

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»



ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ
ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ
ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

Προσομοιώσεις Monte Carlo Κβαντικού Βαθμωτού Πεδίου στο Πλέγμα

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

Σταθόπουλου Χρίστου

Επιβλέπων: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Αν. Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Μάρτιος, 2016

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»



ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ
ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ
ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

Προσομοιώσεις Monte Carlo Κβαντικού Βαθμωτού Πεδίου στο Πλέγμα

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

Σταθόπουλου Χρίστου

Επιβλέπων: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Αν. Καθηγητής ΕΜΠ

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 3η Μαρτίου 2016
(Υπογραφή)

.....

Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Αν. Καθηγητής ΕΜΠ

(Υπογραφή)

.....

Νίκος Ήργες
Αν. Καθηγητής ΕΜΠ

(Υπογραφή)

.....

Γεώργιος Κουτσούμπας
Αν. Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Μάρτιος, 2016

Ευχαριστίες

Πρώτιστα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή της διπλωματικής μου εργασίας, κ. Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο, για το ευχάριστο κλίμα, την υποστήριξη, και την πολύτιμη καθοδήγησή του, καθ' όλη την διάρκεια της εργασίας μου.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους καθηγητές του μεταπτυχιακού ΔΠΜΣ "Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές", για την καλή τους διάθεση και την ευχάριστη μετάδοση γνώσεων στα μαθήματα του μεταπτυχιακού.

Πέρα από τα παραπάνω πρόσωπα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου και του αδερφό μου Κωνσταντίνο, για την υλική και ηθική υποστήριξη που μου παρείχαν, καθώς και την φίλη μου Ελένη, για την στήριξη και την υπομονή της, όσο καιρό εκπονούσα την παρούσα εργασία.

Σας ευχαριστώ.

Περίληψη

Οι θεωρίες πεδίου όπως αυτή της Κβαντικής Χρωμοδυναμικής σε πεπερασμένη βαρυονική πυκνότητα, είναι δύσκολο να προσομοιωθούν με την χρήση τυπικών μεθόδων Monte Carlo. Αυτό συμβαίνει λόγω της μιγαδικής δράσης που προκύπτει σε αυτές τις θεωρίες και της αντίστοιχης αδυναμίας ερμηνείας των βαρών στο ολοκλήρωμα δρόμου ως πιθανότητες (πρόβλημα του προσήμου). Στόχος της παρούσας διπλωματικής είναι να εξετάσει το πρόβλημα του προσήμου και κατά την προσομοίωση μοντέλων με μιγαδική δράση. Για τον σκοπό αυτό, βασιζόμενοι στον φορμαλισμό του ολοκληρώματος δρόμου (Path Integral) της κβαντικής θεωρίας πεδίου, εξάγουμε ένα απλουστευμένο δοκιμαστικό μοντέλο, αυτό ενός ρελατιβιστικού αερίου μποζονίων σε χημικό δυναμικό, του οποίου η δράση είναι μιγαδική. Όμοια προβλήματα με αυτά του αερίου μποζονίων σε χημικό δυναμικό παρουσιάζονται και κατά την μελέτη της QCD. Για την μελέτη του μοντέλου αυτού εστιάζουμε σε τεχνικές προσομοιώσεων Markov Chain Monte Carlo του κβαντικού πεδίου στο Πλέγμα. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιούμε τον αλγόριθμο του Metropolis και το μοντέλο σταθερής φάσεως (Phase Quenched model) με την τεχνική του re-weighting, ώστε να δώσουμε πιθανοτική ερμηνεία στο πραγματικό τμήμα της μιγαδικής δράσης. Με τον τρόπο αυτό, υπολογίζουμε παρατηρήσιμες ποσότητες και εξάγουμε συμπεράσματα για το διάγραμμα φάσεων του θεωρητικού μοντέλου σε διάφορες τιμές θερμοκρασίας και χημικού δυναμικού. Οι εκτιμήσεις των παρατηρήσιμων ποσοτήτων υπολογίζονται αρχικά με βάση το Phase Quenched model, ενώ στην συνέχεια στηριζόμενοι σε αυτές, επιχειρούμε να ανακατασκευάσουμε τις αντίστοιχες ποσότητες για την πλήρη θεωρία. Από την μελέτη αυτή γίνεται αντιληπτό το φαινόμενο Silver Blaze για μικρές τιμές χημικού δυναμικού. Για μεγαλύτερες τιμές χημικού δυναμικού, ο υπολογισμός δίνει παρατηρήσεις όμοιες με του μοντέλου σταθερής φάσεως, πράγμα που καταδεικνύει αριθμητικά προβλήματα σε αυτή την περιοχή. Τα αποτελέσματα της μελέτης μας συγκρίνονται με αντίστοιχα αποτελέσματα σε ανάλογες δημοσιεύσεις.

Abstract

Field theories, such as Quantum Chromodynamics at finite temperature and baryon density, are difficult to treat with standard Monte Carlo methods. This is due to what is known as the “complex action problem”. The theory’s action turns out to have a complex value. That suggests non-real weights in the path integral, which cannot have a probabilistic interpretation. This makes importance sampling and standard Lattice Monte Carlo methods not immediately applicable. The objective of this Master Thesis is the study of the sign problem on systems with complex action, and the respective problems that arise. Similar problems are confronted while studying Lattice-QCD. For this purpose, a simplistic toy model, that of a Relativistic Bose Gas in finite chemical potential, is studied. Consecutively, a Markov Chain Monte Carlo algorithm based on the Reweighting method, is utilized in order to simulate the Phase Quenched model, by assigning a probability interpretation on the real part of the action. Observables for the squared field amplitude and the average particle density are computed for several values of finite temperature and chemical potential based on the Phase Quenched theory. Then, the respective observables for the full theory are reconstructed based on the Phase Quenched model. A Silver Blaze behaviour is observed for small values of chemical potential, whereas for larger values the calculation yields erroneous phase quenched results. Finally, the results are compared with similar work on respective publications.

Πίνακας Περιεχομένων

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Στατιστικές κατανομές σωματιδίων | 3 |
| 2 | Κλασική θεωρία βαθμωτού πεδίου | 5 |
| 2.1 | Λαγκρανζιανή περιγραφή πεδίου στον συνεχή χώρο | 5 |
| 2.2 | Το θεώρημα Noether | 6 |
| 2.2.1 | Απειροστοί μετασχηματισμοί | 7 |
| 2.3 | Λαγκρανζιανή βαθμωτού μιγαδικού πεδίου | 8 |
| 3 | Η συνάρτηση επιμερισμού ως συναρτησιακό ολοκλήρωμα δρόμου | 11 |
| 3.1 | Πλάτη μετάβασης και συναρτησιακά ολοκληρώματα δρόμου | 11 |
| 3.2 | Στατιστική κβαντικών βαθμωτών πεδίων | 15 |
| 3.3 | Υπολογισμός συνάρτησης επιμερισμού για το αέριο μποζονίων | 17 |
| 3.4 | Διακριτοποίηση του πεδίου στο Πλέγμα | 21 |
| 4 | Αλγόριθμοι Monte Carlo | 25 |
| 4.1 | Δειγματοληψία καταστάσεων | 25 |
| 4.1.1 | Απλή δειγματοληψία | 26 |
| 4.1.2 | Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας | 26 |
| 4.2 | Μαρκοβιανές διαδικασίες | 27 |
| 4.3 | Συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης | 28 |
| 4.4 | Αλγόριθμοι Markov Chain Monte Carlo | 29 |
| 5 | Προσομοίωση μποζονικού αερίου σε χημικό δυναμικό | 31 |
| 5.1 | Το σύστημα μποζονικού αερίου και η μιγαδική δράση | 31 |
| 5.1.1 | Επαναπροσδιορισμός βαρών και το Phase Quenched model | 32 |
| 5.2 | Προσομοίωση με τον αλγόριθμο Metropolis | 34 |
| 5.2.1 | Παρατηρήσιμες ποσότητες | 38 |
| 5.2.2 | Περίοδος θέρμανσης | 39 |
| 5.2.3 | Αυτοσυσχετίσεις και χρόνοι αυτοσυσχέτισης | 42 |
| 5.2.4 | Στατιστικά σφάλματα | 45 |

| | |
|--|-----------|
| 5.2.5 Αποτελέσματα προσομοίωσης | 47 |
| 5.3 Συμπεράσματα | 57 |
| Παράρτημα Α Κώδικας Προσομοίωσης σε C | 62 |

Κεφάλαιο 1

Στατιστικές κατανομές σωματιδίων

Στην παρούσα εργασία σκοπός είναι να μελετήσουμε ορισμένες ιδιότητες ενός συνόλου σωματιδίων υπό συγκεκριμένες συνθήκες. Το σύνολο αυτό μπορεί να μελετηθεί ως μία στατιστική κατανομή με βάση υπάρχοντα μοντέλα στατιστικής φυσικής. Η στατιστική κατανομή (statistical ensemble) αποτελεί μία *πιθανοτική κατανομή* για την κατάσταση στην οποία μπορεί να βρεθεί ένα *σύστημα*, το οποίο αποτελείται από έναν μεγάλο αριθμό πανομοιότυπων αντικειμένων (στην περίπτωσή μας σωματιδίων). Μια στατιστική κατανομή είναι σε *στατιστική ισορροπία* αν η κατανομή πιθανότητας των καταστάσεων δεν μεταβάλλεται με τον χρόνο.

Στην στατιστική φυσική τρεις είναι οι κύριες στατιστικές κατανομές σωματιδίων που συναντώνται συνήθως. Η *μικροκανονική κατανομή* (microcanonical ensemble) χρησιμοποιείται για να περιγράψει απομονωμένα συστήματα από ανταλλαγή ενέργειας ή σωματιδίων με το περιβάλλον. Επομένως αναφέρεται σε συστήματα με σταθερή ενέργεια E , σταθερό αριθμό σωματιδίων N , και σταθερό όγκο V . Η *κανονική κατανομή* (canonical ensemble) χρησιμοποιείται σε συστήματα, τα οποία μπορούν να ανταλλάσσουν ενέργεια με το περιβάλλον, το οποίο είναι σε θερμοκρασία T , όμως ο αριθμός των σωματιδίων και ο όγκος είναι σταθερά. Η *μεγαλοκανονική κατανομή* χρησιμοποιείται για την μελέτη συστημάτων, τα οποία μπορούν να ανταλλάσσουν με το περιβάλλον τόσο ενέργεια όσο και σωματίδια. Έτσι, σε αυτήν η θερμοκρασία T , ο όγκος V , και το χημικό δυναμικό μ παραμένουν σταθερά. Στις παραπάνω κατανομές, οι ποσότητες $T^{-1} = \beta$ και μ μπορούν να γίνονται αντιληπτές ως πολλαπλασιαστές Lagrange, οι οποίοι καθορίζουν την μέση ενέργεια και τον μέσο αριθμό σωματιδίων αντίστοιχα.

Για την περιγραφή ενός κβαντικού συστήματος, όπου σωματίδια μπορούν να δημιουργούνται και να καταστρέφονται, η κατάλληλη κατανομή, είναι η μεγαλοκανονική κατανομή. Κάνοντας χρήση αυτού του μοντέλου και με βάση τους τύπους της στατιστικής φυσικής μπορούμε να υπολογίζουμε παρατηρήσιμες

ποσότητες που αφορούν το σύστημά μας. Έτσι, στην συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε την μεγαλοκανονική κατανομή.

Στην στατιστική μηχανική σε κατάσταση ισορροπίας, το στοιχειώδες θερμοδυναμικό αντικείμενο είναι ο *πίνακας πυκνότητας*

$$\hat{\rho} = \exp \left[-\beta \left(\hat{H} - \sum_i \mu_i \hat{N}_i \right) \right] \quad (1.1)$$

όπου \hat{H} είναι ο Χαμιλτονιανός τελεστής και \hat{N}_i οι τελεστές συνολικού αριθμού σωματιδίων¹. Το αντικείμενο αυτό εκφράζει μια ποσότητα ανάλογη της πιθανότητας να βρεθεί το σύστημα σε μια συγκεκριμένη κατάσταση του.

Ο πίνακας πυκνότητας $\hat{\rho}$ χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της εκτιμώμενης τιμής μιας παρατηρήσιμης ποσότητας, η οποία αναπαρίσταται από έναν τελεστή \hat{O} από τον τύπο

$$\mathcal{O} = \langle \hat{O} \rangle = \frac{Tr \hat{O} \hat{\rho}}{Tr \hat{\rho}}$$

όπου το Tr συμβολίζει το ίχνος² του τελεστή.

Από τα παραπάνω, ορίζεται επίσης στην μεγαλοκανονική κατανομή, η αντίστοιχη *συνάρτηση επιμερισμού*

$$Z = Tr \hat{\rho} = Z(V, T, \mu_1, \mu_2, \dots) \quad (1.2)$$

η οποία είναι και η πιο σημαντική συνάρτηση όσον αφορά την θερμοδυναμική συμπεριφορά του συστήματός μας. Από την συνάρτηση επιμερισμού μπορούν να προκύψουν όποιες θερμοδυναμικές ποσότητες μας ενδιαφέρουν.

Ενδεικτικά κάποιες από αυτές είναι:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\partial (T \ln(Z))}{\partial V} && \text{(Πίεση)} \\ N_i &= \frac{\partial (T \ln(Z))}{\partial \mu_i} && \text{(Αριθμός σωματιδίων)} \\ S &= \frac{\partial (T \ln(Z))}{\partial T} && \text{(Εντροπία)} \\ E &= -PV + TS + \mu_i N_i && \text{(Ενέργεια)} \end{aligned}$$

¹Στην συνέχεια όπου συναντώνται επαναλαμβανόμενοι δείκτες θα υπονοούν άθροιση.

²Το ίχνος υπολογίζεται ως άθροισμα επί των ιδιοκαταστάσεων του τελεστή.

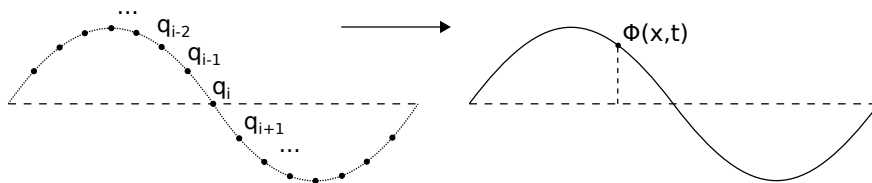
Κεφάλαιο 2

Κλασική θεωρία βαθμωτού πεδίου

Αρχικά, κρίνουμε σκόπιμο να υπενθυμίσουμε τον τρόπο περιγραφής της δυναμικής ενός κλασικού πεδίου, με βάση τον Λαγκρανζιανό φορμαλισμό[20, 6].

2.1 Λαγκρανζιανή περιγραφή πεδίου στον συνεχή χώρο

Με βάση τον Λαγκρανζιανό φορμαλισμό για την περιγραφή ενός συστήματος, μπορούμε να περιγράψουμε ένα διακριτό πεδίο (σύστημα) όπου το κάθε διακριτό σημείο του χώρου i διαθέτει έναν αντίστοιχο βαθμό ελευθερίας $q_i(t)$ με $i = 1 \dots n$. Μπορούμε παρόλα αυτά, να τροποποιήσουμε τον υπάρχων φορμαλισμό για την περιγραφή συνεχών πεδίων στον χώρο. Έτσι, το σύνολο των βαθμών ελευθερίας του συνεχούς πεδίου, μπορεί να θεωρηθεί ως μία συνάρτηση του χρόνου και του χώρου $\phi(x, t)$, η οποία προκύπτει στο όριο του συνεχούς $q_i(t) \rightarrow \phi(x, t)$ για $n \rightarrow \infty$, όπως φαίνεται στην εικόνα 2.1.



Εικόνα 2.1: Διακριτό και συνεχές πεδίο στον χώρο.

Είναι προφανές ότι με τον συνεχή τρόπο περιγραφής υπάρχει απειρία βαθμών ελευθερίας στον περιγραφόμενο χώρο, με κάθε απειροστό σημείο x να έχει συγκεκριμένη μετατόπιση $\phi(x, t)$ σε δεδομένο χρόνο t .

Έχοντας πλέον έναν τρόπο περιγραφής για το συνεχές πεδίο, θα πρέπει στη συνέχεια να αντιστοιχήσουμε την Λαγκρανζιανή στο συνεχές της ανάλογο. Θεωρών-

τας ότι πλέον η συνολική Λαγκρανζιανή είναι το χωρικό ολοκλήρωμα μιας τοπικής ποσότητας $\mathcal{L} = \mathcal{L} \left(\phi, \frac{\partial \phi}{\partial x}, \dot{\phi} \right)$, η οποία εξαρτάται και από την παράγωγο του ϕ ως προς x , και ονομάζεται Λαγκρανζιανή πυκνότητα. Έτσι, η L γίνεται στις τρεις διαστάσεις

$$L = \int L \left(\phi, \nabla \phi, \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) d^3x$$

και η αντίστοιχη Δράση

$$S[\phi] = \int dt \int L \left(\phi, \nabla \phi, \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) d^3x$$

Με βάση την αρχή της ελάχιστης Δράσης από την κλασσική μηχανική για να ελαχιστοποιείται η S , απαιτούμε, η μεταβολή της να είναι $\delta S = 0$. Από την απαίτηση αυτή παίρνουμε τις εξισώσεις *Euler - Lagrange*

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \phi)} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) = 0$$

Για σχετικιστικά πεδία, κάνοντας χρήση του διαφορικού τελεστή¹ μπορούμε να γράψουμε τις εξισώσεις *Euler - Lagrange* για το πεδίο σε συναλοιώτη μορφή

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu \phi)} \right) = 0$$

2.2 Το θεώρημα Noether

Στην κλασσική μηχανική, η ομοιογένεια και η ισοτροπικότητα του χώρου, καθώς και η ομοιογένεια ως προς τον χρόνο, σχετίζονται άμεσα με τις αντίστοιχες αρχές διατήρησης της ορμής, της στροφορμής και της ενέργειας. Ο τρόπος με τον οποίο ορισμένες συμμετρίες στην περιγραφή φυσικών συστημάτων ή πεδίων σχετίζονται με την διατήρηση αντίστοιχων ποσοτήτων, γίνεται εμφανής από την μελέτη του θεωρήματος Noether. Το *θεώρημα Noether* μπορεί να διατυπωθεί συνοπτικά ως εξής.

Αν ένα σύστημα διακατέχεται από την ιδιότητα μίας συνεχούς συμμετρίας, τότε υπάρχουν συγκεκριμένες ποσότητες, των οποίων οι τιμές διατηρούνται με την πάροδο του χρόνου.

Όπου ως συμμετρία, ορίζουμε την δυνατότητα ενός συστήματος να παραμένει αμετάβλητο κάτω από συγκεκριμένους μετασχηματισμούς.

¹Όπου $\partial_\nu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right)$ ο διαφορικός τελεστής στις τέσσερις διαστάσεις.

Πιο συγκεκριμένα, με βάση τον Λαγκρανζιανό φορμαλισμό που αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο, ένα σύστημα ή ένα πεδίο στην περίπτωση μας, περιγράφεται πλήρως από την Λαγκρανζιανή του $L = \int \mathcal{L}(\phi(x), \partial^\mu \phi(x)) dx^3$, ενώ η εξέλιξή του, προκύπτει από τις εξισώσεις κίνησης, ελαχιστοποιώντας την δράση $S = \int L dt$. Έτσι, οι μετασχηματισμοί ενός πεδίου

$$\phi(x) \rightarrow \phi'(x)$$

οι οποίοι αφήνουν την δράση αμετάβλητη και κατά συνέπεια και τις εξισώσεις κίνησης αναλλοίωτες, αποτελούν συμμετρίες. Στην περίπτωση της Λαγκρανζιανής πυκνότητας, αυτό μας δίνει την ελευθερία μετασχηματισμού της έως και έναν όρο ολικής τετρα-παραγώγου μίας ποσότητας J_ν , με

$$\mathcal{L}(x) \rightarrow \mathcal{L}'(x) = \mathcal{L}(x) + \partial^\mu J_\nu(x) \quad (2.1)$$

αφού

$$\int_V \partial^\nu J_\nu(x) dx^4 = \oint_S J_\nu(x) \mathbf{n} da = 0$$

για μηδενικές επιφανειακές οριακές συνθήκες στο άπειρο.

2.2.1 Απειροστοί μετασχηματισμοί

Έστω ότι εφαρμόζουμε έναν απειροστό μετασχηματισμό στο πεδίο της μορφής

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi + \delta\phi$$

$$\delta\mathcal{L} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}\delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)}\delta(\partial^\nu\phi) \quad (2.2)$$

και με

$$\delta(\partial^\nu\phi) = \partial^\nu\phi' - \partial^\nu\phi = \partial^\nu(\phi' - \phi) = \partial^\nu(\delta\phi)$$

έχουμε

$$\delta\mathcal{L} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}\delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)}\partial^\nu(\delta\phi)$$

επιπλέον ισχύει ότι

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)}\partial^\nu(\delta\phi) = \partial^\nu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)}\delta\phi\right) - \partial^\nu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)}\right)\delta\phi$$

άρα η μεταβολή της Λαγκρανζιανής τελικά γίνεται

$$\delta\mathcal{L} = \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} - \partial^\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)} \right) \right] \delta\phi + \partial^\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)} \delta\phi \right)$$

όπου, έχουμε θεωρήσει εξ' αρχής ότι το αρχικό πεδίο $\phi(x)$ αποτελεί λύση των εξισώσεων Euler-Lagrange για την Λαγκρανζιανή \mathcal{L} , επομένως ο πρώτος όρος μηδενίζεται.

Έτσι, συμπεραίνουμε ότι αν για την μεταβολή της \mathcal{L} από τις (2.1) και (2.2) ισχύει ότι

$$\delta\mathcal{L} = \partial^\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)} \delta\phi \right) = \partial^\nu J_\nu(x)$$

τότε

$$\partial^\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)} \delta\phi - J_\nu(x) \right) = 0$$

και η ποσότητα

$$j_\nu(x) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu\phi)} \delta\phi - J_\nu(x)$$

είναι μία σταθερή ποσότητα στο χρόνο.

2.3 Λαγκρανζιανή βαθμωτού μιγαδικού πεδίου

Έστω, η λαγκρανζιανή πυκνότητα

$$\mathcal{L} = \partial_\nu\phi^*\partial^\nu\phi - m^2\phi^*\phi - \lambda(\phi^*\phi)^2 \quad (2.3)$$

για το μιγαδικό βαθμωτό πεδίο

$$\phi = (\phi_1 + i\phi_2)/\sqrt{2} \quad , \quad \phi_1, \phi_2 \in \mathbb{R} \quad (2.4)$$

μάζας m και αλληλεπίδρασης με τον εαυτό του με συντελεστή λ .

Για μετασχηματισμό $U(1)$ του πεδίου κατά φάση

$$\begin{aligned} \phi(x) &\rightarrow \phi'(x) = e^{i\alpha}\phi(x) \\ \phi^*(x) &\rightarrow \phi'^*(x) = e^{-i\alpha}\phi^*(x) \end{aligned}$$

με $a \in \mathbb{R}$ σταθερά, η Λαγκρανζιανή γίνεται

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\phi', \phi'^*, \partial_\nu \phi'^*, \partial^\nu \phi') &= (\partial_\nu \phi'^*)(\partial^\nu \phi') - m^2 \phi'^* \phi' - \lambda (\phi'^* \phi')^2 \\
&= (\partial_\nu (e^{-i\alpha} \phi^*)) (\partial^\nu (e^{i\alpha} \phi)) - m^2 (e^{-i\alpha} \phi^*) (e^{i\alpha} \phi) \\
&\quad - \lambda (e^{-i\alpha} \phi^* e^{i\alpha} \phi)^2 \\
&= e^{-i\alpha} e^{i\alpha} (\partial_\nu \phi^*) (\partial^\nu \phi) - e^{-i\alpha} e^{i\alpha} m^2 \phi^* \phi - \lambda (e^{-i\alpha} e^{i\alpha} \phi^* \phi)^2 \\
&= (\partial_\nu \phi^*) (\partial^\nu \phi) - m^2 \phi^* \phi - \lambda (\phi'^* \phi')^2 \\
&= \mathcal{L}(\phi, \phi^*, \partial_\nu \phi^*, \partial^\nu \phi)
\end{aligned} \tag{2.5}$$

άρα η μεταβολή της, είναι $\delta\mathcal{L} = 0$, και άρα έχει συμμετρία φάσης $U(1)$.

