

УДК 51-72; 519.245; 539.182

РАСЧЕТЫ РАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО В РАСШИРЕННОМ АНСАМБЛЕ

М. А. Вознесенский¹, П. Н. Воронцов-Вельяминов¹, А. П. Любарцев²

Метод Монте-Карло в расширенном ансамбле с настройкой балансирующих параметров по алгоритму Ванга–Ландау использован для расчета отношений квантовых статсумм для различных классов перестановок в проблеме нескольких взаимодействующих тождественных частиц (фермионов) с кулоновским взаимодействием в гармоническом внешнем поле с последующим вычислением полной статсуммы и энергии системы при конечных температурах вплоть до наиболее низких. Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 05–02–17428) и Шведской Королевской академии наук.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, квантовая статистика, интегралы по траекториям, матрица плотности.

1. Введение. Метод Монте-Карло интегралов по траекториям, основанный на фейнмановской трактовке квантовой механики [1], является одним из наиболее надежных способов изучения квантовых систем при конечных температурах. Однако при его реализации возникают определенные трудности, связанные с поведением квантовых систем при низких температурах. Одной из таких трудностей является проблема знаков. Волновая функция, описывающая систему нескольких фермионов, меняет знак (антисимметрична) при перестановке любых двух частиц. Следовательно, матрица плотности, с помощью которой описываются свойства квантовых систем, также должна быть антисимметричной относительно перестановок частиц. Это приводит к появлению отрицательных вкладов в матрицу плотности и, как следствие, в статистическую сумму и в выражения для средних. При понижении температуры разность положительных и отрицательных вкладов экспоненциально уменьшается и становится трудно отделимой от статистического шума.

Существует достаточно большое число работ, посвященных попыткам решить указанную проблему тем или иным способом. Основные идеи попыток решения проблемы знаков в рамках методов Монте-Карло заключаются в сокращении основной доли знаков не стохастически, а на этапе вычисления весов траекторий. Например, в работе [2] было предложено симметризовать (антисимметризовать) каждую высокотемпературную матрицу плотности, входящую в разложение. Таким образом, в рамках метода вершин мы получаем набор незамкнутых полимеров с гармоническими связями, на концы которого наложен особого вида потенциал — детерминант из таких связей. Этот подход, в силу геометрических особенностей конфигурационного пространства, позволяет даже решить проблему знаков для одномерных систем со взаимодействием, однако для систем в пространствах с большей размерностью при низких температурах этот метод оказывается малоэффективным. Существуют и более хитроумные способы: так, например, идея Ньюмана и Куки [3] основана на предложении заменить каждую вершину целым набором состояний, тогда еще на этапе вычисления веса такой траектории будет происходить существенная доля сокращения знаков. Данный подход является численно точным, однако расширить его на системы, содержащие больше двух частиц, пока не удалось.

В настоящей статье предлагается метод ослабления проблемы знаков, основанный на точном вычислении отношений статсумм для различных классов перестановок [4]. Метод апробирован на системе двух невзаимодействующих фермионов в гармоническом поле и применен к системам двух и трех фермионов с кулоновским отталкиванием в гармоническом поле.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 выводятся выражения для статистических сумм и энергий систем тождественных фермионов, а также излагаются используемые алгоритмы. В разделе 3 обсуждается применение методов и алгоритмов к рассматриваемой задаче. В разделе 4 приведены результаты апробации метода на системе, для которой имеется аналитическое решение, и изложены результаты исследования модельных систем, для которых аналитические решения не существуют.

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, ул. Ульяновская, 1, 198504, Ст. Петергоф, г. Санкт-Петербург; e-mail: MVoynessenski@gmail.com, voron.wgroup@pobox.spbu.ru

² Division of Physical Chemistry, Arrhenius Laboratory, Stockholm University, S-10691, Stockholm, Sweden; e-mail: sasha@phyc.su.se

2. Выражения и алгоритмы.

2.1. Выражения для статистической суммы. Рассмотрим квантовую систему, описываемую оператором Гамильтона \hat{H} , состоящую из N различных частиц одного сорта без спина и находящуюся во внешнем поле при обратной температуре β . Каноническая матрица плотности, описывающая рассматриваемую систему, в координатном представлении $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta\hat{H}) | \mathbf{r}' \rangle$ может быть использована для вычисления средних (см. [5]):

$$\langle A \rangle = (Z(\beta))^{-1} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta\hat{H}) | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \hat{A} | \mathbf{r} \rangle.$$

Здесь $\mathbf{r} = (r^{(1)}, \dots, r^{(N)})$ — вектор из координат частиц, $r^{(k)}$ — координата k -й частицы (d -мерный вектор в случае d -мерного пространства), $Z(\beta)$ — каноническая статистическая сумма

$$Z(\beta) = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta\hat{H}) | \mathbf{r} \rangle$$

и $\beta = (k_B T)^{-1}$ — обратная температура в энергетических единицах, где k_B — постоянная Больцмана.

С помощью очевидного тождества $\exp(-\beta\hat{H}) \equiv \left(\exp(-\beta\hat{H}/n) \right)^n$, где n — любое натуральное число, матрица плотности ρ и статистическая сумма Z могут быть выражены в следующем виде:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \int d\mathbf{r}_2 \dots \int d\mathbf{r}_n \prod_{i=1}^n \langle \mathbf{r}_i | \exp(-\beta\hat{H}/n) | \mathbf{r}_{i+1} \rangle, \quad (1)$$

$$Z(\beta) = \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_n \prod_{i=1}^n \langle \mathbf{r}_i | \exp(-\beta\hat{H}/n) | \mathbf{r}_{i+1} \rangle, \quad (2)$$

где $\mathbf{r}_{n+1} \equiv \mathbf{r}'$ в уравнении (1) и $\mathbf{r}_{n+1} \equiv \mathbf{r}_1$ в уравнении (2).

Величина $\rho(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{i+1}; \beta/n) = \langle \mathbf{r}_i | \exp(-\beta\hat{H}/n) | \mathbf{r}_{i+1} \rangle$ является матрицей плотности, соответствующей более высокой температуре nT или обратной температуре β/n . Имея в виду, что оператор \hat{H} есть сумма операторов кинетической и потенциальной энергий (т.е. $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$), высокотемпературную матрицу плотности можно записать в виде

$$\exp\left(-\beta(\hat{K} + \hat{V})/n\right) = \exp(-\beta\hat{K}/n) \exp(-\beta\hat{V}/n) + O((\beta/n)^3).$$

Отсюда приходим к следующей аппроксимации для высокотемпературной матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_i | \exp\left(-\beta(\hat{K} + \hat{V})/n\right) | \mathbf{r}_{i+1} \rangle &\approx \langle \mathbf{r}_i | \exp(-\beta\hat{K}/n) \exp(-\beta\hat{V}/n) | \mathbf{r}_{i+1} \rangle = \\ &= \langle \mathbf{r}_i | \exp(-\beta\hat{K}/n) | \mathbf{r}_{i+1} \rangle \exp(-\beta V(\mathbf{r}_{i+1})/n) = \\ &= \left(\frac{mn}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{-dN/2} \exp\left(-\frac{mn}{2\beta\hbar^2} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1})^2 - \frac{\beta}{n} V(\mathbf{r}_{i+1}) \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь в последнем равенстве использовано выражение для матрицы плотности свободной частицы [1]. Подставляя (3) в соотношение (2), получаем выражение для статистической суммы в n -вершинном приближении:

$$Z(\beta) = \left(\frac{mn}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{-ndN/2} \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_n \exp\left(-\frac{mn}{2\beta\hbar^2} \sum_{i=1}^n (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1})^2 - \frac{\beta}{n} \sum_{i=1}^n V(\mathbf{r}_i) \right), \quad (4)$$

где по-прежнему

$$\mathbf{r}_{n+1} \equiv \mathbf{r}_1. \quad (5)$$

В рамках n -вершинного приближения возникает квантово-классический изоморфизм: каждая квантовая частица представляется в виде “траектории” — формально классического объекта, представляющего собой замкнутый полимер из n “вершин”, соединенных между собой гармоническими пружинами. Как

видно из формулы (4), жесткость пружин прямо пропорциональна числу вершин n и обратно пропорциональна обратной температуре β . Потенциал $V(\mathbf{r})$ включает в себя как взаимодействие с внешним полем, так и межчастичное взаимодействие.

