

## Klasifikacija relevantnih trajektorija u funkcionalnim integralima

---

Računanje funkcionalnih integrala analitičkim putem je, osim za slobodnu česticu, nemoguće, zato se danas funkcionalni integrali računaju numerički. Cilj ovog rada je da odredi trajektorije koje značajno doprinose amplitudi verovatnoće i time omogući jednostavnije računanje funkcionalnih integrala. Trajektorije su klasifikovane prema svojoj izlomljenosti i relativnom doprinosu amplitudi verovatnoće. Kako svaku trajektoriju posmatramo kao izlomljenu liniju sa  $N$  podeonih tačaka, njenu izlomljenost smo definisali količnikom zbira njenih ekstremuma i ukupnog broja podeonih tačaka. Ispitivana su dva algoritma sa različitim metodama generisanja trajektorija. Za oba algoritma smo pokazali da trajektorije čija je izlomljenost  $0.5 \pm \sigma$  daju praktično celokupni doprinos računatim amplitudama. Takođe pokazali smo da teži nuli onda kada je  $N$  konačno veliki broj, odnosno u slučaju  $N \rightarrow \infty$  jedini nenulti doprinos davaće samo trajektorije čija je izlomljenost 0.5. Na osnovu ovoga smo pokazali da su efikasni algoritmi za generisanje trajektorija oni koji isključivo generišu trajektorije čija je izlomljenost 0.5.

---

### Uvod

Prvi opis kvantnih teorija nastaje na operatorskom formalizmu u kome je stanje kvantnog sistema u trenutku  $t$  opisano vektorom  $|q, t\rangle$ . Ako posmatramo kvantno-mehanički sistem čestice koja se kreće u jednoj dimenziji, tada  $|q, t\rangle$  predstavlja položaj čestice  $q$  u trenutku  $t$  (Balaž 2005). Sve merljive veličine su u ovom formalizmu prikazane skalarnim proizvodima različitih stanja kvantno-mehaničkih sistema. Ako sa  $A(q, t | q', t')$  označimo skalarni proizvod, odnosno amplitudu verovatnoće sa  $\langle q', t' | q, t \rangle$ , tada je verovatnoća prelaza čestice iz stanja  $|q, t\rangle$  u trenutku  $t$  u stanje  $|q', t'\rangle$  u trenutku  $t'$  data sa

$$|A(q, t | q', t')|^2.$$

U operatorskom formalizmu je gornja amplituda verovatnoće prelaza data u sledećem obliku

---

Mirjana Dimitrievska  
(1987), *Devete brigade*  
11/10, učenica 3.  
razreda Gimnazije  
"Bora Stanković" u  
Boru

MENTORI:

Jelena Grujić, ISP

Dr Aleksandar  
Bogojević, Institut za  
fiziku, Zemun

$$A(q, t | q', t') = \langle q, t | q', t' \rangle = \langle q' | \hat{U}(t' - t, t) | q \rangle$$

gde je  $\hat{U}(t' - t, t)$  evolucionni operator koji opisuje evoluciju sistema od trenutka  $t$  do trenutka  $t'$ . U slučaju konzervativnih sistema (u kojima važi zakon održanja energije), a takav ovde posmatramo, evolucionni operator zavisi samo od vremena trajanja evolucije  $T = t' - t$ , i računa se kao

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

gde je  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , pri čemu je  $h$  Plankova konstanta, a  $\hat{H}$  hamiltonijan sistema, odnosno operator koji opisuje energiju sistema u kvantnoj mehanici. U ovom radu ćemo se baviti sistemima čiji je hamiltonijan sledećeg oblika

$$H = \frac{1}{2} \cdot \dot{q}^2 + V(q) \quad (1)$$

Alternativni zapis kvantne teorije (ekvivalentan sa operatorskim) je funkcionalni formalizam u kome se amplitude verovatnoće dobijaju sabiranjem doprinosa svih mogućih evolucija, odnosno svih mogućih trajektorija koje zadovoljavaju posmatrane granične uslove  $q(t) = q$  i  $q(t') = q'$  (Feynman i Hibbs 1965). Fajnman je amplitudu verovatnoće predstavio kao sledeći funkcional (preslikavanje određene funkcije u broj)