Για τον αντίστοιχο απειροστό μετασχηματισμό

$$\begin{aligned}
\phi(x) &\rightarrow \phi'(x) \approx (1 + i\alpha)\phi(x) \\
\phi^*(x) &\rightarrow \phi'^*(x) \approx (1 - i\alpha)\phi^*(x)
\end{aligned}$$

έχουμε

$$\begin{aligned}
\delta\phi &= \phi - \phi' = -i\alpha\phi \\
\delta\phi^* &= \phi^* - \phi'^* = i\alpha\phi^*
\end{aligned}$$

και η μεταβολή της \mathcal{L} γίνεται

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L} &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} \delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} \delta(\partial_\nu\phi) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi^*} \delta\phi^* + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} \delta(\partial_\nu\phi^*) \\
&= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} \delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} \partial_\nu(\delta\phi) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi^*} \delta\phi^* + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} \partial_\nu(\delta\phi^*) \\
&= \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} - \partial_\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} \right) \right] \delta\phi + \partial_\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} \delta\phi \right) \\
&\quad + \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi^*} - \partial_\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} \right) \right] \delta\phi^* + \partial_\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} \delta\phi^* \right) \\
&= \partial_\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} \delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} \delta\phi^* \right) = \partial_\nu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} i\alpha\phi^* - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} i\alpha\phi \right)
\end{aligned}$$

όμως, ισχύει ότι

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi)} = \partial^\nu \phi^* \quad , \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu\phi^*)} = \partial^\nu \phi$$

άρα, λόγω της (2.5) έχουμε

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L} &= \partial_\nu((\partial^\nu\phi)i\alpha\phi^* - (\partial^\nu\phi^*)i\alpha\phi) \\ &= \alpha\partial_\nu(i\phi^*\partial^\nu\phi - i\phi\partial^\nu\phi^*) \\ &= \partial_\nu j^\nu = 0\end{aligned}$$

όπου

$$j_\nu = i(\phi^*\partial_\nu\phi - \phi\partial_\nu\phi^*) \quad (2.6)$$

προκύπτει η διατηρούμενη ποσότητα ρεύματος.

Το αντίστοιχο διατηρούμενο φορτίο υπολογίζεται ως

$$\mathcal{Q} = q \cdot N = \int d^3x j_0(x) = \int d^3x i[\phi^*\partial_0\phi - \phi(\partial_0\phi)^*] \quad (2.7)$$

όπου q το φορτίο² του κάθε σωματίου και N ο συνολικός αριθμός σωματίων.

²Θεωρώντας ότι τα σωματίδια έχουν φορτίο q ίσο με την μονάδα, τότε η σχέση (2.7) μας δίνει τον συνολικό αριθμό σωματίων.

Κεφάλαιο 3

Η συνάρτηση επιμερισμού ως συναρτησιακό ολοκλήρωμα δρόμου

Η πιο συνηθισμένη προσέγγιση για μή-ρελατιβιστικά συστήματα πολλών σωματιών είναι η μέθοδος της δεύτερης κβάντωσης. Εναλλακτικά, υπάρχει η προσέγγιση των συναρτησιακών ολοκληρωμάτων δρόμου (Path Integrals), την οποία θα ακολουθήσουμε στην συνέχεια. Αρχικά, θα εξάγουμε την αναπαράσταση του ολοκληρώματος δρόμου για την συνάρτηση επιμερισμού ενός ρελατιβιστικού μποζονικού αερίου τα στοιχεία του οποίου αλληλεπιδρούν μεταξύ τους[21, 5].

3.1 Πλάτη μετάβασης και συναρτησιακά ολοκληρώματα δρόμου

Έστω $\hat{\phi}(\mathbf{x}, 0)$ ο τελεστής πεδίου στην εικόνα Schrödinger, την στιγμή $t = 0$ και $\hat{\pi}(\mathbf{x}, 0)$ ο αντίστοιχος τελεστής συζυγούς ορμής του πεδίου, με $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ το διάνυσμα θέσης στον 3-διάστατο χώρο. Για τους τελεστές $\hat{\phi}(\mathbf{x}, 0)$ και $\hat{\pi}(\mathbf{x}, 0)$ ισχύουν

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}, 0)|\phi\rangle = \phi(\mathbf{x})|\phi\rangle \quad (3.1)$$

$$\hat{\pi}(\mathbf{x}, 0)|\pi\rangle = \pi(\mathbf{x})|\pi\rangle \quad (3.2)$$

όπου $\phi(\mathbf{x})$, $\pi(\mathbf{x})$ οι ιδιοτιμές των αντίστοιχων ιδιοκαταστάσεων $|\phi\rangle$, $|\pi\rangle$. Επίσης οι σχέσεις πληρότητας και ορθογωνιότητας¹ για τις ιδιοκαταστάσεις των δύο τελεστών είναι

$$\int d\phi(\mathbf{x})|\phi\rangle\langle\phi| = 1 \quad (3.3)$$

¹Στις εξισώσεις (3.5,3.6), η συνάρτηση δ του Dirac είναι επι της ουσίας συναρτησιακό καθώς το όρισμά της είναι και αυτό συνάρτηση. Μία επεξήγηση του συμβολισμού μπορεί να δοθεί ως εξής. Θεωρούμε ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα συναρτήσεων $w_n(x)$, με n θετικό ακέραιο. Έτσι, δύο

$$\int \frac{d\pi(\mathbf{x})}{2\pi} |\pi\rangle \langle \pi| = 1 \quad (3.4)$$

$$\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \prod_x \delta(\phi_a(\mathbf{x}) - \phi_b(\mathbf{x})) \quad (3.5)$$

$$\langle \pi_a | \pi_b \rangle = \prod_x \delta(\pi_a(\mathbf{x}) - \pi_b(\mathbf{x})) \quad (3.6)$$

Όπως στην κβαντομηχανική, μπορούμε να εργαστούμε στον χώρο των καταστάσεων θέσης ή στον χώρο των συζυγών καταστάσεων ορμής. Η μετάβαση από τον έναν χώρο στον άλλο γίνεται μέσω της σχέσης

$$\langle x | p \rangle = e^{ipx} \quad (3.7)$$

Γενικεύοντας από την κβαντομηχανική, όπου έχουμε πεπερασμένους βαθμούς ελευθερίας, στο συνεχές πεδίο με άπειρους βαθμούς ελευθερίας για $\sum_{i=1}^N p_i x_i \rightarrow \int d^3x \pi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x})$, η αντίστοιχη σχέση στην θεωρία πεδίου γίνεται

$$\langle \phi | \pi \rangle = e^{i \int d^3x \pi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x})} \quad (3.8)$$

Για έναν μόνο κβαντικό βαθμό ελευθερίας το πλάτος μετάβασης από μία κατάσταση $|x_a\rangle$ την χρονική στιγμή $t_f = 0$, σε μία κατάσταση $|x_b\rangle$ είναι

$$\langle x_b | e^{-iHt_f} | x_a \rangle$$

όπου $U(t) = e^{-iHt}$ ο τελεστής χρονικής εξέλιξης και H η χαμιλτονιανή του συστήματος. Το αντίστοιχο πλάτος μετάβασης από μία κατάσταση $|\phi_a\rangle$ σε μία κατάσταση $|\phi_b\rangle$ στην θεωρία πεδίου γίνεται

$$\langle \phi_b | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle \quad (3.9)$$

όπου $U(t) = e^{-iHt}$ ο τελεστής χρονικής εξέλιξης και H η χαμιλτονιανή του συστήματος η οποία είναι το χωρικό ολοκλήρωμα της χαμιλτονιανής πυκνότητας \mathcal{H} του οποιοσδήποτε συναρτήσεων $a(x)$, $b(x)$ μπορούν να γραφούν ως

$$a(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n w_n(x) \quad , \quad b(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n w_n(x)$$

Τότε η συνάρτηση δ του Dirac ως συναρτησιακό γράφεται

$$\delta(a(\mathbf{x}) - b(\mathbf{x})) = \prod_{n=1}^{\infty} \delta(a_n - b_n)$$

πεδίου ϕ με βάση την σχέση

$$H = \int d^3x \mathcal{H}(\hat{\pi}, \hat{\phi}) \quad (3.10)$$

Καθώς μας ενδιαφέρει η χρήση της σχέσης (3.9) στην στατιστική μηχανική, θέλουμε να υπολογίσουμε το πλάτος μετάβασης, όπου το πεδίο επανέρχεται στην αρχική του κατάσταση μετά από χρόνο t_f . Για τον υπολογισμό του πλάτους αυτού, είναι ιδιαίτερα χρήσιμο να διαιρέσουμε το χρονικό διάστημα $(0, t_f)$ σε N τον αριθμό, ίσα μεταξύ τους, χρονικά βήματα² διάρκειας το καθένα $\Delta t = t_f/N$. Στην συνέχεια, ανάμεσα στους διαδοχικούς τελεστές εξέλιξης παρεμβάλλουμε εναλλάξ πλήρη σύνολα ιδιοκαταστάσεων των θέσεων και των ορμών, με βάση τις εξισώσεις (3.5),(3.6) :

$$\begin{aligned} \langle \phi_a | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \phi_a | e^{-iH\Delta t} e^{-iH\Delta t} \dots e^{-iH\Delta t} | \phi_a \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \phi_a | \prod_{i=1}^N e^{-iH\Delta t} | \phi_a \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{i=1}^N d\pi_i d\phi_i / 2\pi \right) \\ &\quad \times \langle \phi_a | \pi_N \rangle \langle \pi_N | e^{-iH\Delta t} | \phi_N \rangle \langle \phi_N | \pi_{N-1} \rangle \langle \pi_{N-1} | e^{-iH\Delta t} | \phi_{N-1} \rangle \dots \\ &\quad \times \langle \phi_{i+1} | \pi_i \rangle \langle \pi_i | e^{-iH\Delta t} | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \pi_{i-1} \rangle \langle \pi_{i-1} | e^{-iH\Delta t} | \phi_{i-1} \rangle \dots \\ &\quad \times \langle \phi_2 | \pi_1 \rangle \langle \pi_1 | e^{-iH\Delta t} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | \phi_a \rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

Επίσης ισχύει ότι

$$\langle \phi_1 | \phi_a \rangle = \delta(\phi_1 - \phi_a) \quad (3.12)$$

και

$$\langle \phi_{i+1} | \pi_i \rangle = e^{i \int d^3x \pi_i(\mathbf{x}) \phi_{i+1}(\mathbf{x})} \quad (3.13)$$

Με δεδομένο ότι για $N \rightarrow \infty$, $\Delta t \rightarrow 0$ μπορούμε να αναπτύξουμε³ τον όρο

²Για τον τελεστή χρονικής εξέλιξης $U = e^{-iH(t_c - t_a)}$ ισχύει $U(t_c, t_a) = U(t_c, t_b)U(t_b, t_a)$ για $t_a < t_b < t_c$.

³Γενικά, ισχύει ότι $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2!}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{3!}(\frac{1}{2}[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]) + \dots}$, οπότε αν $[\hat{A}, \hat{B}] \ll \hat{A}, \hat{B}$ έχουμε $e^{\hat{A} + \hat{B}} \approx e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$.

$\langle \pi_i | e^{-iH\Delta t} | \phi_i \rangle$ κατά Taylor, κρατώντας όρους μέχρι 1ης τάξης

$$\begin{aligned}
\langle \pi_i | e^{-iH\Delta t} | \phi_i \rangle &\approx \langle \pi_i | 1 - iH\Delta t | \phi_i \rangle \\
&= \langle \pi_i | \phi_i \rangle (1 - iH_i\Delta t) \\
&= (1 - iH_i\Delta t) e^{-i \int d^3x \pi_i(\mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{x})} \\
&\approx e^{-iH_i\Delta t} e^{-i \int d^3x \pi_i(\mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{x})} \\
&= e^{-i \int d^3x (\pi_i(\mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{x}) + \mathcal{H}_i \Delta t)}
\end{aligned} \tag{3.14}$$

όπου

$$H_i = \int d^3x \mathcal{H}(\pi_i(\mathbf{x}), \phi_i(\mathbf{x}))$$

Αντικαθιστώντας τις (3.12),(3.13),(3.14) στην (3.11) λαμβάνουμε την σχέση

$$\begin{aligned}
\langle \phi_a | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{i=1}^N d\pi_i d\phi_i / 2\pi \right) \delta(\phi_1 - \phi_a) \\
&\times e^{-i\Delta t \sum_{i=1}^N \int d^3x [\mathcal{H}(\pi_i, \phi_i) - (\phi_{i+1}(\mathbf{x}) - \phi_i(\mathbf{x})) \pi_i(\mathbf{x}) / \Delta t]}
\end{aligned}$$

όπου $\phi_{N+1} = \phi_a = \phi_1$. Στο όριο του συνεχούς ($N \rightarrow \infty, \Delta t \rightarrow 0$), η παραπάνω παράσταση γίνεται

$$\begin{aligned}
\langle \phi_a | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle &= \int [d\pi] \int_{\phi(\mathbf{x},0)=\phi_a(\mathbf{x})}^{\phi(\mathbf{x},t_f)=\phi_a(\mathbf{x})} [d\phi] \\
&\times \exp \left\{ i \int_0^{t_f} dt \int d^3x \left[\frac{\partial \phi(\mathbf{x},t)}{\partial t} \pi(\mathbf{x},t) - \mathcal{H}(\pi, \phi) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Η τελευταία σχέση μας δίνει το πλάτος μετάβασης του πεδίου από μία κατάσταση ξανά στον εαυτό της μετά από χρόνο t_f ως ένα ολοκλήρωμα διαδρομής (Path Integral) στον χώρο των θέσεων και των ορμών.

Με παρόμοιο τρόπο η παραπάνω σχέση για περισσότερα του ενός βαθμωτά πεδία M γίνεται

$$\begin{aligned}
\langle \phi_a | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle &= \prod_{m=1}^M \int [d\pi_m] \int_{\phi_m(\mathbf{x},0)=\phi_{m,a}(\mathbf{x})}^{\phi_m(\mathbf{x},t_f)=\phi_{m,a}(\mathbf{x})} [d\phi_m] \\
&\times \exp \left\{ i \int_0^{t_f} dt \int d^3x \left[\sum_{m=1}^M \frac{\partial \phi_m(\mathbf{x},t)}{\partial t} \pi_m(\mathbf{x},t) - \mathcal{H}(\pi_1, \dots, \pi_M, \phi_1, \dots, \phi_M) \right] \right\}
\end{aligned}$$

3.2 Στατιστική κβαντικών βαθμωτών πεδίων

Ξεκινώντας από το ότι θέλουμε να μελετήσουμε συλλογή μποζονίων σε ρελατιβιστική βάση, όπου ο αριθμός των σωματιδίων δεν παραμένει σταθερός, αλλά μπορεί να μεταβάλλεται, η ενδεδειγμένη στατιστική κατανομή είναι η Μεγαλοκανονική κατανομή (μVT).

Η συνάρτηση επιμερισμού μιας συλλογής όπως η παραπάνω, από την εξίσωση (1.2) γίνεται:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H}-\mu_i\hat{N}_i)} \right] \\ &= \sum_a \langle a | e^{-\beta(\hat{H}-\mu_i\hat{N}_i)} | a \rangle \end{aligned} \quad (3.16)$$

όπου $\beta = 1/T$ με T την θερμοκρασία, και μ το χημικό δυναμικό της κατανομής. Το ίχνος (trace) του τελεστή $e^{-\beta(\hat{H}-\mu_i\hat{N}_i)}$ υπολογίζεται ως άθροισμα των ιδιοτιμών του επί όλων των ιδιοκαταστάσεων $|a\rangle$ του συστήματος. Οι όροι σε αυτή την έκφραση είναι αρκετά όμοιοι με την παράσταση (3.15) για το πλάτος μετάβασης $\langle \phi_a | e^{-iHt_f} | \phi_a \rangle$ του πεδίου. Έτσι, μπορούμε να εκφράσουμε την συνάρτηση επιμερισμού Z με βάση ένα ολοκλήρωμα δρόμου επί των πεδίων και επί των συζυγών ορμών τους, από την σχέση (3.15). Για να υπολογίσουμε τον όρο $\langle \phi_a | e^{-\beta(\hat{H}-\mu_i\hat{N}_i)} | \phi_a \rangle$ της εξίσωσης (3.16), τοποθετούμε στην έκφραση (3.15) ως χαμιλιτονιανή πυκνότητα την

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) \rightarrow \mathcal{H}' = \mathcal{H}(\pi, \phi) - \mu\mathcal{N}(\pi, \phi)$$

για το κβαντικό σύστημα και εξισώνουμε τον συντελεστή β της θερμοκρασίας με

$$\beta = it_f$$

έτσι, η (3.15) γίνεται

$$\begin{aligned} \langle \phi_a | e^{-\beta(H-\mu N)} | \phi_a \rangle &= \int [d\pi] \int_{\phi(\mathbf{x},0)=\phi_a(\mathbf{x})}^{\phi(\mathbf{x},-i\beta)=\phi_a(\mathbf{x})} [d\phi] \\ &\times \exp \left\{ i \int_0^{-i\beta} dt \int d^3x \left[\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \pi(\mathbf{x}, t) - \mathcal{H}(\pi, \phi) + \mu\mathcal{N}(\pi, \phi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα, είναι χρήσιμο να πραγματοποιήσουμε στην σχέση (3.15) έναν μετασχηματισμό Wick[21]. Στον μετασχηματισμό Wick ορίζουμε τον φανταστικό χρόνο ως

$$\tau = it$$

όπου i είναι η φανταστική μονάδα. Με αυτό τον ορισμό, ο πραγματικός χρόνος t γράφεται πλέον ως $t = -i\tau$. Κάνοντας την παραπάνω αντικατάσταση μεταφερόμαστε από τον πραγματικό χωρόχρονο Minkowski (t, \mathbf{x}) , όπου η μετρική είναι της μορφής $(+, -, -, -)$, στον Ευκλείδειο χωρόχρονο (\mathbf{x}_E, τ) , όπου η μετρική γίνεται $(+, +, +, +)$. Επομένως, πλέον η χρονική συνιστώσα τ μπορεί να αντιμετωπίζεται με τον ίδιο τρόπο, όπως οι υπόλοιπες χωρικές συνιστώσες $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_E$.

Συνοπτικά, για να πραγματοποιήσουμε τον μετασχηματισμό Wick στη σχέση (3.17) πρέπει να μετασχηματίσουμε ως εξής

$$\begin{aligned} t &= -i\tau \\ \partial_t &= i\partial_\tau \\ \partial^2 &= -(\partial_\tau^2 + \nabla^2) \\ d^4x &= -id\tau d^3x \end{aligned}$$

Με βάση τα παραπάνω η (3.17) γίνεται

$$\begin{aligned} \langle \phi_a | e^{-\beta(H-\mu N)} | \phi_a \rangle &= \int [d\pi] \int_{\phi(\mathbf{x},0)=\phi_a(\mathbf{x})}^{\phi(\mathbf{x},\beta)=\phi_a(\mathbf{x})} [d\phi] \\ &\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, \tau)}{\partial \tau} \pi(\mathbf{x}, \tau) - \mathcal{H}(\pi, \phi) + \mu \mathcal{N}(\pi, \phi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.18)$$

όπου $\pi, \mathcal{H}, \mathcal{N}$ είναι πλέον οι αντίστοιχες μετασχηματισμένες κατά Wick ποσότητες από τον πραγματικό στον Ευκλείδειο χωρόχρονο, ενώ χάριν συντομίας έχουμε γράψει το πεδίο ως $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ εννοώντας επί της ουσίας $\phi(\mathbf{x}, -i\tau)$.

Στο σημείο αυτό είμαστε έτοιμοι να υπολογίσουμε την συνάρτηση επιμερισμού $Z = \sum_a \langle a | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | a \rangle$, η οποία προκύπτει ως άθροισμα επί όλων των καταστάσεων, των όρων (3.18). Οι όροι αυτοί, αν θεωρήσουμε ότι ο χρόνος τ εκτείνεται από το $-\infty$ στο $+\infty$, εφόσον μεταβαίνουν από μία κατάσταση, πάλι στην ίδια, αντιστοιχούν σε ολοκληρώματα με περιοδικές οριακές συνθήκες για χρονικό διάστημα $\Delta\tau$, ίσο με τον συνελεστή θερμοκρασίας β του συστήματος. Το άθροισμα των όρων αυτών στην συνάρτηση επιμερισμού Z , όσον αφορά το πεδίο, σημαίνει ότι αθροίζουμε για όλες τις πιθανές οριακές διατάξεις του πεδίου $\phi_a(\mathbf{x})$. Επομένως, για την συνάρτηση επιμερισμού έχουμε

$$Z = \int [d\pi] \int_{periodic} [d\phi] \quad (3.19)$$

$$\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, \tau)}{\partial \tau} \pi(\mathbf{x}, \tau) - \mathcal{H}(\pi, \phi) + \mu \mathcal{N}(\pi, \phi) \right] \right\}$$

Με παρόμοια διαδικασία, η συνάρτηση επιμερισμού για περισσότερα του ενός βαθμωτά πραγματικά πεδία ϕ_m γίνεται

$$Z = \prod_{m=1}^M \int [d\pi_m] \int_{periodic} [d\phi_m] \quad (3.20)$$

$$\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[i \sum_{m=1}^M \frac{\partial \phi_m}{\partial \tau} \pi_m - \mathcal{H} + \mu \mathcal{N} \right] \right\}$$

3.3 Υπολογισμός συνάρτησης επιμερισμού για το αέριο μποζονίων

Για να περιγράψουμε ένα αέριο μποζονίων με τους αντίστοιχους τελεστές σωματιδίων N μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το μιγαδικό βαθμωτό πεδίο της εξίσωσης (2.4)

$$\phi = (\phi_1 + i\phi_2)/\sqrt{2} \quad , \quad \phi_1, \phi_2 \in \mathbb{R}$$

το οποίο αναπαριστά μποζόνια θετικού φορτίου ϕ και αρνητικού φορτίου ϕ^* τα οποία αποτελούν τα μεν αντισωματίδια των δε. Η Λαγκρανζιανή πυκνότητα της εξίσωσης (2.3) γίνεται

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [(\partial_t \phi_1)^2 + (\partial_t \phi_2)^2 - (\nabla \phi_1)^2 - (\nabla \phi_2)^2 - m^2 \phi_1^2 - m^2 \phi_2^2] - \frac{1}{4} \lambda (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2$$

Πραγματοποιώντας έναν μετασχηματισμό Legendre έχουμε

$$\pi_1 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \phi_1)} = \partial_t \phi_1$$

$$\pi_2 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \phi_2)} = \partial_t \phi_2$$

και η αντίστοιχη Χαμιλτονιανή πυκνότητα γίνεται

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{m=1}^M \partial_t \phi_m \pi_m - \mathcal{L} \\
&= \frac{1}{2} [(\partial_t \phi_1)^2 + (\partial_t \phi_2)^2 + (\nabla \phi_1)^2 + (\nabla \phi_2)^2 + m^2 \phi_1^2 + m^2 \phi_2^2] \\
&\quad + \frac{1}{4} \lambda (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 \\
&= \frac{1}{2} (\pi_1^2 + \pi_2^2) + U(\phi_1, \phi_2)
\end{aligned}$$

όπου

$$U(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{2} [(\nabla \phi_1)^2 + (\nabla \phi_2)^2 + m^2 \phi_1^2 + m^2 \phi_2^2] + \frac{1}{4} \lambda (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2$$

είναι ο δυναμικός όρος της χαμιλτονιανής.

