu. Dirak je 1926. godine [1] pokazao izomorfnost Hajzenbergove matrične i Šredingerove talasne mehanike. Neposredno posle toga formulisana je i kopenhagenska interpretacija koja isključuje fizički smisao bilo kakvom razmatranju šta se događa između merenja. Ovaj formalizam omogućio je čvrsto zasnivanje kvantne mehanike, no istovremeno je i otežao izgradnju intuicije o kvantnim procesima, odnosno bilo kakvu vizuelizaciju procesa između merenja. Ričard Fajnman, u svojoj doktorskoj disertaciji 1942. godine [2][3] uvodi funkcionalni formalizam koji je matematički ekvivalentan operatorskom, ali koji nudi fizički jasnu sliku ponašanja između merenja. Ovaj formalizam se pokazao jako koristan na mnogim poljima. Omogućio je ili olakšao izvođenje mnogih aproksimativnih metoda, kao što je perturbativni račun, semiklasična aproksimacija, varijacioni račun, aproksimacija velikog broja polja u kvantnoj teoriji polja itd. Pokazao se kao veoma uspešan u uspostavljanju veza između raznih modela ili sektora modela, pošto omogućava smene promenljivih ¹ koje omogućavaju bozonizaciju (npr. na ovaj način se može pokazati da je masivni Tiringov model ekvivalentan sinus-Gordonovoj teoriji) i dokazivanje dualnosti nekih teorija. Funkcionalni formalizam je posebno koristan u opisu simetrija kvantnih sistema, kako globalni tako i lokalnih, što uključuje narušenje simetrije i anomalije. Ali najveća prednost Fajnmanovog formalizma je lak proces generalizacije kvantizacije sa nerelativističke teorije jedne čestice na relativističku teoriju više čestica, teoriju struna, membrana, teoriji polja u zakrivljenim prostorima itd. U svakom koraku prilikom ovih generalizacija su neke od pretpostavki kvantizacije morale biti napuštene ili izmenjene, a taj proces je skoro uvek najlakše bilo sprovesti u funkcional-

¹Sa ovim smenama treba biti oprezan, s obzirom da se radi o beskonačno višestrukim integralima

nom formalizmu iz prostog razloga što je on baziran na dejstvu koje je invarijanta. Zbog toga se ovaj formalizam igra ključnu ulogu kako u kvantnoj teoriji polja tako i u teoriji kondenzovanog stanja materije.

Veoma značajan dodatni razlog primene ovog formalizma je numeričko rešavanje problema koje se ovde prirodno nameće. Ovo je do sada više bilo od koristi u fizici kondenzovanog stanja materije, jer su relevantni modeli kvantne teorije polja ekstremno računarski zahtevni. Međutim, funkcionalni formalizam je i dalje jedini obećavajući numerički okvir za rešavanje problema. Zato su efikasniji algoritmi za računanje funkcionalnih integrala od velikog interesa.

Ipak, analitički rezultati se često lakše izvode u operatorskom nego u funkcionalnom formalizmu. To je direktna posledica činjenice da, sem definicije, veoma malo znamo o teoriji funkcionalne integracije, koja je tek u povoju. Ukoliko se primena funkcionalnog formalizma učini efikasnijom, ovaj pristup ima mogućnosti da po svojoj praktičnoj koristi daleko nadmaši operatorski. Ispitivanjem i usavršavanjem efikasnih metoda za računanje funkcionalnih integrala se do sada bavilo više istraživačkih grupa u svetu (za kratak pregled videti [6] i reference u tom radu). Teorija ideala je novi pristup razvijen u Laboratoriji za primenu računara u nauci, Institut za fiziku u Zemunu [6][7][8][9] koji je učinio ključni korak u razvoju funkcionalnog formalizma. Numerička posledica ovoga je ubrzanje algoritma za računanje funkcionalnih integrala opšte kvantne teorije za osam redova veličine.

U ovom radu će novi pristup prvi put biti primenjen na računanje očekivanih vrednosti opservabli na primeru potencijalne i kinetičke energije. Prvo ćemo dati pregled različitih estimatora za računanje ovih fizičkih veličina, a nakon poređenja rezultata koje oni daju, ćemo za najefikasnije estimatore u definicionom pristupu izvesti odgovarajuće izraze u novom pristupu i pokazati da njima dobijamo očekivano ubrzanje novog algoritma.

2

Od operatora do funkcionalnih integrala

U klasičnoj mehanici je dinamika čestice koja se kreće u jednoj dimenziji određena hamiltonijanom oblika $H(p, q) = f_{ab}p^a q^b$, gde je q generalisana koordinata, a p odgovarajući generalisani impuls, a sumiranje po ponovljenim indeksima se podrazumeva. Prelazak na kvantnu mehaniku u operatorskom formalizmu definisan je sa $q \rightarrow \hat{q}$, $p \rightarrow \hat{p}$, gde su \hat{q} i \hat{p} hermitski operatori u odgovarajućem Hilbertovom prostoru i važi $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Na ovaj način kvantni hamiltonijan \hat{H} nije jednoznačno definisan, pošto izrazu pq možemo pridružiti kako operator $\hat{p}\hat{q}$ tako i operator $\hat{q}\hat{p}$ koji nisu međusobno ekvivalentni. Dva jednostavna izraza za prevazilaženje ove jednoznačnosti su leva preskripcija $\hat{H}_L = f_{ab}\hat{p}^a\hat{q}^b$ i desna preskripcija $\hat{H}_R = f_{ab}\hat{q}^b\hat{p}^a$, koje nisu hermitske. U praksi se najčešće koristi Vajlova simetrična preskripcija,

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

Za razliku od leve i desne preskripcije, Vajlova preskripcija uvodi hermitske operatore za \hat{H} .

Da bismo rešili jednu teoriju potrebno je naći amplitude verovatnoće prelaska sistema iz jednog stanja u drugo. Poznavanjem svih amplituda verovatnoće za neki hamiltonijan, imamo kompletan skup informacija za jednu teoriju, tj. poznavanje svih amplituda verovatnoće ekvivalentno je poznavanju svojstvenom problema hamiltonijana u operatorskom formalizmu. Ako sa $|q, t\rangle$ označimo stanje kvantnog sistema u trenutku t , a sa $A(q_f, t_f; q_i, t_i)$ amplitudu verovatnoće jednaku $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$, tada je verovatnoća za prelaz iz stanja $|q_i, t_i\rangle$ u

stanje $|q_f, t_f\rangle$ data sa $|A(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2$. U Šredingerovoj slici, amplituda verovatnoće prelaza data je u obliku matričnog elementa:

$$A(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \hat{U}(t_f - t_i, t_i) | q_i \rangle, \quad (2.1)$$

gde je $\hat{U}(t_f - t_i, t_i)$ evolucionni operator. Konzervativni sistemi invarijantni su na vremenske translacije, pa sledi $\hat{U}(t_f - t_i, t_i) = \hat{U}(t_f - t_i)$, a samim tim i $A(q_f, t_f; q_i, t_i) = A(q_f, q_i, t_f - t_i)$. Ukoliko vreme evolucije $(t_f - t_i)$ označimo sa T važi

$$\hat{U}(T) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} T \hat{H} \right\}. \quad (2.2)$$

Podelićemo vremensku evoluciju od t_i do t_f na N uzastopnih evolucija, od kojih svaka traje $\epsilon = T/N$, definišemo $q_0 = q_i$ i $q_N = q_f$, i umetnemo $N - 1$ razlaganja jedinice u koordinatnoj reprezentaciji u definiciju amplitude verovatnoće i dobijamo

$$A(q_f, q_i, t_f - t_i) = \int dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q_N | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_1 | \hat{U}(\epsilon) | q_0 \rangle. \quad (2.3)$$

U izrazu za A imamo članove tipa $\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle$, koje za dovoljno malo ϵ (tj. za dovoljno veliko N) možemo aproksimirati sa $\langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H} | q_n \rangle$. U levoj preskripciji ovaj matrični element računaćemo umetanjem još jednog razlaganja jedinice, ali ovoga puta u impulsnoj reprezentaciji:

$$\begin{aligned} \langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L &\approx \langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \int dp_n \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \\ &= \int dp_n \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_n q_{n+1} \right\}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon f_{ab} \hat{p}^a \hat{q}^b | q_n \rangle = \int dp_n \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\}}{2\pi\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_n, q_n) \right) \approx \\ &\approx \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_n) \right] \right\}. \end{aligned}$$

U desnoj preskripciji dobija se na sličan način:

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

Može se pokazati da se u Vajlovoj preskripciji dobija:

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

Kada ovaj rezultat unesemo u jednačinu (2.3) i pustimo da N teži beskonačnosti, dobijamo sledeći izraz

$$A(q_f, q_i, t_f - t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dq_1 \dots dq_{N-1} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \times$$

$$\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H \left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}. \quad (2.4)$$

Amplituda verovatnoće se, dakle, može napisati kao

$$A(q_f, q_i, t_f - t_i) = \int [dqdp] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - H) dt \right\}. \quad (2.5)$$

gde je desna strana samo formalni izraz koji odgovara gornjem limesu višestrukih integrala. Za klasu hamiltonijana $H = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$, tj. lagranžijana $L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - V(q)$, možemo da izračunamo integrale po impulsima u izrazu (2.4). Tako će se naš integral znatno pojednostaviti i postati funkcionalni integral u konfiguracionom prostoru, koji se obično zove integral po trajektorijama. Ako napišemo integrale po impulsima iz prethodne jednačine, vidimo da su to Gausovi integrali:

$$\int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - \frac{1}{2}p_n^2 - V \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}.$$

Kako je

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

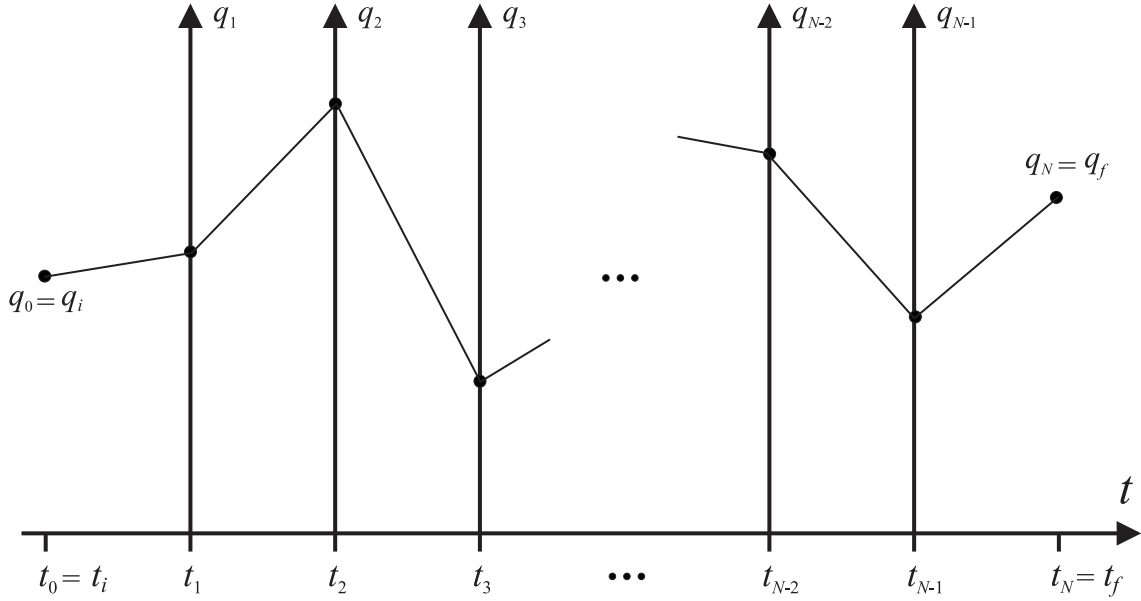
dobijamo

$$A(q_f, q_i, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dq_1 \cdots dq_{N-1}}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{N/2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\} \quad (2.6)$$

Ovo je konačni izraz za integral po trajektorijama u konfiguracionom prostoru za klasu lagranžijana oblika $L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - V(q)$, pa funkcionalni integral možemo zapisati kao

$$A(q_f, q_i, T) = \int [dq] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\} = \int [dq] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[q(t)] \right\}. \quad (2.7)$$

gde se integrali po svim trajektorijama u faznom prostoru koje zadovoljavaju granične uslove $q(t_i) = q_i$, $q(t_f) = q_f$, kao što je prikazano na slici 2.1. Ovo je uobičajeni formalni zapis funkcionalnog integrala iz kog nam se nameće fizička interpretacija: vrednost amplitude verovatnoće za prelazak iz početnog stanja $|q_i, t_i\rangle$ u finalno stanje $|q_f, t_f\rangle$ dobijamo tako što saberemo doprinose svih mogućih trajektorija (evolucija), koje zadovoljavaju granične uslove $q(t_i) = q_i$ i $q(t_f) = q_f$, pri čemu se doprinos svake trajektorije određuje težinskim faktorom $\exp\{\frac{i}{\hbar}S\}$, gde je S dejstvo koje odgovara posmatranoj trajektoriji. Primitimo da vrlo pogodno što je amplituda izražena preko dejstva koje je invarijanta.



