Chocoの概要

Dec 9th, 2013

概要

- 連続空間のハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=0}^{N} (\lambda \nabla_i^2 - V(\boldsymbol{r}_i)) + \sum_{\langle i,j \rangle} U(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|),$$

$$\hat{\mathcal{K}} = \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}$$

- 時間方向も空間方向も連続
- 見えてる粒子（N_c<=N）と見えている世界線（ $N_w=N_c-\Sigma_k c_k$）と見えてない粒子（N-N_c個）がある。
- 配位空間のアップデートは次のプロセスからなる。
  - オペレーター（バーテックス）数の更新
  - 虚時間方向のワインディングナンバー{c_k}の更新
  - 見えている世界線数N_wの更新
- バーテックス間は積分されていている。
- バーテックスの位置は特定されている。-> MCサンプルに任せる
- 和をどこまで残すか検討する必要あり？比をとるのが大変。

やること

- 調和振動子ポテンシャル中のN=1の問題を計算できるか確かめる。
  - V(r)項からくるオンサイトバーテックスだけを挿入する。

$$\mathcal{H} = -\sum_i (\lambda \nabla_i^2 - V(r))$$

$$V(r) = \Omega r^2$$

Hamiltonian

$$H = H^{kin} + H^{po} + H^{\mathrm{int}}$$

$$H^{kin} = \sum_{i=0}^{N-1} H_i^{kin} = -\sum_{i=0}^{N-1} \lambda \nabla_i^2, \ \ H^{po} = \sum_{i=0}^{N-1} H_i^{po} = \sum_{i=0}^{N-1} V(r_i), H^{\mathrm{int}} = \sum_{(i>j)} H_{i,j}^{\mathrm{int}} = \sum_{(i>j)} U\left(\left|r_i - r_j\right|\right),$$

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$$

$$\Xi = Tr[e^{-\beta K}]$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{\psi_N\}} \left\langle \psi_N \middle| e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \middle| \psi_N \right\rangle$$

$$\approx \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\beta\mu N} \sum_{\{\psi_N\}} \left\langle \psi_N \middle| e^{-\beta\hat{H}} \middle| \psi_N \right\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\beta\mu N} Z^{(N)}$$

$$\left|\psi_N\right\rangle = \left|\boldsymbol{r}_0, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-1}\right\rangle$$

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_{\{\psi\}} \left\langle \psi \left| e^{-\beta[H^{kin}+H^{po}+H^{\mathrm{int}}]} \right| \psi \right\rangle,$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \lim_{N_\tau\to\infty} \sum_{\{\psi_t\}} \prod_{t=0}^{N_\tau-1} \left\langle \psi_t \left| e^{-\Delta\tau H^{kin}} e^{-\Delta\tau H^{po}} e^{-\Delta\tau H^{\mathrm{int}}} \right| \psi_{t+1} \right\rangle,$$

$$\left(\psi_{N_\tau} = \psi_0, \Delta\tau = \beta / N_\tau\right)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \lim_{N_\tau\to\infty} \sum_{\{\psi_{ti}\}} \prod_{t=0}^{N_\tau-1}$$

$$\prod_{i=0}^{N-1} \left\langle \psi_{t\,i} \left| e^{-\Delta\tau H_i^{kin}} \right| \psi_{t\,i+1} \right\rangle \times \prod_{i=0}^{N-1} \left\langle \psi_{t\,N} \left| 1 - \Delta\tau H_i^{po} \right| \psi_{t\,N} \right\rangle \prod_{c(i>j)=0}^{N_c-1} \left\langle \psi_{t\,N} \left| 1 - \Delta\tau H_{i,j}^{\mathrm{int}} \right| \psi_{t\,N} \right\rangle$$

$$\left(\begin{array}{l} \left|\psi_{t\,0}\right\rangle = \left|\psi_t\right\rangle, \\ \left|\psi_{t\,N}\right\rangle = \left|\psi_{t+1}\right\rangle, N_c = \dfrac{N(N-1)}{2} \end{array} \right)$$