Ακόμη, η πυκνότητα του αριθμού σωματιδίων \mathcal{N} από την (2.7) γίνεται

$$\begin{aligned}
\mathcal{N} &= i[\phi^* \partial_t \phi - \phi (\partial_t \phi)^*] \\
&= \phi_2 \partial_t \phi_1 - \phi_1 \partial_t \phi_2
\end{aligned}$$

Οι αντίστοιχες μετασχηματισμένες ποσότητες $\pi_1, \pi_2, \mathcal{H}, \mathcal{N}$ στον Ευκλείδειο χωρόχρονο με βάση τον μετασχηματισμό Wick, γίνονται

$$\pi_1 = i \partial_\tau \phi_1$$

$$\pi_2 = i \partial_\tau \phi_2$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (\pi_1^2 + \pi_2^2) + U(\phi_1, \phi_2)$$

$$\mathcal{N} = \phi_2 \pi_1 - \phi_1 \pi_2$$

Αντικαθιστώντας τα παραπάνω στην σχέση (3.20), η συνάρτηση επιμερισμού γίνεται

$$Z = \int [d\pi_1] [d\pi_2] \int_{\text{periodic}} [d\phi_1] [d\phi_2] \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned}
&\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[i \frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} \pi_1 + i \frac{\partial \phi_2}{\partial \tau} \pi_2 - \frac{1}{2} (\pi_1^2 + \pi_2^2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - U(\phi_1, \phi_2) + \mu (\phi_2 \pi_1 - \phi_1 \pi_2) \right] \right\} \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Για να αποτιμήσουμε το παραπάνω ολοκλήρωμα μπορούμε να επιστρέψουμε στην διακριτοποιημένη του μορφή:

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\pi_{1,i}}{2\pi} \frac{d\pi_{2,i}}{2\pi} \int_{\text{periodic}} d\phi_{1,i} d\phi_{2,i} \right) \\ \times \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \Delta\tau \int d^3x \left[\frac{1}{2} \left(i\pi_{1,j} \frac{(\phi_{1,j+1} - \phi_{1,j})}{\Delta\tau} + i\pi_{2,j} \frac{(\phi_{2,j+1} - \phi_{2,j})}{\Delta\tau} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} (\pi_1^2 + \pi_2^2) - U(\phi_1, \phi_2) + \mu (\phi_2 \pi_1 - \phi_1 \pi_2) \right] \right\}$$

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\pi_{1,i}}{2\pi} \frac{d\pi_{2,i}}{2\pi} \int_{\text{periodic}} d\phi_{1,i} d\phi_{2,i} \right) \\ \times \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \sum_{\mathbf{x}} a^3 \left[\frac{1}{2} (i\pi_{1,j} (\phi_{1,j+1} - \phi_{1,j}) + i\pi_{2,j} (\phi_{2,j+1} - \phi_{2,j})) \right. \right. \\ \left. \left. \Delta\tau \left[-\frac{1}{2} (\pi_1^2 + \pi_2^2) - U(\phi_{1,j}, \phi_{2,j}) + \mu (\phi_{2,j} \pi_1 - \phi_{1,j} \pi_2) \right] \right] \right\}$$

Τα ολοκληρώματα των ορμών μπορούν να αποτιμηθούν άμεσα, καθώς αποτελούν γινόμενα Γκαουσιανών ολοκληρωμάτων⁴. Χωρίζουμε τον χώρο των θέσεων όγκου $V = L^3$, σε M^3 μικρούς κύβους πλευράς a , με $M \rightarrow \infty, a \rightarrow 0$. Για λόγους ευκολίας και για να διασφαλίσουμε ότι η συνάρτηση επιμερισμού Z παραμένει αδιάστατη, ορίζουμε $\pi_{m,j} = A_{m,j} / (a^3 \Delta\tau)^{1/2}$ και ολοκληρώνουμε για $A_{1,j}, A_{2,j}$ από $-\infty$ έως ∞ . Για κάθε κύβο παίρνουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dA_{1,j}}{2\pi} \frac{dA_{2,j}}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{2} A_{1,j}^2 - \frac{1}{2} A_{2,j}^2 + i \left(\frac{a^3}{\Delta\tau} \right)^{1/2} [(\phi_{1,j+1} - \phi_{1,j} - i\Delta\tau\mu\phi_{2,j}) A_{1,j} \right. \\ \left. + (\phi_{2,j+1} - \phi_{2,j} + i\Delta\tau\mu\phi_{1,j}) A_{2,j}] \right\} \\ = \frac{1}{2\pi} \exp \left\{ - \left(\frac{a^3}{2\Delta\tau} \right) [(\phi_{1,j+1} - \phi_{1,j} - i\Delta\tau\mu\phi_{2,j})^2 + (\phi_{2,j+1} - \phi_{2,j} + i\Delta\tau\mu\phi_{1,j})^2] \right\} \\ = \frac{1}{2\pi} \exp \left\{ - \left(\frac{\Delta\tau a^3}{2} \right) \left[\left(\frac{\phi_{1,j+1} - \phi_{1,j}}{\Delta\tau} - i\mu\phi_{2,j} \right)^2 + \left(\frac{\phi_{2,j+1} - \phi_{2,j}}{\Delta\tau} + i\mu\phi_{1,j} \right)^2 \right] \right\} \quad (3.23)$$

Έτσι, τελικά έχουμε

⁴ $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx+c} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}+c}$

$$\begin{aligned}
Z &= \lim_{M, N \rightarrow \infty} \left((2\pi)^{-M^3 N} \int_{\text{periodic}} \prod_{i=1}^N d\phi_{1,i} d\phi_{2,i} \right) \\
&\times \exp \left\{ \Delta\tau \sum_{j=1}^N \int d^3x \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\phi_{1,j+1} - \phi_{1,j}}{\Delta\tau} - i\mu\phi_{2,j} \right)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\phi_{2,j+1} - \phi_{2,j}}{\Delta\tau} + i\mu\phi_{1,j} \right)^2 - U(\phi_{1,j}, \phi_{2,j}) \right] \right\} \quad (3.24)
\end{aligned}$$

Παίρνοντας το όριο του συνεχούς για $M, N \rightarrow \infty$ με $\Delta\tau \rightarrow 0$, προκύπτει

$$Z = N' \int_{\text{periodic}} [d\phi_1] [d\phi_2] \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E \right) \quad (3.25)$$

όπου η σταθερά N' μπορεί να αγνοηθεί, αφού ο πολλαπλασιασμός της συνάρτησης επιμερισμού με μια σταθερά δεν μεταβάλλει την θερμοδυναμική του συστήματος, και \mathcal{L}_E , η Ευκλείδεια Λαγκρανζιανή πυκνότητα, η οποία δίνεται ως

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_E &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial\tau} - i\mu\phi_2 \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\phi_2}{\partial\tau} + i\mu\phi_1 \right)^2 \\
&+ \frac{1}{2} [(\nabla\phi_1)^2 + (\nabla\phi_2)^2 + m^2\phi_1^2 + m^2\phi_2^2] + \frac{1}{4}\lambda(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial\phi_1}{\partial\tau} \right)^2 + \left(\frac{\partial\phi_2}{\partial\tau} \right)^2 + (\nabla\phi_1)^2 + (\nabla\phi_2)^2 \right] \\
&+ \frac{m^2 - \mu^2}{2} (\phi_1^2 + \phi_2^2) + \mu i \left(\phi_1 \frac{\partial\phi_2}{\partial\tau} - \phi_2 \frac{\partial\phi_1}{\partial\tau} \right) + \frac{1}{4}\lambda(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 \quad (3.26)
\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τα μιγαδικά πεδία ϕ και ϕ^* , η (3.26) μπορεί να γραφεί και ως

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_E &= (\partial_\tau + \mu)\phi^* (\partial_\tau - \mu)\phi + \partial_i\phi^* \partial_i\phi + m^2\phi^*\phi + \lambda(\phi^*\phi)^2 \\
&= \partial_\nu\phi^* \partial_\nu\phi + (m^2 - \mu^2)\phi^*\phi + \mu(\phi^* \partial_\tau\phi - \phi \partial_\tau\phi^*) + \lambda(\phi^*\phi)^2 \quad (3.27)
\end{aligned}$$

όπου ο δείκτης i εκτείνεται στις τρεις συντεταγμένες του χώρου (x_1, x_2, x_3) , ενώ ο δείκτης ν εκτείνεται στις (x_1, x_2, x_3, τ) [5].

Αντίστοιχα, ορίζεται και η Ευκλείδεια δράση

$$S_E = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E \quad (3.28)$$

Με βάση τις εξισώσεις (3.27), (3.28) η (3.25) γράφεται

$$Z = \int_{\text{periodic}} \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]} \quad (3.29)$$

όπου το $\int_{\text{periodic}} \mathcal{D}\phi \rightarrow \int_{\text{periodic}} [d\phi_1] [d\phi_2]$ υπονοεί το συναρτησιακό ολοκλήρωμα επί όλων των πιθανών διατάξεων του μιγαδικού πεδίου ϕ . Το συναρτησιακό αυτό ολοκλήρωμα επί της ουσίας ορίζει ένα στατιστικό σύνολο διατάξεων ϕ_i του πεδίου ϕ , όπου οι αντίστοιχες πιθανότητες να βρεθεί το σύστημα στην διάταξη ϕ_i είναι⁵

$$p_{\phi_i} = \frac{e^{-S_E[\phi_i]}}{Z} \quad (3.30)$$

ενώ, $Z = \sum_i e^{-S_E[\phi_i]}$ είναι η συνάρτηση επιμερισμού.

Αυτό σημαίνει πως γνωρίζοντας την στατιστική κατανομή του συστήματός μας μπορούμε με υπολογιστικές μεθόδους να προσεγγίσουμε μακροσκοπικές παρατηρήσιμες ποσότητες $\langle \mathcal{O} \rangle$ από τον αντίστοιχο γενικό τύπο

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}[\phi] e^{-S_E[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]}} \approx \frac{\sum_{\{\phi_i\}} \mathcal{O}[\phi_i] e^{-S_E[\phi_i]}}{\sum_{\{\phi_i\}} e^{-S_E[\phi_i]}} \quad (3.31)$$

Η έκφραση (3.29) με την Ευκλείδεια Λαγκρανζιανή της (3.26) δεν μπορεί να αποτιμηθεί αναλυτικά, παρά μόνο για την περίπτωση $\lambda = 0$, όπου το συναρτησιακό ολοκλήρωμα γίνεται Γκαουσιανό και μπορεί να υπολογισθεί όμοια με το ελεύθερο βαθμωτό πεδίο [21].

Στο σημείο αυτό, παρατηρούμε από την (3.26) ότι ο γραμμικός όρος του χημικού δυναμικού μ , προκύπτει φανταστικός, δίνοντάς μας τελικά μία *μιγαδική δράση* S_E . Αυτό το χαρακτηριστικό επηρεάζει σημαντικά την μελέτη του πεδίου μας τόσο με αναλυτικές, όσο και με υπολογιστικές μεθόδους, όπως θα δούμε στην συνέχεια.

3.4 Διακριτοποίηση του πεδίου στο Πλέγμα

Για να πραγματοποιήσουμε πρακτικούς υπολογισμούς αναμενόμενων ποσοτήτων σε ηλεκτρονικό υπολογιστή είναι χρήσιμο να διακριτοποιήσουμε το πεδίο μας στο Ευκλείδειο χωροχρονικό πλέγμα [23, 5]. Έτσι ξεκινάμε από την Ευκλείδεια δράση για το μιγαδικό μποζονικό πεδίο $\phi(\mathbf{x}, \tau)$, όπως προέκυψε από την παραπάνω ανάλυση

$$S_E = \int d^4x [(\partial^\nu \phi^*)(\partial_\nu \phi) + (m^2 - \mu^2) \phi^* \phi + \lambda (\phi^* \phi)^2 + \mu (\phi^* \partial_4 \phi - \phi \partial_4 \phi^*)] \quad (3.32)$$

⁵Όπου $S_E[\phi_i]$ συμβολίζουμε την υπολογιζόμενη δράση για μία διάταξη ϕ_i του πεδίου.

Για την διακριτοποίηση του χωροχρόνου μπορούμε να αντικαταστήσουμε ως εξής

$$x_\nu \rightarrow n_\nu a, \quad n_\nu \in \mathbb{Z}$$

$$\phi(\mathbf{x}) \rightarrow \phi(\mathbf{n}a)$$

$$\int d^4x \rightarrow a^4 \sum_{\mathbf{x}}$$

ενώ για την μερική παράγωγο μπορούμε να προσεγγίσουμε⁶

$$\begin{aligned} \partial_\nu \phi(\mathbf{x}) &\rightarrow \frac{1}{a} [\phi(\mathbf{n}a + a\hat{\nu}) - \phi(\mathbf{n}a)] \\ &= \frac{1}{a} [\phi_{\mathbf{x}+a\hat{\nu}} - \phi_{\mathbf{x}}] \end{aligned}$$

όπου $\hat{\nu}$ είναι μοναδιαίο διάνυσμα κατά την θετική διεύθυνση ν .

Εφαρμόζοντας μια ανακλιμάκωση των ποσοτήτων ϕ, m, μ στα

$$\bar{\phi} = a\phi, \quad \bar{m} = am, \quad \bar{\mu} = a\mu$$

η δράση S_E προκύπτει πλέον αδιάστατη. Επομένως, μπορούμε πλέον να ορίσουμε ότι $a \equiv 1$. Στην συνέχεια, για λόγους ευκολίας στην γραφή θα χρησιμοποιούμε τις ποσότητες ϕ, m, μ εννοώντας τις ανακλιμακωμένες ποσότητες $\bar{\phi}, \bar{m}, \bar{\mu}$. Εφαρμόζοντας τα παραπάνω στην δράση (3.32) έχουμε

$$\begin{aligned} (\partial^\nu \phi^*) (\partial_\nu \phi) &\rightarrow \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* - \phi_{\mathbf{x}}^*) (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}} - \phi_{\mathbf{x}}) \\ &= \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}} - \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}}) \\ \phi^* \partial_4 \phi - \phi \partial_4 \phi^* &\rightarrow \phi_{\mathbf{x}}^* (\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}}) - \phi_{\mathbf{x}} (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* - \phi_{\mathbf{x}}^*) \\ &= \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* + \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}}^* \\ &= \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* \end{aligned}$$

⁶Για μια συνάρτηση $f(x)$ το ανάπτυγμα Taylor δίνει

$$f(x_0 + a) \approx f(x_0) + af'(x_0) + \mathcal{O}(a^2)$$

Επομένως, μπορούμε να προσεγγίσουμε

$$f'(x_0) = \left. \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right|_{x=x_0} \approx \frac{1}{a} [f(x_0 + a) - f(x_0)] + \mathcal{O}(a)$$

Έτσι, αυτή γίνεται

$$\begin{aligned}
S_E &= \sum_{\mathbf{x}} \left[\sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}} - \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}}) \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{x}} \left[(m^2 - \mu^2) \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 + \mu (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^*) \right] \\
&= \sum_{\mathbf{x}} \left[\sum_{\nu=1}^4 (2\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{x}} \left[m^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \mu^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \mu (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^*) + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 \right] \\
&= \sum_{\mathbf{x}} [8\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + m^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{x}} \left[-\mu^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) + \mu (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^*) \right] \\
&= \sum_{\mathbf{x}} [8\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + m^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{x}} \left[-\mu^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} - \sum_{\nu=1}^3 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right. \\
&\quad \left. - (\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}) + \mu (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} - \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^*) \right]
\end{aligned}$$

Για μικρό a ισχύει⁷ ότι $\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} \approx \frac{1}{2} \left(\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} \right)$ οπότε, τελικά

$$\begin{aligned}
S_E &= \sum_{\mathbf{x}} \left[8\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + m^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{x}} \left[- \sum_{\nu=1}^3 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) - (1 + \mu + \frac{\mu^2}{2}) \phi_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* - (1 - \mu + \frac{\mu^2}{2}) \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} \right] \\
&\approx \sum_{\mathbf{x}} \left[8\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + m^2 \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{x}} \left[- \sum_{\nu=1}^3 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) - \phi_{\mathbf{x}} e^{\mu} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* - \phi_{\mathbf{x}}^* e^{-\mu} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} \right] \\
&= \sum_{\mathbf{x}} \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* e^{\mu \delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* e^{-\mu \delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right] \quad (3.33)
\end{aligned}$$

Έχοντας αναπτύξει πλέον έναν εύκολο τρόπο υπολογισμού της δράσης στον υπολογιστή, μπορούμε να προχωρήσουμε στην πραγματοποίηση μεθόδων προσομοίωσης MCMC.

⁷Αναπτύσσοντας κατά Taylor τα $\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}, \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^*$ έχουμε:

$$\begin{aligned}
\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} &\approx \phi_{\mathbf{x}} + a \partial_4 \phi_{\mathbf{x}} + \mathcal{O}(a^2) \\
\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* &\approx \phi_{\mathbf{x}}^* + a \partial_4 \phi_{\mathbf{x}}^* + \mathcal{O}(a^2)
\end{aligned}$$

Επομένως, για μικρό a προσεγγιστικά ισχύει $\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}} \approx 2\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \mathcal{O}(a)$

Κεφάλαιο 4

Αλγόριθμοι Monte Carlo

Στην στατιστική φυσική ένα σύστημα μπορεί να έχει πολύ μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας, όπως και αντίστοιχων πιθανών καταστάσεων που μπορεί να βρεθεί. Για τα περισσότερα ενδιαφέροντα συστήματα είναι δύσκολος έως και αδύνατος ο αναλυτικός υπολογισμός της συνάρτησης επιμερισμού, η οποία εμπεριέχει και όλη τη στατιστική πληροφορία για το σύστημα. Για τον λόγο αυτό, συχνά καταφεύγουμε σε αριθμητικούς υπολογισμούς. Αυτό κάνουν οι λεγόμενες μέθοδοι *Monte Carlo* [10]. Συγκεντρώνοντας ένα μικρό στατιστικό δείγμα κάποιων ενδεικτικών καταστάσεων του συστήματος, με κατάλληλα επιλεγμένη κατανομή πιθανοτήτων μπορούμε να εκτιμήσουμε με ακρίβεια χαρακτηριστικές θερμοδυναμικές του ποσότητες.

4.1 Δειγματοληψία καταστάσεων

Έστω ένα κλασικό στατιστικό σύστημα, όπου p_{ϕ_i}

$$p_{\phi_i} = \frac{e^{-S[\phi_i]}}{\sum_i e^{-S[\phi_i]}} = \frac{e^{-S[\phi_i]}}{Z} \quad (4.1)$$

είναι η πιθανότητα του συστήματος να βρεθεί στην κατάσταση ϕ_i , θεωρώντας πως η ποσότητα $S \in \mathbb{R}$ και με $Z = \sum_i e^{-S[\phi_i]}$, την συνάρτηση επιμερισμού. Η αναμενόμενη τιμή μιας παρατηρήσιμης ποσότητας O είναι

$$\langle O \rangle = \sum_i p_{\phi_i} O_i \quad (4.2)$$

Με στόχο να έχουμε μια προσέγγιση του μεγέθους O , κατασκευάζουμε ένα δείγμα M καταστάσεων $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$ του συστήματος οι οποίες είναι στατιστικά κατανεμημένες με βάση μία πιθανοτική κατανομή P_{ϕ_i} . Επομένως, ορίζουμε τον

εκτιμητή \mathcal{O}_M του $\langle O \rangle$ ως

$$\mathcal{O}_M = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\phi_i} P_{\phi_i}^{-1} e^{-S[\phi_i]}}{\sum_{i=1}^M P_{\phi_i}^{-1} e^{-S[\phi_i]}} \quad (4.3)$$

Στην παραπάνω εξίσωση για αρκετά μεγάλο δείγμα καταστάσεων το P_{ϕ_i} είναι η πιθανότητα να βρεθεί η κατάσταση ϕ_i στο δείγμα μας. Τελικά περιμένουμε

$$\langle O \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} \mathcal{O}_M$$

ο στόχος μας είναι να βρούμε μια κατάλληλη κατανομή P_{ϕ_i} , ώστε ο εκτιμητής μας να συγκλίνει στην πραγματική τιμή του $\langle O \rangle$ κατά το δυνατόν συντομότερα (με μικρότερο δείγμα καταστάσεων).

4.1.1 Απλή δειγματοληψία

Αν διαλέξουμε δείγμα με $P_{\phi_i} = \text{σταθερό}$, τότε η εξίσωση (4.3) γίνεται

$$\mathcal{O}_M = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\phi_i} e^{-S[\phi_i]}}{\sum_{i=1}^M e^{-S[\phi_i]}}$$

Το πρόβλημα με αυτή την επιλογή P_{ϕ} είναι ότι υπάρχει χαμηλή επικάλυψη του δείγματος με τις καταστάσεις, οι οποίες συνεισφέρουν σημαντικά στον υπολογισμό του αθροίσματος (4.2). Σε μία προσομοίωση Monte Carlo το μέγεθος του δείγματος καταστάσεων είναι ένα πολύ μικρό κλάσμα του συνόλου των πιθανών καταστάσεων. Επομένως, η πιθανότητα να επιλεγούν οι καταστάσεις που συνεισφέρουν σημαντικά είναι πολύ μικρή.

4.1.2 Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας

Εναλλακτικά, από την απλή δειγματοληψία μπορούμε να διαλέξουμε μια κατανομή P_{ϕ_i} για το δείγμα των καταστάσεων, όπου η πιθανότητα να επιλεγεί μια κατάσταση, η οποία θα συνεισφέρει σημαντικά στον υπολογισμό του $\langle O \rangle$ θα είναι πολύ μεγαλύτερη. Αν επιλέξουμε ένα δείγμα με δειγματοληψία

$$P_{\phi_i} = p_i = \frac{e^{-S[\phi_i]}}{Z} \quad (4.4)$$

το δείγμα μας θα δειγματοληφτεί σε αυτή την περιοχή καταστάσεων. Στην περίπτωση

αυτή ο εκτιμητής (4.3) γίνεται

$$\mathcal{O}_M = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{j_i} (e^{-S_E[\phi_i]})^{-1} e^{-S_E[\phi_i]}}{\sum_{i=1}^M (e^{-S_E[\phi_i]})^{-1} e^{-S_E[\phi_i]}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{j_i} \quad (4.5)$$

Αυτός ο τρόπος δειγματοληψίας ονομάζεται δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (importance sampling) και είναι ο πιο συνηθισμένος τρόπος δειγματοληψίας σε προσομοιώσεις Monte Carlo. Το δείγμα, όπως φαίνεται από την εξίσωση (4.4) εξαρτάται από την θερμοκρασία β , αλλά και από το χημικό δυναμικό μ . Για τον λόγο αυτό, σε περίπτωση αλλαγής της θερμοκρασίας ή του χημικού δυναμικού, θα πρέπει να κάνουμε νέα δειγματοληψία για την μέτρηση των νέων ποσοτήτων. Παρά ταύτα, η δυσκολία αυτή είναι συνήθως κατά πολύ μικρότερη από το πρόβλημα επικάλυψης που εμφανίζεται σε περίπτωση απλής δειγματοληψίας.

4.2 Μαρκοβιανές διαδικασίες

Το να δειγματοληψήσουμε με βάση μια πιθανοτική κατανομή P_ϕ , δεν είναι δυνατό να γίνει απ' ευθείας. Αν επιχειρήσουμε να κατασκευάσουμε ένα δείγμα $P_\phi = \frac{e^{-S[\phi]}}{Z}$ επιλέγοντας τυχαία από ομοιόμορφη κατανομή μια κατάσταση ϕ και απορρίπτοντας ή κρατώντας την κατάσταση αυτή στο δείγμα με βάση πιθανότητα P_ϕ , τότε έχουμε πολύ μικρή πιθανότητα να κρατήσουμε την κατάσταση ϕ στο δείγμα. Συνεπώς, θα καταλήξουμε πάλι να χρειαζόμαστε πάρα πολύ χρόνο για την κατασκευή του δείγματος καταστάσεων. Για να παρακάμψουμε αυτό το πρόβλημα θα χρησιμοποιήσουμε μια διαδικασία Markov για την κατασκευή του δείγματος. Η διαδικασία Markov είναι μία στοχαστική διαδικασία, η οποία δεδομένου ενός συστήματος σε κατάσταση ϕ_j , τοποθετεί το σύστημα σε μία νέα κατάσταση ϕ_k με τέτοιο στοχαστικό τρόπο ώστε να ακολουθούν την ζητούμενη κατανομή. Με τον τρόπο αυτό, τελικά δημιουργείται μία αλυσίδα καταστάσεων

$$\phi_1 \rightarrow \phi_2 \rightarrow \dots \rightarrow \phi_M$$

η οποία αποτελεί και το ζητούμενο δείγμα $\{\phi_i\}$. Για τις πιθανότητες μετάβασης $P(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ από την κατάσταση ϕ_j στην κατάσταση ϕ_k , ικανοποιούνται οι παρακάτω ιδιότητες:

1. Η δειγματοληψία είναι ανεξάρτητη του χρόνου
2. Εξαρτώνται μόνο από τις καταστάσεις ϕ_j , ϕ_k και όχι από προηγούμενες ή επόμενες από αυτές.

3. Ισχύει ότι

$$\sum_k P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = 1$$

4. Για $M \rightarrow \infty$ το δείγμα $\{\phi_i\}$, ακολουθεί την ζητούμενη κατανομή πιθανότητας P_ϕ .

Κατά την μέθοδο Monte Carlo, κατασκευάζουμε το δείγμα μας από μία διαδικασία Markov, χρησιμοποιώντας δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας με τέτοιο τρόπο, ώστε να συγκλίνει γρήγορα η (4.5). Ένα άλλο σημείο που δίνουμε προσοχή είναι η επιλογή της *αρχικής κατάστασης* ϕ_1 . Σε περίπτωση που η αρχική κατάσταση της μαρκοβιανής αλυσίδας δεν είναι μια τυπική κατάσταση του συστήματος, τότε μέχρι το σύστημα να μεταβεί σε θερμοδυναμική ισορροπία χρειάζεται να περάσει πρώτα κάποιος χρόνος (thermalization time) για να πάρουμε ένα δείγμα αντιπροσωπευτικό της συγκεκριμένης θερμοκρασίας.