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

2.1 Očekivane vrednosti operatora u funkcionalnom formalizmu

Ukoliko probamo numerički da rešimo funkcionalni integral (2.7) definisan u predhodnom odeljku, naići ćemo na problem. Naime, nemoguće je numerički postići konvergenciju integrala ukoliko podintegralna funkcija ima oscilatorni karakter, kao što je ovde slučaj. Zato se pribegava Vikovoj rotaciji tj. prelasku na imaginarno vreme. Tako će se izraz u eksponentu transformisati na sledeći način

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

Ovim postupkom promenjene i granice integracije, zato se na kraju rotira kontura integracije za 90° tako da sa imaginarne ose opet prelazimo na realnu i granica integracije opet postaje T . Pogledajmo šta smo ustvari uradili:

$$iS = i \int_0^T dt L \longrightarrow - \int_0^T d\tau H = -E,$$

Od sada ćemo euklidsko vreme obeležavati sa t . Ukoliko opservabla ne zavisi eksplicitno od vremena rezultat dobijen u imaginarnom vremenu biće isti kao rezultat u realnom vremenu (u suprotnom na kraju ostaje da se odradi inverzna Vikova rotacija).

Posle Vikove rotacije u funkcionalnom integralu postaje jasna veza između kvantne mehanike i statističke fizike. Centralni objekat u statističkoj fizici, particiona funkcija definisana kao:

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta H}$$

dobija se iz amplitude verovatnoće na sledeći način:

$$Z(\beta) = \int A(q, q; \beta) dq,$$

a očekivanu vrednost nekog operatora \hat{A} na temperaturi $1/\beta$ računa se na sledeći način

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(e^{-\hat{H}\beta/\hbar} \hat{A}) / \text{Tr}(e^{-\hat{H}\beta/\hbar})$$

Ukoliko ulogu β preuzme vremenski interval T u funkcionalnom formalizmu ovaj izraz postaje

$$\frac{\int [dq] A e^{-\frac{\beta}{\hbar} E}}{\int [dq] e^{-\frac{\beta}{\hbar} E}}$$

Osnovni zadatak ovog rada je upravo računanje očekivanih vrednosti u funkcionalnom formalizmu. Ovaj opšti problem biće prikazan na primeru potencijalne i kinetičke energije.

2.2 Osnovni pojmovi o Monte Karlo metodi računanja integrala

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

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx. \quad (2.8)$$

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

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

$$I_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{p_i}, \quad (2.9)$$

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

$$\Delta I_{MC} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{f_i}{p_i} \right)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{p_i} \right)^2 \right]}. \quad (2.10)$$

Rezultate Monte Karlo metoda navodimo u obliku $I = I_{MC} \pm \Delta I_{MC}$, gde grešku interpretiramo kao širinu odgovarajuće Gausove raspodele.

Uspešnost Monte Karlo metoda zavisi izbora raspodele p u identitetu (2.8) i načina generisanja slučajnih brojeva iz ove raspodele. Problem odabira je raspodele p je u našem slučaju, u stvari problem generisanja trajektorija sa slike 2.1 . Koristili smo dobro poznati bisekcionni metod [10]. Pošto generišemo trajektorije, funkcionalni integral računamo kao sumu doprinosa svake od datih trajektorija, gde doprinos računamo kao e^{-S} , gde je S diskretizovano dejstvo za datu trajektoriju.

Pri računanju višestrukih integrala, Monte Karlo metod prednjači u odnosu na bilo koji drugi iz prostog razloga što je ovde greška zavisi od vremena izvršavanja simulacije kao $1/\sqrt{t}$ bez obzira na dimenzionalnost integrala, dok je kod ostalih metoda greška stazmerna sa $1/t^{k/d}$, gde je d dimenzionalnost integrala, a k zavisi od algoritma, ali je retko veći od četiri-pet. Tako da ukoliko treba da rešimo intergal dimenzionalnosti veće od 10, Monte Karlo je metoda od izbor.

Specifičnost u numeričkom rešavanju funkcionalnih integrala u odnosu na rešavanje običnih višestrukih integrala je postojanje limesa $N \rightarrow \infty$ u definiciji (??). To znači da ćemo za svaku vrednost broja podeonih tačaka N dobiti ocenu vrednosti funkcionalnog integrala A_N i odgovarajuće greške ΔA_N , a zatim iz dobijenih vrednosti treba naći ocenu prave vrednosti funkcionalnog integrala A i greške ΔA . Poznato je da je u pitanju polinomijalna zavisnost po $1/N$,

$$A_N = A + \frac{a}{N} + \frac{b}{N^2} + \dots, \quad (2.11)$$

a parametri ove zavisnosti se mogu oceniti metodom najmanjih kvadata. Slobodni član gornjeg polinoma je tražena vrednost funkcionalnog integrala, a metod najmanjih kvadrata nam daje i ocenu greške ΔA dobijene vrednosti A na osnovu ocena grešaka pojedinih vrednosti A_N koje dobijamo iz Monte Karlo metoda i na osnovu rasporeda pojedinih tačaka na krivoj. Opisanim metodom sa fitovanjem dobijaju se značajno precizniji rezultati od naivnog pristupa, u kome se funkcionalni integral ocenjuje sa A_N za dovoljno veliku vrednost N . Pored ovoga, rezultat dobijen u naivnom pristupu daje pristrasnu ocenu, što dodatno diskvalifikuje ovaj pristup.

Međutim, datu proceduru moguće je dodatno poboljšati ubrzati korišćenjem metoda u kome vrednosti funkcionalnog integrala brže teže traženoj vrednosti od generičke $1/N$ konvergencije. U radu [6] proučavan je odnos između različitih diskretizacija i kao rezultat dat je postupak za konstruisanje niza efektivnih dejstava $S^{(p)}$, gde je $p = 1, \dots, 9$ koja imaju isti kontinuum limes kao početno dejstvo, ali vrednosti funkcionalnih integrala konvergiraju limesu mnogo brže kao $1/N^p$. Metod je razvijen za amplitudu verovatnoće, a cilj ovog rada je da se ispita brzina konvergencije nakon primene ovog metoda na očekivane vrednosti operatora energije.

3

Estimatori energije

Izraze za kinetičku energiju K i potencijalnu energiju V u kontinuum limesu su dobro poznati, ali diskretizacija ovih veličina nije jednoznačna. Estimator je izraz za diskretnu verziju veličine čiju očekivanu vrednost računamo. Za kinetičku i potencijalnu energiju postoje različiti estimatori u literaturi [12][13][14][15]. Očekivana vrednost potencijalne energije definisana je na sledeći način

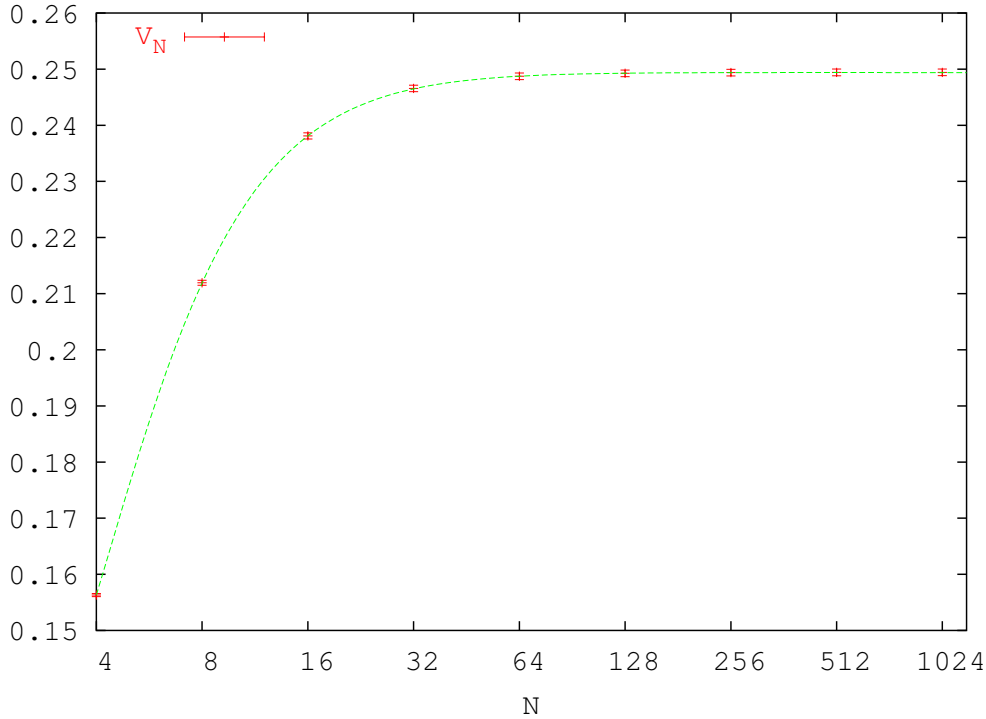
$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{\int dq \langle q | \hat{V}(q) e^{-T\hat{H}} | q \rangle}{\int dq \langle q | e^{-T\hat{H}} | q \rangle} = \frac{\int \int dq dq' \langle q | \hat{V}(q) | q' \rangle \langle q' | e^{-T\hat{H}} | q \rangle}{\int dq \langle q | e^{-T\hat{H}} | q \rangle}$$

S obzirom da je svojstveni vrednost operatora koordinate $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$, a potencijal je samo funkcija od q , sledi $\hat{V}(q)|q\rangle = V(q)|q\rangle$ pa kako $\langle q|q'\rangle = \delta(q - q')$, a znamo da je $\langle q | e^{-T\hat{H}} | q \rangle = A(q, q, T)$ sledi

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{\int dq V(q) A(q, q, T)}{\int dq A(q, q, T)}.$$

Sledi da za estimator potencijalne energije mozemo uzeti $V(q)$, koji ćemo zvati **osnovnim estimatorom potencijalne energije**. Ovaj estimator testirali smo sa potencijalom linearnog harmonijskog oscilatora, s obzirom da u tom slučaju znamo analitičke vrednosti sa kojima možemo da poredimo naše rezultate. Na slici 3.1 prikazani su numerički rezultati za očekivanu vrednost potencijalne energije linearnog harmonijskog oscilatora (LHO), sa potencijalom $V(q) = \frac{1}{2}\omega^2 q^2$ za vremenski interval $T = 10$ i $\omega = 1$, dobijeni korišćenjem ovog estimatora. Fitovanjem prikazane zavisnosti dobija da je $\langle \hat{V} \rangle = 0.2500 \pm 0.0002$, sto se slaže sa analitičkom vrednošću.

Možemo primetiti da ovaj estimator potencijalne energije daje dobre rezultate i može se koristiti u daljem radu.