Рассмотрим теперь систему N тождественных частиц со спином (фермионов или бозонов). Выражая матрицу плотности как антисимметричную или симметричную (в зависимости от статистики) сумму по всем $N!$ перестановкам P координат частиц в матрице плотности $\rho^{(D)}$ системы N различных частиц, мы получаем следующее выражение для статистической суммы (см. [6]):

$$Z^{(A,S)}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} \xi^{[P]} \int dx^{(1)} \dots dx^{(N)} \rho^{(D)}(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}, P(x^{(1)}), \dots, P(x^{(N)}); \beta). \quad (6)$$

Здесь $x^{(k)} = (r^{(k)}, \sigma^{(k)})$ обозначает соответствующую k -й частице совокупность пространственных координат и спиновой переменной, $\int dx^{(k)} = \sum_{\sigma^{(k)}} \int dr^{(k)}$, $\xi = 1$ соответствует симметричному случаю (бозоны), $\xi = -1$ — антисимметричному (фермионы) и $[P]$ — четность перестановки. Матрица плотности в уравнении (6) в случае, когда гамильтониан не зависит от спина, может быть представлена как произведение координатной и спиновой частей:

$$\rho^{(D)} = \rho_c^{(D)}(r^{(1)}, \dots, r^{(N)}, P(r^{(1)}), \dots, P(r^{(N)})) \rho_s(P), \quad (7)$$

$$\rho_s(P) = \delta(\sigma^{(1)}, P(\sigma^{(1)})) \dots \delta(\sigma^{(N)}, P(\sigma^{(N)})). \quad (8)$$

Подставляя уравнения (7) и (8) в уравнение (6), приходим к следующему выражению для статистической суммы:

$$Z^{(A,S)}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} \xi^{[P]} K(P) Z_{(P)}^{(D)}(\beta). \quad (9)$$

Здесь $K(P) = \sum_{\sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(N)}} \rho_s(P)$ — спиновая и

$$Z_{(P)}^{(D)}(\beta) = \int dr^{(1)} \dots dr^{(N)} \rho_c^{(D)}(r^{(1)}, \dots, r^{(N)}, P(r^{(1)}), \dots, P(r^{(N)}); \beta) \quad (10)$$

— соответственно координатная часть статистической суммы, отвечающие перестановке P .

Матрица плотности $\rho_c^{(D)}$ в выражении (10) может быть представлена в виде разложения (1) по высокотемпературным матрицам плотности, для которых, в свою очередь, будет справедлива аппроксимация (3). В итоге мы получим выражение для статистической суммы, аналогичное выражению (4), но, как нетрудно понять, условие (5) в этом случае будет выглядеть так: $\mathbf{r}_{n+1} \equiv P(\mathbf{r}_1) = (P(r^{(1)}), P(r^{(2)}), \dots, P(r^{(N)}))$, т.е. траектории будут замкнуты не обязательно на себя, но и на другие траектории; в результате возникнут объекты, которые называют циклами, содержащие удвоенное, утроенное и так далее вплоть до Nn число вершин. Перепишем статистическую сумму (9) как сумму по классам перестановок [6]. В этом случае имеем $\xi^{[P]} \rightarrow \xi^{[G]}$, $K(P) \rightarrow K(G) = (2s+1)^{\sum_{\nu} C_{\nu}(G)}$, где $C_{\nu}(G)$ — число циклов длиной ν в данном классе G ,

так что $\sum_{\nu} C_{\nu}(G)$ есть полное число циклов в классе G : $1 \leq \sum_{\nu=1}^N C_{\nu}(G) \leq N$. Так как значение интеграла

(10) по всем пространственным переменным зависит только от циклической структуры перестановки, то $Z_{(P\{G\})}^{(D)}(\beta) \equiv Z_{(G)}^{(D)}(\beta)$. Следовательно, статистическая сумма будет иметь вид

$$Z^{(A,S)}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_G \xi^{[G]} K(G) M(G) Z_{(G)}^{(D)}(\beta), \quad (11)$$

где $M(G) = \frac{N!}{\prod_{\nu=1}^N (C_{\nu}! \nu^{C_{\nu}})}$ — число элементов в классе G [6].

Конкретизируем выражение для статистической суммы в случае системы тождественных фермионов. Для двух частиц имеем

$$Z_2^{(A)}(\beta) = \frac{1}{2} \left[K(1^2) Z_{(1^2)}(\beta) - K(2) Z_{(2)}(\beta) \right]. \quad (12)$$

Здесь два класса перестановок обозначены как 1^2 (две отдельные частицы) и 2 (цикл из двух частиц), $M(1^2) = M(2) = 1$, $Z_{(1^2)}(\beta)$ обозначает статистическую сумму системы из двух различных частиц при обратной температуре β , а $Z_{(2)}(\beta)$ — соответственно статистическую сумму для цикла из двух частиц. В случае спина, равного нулю ($s = 0$), спиновая часть статистической суммы $K(G)$ будет равна 1 для всех классов перестановок G . Если же спин равен половине ($s = 1/2$), то $K(1^2) = 4$, а $K(2) = 2$.

Пользуясь уравнением Гиббса–Гельмгольца

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z, \tag{13}$$

можно легко получить выражение для внутренней энергии:

$$E_2^{(A)}(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \left(\ln(Z_2^{(A)}(\beta)) \right) = \frac{K(1^2)E_{(1^2)}(\beta)Z_{(1^2)}(\beta) - K(2)E_{(2)}(\beta)Z_{(2)}(\beta)}{K(1^2)Z_{(1^2)}(\beta) - K(2)Z_{(2)}(\beta)}. \tag{14}$$

Здесь $E_{(1^2)}(\beta)$ — внутренняя энергия системы из двух различных частиц при обратной температуре β , а $E_{(2)}(\beta)$ — внутренняя энергия цикла из двух частиц.

Для системы $N = 3$ выражение для статистической суммы будет выглядеть так:

$$Z_3^{(A)}(\beta) = \frac{1}{6} \left[K(1^3)Z_{(1^3)}(\beta) - 3K(12)Z_{(12)}(\beta) + 2K(3)Z_{(3)}(\beta) \right]. \tag{15}$$

Здесь имеется соответственно три класса перестановок, обозначенные как 1^3 (три отдельные частицы), 12 (одна частица и цикл из двух частиц) и 3 (цикл из трех частиц), $M(1^3) = 1$, $M(12) = 3$, а $M(3) = 2$. В случае спина, равного нулю ($s = 0$), $K(G)$ равны 1 для всех G . Если же спин равен половине ($s = 1/2$), то $K(1^3) = 8$, $K(12) = 4$, а $K(3) = 2$.

Для большего числа частиц можно построить формулы, аналогичные (12) и (14).

2.2. Метод расширенных ансамблей. Данный метод, позволяющий в ходе одного расчета получить отношение статистических сумм, был предложен в работе [7]. Пусть $H(q)$ есть конфигурационная часть гамильтониана, описывающего рассматриваемую систему. Введем приведенный гамильтониан $h = -\beta H(q)$. Пусть h_0 — гамильтониан системы, для которой статистическая сумма может быть рассчитана точно. Построим цепочку гамильтонианов $h_0, h_1, \dots, h_M \equiv h$, в которой с изменением индекса m от 0 до M гамильтониан h_0 постепенно превращается в h_M , например по линейному закону

$$h_m = (1 - \lambda_m)h_0 + \lambda_m h_M, \tag{16}$$

где $0 = \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_M = 1$. Для каждого m имеем канонический ансамбль с конфигурационным интегралом $Z_m = \int dq \exp(h_m)$.

