

# Замена переменных В.С. Филинова для моделирования идеального больцмановского и ферми-газа с интегралами по траекториям

Г. С. Демьянов и П. Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва  
125412, Россия

E-mail: demyanovgs@jiht.ru

Статья поступила в редакцию 14 ноября 2024 г.

**Аннотация.** В данной работе мы рассматриваем выражения для статистической суммы классического и ферми-газа в отсутствие взаимодействия, а также соответствующие им выражения для энергии. На примере этих простых систем мы показываем характерные проблемы, которые обычно возникают при моделировании взаимодействующих систем. Особое внимание уделено проблеме знаков, которая может быть эффективно устранена с помощью замены переменных, представленной в работах В.С. Филинова с соавторами. Данная замена позволяет не только свести сумму по перестановкам в статистической сумме фермионов к неотрицательному детерминанту, но и аналитически выполнить интегрирование по траекториям в случае отсутствия взаимодействия. <https://doi.org/10.33849/2024404>

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Методы Монте-Карло являются основой для первопринципного расчета термодинамических свойств различных веществ и модельных систем [1, 2]. Эти методы позволяют, теоретически, вычислять многомерные интегралы с любой заданной точностью, что делает их чрезвычайно полезными в статистической физике. Кроме того, они дают возможность определять средние значения термодинамических величин вне зависимости от уровня неидеальности или вырождения системы.

Ключевой величиной для первопринципного моделирования в  $NVT$ -ансамбле является оператор плотности (или матрица плотности) в координатном представлении [3]. След этого оператора определяет статистическую сумму системы. В соответствии с подходом Фейнмана [4], статистическая сумма может быть представлена в виде интегралов по траекториям, где граничные условия на траектории определяют статистику, которой подчиняются частицы. В численном моделировании интеграл по траекториям заменяется повторным интегралом, а сами траектории являются ломаными линиями [2, 5]. Термодинамические величины, такие как энергия и давление, выражаются как средние по ансамблю таких траекторий в координатном пространстве.

Взаимодействие между частицами учитывается с помощью формулы Троттера для ограниченных снизу потенциалов [6]. В случае неограниченных потенциалов взаимодействие можно учесть методом псевдопотенциалов [7], например, с помощью высокотемпературного решения Кельбга для матрицы плотности в первом порядке теории возмущений [8, 9] или вычисления суммы Слэтера [10]. Так как подходы Троттера и Кельбга являются точными только в пределе высоких температур, необходимо использовать представление статистической суммы в виде интегралов по траекториям, с помощью которого становится возможным рассматривать в принципе любые конечные температуры.

Стоит также отметить, что на основании представления интегралов по траекториям без перестановок можно построить метод молекулярной динамики с интегралами по траекториям [11] для учета конечного размера частиц. Оказывается, что в некоторых случаях, особенно при малых температурах, такой учет квантовых

эффектов может оказывать влияние на динамические и структурные свойства молекул [12].

Хотя формализм интегралов по траекториям позволяет в теории получать результаты с произвольной точностью для многочастичных квантовых систем, при его применении возникают несколько сложностей. Одной из главных проблем является проблема знаков, которая особенно актуальна для фермионов. Она заключается в том, что некоторые траектории вносят отрицательный вклад в статистическую сумму, из-за чего стандартные методы Монте-Карло становятся неприменимыми. Для преодоления этой проблемы было разработано множество методов, которые либо основаны на неконтролируемых приближениях, либо требуют огромных вычислительных затрат, ограничивая число частиц в моделировании несколькими десятками (или даже единицами) [13, 14].

Недавно В.С. Филинов с соавторами предложил замену переменных, которая позволяет устранить проблему знаков без потери точности [15]. В этом подходе используются так называемые “замкнутые” траектории, благодаря которым перестановки в статистической сумме сводятся к вычислению неотрицательного детерминанта. Этот метод позволяет избежать экспоненциального роста статистической погрешности с увеличением числа частиц, характерного для метода перевешивания [16] (см. раздел 4.2).

В настоящей работе мы рассматриваем идеи из [15] на примерах идеального больцмановского и ферми-газа. Мы демонстрируем явные преимущества подхода В.С. Филинова при моделировании с интегралами по траекториям. Несмотря на то, что рассматриваемые в данной работе системы достаточно просты, а их термодинамические свойства хорошо известны, предложенные методы легко обобщаются на взаимодействующие системы. Следует отметить, что при этом могут возникать дополнительные сложности, особенно связанные с суммированием по перестановкам.

## 2. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

Термодинамические свойства квантовой системы с гамильтонианом  $\hat{H}$  при температуре  $T$  можно вычислить из матрицы плотности,  $\hat{\rho}(\beta)$ , и ее координатного

представления,  $\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta)$ :

$$\hat{\rho}(\beta) = \exp(-\beta \hat{H}), \quad \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \langle \mathbf{R} | \hat{\rho}(\beta) | \mathbf{R}' \rangle, \quad (1)$$

где  $\beta = (kT)^{-1}$ ,  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  — координаты всех частиц системы и  $k$  — постоянная Больцмана. Матрица плотности удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\frac{d\hat{\rho}(\beta)}{d\beta} = -\hat{H}\hat{\rho}(\beta), \quad (2)$$

которое называется уравнением Блоха. Используя то, что гамильтониан  $\hat{H}$  коммутирует сам с собой, можно представить оператор плотности в виде  $n+1$  одинаковых экспоненциальных сомножителей:

$$\exp(-\beta \hat{H}) = \prod_{k=0}^n \exp(-\varepsilon \hat{H}), \quad (3)$$

где  $\varepsilon = \beta/(n+1)$ . Используя далее соотношение полноты для координатного базиса, можно представить матрицу плотности в виде  $n$  повторных интегралов:

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_n \times \\ \times \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}_1; \varepsilon) \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2; \varepsilon) \dots \rho(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}'; \varepsilon), \quad (4)$$

где  $\mathbf{R}_k = (\mathbf{r}_{1,k}, \dots, \mathbf{r}_{N,k})$ . В пределе  $n \rightarrow \infty$  можно получить представление матрицы плотности в виде функционального интеграла по непрерывным траекториям [4]. Мы будем рассматривать только конечные значения  $n$ .

Статистическая сумма есть след оператора плотности. В общем случае тождественных частиц:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \sigma_P \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_n \times \\ \times \rho(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_1; \varepsilon) \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2; \varepsilon) \dots \rho(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n+1}; \varepsilon), \quad (5)$$

где  $\mathbf{R}_{n+1} = \hat{P}\mathbf{R}_0$ ;  $\hat{P}$  — оператор перестановки с четностью  $P$ ;  $\sigma_P = 1$  для бозе-системы и  $\sigma_P = (-1)^P$  для ферми-системы [4]. В пределе малого вырождения основной вклад в статистическую сумму вносит только тождественная перестановка; такая статистическая сумма соответствует распределению Больцмана. Зачастую, в случае бальцмановских частиц (которые также называют бальцманонами), фактор  $1/N!$  не указывается; такую статистическую сумму мы будем обозначать  $Q(\beta)$ :

$$Q(\beta) = \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_n \times \\ \times \rho(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_1; \varepsilon) \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2; \varepsilon) \dots \rho(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_0; \varepsilon). \quad (6)$$

Оператор плотности в координатном представлении для невзаимодействующей классической системы можно получить достаточно просто. Так как оператор плотности  $N$  невзаимодействующих классических частиц факторизуется, рассмотрим оператор плотности для одной частицы в координатном представлении:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)) | \mathbf{r}' \rangle. \quad (7)$$