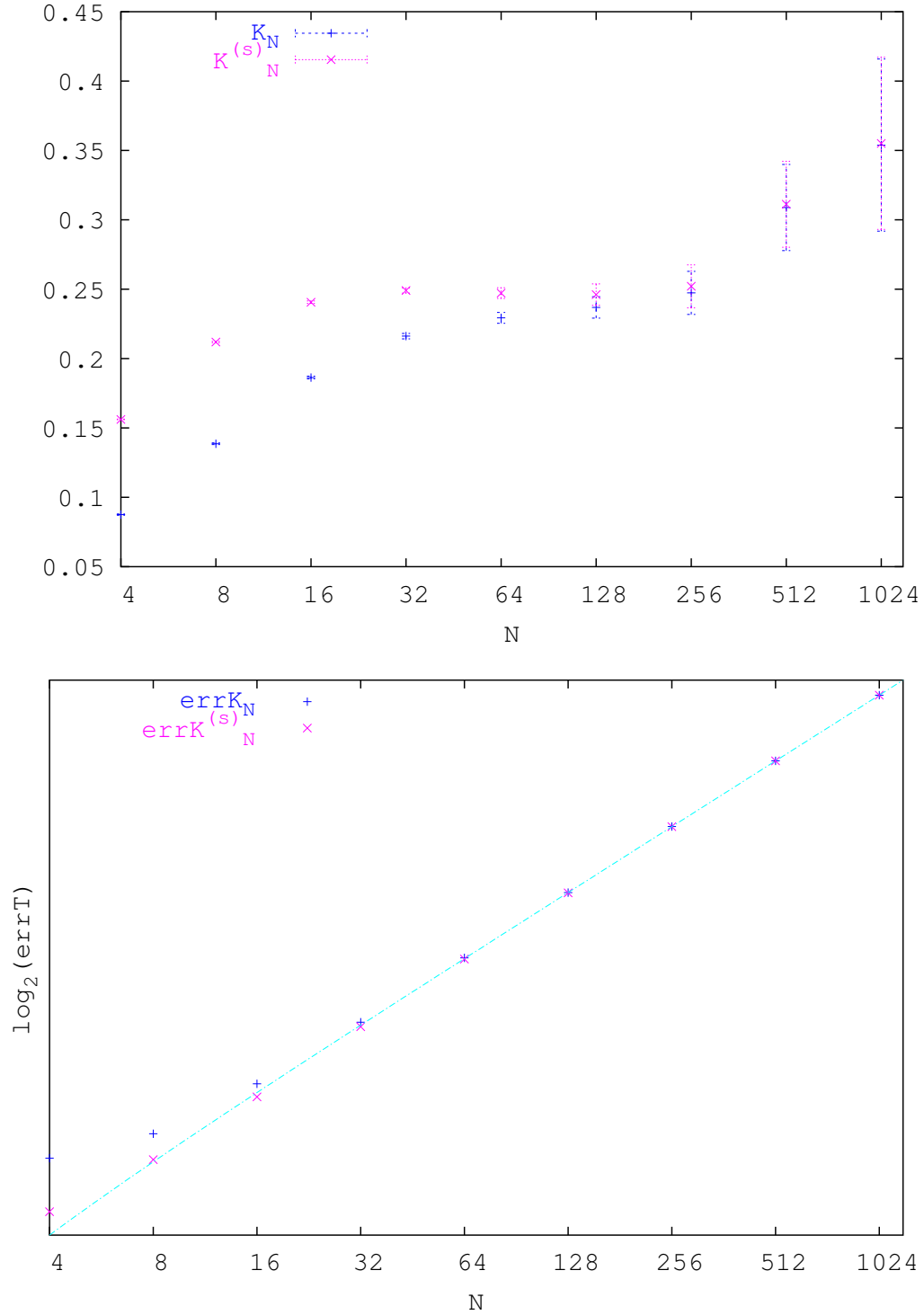


Slika 3.1: Zavisnost očekivane vrednosti potencijalne energije $\langle V \rangle$ od broja podeonih tačaka N dobijen pomoću estimatora V . Egzaktna vrednost dobijena fitovanjem polinoma po $1/N$ na odgovarajuću V_N zavisnost je 0.2500 ± 0.0002 . Potencijal je linearnog harmonijskog oscilatora za $\omega = 1$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktnosti generišućeg funkcionala je $N_{MC} = 10^7$.

Sa estimatorom kinetičke energije stvari se komplikuju. Naivno bi se očekivalo da će estimator kinetičke energije biti oblika $\frac{1}{2} \frac{(q_{n+1} - q_n)^2}{\epsilon^2}$. Međutim ovakav “naivni” estimator divergira sa smanjenjem ϵ . Zašto se ovo dešava? Primetimo da je Vik rotirana Šredingerova jednačina matematički izomorfna difuzionoj jednačini, zato i ovde dobijamo $\langle (q_{n+1} - q_n)^2 \rangle \sim \epsilon$ (uobičajeni rezultat za “slučajnog hodača” kao arhetipskog difuzionog procesa), pa će se “naivni” estimator kinetičke energije ponašati kao $1/\epsilon$. Na prvi pogled odavde bi sledilo da je očekivana vrednost kinetičke energije beskonačna, ali ako pogledamo diskretizovan izraz za funkcionalni integral primetićemo da u meri integrala postoji ϵ zavisnost koja takođe utiče na konačan rezultat. Pogodnim izborom estimatora uklanja se divergentni deo gornjeg člana. Izraz za ocenu očekivane kinetičke energije glasi

$$\langle \hat{K} \rangle = \frac{\int dq \langle q | \frac{1}{2} \hat{p}^2 e^{-T\hat{H}} | q \rangle}{\int dq \langle q | e^{-T\hat{H}} | q \rangle}$$

Da bismo dobili izraz iz koga možemo naći pogodan estimator energije u brojilac predhodnog izraza ubacićemo dva razlaganja jednice, jedno po q , a jedno po p i s obzirom da



Slika 3.2: Na gornjoj slici prikazana je ocena očekivane vrednosti kinetičke energije $\langle K \rangle$ pomoću osnovnog estimatora kinetičke energije, na donjoj kako greška ovih estimator raste za potrazom broja podeonih tačaka N Rađeno na primeru linearnog harmonijskog oscilatora za $\omega = 1$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktne vrednosti generišućeg funkcionala je $N_{MC} = 10^7$.

je $\langle q|p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}pq}$, sređivanjem gornjeg izraza dobijamo **osnovni estimator kinetičke energije**:

$$K = -\frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{q_1 - q_0}{\epsilon_N} - \frac{\epsilon_N}{2} V'(q_0) \right]^2 - \left[\frac{1}{\epsilon_N} + \frac{\epsilon_N}{4} V''(q_0) \right] \right\}$$

. Primitimo da sa povećanjem broja podeonih tačaka N , vremenski korak $\epsilon_N = T/N$ teži nuli, pa iz gornjeg izraza možemo zanemariti članove uz ϵ_N i dobiti **uprošćeni osnovni estimator kinetičke energije**:

$$K^{(s)} = -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{q_1 - q_0}{\epsilon_N} \right)^2 - \frac{1}{\epsilon_N} \right]$$

Na slici 3.2 su prikazani rezultati numeričkih simulacija za oba ova estimatora. Simulacija je rađena za $T = 10$, $N_{MC} = 10^7$ za linearni harmonijski oscilator. Vidimo da je zanemarivanje članova u ϵ_N bilo opravdano, ali ovi estimatori ipak ne daju dobre rezultate, što se najbolje vidi iz toga što sa porastom N i greška srazmerno raste slika ?? , tako da ovi estimatori ne konvergiraju kontinualnoj vrednosti za $\langle K \rangle$.

Jasno je da ovaj estimator ne daje zadovoljavajuće rezultate, zato moramo tražiti nove estimatore.

3.1 Kinetički estimatori

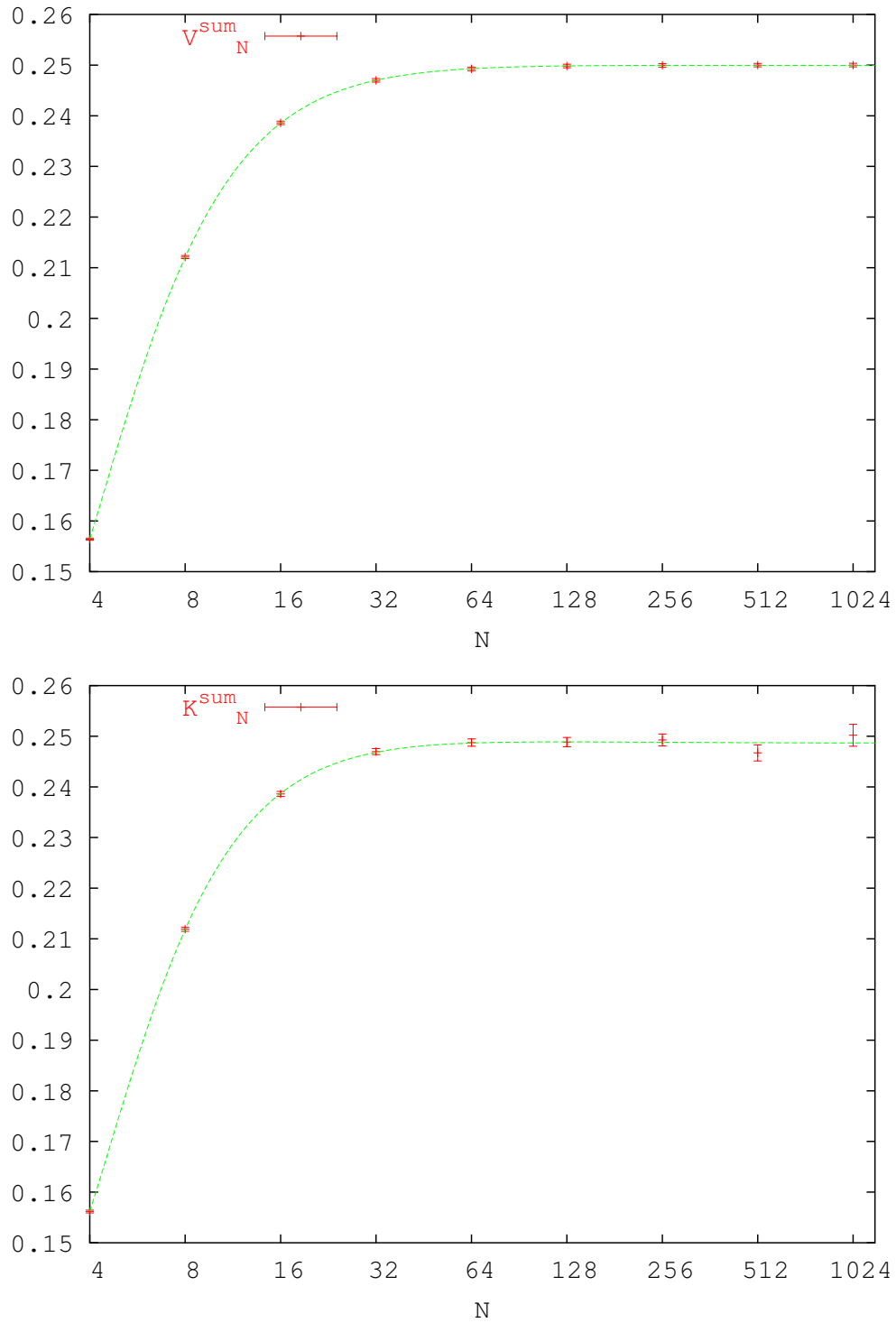
Da bismo izveli ovaj estimator pogledajmo kako se izraz za očekivanu vrednost ukupne energije dobija direktno iz particione funkcije. Jasno je da je

$$\langle \hat{H} \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial T} = \frac{\text{Tr} \hat{H} e^{-T\hat{H}}}{Z}$$

S obzirom da je $\partial/\partial T = (1/N)\partial/\partial\epsilon$, za estimator energije dobijamo:

$$E_k = \frac{N}{2T} - \frac{1}{2N} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_N} \right)^2 + \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} V(q_n)$$

Ovaj estimator je u literaturi poznat kao **kinetički estimator** (i ne treba ga mešati sa estimatorom kinetičke energije). Prva dva člana u ovom izrazu možemo uzeti za estimator kinetičke energije, a poslednji član kao estimator potencijalne energije ova dva estimatora ćemo zvati **sumarnim estimatorima**. Sumarni estimator kinetičke energije se sastoji iz dva člana srazmerna $1/\epsilon$ koja su suprotnog znaka tako da neće doći do divergencije kinetičke energije. Primitimo da je prvi član je pritom izašao iz mere integrala kao što smo i očekivali.



Slika 3.3: Zavisnost diskretizovane očekivane vrednosti potencijalne energije (gornji grafik) i kinetičke energije (donji grafik) sumarnim estimatorom, fitovanu polinomom po $1/N$, za kontinuum limes dobijeno je $\langle K \rangle = 0.249 \pm 0.001$ i $\langle V \rangle = 0.2499 \pm 0.0002$, što se poklapa sa analitičkom vrednosti. Testirano na primeru linearnog harmonijskog oscilatora za $\omega = 1$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka korišćen za računanje egzaktne vrednosti generišućeg funkcionala je $N_{MC} = 10^7$.

Do ovog estimatora smo mogli da dodjemo i iz sledećeg razmatranja

$$\langle K(q_0) \rangle = \langle K(q_1) \rangle = \dots = \langle K(q_N) \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_n K(q_n) \right\rangle$$

prema tome sumarni estimator je dodatno usrednjuje što bi trebalo da smanji grešku.