$$A(q, q', T) = \int [d\mu] \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S[q(t)]} \quad (2)$$

gde je  $e^{(i/\hbar)S}$  određena težina koja se dodeljuje svakoj trajektoriji (doprinos), a  $S$  dejstvo te trajektorije koje se računa kao

$$S = \int_t^{t'} L dt$$

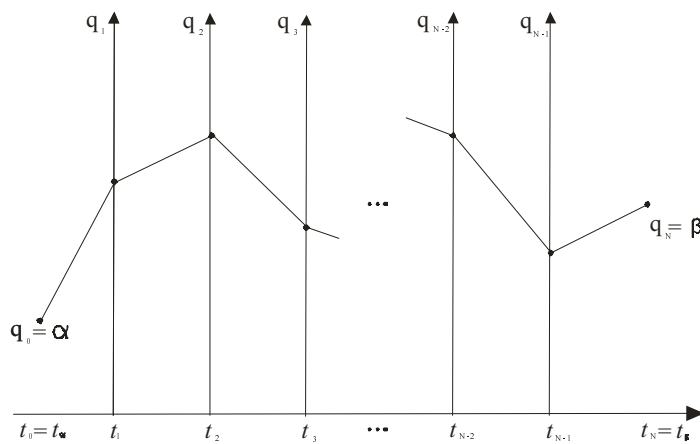
gde je  $L$  lagranžijan, odnosno razlika između kinetičke i potencijalne energije. U konzervativnim sistemima koje ovde posmatramo i na osnovu relacije (1) koja opisuje hamiltonijan sistema dobijamo langranžijan sledećeg oblika

$$L = \frac{1}{2} \cdot \dot{q}^2 - V(q)$$

gde  $\frac{1}{2} \dot{q}^2$  predstavlja kinetičku, a  $V(q)$  potencijalnu energiju.

U relaciji (2) izraz  $\int [d\mu]$  predstavlja beskonačni višestruki integral koji podrazumeva sumiranje doprinosa svih trajektorija  $q(t)$  sa graničnim uslovima  $q(t) = q$  i  $q(t') = q'$ . Lako možemo pokazati da je u slučaju sistema koje razmatramo, opisanih hamiltonijanom oblika (1), mera oblika  $d\mu = \prod_{t \in [t, t']} d q(t)$ .

Trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove ima beskonačno mnogo zato ćemo skup svih trajektorija koje zadovoljavaju granične uslove aproksimirati skupom izlomljenih trajektorija koje se sastoje od  $N$  duži. Svaku trajektoriju ćemo posmatrati kao izlomljenu liniju sa presečnim tačkama  $q_1, q_2, \dots, q_{N-1}, q_N$  gde vrednost  $q_i$  ide po celoj realnoj osi (slika 1).



Slika 1. Ilustracija definicije funkcionalnog integrala (prikaz trajektorije kao izlomljene linije)

Figure 1. Illustration of an N-fold discretized trajectory

Ovakvom diskretizacijom sistema, doprinos svake trajektorije se može izračunati kao

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon \cdot \left[ \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} \right)^2 - V \left( \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\} \quad (3)$$

gde je vremenski korak  $\varepsilon = \frac{T}{n}$ , a  $n \in \{1, \dots, N-1\}$ .

Međutim, sabiranje oscilujućih izraza  $e^{(i/\hbar)S}$  iz relacije (3) je veoma složen proces. U numeričkim proračunima funkcionalnih integrala (ali i u nekim analitičkim računima) nepohodno je izvršiti tzv. Wick rotaciju teorije, odnosno nepohodno je posmatrati evoluciju sistema ne u realnom vremenu  $T$  već u imaginarnom vremenu  $\tau = i \cdot T$ . U ovom slučaju je doprinos svake trajektorije dat pozitivnim težinskim faktorom  $e^{-\frac{1}{\hbar}S}$  (Balaž 2005).