Далее дважды воспользуемся условием полноты им-

пульсного базиса, и получим:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \int d\mathbf{p} d\mathbf{g} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | e^{-\beta \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)} | \mathbf{g} \rangle \langle \mathbf{g} | \mathbf{r}' \rangle = \\ = \int d\mathbf{p} e^{-\beta \mathbf{p}^2/(2m)} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle = \\ = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta \mathbf{p}^2/(2m)} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar} = \\ = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2\hbar^2\beta} \right). \quad (8)$$

Тогда для  $N$  частиц получаем ( $\kappa^2 \equiv m/(2\pi\hbar^2\beta)$ ):

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \kappa^{3N} \exp\left[ -\pi\kappa^2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i)^2 \right]. \quad (9)$$

Такое же уравнение было получено в [4] в результате решения уравнения Блоха (2). Полученная матрица плотности может быть использована дальше для вычисления термодинамических свойств невзаимодействующих частиц, как в случае бальцмановской статистики, так и в случае неразличимых частиц (Ферми или Бозе).

Теперь рассмотрим представление классического невзаимодействующего (идеального) газа  $N$  частиц с интегралами по траекториям.

### 3. ИДЕАЛЬНЫЙ БОЛЬЦМАНОВСКИЙ ГАЗ

Рассмотрим самый простой случай: невзаимодействующий газ  $N$  частиц (без обмена, классический идеальный газ). Тогда статистическая сумма  $Q(\beta)$  выражается следующим образом:

$$Q(\beta) = \text{Sp} \hat{\rho}(\beta) = \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \rho(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_0; \beta). \quad (10)$$

Как было показано выше (9), матрица плотности для невзаимодействующих частиц известна точно для любой температуры. В результате, представление статистической суммы в виде интегралов по траекториям не является необходимым, а экспонентна в выражении (9) равна 1; следовательно

$$Q(\beta) = \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \kappa^{3N} = \kappa^{3N} V^N, \quad (11)$$

откуда сразу же получаем известный ответ для энергии (все частные производные по  $\beta$  полагаются при фиксированном объеме системы  $V$ ):

$$\beta E = -\beta \frac{\partial \ln Q(\beta)}{\partial \beta} = 3N/2. \quad (12)$$

#### 3.1. Идеальный газ в представлении интегралов по траекториям

Воспользуемся теперь разбиением на интегралы по траекториям ( $\varepsilon = \beta/(n+1)$ ) в выражении для статистической суммы (10):

$$Q(\beta) = \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_n \prod_{k=0}^n \rho(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_{k+1}; \varepsilon) = \\ = (n+1)^{\frac{3N}{2}(n+1)} \kappa^{3N(n+1)} \times \\ \times \int d\mathbf{R} \exp\left[ -\pi(n+1)\kappa^2 \sum_{k=0}^n (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k+1})^2 \right], \quad (13)$$

где последняя координата  $\mathbf{R}_{n+1} = (\mathbf{r}_{1,n+1}, \mathbf{r}_{2,n+1}, \dots, \mathbf{r}_{N,n+1}) = \mathbf{R}_0$ . Для удобства здесь введено обозначение  $\mathcal{R} = (\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n)$ , а также символ дифференциала  $d\mathcal{R} = d\mathbf{R}_0 \dots d\mathbf{R}_n$ . Под символом  $(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k+1})^2$  понимается сумма по всем частицам,  $\sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2$ . Для начала рассчитаем энергию напрямую из (13):

$$\beta E = -\beta \frac{\partial \ln Q(\beta)}{\partial \beta} = -\frac{\beta}{Q(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ (\kappa^2(n+1))^{3N(n+1)/2} \times \int d\mathcal{R} \exp \left[ -\pi(n+1)\kappa^2 \sum_{k=0}^n (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k+1})^2 \right] \right\}. \quad (14)$$

Зависимость от температуры присутствует только в переменной  $\kappa = \kappa(\beta)$ :

$$\beta E = \frac{3N}{2}(n+1) - ((n+1)\kappa^2)^{3N(n+1)/2} \times \int \frac{d\mathcal{R}}{Q(\beta)} \exp \left[ -\pi(n+1)\kappa^2 \sum_{k=0}^n (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k+1})^2 \right] \times \pi(n+1)\kappa^2 \sum_{k=0}^n (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k+1})^2. \quad (15)$$

В результате, получаем следующее выражение для энергии:

$$\beta E = \frac{3N}{2}(n+1) - \pi(n+1)\kappa^2 \left\langle \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \right\rangle. \quad (16)$$

В данной работе, усреднение  $\langle f(\mathcal{R}) \rangle$  означает следующее выражение:

$$\langle f(\mathcal{R}) \rangle = \frac{\int W(\mathcal{R}) f(\mathcal{R}) d\mathcal{R}}{\int W(\mathcal{R}) d\mathcal{R}}, \quad (17)$$

где  $W(\mathcal{R})$  отражает вес каждой конфигурации, который, вообще говоря, может быть как положительным, так и отрицательным (см. также раздел 4.2). При усреднении в выражении (16) используется  $W(\mathcal{R})$ , соответствующая статистической сумме (13) (то есть  $Q(\beta) = \int W(\mathcal{R}) d\mathcal{R}$ ).

Формула (16) зачастую используется в работах по моделированию с интегралами по траекториям для расчета кинетической энергии. Несмотря на формальную корректность этого выражения, оно обладает особенностью в пределе  $n \rightarrow \infty$ , так как каждое слагаемое расходится в этом пределе:

$$\frac{3N}{2}(n+1) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty, \quad (18)$$

$$\pi(n+1)\kappa^2 \left\langle \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \right\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty, \quad (19)$$

хотя их сумма  $\beta E$  остается конечной. Такое поведение приводит к увеличению статистической погрешности полной энергии с увеличением  $n$ , что будет показано далее (см. таблицу 1).

### 3.2. Безразмерные переменные

Тем не менее, этой расходимости и увеличения погрешности можно избежать. Для этого мы вводим замену переменных, представленную в работах В. С. Фили-

нова с соавторами (см. например [5]):

$$(\boldsymbol{\eta}_{1,k}, \dots, \boldsymbol{\eta}_{N,k}) = \mathbf{H}_k = \kappa(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k-1}), \quad (20)$$

$$\boldsymbol{\eta}_{i,k} = \kappa(\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k-1}), \quad k \in [1, \dots, n+1], \quad (21)$$

причем дифференциалы преобразуются следующим образом:

$$d\mathbf{H}_k = \kappa^{3N} d(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_{k-1}) = \kappa^{3N} d\mathbf{R}_k, \quad (22)$$

$$d\boldsymbol{\eta}_{i,k} = \kappa^3 d(\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k-1}) = \kappa^3 d\mathbf{r}_{i,k}. \quad (23)$$

При этом, координаты  $\mathbf{R}_m$  на  $m$ -ом слое выражаются через  $\mathbf{R}_0$ :

$$\mathbf{R}_m = \mathbf{R}_0 + \kappa^{-1} \sum_{k=1}^m \mathbf{H}_k. \quad (24)$$

Тогда безразмерная переменная  $\mathbf{H}_{n+1}$  выражается через все промежуточные:

$$\mathbf{H}_{n+1} = -\kappa(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_0) = -\sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k, \quad (25)$$

$$\boldsymbol{\eta}_{i,n+1} = -\kappa(\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{i,0}) = -\sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_{i,k}, \quad (26)$$