Na slici 3.3 vidimo ponašanje očekivane vrednosti potencijalne i kinetičke energije za ova dva estimator na primeru linearnog harmonijskog oscilator. Sumarni estimator za potencijalnu energiju radi podjednako dobro kao i osnovni, ali pravi napredak se vidi kod estimatora kinetičke energije, mada za veće vrednosti N tj. za malo ϵ , dolazi do odstupanja od date zavisnosti, koja je još uvek u granicama greške. Fitovanjem ovih zavisnosti dobijamo vrednosti koje se poklapaju sa analitičkim u okviru greške.

Ovaj estimator kinetičke energije daje prilično dobre rezultate, ali dobijena greška je ipak za red veličine veća od greške za potencijalnu energiju, zato ćemo potražiti bolji estimator.

3.2 Virijalni estimatori

Za izvođenje ovog estimatora korišćićemo se virijalnom teoremom koja kaže

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{q} V'(\hat{q}) \rangle$$

Da bismo ovo pokazali poćićemo od particione funkcije definisane kao $Tr \hat{A}$ gde je A dato jednačinom 2.6. U ovom izrazu reskaliraćemo “polje”, tj. izvršiti smenu $q_n \rightarrow \lambda q_n$. Nakon ovoga dobijamo

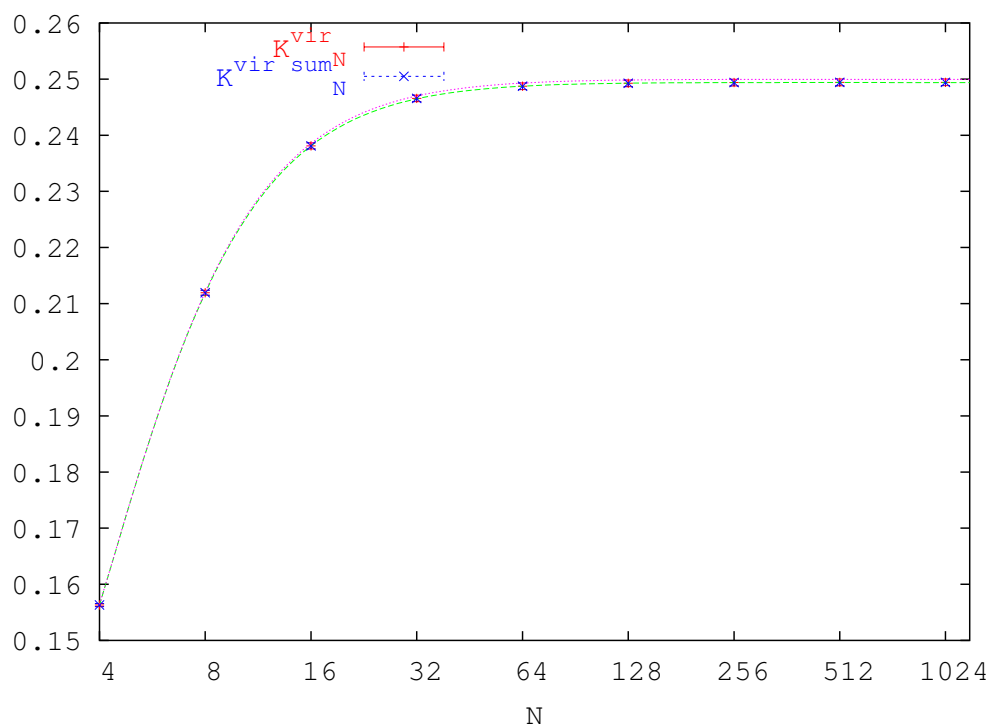
$$Z_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \dots dq_{N-1} \left(\prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{\lambda^2}{2\pi \hbar i \epsilon}} \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{\lambda^2}{2\epsilon} (q_{k+1} - q_k)^2 - \epsilon V(\lambda q_k) \right] \right\}.$$

Odabirom $\lambda^2 \equiv \epsilon$, zavisnost od β tj. T u našem slučaju, nestaje iz kinetičkog člana i diferenciranje po T sada utiče samo na potencijalni deo. Ako primetimo da je $\partial V(\lambda q)/\partial \lambda = q \partial V(y)/\partial y|_{y=\lambda q}$, za virijalni estimator dobijamo

$$E_v = \frac{1}{2N} \sum_{n=0}^{N-1} q_n V'(q_n) + \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{N-1} V(q_n),$$

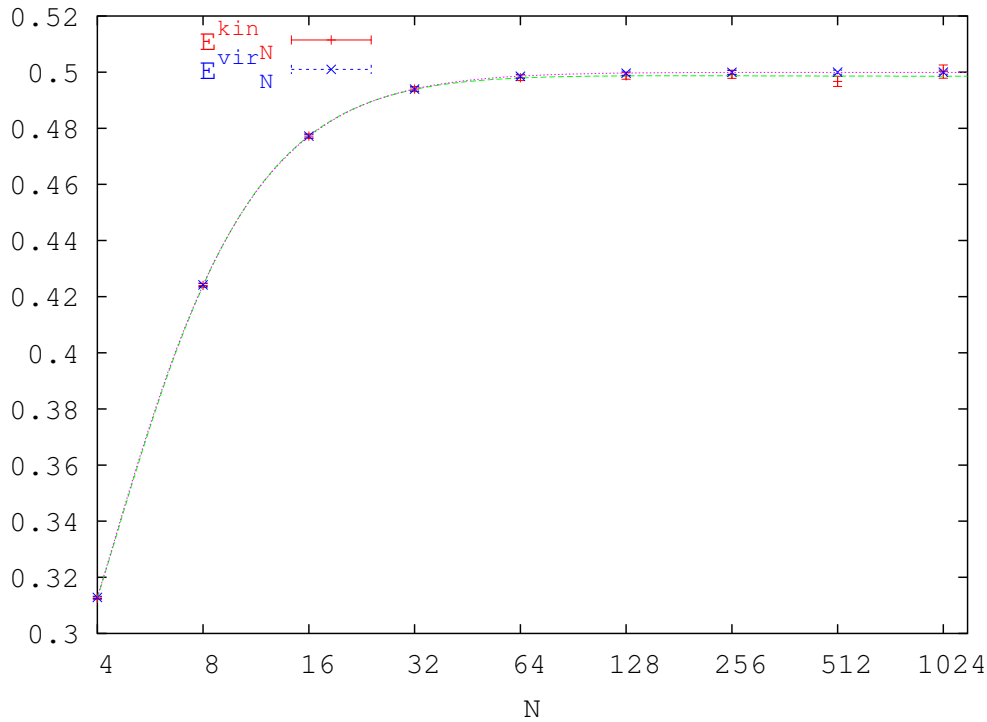
gde prvi član možemo pridružiti kinetičkoj, a drugi potencijalnoj energiji. Zvaćemo ih **sumarni virijalni estimatori**. S obziroma da je estimator potencijalne energije isti kao

kinetički, razmatraćemo samo estimator kinetičke energije. Ako virijalnu teoremu primenimo samo na osnovni estimator kinetičke energije, dobićemo još jedan estimator koji ćemo zvati samo **virijalni estimator**. Na slici 3.4 prikazana je ocena očekivane vrednosti kinetičke energije za ova dva estimatora na primeru linearnog harmonijskog oscilatora. Fitovanjem ove dve zavisnosti polinomom po $1/N$, dobijamo vrednosti za kontinuum limes očekivane vrednosti kinetičke energije i to 0.2500 ± 0.0002 za sumarni virijalni i 0.2494 ± 0.0008 za virijalni estimator. Obe ove vrednosti se slažu sa analitičkom vrednošću. Vidimo da za najbolji estimator kinetičke energije sumarni virijalni estimator.



Slika 3.4: Na slici je prikazana zavisnost diskretizovane očekivane vrednosti kinetičke energije od broja podeljenih tačaka fitovane polinomom po $1/N$, za sumarni virijalni i virijalni estimator. Za očekivanu kinetičku energiju u kontinuum limesu dobija se 0.2500 ± 0.0002 za sumarni virijalni i 0.2494 ± 0.0008 za virijalni estimator. Testirano na primeru linearnog harmonijskog oscilatora za $\omega = 1$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$.

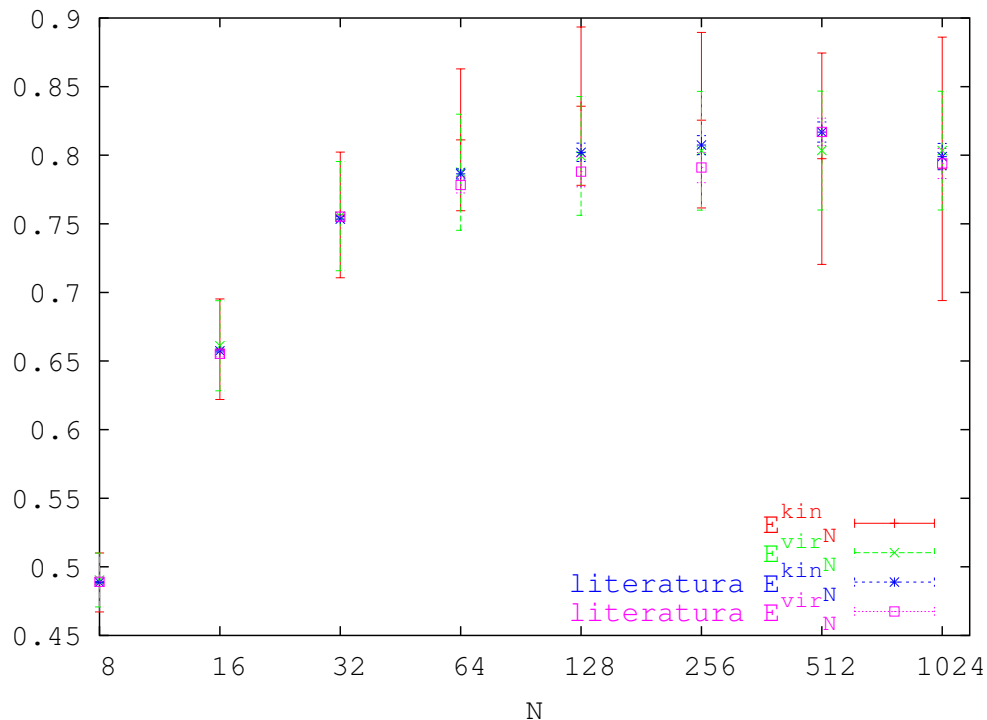
Za ocenu ukupne energije korišćena su odabrana dva estimatora: kinetički (zbir sumarnih estimatora za potencijalnu i sumarnog za kinetičku energiju) i virijalni (zbir sumarnog za potencijalnu i sumarnog virijalnog za kinetičku). Na slici 3.5 prikazani su rezultati za ocenu srednje ukupne energije na primeru linearnog harmonijskog oscilatora. Vidimo da oba estimatora daju dobre rezultate, no virijalni je ipak bolji, što se vidi po grešci koju daje



Slika 3.5: Na slici je prikazana zavisnost diskretizovane očekivane vrednosti ukupne energije od broja podeonih tačaka fitovane polinomom po $1/N$, za kinetički i virijalni estimator. Za očekivanu ukupnu energiju u kontinuum limesu dobija se 0.4990 ± 0.0012 za kinetički i 0.4999 ± 0.0005 za virijalni estimator, što se poklapa. Testirano na primeru linearnog harmonijskog oscilatora za $\omega = 1$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$.

u kontinuum limesu, ali mnogo više po kvalitetu fita, koji je značajno bolji u virijalnom slučaju.

Da bismo dodatno proverili dati algoritam, rezultate smo uporedili sa rezultatima iz literature [11]. Na slici 3.6 prikazan je upoređan prikaz rezultata koje mi dobijamo i rezultata iz literature za računanje srednje vrednosti ukupne enrgije pomoću kinetičkog i virijalnog estimatora.