Составим расширенный и модифицированный ансамбль со статистической суммой

$$Z = \sum_{m=0}^M Z_m \exp(-\eta_m), \tag{17}$$

где η_m — так называемые балансирующие параметры.

Расширение ансамбля означает введение суммирования по дополнительному параметру λ_m , который в частных случаях может совпадать с обычными термодинамическими параметрами: температурой, давлением, числом частиц и т.п. Модификация означает введение весового множителя $\exp(-\eta_m)$. Каждый из канонических ансамблей с номером m становится подансамблем расширенного ансамбля (17). В построенном расширенном ансамбле организуется МК-блуждание в соответствии со стандартным алгоритмом Метрополиса. При этом реализуют два типа шагов: изменение конфигурации системы внутри подансамбля (λ_m не меняется) и переходы между подансамблями (изменение λ_m при неизменных значениях координат). Вероятность перехода $1 \rightarrow 2$ определяется стандартным выражением алгоритма Метрополиса

$$p_{1 \rightarrow 2} = \min \left(1, \exp((h^{(2)} - \eta^{(2)}) - (h^{(1)} - \eta^{(1)})) \right), \tag{18}$$

причем для шагов первого типа выполнено $\eta^{(1)} = \eta^{(2)}$.

В ходе описанной МК-процедуры подсчитывается число раз n_m , когда система побывала в подансамбле с индексом m . В результате получаем оценку вероятности состояния, характеризуемого значением λ_m :

$p_m \simeq \frac{n_m}{n_{MC}}$, где n_{MC} — полное число МК-шагов. С другой стороны, исходя из (17), имеем $p_m = \frac{Z_m e^{-\eta_m}}{Z}$; следовательно, $\frac{n_m}{n_k} \simeq \frac{Z_m}{Z_k} \exp(-\eta_m + \eta_k)$. Таким образом, можно получить отношение статистических сумм для любых двух подансамблей из расширенного ансамбля (17). Поскольку для подансамбля с индексом 0 статистическая сумма известна, можно получить значения статистической суммы для любого подансамбля, в частности исследуемого, обозначенного индексом M : $Z_M = Z_0 \frac{n_m}{n_0} \exp(-\eta_0 + \eta_m)$.

В принципе, результаты не зависят от выбора параметров η_m . Однако очевидно, что посещаемость подансамблей экспоненциально зависит от значений балансирующих параметров, и, следовательно, в случае неудачного выбора η_m может получиться, что система ни разу не побывает в некоторых подансамблях за время расчета или же не будет набрана достаточная статистика. Оригинальный метод расширенных ансамблей предполагает проведение нескольких предварительных прогонов с целью оптимизации значений балансирующих параметров, однако эту процедуру оказывается возможным автоматизировать при помощи алгоритма Ванга–Ландау [8].

2.3. Алгоритм Ванга–Ландау. Данный алгоритм [8] является самонастраивающейся процедурой организации марковского процесса, реализующего равномерное блуждание по пространству энергий в генерируемой выборке.

Организация блуждания по алгоритму Метрополиса приводит к канонической функции распределения $p(E) = \Omega(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$, где $\Omega(E)$ — плотность числа состояний. Если больцмановский фактор $\exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$ заменить весом $\frac{1}{\Omega(E)}$, естественный вес $\Omega(E)$ будет полностью скомпенсирован и распределение по энергиям $p(E)$ будет равномерным. Однако плотность числа состояний *a priori* неизвестна.

Для реализации алгоритма рассматриваемый промежуток энергии $E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$ делится на конечное число интервалов N_b . Вводятся два массива размером N_b каждый. Один предназначается для весов Ω_m , второй — для чисел посещений n_m . Все начальные значения Ω_m полагаются равными единице, значения n_m — нулю. После этого начинается блуждание по области конфигурационного пространства, отвечающей выбранному диапазону энергии.

Пусть E_1 и E_2 — энергии исходного и пробного состояний соответственно. Каждое из этих значений попадает в какой-то интервал, а каждому из них соответствует какой-то индекс. Вероятность перехода имеет вид $P(E_1 \rightarrow E_2) = \min\left(1, \frac{\Omega_m(E_1)}{\Omega_m(E_2)}\right)$. Независимо от того, состоялся переход или нет, значение Ω_m , соответствующее текущему значению энергии, умножается на модифицирующий фактор f , т.е. Ω_m заменяется на $f\Omega_m$, а счетчик посещений n_m увеличивается на 1.

Чтобы избежать работы с большими числами, удобно ввести функцию $S(E) = \ln \Omega(E)$. Тогда вместо массива для Ω_m вводится массив сумматоров для S_m и вероятность перехода будет выглядеть так:

$$P(E_1 \rightarrow E_2) = \min\left(1, \exp(S_m(E_1) - S_m(E_2))\right). \quad (19)$$

Модификация значения S_m сведется к добавлению $\Delta S = \ln f$. Начальное значение модифицирующего фактора может быть взято равным, например, $e = 2.7182\dots$ [8].

С фиксированным значением f выполняется серия шагов такого размера, чтобы гистограмма n_m стала “плоской”. После выполнения этой серии модифицирующий фактор уменьшается по некоторому закону, например $f \rightarrow \sqrt{f}$ (возможно использовать любую функцию, монотонно убывающую к единице), счетчики посещений n_m обнуляются и запускается новая серия. После ее выполнения описанные выше действия повторяются.

Процедура продолжается до тех пор, пока модифицирующий фактор не станет меньше некоторого заранее определенного значения. Очевидно, что модифицирующий фактор действует как параметр, определяющий точность полученных значений плотностей состояний. После этого выполняется несколько серий с фиксированными значениями величин S_m . Кроме того, очевидно, что невозможно получить идеально равномерное блуждание, поэтому под плоской гистограммой понимается гистограмма, в которой значения n_m для любого t отличаются от среднего значения $\langle n_m \rangle$ не более, чем на несколько процентов.

3. Алгоритм Ванга–Ландау в методе расширенных ансамблей. В данной работе алгоритм Ванга–Ландау используется для настройки балансирующих параметров η_m в методе расширенных ансамблей. Следуя методу расширенных ансамблей, мы строим цепочку гамильтонианов, например по закону (16). Вводим два массива размером $M + 1$: один для весов S_m , второй для чисел посещения n_m . В начале расчета все S_m и n_m берутся равными нулю.

Согласно методу расширенных ансамблей, мы организуем МК-блуждание путем реализации двух типов шагов.

Шаги, осуществляющие попытку перехода между подансамблями, реализуются следующим образом. Случайно выбирается “направление” — в сторону увеличения или уменьшения индекса подансамбля на 1. В том случае если мы находимся в крайнем подансамбле с индексом 0 или M , то достоверно совершается попытка перейти в единственный соседний подансамбль с индексом 1 или $M - 1$ соответственно.

Вероятность перехода определяется выражением

$$p_{m \rightarrow m \pm 1} = \min(1, \exp(h_{m \pm 1} - h_m - S_{m \pm 1} + S_m)). \quad (20)$$

Вне зависимости от того, состоялся переход или нет, в счетчик n_m , соответствующий текущему подансамблю, добавляется единица, а значение S_m увеличивается на величину ΔS . Таким образом, последним действием мы уменьшаем вес текущего подансамбля; следовательно, уменьшается и вероятность попасть в него в следующий раз. Сравнивая (18) и (20), нетрудно убедиться, что балансирующие параметры η_m в точности совпадают с параметрами S_m алгоритма Ванга–Ландау.