вследствие граничных условий  $\mathbf{R}_{n+1} = \mathbf{R}_0$ . Статистическая сумма (13) после замены переменных принимает вид:

$$Q(\beta) = \kappa^{3N}(n+1)^{3N(n+1)/2} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \times \int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n \exp \left[ -\pi(n+1) \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2 \right]. \quad (27)$$

В результате интегрирование производится по безразмерным переменным  $\mathbf{H}_k$  в бесконечных пределах, а вся температурная зависимость перешла в предэкспоненциальный множитель. Тогда, рассчитывая производную по температуре, получим:

$$\beta E = -\beta \frac{\partial \ln Q(\beta)}{\partial \beta} = -\frac{1}{Q(\beta)} \beta \frac{\partial \kappa^{3N}}{\partial \beta} (n+1)^{3N(n+1)/2} \times \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n \exp \left[ -\pi(n+1) \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2 \right]. \quad (28)$$

Так как

$$\frac{\partial \kappa}{\partial \beta} = -\frac{\kappa}{2\beta}, \quad \frac{\partial \kappa^{3N}}{\partial \beta} = -\frac{3N}{2\beta} \kappa^{3N}, \quad (29)$$

мы получаем известный результат

$$\beta E = \frac{3N}{2}. \quad (30)$$

Таким образом, для любой конфигурации  $\mathcal{R}$  энергия получается равной  $3N/2$ .

Тем не менее, возникает вопрос, каким образом можно получить напрямую эквивалентность выражений для энергии (16) и (30)?

### 3.3. Интегрирование статистической суммы идеального газа по траекториям

Во-первых, можно заметить, что интегралы по переменным  $\mathbf{H}_k$  в выражении (27) можно взять аналитически. Сначала используем то, что статистическая

сумма факторизуется:

$$Q(\beta) = \prod_{i=1}^N I_i, \quad (31)$$

где

$$I_i = \kappa^3(n+1)^{3(n+1)/2} \int_V d\mathbf{r}_{i,0} \times \\ \times \int d\boldsymbol{\eta}_{i,1} \dots d\boldsymbol{\eta}_{i,n} \exp \left[ -\pi(n+1) \sum_{k=1}^{n+1} \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2 \right]. \quad (32)$$

Так как все интегралы  $I_i$  для разных  $i$  имеют одну и ту же форму, мы пропустим индекс  $i$  и будем писать  $I_i \equiv I$ . Также мы воспользуемся явно выражением для переменной  $\boldsymbol{\eta}_{i,n+1}$  из уравнения (26). Тогда интеграл принимает вид:

$$I = \kappa^3(n+1)^{3(n+1)/2} \int_V d\mathbf{r}_0 \int d\boldsymbol{\eta}_1 \dots d\boldsymbol{\eta}_n \times \\ \times \exp \left[ -\pi(n+1) \left( \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_k^2 + \left( \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_k \right)^2 \right) \right]. \quad (33)$$

Проинтегрируем для начала по переменной  $\boldsymbol{\eta}_n$ . Для этого мы введем следующую замену:

$$\mathbf{w}_n = \sum_{k=1}^{n-1} \boldsymbol{\eta}_k, \quad w_n = |\mathbf{w}_n|, \quad (34)$$

$$q_n^2 = \sum_{k=1}^{n-1} \boldsymbol{\eta}_k^2. \quad (35)$$

Тогда интеграл по  $\boldsymbol{\eta}_n$  принимает вид:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{\eta}_n \exp \left\{ -\pi(n+1) \left[ \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_k^2 + \left( \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_k \right)^2 \right] \right\} = \\ = \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{\eta}_n e^{-\pi(n+1)q_n^2} e^{-\pi(n+1)[\boldsymbol{\eta}_n^2 + (\boldsymbol{\eta}_n + \mathbf{w}_n)^2]}. \quad (36)$$

Раскрывая скобки в экспоненте и переходя к сферическим координатам ( $\boldsymbol{\eta}_n \cdot \mathbf{w}_n = \eta_n w_n u_n$ ,  $u_n$  есть косинус угла между векторами  $\boldsymbol{\eta}_n$  и  $\mathbf{w}_n$  и меняется от 1 до  $-1$ ), получаем:

$$\int_0^\infty d\eta_n 2\pi \eta_n^2 e^{-\pi(n+1)(q_n^2 + w_n^2)} \times \\ \times \int_{-1}^1 du_n e^{-2\pi(n+1)[\eta_n^2 + \eta_n w_n u_n]} = \frac{e^{-\pi(n+1)(q_n^2 + w_n^2/2)}}{2\sqrt{2}(n+1)^{3/2}}. \quad (37)$$

Для взятия интеграла по переменной  $\boldsymbol{\eta}_{n-1}$  заметим, что

$$q_n^2 + w_n^2/2 = \boldsymbol{\eta}_{n-1}^2 + q_{n-1}^2 + (\boldsymbol{\eta}_{n-1} + \mathbf{w}_{n-1})^2/2. \quad (38)$$

Тогда, проделывая аналогичную процедуру интегрирования, получаем:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{\eta}_{n-1} \frac{e^{-\pi(n+1)(q_n^2 + w_n^2/2)}}{2\sqrt{2}(n+1)^{3/2}} = \frac{e^{-\pi(n+1)(q_{n-1}^2 + w_{n-1}^2/3)}}{3\sqrt{3}(n+1)^3}. \quad (39)$$

Производя интегрирование  $m$  раз, получаем:

$$\frac{e^{-\pi(n+1)(q_{n-m}^2 + \boldsymbol{\eta}_{n-m}^2 + (\boldsymbol{\eta}_{n-m} + \mathbf{w}_{n-m})^2/(m+1))}}{(m+1)\sqrt{(m+1)}(n+1)^{3m/2}}, \quad (40)$$

и интеграл  $I$  принимает вид:

$$I = \kappa^3(n+1)^{3(n+1)/2} \int_V d\mathbf{r}_0 \int d\boldsymbol{\eta}_1 \dots d\boldsymbol{\eta}_{n-m} \times \\ \times \frac{e^{-\pi(n+1)(q_{n-m}^2 + \boldsymbol{\eta}_{n-m}^2 + (\boldsymbol{\eta}_{n-m} + \mathbf{w}_{n-m})^2/(m+1))}}{(m+1)\sqrt{(m+1)}(n+1)^{3m/2}}. \quad (41)$$

Если  $m = n-1$ , то  $q_1^2 = 0$  и  $\mathbf{w}_1 = \mathbf{0}$ , а интеграл по  $\boldsymbol{\eta}_1$  легко рассчитывается в сферической системе координат:

$$I = \kappa^3(n+1)^{3(n+1)/2} \int_V d\mathbf{r}_0 \int d\boldsymbol{\eta}_1 \frac{e^{-\pi(n+1)(\boldsymbol{\eta}_1^2 + \boldsymbol{\eta}_1^2/n)}}{n\sqrt{n}(n+1)^{3(n-1)/2}} = \\ = \kappa^3 \int_V d\mathbf{r}_0 = \kappa^3 V. \quad (42)$$

В результате, получаем статистическую сумму идеального газа (без учета тождественности частиц):

$$Q(\beta) = \kappa^{3N} V^N. \quad (43)$$

Таким образом, с помощью замены (20) удается проинтегрировать по всем траекториям статистическую сумму идеального газа. Помимо этого, мы получили следующее соотношение, которое будет использовано далее:

$$\int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n e^{-\pi(n+1) \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2} = (n+1)^{-3N(n+1)/2}. \quad (44)$$