Απαραίτητη προϋπόθεση για να πετύχουμε το δείγμα να ακολουθεί την ζητούμενη κατανομή είναι η διαδικασία Markov να ικανοποιεί το κριτήριο της *εργοδικότητας*. Αυτό σημαίνει ότι από κάθε κατάσταση ϕ που επιλέγουμε, κάθε άλλη δυνατή κατάσταση είναι προσβάσιμη μέσω ενός πεπερασμένου αριθμού βημάτων. Αν αυτή η συνθήκη δεν ικανοποιείται, τότε υπάρχουν περιοχές του χώρου καταστάσεων που δεν θα μπορούμε να δειγματοληψήσουμε, κι έτσι δεν θα μπορούμε να πετύχουμε την ζητούμενη κατανομή.

4.3 Συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης

Για να βρίσκεται το σύστημα σε στατιστική ισορροπία στην κατανομή p_ϕ , πρέπει για τις πιθανότητες μετάβασης να ισχύει

$$\sum_k p_{\phi_j} P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = \sum_j p_{\phi_k} P(\phi_k \rightarrow \phi_j)$$

Το παραπάνω σημαίνει ότι ο ρυθμός με τον οποίο το σύστημα μεταβαίνει από μία κατάσταση ϕ_j στις υπόλοιπες καταστάσεις είναι ίσος με τον ρυθμό που μεταβαίνει από τις υπόλοιπες καταστάσεις στην κατάσταση ϕ_j . Μία ικανή, αλλά όχι και αναγκαία συνθήκη για να καταλήξει το σύστημα σε ισορροπία μετά από μια περίοδο εξισορρόπησης είναι η *συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης (detailed balance condition)*

$$p_{\phi_j} P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = p_{\phi_k} P(\phi_k \rightarrow \phi_j) \quad (4.6)$$

Για την κατανομή μας η συνθήκη (4.6) μας δίνει

$$\frac{P(\phi_j \rightarrow \phi_k)}{P(\phi_k \rightarrow \phi_j)} = \frac{p_{\phi_k}}{p_{\phi_j}} = e^{-(S[\phi_k] - S[\phi_j])} \quad (4.7)$$

μπορεί να δειχθεί ότι αν οι πιθανότητες μετάβασης ικανοποιούν την παραπάνω συνθήκη, η κατανομή πιθανότητας σε κατάσταση ισορροπίας του συστήματος θα είναι η κατανομή (4.1).

4.4 Αλγόριθμοι Markov Chain Monte Carlo

Με βάση τα προηγούμενα μια διαδικασία προσομοίωσης Monte Carlo μπορεί να συνοψιστεί στα επόμενα βήματα:

1. Κατασκευάζουμε το λογισμικό που υλοποιεί κατάλληλα επιλεγμένες πιθανότητες μετάβασης $P(\phi_j \rightarrow \phi_k)$, τέτοιες ώστε να ικανοποιούν την εξίσωση (4.7).
2. Επιλέγουμε κατάλληλη αρχική κατάσταση ϕ_1 .
3. Αφήνουμε το σύστημα να εξελιχθεί μέχρι να προσεγγίσουμε την κατανομή p_{ϕ_i} (4.1).
4. Συλλέγουμε δεδομένα για τις παρατηρήσιμες ποσότητες \mathcal{O} που μας ενδιαφέρουν και υπολογίζουμε τον εκτιμητή \mathcal{O}_M .
5. Σταματάμε μόλις πετύχουμε την επιθυμητή ακρίβεια.

Η εξίσωση (4.7) έχει πολλές λύσεις. Ποια από αυτές τις λύσεις θα επιλέξουμε, εξαρτάται από την αποδοτικότητά τους σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα.

Ενδεικτικά, τέτοιες επιλογές μπορούν να είναι:

$$P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = A \cdot e^{-\frac{1}{2}(S[\phi_k] - S[\phi_j])} \quad (4.8)$$

$$P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = A \cdot \frac{e^{-(S[\phi_k] - S[\phi_j])}}{1 + e^{-(S[\phi_k] - S[\phi_j])}} \quad (4.9)$$

$$P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = A \cdot \begin{cases} e^{-(S[\phi_k] - S[\phi_j])} & S[\phi_k] - S[\phi_j] > 0 \\ 1 & S[\phi_k] - S[\phi_j] \leq 0 \end{cases} \quad (4.10)$$

για καταστάσεις $\phi_j \neq \phi_k$ και

$$P(\phi_j \rightarrow \phi_j) = 1 - \sum_k P(\phi_j \rightarrow \phi_k) \quad (4.11)$$

ενώ $P(\phi_j \rightarrow \phi'_k) = 0$ για οποιαδήποτε άλλη κατάσταση ϕ'_k . Για να μπορεί να ισχύει η (4.11) οι σταθερές A , πρέπει να επιλεγούν έτσι ώστε

$$\sum_{k \neq j} P(\phi_j \rightarrow \phi_k) < 1 \quad (4.12)$$

η εξίσωση (4.12) μας δίνει αρκετή ελευθερία στο πως να επιλέξουμε τις πιθανότητες μετάβασης. Στις περισσότερες περιπτώσεις χωρίζουμε τις πιθανότητες μετάβασης σε δύο ανεξάρτητα μέρη

$$P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = g(\phi_j \rightarrow \phi_k) A(\phi_j \rightarrow \phi_k) \quad (4.13)$$

Η πιθανότητα $g(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ είναι η *πιθανότητα επιλογής* της κατάστασης ϕ_k όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση ϕ_j . Επομένως, το πρώτο βήμα του αλγορίθμου είναι να επιλέξει μία κατάσταση $k \neq j$ με πιθανότητα $g(\phi_j \rightarrow \phi_k)$. Το δεύτερο βήμα είναι να αποδεχθεί την μετάβαση στην επιλεγθείσα κατάσταση ϕ_k με πιθανότητα $A(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ ή διαφορετικά να απορρίψει την μετάβαση παραμένοντας στην κατάσταση ϕ_k . Οι πιθανότητες $A(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ ονομάζονται *λόγοι αποδοχής (acceptance ratios)*. Είναι σημαντικό σε έναν αλγόριθμο Markov Chain Monte Carlo να έχει σχετικά υψηλούς λόγους αποδοχής, όπως επίσης και κάθε νέα κατάσταση ϕ_k να είναι κατά το δυνατόν στατιστικά ανεξάρτητη από τη προηγούμενη κατάσταση ϕ_j .

Κεφάλαιο 5

Προσομοίωση μποζονικού αερίου σε χημικό δυναμικό

Στο κεφάλαιο αυτό θα χρησιμοποιήσουμε βασικές μεθόδους Monte Carlo για την προσομοίωση ενός στατιστικού συστήματος μποζονίων που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, σε σταθερή θερμοκρασία $T = 1/\beta$ και χημικό δυναμικό μ . Το σύστημα αυτό των σωματιδίων περιγράφεται από ένα μιγαδικό πεδίο ϕ με δυναμική που προσδιορίζεται από την λαγκρανζιανή (2.3) και το αντίστοιχο συναρτησιακό επιμερισμού (generating functional) της εξίσωσης (3.25). Ο αλγόριθμος που θα χρησιμοποιήσουμε είναι ένας από τους πιο διαδεδομένους αλγόριθμους για προσομοιώσεις Monte Carlo, αυτός του *Metropolis* [10]. Θα μελετήσουμε την εφαρμογή του αλγορίθμου μας, αναφερόμενοι στην *περίοδο θέρμανσης* του συστήματος και την επίδραση των συσχετίσεων ανάμεσα σε διαδοχικές διατάξεις του πεδίου που κατασκευάζονται κατά την προσομοίωση. Οι συσχετίσεις αυτές ποσοτικοποιούνται με την *συνάρτηση αυτοσυσχέτισης* και τη χρονική κλίμακα που ορίζεται από αυτήν, τον *χρόνο αυτοσυσχέτισης*. Το να ξεπεράσουμε το εμπόδιο της αυτοσυσχέτισης των διαδοχικών καταστάσεων θα είναι κρίσιμο σημείο για την μελέτη του συστήματός μας. Θα μελετήσουμε ακόμη τον καθορισμό των στατιστικών σφαλμάτων για να αξιολογήσουμε την ακρίβεια των μετρήσεών μας.

5.1 Το σύστημα μποζονικού αερίου και η μιγαδική δράση

Το σύστημα, που θέλουμε να προσομοιώσουμε είναι αυτό που έχει προκύψει από την ανάλυση στο κεφάλαιο 3 και το οποίο περιγράφεται από την Ευκλείδεια Λαγκρανζιανή (3.27) και την αντίστοιχη δράση (3.28), η οποία όπως προαναφέραμε

προκύπτει μιγαδική. Θεωρίες πεδίου με μιγαδική δράση είναι δύσκολο να προσεγγιστούν με τυπικές μεθόδους Monte Carlo. Αυτό συμβαίνει διότι η υπο ολοκλήρωση ποσότητα $e^{-S_E} = |e^{-S_E}| e^{i\phi} = e^{-(\Re\{S_E\} + i\Im\{S_E\})}$ στο ολοκλήρωμα δρόμου δεν είναι πραγματικός αριθμός, και δεν μπορεί να ερμηνευθεί ως πιθανότητα της αντίστοιχης διάταξης του πεδίου. Επομένως, οι υπολογιστικές μέθοδοι με δειγματοληψία κριτηρίου σημαντικότητας δεν μπορούν να εφαρμοστούν απευθείας. Το πρόβλημα αυτό είναι γνωστό και ως *πρόβλημα του προσήμου* (sign problem) [1, 12, 5, 3, 4].

Στην διεθνή βιβλιογραφία έχουν προταθεί διάφορες υπολογιστικές μέθοδοι για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος της αναμενόμενης τιμής (3.31), για την περίπτωση όπου η δράση είναι μιγαδικός αριθμός. Μερικές από αυτές είναι: *Επαναπροσδιορισμός των στατιστικών βαρών* (*re-weighting*) [16, 17, 12], Μιγαδική δυναμική Langevin (Complex Langevin dynamics) [1, 3], Ανάπτυγμα σε σειρές Taylor [7, 19], φανταστικό χημικό δυναμικό και αναλυτική συνέχεια [13, 14], χρήση κανονικής κατανομής [15, 22] και μέθοδοι πυκνότητας καταστάσεων [9, 8]. Γενικά, αυτές οι μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν μόνο σε περιορισμένες περιοχές του διαγράμματος των φάσεων (υψηλές θερμοκρασίες και μικρό χημικό δυναμικό), καθώς πάσχουν από *προβλήματα επικάλυψης* και περιορίζονται σε μικρούς όγκους πλέγματος.

5.1.1 Επαναπροσδιορισμός βαρών και το Phase Quenched model

Στην παρούσα εργασία θα μελετήσουμε το πρόβλημα με την τεχνική του επαναπροσδιορισμού βαρών (*Re-weighting*) χρησιμοποιώντας το λεγόμενο *Μοντέλο Σταθερής Φάσεως* (*Phase Quenched Model*). Μέσω του τελευταίου, θα προσπαθήσουμε να ανακατασκευάσουμε το πλήρες μοντέλο. Στο Phase Quenched μοντέλο για να μπορέσουμε να εφαρμόσουμε μεθόδους Monte Carlo και δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας, αγνοούμε το φανταστικό μέρος της δράσης S_E και κρατάμε μόνο το πραγματικό μέρος της $\Re\{S_E\}$. Κάνοντας αυτό, το φανταστικό τμήμα της δράσης μπορεί να μεταφερθεί ως μέρος της παρατηρήσιμης ποσότητας. Η (4.2) και (3.31) γίνεται

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \frac{\sum_{\phi} O_{\phi} \rho_{\phi}}{\sum_{\phi} \rho_{\phi}} = \frac{\sum_{\phi} O_{\phi} e^{-(\Re\{S_E[\phi]\} + i\Im\{S_E[\phi]\})}}{\sum_{\phi} e^{-(\Re\{S_E[\phi]\} + i\Im\{S_E[\phi]\})}} \\ &= \frac{\sum_{\phi} (O_{\phi} e^{-i\Im\{S_E[\phi]\}}) e^{-\Re\{S_E[\phi]\}}}{\sum_{\phi} e^{-(\Re\{S_E[\phi]\} + i\Im\{S_E[\phi]\})}} \end{aligned}$$

Κάνοντας δειγματοληψία από μία κατανομή M καταστάσεων, με πυκνότητα πι-

θανότητας

$$P_{\phi_i} = \frac{e^{-\Re\{S_E[\phi_i]\}}}{Z} \quad (5.1)$$

ο εκτιμητής (4.3) μιας παρατηρήσιμης ποσότητας \mathcal{O} γίνεται

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_{full} = \mathcal{O}_M &= \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\phi_i} P_{\phi_i}^{-1} e^{-S_E[\phi_i]}}{\sum_{i=1}^M P_{\phi_i}^{-1} e^{-S_E[\phi_i]}} = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O} e^{\Re\{S_E[\phi_i]\}} e^{-(\Re\{S_E[\phi_i]\} + i\Im\{S_E[\phi_i]\})}}{\sum_{i=1}^M e^{\Re\{S_E[\phi_i]\}} e^{-(\Re\{S_E[\phi_i]\} + i\Im\{S_E[\phi_i]\})}} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\phi_i} e^{-i\Im\{S_E[\phi_i]\}}}{\sum_{i=1}^M e^{-i\Im\{S_E[\phi_i]\}}} = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\phi_i} e^{i\theta_{\phi_i}}}{\sum_{i=1}^M e^{i\theta_{\phi_i}}} = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\phi_i} e^{i\theta_{\phi_i}}}{\sum_{i=1}^M e^{i\theta_{\phi_i}}} \\ &= \frac{\langle \mathcal{O} e^{i\theta} \rangle_{pq}}{\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}} \end{aligned} \quad (5.2)$$

όπου $\langle \cdot \rangle_{full}$ συμβολίζουμε την αναμενόμενη τιμή με βάση το αρχικό μιγαδικό βάρος, ενώ με $\langle \cdot \rangle_{pq}$ συμβολίζουμε τις αναμενόμενες τιμές με βάση το πραγματικό μόνο τμήμα του βάρους. Επομένως, η (5.2) μας δίνει έναν τρόπο να ανακατασκευάσουμε τις μετρήσιμες ποσότητες για το αρχικό μοντέλο, με βάση μια δειγματοληψία, η οποία έχει στηριχθεί στο Phase Quenched μοντέλο.

Η ποσότητα $e^{i\theta}$ στις παραπάνω παραστάσεις για μεγάλες τιμές του μ , αλλά και του όγκου του πλέγματος L^4 , είναι μία ισχυρά ταλαντούμενη συνάρτηση. Για τον λόγο αυτό, οι αναμενόμενες τιμές, τόσο στον αριθμητή, όσο και στον παρονομαστή της παράστασης (5.2) συγκλίνουν γρήγορα προς το μηδέν [12, 1, 3, 4, 5, 24, 2]. Το γεγονός αυτό δημιουργεί πρόβλημα στον αξιόπιστο υπολογισμό της παρατηρήσιμης ποσότητας [12, 11]. Η σοβαρότητα του προβλήματος μπορεί να ποσοτικοποιηθεί από την τιμή $\Re\{\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}\}$ στον παρονομαστή. Όσο γίνεται αρκετά μικρότερη της μονάδας, το πρόβλημα γίνεται σοβαρότερο. Επίσης, μπορεί να δειχθεί ότι

$$\langle e^{i\theta} \rangle_{pq} \propto \exp(-fV/T)$$

όπου V ο όγκος του συστήματος, T η θερμοκρασία, και f η πυκνότητα της ελεύθερης ενέργειας. Έτσι, η μέθοδος ανακατασκευής του πλήρους μοντέλου, για μεγαλύτερες τιμές του μ αλλά και για μεγαλύτερους όγκους πλέγματος V , απαιτεί εκθετικά μεγαλύτερο αριθμό υπολογισμών, ώστε να δώσει αξιόπιστο αποτέλεσμα.

Η παραπάνω συμπεριφορά συνδέεται με το λεγόμενο *πρόβλημα επικάλυψης* (Overlap Problem), όπου η συλλογή καταστάσεων του δείγματος δεν προέρχεται από την ζητούμενη κατανομή του μιγαδικού πίνακα πυκνότητας, αλλά από μία διαφορετική η οποία περιλαμβάνει μόνο το πραγματικό τμήμα και όχι το φανταστικό.

Παρά το πρόβλημα του προσήμου, υπάρχουν περιοχές για τις οποίες η μέθοδος λειτουργεί αποδοτικά και αποδίδει ουσιαστικά αποτελέσματα, μη προσβάσιμα με αναλυτικές μεθόδους. Στην συνέχεια, θα δούμε την εφαρμογή αυτής της μεθό-

δου και θα αξιολογήσουμε την χρήση της στο πρακτικό πρόβλημα του μποζονικού αερίου.

5.2 Προσομοίωση με τον αλγόριθμο Metropolis

Ας θεωρήσουμε ένα διακριτό τετραγωνικό πλέγμα στις τέσσερις διαστάσεις του χωρόχρονου, με L σημεία σε κάθε πλευρά του, έτσι ώστε ο αριθμός των κορυφών του πλέγματος να είναι $N_{lat} = L^d$ με $d = 4$. Επίσης, θεωρούμε τοροειδή τοπολογία στο πλέγμα με περιοδικές οριακές συνθήκες. Αυτό σημαίνει πως κάθε σημείο (κορυφή) του πλέγματος είναι ισότιμο με κάθε άλλο, και το κάθε ένα από αυτά έχει $2d = 8$ γειτονικά σημεία. Κάθε πλεγματική θέση καθορίζεται από τις αντίστοιχες συντεταγμένες της $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ στο πλέγμα με $n_i \in \mathbb{N}$. Σε κάθε σημείο του πλέγματος έχουμε έναν μιγαδικό βαθμό ελευθερίας του πεδίου $\phi_{\mathbf{x}} = \phi(a\mathbf{n}) = \phi_{\mathbf{x},1} + \phi_{\mathbf{x},2}i$, ο οποίος επί της ουσίας αντιστοιχεί σε δύο πραγματικούς βαθμούς ελευθερίας. Έτσι ορίζεται και η αντίστοιχη δράση του από την σχέση (3.33) ως ένα άθροισμα πάνω στο πλέγμα:

$$S_E = \sum_{\mathbf{x}} \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* e^{\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* e^{-\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right] \quad (5.3)$$

όπως και η αντίστοιχη συνάρτηση επιμερισμού

$$Z = \sum_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]}$$

Στόχος μας είναι να συλλέξουμε ένα δείγμα καταστάσεων με βάση την κατανομή του Phase Quenched μοντέλου (5.1). Αυτό θα το πετύχουμε κατασκευάζοντας μία διαδικασία Markov όπως εξηγήσαμε στην παράγραφο 4.2. Η δειγματοληψία θα γίνεται με κριτήριο σημαντικότητας 4.1.2, και οι αναμενόμενες τιμές θα υπολογίζονται από τον τύπο (4.5). Σε κάθε βήμα η επόμενη κατάσταση δίνεται από τον τύπο (4.7), όπου για ένα αρκούντως μεγάλο δείγμα, αυτό συγκλίνει προσεγγιστικά στην ζητούμενη κατανομή.

Υποθέτοντας ότι το σύστημα είναι στην κατάσταση j , η πιθανότητα να μεταβεί το σύστημα στην κατάσταση k δίνεται από την (4.13)

$$P(\phi_j \rightarrow \phi_k) = g(\phi_j \rightarrow \phi_k) A(\phi_j \rightarrow \phi_k)$$

όπου $g(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ η πιθανότητα επιλογής της ϕ_k ως υποψήφιας επόμενης κατάστασης, και $A(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ είναι ο λόγος αποδοχής της. Για το Phase Quenched μοντέλο η

συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης (4.7) της σειράς Markov γίνεται

$$\frac{P(\phi_j \rightarrow \phi_k)}{P(\phi_k \rightarrow \phi_j)} = \frac{p_k}{p_j} = e^{-\Re\{S_E[\phi_k] - S_E[\phi_j]\}} \quad (5.4)$$

όπου ϕ_j, ϕ_k οι διατάξεις του πεδίου στις καταστάσεις j, k αντίστοιχα. Αν ισχύει η συνθήκη (5.4) τότε το δείγμα μας θα συγκλίνει στην κατανομή $p_\phi = e^{-\Re\{S_E[\phi]\}}/Z$. Για να είναι οι πιθανότητες $P(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ αρκετά μεγάλες (μεγαλύτερες του 50%), ώστε το σύστημα να αλλάζει αρκετά συχνά κατάσταση, η μεταβολή στην δράση μεταξύ των δύο καταστάσεων θα πρέπει να είναι αρκούντως μικρή. Ένας τρόπος να το πετύχουμε αυτό, είναι να επιλέγουμε καταστάσεις στο πλέγμα, οι οποίες διαφέρουν στην τιμή του πεδίου για ένα μόνο σημείο του πλέγματος κατά

$$\phi_j(\mathbf{an}) - \phi_k(\mathbf{an}) = \Delta\phi$$

αρκετά μικρό. Αν το σημείο του πλέγματος που θα πραγματοποιήσουμε την αλλαγή επιλέγεται από μία ομοιόμορφη κατανομή στο πλέγμα, η πιθανότητα επιλογής της νέας κατάστασης ϕ_k είναι

$$g(\phi_j \rightarrow \phi_k) = g(\phi_k \rightarrow \phi_j)$$

και ο αλγόριθμος προκύπτει εργοδικός. Στη συνέχεια, για να ισχύει η (5.4) για τους λόγους αποδοχής $A(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ και $A(\phi_k \rightarrow \phi_j)$, πρέπει να ισχύει ότι

$$\frac{A(\phi_j \rightarrow \phi_k)}{A(\phi_k \rightarrow \phi_j)} = e^{-\Re\{S_E[\phi_k] - S_E[\phi_j]\}}$$

Με βάση τον αλγόριθμο του Metropolis μία καλή επιλογή των λόγων αποδοχής $A(\phi_j \rightarrow \phi_k)$ είναι η

$$A(\phi_j \rightarrow \phi_k) = \begin{cases} e^{-\Re\{S_E[\phi_k] - S_E[\phi_j]\}} & \Re\{S_E[\phi_k] - S_E[\phi_j]\} > 0 \\ 1 & \Re\{S_E[\phi_k] - S_E[\phi_j]\} \leq 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

Σύμφωνα με την (5.5) αν η επόμενη κατάσταση έχει χαμηλότερη δράση από την προηγούμενη, τότε η νέα κατάσταση γίνεται άμεσα αποδεκτή, διαφορετικά γίνεται αποδεκτή με πιθανότητα μικρότερη της μονάδας.

Ο υπολογισμός της διαφοράς

$$\Delta S_E = S_E[\phi_k] - S_E[\phi_j]$$

από την διαφορά $\Delta\phi = \phi_k(\mathbf{an}) - \phi_j(\mathbf{an})$, γίνεται από τον τύπο (5.3). Παρατηρούμε

ότι η δράση υπολογίζεται ως άθροισμα της ποσότητας

$$S_{\mathbf{x}} = \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* e^{\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* e^{-\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right]$$

επί όλων των πλεγματικών θέσεων, όπου το διάνυσμα $\hat{\nu}$ συμβολίζει μετατόπιση κατά μία θέση προς την θετική διεύθυνση ν με $\nu = (1, 2, 3, 4)$, τα οποία αντιστοιχούν στις διαστάσεις x_1, x_2, x_3, τ του Ευκλείδειου χώρου. Με δεδομένο ότι η μεταβολή του πεδίου από την κατάσταση ϕ_j στην κατάσταση ϕ_k είναι μόνο στην θέση $\mathbf{x}_\delta = an_\delta$, και είναι ίση με $\Delta\phi = \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j$, αυτή θα επηρεάσει μόνο τις ποσότητες $S_{\mathbf{x}_\delta}$ και $S_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}$.