Так как каждый из крайних подансамблей (m равно 0 или M) граничит только с одним подансамблем (m равно 1 или $M - 1$ соответственно), а все остальные с двумя (с индексами $m \pm 1$), очевидно, что при попадании в крайний подансамбль к значениям элементов массивов n_m и S_m необходимо добавлять удвоенные добавки.

Изменение конфигурации производится при неизменном значении λ_m . Тип шага выбирается случайно, но между ними сохраняется определенная пропорция.

Описанным образом выполняется серия из, как правило, порядка $10^6 \div 10^7$ шагов. Такого количества шагов вполне достаточно, по крайней мере в случае рассматриваемых здесь систем, для формирования равномерного распределения чисел посещения подансамблей n_m .

С использованием текущих значений S_m и n_m вычисляется статистическая сумма исследуемой системы с индексом M , чтобы построить кривую сходимости для оценки погрешности и достаточности числа шагов.

Далее величина ΔS домножается на константу $a < 1$ и запускается новая серия, тем самым начинается более тонкая настройка балансирующих параметров.

4. Применение к задачам квантовой статистики. Для начала мы рассмотрели модельную систему, для которой существует аналитическое решение. Мы попытались воспроизвести известные результаты для оценки возможностей нашего подхода.

Для системы невзаимодействующих частиц в гармоническом поле хорошо известны точные формулы для статистической суммы и энергии. Статистическая сумма N различных частиц в d -мерном пространстве выражается формулой

$$Z_N^{(D)} = Z_{1N} = (Z_1)^N = \left(2 \operatorname{sh} \frac{b}{2}\right)^{-dN}. \quad (21)$$

В случае отсутствия взаимодействия между частицами статистическая сумма $Z_{(P)}^{(D)}$ распадается на произведение статистических сумм циклов. Выражение для статистической суммы одного цикла длиной ν выглядит следующим образом (см. [6]):

$$Z_\nu(b) = Z_1(\nu b) = \left(2 \operatorname{sh} \frac{\nu b}{2}\right)^{-d}. \quad (22)$$

Выражения для энергий получаются из соотношения Гиббса–Гельмгольца (13): $E_{1N} = \frac{dN}{2} \operatorname{cth} \frac{b}{2}$ и $E_\nu = \frac{d}{2} \operatorname{cth} \frac{\nu b}{2}$. Кроме того, как показано в работе [9], интегралы для конечномерных выражений статистических сумм систем невзаимодействующих частиц в гармоническом поле могут быть вычислены аналитически. Например, для $N = 2$ и $n = 5$ имеем

$$\begin{aligned} Z_{(1^2)}^{(n=5)} &= (32C^5 - 40C^3 + 10C - 2)^{-d}, \\ Z_{(2)}^{(n=5)} &= (1024C^{10} - 2560C^8 + 2240C^6 - 800C^4 + 100C^2 - 4)^{-d/2}, \\ E_{(1^2)}^{(n=5)} &= d \frac{160C^4 - 120C^2 + 10}{32C^5 - 40C^3 + 10C - 2} \frac{b}{5^2} (1 + 2\alpha), \\ Z_{(2)}^{(n=5)} &= d \frac{10240C^9 - 20480C^7 + 13440C^5 - 3200C^3 + 200C}{1024C^{10} - 2560C^8 + 2240C^6 - 800C^4 + 100C^2 - 4} \frac{b}{5^2} (1 + 2\alpha), \end{aligned}$$

где $C = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{b}{5}\right)^2 (1 + \alpha)$ и $\alpha = \frac{1}{12} \left(\frac{b}{5}\right)^2$ — поправка Такахаши–Имады [10]. Так как в расчетах мы пользовались пятивершинным приближением, которое является недостаточным для моделирования квантовых систем при низких температурах, мы учли поправку α .

4.1. Система двух квантовых частиц без взаимодействия. Рассмотрим систему, состоящую из двух тождественных невзаимодействующих фермионов без спина в трехмерном гармоническом поле, находящуюся в термостате при обратной температуре β . Статистическая сумма такой системы выражается формулой (12). Мы можем представить ее в виде

$$Z_2^{(A)}(\beta) = Z_{(1^2)}(\beta) f_2(\beta), \quad (23)$$

где

$$f_2(\beta) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{Z_{(2)}(\beta)}{Z_{(1^2)}(\beta)} \right]. \quad (24)$$

Статистическая сумма $Z_{(1^2)}(\beta)$ — это статистическая сумма системы двух различных частиц, а фактор $f_2(\beta)$ описывает обменное взаимодействие. Энергия такой системы дается формулой (14) и может быть записана в аналогичной форме (т.е. в форме произведения энергии системы двух различных частиц на фактор, описывающий обменное взаимодействие):

$$E_2^{(A)}(\beta) = E_{(1^2)}(\beta) f_2^{(E)}(\beta), \quad (25)$$

где

$$f_2^{(E)}(\beta) = \frac{1 - \frac{E_{(2)}(\beta)}{E_{(1^2)}(\beta)} \frac{Z_{(2)}(\beta)}{Z_{(1^2)}(\beta)}}{1 - \frac{Z_{(2)}(\beta)}{Z_{(1^2)}(\beta)}}. \quad (26)$$

Мы применили вышеизложенный метод расширенных ансамблей с настройкой балансирующих параметров по алгоритму Ванга–Ландау для вычисления отношения статистических сумм $\frac{Z_{(2)}(\beta)}{Z_{(1^2)}(\beta)}$.

Была построена цепочка гамильтонианов (16), в которой выражения для h_0 и h_M в виде

$$h_0 = h_M = -\frac{n}{b} \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_{ki} - \mathbf{x}_{k(i+1)})^2 - \frac{b}{n} (1 + \alpha) \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_{ki}^2 \quad (27)$$

отличаются только условиями соединения $\mathbf{x}_{k(n+1)} \equiv \mathbf{x}_{k1}$ для h_0 и $\mathbf{x}_{1(n+1)} \equiv \mathbf{x}_{21}$, $\mathbf{x}_{2(n+1)} \equiv \mathbf{x}_{11}$ для h_M (эти выражения записаны в безразмерных переменных $\mathbf{x} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \mathbf{r}$, $b = \hbar\omega\beta$, $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbf{r}^2$, α — поправка Такахаши–Имады). Как видно из выражения (27), мы осуществляем расширение ансамбля по перестановке и “превращаем” систему двух различных частиц в систему цикла из двух частиц. В построенном расширенном ансамбле было организовано МК-блуждание. Для изменения конформации использовались шаги двух видов: первый — смещение одной случайно выбранной вершины и второй — смещение всей траектории как целого. Каждая компонента вектора смещения равномерно выбиралась из отрезка $[-dx, dx]$. Таким образом, вектор смещения равномерно выбирался из кубика с гранью $2dx$. В конце каждой серии шагов масштаб шага dx корректировался для поддержания процента удачных переходов в пределах 50–70%. Для использованных видов шагов масштабы шага являлись независимыми. Соотношение видов шагов выбиралось из расчета n шагов первого вида на один шаг второго. Так как в данном случае значения статистических сумм отличаются весьма незначительно (в интересующей нас области низких температур $b \geq 6$ менее чем на 1%), то расширенный ансамбль мы составили всего из двух подансамблей h_0 и h_M .