Для расчета кинетической энергии (16) необходимо рассчитать следующее среднее:

$$\kappa^2 \left\langle \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2 \right\rangle. \quad (45)$$

Для этого введем в статистическую сумму параметр  $\alpha$ , чтобы воспользоваться далее дифференцированием по параметру:

$$Q(\beta; \alpha) = \kappa^{3N}(n+1)^{3N(n+1)/2} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \times \\ \times \int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n \exp \left[ -\pi(n+1)\alpha \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2 \right]. \quad (46)$$

Производная по параметру оказывается связана с искомым средним:

$$\frac{\partial \ln Q(\beta; \alpha)}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=1} = \left\langle -\pi(n+1) \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}_{i,k}^2 \right\rangle. \quad (47)$$

Вычислить  $Q(\beta; \alpha)$  можно аналогично процедуре (31)–(43). Тогда снова используем факторизацию:

$$Q(\beta; \alpha) = \prod_{i=1}^N I_i(\alpha). \quad (48)$$

После интегрирования  $m$  раз, мы получаем формулу, аналогичную выражению (41):

$$I_i(\alpha) = I(\alpha) = \kappa^3(n+1)^{3(n+1)/2} \int_V d\mathbf{r}_0 \int d\boldsymbol{\eta}_1 \dots d\boldsymbol{\eta}_{n-m} \times \\ \times \frac{e^{-\pi(n+1)\alpha(q_{n-m}^2 + \boldsymbol{\eta}_{n-m}^2 + (\boldsymbol{\eta}_{n-m} + \mathbf{w}_{n-m})^2/(m+1))}}{(m+1)\sqrt{(m+1)}\alpha^{3m/2}(n+1)^{3m/2}}. \quad (49)$$

Тогда снова подставим  $m = n-1$  и найдем значение

интеграла ( $I_i(\alpha) = I(\alpha)$ ):

$$I(\alpha) = \kappa^3 (n+1)^{3(n+1)/2} \times \\ \times \int_V d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{n}_1 \frac{e^{-\pi(n+1)\alpha(\mathbf{n}_1^2 + \mathbf{n}_1^2/n)}}{n\sqrt{n}\alpha^{3(n-1)/2}(n+1)^{3(n-1)/2}} = \\ = \kappa^3 \alpha^{-3n/2} \int_V d\mathbf{r}_0 = \kappa^3 \alpha^{-3n/2} V. \quad (50)$$

В результате, получаем параметризованное выражение статистической суммы:

$$Q(\beta; \alpha) = \kappa^{3N} \alpha^{-3nN/2} V^N. \quad (51)$$

Далее воспользуемся связью (47):

$$\left\langle \pi(n+1) \sum_{k=1}^{n+1} \sum_{i=1}^N \mathbf{n}_{i,k}^2 \right\rangle = - \frac{\partial \ln Q(\beta; \alpha)}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=1} = \frac{3N}{2} n, \quad (52)$$

что в итоге приводит полную энергию (16) к виду:

$$\beta E = \frac{3N}{2} (n+1) - \frac{3Nn}{2} = \frac{3N}{2}, \quad (53)$$

который уже был получен в (30).

Стоит отметить, что в представлении обычных координат энергия отдельной конфигурации  $\beta E(\mathbf{R})$ :

$$\beta E(\mathbf{R}) = \frac{3N}{2} (n+1) - \pi(n+1) \kappa^2 \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \quad (54)$$

может значительно отличаться от  $3N/2$  и даже быть отрицательной.

Такое поведение этой функции имеет следующий физический смысл. Главный вклад в статистическую сумму вносят траектории, характерный “размах” которых равен тепловой длине волны де Бройля  $\kappa^{-1}$ . Можно интерпретировать этот “размах” как размер частицы. Если траектория имеет слишком большой размах, то такая траектория не является равновесной (в термодинамическом смысле), что приводит к значительному увеличению вклада  $\langle \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \rangle$  и уменьшению энергии. Наоборот, если размах траектории слишком мал относительно равновесной, вклад  $\langle \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \rangle \approx 0$ , и полная энергия значительно превышает равновесную,  $3N/2$ .

Тем не менее, замена переменных (20) приводит к тому, что энергия любой конфигурации (или набора траекторий)  $\mathbf{R}$  имеет одинаковое значение; в то же время, основной вклад в статистическую сумму все еще вносят траектории с характерным размахом  $\kappa^{-1}$ .

#### 4. ИДЕАЛЬНЫЙ ФЕРМИ-ГАЗ

Статистическая сумма для ферми-газа в соответствии с (5) записывается как сумма по перестановкам

(без интегралов по траекториям):

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \int_{V^N} d\mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, \hat{P}\mathbf{R}; \beta). \quad (55)$$

Как и в случае больцмановской системы, представление интегралов по траекториям не является необходимым, так как уравнение (55) является точным. Тем не менее, из-за перестановок необходимо использовать недиагональные матричные элементы, в отличие от больцмановского газа (11). Подставляя выражение для матрицы плотности (9), мы получим:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \kappa^{3N} \int_{V^N} e^{-\pi \kappa^2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \hat{P}\mathbf{r}_i)^2} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (56)$$

Сумму по перестановкам можно представить в виде неотрицательного детерминанта:

$$\sum_P (-1)^P e^{-\pi \kappa^2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \hat{P}\mathbf{r}_i)^2} = \\ = \sum_P (-1)^P \prod_{i=1}^N e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \hat{P}\mathbf{r}_i)^2} = \det A(\beta) \geq 0, \quad (57)$$

где  $A(\beta) = \|e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}\|$ . Тогда статистическая сумма принимает вид:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \kappa^{3N} \int_{V^N} \det \|e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}\| d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (58)$$

При дифференцировании выражения (58) для вычисления энергии, возникает производная по температуре от детерминанта. К счастью, такая производная выражается через сам детерминант (формула Якоби [17]):

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \det A(\beta) = \det A(\beta) \times \text{tr} \left( A^{-1}(\beta) \frac{\partial A(\beta)}{\partial \beta} \right), \quad (59)$$

где  $A^{-1}(\beta)$  — обратная матрица. Таким образом, представляется возможным записать производную по температуре в виде среднего по ансамблю. После дифференцирования (58), получаем:

$$\beta E = -\beta \frac{\partial \ln Z(\beta)}{\partial \beta} = \frac{3N}{2} - \left\langle \text{tr} \left( A^{-1}(\beta) \beta \frac{\partial A(\beta)}{\partial \beta} \right) \right\rangle, \quad (60)$$

где матрица из производных имеет вид:

$$\beta \frac{\partial A(\beta)}{\partial \beta} = \left\| \pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2} \right\|, \quad (61)$$

а при усреднении в выражении (60) используется весовая функция  $\det A(\beta)$ . Стоит еще раз отметить, что детерминант  $\det A(\beta)$  в формуле (58) является неотрицательным, что делает возможным использование стандартных методов Монте-Карло.