$\boldsymbol{r}_i$に変更を加えることができるのは$H^{kin}{}_i$のみ

$$\left\langle \psi_{t\,i} \middle| e^{-\Delta\tau H_i^{kin}} \middle| \psi_{t\,i+1} \right\rangle = (4\pi\lambda\Delta\tau)^{-d/2} \exp\left[-\frac{\left\{ \boldsymbol{r}_{t+1\,i} - \boldsymbol{r}_{t\,i} \right\}^2}{4\lambda\Delta\tau} \right].$$

$$\left| \psi_t \right\rangle = \left| \boldsymbol{r}_{t\,0} \ldots \boldsymbol{r}_{t\,N-1} \right\rangle,$$

$$\left| \psi_{t\,i} \right\rangle = \left| \boldsymbol{r}_{t+1\,0} \ldots \boldsymbol{r}_{t+1\,i-1}, \boldsymbol{r}_{t\,i} \ldots \boldsymbol{r}_{t\,N-1} \right\rangle,$$

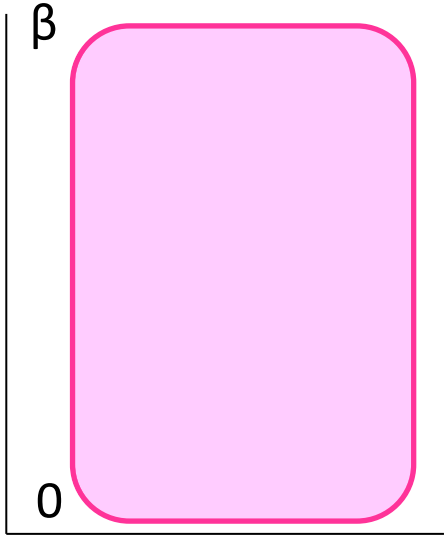
$$e^{-\Delta\tau H_i^{kin}} \left| \psi_{t\,i+1} \right\rangle = e^{-\Delta\tau H_i^{kin}} \left| \boldsymbol{r}_{t+1\,0} \ldots, \boldsymbol{r}_{t+1\,i-1}, \boxed{\boldsymbol{r}_{t+1\,i}}, \boldsymbol{r}_{t\,i+1} \ldots \boldsymbol{r}_{t\,N-1} \right\rangle$$

$$= (4\pi\lambda\Delta\tau)^{-d/2} \exp\left[-\frac{\left\{ \boldsymbol{r}_{t+1\,i} - \boldsymbol{r}_{t\,i} \right\}^2}{4\lambda\Delta\tau} \right] \left| \boldsymbol{r}_{t+1\,0} \ldots, \boldsymbol{r}_{t+1\,i-1}, \boxed{\boldsymbol{r}_{ti}}, \boldsymbol{r}_{t\,i+1} \ldots \boldsymbol{r}_{t\,N-1} \right\rangle$$

$$
\begin{aligned}
\Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \lim_{N_\tau\to\infty} \sum_{\{\psi_{ti}\}} \prod_{t=0}^{N_\tau-1} \\
&\quad \prod_{i=0}^{N-1}\left[\left(4\pi\lambda\Delta\tau\right)^{-d/2}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{r}_{t+1i}-\boldsymbol{r}_{ti}\right)^2}{4\lambda\Delta\tau}\right]\right] \\
&\quad \times\prod_{i=0}^{N-1}\left\langle\psi_{tN}\left|\sum_{G_{ti}^{po}}\left(-\Delta\tau H_i^{po}\right)^{G_{ti}^{po}}\right|\psi_{tN}\right\rangle \prod_{c(i>j)=0}^{N_c-1}\left\langle\psi_{tN}\left|\sum_{G_{tc}^{\mathrm{int}}}\left(-\Delta\tau H_{i,j}^{\mathrm{int}}\right)^{G_{tc}^{\mathrm{int}}}\right|\psi_{tN}\right\rangle, \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \lim_{N_\tau\to\infty} \sum_{\{\psi_{ti}\}} \sum_{\{G_{ti}^{po}\},\{G_{tc}^{\mathrm{int}}\}} \prod_{t=0}^{N_\tau-1} \\
&\quad \prod_{i=0}^{N-1}\left[\left(4\pi\lambda\Delta\tau\right)^{-d/2}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{r}_{t+1i}-\boldsymbol{r}_{ti}\right)^2}{4\lambda\Delta\tau}\right]\right] \\
&\quad \times\prod_{i=0}^{N-1}\left\langle\psi_{t+1}\left|\left(-\Delta\tau H_i^{po}\right)^{G_{ti}^{po}}\right|\psi_{t+1}\right\rangle \prod_{c(i>j)=0}^{N_c-1}\left\langle\psi_{t+1}\left|\left(-\Delta\tau H_{i,j}^{\mathrm{int}}\right)^{G_{tc}^{\mathrm{int}}}\right|\psi_{t+1}\right\rangle \\
&= \lim_{N_\tau\to\infty} \sum_{\{G_{ti}^{po}\},\{G_{tc}^{\mathrm{int}}\}} W(\{G_{ti}^{po}\},\{G_{tc}^{\mathrm{int}}\})
\end{aligned}
$$