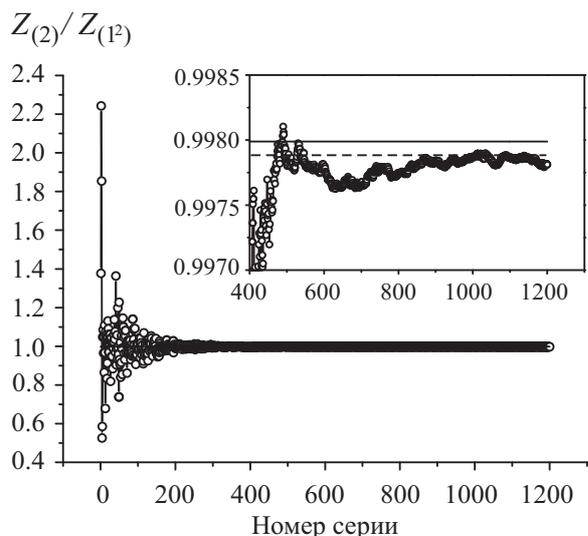
Введение дополнительных подансамблей приводило к снижению точности расчетов. Соответственно, шаг, реализующий смену подансамбля, сводился к попытке перейти в другой подансамбль. Попытка смены подансамбля предпринималась в среднем один раз на десять шагов изменения конфигурации. Начальное значение величины ΔS бралось равным 0,01. В конце свипа величина ΔS домножалась на $a = 0,95$. Такой выбор параметров был продиктован следующими соображениями. Использование больших значений ΔS

приводило к очень большим флуктуациям и выливалось в систематические ошибки, тогда как использование меньших значений приводило к ухудшению сходимости. Длина расчета составляла 1200 свинов по 2 500 000 шагов.

Так как блуждание внутри подансамблей осуществляется по алгоритму Метрополиса (см. (20)), то в процессе моделирования можно рассчитать канонические средние. Энергии $E_{(1^2)}$ и $E_{(2)}$ мы рассчитывали с помощью вириального эstimатора энергии [11]

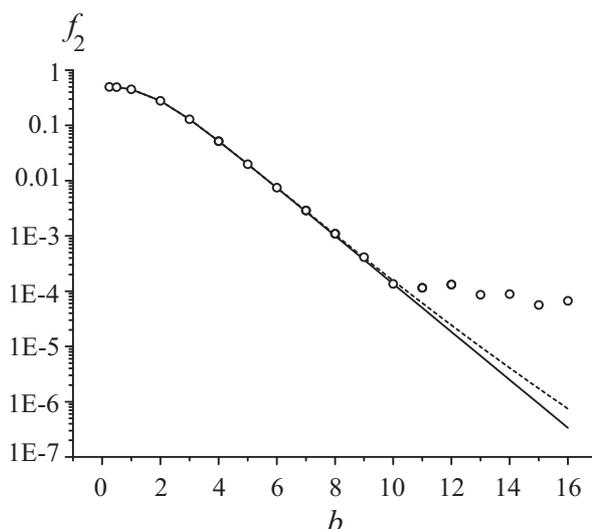
$$\varepsilon_V = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[V(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{x}_i \frac{\partial V(\mathbf{x}_i)}{\partial \mathbf{x}_i} \right]. \tag{28}$$

Полученные значения сравнивались с суммой значений примитивного эstimатора кинетической энергии и эstimатора потенциальной энергии (выражения не приводятся).



—○— результаты расчёта
 — по точным формулам
 - - - по формулам конечномерного приближения

Рис. 1. Типичная кривая сходимости. Зависимость значения отношения статистических сумм от номера серии. Расчет для $b = 8$



—○— результаты расчёта
 — по точным формулам
 - - - по формулам конечномерного приближения

Рис. 2. Фактор f_2 (см. (24)) системы двух тождественных невзаимодействующих фермионов без спина в гармоническом поле в зависимости от обратной температуры

На рис. 1 представлена типичная кривая сходимости расчета, полученная при $b = 8$. Учитывая выбранный нами закон уменьшения добавки ΔS , примерно к 600-й серии ошибка, связанная с точностью определения балансируемых параметров S_m , становится меньше ошибки, связанной с точностью вычисления вероятности посещения подансамблей, и можно считать, что ΔS равна нулю. Тем самым, вторую половину расчета мы эффективно выполняем с фиксированными значениями балансируемых параметров, набирая статистику. По результатам последних 600 серий мы оцениваем статистическую погрешность результатов расчета.

Результаты расчетов представлены в табл. 1. Для каждого значения температуры проводился отдельный расчет. Как следует из таблицы, нам удалось вычислить отношения статистических сумм с точностью порядка $0,01 \div 0,001 \%$. Благодаря использованию поправки Такахаши–Имады ошибка конечномерного приближения оказывается меньше статистической ошибки расчета.

Пользуясь полученными отношениями статистических сумм, мы построили зависимость фактора f_2 (см. (24)), описывающего обменное взаимодействие, от обратной температуры b (рис. 2). Вплоть до значения $b = 10$ точки замечательно совпадают с аналитическими результатами. При значениях $b > 10$ наблюдается отклонение, связанное с тем, что отличие отношений статистических сумм от единицы становится меньше ошибки расчетов.

В табл. 2 представлены полученные с помощью вириального эstimатора (28) отношения внутренних энергий $\frac{E_{(2)}}{E_{(1^2)}}$. Точность расчета составляет порядка $0,1 \div 0,01 \%$.

Таблица 1

Отношения статистических сумм двух перестановок системы двух неразличимых не взаимодействующих фермионов в трехмерном гармоническом поле $(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{cl}$ в сравнении с отношениями, полученными по точным формулам $(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{th}$ и формулам конечномерного приближения $(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{ex}$. Погрешность $\Delta(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})$ рассчитана по последним 600 сериям

b	$(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{cl}$	$\Delta(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})$	$(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{th}$	$(Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{ex}$	$1 - (Z_{(2)}/Z_{(1^2)})_{th}$
0,25	0,00192	$\pm 0,00002$	0,0019230	0,0019230	0,9980770
0,5	0,01468	$\pm 0,00006$	0,0146915	0,0146915	0,9853085
1	0,0984	$\pm 0,0002$	0,0986862	0,0986856	0,9013138
2	0,4422	$\pm 0,0005$	0,4417442	0,4417188	0,5582559
3	0,7422	$\pm 0,0007$	0,7415820	0,7414682	0,2584180
4	0,8961	$\pm 0,0004$	0,8959182	0,8957138	0,1040818
5	0,9605	$\pm 0,0003$	0,9603780	0,9601436	0,0396220
6	0,98523	$\pm 0,0002$	0,9852375	0,9850292	0,0147625
7	0,9942	$\pm 0,0001$	0,9945436	0,9943862	0,0054564
8	0,99779	$\pm 0,00007$	0,9979892	0,9978828	0,0020108
9	0,99913	$\pm 0,00008$	0,9992598	0,9991935	0,0007402
10	0,99969	$\pm 0,00003$	0,9997276	0,9996887	0,0002729
11	0,99966	$\pm 0,00008$	0,9998998	0,9998780	0,0001002
12	0,99965	$\pm 0,00007$	0,9999631	0,9999514	0,0000369
13	0,99978	$\pm 0,00004$	0,9999864	0,9999802	0,0000136
14	0,99980	$\pm 0,00003$	0,9999950	0,9999918	0,0000050
15	0,99986	$\pm 0,00004$	0,9999982	0,9999965	0,0000018
16	0,99984	$\pm 0,00003$	0,9999993	0,9999985	0,0000007

С использованием отношений энергий, приведенных в табл. 2, мы построили зависимость фактора $f_2^{(E)}$ (см. (26)), описывающего обменное взаимодействие, от обратной температуры b (рис. 3). Хорошее совпадение с точными кривыми наблюдается вплоть до $b = 7$. Для больших значений b разброс оказывается весьма значительным, так как в (26) мы выполняем деление чисел, посчитанных с ошибкой порядка их значения.

Однако можно вычислить внутреннюю энергию без использования эstimаторов. Исходя из соотношения Гиббса–Гельмгольца, конечно-разностная логарифмическая производная от статсуммы $Z_2^{(A)}$ по температуре, взятая со знаком минус, даст нам зависимость внутренней энергии $E_2^{(A)}$ от температуры. При понижении температуры ($b \rightarrow \infty$) система будет “сваливаться” в основное состояние, поэтому кривая $E_2^{(A)}(b)$ должна выйти на уровень, отвечающий уровню энергии основного состояния. На рис. 4 представлена зависимость внутренней энергии $E_2^{(A)}$ от температуры, полученная этим способом. Как следует из рисунка, вплоть до $b = 10$ наблюдается замечательное совпадение результатов расчета с точными значениями.