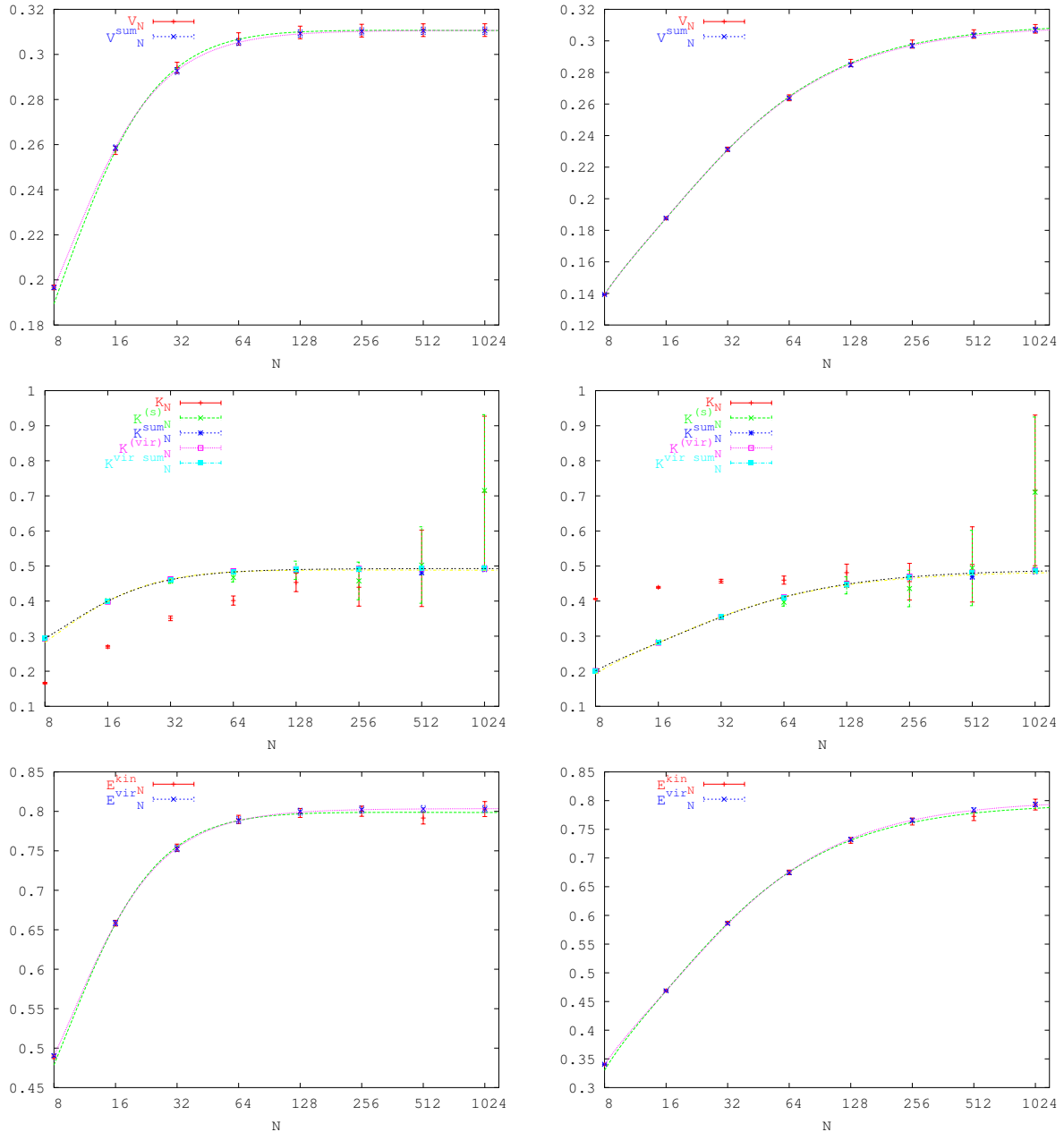
Slika 3.6: Uporedan prikaz rezultata koje mi dobijamo i rezultata iz literature za računanje srednje vrednosti ukupne enrgije pomoću kinetičkog i virijalnog estomatora. Rađeno na primeru kvatričnog potencijala $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{41}q^4$ za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je bio manji nego pri ostalim simulacijama, da bi nam svi parametri simulacije bili isti sa parametrima u literaturi i iznosio je $N_{MC} = 10^5$, što za posledicu ima 10 puta veće graške pri ovoj simulaciji.

3.3 Očekivane vrednosti energija za kvartičnu teoriju

U predhodnom odeljku uveli smo razne estimatore za potencijalnu i kinetičku energiju i ispitali ih za slučaj linearnog harmonijskog oscilatora. Ovaj potencijal je bio očigledan početni test primer s obzirom da za njega znamo analitičke rezultate. Ali baš zbog analitičke rešivosti ovaj potencijal je nezanimljiv za numeričko rešavanje. Zato smo ove estimatore dodatno testirali za kvartičnu teoriju tj. teoriju sa potencijalom $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{41}q^4$. Važno je napomenuti da se kompletna procedura ovde opisana može primeniti na proizvoljan potencijal. U ovom radu taj opšti metod ilustrujemo na primeru kvartičnog potencijala.

Primetimo da su svi gore zadati estimatori dati u levoj preskripciji. Analogni izrazi se lako mogu izvesti u Vajlovoj preskripciji. U ovom odeljku ispitivaćemo date estimatore i za levu i za Vajlovu preskripciju za kvartičnu teoriju. Ispitali smo ove estimatore za različite vrednosti parametra g koji uzima vrednosti $g \in \{1.2, 2.4, 12, 24, 120, 240\}$. Na slici

3.7 prikazani su rezultati za levu i Vajlovu preskripciju za sve opisane estimatore za $g = 24$

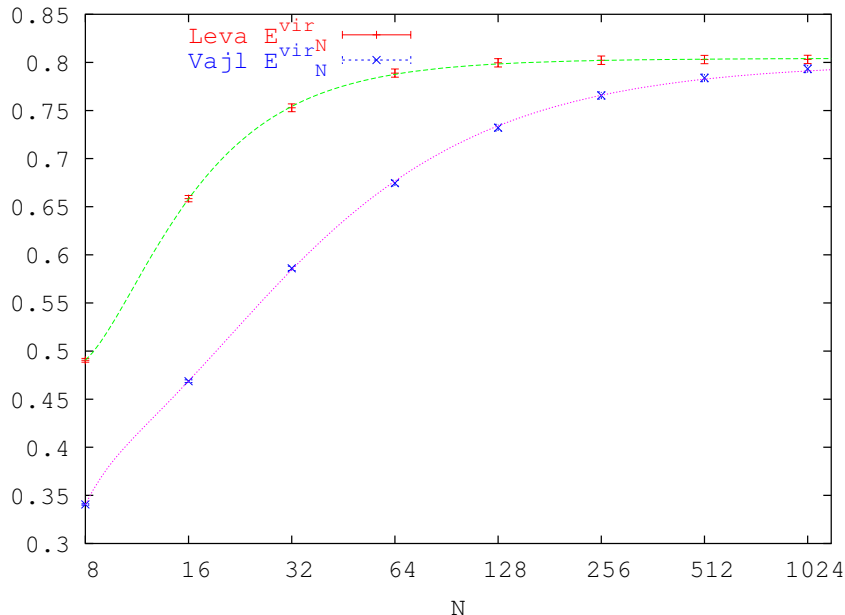


Slika 3.7: Uporedan prikaz rezultata koje mi dobijenih za sve estimatore. Sa leve strane prikazani su rezultati u levoj preskripciji, a sa desne Vajlovoj. Rađeno na primeru kvadrinog potencijala za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je bio $N_{MC} = 10^5$

Možemo primetiti da se estimatori kvalitativno ponašaju kao kod primera linearnog harmonijskog oscilatora, a kvantitativne razlike između rezultata za različite estimatore

male. Greške ocenjenih vrednosti u kontinuum limesu su oko 4 puta veće i primećena je nešto veća razlika između kontinuum limesa za različite estimatore, ali se oni i dalje poklapaju unutar greške. Što je veće g to se greške povećavaju (za $g = 240$ dostižu vrednost od 0.06 za virijalni estimator ukupne energije, što je oko 5%). Razlike između estimatora sada postaju uočljivije, ali vrednosti se uvek poklapaju unutar greške. Ovo se dešava jer se sa povećanjem parametra g , podintegralna funkcija sve više razlikuje od Gausove raspodele kojom smo generisali slučajne brojeve, a kao što je rečeno u odeljku 3.2 što je razlika između podintegralne funkcije i funkcije kojom generišemo slučajne brojeve veća, veća je greška ove metode.

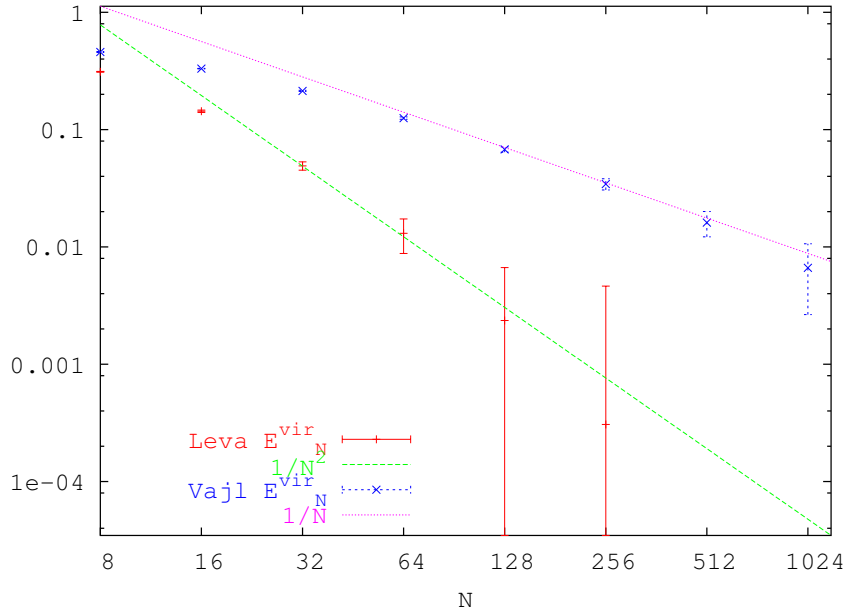
Ako uporedimo levu i Vajlovu preskripciju primetićemo da leva preskripcija brže konvergira kontinuumu. Na slici 3.8 uporedo su prikazani rezultati za virijalni estimator ukupne energije za levu i Vajlovu preskripciju i obe zavisnosti su fitovane polinomom po $1/N$. Primećeno je da koeficient dobijen fitovanjem uz $1/N$ u levoj preskripciji jednak nuli, dok su fitovanjem Vajlove preskripcije dobijeni svi koeficienti različiti od nule, što nam govori da leva preskripcija konvergira kao $1/N^2$, dok Vajlova konvergira kao $1/N$.



Slika 3.8: Upoređan prikaz rezultata za levu i Vajlovu preskripciju preskripciji, za virijalni estimator ukupne energije. Fitovano polinomom po $1/N$. Rađeno na primeru kvatričnog potencijala za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je bio $N_{MC} = 10^5$

Da bismo ovo dodatno proverili, na grafiku 3.9 prikazana je razlika od kontinuum limesa

$|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N za levu i Vajlovu preskripciju i to na logaritamskoj skali i po x i po y osi. Uporedno su prikazane zavisnosti $1/N$ i $1/N^2$. Jasno se vidi da je leva preskripcija paralelna sa zavisnošću $1/N^2$, dok je Vajlova paralelna sa zavisnošću $1/N$. Ovim je pokazano da osobina različitih preskripcija da različito konvergiraju uočena za amplitude [6], važi i za srednje vrednosti energija.