##### 4.1. Идеальный ферми-газ в представлении интегралов по траекториям

Основные трудности возникают при представлении статистической суммы фермионов в формализме интегралов по траекториям даже в отсутствии взаимодействия:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} (\kappa^2 (n+1))^{\frac{3N}{2}(n+1)} \sum_P (-1)^P \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_n \exp \left\{ -\pi(n+1) \kappa^2 \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^n (\mathbf{r}_{i,k+1} - \mathbf{r}_{i,k})^2 \right\}, \quad (62)$$

где  $\mathbf{r}_{i,n+1} = \hat{P}\mathbf{r}_{i,0}$ . Все перестановки, содержащие квадрат разности  $(\mathbf{r}_{i,n} - \hat{P}\mathbf{r}_{i,0})^2$ , снова можно собрать в детерминант:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} (\kappa^2(n+1))^{\frac{3N}{2}(n+1)} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_n \exp \left\{ -\pi(n+1)\kappa^2 \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \right\} \det A_n(\beta), \quad (63)$$

где матрица имеет вид:

$$A_n(\beta) = \left\| \exp \left\{ -\pi(n+1)\kappa^2 (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{j,0})^2 \right\} \right\|. \quad (64)$$

При расчете энергии снова возникает обратная матрица  $A_n^{-1}(\beta)$  и матрица из производных:

$$\beta \frac{\partial A_n(\beta)}{\partial \beta} = \left\| \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \exp \left\{ -\pi(n+1)\kappa^2 (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{j,0})^2 \right\} \right\| = \left\| \exp \left\{ -\pi(n+1)\kappa^2 (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{j,0})^2 \right\} \pi(n+1)\kappa^2 (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{j,0})^2 \right\|. \quad (65)$$

В результате, при дифференцировании  $Z(\beta)$  возникают три слагаемых. Первые два аналогичны виду кинетической энергии классического газа (16), а последнее возникает из-за производной детерминанта:

$$\beta E = \frac{3N}{2} (n+1) - \pi(n+1)\kappa^2 \left\langle \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2 \right\rangle - \left\langle \text{tr} \left( A_n^{-1}(\beta) \cdot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} A_n(\beta) \right) \right\rangle. \quad (66)$$

Проанализируем получившиеся формулы. Во-первых, обратим внимание, что детерминант в выражении для статистической суммы (63) может быть как положительным, так и отрицательным. Это приводит к тому, что прямое использование метода Монте-Карло невозможно. Эта проблема известна под названием “проблема знаков”. Во-вторых, в выражении для энергии (66) снова присутствует вклад  $(\sum_{k=0}^{n-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_{i,k} - \mathbf{r}_{i,k+1})^2)$ , который приводит к росту статистической погрешности с увеличением  $n$ .

Последняя проблема разрешается заменой (20). В результате, статистическая сумма принимает вид:

$$Z(\beta) = \frac{(n+1)^{\frac{3N(n+1)}{2}}}{N!} \kappa^{3N} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n e^{-\pi(n+1) \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k^2} \det A(\beta), \quad (67)$$

где матрица  $A(\beta)$  имеет такой же вид, как и в уравнении (64)

$$A(\beta) = \left\| \exp \left\{ -\pi(n+1) \left( \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_{i,k} + \kappa(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0}) \right)^2 \right\} \right\| \equiv \left\| e^{-\pi(n+1)\kappa^2 (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{j,0})^2} \right\|. \quad (68)$$

Однако выражение для производной матрицы по температуре, как и для энергии, принимает другой вид:

$$\beta E = \frac{3N}{2} - \langle \text{tr} (A^{-1}(\beta) \cdot B(\beta)) \rangle, \quad (69)$$

где

$$\begin{aligned} B(\beta) &= \left\| \beta \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\pi(n+1) \left( \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_{i,k} + \kappa(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0}) \right)^2} \right\| = \\ &= \left\| e^{-\pi(n+1) \left( \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_{i,k} + \kappa(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0}) \right)^2} \pi(n+1) \left( \kappa(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0}) \cdot \sum_{k=1}^n \boldsymbol{\eta}_{i,k} + \kappa^2 (\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2 \right) \right\| \equiv \\ &\equiv \left\| e^{-\pi(n+1)\kappa^2 (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{j,0})^2} \pi(n+1)\kappa^2 ((\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0}) \cdot (\mathbf{r}_{i,n} - \mathbf{r}_{i,0}) + (\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2) \right\|. \end{aligned} \quad (70)$$

В результате, статистическая погрешность энергии значительно уменьшается. Тем не менее, такая замена не решает проблему знаков, которая вызывает основные трудности.

#### 4.2. Перевзвешивание траекторий в статистической сумме ферми-частиц

Проблема знаков обычно решается с помощью “перевзвешивания” [13, 16]. Перепишем уравнение (63) следующим образом:

$$Z(\beta) \equiv \int d\mathbf{R} W(\mathbf{R}), \quad (71)$$

где  $W(\mathbf{R})$  — “функция распределения”, которая задает вес конфигурации (она равна подынтегральному выражению в уравнении (63)). Пусть  $O(\mathbf{R})$  — некоторая величина, которую необходимо усреднить по распреде-

лению  $W(\mathbf{R})$ :

$$\langle O(\mathbf{R}) \rangle = \frac{\int d\mathbf{R} W(\mathbf{R}) O(\mathbf{R})}{\int d\mathbf{R} W(\mathbf{R})}. \quad (72)$$

Перепишем функцию  $W(\mathbf{R})$  через ее модуль с помощью функции  $\text{sign}$ :

$$W(\mathbf{R}) = |W(\mathbf{R})| \text{sign}(W(\mathbf{R})) \equiv |W(\mathbf{R})| S(\mathbf{R}). \quad (73)$$

Подставим это выражение в уравнение (72):

$$\langle O(\mathbf{R}) \rangle = \frac{\int d\mathbf{R} |W(\mathbf{R})| S(\mathbf{R}) O(\mathbf{R})}{\int d\mathbf{R} |W(\mathbf{R})| S(\mathbf{R})} = \frac{\langle S(\mathbf{R}) O(\mathbf{R}) \rangle'}{\langle S(\mathbf{R}) \rangle'}, \quad (74)$$

где  $\langle \dots \rangle'$  означает среднее по функции распределения  $|W(\mathbf{R})| \geq 0$ . В результате, производится усреднение

по бозе-системе, а отличие компенсируется фактором  $S = \langle S(\mathbf{R}) \rangle'$ . Это позволяет использовать методы Монте-Карло для расчета термодинамики.

Несмотря на формальную справедливость формулы (74), она обладает очень серьезным практическим ограничением. Величина  $S = \langle S(\mathbf{R}) \rangle'$ , называемая средним знаком, может быть представлена в виде:

$$S = \frac{\int d\mathbf{R} |W(\mathbf{R})| S(\mathbf{R})}{\int d\mathbf{R} |W(\mathbf{R})|} = \frac{\int d\mathbf{R} W(\mathbf{R})}{\int d\mathbf{R} |W(\mathbf{R})|} = e^{-\beta N(f-f')}, \quad (75)$$

где  $f$  и  $f'$  — свободные энергии на одну частицу, соответственно, ферми- и бозе-систем. Таким образом, с увеличением числа частиц, средний знак экспоненциально уменьшается, что приводит к экспоненциальному росту статистической погрешности моделирования методом Монте-Карло. Поэтому такие расчеты зачастую ограничены системой нескольких десятков частиц, хотя в некоторых работах заявляется, что этого достаточно для достижения термодинамического предела [18].

#### 4.3. Замена В.С. Филинова: замкнутые траектории

Для того, чтобы избавиться от проблемы знаков, мы воспользуемся методом, впервые изложенным В.С. Филиновым с соавторами в работе 2020 года [15] и применяемым в последующих работах [19, 20]. Для этого необходимо ввести “замкнутые траектории”, которые начинаются и заканчиваются в нулевой точке. В теории винеровских процессов такие траектории называются броуновским мостом [21].