N=1ですべてのG^{po},G^{int}0ときの重みのとき

- 空間方向に対する積分を実行



$$W\left(\left\{G_{t\,i}^{po}=0\right\},\left\{G_{t\,c}^{\mathrm{int}}=0\right\}\right)$$

$$=\int_0^L d\boldsymbol{r}_0\,\frac{(4\pi\lambda\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}}\exp\left(-\frac{(\boldsymbol{a}L+\boldsymbol{r}_0-\boldsymbol{r}_0)^2}{4\lambda\beta}\right),$$

$$=(4\pi\lambda\beta)^{-d/2}\sum_{\boldsymbol{a}}\exp\left(-\frac{(\boldsymbol{a}L)^2}{4\lambda\beta}\right)$$

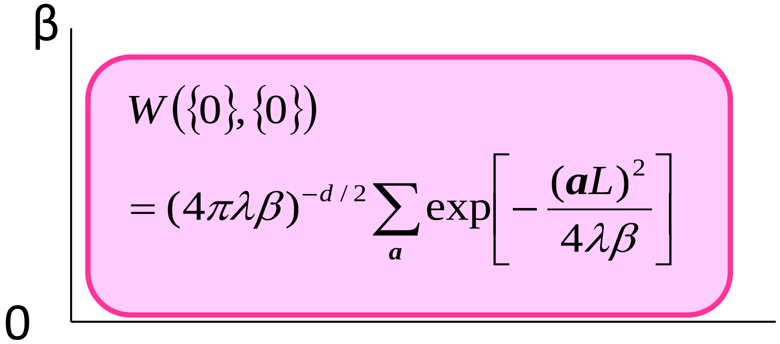
a:空間方向のワインディングナンバー

N=1でG^poが一つだけ入っているとき

この場合、Nc<=N, Nc=Nw

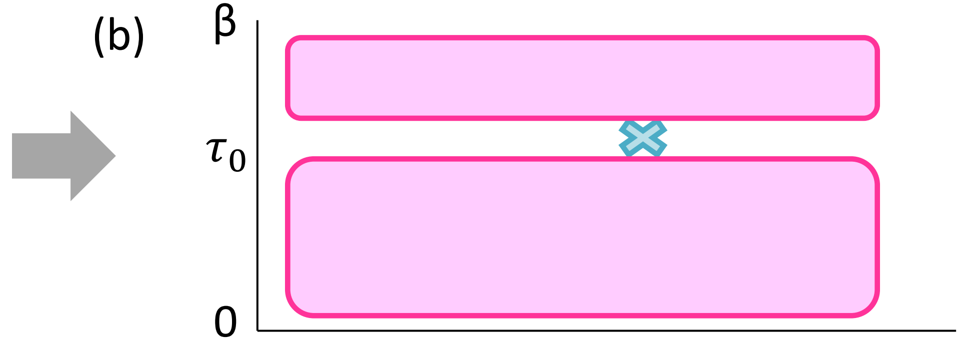
$$\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t\,i}) = \left\langle \psi_t \left| \left(-H_i^{po}\right)^{G_{ti}^{po}} \right| \psi_t \right\rangle = E_{shift}^{po} - \Omega \boldsymbol{r}_{t\,i}^2$$