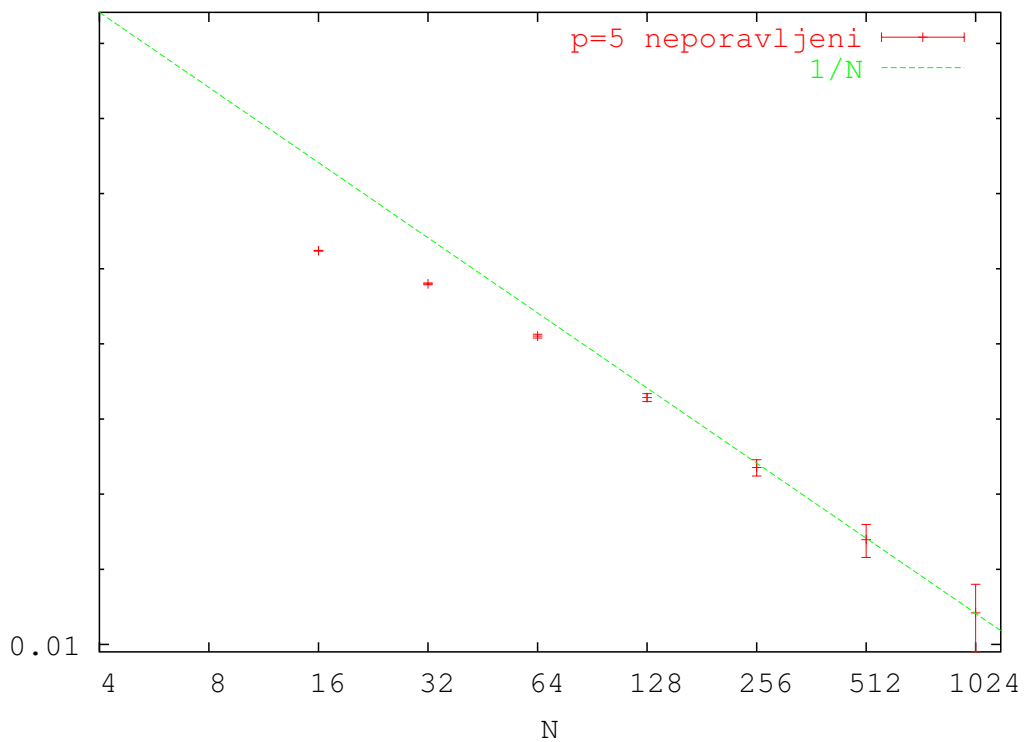
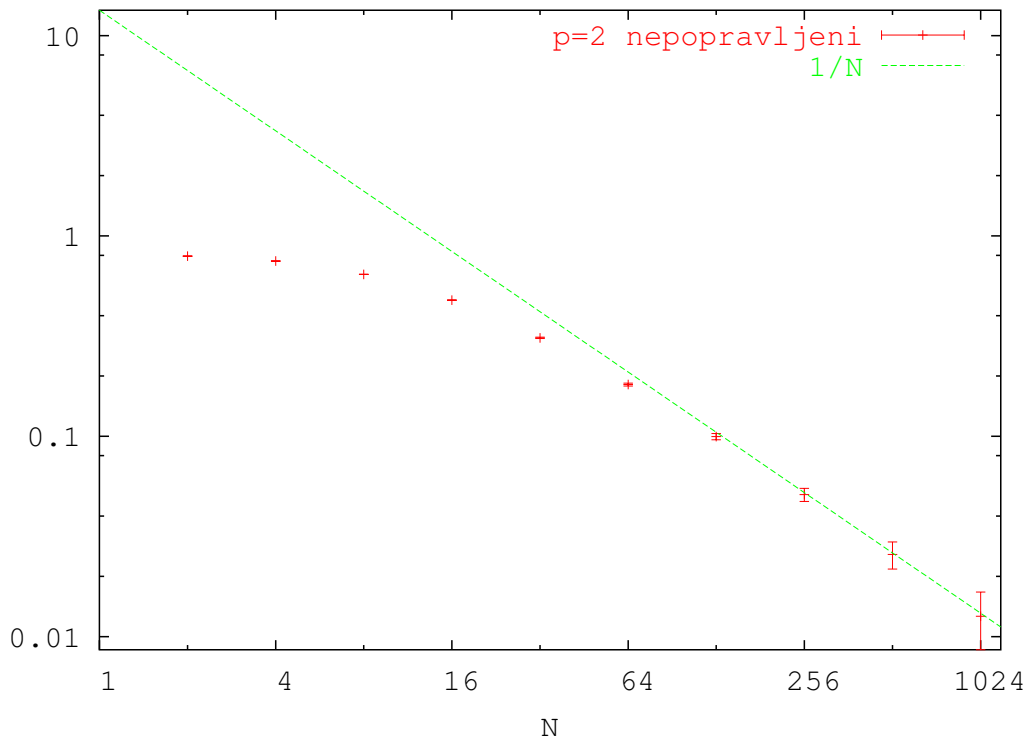
Slika 3.9: Razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N za levu i Vajlovu preskripciju, na logaritamskoj skali i po x i po y osi. Uporedno su prikazane zavisnosti $1/N$ i $1/N^2$ Rađeno na primeru kvatričnog potencijala za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je bio $N_{MC} = 10^5$

4

Novi pristup za očekivane vrednosti energija

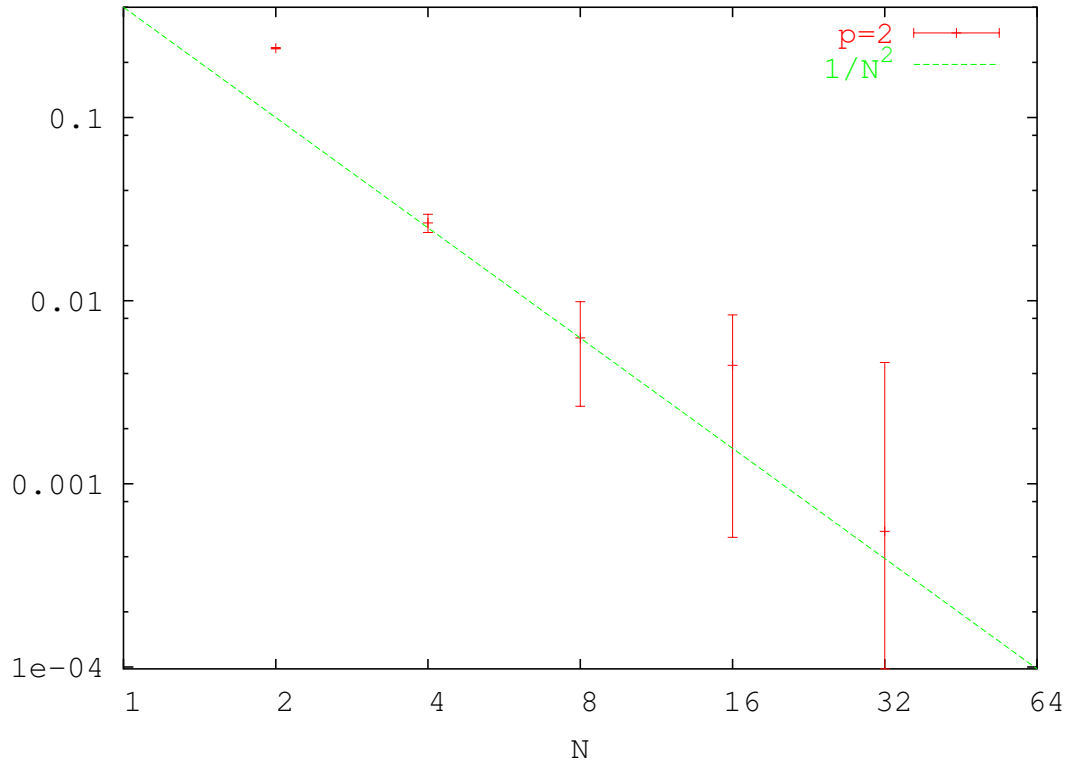
U [6] je razvijen novi efikasniji metod računanja funkcionalnih integrala datih u Vajlovoj preskripciji. Konstruisana su efektivna dejstva $S^{(p)}$ koja su ekvivalentna početnom dejstvu S , ali koja dovode do amplitude koje konvergiraju kontinuumu kao $1/N^p$. U ovom odeljku ćemo ovaj novi metod primeniti na računanje očekivanih vrednosti energija. Najlakši način za dobijanje estimatora za računanje energija u ovom pristupu je postupak kojim smo dobili kinetički i virijalni estimator, tj diferenciranjem logaritma particione funkcije po vremenskom intervalu T . Ukoliko ovaj postupak primenimo na efektivnu particionu funkciju dobićemo estimatore ukupne energije za veće stepene ubrzanja. S obzirom da se u efektivnom dejstvu gubi jasna distinkcija između kinetičke i potencijalne energije, ove estimatore možemo izvesti samo za ukupnu energiju. U ovom radu izveli smo kinetički estimator ukupne energije i virijalni estimator ukupne energije za stepene ubrzanja $p = 2$ i $p = 5$. Procedura za izvođenje ovih estimatora je analogna proceduri za dobijanje estimatora u osnovnom algoritmu. Međutim izrazi za efektivno dejstvo za više niveoe p su veoma glomazni [7], tako da je ovaj račun sada veoma zahtevan i mora biti obavljen uz pomoć računara. Mi smo izveli ove estimatore u programskom paketu Mathematica. Radićemo u Vajlovoj preskripciji s obzirom da je spomenut formalizam moguće izvesti samo u ovom slučaju. Ispitivali smo konvergenciju za, kako se pokazalo u predhodnim ispitivanjima najbolji estimator, a to je virijali.

Na početku smo ispitivali konvergenciju sa efektivnim dejstvom za niveoe $p = 2$ i $p = 5$, ali sa identičnim estimatorima kao za $p = 1$. Na slici 4.1 dati su rezultati za nivo $p = 2$,



Slika 4.1: Razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N za nepopravljeni estimator za stepen ubrzanja $p = 2$ (gornji grafik) i $p = 5$ (donji grafik), na logaritamskoj skali i po x i po y osi. Uporedno je prikazana zavisnosti $1/N$. Rađeno na primeru kvatričnog potencijala za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je bio $N_{MC} = 10^7$

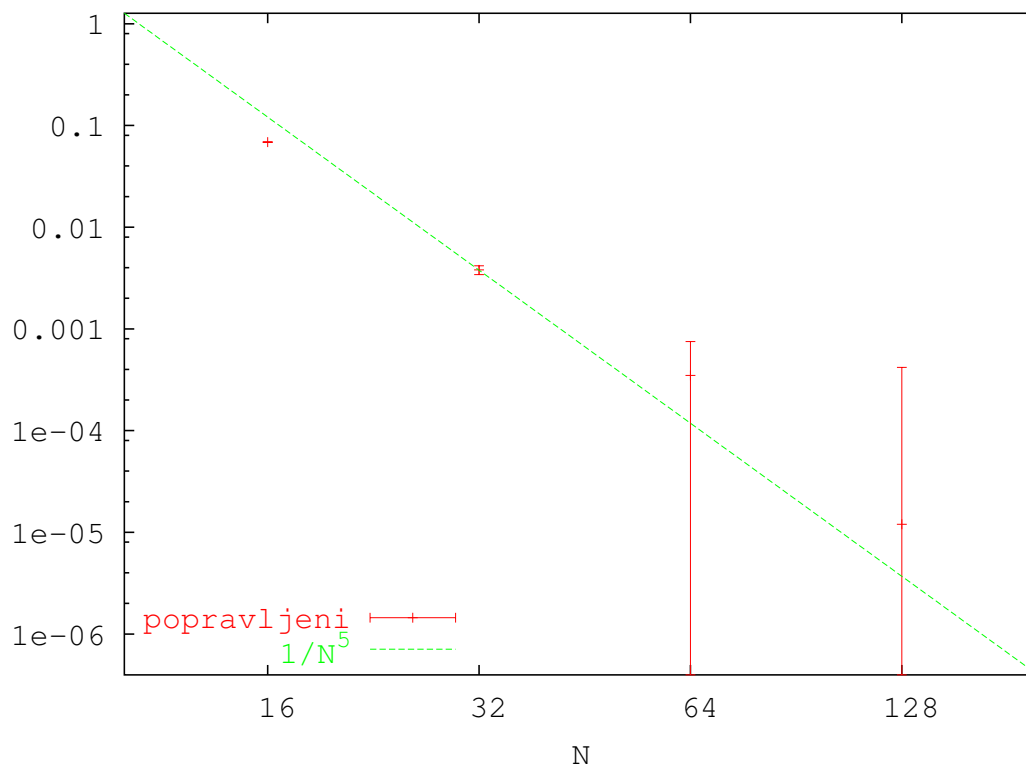
a na slici 4.1 za nivo $p = 5$. Prikazana je razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N na logaritamskoj skali i po x i po y osi. Uporedno su prikazane zavisnosti $1/N$ i jasno se vidi da se radi o zavisnostima $1/N$. Znači, očekivane vrednosti ocenjene pomoću nepopravljenih estimatora konvergiraju traženoj vrednosti i dobro je ocenjuju, ali nema ubrzanja u konvergenciji tj. konvergiraju kao $1/N$, kao na nivou $p = 1$.



Slika 4.2: Razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N za popravljene virijalne estimatore za $p = 2$. Na primeru kvadrinog potencijala za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^7$.

Zatim smo ispitivali u ovom radu izvedene popravljene estimatore za stepen ubrzanja $p = 2$ i $p = 5$. Fitovanjem zavisnosti diskretizovane srednje vrednosti energije od N , polinomom po $1/N$, za stepen ubrzanja $p = 2$ dobijamo da je koeficijent uz $1/N$ jednak nuli, što ukazuje da se radi o konvergenciji sa $1/N^2$. Na slici 4.2 prikazana je razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N , na logaritamskoj skali i po x i po y osi, za popravljene virijalne estimatore za $p = 2$ i uporedo zavisnost $1/N^2$. Vidi se da je zavisnost za popravljene estimator konvergira kao $1/N^2$ tj. istom brzinom kao i amplituda verovatnoće za ovo ubrzanje [6]. Ovde još treba reći da je iako srednja vrednost energije za ubrzanje $p = 2$ i za levu preskripciju na nivou $p = 1$, konvergira sa $1/N^2$, na nivou $p = 2$ je koeficijent uz $1/N^2$

mnogo manji.