Έτσι οι ποσότητες αυτές θα μεταβληθούν ως εξής:

$$\begin{aligned} \Delta S_{\mathbf{x}_\delta} &= S_{\mathbf{x}_\delta}^k - S_{\mathbf{x}_\delta}^j \\ &= \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k + \lambda (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k)^2 - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}_\delta+\hat{\nu}}^{k*} e^{\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k + \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} e^{-\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta+\hat{\nu}}^k) \right] \\ &\quad - \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j + \lambda (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j)^2 - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}_\delta+\hat{\nu}}^{j*} e^{\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j + \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} e^{-\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta+\hat{\nu}}^j) \right] \\ &= (8 + m^2) (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j) + \lambda \left[(\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k)^2 - (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j)^2 \right] \\ &\quad - \sum_{\nu=1}^4 \left[\phi_{\mathbf{x}_\delta+\hat{\nu}}^{k*} e^{\mu\delta_{\nu,4}} (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j) + (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*}) e^{-\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta+\hat{\nu}}^k \right] \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \Delta S_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}} &= S_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^k - S_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^j \\ &= \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^k + \lambda (\phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^k)^2 \right. \\ &\quad \left. + - \sum_{\xi=1}^4 \left(\phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^{k*} e^{\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^k + \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{k*} e^{-\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^k \right) \right] \\ &\quad - \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^j + \lambda (\phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^j)^2 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\xi=1}^4 \left(\phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^{j*} e^{\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^j + \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{j*} e^{-\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^j \right) \right] \\ &= - \sum_{\xi=1}^4 \left[\left(\phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^{k*} - \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^{j*} \right) e^{\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^j \right. \\ &\quad \left. + \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}}^{j*} e^{-\mu\delta_{\xi,4}} \left(\phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta-\hat{\nu}+\hat{\xi}}^j \right) \right] \end{aligned}$$

όπου για $\hat{\nu} \neq \hat{\xi}$

$$\left(\phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu} + \hat{\xi}}^{k*} - \phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu} + \hat{\xi}}^{j*} \right) = \left(\phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu} + \hat{\xi}}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu} + \hat{\xi}}^j \right) = 0$$

Επομένως, η $\Delta S_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}}$ τελικά γίνεται

$$\Delta S_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}} = - \left[(\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*}) e^{\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}}^j + \phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}}^{j*} e^{-\mu\delta_{\xi,4}} (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j) \right] \quad (5.7)$$

Με βάση τις (5.3), (5.6), (5.7), η συνολική διαφορά της δράσης S_E θα είναι

$$\begin{aligned} \Delta S_E &= S_E^k - S_E^j \\ &= \Delta S_{\mathbf{x}_\delta} + \sum_{\nu=1}^4 \Delta S_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}} \\ &= (8 + m^2) (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j) + \lambda \left[(\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^k)^2 - (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*} \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j)^2 \right] \\ &\quad - \sum_{\nu=1}^4 \left[\phi_{\mathbf{x}_\delta + \hat{\nu}}^{k*} e^{\mu\delta_{\nu,4}} (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j) + (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*}) e^{-\mu\delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta + \hat{\nu}}^k \right] \\ &\quad - \sum_{\nu=1}^4 \left[(\phi_{\mathbf{x}_\delta}^{k*} - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^{j*}) e^{\mu\delta_{\xi,4}} \phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}}^j + \phi_{\mathbf{x}_\delta - \hat{\nu}}^{j*} e^{-\mu\delta_{\xi,4}} (\phi_{\mathbf{x}_\delta}^k - \phi_{\mathbf{x}_\delta}^j) \right] \quad (5.8) \end{aligned}$$

Έχοντας υπολογίσει την διαφορά της δράσης ανάμεσα σε διαδοχικές καταστάσεις, μπορούμε πλέον εύκολα να εφαρμόσουμε τον αλγόριθμο του Metropolis, ο οποίος με βάση τα παραπάνω συνοψίζεται ως εξής:

1. Αρχικοποιούμε το πεδίο μας στο πλέγμα σε μια αρχική κατάσταση ϕ_1 .
2. Επιλέγουμε ένα τυχαίο σημείο \mathbf{x}_δ του πλέγματος και διαφοροποιούμε το πεδίο κατά μία ποσότητα $\Delta\phi_{\mathbf{x}_\delta}$.
3. Υπολογίζουμε την διαφορά ΔS_E που προκύπτει στη δράση από τον τύπο (5.8).
4. Επιλέγουμε έναν τυχαίο αριθμό p από ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $[0, 1]$. Αν ισχύει $e^{-\mathfrak{R}\{\Delta S_E\}} < p$, τότε αποδεχόμαστε την νέα κατάσταση στο δείγμα και επιστρέφουμε στο βήμα 2.

Ακολουθώντας τα προαναφερθέντα βήματα κατασκευάζουμε το δείγμα καταστάσεων, πάνω στο οποίο μπορούμε να κάνουμε μετρήσεις σε παρατηρήσιμες ποσότητες του πεδίου στο πλέγμα και να εκτιμήσουμε την αναμενόμενη τιμή τους με βάση τον τύπο (4.5). Για να έχουμε μια χρονική εκτίμηση των επαναλήψεων του αλγορίθμου, είναι χρήσιμο να ορίσουμε ως “πέρασμα” (sweep) την πραγματοποίηση N αριθμού επαναλήψεων του αλγορίθμου μας (όσα δηλαδή είναι τα σημεία του πλέγματος).

5.2.1 Παρατηρήσιμες ποσότητες

Κατά την δική μας προσομοίωση οι ποσότητες, οι οποίες μας ενδιαφέρει να μετρήσουμε είναι το μέσο πλάτος του μιγαδικού πεδίου στο πλέγμα $\langle |\phi|^2 \rangle$ και το πραγματικό μέρος της μέσης πυκνότητας σωματιδίων $\Re \{ \langle n \rangle_{pq} \}$ για το Phase Quenched μοντέλο, και αντίστοιχα το $\Re \{ \langle n \rangle_{full} \}$ για το ανακατασκευασμένο πλήρες μοντέλο.

Με βάση το διακριτό σύστημα ο εκτιμώμενος συνολικός αριθμός σωματιδίων στο πλέγμα προκύπτει από την συνάρτηση επιμερισμού Z ως

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \mu} = \frac{1}{\left(\sum_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]} \right)} \frac{\partial \left(\sum_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]} \right)}{\partial \mu} \\ &= \frac{\sum_{\phi_i} \frac{\partial e^{-S_E[\phi_i]}}{\partial \mu}}{\sum_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]}} = - \frac{\sum_{\phi_i} \left(\frac{\partial S_E[\phi_i]}{\partial \mu} \right) e^{-S_E[\phi_i]}}{\sum_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]}} = \frac{\sum_{\phi_i} N_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]}}{\sum_{\phi_i} e^{-S_E[\phi_i]}} \end{aligned}$$

Όπου $N_{\phi_i} = -\frac{\partial S_E[\phi_i]}{\partial \mu}$. Η αντίστοιχη μέση πυκνότητα σωματιδίων είναι¹

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\Omega} \langle N \rangle$$

Επομένως, για κάθε κατάσταση ϕ_i της μαρκοβιανής σειράς, η μετρήσιμη ποσότητα στο πλέγμα που μας ενδιαφέρει είναι η $n_{\phi_i} = \frac{N_{\phi_i}}{\Omega}$, η οποία από την (5.3) υπολογίζεται ως

$$\begin{aligned} n_{\phi_i} &= -\frac{1}{N_{lat}} \frac{\partial S_E[\phi_i]}{\partial \mu} \\ &= -\frac{1}{N_{lat}} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\mathbf{x}} \left[(8 + m^2) \phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}} + \lambda (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}})^2 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* e^{\mu \delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}} + \phi_{\mathbf{x}}^* e^{-\mu \delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right] \\ &= -\frac{1}{N_{lat}} \sum_{\mathbf{x}} \left[- \sum_{\nu=1}^4 (\phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}^* \delta_{\nu,4} e^{\mu \delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}}^* \delta_{\nu,4} e^{-\mu \delta_{\nu,4}} \phi_{\mathbf{x}+\hat{\nu}}) \right] \\ &= \frac{1}{N_{lat}} \sum_{\mathbf{x}} \left[(\phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}^* e^{\mu} \phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{x}}^* e^{-\mu} \phi_{\mathbf{x}+\hat{4}}) \right] \end{aligned}$$

και για την οποία ισχύει $\langle n \rangle \approx \langle n_{\phi_i} \rangle$

¹Όπου Ω είναι ο όγκος του πλέγματος. Για $a = 1$ το Ω είναι ίσο με το σύνολο των πλεγματικών σημείων N_{lat} .

Αντίστοιχα το μέσο πλάτος του μιγαδικού πεδίου στο πλέγμα υπολογίζεται ως

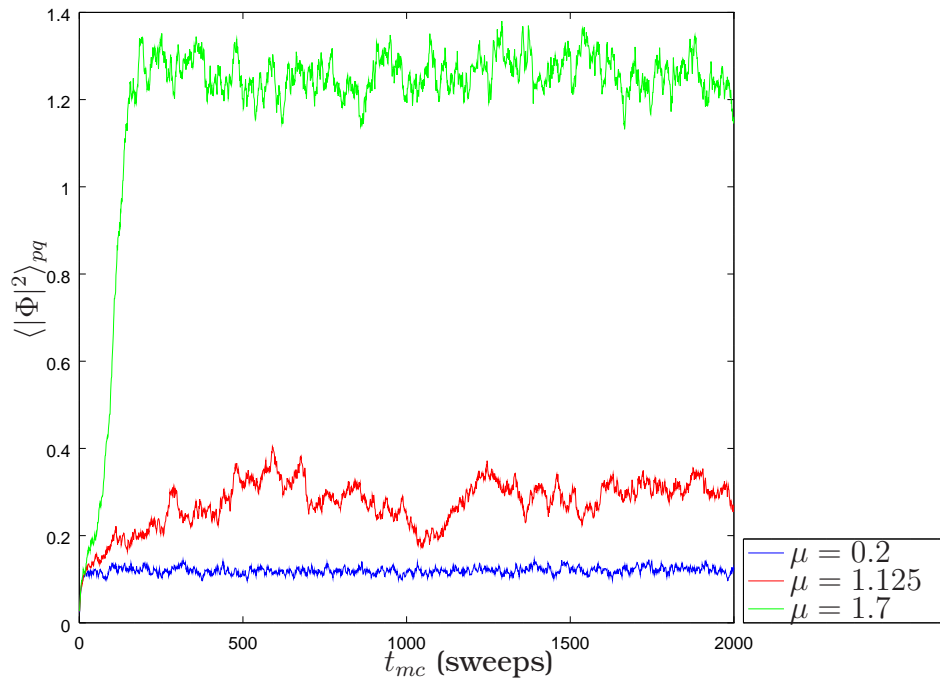
$$\langle |\phi|^2 \rangle = -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial \ln Z}{\partial m^2} \approx \left\langle \frac{1}{N_{lat}} \sum_{\mathbf{x}} (\phi_{\mathbf{x}}^* \phi_{\mathbf{x}}) \right\rangle$$

5.2.2 Περίοδος θέρμανσης

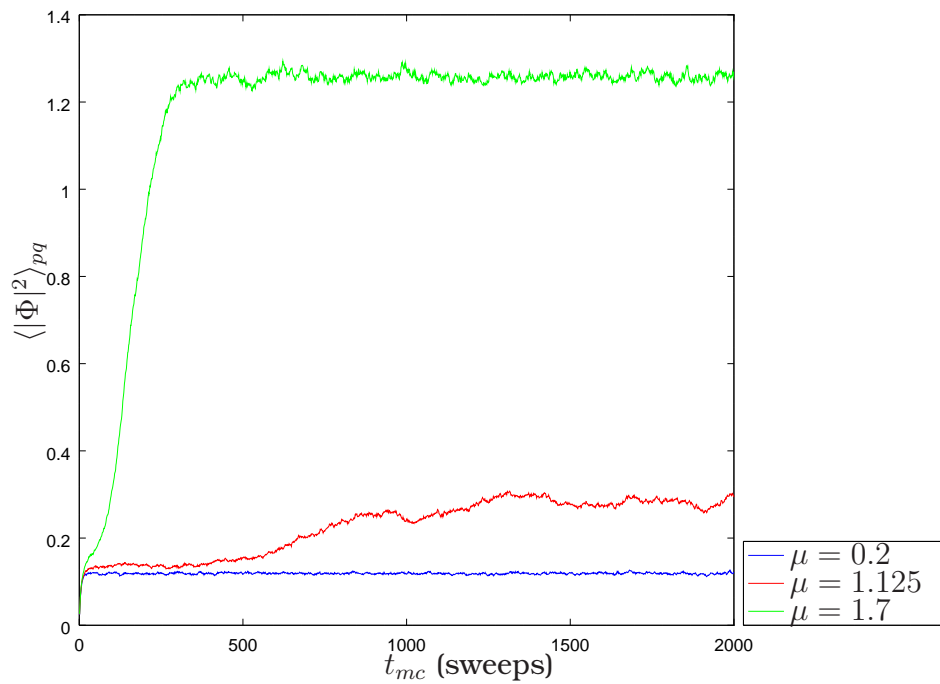
Στην προσομοίωση μας θα εκκινήσουμε το σύστημά μας από αρχική συνθήκη “ψύχους”. Αυτό σημαίνει ότι η αρχική τιμή του πεδίου ϕ στο πλέγμα είναι παντού ίση με το μηδέν. Επομένως, το σύστημα θα περάσει αρχικά μια περίοδο θέρμανσης μέχρις ότου σταθεροποιηθεί γύρω από την περιοχή των τυπικών του καταστάσεων. Για να μπορέσουμε να εκτιμήσουμε με αξιοπιστία τις παρατηρήσιμες ποσότητες που επιθυμούμε, πρέπει να έχουμε βεβαιωθεί ότι το σύστημά μας βρίσκεται σε αυτήν την περιοχή ισορροπίας. Για κάθε μετρήσιμη ποσότητα, ο χρόνος θέρμανσης μπορεί να είναι διαφορετικός. Κατά κανόνα οι τοπικές ποσότητες έρχονται σε ισορροπία γρηγορότερα από ότι οι μη-τοπικές ποσότητες.

Με βάση τα παραπάνω, έχει σημασία να αναγνωρίσουμε πότε το σύστημα έχει περιέλθει σε ισορροπία, και να αγνοήσουμε όλες τις μετρήσεις πριν από τον χρόνο αυτό. Ένας απλός τρόπος να το πετύχουμε αυτό είναι να υπολογίσουμε τις παρατηρήσιμες ποσότητες απορρίπτοντας έναν συνεχώς αυξανόμενο αριθμό από αρχικές μετρήσεις. Όταν η μετρήσιμη ποσότητα αρχίσει να συγκλίνει, σημαίνει ότι έχουμε απορρίψει επιτυχώς τα δείγματα της περιόδου θέρμανσης, τα οποία μας οδηγούσαν σε στατιστικές αποκλίσεις.

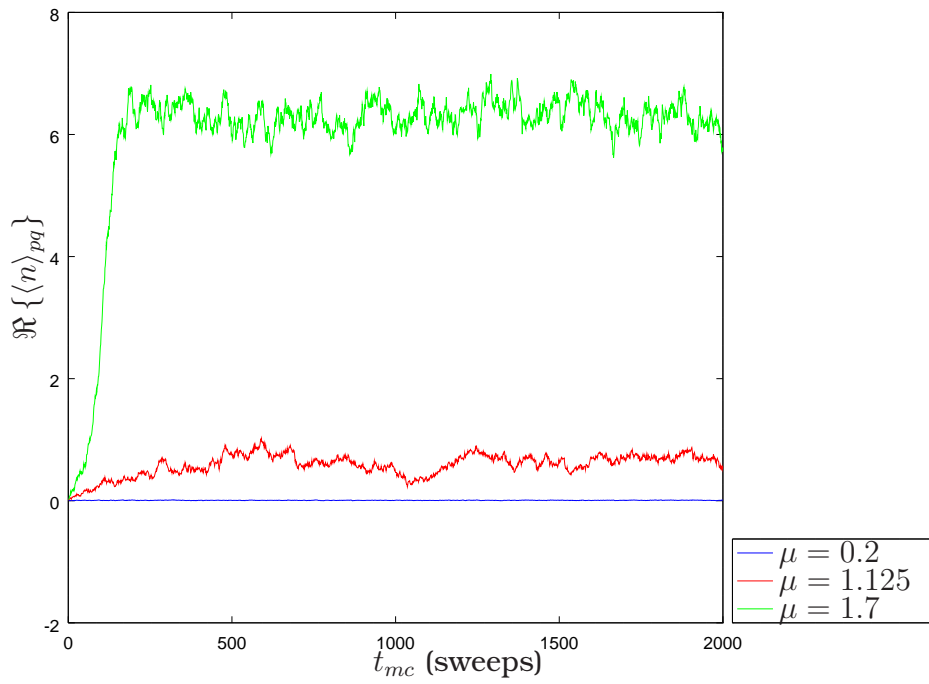
Για το σύστημά μας θέτοντας $m = \lambda = 1$ πραγματοποιήσαμε αυτήν την διαδικασία τόσο για μετρήσεις του $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ όσο και για μετρήσεις του $\langle n \rangle_{pq}$ για διαφορετικές τιμές του χημικού δυναμικού, μ . Στις εικόνες 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, παρουσιάζονται κάποια ενδεικτικά αποτελέσματα. Όπως βλέπουμε για το $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ μετά από μια μικρή αρχική περίοδο θέρμανσης οι μετρήσεις σταθεροποιούνται γύρω από κάποιες περιοχές στα όρια του στατιστικού σφάλματος. Για τις τρεις τιμές χημικού δυναμικού $\mu = (0.2, 1.25, 1.7)$, τη μεγαλύτερη περίοδο θέρμανσης έχει η ενδιάμεση τιμή $\mu = 1.25$. Στην περίπτωση του πλέγματος με $L = 8$, παρατηρούμε ότι η περίοδος θέρμανσης είναι αρκετά μεγαλύτερη. Παρόμοια προκύπτουν τα συμπεράσματα και για τον μέσο αριθμό των σωματιδίων $\langle n \rangle_{pq}$. Πρακτικά, καταλήγουμε στο ότι μετά από 2000 “περάσματα” Monte Carlo το σύστημα μπορεί να θεωρηθεί ότι βρίσκεται στην περιοχή τυπικών καταστάσεων του για συγκεκριμένη θερμοκρασία και χημικό δυναμικό.



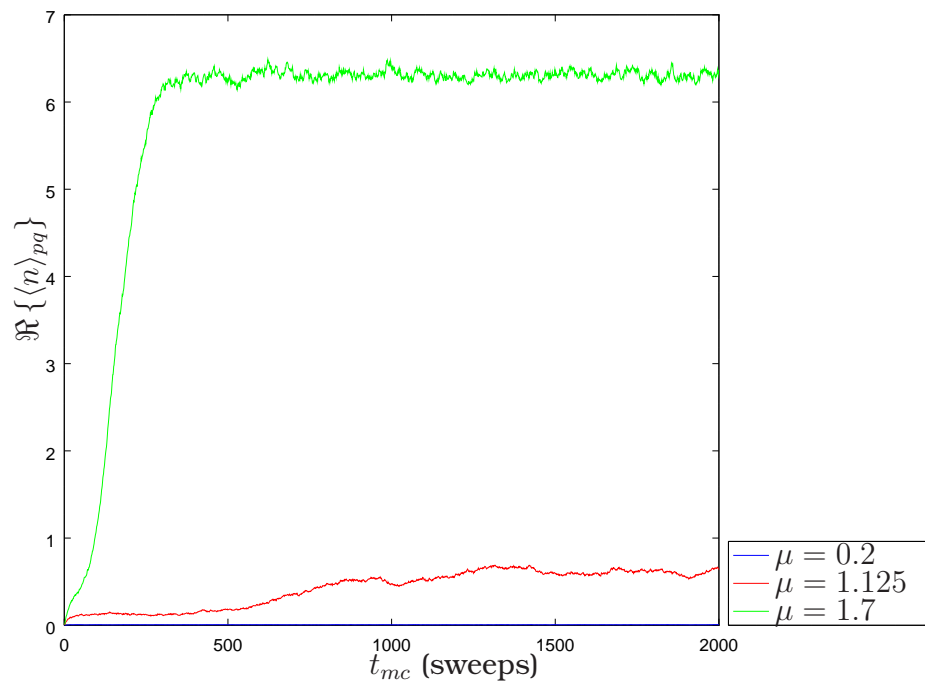
Εικόνα 5.1: Μέσο πλάτος του πεδίου $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 4$.



Εικόνα 5.2: Μέσο πλάτος του πεδίου $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 8$.



Εικόνα 5.3: Μέσος αριθμός σωματιδίων $\langle n \rangle_{pq}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 4$.



Εικόνα 5.4: Μέσος αριθμός σωματιδίων $\langle n \rangle_{pq}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 8$.

5.2.3 Αυτοσυσχετίσεις και χρόνοι αυτοσυσχέτισης

Με βάση όσα εξηγήσαμε για τους αλγόριθμους Markov Chain Monte Carlo, για να κατασκευάσουμε ένα σύνολο ανεξάρτητων μετρήσεων οι καταστάσεις, οι οποίες θα εισάγουμε στο δείγμα μας θα πρέπει να είναι στατιστικά ανεξάρτητες. Κάτι τέτοιο όμως, προφανώς στον αλγόριθμο Metropolis, δεν ισχύει. Κάθε κατάσταση του πλέγματος προκύπτει από την προηγούμενη με διαφοροποίηση μόνο σε ένα σημείο. Θα μπορούσαμε να περιμένουμε στην καλύτερη περίπτωση να παίρνουμε μία ανεξάρτητη μέτρηση από την προηγούμενη μετά από N επαναλήψεις του αλγορίθμου (ένα sweep). Παρ' όλα αυτά, για κρίσιμες περιοχές του χώρου καταστάσεων, όπου υπάρχουν μεταβάσεις φάσης, οι συσχετίσεις ανάμεσα σε καταστάσεις μπορούν να παραμένουν ισχυρές ακόμη και μετά από πολλά Monte Carlo sweeps.