(a)



$$W(\{0\},\{0\}) = (4\pi\lambda\beta)^{-d/2}\sum_{\boldsymbol{a}}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}L)^2}{4\lambda\beta}\right]$$

(b)



$$W(\{G_{t\,r\,0}^{po} = \delta_{t\,t_0}\delta_{r\,r_0}\},\{G_{t\,c}^{\mathrm{int}} = 0\})$$

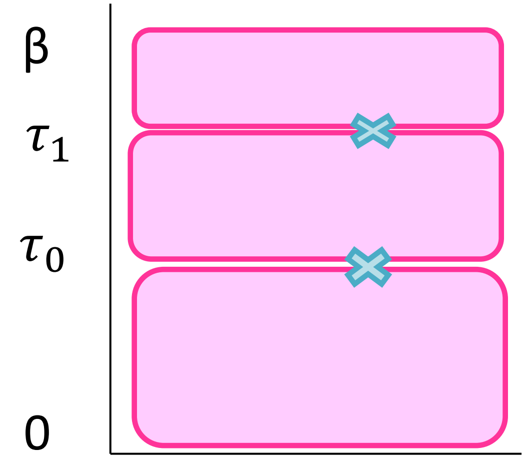
$$= \left[\frac{(4\pi\lambda\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}L + \boldsymbol{r}_{t_0\,0} - \boldsymbol{r}_{t_0\,0}\right)^2}{4\lambda\beta}\right]\right] \times \rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0\,0})$$

$$= \left[\frac{(4\pi\lambda\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}L)^2}{4\lambda\beta}\right]\right] \times \rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0\,0})$$

$$\frac{W(\{\delta_{t\,t_0}\delta_{r\,r_0}\},\{0\})}{W(\{0\},\{0\})} = \frac{\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0\,0})}{L^d}$$

N_w=1でG^{po}が2つ入っているときの重み

※見えている粒子数$N_c=c_0+c_1+N_w$ (Nc<=N)



a:空間方向のワインディングナンバー
c:虚時間方向のワインディングナンバー

$$W\left(\left\{G^{po}_{t0}=\delta_{tt_0}\delta_{\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}_0},\delta_{tt_1}\delta_{\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}_1}\right\},\left\{G^{\mathrm{int}}_{tc}=0\right\}\right)$$

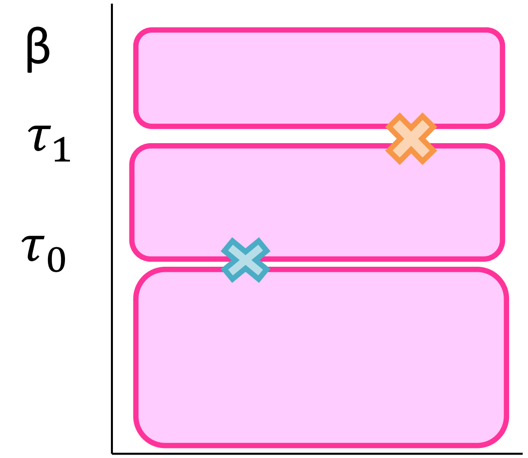
$$=\sum_N e^{\beta\mu N}\binom{N}{N_c}\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0 0})\sum_{c_0}\left[\frac{\left(4\pi\lambda(c_0\beta+\tau_1-\tau_0)\right)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_0}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}_0L+\boldsymbol{r}_{t_0 0}-\boldsymbol{r}_{t_1 0}\right)^2}{4\lambda(c_0\beta+\tau_1-\tau_0)}\right]\right]$$

$$\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_1 0})\sum_{c_1}\left[\frac{\left(4\pi\lambda((c_1+1)\beta-\tau_1+\tau_0)\right)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_1}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}_1L+\boldsymbol{r}_{t_1 0}-\boldsymbol{r}_{t_0 0}\right)^2}{4\lambda((c_1+1)\beta-\tau_1+\tau_0)}\right]\right]$$