Итак, аналогично работам [15, 20], введем переменные  $\mathbf{q}_{i,k}$  следующим образом:

$$\mathbf{r}_{i,k} = (\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0}) \frac{k}{n+1} + \mathbf{r}_{i,0} + \mathbf{q}_{i,k}. \quad (76)$$

Тогда получаем следующие граничные условия на новые траектории  $\mathbf{q}_{i,k}$ :

$$\mathbf{r}_{i,0} = \mathbf{0} + \mathbf{r}_{i,0} + \mathbf{q}_{i,0} \quad (77)$$

$$\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} \equiv \mathbf{r}_{i,n+1} = \hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0} + \mathbf{r}_{i,0} + \mathbf{q}_{i,n+1}, \quad (78)$$

откуда

$$\mathbf{q}_{i,0} = \mathbf{q}_{i,n+1} = \mathbf{0}. \quad (79)$$

Таким образом, траектории  $\mathbf{q}_{i,k}$  начинаются и заканчиваются в точке  $\mathbf{0}$ . Чтобы произвести замену в статистической сумме (62), рассмотрим каждое слагаемое  $(\mathbf{r}_{i,k+1} - \mathbf{r}_{i,k})^2$  для  $k = 0, \dots, n$ :

$$\mathbf{r}_{i,k+1} - \mathbf{r}_{i,k} = (\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0}) \frac{k+1-k}{n+1} + \mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k}. \quad (80)$$

Теперь возведем результат в квадрат:

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_{i,k+1} - \mathbf{r}_{i,k})^2 &= \left( \frac{(\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})}{n+1} + \mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k} \right)^2 = \\ &= \left( \frac{(\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})}{n+1} \right)^2 + 2 \frac{(\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})}{n+1} \cdot (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k}) + \\ &\quad + (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k})^2 \end{aligned} \quad (81)$$

и просуммируем по всем разбиениям:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (\mathbf{r}_{i,k+1} - \mathbf{r}_{i,k})^2 &= (n+1) \left( \frac{(\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})}{n+1} \right)^2 + \\ &+ \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k})^2 - 2 \frac{(\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})}{n+1} \cdot \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k} - \mathbf{q}_{i,k+1}). \end{aligned} \quad (82)$$

В последней сумме остаются только два члена:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k} - \mathbf{q}_{i,k+1}) &= \mathbf{q}_{i,0} - \mathbf{q}_{i,1} + \mathbf{q}_{i,1} - \mathbf{q}_{i,2} + \dots + \\ &+ \mathbf{q}_{i,n-1} - \mathbf{q}_{i,n} + \mathbf{q}_{i,n} - \mathbf{q}_{i,n+1} = \mathbf{q}_{i,0} - \mathbf{q}_{i,n+1}, \end{aligned} \quad (83)$$

которые тоже равны нулю из-за граничных условий (79). В результате, последнее слагаемое в уравнении (82) равно нулю:

$$\sum_{k=0}^n (\mathbf{r}_{i,k+1} - \mathbf{r}_{i,k})^2 = \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k})^2 + \frac{(\hat{P}\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})^2}{n+1}. \quad (84)$$

Так мы получили перестановки только на нулевом слое  $k = 0$ . Именно это необходимо для неотрицательности детерминанта.

Тогда статистическая сумма принимает вид:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} (\kappa^2(n+1))^{\frac{3N}{2}(n+1)} \sum_P (-1)^P \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{Q}_1 \dots d\mathbf{Q}_n e^{-\pi(n+1)\kappa^2 \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k})^2} e^{-\pi\kappa^2 \sum_{i=1}^N (P\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{i,0})^2}, \quad (85)$$

или, переписывая через детерминант:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} ((n+1)\kappa^2)^{\frac{3N}{2}(n+1)} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \det \left\| e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2} \right\| \int d\mathbf{Q}_1 \dots d\mathbf{Q}_n e^{-\pi(n+1)\kappa^2 \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k})^2}. \quad (86)$$

Здесь переменные  $\mathbf{Q}_k$ , аналогично переменным  $\mathbf{R}_k$ , равны  $\mathbf{Q}_k = (\mathbf{q}_{1,k}, \dots, \mathbf{q}_{N,k})$ . Заметим, что в отсутствии взаимодействия переменные разделяются на два типа: переменная  $\mathbf{R}_0$ , координаты которой входят в детерминант, а также переменные  $\mathbf{Q}_k$ , входящие в экспоненциальный множитель. Таким образом, при интегрировании методом Монте-Карло удобно ввести два независимых шага по координатам  $\mathbf{R}_0$  и  $\mathbf{Q}_k$ . Отметим, что при включении взаимодействия факторизация (86) статистической суммы пропадает.

Если продифференцировать получившуюся статисти-

ческую сумму по температуре для поиска энергии,

мы снова получим расходящиеся при  $n \rightarrow \infty$  вклады, аналогично (16). Чтобы избежать этого, мы снова введем безразмерные переменные для замкнутых траекторий:

$$(\eta_{1,k}, \dots, \eta_{N,k}) = \mathbf{H}_k = \kappa(\mathbf{Q}_k - \mathbf{Q}_{k-1}), \quad (87)$$

$$\eta_{i,k} = \kappa(\mathbf{q}_{i,k} - \mathbf{q}_{i,k-1}), \quad k \in [1, \dots, n+1], \quad (88)$$

причем дифференциалы преобразуются следующим образом:

$$d\mathbf{H}_k = \kappa^{3N} d(\mathbf{Q}_k - \mathbf{Q}_{k-1}) = \kappa^{3N} d\mathbf{Q}_k, \quad (89)$$

$$d\eta_{i,k} = \kappa^3 d(\mathbf{q}_{i,k} - \mathbf{q}_{i,k-1}) = \kappa^3 d\mathbf{q}_{i,k}. \quad (90)$$

Помимо этого, на первом слое получаем:

$$\mathbf{H}_1 = \kappa(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_0) = \kappa\mathbf{Q}_1, \quad (91)$$

а на последнем:

$$\mathbf{H}_{n+1} = \kappa(\mathbf{Q}_{n+1} - \mathbf{Q}_n) = -\kappa\mathbf{Q}_n. \quad (92)$$

Так как  $\mathbf{Q}_m$  переменные выражаются через  $\mathbf{H}_k$  следующим образом:

то ( $\mathbf{Q}_0 = 0$ ):

$$\mathbf{Q}_m = \mathbf{Q}_0 + \kappa^{-1} \sum_{k=1}^m \mathbf{H}_k \Rightarrow \mathbf{Q}_n = \mathbf{Q}_0 + \kappa^{-1} \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k, \quad (93)$$

то ( $\mathbf{Q}_0 = 0$ ):

$$\mathbf{H}_{n+1} = -\kappa\kappa^{-1} \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k = -\sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k. \quad (94)$$

Сумма по температурным разбиениям в (86) принимает следующий вид:

$$\kappa^2 \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^n (\mathbf{q}_{i,k+1} - \mathbf{q}_{i,k})^2 = \sum_{k=1}^{n+1} \mathbf{H}_k^2. \quad (95)$$

Учитывая выражение для переменной на последнем слое (94), получим:

$$\sum_{k=1}^{n+1} \mathbf{H}_k^2 = \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k^2 + \mathbf{H}_{n+1}^2 = \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k^2 + \left( \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k \right)^2. \quad (96)$$