Για να ποσοτικοποιήσουμε το φαινόμενο των συσχετίσεων στις μετρήσεις χρησιμοποιούμε την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης. Έστω μία ποσότητα προς μέτρηση \mathcal{O} , και η τιμή της $\mathcal{O}(t)$, μετά από "χρόνο"² Monte Carlo t . Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $\rho_{\mathcal{O}}(t)$, της ποσότητας \mathcal{O} , ορίζεται ως

$$\rho_{\mathcal{O}}(t) = \frac{\langle (\mathcal{O}(t') - \langle \mathcal{O} \rangle) (\mathcal{O}(t' + t) - \langle \mathcal{O} \rangle) \rangle_{t'}}{\langle (\mathcal{O} - \langle \mathcal{O} \rangle)^2 \rangle} \quad (5.9)$$

όπου $\langle \dots \rangle_{t'}$, συμβολίζει την μέση τιμή στο δείγμα για χρόνο $t' < t_{max} - t$. Η κανονικοποίηση είναι τέτοια ώστε $\rho_{\mathcal{O}}(0) = 1$. Όταν η τιμή $\mathcal{O}(t)$ είναι ισχυρά συσχετισμένη με την αρχική της για $t = 0$, τότε η $\rho_{\mathcal{O}}(t)$ θα έχει θετική τιμή. Όταν η συσχέτιση είναι χαμηλή, τότε και η $\rho_{\mathcal{O}}(t)$ θα είναι κοντά στο μηδέν. Η συνάρτηση $\rho_{\mathcal{O}}(t)$ συγκλίνει ασυμπτωτικά προς το μηδέν με εκθετικό ρυθμό

$$\rho_{\mathcal{O}}(t) \sim e^{-t/\tau_{\mathcal{O}}} \quad (5.10)$$

όπου $\tau_{\mathcal{O}}$ είναι η χρονική κλίμακα αποσυσχέτισης των μετρήσεων του \mathcal{O} και ονομάζεται *χρόνος αυτοσυσχέτισης*. Με την πάροδο χρόνου $2\tau_{\mathcal{O}}$ η $\rho_{\mathcal{O}}(t)$ θα έχει μειωθεί στο $e^{-2} \approx 14\%$ της αρχικής τιμής. Τότε πρακτικά μπορούμε να θεωρήσουμε την μέτρηση του \mathcal{O} ως ανεξάρτητη. Επομένως, μετά από t_{max} μετρήσεις, ο αριθμός των πρακτικά ανεξάρτητων από αυτές είναι

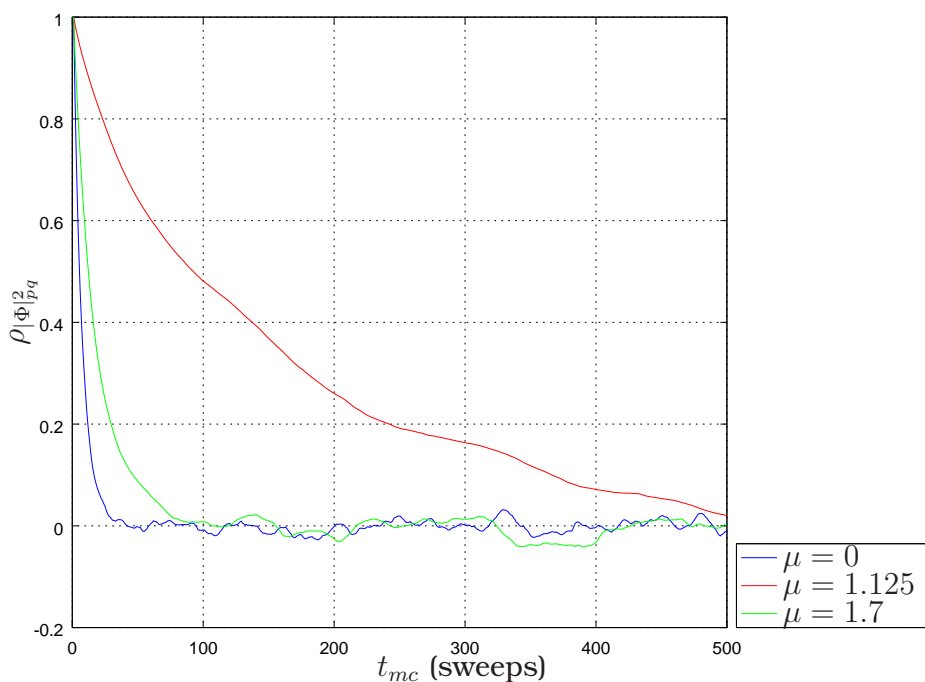
$$n_{\mathcal{O}} = \frac{t_{max}}{2\tau_{\mathcal{O}}}$$

Αν το υπολογιστικό κόστος της κάθε μέτρησης είναι σημαντικό, τότε πρέπει να μετράμε με περίοδο δειγματοληψίας της τάξης του $\tau_{\mathcal{O}}$. Διαφορετικά, μπορούμε

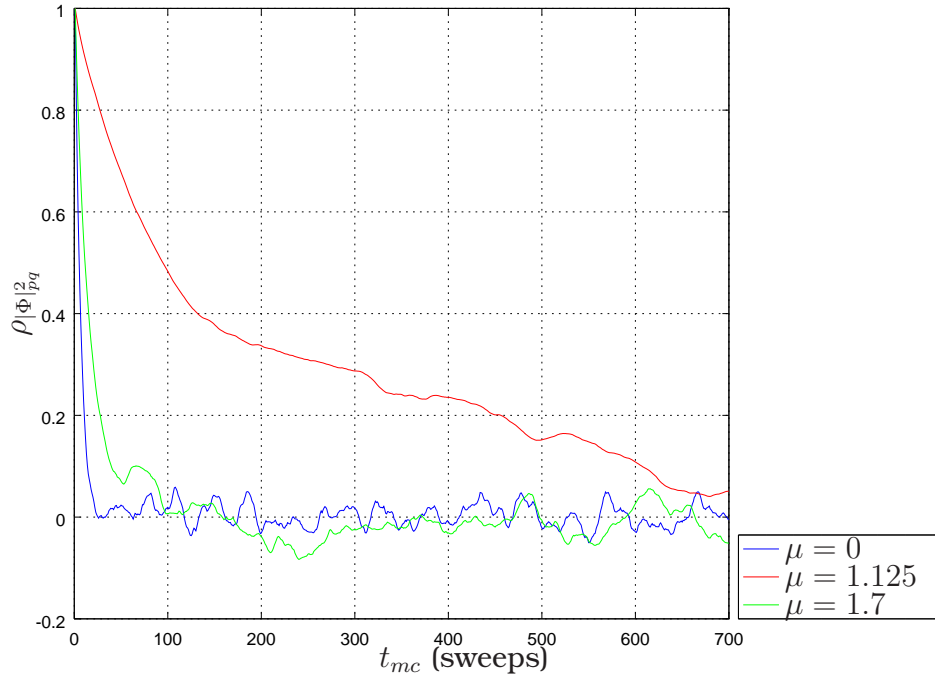
²Ο χρόνος Monte Carlo t μπορεί να μετριέται σε sweeps, αλλά και πολλαπλάσια ή υποπολλαπλάσια αυτών.

να μετράμε και πιο συχνά, καθώς και οι ενδιάμεσες τιμές παρέχουν στατιστική πληροφορία ακόμη και αν οι διαδοχικές καταστάσεις είναι περισσότερο στατιστικά συσχετισμένες. Οι χρόνοι αυτοσυσχέτισης δεν αποτελούν σημαντικό πρόβλημα εκτός της κρίσιμης περιοχής του χώρου καταστάσεων, όπου έχουμε μεταβάσεις φάσης.

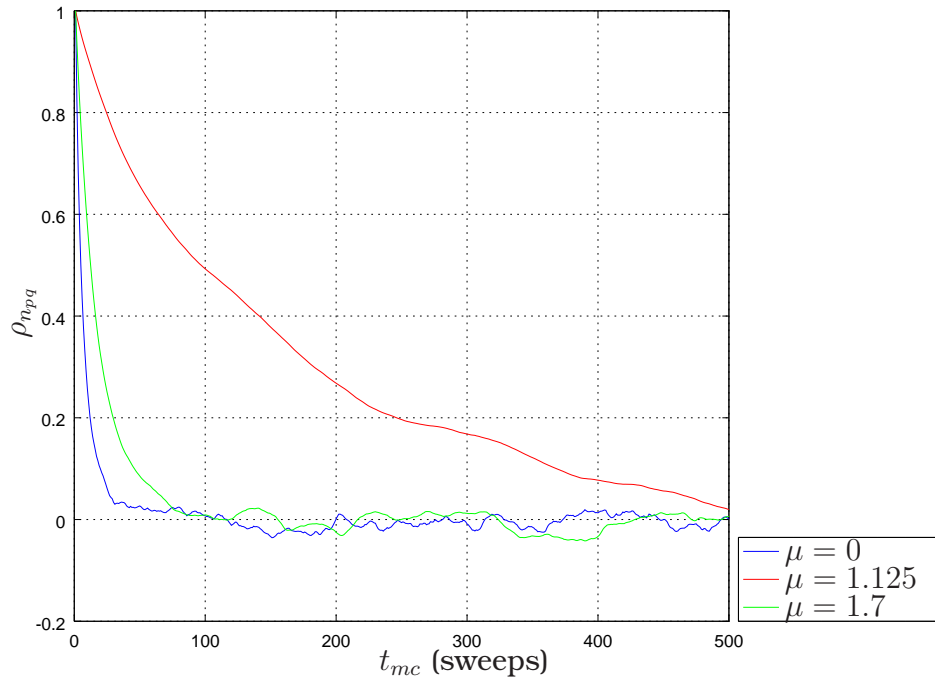
Για το σύστημά μας υπολογίσαμε τις συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης (5.9) για τα μεγέθη $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ και $\langle n \rangle_{pq}$ για ένα στατιστικό δείγμα $t_{max} = 10000$ MC sweeps. Κάποια ενδεικτικά αποτελέσματα για δύο τιμές χημικού δυναμικού μ , φαίνονται στις εικόνες 5.5, 5.6, 5.7, 5.8. Από τα διαγράμματα, παρατηρούμε ότι ο μέγιστος χρόνος αυτοσυσχέτισης των μετρήσεών μας, προκύπτει $\tau_{\mathcal{O}} \approx 250$ sweeps. Αυτό σημαίνει ότι παίρνοντας δείγματα τα οποία έχουν ληφθεί με διαφορά χρόνου μεγαλύτερη των 500 sweeps, αυτά μπορούν να θεωρηθούν ως στατιστικά ανεξάρτητα. Εξετάζοντας για τις διαφορετικές τιμές του μ βλέπουμε ότι για τις μεσαίες τιμές του $\mu \approx 1$ έχουμε σχετικά μεγαλύτερους χρόνους αυτοσυσχέτισης. Τέλος, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι για το μικρότερο πλέγμα με πλευρά $L = 4$, η $\rho_{\mathcal{O}}(t)$ προσεγγίζει στατιστικά καλύτερα την εκθετική μείωση (5.10) από ότι για προσομοίωση με πλέγμα $L = 8$.



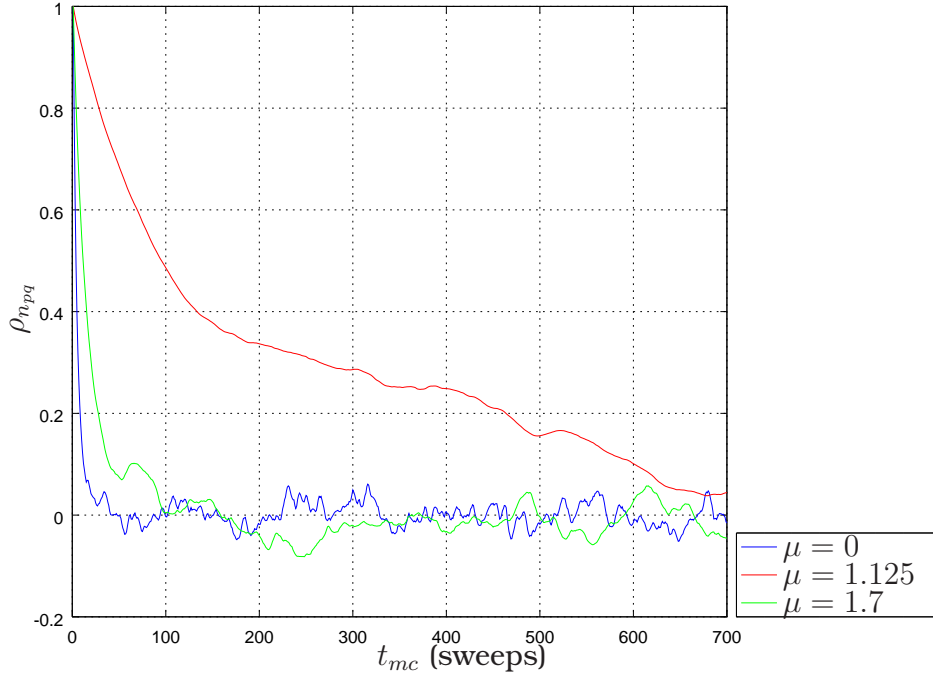
Εικόνα 5.5: Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ποσότητας $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 4$.



Εικόνα 5.6: Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ποσότητας $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 8$.



Εικόνα 5.7: Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ποσότητας $\Re \{ \langle n \rangle_{pq} \}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 4$.



Εικόνα 5.8: Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ποσότητας $\Re \{ \langle n \rangle_{pq} \}$ για διαδοχικά Metropolis sweeps σε πλέγμα με $L = 8$.

5.2.4 Στατιστικά σφάλματα

Είναι εφικτό να εκτιμήσουμε την αναμενόμενη τιμή μιας παρατηρήσιμης ποσότητας υπολογίζοντας τον μέσο όρο της σε ένα στατιστικό δείγμα μετρήσεων. Αυτό όμως δεν μας δίνει κάποια πληροφορία για την ποιότητα της εκτίμησής μας αυτής. Για να ποσοτικοποιήσουμε την ποιότητα της εκτίμησής μας υπολογίζουμε τα εκτιμώμενα σφάλματα. Για να το πράξουμε αυτό κάνουμε την παραδοχή ότι η στατιστική κατανομή των σφαλμάτων μέτρησης σε συνθήκη θερμοδυναμικής ισορροπίας είναι Γκαουσιανή. Η παραδοχή αυτή είναι μια αρκετά καλή προσέγγιση αν θεωρήσουμε τις μετρήσεις στατιστικά ανεξάρτητες. Επομένως, το στατιστικό σφάλμα καθορίζεται από την διακύμανση των τιμών της παρατηρήσιμης ποσότητας γύρω από την μέση τιμή της. Τα στατιστικά σφάλματα μπορούν να εξαλειφθούν, καθώς μειώνονται αναλογικά με το αντίστροφο της ρίζας του μεγέθους του δείγματος μετρήσεων.

Με βάση την θεωρία για ένα σύνολο n μετρήσεων $\mathcal{O}_0, \mathcal{O}_1, \dots, \mathcal{O}_{n-1}$ η εκτιμώμενη μέση τιμή είναι

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{O}_i \quad (5.11)$$

ενώ τα αντίστοιχα σφάλματα προκύπτουν ως

$$(\delta\mathcal{O})^2 \equiv \frac{1}{n-1} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (\mathcal{O}_i - \langle \mathcal{O} \rangle)^2 \right\} = \frac{1}{n-1} (\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2) \quad (5.12)$$

Με δεδομένο ότι στον αλγόριθμο Monte Carlo λόγω αυτοσυσχέτισης, οι στατιστικά ανεξάρτητες μετρήσεις είναι $n_{\mathcal{O}} = n / (2\tau_{\mathcal{O}})$ μπορεί να δειχθεί ότι η (5.12) γίνεται

$$(\delta\mathcal{O})^2 \equiv \frac{1 + 2\tau_{\mathcal{O}}}{n-1} (\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2) \quad (5.13)$$

όπου για $\tau_{\mathcal{O}} \gg 1$ η (5.13) γίνεται

$$(\delta\mathcal{O})^2 \approx \frac{1}{n_{\mathcal{O}} - 1} (\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2) \quad (5.14)$$

Με δεδομένο ότι είναι πρακτικά δύσκολο για κάθε σειρά μετρήσεων να υπολογίσουμε τον χρόνο αυτοσυσχέτισης $\tau_{\mathcal{O}}$, για τον υπολογισμό των σφαλμάτων μέτρησης θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο Jackknife. Σε μία απλή binning μέθοδο χωρίζουμε το δείγμα των n μετρήσεών μας σε n_b τμήματα (bins). Κάθε bin μπορεί να θεωρηθεί ως μία ανεξάρτητη μέτρηση, αν το κάθε bin έχει $b = (n/n_b)$ αριθμό μετρήσεων $\gg \tau_{\mathcal{O}}$. Αν \mathcal{O}_i^b με $i = 0, \dots, n_b - 1$ είναι ο μέσος όρος των μετρήσεων του κάθε bin i , τότε το σφάλμα υπολογίζεται ως

$$(\delta\mathcal{O})^2 = \frac{1}{n_b - 1} \left\{ \frac{1}{n_b} \sum_{i=0}^{n_b-1} (\mathcal{O}_i^b - \langle \mathcal{O}^b \rangle)^2 \right\} \quad (5.15)$$

Αν το μέγεθος του κάθε bin είναι μικρό και τα δείγματα δεν είναι ανεξάρτητα, τότε το σφάλμα υποτιμάται κατά έναν παράγοντα $2\tau_{\mathcal{O}} / (n_b - 1)$. Τα bin είναι στατιστικά ανεξάρτητα αν $b \approx 2\tau_{\mathcal{O}}$. Αν δεν γνωρίζουμε τον χρόνο αυτοσυσχέτισης, τότε μπορούμε να εκτιμήσουμε το μέγεθος του bin αυξάνοντάς το σταδιακά. Όταν το εκτιμώμενο σφάλμα αρχίσει να σταθεροποιείται, τότε εκεί βρίσκεται το πραγματικό σφάλμα.

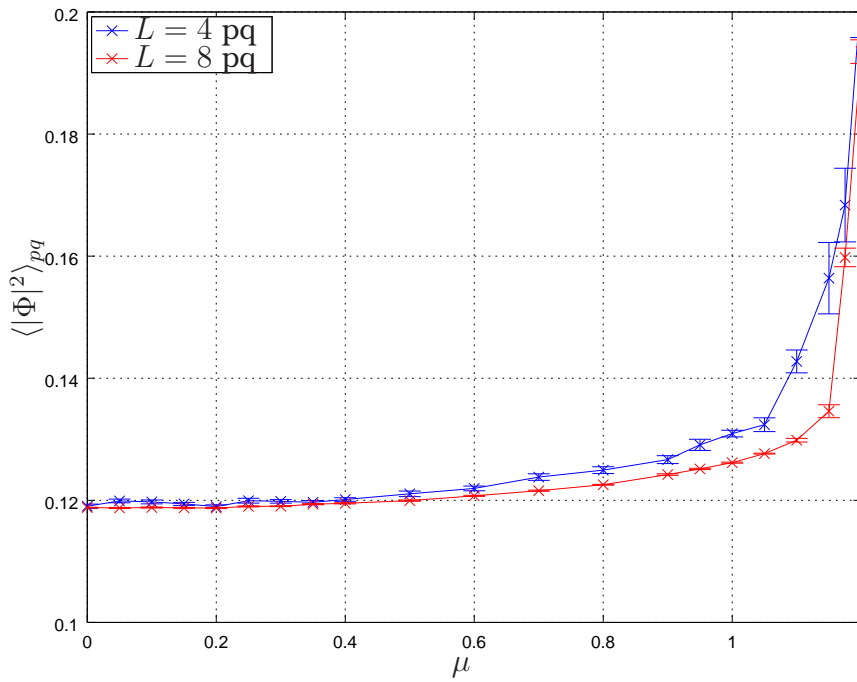
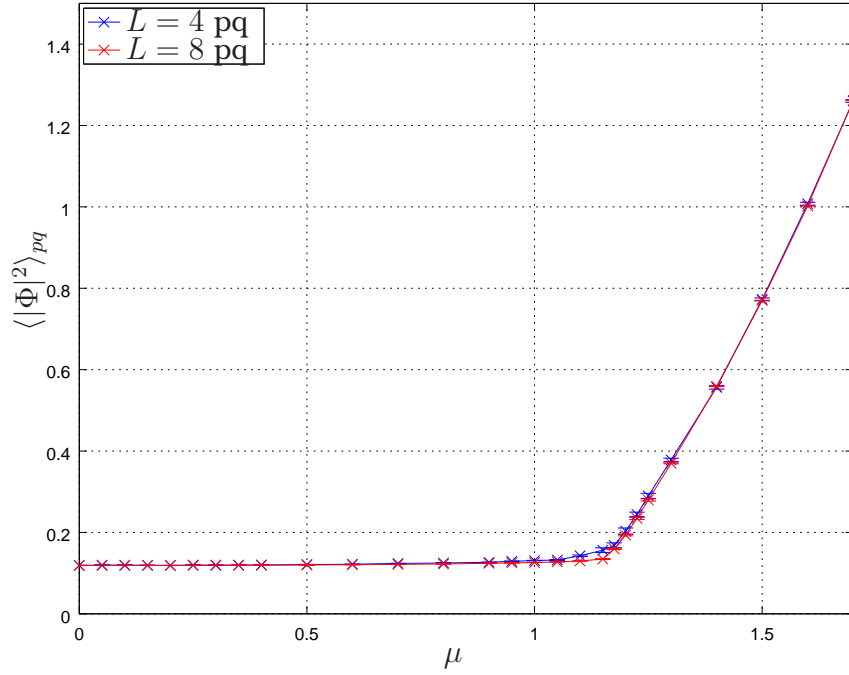
Η μέθοδος jackknife είναι μία τροποποίηση της απλής binning μεθόδου. Η διαφορά έγκειται στην κατασκευή των bins. Κάθε bin πλέον είναι το συμπληρωματικό της απλής binning, δηλαδή περιέχει όλες τις υπόλοιπες μετρήσεις πλην αυτών που εμπεριέχονται στο αντίστοιχο συμβατικό bin. Επομένως, ο αριθμός των στοιχείων του κάθε bin είναι $b = n - \frac{n}{n_b}$. Το σφάλμα στην jackknife υπολογίζεται από την σχέση

$$(\delta\mathcal{O})^2 = \sum_{j=0}^{n_b-1} (\mathcal{O}_j^b - \langle \mathcal{O}^b \rangle)^2 = n_b \left(\langle (\mathcal{O}^b)^2 \rangle - \langle \mathcal{O}^b \rangle^2 \right) \quad (5.16)$$

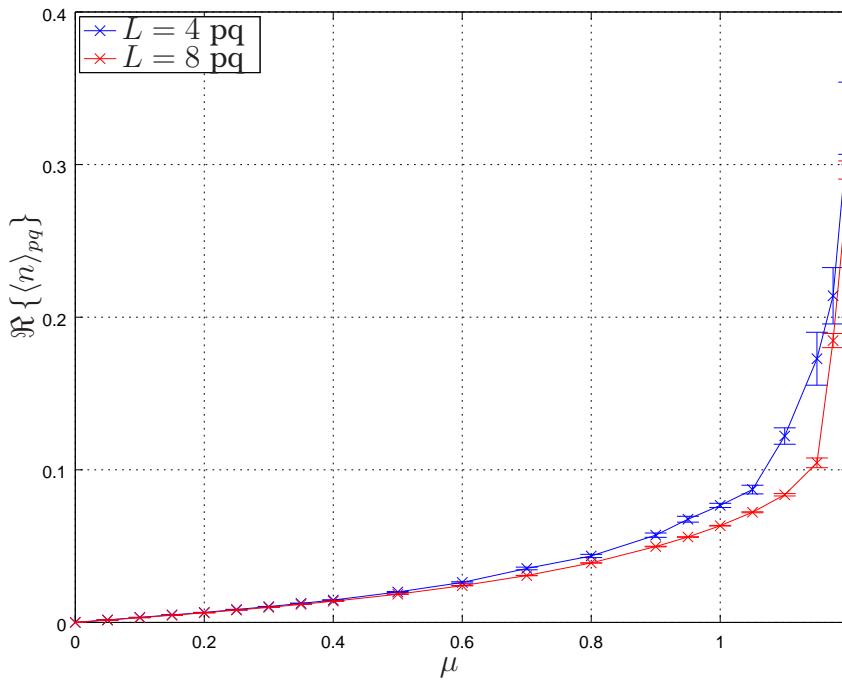
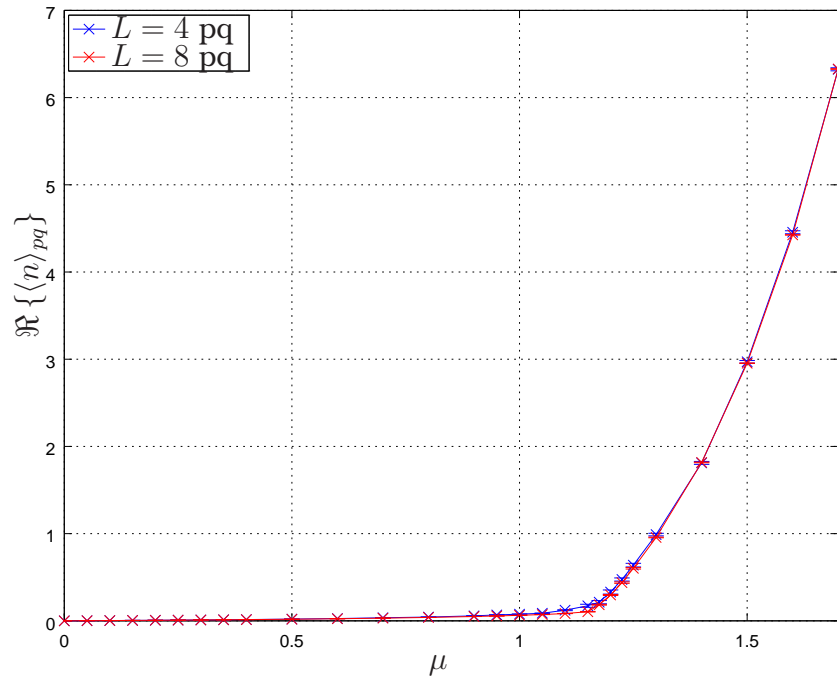
5.2.5 Αποτελέσματα προσομοίωσης

Μοντέλο Σταθερής φάσεως

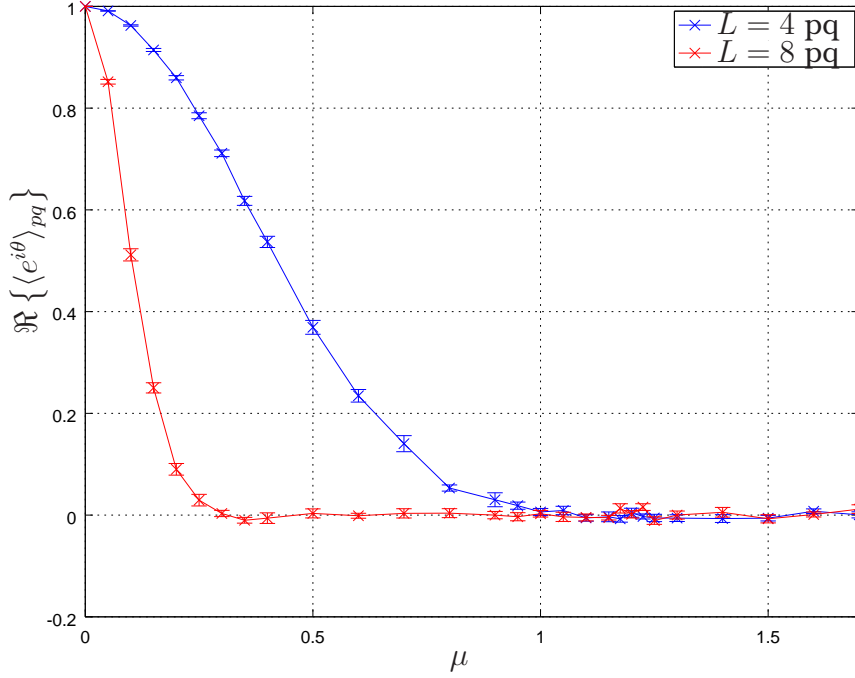
Με βάση τα όσα αναφέραμε, πραγματοποιήσαμε ένα σύνολο προσομοιώσεων βασισμένες στο Phase Quenched μοντέλο, με παραμέτρους του πεδίου $m = \lambda = 1$. Προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν για πλέγμα με $L = 4$ και για πλέγμα με $L = 8$. Αρχικά οι προσομοιώσεις έτρεξαν για $n_{total} = 12000$ επαναλήψεις (sweeps) κρατώντας μία μέτρηση για κάθε sweep. Από αυτές, οι πρώτες $n_{therm} = 2000$ μετρήσεις ήταν περίοδος θέρμανσης του συστήματος, οι οποίες απορρίφθηκαν. Επομένως, πρακτικά αξιοποιήσαμε τις υπόλοιπες $n_{sim} = 10000$ μετρήσεις. Τα αποτελέσματα των μετρούμενων ποσοτήτων $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$, $\Re \{ \langle n \rangle_{pq} \}$ και $\Re \{ \langle e^{i\theta} \rangle_{pq} \} = \langle \cos(\Im \{ S_E[\phi] \}) \rangle_{pq}$ ως συναρτήσεις του μ για το Phase Quenched μοντέλο, μαζί με τα στοχαστικά σφάλματά τους παρουσιάζονται στις εικόνες 5.9, 5.10, 5.11. Το φανταστικό μέρος της σωματιδιακής πυκνότητας $\Im \{ \langle n \rangle_{pq} \}$ στα όρια του στατιστικού σφάλματος προέκυψε ίσο με το μηδέν. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για το Phase Quenched μοντέλο είναι σε συμφωνία με τα αντίστοιχα της αναφοράς [1], στην οποία έχει εφαρμοστεί η μέθοδος Complex Langevin.