カノニカルの時はNが確定され、和が要らなくなるだけ

N_w=2でG^{po}が２つ入っているときの重み

※見えている粒子数$N_c=c_0+c_1+N_w$ (Nc<=N)



$$W\left(\left\{G^{po}_{t0}=\delta_{r\,r_0}\delta_{t\,t_0},\,G^{po}_{t1}=\delta_{r\,r_1}\delta_{t\,t_1}\right\},\left\{G^{\mathrm{int}}_{t\,c}=0\right\}\right)$$

$$=\sum_N e^{\beta\mu N}\frac{N!}{(c_0+1)!(c_1+1)!(N-N_c)!}\sum_{c_0}\left[\frac{\left(4\pi\lambda(c_0+1)\beta\right)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_0}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}_0L+\boldsymbol{r}_{t_0\,0}-\boldsymbol{r}_{t\;{}_{0}0}\right)^2}{4\lambda(c_0+1)\beta}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0\,0})$$

$$\times\sum_{c_1}\left[\frac{\left(4\pi\lambda(c_1+1)\beta\right)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_1}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}_1L+\boldsymbol{r}_{t_1\,0}-\boldsymbol{r}_{t\;{}_{1}0}\right)^2}{4\lambda(c_1+1)\beta}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_1\,1})$$

アルゴリズムのまとめ

- 注意点
  - aに関しては減衰が早いので和のカットオフが小さくても大丈夫そう。
  - Nとc_kに関する和が計算コストを上げる。
- 配位空間のアップデートは次のプロセスからなる。
  ① オペレーター（バーテックス）数の更新
    - ポアソン分布
  ② 見えている世界線数N_wの更新（グランドカノニカル）
    - Ncを決定したことと等価 → 重みの式に入っている。ヒートバスなど。
  ③ 虚時間方向のワインディングナンバー$\{c_k\}$の更新（グランドカノニカル）
    - 重みの式に入っている。ヒートバスなど。
  ④ 全粒子数Nの更新（グランドカノニカル）
    - 重みの式に入っている。メトロポリス？
- 例えば前ページの重みは次のようにNと$\{c_k\}$の和がない形を使う。

$$W(\{G_{t0}^{po}=\delta_{r r_0}\delta_{t t_0}, G_{t1}^{po}=\delta_{r r_1}\delta_{t t_1}\}, \{G_{tc}^{\mathrm{int}}=0\}) = e^{\beta\mu N}\frac{N!}{(c_0+1)!(c_1+1)!(N-N_c)!}\left[\frac{(4\pi\lambda(c_0+1)\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_0}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}_0 L+\boldsymbol{r}_{t_0 0}-\boldsymbol{r}_{t\,0 0})^2}{4\lambda(c_0+1)\beta}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0 0})$$

$$\times\frac{(4\pi\lambda(c_1+1)\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_1}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}_1 L+\boldsymbol{r}_{t_1 0}-\boldsymbol{r}_{t\,1 0})^2}{4\lambda(c_1+1)\beta}\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_1 1})$$

①バーテックスを位置rに挿入するときの確率

$$H^{po}(r) = \Omega r^2$$

バーテックス密度

$$\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t\,i}) = \left\langle \psi_t \middle| -H^{po}(\boldsymbol{r}_i) \middle| \psi_t \right\rangle = C^{po} - \Omega \boldsymbol{r}_{t\,i}{}^2 > 0$$

$$\rho^{po}_{\max}(\boldsymbol{r}_{t\,i}) = \rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t\,i} = 0) = C^{po}$$

$$\rho^{po}_{tot} = \sum_{i=0}^{N-1} \int_0^L d\boldsymbol{r}_{t\,i}\, \rho^{po}_{\max}(\boldsymbol{r}_{t\,i}) = C^{po} L^d N$$

バーテックス間距離:

$$l_w = -\log(1-R) / \rho^{po}_{tot}$$

バーテックスを挿入する位置と粒子

$$P_{site}(\boldsymbol{r}_{ti}) = \frac{\rho^{po}_{\max}(\boldsymbol{r}_{t\,i})}{\rho^{po}_{tot}} = \frac{1}{L^d N}$$