Таким образом, статистическая сумма (86) принимает следующий вид:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \kappa^{3N} (n+1)^{\frac{3N}{2}(n+1)} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n e^{-\pi(n+1) \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k^2} e^{-\pi(n+1) \left( \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k \right)^2} \det A(\mathbf{R}_0, \beta), \quad (97)$$

где

$$A(\mathbf{R}_0, \beta) = \|e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2}\|, \quad \det A(\mathbf{R}_0, \beta) \geq 0. \quad (98)$$

Более того, как уже было показано ранее в (44):

$$\int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n e^{-\pi(n+1) \left[ \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k^2 + \left( \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k \right)^2 \right]} = (n+1)^{-\frac{3N}{2}(n+1)}, \quad (99)$$

что позволяет проинтегрировать статистическую сумму ферми-системы по траекториям и получить формулу (58):

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \kappa^{3N} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \det A(\mathbf{R}_0, \beta). \quad (100)$$

Найдем энергию из уравнения (97):

$$\beta E = -\beta \frac{\partial \ln Z(\beta)}{\partial \beta} = \frac{3N}{2} - \frac{(n+1)^{\frac{3N}{2}(n+1)}}{N! Z(\beta)} \kappa^{3N} \int_{V^N} d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{H}_1 \dots d\mathbf{H}_n e^{-\pi(n+1) \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k^2} e^{-\pi(n+1) \left( \sum_{k=1}^n \mathbf{H}_k \right)^2} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \det A(\mathbf{R}_0, \beta). \quad (101)$$

Здесь снова понадобится формула для производной детерминанта (59). Тогда

$$\beta \frac{\partial}{\partial \beta} A(\mathbf{R}_0, \beta) = \|\beta \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2}\| = \|\pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2 e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2}\|. \quad (102)$$

Итого, получаем следующее выражение для энергии:

$$\beta E = \frac{3N}{2} - \left\langle \text{tr} \left( A^{-1}(\mathbf{R}_0, \beta) \cdot \left\| \pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2 e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_{i,0} - \mathbf{r}_{j,0})^2} \right\| \right) \right\rangle. \quad (103)$$

В результате, получаем такое же выражение для энергии, как в уравнении (60), будто разбиения отсутствуют.

#### 4.4. Частично поляризованный и неполяризованный идеальный ферми-газ

Обычно под идеальным ферми-газом имеется в виду газ двух групп  $N/2 + N/2$  частиц со спином  $1/2$ , каждая из которых имеет частицы противоположной проекции спина. Тогда перестановки необходимо учитывать только в каждой подгруппе частиц с одной и той же проекцией; таким образом, статистическая сумма (58)

принимает вид ( $N_u = N_d = N/2$ ):

$$Z(\beta) = \frac{1}{N_u! N_d!} \kappa^{3N} \int_{V^N} \det A^u(\beta) \det A^d(\beta) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (104)$$

где матрица для частиц с проекцией спина “вверх”:

$$A^u(\beta) = \left\| e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2} \right\|_{i,j=1}^{N_u}, \quad (105)$$

и матрица для частиц с проекцией спина “вниз”:

$$A^d(\beta) = \left\| e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2} \right\|_{i,j=N_u+1}^N. \quad (106)$$

Матрицы  $A^u(\beta)$  и  $A^d(\beta)$  имеют размер  $N_u \times N_u$  и  $N_d \times N_d$ , соответственно. Формулы справедливы также и в случае частично поляризованного газа ( $N_u \neq N_d$ ,  $N_u + N_d = N$ ). В результате, все предыдущие формулы меняются похожим образом: в статистической сумме появляется произведение факторов, относящихся к частицам  $N_u$  и  $N_d$ , а энергия этих двух подсистем складывается. Например, формула (60) принимает вид:

$$\beta E = \frac{3N}{2} - \left\langle \text{tr} \left( (A^u(\beta))^{-1} \beta \frac{\partial A^u(\beta)}{\partial \beta} \right) \right\rangle - \left\langle \text{tr} \left( (A^d(\beta))^{-1} \beta \frac{\partial A^d(\beta)}{\partial \beta} \right) \right\rangle. \quad (107)$$

В расчетах мы будем рассматривать именно неполяризованный идеальный ферми-газ ( $N_u = N_d$ ), чтобы сравнить результаты моделирования с аналитическими [22].

## 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНТЕ-КАРЛО

Мы выполняем моделирование методом Монте-Карло стандартным образом. Процесс начинается с генерации случайной конфигурации, после чего случайно выбирается одна частица. Ее траектория целиком смещается случайным образом, а затем изменяются положения точек в каждом высокотемпературном разбиении. Все координаты, входящие в детерминант, *всех* частиц также смещаются на каждом шаге.

После выхода энергии на равновесный участок проводится  $10^7$  шагов для классического идеального газа и  $2 \times 10^5$  шагов для невзаимодействующего неполяризованного ферми-газа. Для анализа результатов весь равновесный участок моделирования делится на 20 блоков, после чего вычисляется среднее значение и статистическая погрешность с использованием метода блочного усреднения. Во всех случаях применяются периодические граничные условия и соглашение о минимальном изображении. Дополнительные детали метода Монте-Карло приведены в работе [23].

### 5.1. Идеальный газ

В таблице 1 представлены результаты моделирования идеального бoльцмановского газа с использованием интегралов по траекториям для разных значений параметра  $n$  при  $N = 100$ . Моделирование проводилось с использованием функции распределения из уравнения (13), а энергия рассчитывалась по формуле (16).

**Таблица 1.** Зависимость безразмерной энергии  $\beta E/N$  классической системы без взаимодействия от числа высокотемпературных разбиений на одну частицу.

| $n$ | (16)     |
|-----|----------|
| 0   | 1.5      |
| 1   | 1.503(6) |
| 5   | 1.49(4)  |
| 10  | 1.49(6)  |
| 20  | 1.40(13) |
| 50  | 1.7(3)   |

Как видно из таблицы, статистическая погрешность увеличивается с ростом числа разбиений  $n$ . Однако, с учетом погрешностей, энергия совпадает с точным значением  $3N/2$ .

### 5.2. Идеальный ферми-газ электронов

Рассмотрим теперь идеальный ферми-газ на примере электронного газа. Тогда термодинамика ферми-газа определяется параметрами Бракнера  $r_s = r_a/a_B$  и вырождения  $\theta = kT/E_F$ , где  $r_a$  — среднее межчастичное расстояние между частицами газа, определяемое обычно из условия  $(4/3)\pi r_a^3 = V/N$ ,  $a_B = \hbar^2/(m_e e^2)$  — радиус Бора, а  $E_F = (\hbar^2/2m_e)(3\pi^2 N/V)^{2/3}$  — энергия Ферми,  $m_e$  — масса электронов,  $e > 0$  — заряд электрона. В таблице 2 показаны результаты моделирования для различных методов расчета при  $r_s = 28$  и  $\theta = 2$ . Расчеты выполнены для  $N_u = N_d = 25$ , причем во всех случаях использовалось одно и то же начальное зерно генератора случайных чисел. В таблице 3 также указано значение среднего знака. Результаты для более широкого диапазона температур представлены на рисунке 1.