Εικόνα 5.9: Μέτρηση της ποσότητας $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 10000$ Metropolis sweeps.



Εικόνα 5.10: Μέτρηση της ποσότητας $\mathfrak{R}\{\langle n \rangle_{pq}\}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 10000$ Metropolis sweeps.



Εικόνα 5.11: Μέτρηση της φάσης $\Re \{ \langle e^{i\theta} \rangle_{pq} \}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 10000$ Metropolis sweeps.

Με βάση τα αποτελέσματα των διαγραμμάτων 5.9, 5.10, μπορούμε να διακρίνουμε μια διαφοροποίηση από μία κατάσταση χαμηλής πυκνότητας, σε μία κατάσταση συμπύκνωσης με υψηλή πυκνότητα, στην περιοχή για χημικό δυναμικό κοντά στο $\mu_{critical} \approx 1.15$. Για μεγαλύτερο όγκο του τετραδιάστατου πλέγματος ($L = 8$) παρατηρούμε ότι η μετάβαση αυτή γίνεται πιο απότομη. Για χημικό δυναμικό μικρότερο από $\mu_{critical} \approx 1.15$, η πυκνότητα μειώνεται σημαντικά.

Πλήρες μοντέλο

Αξιοποιώντας τις μετρήσεις του Phase Quenched model και του τύπου (5.2) για τις παρατηρήσιμες ποσότητες, θα επιχειρήσουμε στην συνέχεια να ανακατασκευάσουμε τις αντίστοιχες ποσότητες για το πλήρες μοντέλο. Οι ποσότητες που θα υπολογίσουμε για το πλήρες μοντέλο είναι το πραγματικό μέρος του μέσου πλάτος του πεδίου στο τετράγωνο

$$\Re \left\{ \langle |\phi|^2 \rangle_{full} \right\} = \Re \left\{ \frac{\langle |\phi|^2 e^{i\theta} \rangle_{pq}}{\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}} \right\} \quad (5.17)$$

και το πραγματικό μέρος της αντίστοιχης μέση πυκνότητα σωματιδίων

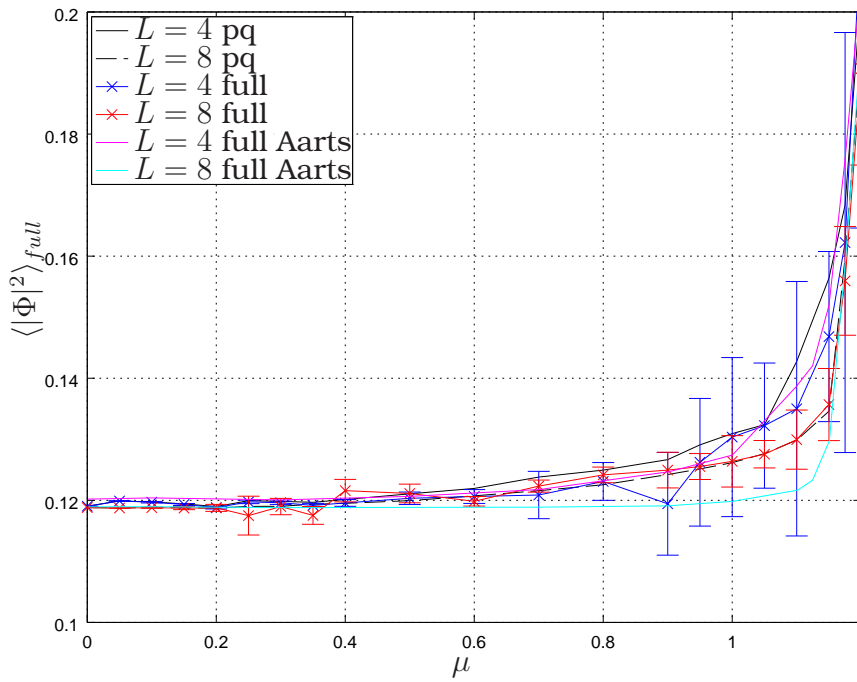
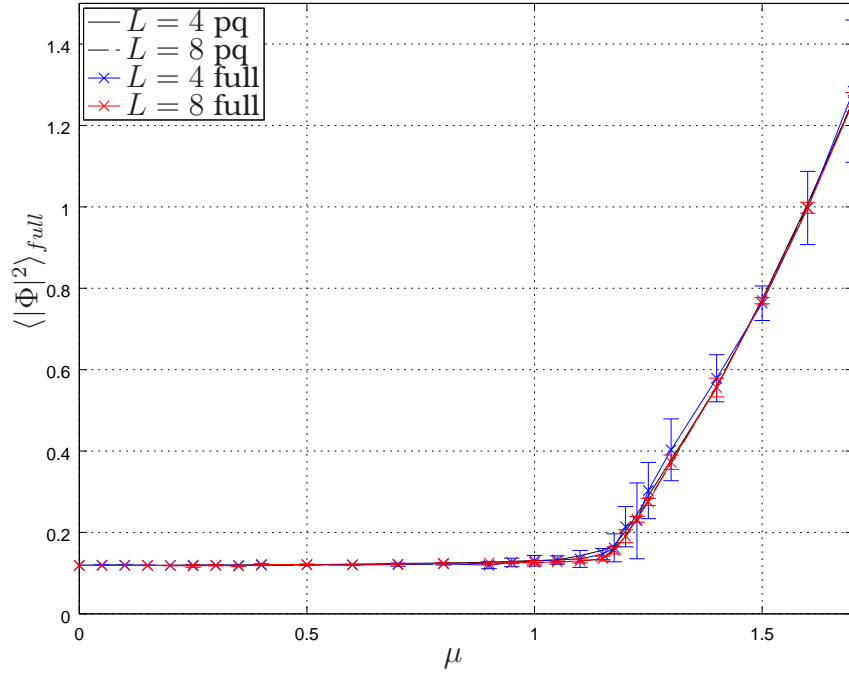
$$\Re \{ \langle n \rangle_{full} \} = \Re \left\{ \frac{\langle n e^{i\theta} \rangle_{pq}}{\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}} \right\} \quad (5.18)$$

Όπως ήταν αναμενόμενο και από την θεωρία, η οποία περιγράφηκε συνοπτικά στην παράγραφο 5.1.1, η τιμή του παρονομαστή $\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}$ των παραστάσεων (5.17),(5.18) συγκλίνει γρήγορα προς το μηδέν. Αυτό γίνεται εμφανές και από το διάγραμμα του $\Re \{ \langle e^{i\theta} \rangle_{pq} \}$, 5.11. Για τον λόγο αυτό, όπως εξηγήθηκε, δημιουργείται πρόβλημα στον αξιόπιστο υπολογισμό των παραστάσεων.

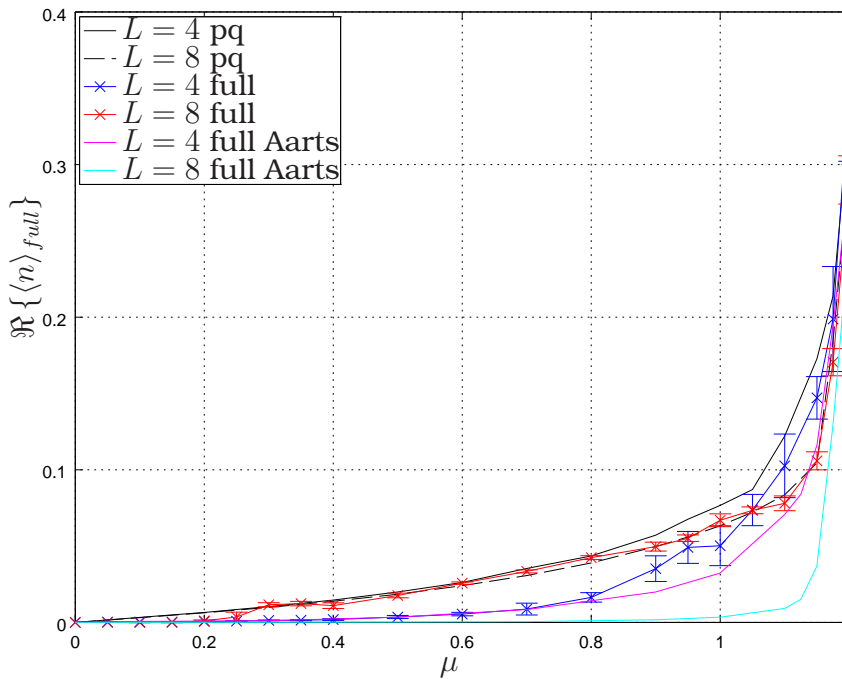
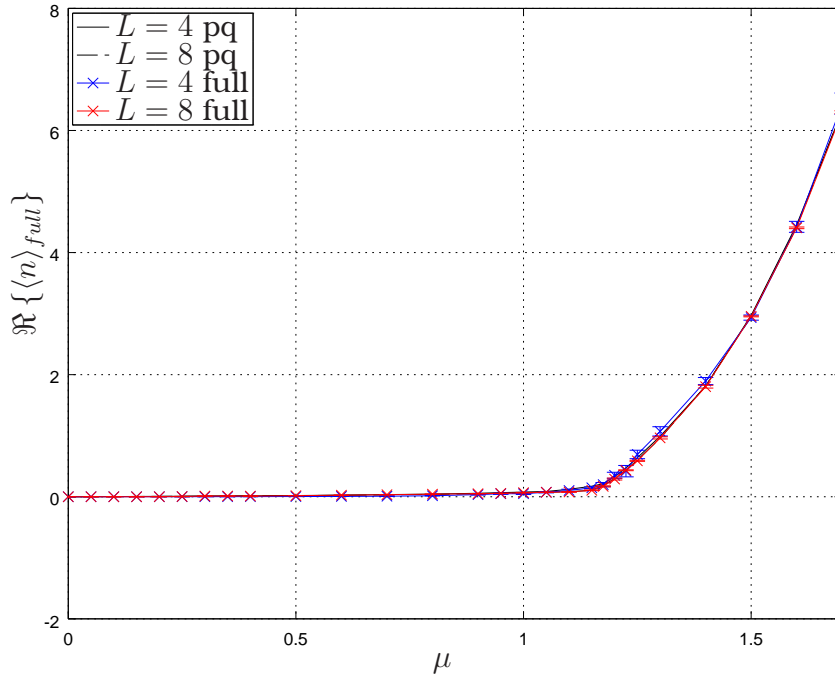
Παρά το πρόβλημα του προσήμου που εμφανίζεται, κάνοντας χρήση των μετρήσεων του Phase Quenched model και του τύπου (5.2) για τις παρατηρήσιμες ποσότητες, θα επιχειρήσουμε να ανακατασκευάσουμε τις ποσότητες αυτές στο πλήρες μοντέλο.

Για την μέτρηση των ποσοτήτων (5.17) και (5.18), το δείγμα των $n_{sim} = 10000$ μετρήσεων του Phase Quenched Model, χωρίστηκε σε $n_b = 10$ ομάδες (bins), των $b = 1000$ μετρήσεων η κάθε μία. Για κάθε ένα από τα bins, υπολογίστηκαν οι ποσότητες (5.17) και (5.18). Από τον μέσο όρο των μετρούμενων ποσοτήτων για όλα τα bins, υπολογίσθηκε η αναμενόμενη τιμή της κάθε ποσότητας, ενώ τα τυπικά σφάλματα υπολογίσθηκαν με βάση τον τύπο (5.15).

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης $n_{sim} = 10000$ μετρήσεων, για το πλήρες μοντέλο δίνονται στις εικόνες 5.12, 5.13. Για λόγους σύγκρισης, στις εικόνες περιλαμβάνονται τα αποτελέσματα του Phase Quenched μοντέλου (μαύρο), όπως επίσης και τα αντίστοιχα αποτελέσματα του πλήρους μοντέλου, με βάση την μέθοδο Complex Langevin, από την σχετική δημοσίευση του Gert Aarts [1].



Εικόνα 5.12: Υπολογισμός της ποσότητας $\langle |\phi|^2 \rangle_{full}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 10000$ Metropolis sweeps. Μέγεθος ομαδοποίησης μετρήσεων $b = 1000$ sweeps. Στο διάγραμμα περιλαμβάνονται για λόγους σύγκρισης τα αποτελέσματα για το $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ με μαύρο χρώμα όπως και τα αποτελέσματα του πλήρους μοντέλου από την σχετική δημοσίευση του Gert Aarts.



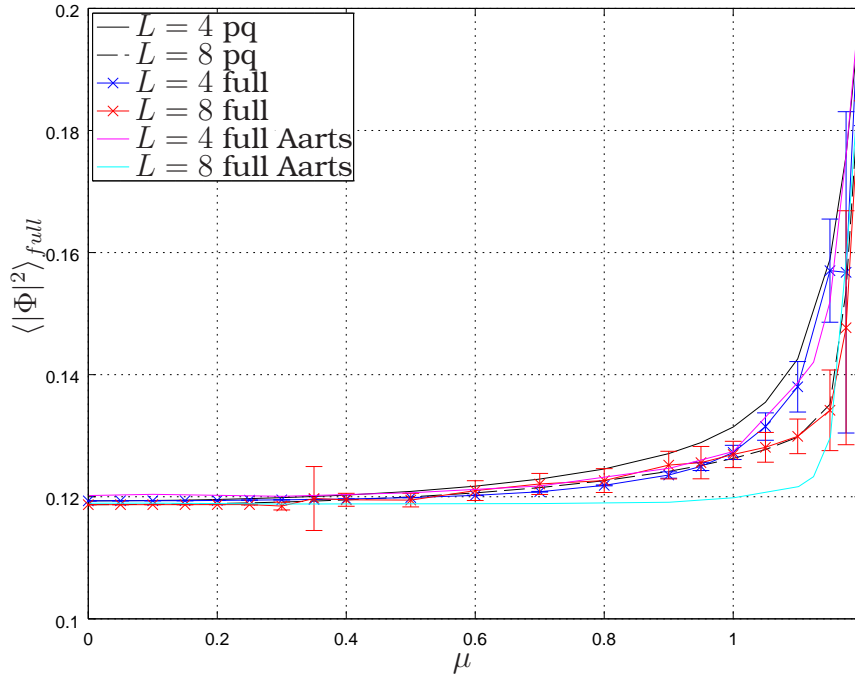
Εικόνα 5.13: Υπολογισμός της ποσότητας $\Re\{\langle n \rangle_{full}\}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 10000$ Metropolis sweeps. Μέγεθος ομαδοποίησης μετρήσεων $b = 1000$ sweeps. Στο διάγραμμα περιλαμβάνονται για λόγους σύγκρισης τα αποτελέσματα για το $\Re\{\langle n \rangle_{pq}\}$ με μαύρο χρώμα όπως και τα αποτελέσματα του πλήρους μοντέλου από την σχετική δημοσίευση του Gert Aarts.

Στην εικόνα 5.13 παρουσιάζονται συνοπτικά τα αποτελέσματα της μέσης πυκνότητα σωματιδίων για τις περιπτώσεις του πλήρους μοντέλου, σε σύγκριση με τις αντίστοιχες Phase Quenched ποσότητες. Εξετάζοντας τα αποτελέσματα για το πλήρες μοντέλο, με $L = 4$ σε μία περιοχή για $\mu \lesssim 0.4$ και με $L = 8$ για $\mu \lesssim 0.2$, όπου ακόμη δεν έχουμε ισχυρό πρόβλημα προσήμου, μπορούμε να διακρίνουμε ότι η μέση πυκνότητα σωματιδίων έχει πολύ ασθενή εξάρτηση από το χημικό δυναμικό μ . Το τελευταίο είναι γνωστό και ως φαινόμενο *Silver Blaze* [1, 3, 2]. Παρά ταύτα, με $L = 4$ για $\mu \gtrsim 0.8$ και με $L = 8$ για $\mu \gtrsim 0.3$, τα αποτελέσματα του πλήρους μοντέλου συγκλίνουν γρήγορα σε αυτά του Phase Quenched. Αυτό είναι κάτι που δεν μας εκπλήσσει, καθώς αν η παρατηρήσιμη ποσότητα \mathcal{O} είναι στατιστικά ασυσχέτιστη με την $e^{i\theta}$, τότε

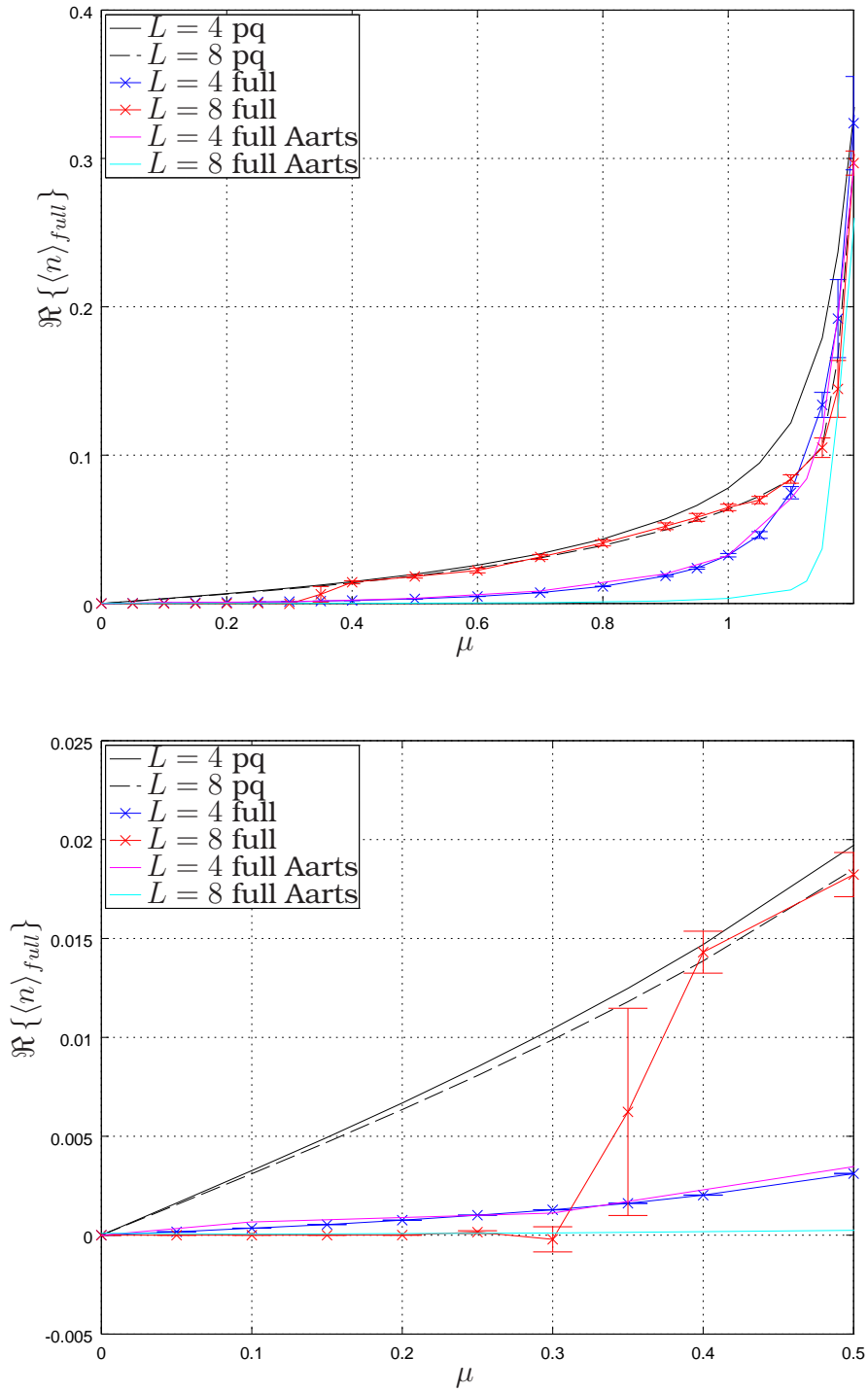
$$\langle \mathcal{O} \rangle_{full} = \frac{\langle \mathcal{O} e^{i\theta} \rangle_{pq}}{\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}} \rightarrow \frac{\langle \mathcal{O} \rangle_{pq} \cdot \langle e^{i\theta} \rangle_{pq}}{\langle e^{i\theta} \rangle_{pq}} \approx \langle \mathcal{O} \rangle_{pq}$$

Σύμφωνα με αντίστοιχες δημοσιεύσεις, [3, 18, 1], στις οποίες έχουν χρησιμοποιηθεί αλγόριθμοι Worm και Complex Langevin, περιμένουμε η συμπεριφορά Silver Blaze να διατηρείται και για μεγαλύτερες τιμές του μ κοντά στην περιοχή του $\mu_{critical} \approx 1.15$. Κάτι τέτοιο από τα αποτελέσματά μας δεν φαίνεται να ισχύει.

Για να ερευνήσουμε περαιτέρω την ασυμφωνία αυτή, επιλέγουμε να πραγματοποιήσουμε επιπλέον προσομοιώσεις, για πολύ μεγαλύτερο στατιστικό δείγμα μετρήσεων, $n_{sim} = 20$ εκατομμυρίων sweeps, υπολογίζοντας εκ νέου τις παρατηρήσιμες ποσότητες για το πλήρες μοντέλο. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 5.14, 5.15.



Εικόνα 5.14: Υπολογισμός της ποσότητας $\langle |\phi|^2 \rangle_{full}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 20M$ Metropolis sweeps. Μέγεθος ομαδοποίησης μετρήσεων $b = 2M$ sweeps. Στο διάγραμμα περιλαμβάνονται για λόγους σύγκρισης τα αποτελέσματα για το $\langle |\phi|^2 \rangle_{pq}$ με μαύρο χρώμα όπως και τα αποτελέσματα του πλήρους μοντέλου από την σχετική δημοσίευση του Gert Aarts.



Εικόνα 5.15: Υπολογισμός της ποσότητας $\Re\{\langle n \rangle_{full}\}$ ως συνάρτηση του χημικού δυναμικού, μ . Χρόνος προσομοίωσης, $n_{sim} = 20M$ Metropolis sweeps. Μέγεθος ομαδοποίησης μετρήσεων $b = 2M$ sweeps. Στο διάγραμμα περιλαμβάνονται για λόγους σύγκρισης τα αποτελέσματα για το $\Re\{\langle n \rangle_{pq}\}$ με μαύρο χρώμα όπως και τα αποτελέσματα του πλήρους μοντέλου από την σχετική δημοσίευση του Gert Aarts.