4.2. Системы квантовых частиц со взаимодействием. Теперь перейдем к рассмотрению систем со взаимодействием. Рассмотрим систему двух тождественных фермионов в гармоническом поле, между

Таблица 2

Отношения внутренних энергий двух перестановок системы двух неразличимых не взаимодействующих фермионов в трехмерном гармоническом поле $(E_{(2)}/E_{(1^2)})_{cl}$ в сравнении с отношениями, полученными по точным формулам $(E_{(2)}/E_{(1^2)})_{th}$ и формулам конечномерного приближения $(E_{(2)}/E_{(1^2)})_{ex}$. Погрешность $\Delta(E_{(2)}/E_{(1^2)})$ рассчитана по последним 600 сериям

b	$(E_{(2)}/E_{(1^2)})_{cl}$	$\Delta(E_{(2)}/E_{(1^2)})$	$(E_{(2)}/E_{(1^2)})_{th}$	$(E_{(2)}/E_{(1^2)})_{ex}$
0,25	0,5092	$\pm 0,002$	0,5077318	0,5077318
0,5	0,5325	$\pm 0,001$	0,5299926	0,5299926
1	0,6102	$\pm 0,004$	0,6067761	0,6067757
2	0,7918	$\pm 0,002$	0,7900128	0,7900017
3	0,9105	$\pm 0,0009$	0,9096467	0,9096048
4	0,96485	$\pm 0,0003$	0,9646746	0,9646039
5	0,98678	$\pm 0,0002$	0,9867039	0,9866247
6	0,99502	$\pm 0,0002$	0,9950670	0,9949972
7	0,99806	$\pm 0,0001$	0,9981796	0,9981270
8	0,99920	$\pm 0,0002$	0,9993295	0,9992940
9	0,99972	$\pm 0,0001$	0,9997532	0,9997311
10	0,99984	$\pm 0,0001$	0,9999092	0,9998962
11	0,99991	$\pm 0,0002$	0,9999666	0,9999593
12	0,99991	$\pm 0,0002$	0,9999877	0,9999838
13	0,99993	$\pm 0,0002$	0,9999955	0,9999934
14	0,99999	$\pm 0,0001$	0,9999983	0,9999973
15	0,99996	$\pm 0,0001$	0,9999994	0,9999988
16	0,99999	$\pm 0,0001$	0,9999998	0,9999995

которыми существует кулоновское отталкивание. Перепишем статистическую сумму (12) в виде

$$Z_2^{(A)} = \frac{1}{2} \left[Z_{1^2}^0 \frac{Z_{1^2}}{Z_{1^2}^0} - Z_2^0 \frac{Z_2}{Z_2^0} \right], \tag{29}$$

где ноликами обозначены соответствующие статсуммы систем без межчастичного взаимодействия. Энергию в этом случае запишем следующим образом:

$$E_2^{(A)} = \frac{E_{1^2} Z_{1^2}^0 \frac{Z_{1^2}}{Z_{1^2}^0} - E_2 Z_2^0 \frac{Z_2}{Z_2^0}}{Z_{1^2}^0 \frac{Z_{1^2}}{Z_{1^2}^0} - Z_2^0 \frac{Z_2}{Z_2^0}}. \tag{30}$$

Теперь мы ищем отношение статистической суммы системы со взаимодействием к статистической сумме системы без взаимодействия для каждого класса перестановки. В случае двух частиц для циклических структур 1^2 и 2 были проведены два независимых расчета.

Для нейтрализации сингулярности истинный кулоновский потенциал мы заменили потенциалом вида

$$V(r) = \frac{1 - \exp(-r/r_0)}{r}. \tag{31}$$

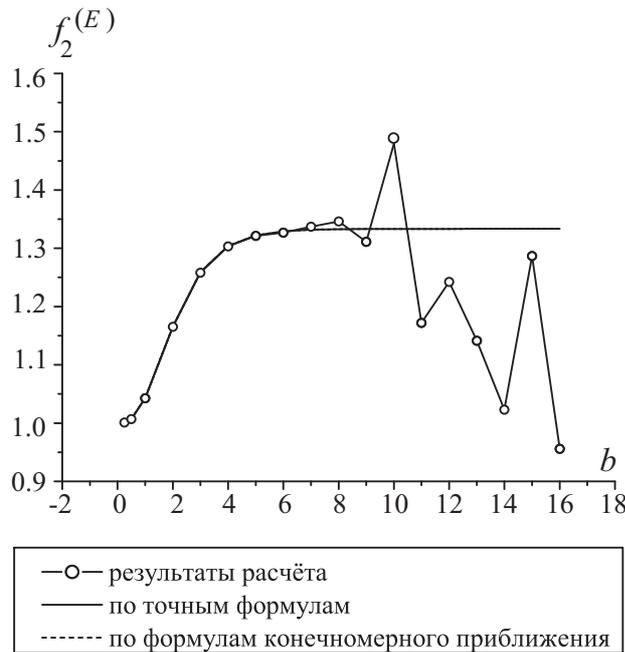


Рис. 3. Фактор $f_2^{(E)}$ системы двух тождественных невзаимодействующих фермионов без спина в гармоническом поле в зависимости от обратной температуры. Кривые, построенные по точным формулам и по формулам конечномерного приближения, совпадают

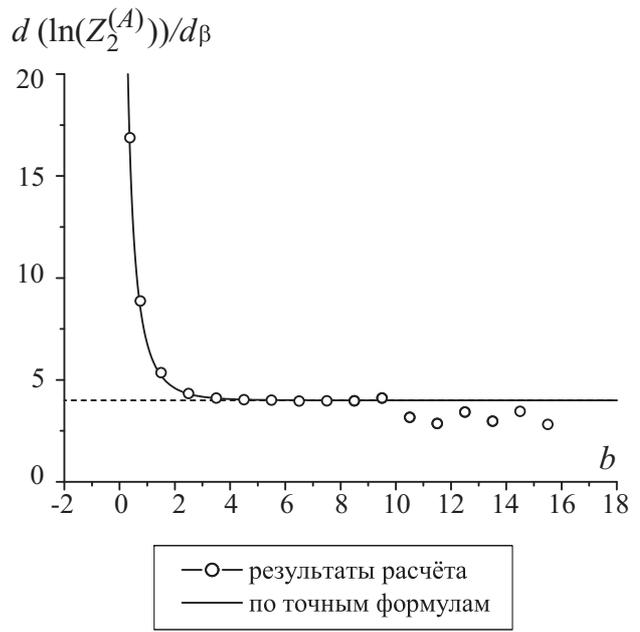


Рис. 4. Значения энергии $E_2^{(A)}$ системы двух тождественных невзаимодействующих фермионов без спина в гармоническом поле в зависимости от обратной температуры, полученные путем конечно-разностного дифференцирования (кружки). Сплошная линия — кривая, построенная по точным формулам. Пунктирной линией показан уровень энергии основного состояния $E = 4$

Значение $r_0 = 0,001$ выбиралось с целью минимизировать отличие от истинного потенциала, но в то же время избежать переполнения.