U nekim slučajevima, korišćenjem aproksimacija, možemo analitički izračunati funkcionalne integrale, međutim veliki je broj teorija kod kojih

je računanje ovih integrala jedino moguće numeričkim putem. Numerički metodi za računanje funkcionalnih integrala bazirani su na direktnom izračunavanju višestrukih, odnosno  $N$ -tostrukih integrala po prethodnoj relaciji.

Metodi se razlikuju po veličini ocenjene greške. Kvalitet nekog metoda ocenjuje se na osnovu veličine greške i vremena utrošenog za izračunavanje integrala. Kako je u ovom slučaju potrebno rešavati integrale visoke dimenzionalnosti, najpovoljnije je koristiti Monte Karlo metod.

Od svih trajektorija kojima se računa funkcionalni integral, neke trajektorije daju veći a neke manji doprinos amplitudi verovatnoće. Cilj ovog istraživanja biće klasifikacija tih trajektorija po njihovim relativnim doprinosima amplitudi verovatnoće u zavisnosti od njihove izlomljenosti. Kako se trajektorija posmatra kao izlomljena linija sa  $N$  podeonih tačaka, njenu izlomljenost možemo izračunati brojanjem lokalnih minimuma i maksimuma (Bogojević *et al.* 2005a). Izlomljenost trajektorije računa se sledećom relacijom

$$J = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} \left( \frac{1 - \operatorname{sgn}((q_i - q_{i-1}) \cdot (q_{i+1} - q_i))}{2} \right)}{N-1} \quad (4)$$

Ovim metodom računanja vrednost izlomljenosti trajektorije se uvek nalazi u intervalu  $[0, 1]$  i tako smo dobili mogućnost upoređivanja i klasifikacije trajektorija nezavisno od broja podeonih tačaka  $N$ . Primenom relacije (4) na glatke funkcije sa konačnim brojem ekstremuma i kod kojih važi da  $N \rightarrow \infty$ , dobija se da je vrednost njihove izlomljenosti

$$J = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} \left( \frac{1 - \operatorname{sgn}((q_i - q_{i-1}) \cdot (q_{i+1} - q_i))}{2} \right)}{\infty} \rightarrow 0$$

U ovom radu ćemo pokazati da ovakve funkcije ne daju nikakav doprinos (u kontinualnoj teoriji, tj.  $N \rightarrow \infty$ ), odnosno veoma mali doprinos u slučaju diskretne teorije (za konačno  $N$ ).

Svaku trajektoriju karakteriše jedna vrednost izlomljenosti, dok skup trajektorija sa istim brojem podeonih tačaka karakteriše fizička vrednost izlomljenosti koja predstavlja srednju vrednost izlomljenosti svih trajektorija koje se generišu numerički i njena vrednost zavisi od metoda za generisanje trajektorija. Fizička vrednost izlomljenosti računa se sledećom relacijom

$$\langle J \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} J_i \cdot e^{-\frac{1}{h} \cdot S_i}}{N_{MC}} \quad (5)$$

gde je  $N_{MC}$  u našem slučaju broj Monte Karlo uzoraka.

Relativni doprinos trajektorija amplitudi verovatnoće dobijamo sabiranjem količnika doprinosa i amplitude verovatnoće trajektorija iste izlomljenosti, odnosno za sve trajektorije iste izlomljenosti računamo relativni doprinos sledećom relacijom

$$\delta = \frac{\sum_{j=1}^m \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \cdot S_j\right\}}{A(q, q', T)} \quad (6)$$

gde je  $m$  broj trajektorija sa istom izlomljenosti.