Όπως παρατηρούμε στην εικόνα 5.15 της μέσης πυκνότητας σωματιδίων, για μεγαλύτερο στατιστικό δείγμα η συμπεριφορά Silver Blaze γίνεται πιο ευδιάκριτη. Στην προσομοίωση των $n_{sim} = 20M$ Metropolis sweeps, η Silver Blaze συμπεριφορά πλέον επεκτείνεται για $L = 4$, σε $0 \leq \mu \lesssim 1.15$, αποδίδοντας αποτελέσματα ανάλογα των δημοσιεύσεων [3, 18]. Για $L = 8$, η Silver Blaze συμπεριφορά επεκτείνεται σε μία περιοχή $\mu \lesssim 0.3$, ενώ για $\mu \gtrsim 0.3$ τα αποτελέσματα πάλι συγκλίνουν σε εκείνα του Phase Quenched μοντέλου. Το τελευταίο μπορεί να δικαιολογηθεί καθώς για μεγαλύτερους όγκους πλέγματος, το πρόβλημα του προσήμου και αντίστοιχα το πρόβλημα επικάλυψης γίνονται ισχυρότερα. Παρά ταύτα, μπορούμε να υποθέσουμε ότι για αρκετά μεγαλύτερα στατιστικά δείγματα, η διεύρυνση της Silver Blaze περιοχής θα συνεχίσει να συμβαίνει, αποδίδοντας τελικά ανάλογα αποτελέσματα των [18, 1] και για $L = 8$. Κάτι τέτοιο, δεν μπόρεσε να επιβεβαιωθεί στην παρούσα εργασία, λόγω περιορισμένων υπολογιστικών πόρων.

Στα αποτελέσματα για το πλήρες μοντέλο είναι ενδιαφέρον ότι, καθώς τα bins με βάση τα οποία υπολογίζουμε την πυκνότητα σωματιδίων μεγαλώνουν, τότε στα αθροίσματα του αριθμητή της 5.18 δημιουργούνται συσχετίσεις μεταξύ της παρατηρήσιμης ποσότητας και της φάσης. Οι συσχετίσεις αυτές είναι τέτοιες ώστε για χαμηλές τιμές του χημικού δυναμικού, η πυκνότητα να προκύπτει σημαντικά μικρότερη από αυτή του Phase Quenched μοντέλου για αντίστοιχα χημικά δυναμικά.

Παρατηρούμε επίσης, ότι για τιμές του $\mu > \mu_{critical}$ η μέθοδός μας, μας δίνει σχετικά μεγάλα σφάλματα στις μετρήσεις, κάτι αναμενόμενο με βάση την θεωρία, λόγω του προβλήματος επικάλυψης.

5.3 Συμπεράσματα

Με βάση την παρούσα διπλωματική εργασία, μπορούμε να δούμε ότι το μοντέλο του ρελατιβιστικού Bose αερίου σε χημικό δυναμικό, μπορεί να χρησιμοποιηθεί επιτυχώς ως απλοϊκό-δοκιμαστικό μοντέλο για την μελέτη προβλημάτων, που προκύπτουν από την μιγαδική δράση, όμοια με αυτά που εμφανίζονται σε πιο πολύπλοκα φυσικά συστήματα, όπως αυτά της QCD, όπου παρατηρείται επίσης το φαινόμενο Silver Blaze. Για την προσέγγιση του προβλήματος χρησιμοποιήσαμε αριθμητικές μεθόδους Markov Chain Monte Carlo και πιο συγκεκριμένα τον ευρέως χρησιμοποιούμενο αλγόριθμο του Metropolis, με την διαδικασία του re-weighting.

Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος, όσον αφορά το μοντέλο σταθερής φάσεως (Phase Quenched model), παρατηρήσαμε ότι μας απέδωσε ουσιαστικά αποτελέσματα, σε συμφωνία με τις σχετικές δημοσιεύσεις. Η ανακατασκευή του πλήρους μοντέλου

επιχειρήθηκε από την Phase Quenched θεωρία. Κάτι τέτοιο απεδείχθη μερικώς εφικτό, μόνο σε μια ορισμένη περιοχή του χημικού δυναμικού, λόγω της σύνδεσης του τελευταίου με το μιγαδικό μέρος της δράσης. Ακόμη, παρατηρήθηκε ενίσχυση του προβλήματος του προσήμου για μεγαλύτερες τιμές του χημικού δυναμικού. Από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων μπορέσαμε να παρατηρήσουμε φαινόμενα, που αναμέναμε για την πλήρη θεωρία, όπως το Silver Blaze φαινόμενο. Παρ' όλα αυτά, δείξαμε ότι για να ανακτήσουμε αποτελέσματα για την πλήρη θεωρία, αντίστοιχα με αυτά που έχουν προκύψει σε άλλες δημοσιεύσεις, με χρήση διαφορετικών μεθόδων, όπως Complex Langevin και αλγόριθμους Worm, απαιτείται εξαιρετικά μεγαλύτερο στατιστικό δείγμα, για μεγαλύτερους όγκους πλέγματος κάτι που αποδίδουμε σε πρόβλημα επικάλυψης.

Βιβλιογραφία

- [1] Gert Aarts. Can stochastic quantization evade the sign problem? the relativistic bose gas at finite chemical potential. *Phys. Rev. Lett.*, 102:131601, 2009.
- [2] Gert Aarts. Complex langevin dynamics at finite chemical potential: Mean field analysis in the relativistic bose gas. *JHEP*, 05:052, 2009.
- [3] Gert Aarts. Complex langevin dynamics and other approaches at finite chemical potential. *PoS, LATTICE2012:017*, 2012.
- [4] Gert Aarts. Developments in lattice quantum chromodynamics for matter at high temperature and density. *Pramana*, 84(5):787–799, 2015.
- [5] Gert Aarts. Introductory lectures on lattice qcd at nonzero baryon number. 2015.
- [6] Anthony J. G Aitchison, Ian J. R.; Hey. *Gauge Theories in Particle Physics : From Relativistic Quantum Mechanics to QED, Fourth Edition*. CRC Press, 4th ed edition, 2012.
- [7] C. R. Allton, S. Ejiri, S. J. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, C. Schmidt, and L. Scorzato. The qcd thermal phase transition in the presence of a small chemical potential. *Phys. Rev.*, D66:074507, 2002.
- [8] J. Ambjorn, K. N. Anagnostopoulos, J. Nishimura, and J. J. M. Verbaarschot. The Factorization method for systems with a complex action: A Test in random matrix theory for finite density QCD. *JHEP*, 10:062, 2002.
- [9] K. N. Anagnostopoulos and J. Nishimura. New approach to the complex action problem and its application to a nonperturbative study of superstring theory. *Phys. Rev.*, D66:106008, 2002.

- [10] Konstantinos N Anagnostopoulos. *Computational Physics, Vol I: A Practical Introduction to Computational Physics and Scientific Computing*, volume 1. Konstantinos Anagnostopoulos, 2014.
- [11] Shailesh Chandrasekharan and Uwe-Jens Wiese. Meron cluster solution of a fermion sign problem. *Phys. Rev. Lett.*, 83:3116–3119, 1999.
- [12] Philippe de Forcrand. Simulating qcd at finite density. *PoS, LAT2009:010*, 2009.
- [13] Philippe de Forcrand and Owe Philipsen. The qcd phase diagram for small densities from imaginary chemical potential. *Nucl. Phys.*, B642:290–306, 2002.
- [14] Massimo D’Elia and Maria-Paola Lombardo. Finite density qcd via imaginary chemical potential. *Phys. Rev.*, D67:014505, 2003.
- [15] Shinji Ejiri. Canonical partition function and finite density phase transition in lattice qcd. *Phys. Rev.*, D78:074507, 2008.
- [16] Z. Fodor and S. D. Katz. A new method to study lattice qcd at finite temperature and chemical potential. *Phys. Lett.*, B534:87–92, 2002.
- [17] Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabo. The qcd equation of state at nonzero densities: Lattice result. *Phys. Lett.*, B568:73–77, 2003.
- [18] Christof Gattringer and Thomas Kloiber. Lattice study of the silver blaze phenomenon for a charged scalar ϕ^4 field. *Nucl. Phys.*, B869:56–73, 2013.
- [19] Rajiv V. Gavai and Sourendu Gupta. Pressure and nonlinear susceptibilities in qcd at finite chemical potentials. *Phys. Rev.*, D68:034506, 2003.
- [20] John Safko Herbert Goldstein, Charles Poole. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 2001.
- [21] Joseph I. Kapusta and Charles Gale. *Finite-Temperature Field Theory*. Cambridge University Press, second edition, 2006. Cambridge Books Online.
- [22] Slavo Kratochvila and Philippe de Forcrand. The canonical approach to finite density qcd. *PoS, LAT2005:167*, 2006.
- [23] Heinz J Rothe. *Lattice gauge theories: an introduction*, volume 74. World Scientific, 2005.

- [24] K. Splittorff and J. J. M. Verbaarschot. Phase of the fermion determinant at nonzero chemical potential. *Phys. Rev. Lett.*, 98:031601, 2007.

Παράρτημα Α

Κώδικας Προσομοίωσης σε C

```

                                Αρχείο 1: source/main.c
/***** main.c *****/
#include "include.h"
#include "fields.h"
#include "options.h"

int main(int argc, char **argv){

    int imeasurement;
    /*default simulation options */
    start=-1; MU=-1.; nmeasurement=-1;
    silent=0; seed=9873;

    get_the_options(argc, argv);

    // Create a field
    artype phi[L][L][L][L];

    // initialize the field
    init(start, phi);

    // perform metropolis sweeps
    for( imeasurement=0; imeasurement<nmeasurement; imeasurement++)
        {
            met(phi);
            measure(phi);
        }
}

EOF
```

Αρχείο 2: source/include.h

```
/****** include.h *****/
#ifndef INCLUDE_H
#define INCLUDE_H

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <complex.h>
#include <math.h>
#include <unistd.h>

#define L 4
#define N (L*L*L*L)

typedef double complex artype;

// Shell options are delceared as global variables
int silent;
int start;
int nmeasurement;
long seed;

double drandom();
void init(int start, artype phi[L][L][L][L]);
void met(artype phi[L][L][L][L]);
void measure(artype phi[L][L][L][L]);

#endif
EOF
```

Αρχείο 3: source/init.c

```
/****** init.c *****/
#include "include.h"
#include "fields.h"
#include "options.h"

#define HOTSCALE 5

/* initialize the field state */
/* start= 0 cold
      1 hot */
void init( int start, artype phi[L][L][L][L]) {

    int n1,n2,n3,n4;

    /*Initial configuration:*/
```

```

switch( start){
case 0:/*cold start*/
    for(n1=0;n1<L;n1++){
        for(n2=0;n2<L;n2++){
            for(n3=0;n3<L;n3++){
                for(n4=0;n4<L;n4++){
                    phi[n1][n2][n3][n4] = 0;
                }
            }
        }
    }
    break;
case 1:/*hot start*/
    for(n1=0;n1<L;n1++){
        for(n2=0;n2<L;n2++){
            for(n3=0;n3<L;n3++){
                for(n4=0;n4<L;n4++){
                    phi[n1][n2][n3][n4] = HOTSCALE*(2*drandom() - 1) +
                        HOTSCALE*(2*drandom() - 1)*I ;
                }
            }
        }
    }
    break;
default:
    printf("start= %d not valid. Exiting....\n",start);
    exit(1);
    break;
}
}
EOF

```

Αρχείο 4: source/met.c

```

/***** met.c *****/
#include "include.h"
#include "fields.h"
#include "action.h"

void met(artype phi[L][L][L][L])
{ /* Performs a metropolis algorithm sweep */
    int n1, n2, n3, n4, k;
    fieldpos n;
    artype newvalue;
    artype deltacomplex;

```



```

double delta;
static int acceptedstates=0, droppedstates=0;

for(k=0;k<N;k++){
    //pick a random site n=(n1,n2,n3,n4)
    n1 = L*drandom();
    n2 = L*drandom();
    n3 = L*drandom();
    n4 = L*drandom();
    n.n1=n1; n.n2=n2; n.n3=n3; n.n4=n4;

    // New value for the field phi at site n. phi -> phi+D_phi
    newvalue = phi[n1][n2][n3][n4] + D_Phi*( (2*drandom()-1) +
        (2*drandom()-1)*I ) ;

    // Calculate change in action between the new and the old
    field state
    deltacomplex = deltaS(phi, newvalue, n);
    delta = creal(deltacomplex);

    // Decide whether the new state is to be accepted or not
    if ( (delta <=0 ) || (drandom()<exp(-delta)) )
    { // Accepted!
        phi[n1][n2][n3][n4] = newvalue;
        acceptedstates++;
    }
    else
    { // Not accepted
        droppedstates++;
    }

} //sweep ends

if (! silent)
    printf("Acceptance Ratio: %f\n", (1.0*acceptedstates)/(
        acceptedstates+droppedstates));
}
EOF

```

Αρχείο 5: source/measure.c

```

/***** measure.c *****/
#include "include.h"
#include "fields.h"
#include "action.h"

static double AvgFieldSquared(artype [L][L][L][L]);

```

```

static double ImgAction(artype phi[L][L][L][L]);
static artype AvgParticleDensityComplex(artype phi[L][L][L][L]);

void measure(artype phi[L][L][L][L]) {
    /* Prints out all the measurements on the scalar field state
       for the Phase Quenched theory*/

    artype temp = AvgParticleDensityComplex(phi);

    if (!silent) {
        printf("Average Phi^2_pq=%f  ", AvgFieldSquared(phi) );
        printf("Average n_pq=%f%+fi  Img{S}=%f", creal(temp), cimag(
            temp), ImgAction(phi) );
        printf("\n");
    }
    else {
        printf("%.8f ", AvgFieldSquared(phi));
        printf("%.8f%+.8fi %.8f ", creal(temp), cimag(temp),
            ImgAction(phi) );
        printf("\n");
    }
}

static double AvgFieldSquared(artype phi[L][L][L][L]) {
    /* Returns the average value of the squared scalar field |Phi
       |^2_pq */
    int n1,n2,n3,n4;
    double sum=0;

    for(n1=0;n1<L;n1++){
        for(n2=0;n2<L;n2++){
            for(n3=0;n3<L;n3++){
                for(n4=0;n4<L;n4++){
                    sum += pwr2(cabs(phi[n1][n2][n3][n4]));
                }
            }
        }
    }

    return (sum/N);
}

static double ImgAction(artype phi[L][L][L][L]) {
    /* Returns the imaginary part of the complex Action S */

```

```

    return cimag(Saction(phi));
}

static artype AvgParticleDensityComplex(artype phi[L][L][L][L]) {
    /* Returns the average value of the particle density <n>_pq */
    int n1,n2,n3,n4;
    fieldpos n;
    artype sum=0;

    for (n1=0;n1<L;n1++){
        for (n2=0;n2<L;n2++){
            for (n3=0;n3<L;n3++){
                for (n4=0;n4<L;n4++){
                    n.n1=n1; n.n2=n2; n.n3=n3; n.n4=n4;
                    sum += ( conj( fval(phi,n,4) ) * exp(MU) * fval(phi,n,0) -
                            conj( fval(phi,n,0) ) * exp(-MU) * fval(phi,n,4) );
                }
            }
        }
    }

    return (sum/N);
}
EOF

```

Αρχείο 6: source/action.h

```

/***** action.h *****/
#ifndef ACTION_H
#define ACTION_H

#define krondelta(x,y) ( ((x)==(y)) ? (1) : (0) )

artype Saction(artype phi[L][L][L][L]);
artype deltaS(artype phi[L][L][L][L], artype newphi, fieldpos n);

#endif
EOF

```

Αρχείο 7: source/action.c

```

/***** action.c *****/
#include "include.h"
#include "fields.h"
#include "action.h"

static artype Sn(artype [L][L][L][L], fieldpos n);

```

```

/* Calculates the action of the field state phi */
artype Saction(artype phi[L][L][L][L] )
{
    int n1,n2,n3,n4;
    fieldpos n;
    artype sum = 0;

    for(n1=0; n1<L; n1++){
        for(n2=0; n2<L; n2++){
            for(n3=0; n3<L; n3++){
                for(n4=0; n4<L; n4++){
                    {
                        n.n1=n1; n.n2=n2;
                        n.n3=n3; n.n4=n4;
                        sum += Sn(phi, n);
                    }
                }
            }
        }
    }

    return sum;
}

// Calculate the contribution to the action for a field site n
static artype Sn(artype phi[L][L][L][L], fieldpos n)
{
    artype sum=0;
    int mi;

    sum += (2*DIM+pwr2(M)) *(conj(fval(phi,n,0))*fval(phi,n,0));
    sum += LAMBDA*pwr2( conj(fval(phi,n,0))*fval(phi,n,0) );

    for(mi=1;mi<=4;mi++){
        sum -= conj(fval(phi,n,0)) * exp(-MU*krondelta(mi,4)) * fval(
            phi,n,mi) + conj(fval(phi,n,mi)) * exp(MU*krondelta(mi,4))
            * fval(phi,n,0);
    }

    return sum;
}

// Calculates the change in action between the old and the new
// field state
artype deltaS(artype phi[L][L][L][L], artype newphi, fieldpos n)
{

```

```

artype sum = 0;
int mi;

sum += (2*DIM+pwr2(M)) * ( conj(newphi)*newphi - conj( fval(phi,
    n,0))*fval(phi,n,0) );
sum += LAMBDA * ( pwr2(conj(newphi)*newphi) - pwr2(conj( fval(
    phi,n,0))*fval(phi,n,0)) );

for(mi=1;mi<=4;mi++){
    sum -= conj( newphi-fval(phi,n,0) ) * exp(-MU*krondelta(mi,4)
        ) * fval(phi,n,mi);
    sum -= conj( fval(phi,n,mi) ) * exp(MU*krondelta(mi,4)) * (
        newphi - fval(phi,n,0));
}

for(mi=1;mi<=4;mi++){
    sum -= conj( fval(phi,n,-mi) ) * exp(-MU*krondelta(mi,4)) * (
        newphi - fval(phi,n,0));
    sum -= conj( newphi - fval(phi,n,0) ) * exp(MU*krondelta(mi
        ,4)) * fval(phi,n,-mi);
}

return sum;
}
EOF

```

Αρχείο 8: source/fields.h

```

/***** fields.h *****/
#ifndef FIELDS_H
#define FIELDS_H

#define M 1 // This is the mass of the field
#define DIM 4 // Number of Euclidian dimensions
#define LAMBDA 1 // Coupling constant Lambda
#define D_Phi 0.3 // Delta_Phi is the maximum change in the field
    between consecutive states - tune that to get a good
    acceptance ratio ~0.7

#define pwr2(x) ( (x)*(x) )
#define SIGN(x) ((x) > 0) - ((x) < 0)
#define wrap(x) (((x) % L) + L) % L // Periodical boundary
    conditions

typedef struct field_position {

    int n1, n2, n3, n4;

```

```

} fieldpos;

double MU;

artype fval(artype phi[L][L][L][L], fieldpos n, int mi);

#endif
EOF

```

Αρχείο 9: source/fields.c

```

/***** fields.c *****/

#include "include.h"
#include "fields.h"
/*
   return the value of a field by offset of 1 at the mi direction
   from the position n
   negative vaules of mi indicate negative offset
*/
artype fval(artype phi[L][L][L][L], fieldpos n, int mi)
{ int sign;

  sign = SIGN(mi);
  switch (abs(mi)) {
    case 1:
      return phi[wrap(n.n1+sign)][wrap(n.n2)][wrap(n.n3)][wrap(n.
        n4)];
      break;
    case 2:
      return phi[wrap(n.n1)][wrap(n.n2+sign)][wrap(n.n3)][wrap(n.
        n4)];
      break;
    case 3:
      return phi[wrap(n.n1)][wrap(n.n2)][wrap(n.n3+sign)][wrap(n.
        n4)];
      break;
    case 4:
      return phi[wrap(n.n1)][wrap(n.n2)][wrap(n.n3)][wrap(n.n4+
        sign)];
      break;
    case 0:
      return phi[wrap(n.n1)][wrap(n.n2)][wrap(n.n3)][wrap(n.n4)];
      break;
    default :
      fprintf(stderr, "fval function argument mi out of bounds");

```

```

        exit(1);
        return 0;
    }

}

EOF

```

Αρχείο 10: source/options.h

```

/***** options.h *****/
#ifndef OPTIONS_H
#define OPTIONS_H

#include <getopt.h>
#include <string.h>
#include <libgen.h>
#include <time.h>

void usage();
void locerr(char *errmes);
void get_the_options(int argc, char **argv);
void simmessage(FILE *fp);

#endif

EOF

```

Αρχείο 11: source/options.c

```

/***** options.c *****/
#include "include.h"
#include "fields.h"
#include "options.h"

char prog[1024];

/*Get the options function: See "man 3 getopt" for usage*/
/*Option letters are defined with this string*/
#define OPTARGS "hm:s:S:n:d:"
void get_the_options(int argc, char **argv){
    int c, errflg = 0;

    if (argc==1) usage();

    strcpy(prog, (char *)basename(argv[0]));
    while (!errflg && (c = getopt(argc, argv, OPTARGS)) != -1){
        switch(c){
            case 's':

```

```

        start = atoi(optarg);
        break;
    case 'S':
        seed = atol(optarg);
        break;
    case 'n':
        nmeasurement = atoi(optarg);
        break;
    case 'm':
        MU = atof(optarg);
        break;
    case 'd':
        silent = atoi(optarg);
        break;
    case 'h':
        errflg++; /* call usage */
        break;
    default:
        errflg++;
} /* switch */
if (errflg) usage();
} /* while ... */

// Check to see if the shell options given are valid
if (L < 1) locerr("L has not been set. ");
if (start < 0 || start > 1) locerr("start has not been set.");
if (seed < 0) locerr("seed has not been set.");
if (MU < 0) locerr("MU has not been set.");
if (nmeasurement < 0) locerr("nmeasurement has not been set");

// print out simulation message
if (!silent) simmessage(stdout);

} /* get_the_options () */

/* ----- usage () -----
*/
void usage () {
    /* Careful: New lines end with \n : No space after last
       backslacsh
       indicates line is broken.... */
    fprintf(stderr, "\
Usage: %s [options]                               \n\
        -m: mu (chemical potential)                \n\
        -s: start (0 cold, 1 hot)                  \n\
        -S: seed (options seed overrides the one in config) \n\

```



```

        -n: number of measurements of <Phi^2> and <n>           \n\
        -d: silent data mode (0 = normal, 1 = silent)         \n\
Monte Carlo simulation of 4d Complex Scalar Field.           \n\
Metropolis is used by default.\n\
\n",prog);
// printed usage message "
    exit(1);
}/*usage()*/

/* ----- locerr() -----
*/
void locerr( char *errmes ){
    fprintf(stderr,"%s: %s Exiting....\n",prog,errmes);
    exit(1);
}

/* ----- simmessage() -----
*/
/*print a message about the simulation: */
void simmessage(FILE *fp){
    time_t t;

    time(&t);/* store time in seconds in *t. see: "man 2 time" */

    fprintf(fp,"\n
#####\n
#   Complex Scalar field Model for relativistic Bose gas at
#   finite\n\
#   chemical potential – Metropolis algorithm on 4box lattice
#   \n\
# Run on %s#                                           \n\
# L           = %d (Lattice linear dimension, N=L*L*L*L) \n\
# seed        = %ld (random number gener. seed)       \n\
# nmeasur     = %d (No. of nmeasurments)              \n\
# mu          = %f (Chemical Potential)                \n\
# start       = %d (0 cold, 1 hot)                     \n\
# silent      = %d (0 = normal, 1 = silent)\n",
        ctime(&t), L, seed, nmeasurement, MU, start, silent);
    fflush(fp);
}/* message()*/

EOF

```

Αρχείο 12: source/drandom.c

```

/***** drandom.c *****/

```

```

#include "include.h"

#define a 16807
#define m 2147483647
#define q 127773
#define r 2836
#define conv (1.0/(m-1))

double drandom() {
    long l;

    l=seed/q;
    seed = a*(seed-q*l) - r*l;
    if(seed < 0) seed +=m;

    return conv*(seed-1);
}
EOF

```

Αρχείο 13: source/Makefile

```

# ##### Makefile.1 #####

OBJS  = main.o fields.o options.o init.o met.o action.c measure.
      o drandom.o
CFLAGS = -O2 -ggdb3 -Wall -Wextra -std=c99 -pedantic
LIBS   = -lm

metropolis: $(OBJS)
    $(CC) $(CFLAGS) $^ -o $@ $(LIBS)

$(OBJS): include.h fields.h action.h options.h

clean:
    /bin/rm -f *.o metropolis core*

EOF

```