Мы построили две цепочки гамильтонианов (16)

$$h_m = -\frac{n}{b} \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_{ki} - \mathbf{x}_{k(i+1)})^2 - \frac{b}{n} \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n V(\mathbf{x}_{ki}), \quad V(\mathbf{x}_{ki}) = \mathbf{x}_{ki}^2 + \frac{\lambda_m}{2} \sum_{j \neq k} V(|\mathbf{x}_{ki} - \mathbf{x}_{ji}|),$$

записанные в безразмерных переменных (см. (27)), где $\omega = \frac{m\epsilon^4}{2\hbar^3}$ и e — заряд электрона. Эти цепочки отличаются условиями замыкания: $\mathbf{x}_{k(N+1)} \equiv \mathbf{x}_{k1}$ для случая двух различных частиц и $\mathbf{x}_{1(N+1)} \equiv \mathbf{x}_{21}$, $\mathbf{x}_{2(N+1)} \equiv \mathbf{x}_{11}$ для случая цикла из двух частиц. Мы использовали десятивершинное приближение. Число подансамблей в расширенном ансамбле равнялось 10.

Для изменения конфигурации использовались такие же виды шагов, как и в случае системы без взаимодействия. Соотношение шагов первого и второго вида составляло 10 к 1. Вероятности реализации шагов изменения конфигурации и шагов смены подансамбля составляли 0,9 и 0,1 соответственно. Начальное значение величины ΔS бралось равным 0,01. Длина серии составляла 2 000 000 шагов. В конце серии величина ΔS домножалась на 0,975. Число серий равнялось 1000.

Энергии $E_m^{(1^2)}$ и $E_m^{(2)}$ мы рассчитывали с помощью вириального эстиматора энергии (28).

Подставляя рассчитанные отношения статистических сумм в выражение (29) и пользуясь (21) и (22), получаем зависимости от температуры для статсумм $Z_2^{(A)}$ систем двух неразличимых бесспиновых фермионов с кулоновским отталкиванием в гармоническом поле. На рис. 5 показаны кривые для $\lambda = 0$, $\lambda = 0,59$, $\lambda = 1$ для случая $d = 1$. В случае $d = 3$ результаты выглядят очень сходным образом и не приводятся. Так как при $\lambda = 0$ отношения $\frac{Z_{(1^2)}}{Z_{(1^2)}^0}$ и $\frac{Z_{(2)}}{Z_{(2)}^0}$ тождественно равны 1, фактически статистическая сумма системы с обменом вычислялась по точным формулам, поэтому данная кривая может считаться опорной. При понижении температуры становится ощутимой проблема знаков: значения вкладов перестановок в

статистическую сумму становятся очень близки друг к другу, а их разность становится меньше точности расчетов. Включение взаимодействия заметно улучшает ситуацию. Если для случая $\lambda = 0,03$ полученные значения статсуммы начинают сильно флуктуировать при $b > 8$ (не приводятся), то в случае $\lambda = 1$ кривая получается достаточно гладкой вплоть до самых низких температур, когда $b = 16$.

На рис. 6 и 7 показаны результаты вычислений (только для $\lambda = 1$) для одномерного и трехмерного случаев энергий $E_2^{(A)}$ двумя способами — с использованием эstimаторов и путем конечно-разностного дифференцирования статсуммы. Как следует из рисунков, в области высоких температур оба способа дают прекрасно согласующиеся результаты. Однако при понижении температуры при использовании эstimаторов возникает систематическая ошибка (по-видимому, связанная с недостаточным числом вершин), приводящая к занижению значений энергий. В случае численного дифференцирования мы можем получить достаточно четкую оценку значения энергии основного состояния. Значения энергии основного состояния получились равными $E = 2,87$ в одномерном случае и $E = 4,73$ в трехмерном. Полученные значения оказываются больше соответствующих значений энергии $E = 2$ и $E = 4$ двух невзаимодействующих бесспиновых ферми-частиц в гармоническом поле вследствие включения кулоновского отталкивания. В одномерном случае имеется неплохое согласие

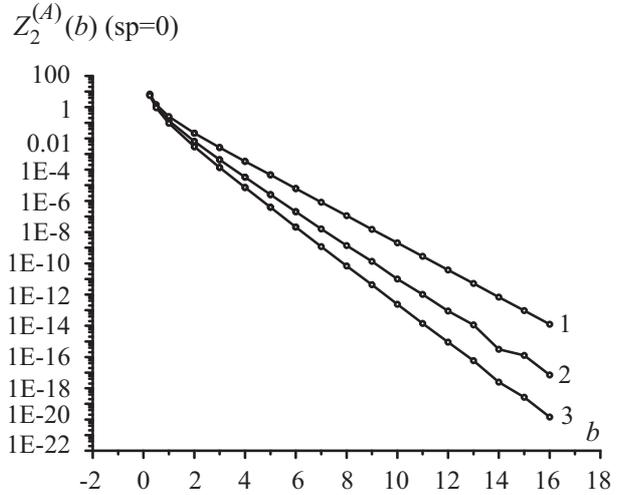


Рис. 5. Значения статистической суммы $Z_2^{(A)}$ системы двух тождественных фермионов без спина с кулоновским отталкиванием в одномерном гармоническом поле в зависимости от обратной температуры. Обозначения кривых: 1 — $\lambda = 0$; 2 — $\lambda = 0,59$; 3 — $\lambda = 1$

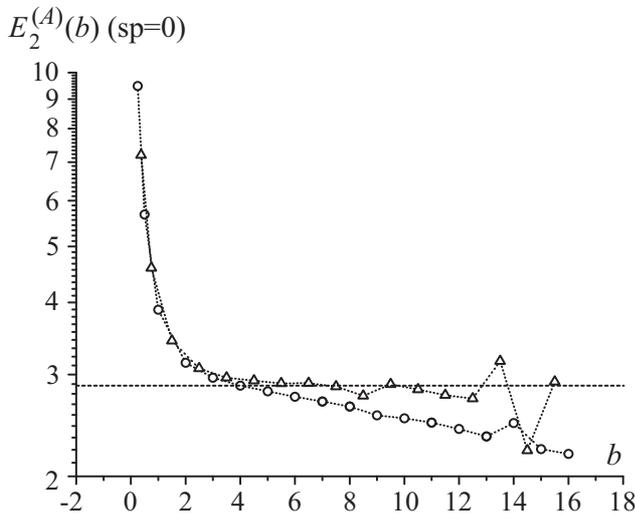


Рис. 6. Значения внутренней энергии $E_2^{(A)}$ системы двух тождественных фермионов без спина с кулоновским отталкиванием в одномерном гармоническом поле в зависимости от обратной температуры. Кружки — полученные усреднением вириального эstimатора (28), треугольники — полученные путем конечно-разностного дифференцирования статистической суммы

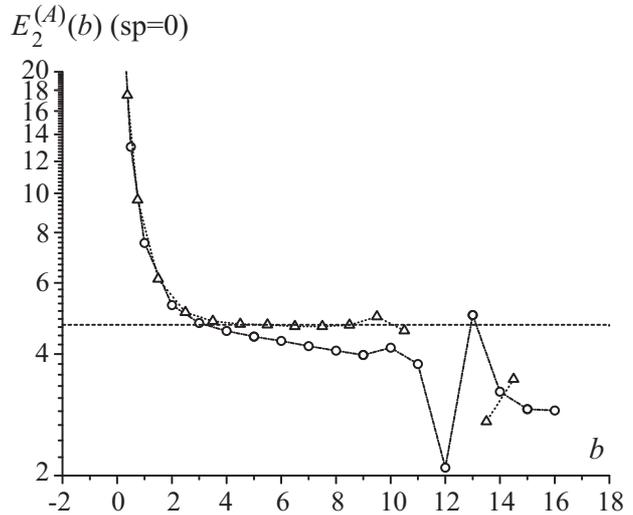


Рис. 7. Значения внутренней энергии $E_2^{(A)}$ системы двух тождественных фермионов без спина с кулоновским отталкиванием в трехмерном гармоническом поле в зависимости от обратной температуры. Кружки — полученные усреднением вириального эstimатора (28), треугольники — полученные путем конечно-разностного дифференцирования статистической суммы

результатов вычислений с данными, приведенными в статье [12], содержащей рассмотрение такой же модельной системы другими способами ($E = 2,67$). Имеющееся расхождение, по-видимому, также связано с малым числом вершин.