**Таблица 2.** Зависимость безразмерной энергии  $\beta E/N$  ферми-газа без взаимодействия от числа высокотемпературных разбиений и метода расчета на одну частицу при  $r_s = 28$  и  $\theta = 2$ . В случае  $n = 0$  все методы совпадают. Точный результат был получен с помощью кода `ifg` [22] и равен  $\beta E = 1.57018$ .

| $n$ | (66)      | (69)      | (103)     |
|-----|-----------|-----------|-----------|
| 0   | 1.5676(5) | 1.5676(5) | 1.5675(5) |
| 1   | 1.4(3)    | 1.6(2)    | 1.5677(5) |
| 2   | 1.4(5)    | 1.49(10)  | 1.5674(3) |

**Таблица 3.** Средний знак  $S = \langle S(\mathcal{R}) \rangle'$ .

| $n$ | (63) | (67) | (97) |
|-----|------|------|------|
| 0   | 1    | 1    | 1    |
| 1   | 0.22 | 0.22 | 1    |
| 2   | 0.13 | 0.13 | 1    |

Мы видим, что результат моделирования в случае  $n = 0$  отлично согласуется с точным значением. Небольшое отличие этих данных за пределами статистической погрешности объясняется проявлением зависимости энергии от числа частиц. С увеличением числа разбиений,  $n$ , статистическая погрешность возрастает на два порядка, а средний знак уменьшается более чем в 5 раз для стандартных методов моделирования со статистическими суммами (63) и (67). Как и ожидалось, выражение для энергии с использованием размерных переменных (66) приводит к значительному увеличению погрешности при росте  $n$ , тогда как формула (69) с безразмерными переменными демонстрирует меньшую чувствительность к числу разбиений (расчет энергии по формулам (66) и (69) в таблице 2 произведен по одному и тому же набору траекторий).

В то же время, точность результатов моделирования со статической суммой (97) и энергией (103) показывает очевидные преимущества над стандартными подходами. Порядок статистической погрешности и значения энергии не зависят от числа разбиений  $n$ . Кроме того, средний знак моделирования равен 1, так как детерминант в формуле (97) является неотрицательным. Таким образом, предложенная в работе [15] замена переменных (76) существенно повышает качество результатов моделирования вырожденных систем без увеличения вычислительных затрат.

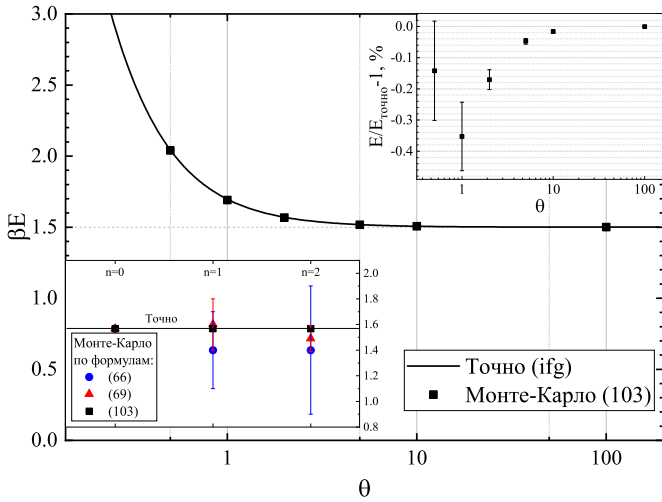


**Рисунок 1.** Зависимость энергии идеального ферми-газа от параметра вырождения  $\theta$  при  $r_s = 28$ . Сплошная кривая соответствует точным результатам, полученным с использованием кода ifg [22]. Черные квадраты отображают результаты моделирования методом Монте-Карло с применением замкнутых траекторий (103). В правом верхнем углу на вставке показано отклонение этих данных от точной кривой в процентах. На вставке в левом нижнем углу представлена зависимость энергии от числа высокотемпературных разбиений  $n$  при  $r_s = 28$  и  $\theta = 2$  (см. таблицу 2).

Все полученные результаты также проиллюстрированы на рисунке 1.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлены выражения для статистических сумм и энергий невзаимодействующих бозе-газа и ферми-газа в формализме интегралов по траекториям. Мы показали, что замены переменных, представленные в работах [5, 15], значительно уменьшают статистическую погрешность моделирования Монте-Карло с интегралами по траекториям, позволяют точно решить проблему знаков, и даже проинтегрировать аналитически по температурным разбиениям траекторий в отсутствие взаимодействия. Мы надеемся, что детальное объяснение этих идей на примере простых невзаимодействующих систем продвинет дальнейшее развитие аналогичных подходов для систем со взаимодействием.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Данная статья посвящается д.ф.-м.н. Владимиру Сергеевичу Филинову в честь его 80-летия. Мы благодарим В.С. Филинова за многочисленные объяснения своих идей и обсуждения результатов работы.

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант № 23-1-5-119-1). Авторы выражают благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН и Центру коллективного пользования “Дальневосточный вычислительный ресурс” ИАПУ ДВО РАН за предоставленное вычислительное время.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Замалин В М, Норман Г Э и Филинов В С 1977 *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике* (Москва: Наука)
2. Tuckerman M E 2023 *Statistical mechanics: theory and molecular simulation* (Oxford university press)
3. Filinov A V, Golubnychiy V O, Bonitz M, Ebeling W and Dufty J W 2004 *Phys. Rev. E* **70** 046411
4. Feynman R P 1972 *Statistical mechanics: a set of lectures by R. P. Feynman* Frontiers in physics notes taken by R. Kikuchi and H. A. Feiveson. Edited by Jacob Shaham
5. Filinov V S, Bonitz M, Ebeling W and Fortov V E 2001 *Plasma Physics and Controlled Fusion* **43** 743–759
6. Trotter H F 1959 *Proceedings of the American Mathematical Society* **10** 545–551
7. Зеленер Б В, Норман Г Э и Филинов В С 1972 *ТВТ* **10** 1160–1170
8. Kelbg G 1963 *Annalen der Physik* **467** 219–224
9. Демьянов Г С и Левашов П Р 2022 *Вестник ОИВТ РАН* **7** 30–39
10. Butlitsky M A, Zelener B B, Zelener B V and Manykin E A 2008 *Computational Mathematics and Mathematical Physics* **48** 147–151
11. Tuckerman M E, Berne B J, Martyna G J and Klein M L 1993 *The Journal of Chemical Physics* **99** 2796–2808
12. Потапов Д О и Кондратюк Н Д 2024 *Письма в ЖЭТФ* **119** 897–903
13. Alexandru A, Başar G, Bedaque P F and Warrington N C 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 015006
14. Dornheim T, Groth S and Bonitz M 2018 *Physics Reports* **744** 1–86
15. Filinov V S, Larkin A S and Levashov P R 2020 *Phys. Rev. E* **102** 033203
16. Dornheim T 2021 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **54** 335001
17. Magnus J R and Neudecker H 2019 *Matrix differential calculus with applications in statistics and econometrics* (John Wiley & Sons)
18. Dornheim T and Vorberger J 2021 *The Journal of Chemical Physics* **154** 144103
19. Filinov V, Levashov P and Larkin A 2021 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **55** 035001
20. Filinov V, Syrovatka R and Levashov P 2022 *Molecular Physics* **120** e2102549
21. Huang X, Plechac P, Sandberg M and Szepessy A 2023 Path integral molecular dynamics approximations of quantum canonical observables arXiv:2311.17333
22. Kozharin A S and Levashov P R 2021 *Contributions to Plasma Physics* **61** e202100139
23. Demyanov G and Levashov P 2024 *Computer Physics Communications* **305** 109326