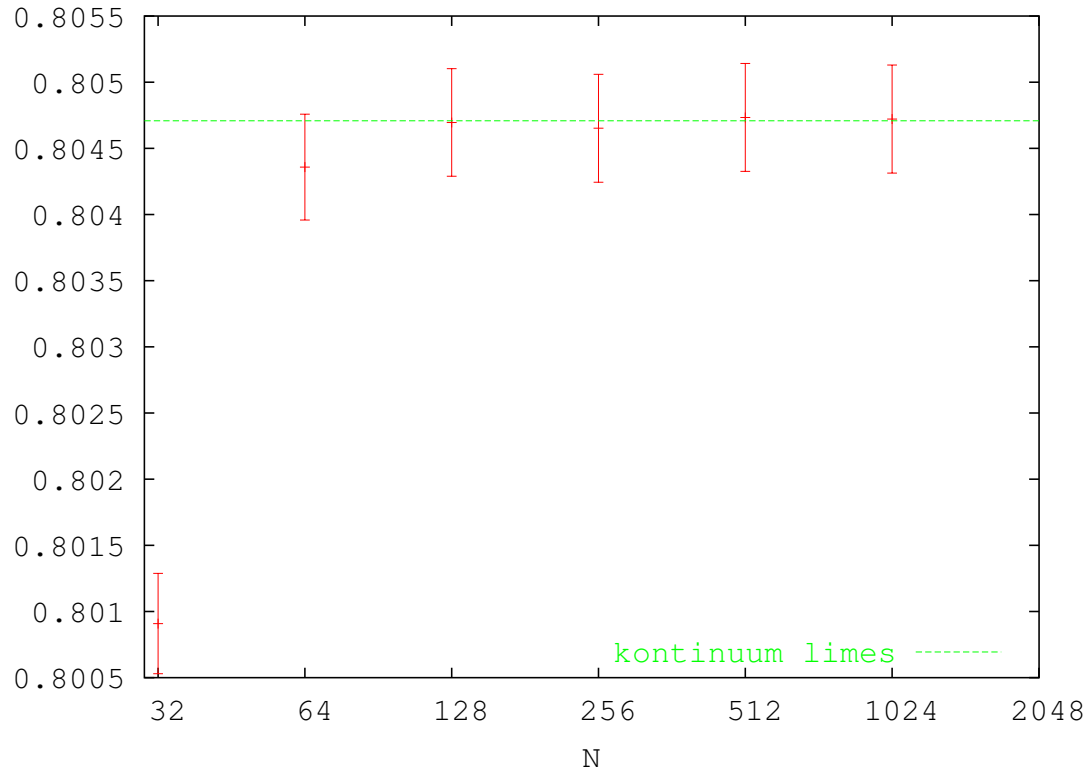


Slika 4.3: razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N za popravljeni virijalni estimatora za $p = 5$. Uporeda je data zavisnost $1/N^5$. Na primeru kvadričnog potencijala za $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^9$

Na početku smo ispitivali konvergenciju sa efektivnim dejstvom za nivoe $p = 2$ i $p = 5$, ali sa identičnim estimatorima kao za $p = 1$. Na slici 4.1 dati su rezultati za nivo $p = 2$, a na slici 4.1 za nivo $p = 5$. Prikazana je razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N na logaritamskoj skali i po x i po y osi. Uporedno su prikazane zavisnosti $1/N$ i jasno se vidi da se radi o zavisnostima $1/N$. Znači, očekivane vrednosti ocenjene pomoću nepopravljenih estimatora konvergiraju traženoj vrednosti i dobro je ocenjuju, ali nema ubrzanja u konvergenciji tj. konvergiraju kao $1/N$, kao na nivou $p = 1$.

Zatim smo ispitivali u ovom radu izvedene popravljene estimatore za stepen ubrzanja $p = 2$ i $p = 5$. Fitovanjem zavisnosti diskretizovane srednje vrednosti energije od N , polinomom po $1/N$, za stepen ubrzanja $p = 2$ dobijamo da je koeficijent uz $1/N$ jednak nuli, što ukazuje da se radi o konvergenciji sa $1/N^2$. Na slici 4.2 prikazana je razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N , na logaritamskoj skali i po x i po y osi, za popravljeni virijalni estimatora za $p = 2$ i uporedo zavisnost $1/N^2$. Vidi se da je zavisnost za popravl-

jeni estimator konvergira kao $1/N^2$ tj. istom brzinom kao i amplituda verovatnoće za ovo ubrzanje [6]. Ovde još treba reći da je iako srednja vrednost energije za ubrzanje $p = 2$ i za levu preskripciju na nivou $p = 1$, konvergira sa $1/N^2$, na nivou $p = 2$ je koeficijent uz $1/N^2$ mnogo manji, što se vidi i iz toga što smo dobili mnogo veći broj tačaka van opsega greške pri pokazivanju da leva preskripcija za $p = 1$ konvergira kao $1/N^2$ nego pri pokazivanju da Vajlova preskripcija za $p = 2$ konvergira kao $1/N^2$.



Slika 4.4: Prikazana je zavisnost diskretizovane očekivane vrednosti ukupne energije od broja podeonih tačaka za popravljene virijalni estimatora za stepen ubrzanja $p = 5$. Uporedo je data vrednost dobijena u kontinuum limesu. Za kvartični potencijal sa anharmonicitetom $g = 24$, a posmatrani vremenski interval evolucije je $T = 10$. Broj Monte Karlo koraka je $N_{MC} = 10^9$

Na slici 4.2 prikazana je razlika od kontinuum limesa $|E_N^{vir} - \langle E \rangle|$ u zavisnosti od N , na logaritamskoj skali i po x i po y osi, za popravljene virijalni estimatora za $p = 5$ i uporedo zavisnost $1/N^5$. Vidi se da je zavisnost za popravljene estimator konvergira kao $1/N^5$ tj. istom brzinom kao i amplituda verovatnoće za ovo ubrzanje [6]. Da bismo pokazali da se dobija konvergencija sa $1/N^5$, morali smo da povećamo broj Monte Karlo tačaka za 10^9 , tako da je ova simulacija bila izuzetno zahtevna (program je radio nedelju dana na klasteru “Paradox”). I pored smo dobili samo nekoliko tačaka na grafiku van opsega greške.

Tražena zavisnost se ipak vidi. Mali broj tačaka van opsega greške je posledica toga što diskretizovane očekivane vrednosti ocenjene popraavljenim estimatorima jako brzo konvergiraju i već za jako mali broj podeonih tačaka dobija se vrednost koja je u okviru greške jednaka vrednosti u kontinuum limesu. Na slici 4.4 prikazana je zavisnost diskretizovane očekivane vrednosti ukupne energije od broja podeonih tačaka. Na slici se vidi da već za $N = 64$ ova zavisnost u okviru greške dostiže vrednost u kontinuum limesu, što je vrlo dobro ukoliko želite da računate očekivanu vrednost, ali izuzetno otežava dokazivanje da se radi upravo o toj zavisnosti.

5

Zaključak

U ovom radu ispitivali smo različite estimatore za računanje očekivane vrednosti potencijalne i kinetičke energije. Za potencijalnu energiju ispitivani su osnovni estimator i sumarni estimator i za oba smo dobili da rezultat dobro konvergira kontinuum limesu, da se greška ne povećava za veliki broj podeonih tačaka. Estimatori kinetičke energije se, međutim, komplikovanije ponašaju. Za kinetičku energiju ispitivali smo pet estimatora: osnovni, uprošćeni osnovni, sumarni, virijalni i sumarni virijalni. Kod osnovnog i uprošćenog osnovnog greška linearno raste za porastom N , tako da se ova dva estimatora u praksi ne mogu koristiti. Sumarni estimator je davao mnogo bolje rezultate, ali je primećena mala nestabilnost za veći broj podeonih tačaka, a ocenjena greška je za red veličine veća od one koju smo postigli kod potencijalne energije. Rezultate sa najmanjom greškom dobijali smo primenom virijalnog i sumarnog virijalni estimator sa kojima se postižu podjednako dobri rezultati za ukupnu energiju kao što smo dobili za potencijalu. Za ukupnu energiju proučavali smo dva estimatora: sumarni kinetički (u tekstu samo kinetički) i sumarni virijalni (u tekstu samo virijalni). Kinetički estimator ukupne energije se ponašao analogno sumarnom estimatoru kinetičke energije, a virijalni estimator analogno sumarnom virijalnom kod kinetičke energije. Svi estimatori testirani su za linearni harmonijski oscilator i dobijeni su rezultati koji se poklapaju sa analitičkim.

Zatim smo primenili ove estimatore na kvartični potencijal oblika $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4}q^4$, za šest različitih vrednosti parametra g za levu i Vajlovu preskripciju. Primetili smo da sa povećanjem anharmoniciteta i greška raste, što je posledica toga što smo za raspodelu slučajnih brojeva uvek koristili Gausovu raspodelu. što je g veće to se podintegralna funkcija više razlikuje od od Gausove raspodele pa i greška raste. Uporedili smo estimatore u levoj

i Vajlovoj preskripciji i dobili da za levu preskripciju očekivane vrednosti konvergiraju kao $1/N^2$, a u Vajlovoj preskripciji kao $1/N$. Ova osobina je ranije pokazana za konvergenciju amplituda verovatnoće [7], sada je ta osobina potvrđena i za očekivane vrednosti.

Ispitali smo brzinu konvergencije za više stepene ubrzanja p (objašnjenje pogledati u [6]). Prvo smo ispitivali konvergenciju sa ubrzanim algoritmom, ali za iste estimatore kao na za stepen ubrzanja $p = 1$. Ovi estimatori su dobro konvergirali, ali nije postojalo nikakvo ubrzanje u odnosu na stepen $p = 1$. Zatim smo izveli popravljene virijalni estimator ukupne energije za stepene ubrzanja $p = 2$ i $p = 5$ i pokazali da se za njih dobija brzina konvergencije $1/N^p$. Ovim je potvrđeno da novi formalizam prikazan u [7][6][9] za amplitude verovatnoće postiže istu brzinu konvergencije i za očekivane vrednosti operatora.

Važno je napomenuti da su sva izvođenja ovde prikazana nezavisna od potencijala u kome se radi i jednom izvedeni estimatori radiće za svaku teoriju. Ovde smo samo ispitivali estimatore na primeru kvartične teorije. Na ovaj način sva ubrzanja postignuta u [6] za računanje amplitude verovatnoće postignuta su za računanje srednjih vrednosti operatora, čime je zaokružen nov formalizam iz [6]. Naime, sada je pokazano da isto ubrzanje (za oko osam redova veličine mozemo postići i za računanje srednjih vrednosti.

U budućnosti postoji nekoliko stvari koje treba još uraditi. Prvi korak je izvođenje popraavljenih estimatora za sve stepene ubrzanja p , za koje je izvedeno diskretizovano dejstvo u [7]. Izvođenje je potpuno analogan ovde prikazanom, ali s obzirom na kompleksnost izraza za efektivna dejstva na višim nivoima, može biti računarski zahtevno. U ovom radu srednja vrednost je računata kao količnik dva funkcionalna integrala, međutim za računanje srednjih vrednosti postoje mnogo efikasniji algoritmi, kao na primer $M(RT)^2$ algoritam takođe poznat i kao Metropolis algoritam [16]. U budućnosti bi trebalo sve ovo uraditi u ovom algoritmu. Na taj način očekujemo da dobijemo nešto bržu konvergenciju i nešto manju grešku. Svi ovde dobijeni rezultati (hijerarhija estimatora, $1/N^p$ ponašanje) naravno ostaju na snazi..