実際にバーテックスを置く確率

$$P_{insert}(\boldsymbol{r}_{t\,i}) = \frac{\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t\,i})}{\rho^{po}_{\max}(\boldsymbol{r}_{t\,i})} = \frac{C^{po} - \Omega \boldsymbol{r}_{t\,i}{}^2}{C^{po}}$$

②N,c_0,c_1を固定してN_c (N_w)を変化させるとき

例えばGが2つあり、最初1つの粒子が2つのGを通っていたが、更新後はそれぞれのGには別の粒子が割り当てられる場合

$$W(\{G_{t0}^{po}=\delta_{tt_0},\delta_{tt_1}\},\{G_{tc}^{\mathrm{int}}=0\})$$

$$=e^{\beta\mu N}\frac{N!}{c_0!(c_1+1)!(N-N_c^{before})!}\left[\frac{(4\pi\lambda(c_0\beta+\tau_1-\tau_0))^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_0}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}_0L+\boldsymbol{r}_{t_0 0}-\boldsymbol{r}_{t_1 0})^2}{4\lambda(c_0\beta+\tau_1-\tau_0)}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0 0})$$

$$\times\left[\frac{(4\pi\lambda((c_1+1)\beta-\tau_1+\tau_0))^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_1}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}_1L+\boldsymbol{r}_{t_1 0}-\boldsymbol{r}_{t_0 0})^2}{4\lambda((c_1+1)\beta-\tau_1+\tau_0)}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_1 0})$$

$$\boxed{N_c^{before}=c_0+c_1+1}$$

$$W(\{G_{ti=0}^{po}=\delta_{rr_0}\delta_{tt_0},G_{ti=1}^{po}=\delta_{rr_1}\delta_{tt_1}\},\{G_{tc}^{\mathrm{int}}=0\})$$

$$=e^{\beta\mu N}\frac{N!}{(c_0+1)!(c_1+1)!(N-N_c^{after})!}\left[\frac{(4\pi\lambda(c_0+1)\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_0}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}_0L+\boldsymbol{r}_{t_0 0}-\boldsymbol{r}_{t_0 0})^2}{4\lambda(c_0+1)\beta}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0 0})$$

$$\times\left[\frac{(4\pi\lambda(c_1+1)\beta)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_1}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{a}_1L+\boldsymbol{r}_{t_1 0}-\boldsymbol{r}_{t_1 0})^2}{4\lambda(c_1+1)\beta}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_1 1})$$

$$\boxed{N_c^{after}=c_0+c_1+2}$$

④N_w,c_0,c_1を固定してNを変化させるとき

$$
W\left(\left\{G_{t0}^{po}=\delta_{tt_0},\delta_{tt_1}\right\},\left\{G_{tc}^{\mathrm{int}}=0\right\}\right)
$$

$$
=e^{\beta\mu N}\frac{N!}{c_0!(c_1+1)!(N-N_c)!}\left[\frac{\left(4\pi\lambda(c_0\beta+\tau_1-\tau_0)\right)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_0}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}_0L+\boldsymbol{r}_{t_0 0}-\boldsymbol{r}_{t_1 0}\right)^2}{4\lambda(c_0\beta+\tau_1-\tau_0)}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_0 0}^2)
$$

$$
\times\left[\frac{\left(4\pi\lambda((c_1+1)\beta-\tau_1+\tau_0)\right)^{-d/2}}{L^d}\sum_{\boldsymbol{a}_1}\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{a}_1L+\boldsymbol{r}_{t_1 0}-\boldsymbol{r}_{t_0 0}\right)^2}{4\lambda((c_1+1)\beta-\tau_1+\tau_0)}\right]\right]\times\rho^{po}(\boldsymbol{r}_{t_1 0})
$$

で、Nだけを変えて重みを計算すればよい。
③のckを変えるときも同様。

procedure

1. Configuration SpaceにPotential,μ,interactionのうちのいずれかのバーテックスを置く。この時点で、どの粒子がバーテックスを通るか決まる。
2. 見えているワールドラインの本数を決める。

   粒子数が保存するときは5へ。
3. 虚時間方向のワインディングナンバーを決める。
4. Nの本数を決める。
5. 物理量の測定。
6. バーテックスを抜く。（確率１ではない。）