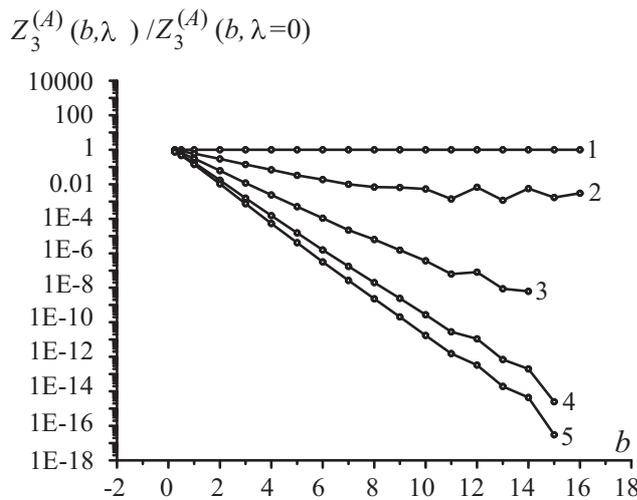


Рис. 8. Значения статистической суммы $Z_3^{(A)}$ системы трех тождественных фермионов со спином с кулоновским отталкиванием в трехмерном гармоническом поле в зависимости от обратной температуры. Обозначения кривых: 1 — $\lambda = 0$; 2 — $\lambda = 0,12$; 3 — $\lambda = 0,59$; 4 — $\lambda = 0,88$; 5 — $\lambda = 1$

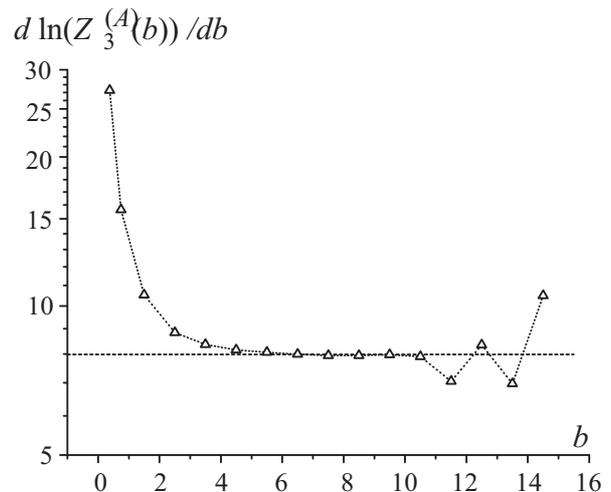


Рис. 9. Значения внутренней энергии $E_3^{(A)}$ системы трех тождественных фермионов со спином с кулоновским отталкиванием в трехмерном гармоническом поле в зависимости от обратной температуры, полученные конечно-разностным дифференцированием статистической суммы

Данные, полученные в результате моделирования, могут быть использованы для вычисления статсуммы и энергии системы со спином. Учет спина приводит к появлению спиновых множителей при статсуммах $Z_{(G)}^{(D)}$, что в случае двух частиц снимает проблему знаков. Кривые, описывающие зависимости статсуммы и энергии от температуры (не приводятся), получаются гладкими вплоть до самых низких значений температур. Описанный подход может быть очевидным образом распространен на системы из большего числа частиц. На рис. 8 показаны результаты расчетов статистической суммы $Z_3^{(A)}$ системы трех тождественных частиц со спином с кулоновским отталкиванием в трехмерном гармоническом поле в зависимости от температуры. Результаты представлены в форме отношения статистических сумм системы с обменом для $\lambda = 0$, $\lambda = 0,12$, $\lambda = 0,59$, $\lambda = 0,88$ и $\lambda = 1$ к соответствующим значениям статистических сумм системы тождественных частиц без взаимодействия ($\lambda = 0$). Здесь также было использовано десятивершинное приближение. Соотношения типов шагов, их полное число и другие параметры расчета были такими же, как и в случае двух частиц.

Наконец, на рис. 9 представлена зависимость энергии $E_3^{(A)}$ от обратной температуры, полученная конечно-разностным дифференцированием статистической суммы. Как видно из рисунка, кривая очень четко выходит на уровень, очевидно, соответствующий уровню основного состояния. Оценка значения энергии основного состояния получилась равной $E = 7,98$, что также больше значения энергии $E = 5,5$ основного состояния системы без взаимодействия.

5. Заключение. В настоящей работе метод расширенных ансамблей с настройкой балансирующих параметров по алгоритму Ванга–Ландау был использован для исследования равновесных свойств малых квантовых систем. Работоспособность данного подхода была продемонстрирована сначала на примере системы двух бесспиновых невзаимодействующих тождественных фермионов в гармоническом поле, для которой имеется аналитическое решение. Нам удалось с хорошей точностью воспроизвести известные результаты до достаточно низких значений температуры.

Далее метод был применен к изучению системы с кулоновским отталкиванием между частицами, для которой точного решения не существует. Включение взаимодействия ослабляет проблему знаков, и мы смогли получить гладкие кривые вплоть до самых низких значений температур: $b = 16$. Это позволяет нам путем конечно-разностного дифференцирования получить зависимость внутренней энергии от температуры, проследить выход кривой на горизонталь, тем самым убедиться в том, что система доходит до основного состояния, и получить оценку значения энергии этого состояния.

Развитый подход может быть использован для исследования систем, состоящих из большего числа квантовых частиц, с другими внешними потенциалами и характером взаимодействия.

Все расчеты были проведены на ПК Пентиум 4 (3ГГц). Время расчета для одного значения температуры составляло от нескольких десятков минут до нескольких часов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фейнман Р., Хиббс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968.
2. Takahashi M., Imada M. Monte Carlo calculation of quantum systems // J. Phys. Soc. Jpn. 1984. **53**, N 3. 963–974.
3. Newman W.H., Kuki A. Improved methods for path integral Monte Carlo integration in fermionic systems // J. Chem. Phys. 1992. **92**, N 2. 1409–1417.
4. Lyubartsev A.P., Vorontsov-Velyaminov P.N. Path-integral Monte Carlo method in quantum statistics for a system of N identical fermions // Phys. Rev. A. 1993. **48**, N 6. 4075–4083.
5. Фейнман Р. Статистическая механика. Курс лекций. М.: Мир. 1975.
6. Vorontsov-Velyaminov P.N., Nesvit M.O., Gorbunov R.I. Bead-Fourier path-integral Monte Carlo method applied to systems of identical particles // Phys. Rev. E. 1997. **55**, N 2. 1979–1997.
7. Lyubartsev A.P., Martsinovski A.A., Shevkunov S.V., Vorontsov-Velyaminov P.N. New approach to Monte Carlo calculation of the free energy: Method of expanded ensembles // J. Chem. Phys. 1992. **96**, N 3. 1776–1783.
8. Wang F., Landau D.P. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states // Phys. Rev. Lett. 2001. **86**, N 10. 2050–2053.
9. Vorontsov-Velyaminov P.N., Lyubartsev A.P. Entropic sampling in the path integral Monte Carlo method // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. **36**, N 1. 1–9.
10. Takahashi M., Imada M. Monte Carlo calculation of quantum systems. II. Higher order correction // J. Phys. Soc. Jpn. 1984. **53**, N 11. 3765–3769.
11. Herman M.F., Bruskin E.J., Berne B.J. On path integral Monte Carlo simulations // J. Chem. Phys. 1982. **76**, N 10. 5150–5155.
12. Поляков Е.А., Воронцов-Вельяминов П.Н. Квантовый газ во внешнем поле при конечных температурах. Точное выражение для плотности и возбужденные состояния // Вычислительные методы и программирование. 2007. **8**, № 2. 185–202 (<http://num-meth.srcc.msu.ru/>).

Поступила в редакцию
31.03.2008