Dodatak A

Programski kod

Programski kod korišćen u ovom radu je speedup-serial [17] u kome su za ovaj rad izvršene neke izmene. S obzirom da je ovde bilo potrebno računati $Tr\hat{A}$, kao i $Tr\hat{X}\hat{A}$, gde je \hat{A} , a \hat{X} operator čiju srednju vrednost računamo, bilo je potrebno u funkciji *distr* generisati i krajnje tačke trajektorije po Gausovoj raspodeli.

```
void distr(double *q, int s) {
    int n;
    int i;
    double temp;

    q[0] = sigma * sqrt(- 2 * log(sprng(stream))) * cos(dpi * sprng(stream));
    q[two[s]] = q[0];
    distrexp[0] = q[0] * q[0]/(2 * sigma * sigma);
    /* distrexp[two[s]] = q[0] * q[0]/(2 * sigma * sigma);

    for(n = 1; n <= s; n ++) /* Loop over bisection level.
    {
        for(i = 0; i < two[n - 1]; i ++)
        {
            temp = sqrt(- dsigma2[n] * log(sprng(stream))) * cos(dpi * sprng(stream));
            q[(1 + 2 * i) * two[s - n]] =
            0.5 * (q[i * two[s - n + 1]] + q[(1 + i) * two[s - n + 1]]) + temp;
            distrexp[(1 + 2 * i) * two[s - n]] = temp * temp * dsigma2inv[n];
        }
    }
```

```
    return;  
}
```

Da bi sračunali očekivane vrednosti energija za različite estimatore, bilo je potrebno izvršiti sledeće promene u funkciji *func*

```
double func(double *q, double T, int s, int n) {  
  
    void V0(double);  
    double Vp(void);  
    int i;  
    double estU, estT, estTv;  
  
    action = 0;  
    Nmax = two[s];  
    Nc = two[n];  
    step = two[s - n];  
    eps = T / Nc;  
    epsinv = 1. / eps;  
    epsinv2 = epsinv * epsinv;  
    eps2 = eps * eps;  
    eps3 = eps * eps2;  
    eps4 = eps * eps3;  
    eps5 = eps * eps4;  
    eps6 = eps * eps5;  
    eps7 = eps * eps6;  
    eps8 = eps * eps7;  
    estU = 0;  
    estT = 0;  
    estTv = 0;  
  
    for(i = 0; i < Nmax; i += step)  
    {  
        qbar = (q[i + step] + q[i]) * 0.5;  
        delta = q[i + step] - q[i];  
        delta2 = delta * delta;
```

```

V0(q[i]);
action += 0.5 * delta2 * epsinv + eps * Vp() - distrexp[i];

estU += V00;
estT += - 0.5 * ((q[step+i] - q[i]) * (q[step+i] - q[i]) * epsinv2 - epsinv);
estTv += (0.5 * q[i] * V01);
}
estU += V00;
estT += - 0.5 * (delta2 * epsinv2 - epsinv);
estTv += (0.5 * qbar * V01);

Vp();
estEk += - 0.5 * (delta2 * epsinv2 - epsinv) + Vk;
estEv += Vv;

funcZ = exp(- action + norm[n] - norm0);
V0(q[0]);
funcU = exp(- action + norm[n] - norm0)*V00;
funcUsum = exp(- action + norm[n] - norm0) * estU/Nc;

funcT = exp(- action + norm[n] - norm0) *
        ( - 0.5 * (((q[step] - q[0]) * epsinv - 0.5 * eps * V01)
          * ((q[step] - q[0]) * epsinv - 0.5 * eps * V01) - epsinv - 0.25 * eps * V02));
funcTe = exp(- action + norm[n] - norm0) *
        ( - 0.5 * ((q[step] - q[0]) * (q[step] - q[0]) * epsinv2 - epsinv));
funcTsum = exp(- action + norm[n] - norm0) * estT/Nc;
funcTv = exp(- action + norm[n] - norm0) * (0.5 * q[0] * V01);
funcTvsum = exp(- action + norm[n] - norm0) * estTv/Nc;

funcEksum = exp(- action + norm[n] - norm0) * (estT+estU)/Nc;
funcEvsum = exp(- action + norm[n] - norm0) * (estTv+estU)/Nc;

return;

#ifdef p2
double Vp(void) {
g0eps1 = V02 / 12.;

g1eps0 = V02 / 24.;

```

```
Vv = V00 + 0.5 * qbar * V01 + eps * V02 / 6. + delta2 * V02 / 12. +
      eps * qbar * V03 / 24. + delta2 * qbar * V03 / 48. ;
```

```
Vk = V00 + eps * V02 / 6. + delta2 * V02 / 24.;
```

```
return V00 + eps * g0eps1 + delta2 * g1eps0;
```

```
} #endif
```

```
g0eps4 = V012 * V02 / 240. - 23 * V032 / 40320. - V02 * V04 / 1680. -
          V01 * V05 / 2240. + V08 / 241920.;
```

```
g1eps0 = V02 / 24.;
```

```
g1eps1 = V04 / 480.;
```

```
g1eps2 = - V022 / 1440. - V01 * V03 / 480. + V06 / 13440.;
```

```
g1eps3 = - V032 / 4032. - V02 * V04 / 5040. - V01 * V05 / 6720. + V08 / 483840.;
```

```
g2eps0 = V04 / 1920.;
```

```
g2eps1 = V06 / 53760.;
```

```
g2eps2 = - V032 / 32256. - V02 * V04 / 40320. - V01 * V05 / 53760. + V08 / 1.93536e6;
```

```
g3eps0 = V06 / 322560.;
```

```
g3eps1 = V08 / 1.161216e7;
```

```
g4eps0 = V08 / 9.289728e7;
```

```
Vk = V00 + 2. * eps * g0eps1 + 3. * eps2 * g0eps2 + 4. * eps3 * g0eps3 +
      5. * eps4 * g0eps4 +
      delta2 * (g1eps0 + 2. * eps * g1eps1 + 3. * eps2 * g1eps2 + 4. * eps3 * g1eps3) +
      delta4 * (g2eps0 + 2. * eps * g2eps1 + 3. * eps2 * g2eps2) +
      delta6 * (g3eps0 + 2. * eps * g3eps1) +
      delta2 * delta6 * g4eps0;
```


$$\begin{aligned}
Vv = & V00 + qbar * V01 * 0.5 - eps2 * V012 * 0.125 + delta2 * V02 / 12. + \\
& eps * V02 / 6. - eps2 * qbar * V01 * V02 / 24. + eps4 * V012 * V02 / 48. - \\
& delta2 * eps2 * V022 / 360. - \\
& eps * eps2 * V022 / 90. + eps4 * qbar * V01 * V022 / 240. + \\
& delta2 * qbar * V03 / 48. + \\
& eps * qbar * V03 / 24. - delta2 * eps2 * V01 * V03 / 120. - \\
& eps * eps2 * V01 * V03 / 30. + eps4 * qbar * V012 * V03 / 480. - \\
& delta2 * eps2 * qbar * V02 * V03 / 576. - \\
& eps * eps2 * qbar * V02 * V03 / 144. - \\
& 5 * delta4 * eps2 * V032 / 32256. - 5 * delta2 * eps * eps2 * V032 / 4032. - \\
& 23 * eps4 * V032 / 8064. + delta4 * V04 / 640. + delta2 * eps * V04 / 160. + \\
& eps2 * V04 / 80. - delta2 * eps2 * qbar * V01 * V04 / 960.- \\
& eps * eps2 * qbar * V01 * V04 / 240. - delta4 * eps2 * V02 * V04 / 8064. - \\
& delta2 * eps * eps2 * V02 * V04 / 1008. - eps4 * V02 * V04 / 336.- \\
& delta4 * eps2 * qbar * V03 * V04 / 23040. - \\
& delta2 * eps * eps2 * qbar * V03 * V04 / 2880. - \\
& eps4 * qbar * V03 * V04 / 1152. + delta4 * qbar * V05 / 3840. + \\
& delta2 * eps * qbar * V05 / 960. + eps2 * qbar * V05 / 480. - \\
& delta4 * eps2 * V01 * V05 / 10752. - delta2 * eps * eps2 * V01 * V05 / 1344. - \\
& eps4 * V01 * V05 / 448. - \\
& delta4 * eps2 * qbar * V02 * V05 / 46080. - \\
& delta2 * eps * eps2 * qbar * V02 * V05 / 5760. - \\
& eps4 * qbar * V02 * V05 / 1920. + delta6 * V06 / 80640. + \\
& delta4 * eps * V06 / 13440. + \\
& delta2 * eps2 * V06 / 3360. + eps * eps2 * V06 / 1680. - \\
& delta4 * eps2 * qbar * V01 * V06 / 107520. - \\
& delta2 * eps * eps2 * qbar * V01 * V06 / 13440. - \\
& eps4 * qbar * V01 * V06 / 4480. + delta6 * qbar * V07 / 645120. + \\
& delta4 * eps * qbar * V07 / 107520. + delta2 * eps2 * qbar * V07 / 26880. + \\
& eps * eps2 * qbar * V07 / 13440. + \\
& delta8 * V08 / 1.8579456e7 + delta6 * eps * V08 / 2.322432e6 + \\
& delta4 * eps2 * V08 / 387072. + delta2 * eps * eps2 * V08 / 96768. + \\
& eps4 * V08 / 48384. + \\
& delta8 * qbar * V09 / 1.8579456e8 + delta6 * eps * qbar * V09 / 2.322432e7 + \\
& delta4 * eps2 * qbar * V09 / 3.87072e6 + \\
& delta2 * eps * eps2 * qbar * V09 / 967680. + \\
& eps4 * qbar * V09 / 483840.;
\end{aligned}$$

$$\text{return } V00 + eps * g0eps1 + eps2 * g0eps2 + eps3 * g0eps3 + eps4 * g0eps4 +$$

```

    delta2 * (g1eps0 + eps * g1eps1 + eps2 * g1eps2 + eps3 * g1eps3) +
    delta4 * (g2eps0 + eps * g2eps1 + eps2 * g2eps2) +
    delta6 * (g3eps0 + eps * g3eps1) +
    delta2 * delta6 * g4eps0;

} #endif

}

```

S obzirom na veći broj parametara koje program računa, bilo je potrebno promeniti funkciju *mc*, radi obrate tih podataka

```

void mc(double Nmc, double *q, double **amp, double **err, int s) {
    double i;
    int n;
    double foverpZ, foverpU, foverpT, foverpTe, foverpTsum, foverpTv;
    double foverpUsum, foverpTvsum, foverpEksum, foverpEvsum;

    for(i = 0; i < Nmc; i ++)
    {
        distr(q, s);
        for(n = 1; n <= s; n ++)
        {
            func(q, T, s, n);

            foverpZ = funcZ;
            amp[n][0] += foverpZ;
            err[n][0] += foverpZ * foverpZ;

            foverpU = funcU;
            amp[n][1] += foverpU;
            err[n][1] += foverpU * foverpU;

            foverpUsum = funcUsum;
            amp[n][2] += foverpUsum;
            err[n][2] += foverpUsum * foverpUsum;
        }
    }
}

```

```
foverpT = funcT;
amp[n][3] += foverpT;
err[n][3] += foverpT * foverpT;

foverpTe = funcTe;
amp[n][4] += foverpTe;
err[n][4] += foverpTe * foverpTe;

foverpTsum = funcTsum;
amp[n][5] += foverpTsum;
err[n][5] += foverpTsum * foverpTsum;

foverpTv = funcTv;
amp[n][6] += foverpTv;
err[n][6] += foverpTv * foverpTv;

foverpTvsum = funcTvsum;
amp[n][7] += foverpTvsum;
err[n][7] += foverpTvsum * foverpTvsum;

foverpEksum = funcEksum;
amp[n][8] += foverpEksum;
err[n][8] += foverpEksum * foverpEksum;

foverpEvsum = funcEvsum;
amp[n][9] += foverpEvsum;
err[n][9] += foverpEvsum * foverpEvsum;

}

}

return;
```


Literatura

- [1] P. A. M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowietunion* **3** (1933) 64.
- [2] R. P. Feynman, *A New Approach to Quantum Theory*, PhD Thesis, Princeton University, 1942.
- [3] Feynman R. P., Hibbs A. R., *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [4] Kalos M. H., Whitlock P. A., *Monte Carlo methods*, Vol. 1: Basics, John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [5] A. Balaž, *Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantno mehanici: analitičke i numeričke osobine*, magistarski rad, Univerzitet u Beogradu, 2004.
- [6] A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 180403 (2005).
- [7] A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, *Phys. Rev. B* **72**, 064302 (2005).
- [8] A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, *Phys. Lett. A* **344** (2005) 84-90.
- [9] A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, *Phys. Rev. E* **72**, 036128 (2005)
- [10] E. L. Ceperley, *Rev. Mod. Phys* **67** (1995) 279.
- [11] W. Janke, T. Sauer, *The Journal of Chemical Physics*, **107** (1997) 5821-5839
- [12] J. A. Barker, *J. Chem. Phys.* **70** (1979) 2914.
- [13] M. Creutz, B. Freedman, *Ann. Phys.* **132** (1981) 427.
- [14] M. F. Herman, E.J. Bruskin, B.J. Berne, *J. Chem. Phys.* **76** (1982) 5150.
- [15] M. Parrinello, A. Rahman, *J. Chem. Phys* **80** (1984) 860.

- [16] M. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [17] <http://scl.phy.bg.ac.yu/speedup>