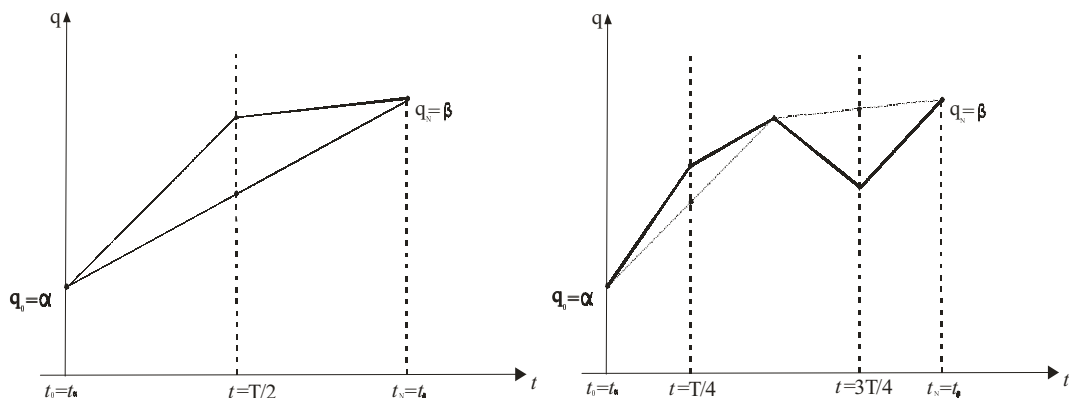
Na osnovu izlomljenosti i doprinosa amplitudi verovatnoće odredićemo trajektorije koje značajno utiču na amplitudu verovatnoće, a samim tim omogućiće se brže računanje funkcionalnih integrala.

## Metod

U ovom istraživanju korišćen je, sa manjim izmenama, osnovni Monte Karlo algoritam razvijen na Institutu za fiziku u Beogradu (*Speedup-serial* neparalelna verzija), (Bogojević *et al.* 2005b). Osnovni algoritam generiše trajektorije kao izlomljene linije sa određenim brojem podeonih tačaka  $N$ , sa početnim položajem  $q[0]$  i krajnjim položajem  $q[N]$ . Trajektorija se generiše tako što se prvo generiše tačka u sredini, kao aritmetička sredina početnog i krajnjeg položaja, a zatim se pomoću Gausove raspodele generiše slučajni broj oko te tačke sa širinom  $\sigma_1$ . U drugom koraku se generišu dve tačke, prva kao aritmetička sredina početne  $q[0]$  i srednje  $q[2]$ , a druga kao aritmetička sredina srednje  $q[2]$  i krajnje  $q[N]$ , zatim se oko ovih tačaka Gausovom raspodelom ponovo generišu slučajni brojevi sa širinom  $\sigma_2$ , tako se dobijaju još dve nove tačke trajektorije (slika 2).

Slika 2.  
Ilustracija generisanja trajektorija metodom prikazanom u algoritmu *Speedup-serial*

Figure 2.  
Illustration of the bisection procedure for generating trajectories used in the basic algorithm

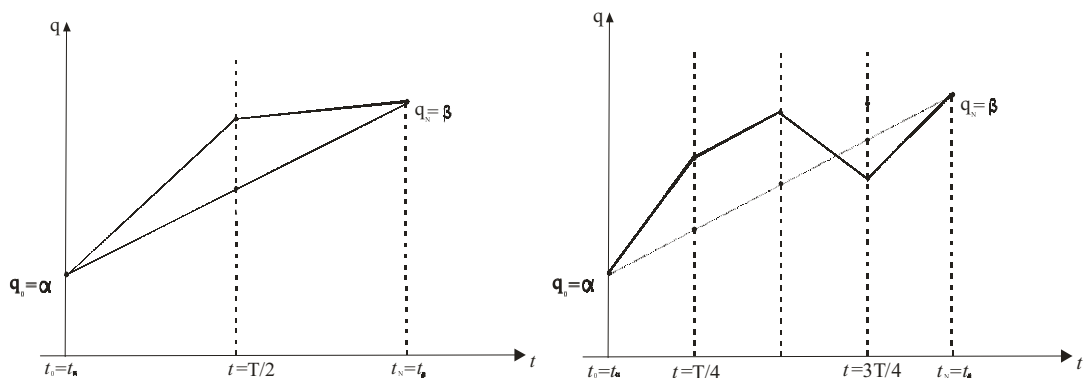


U sledećem koraku se po istom principu između svake dve tačke generiše po jedna nova, itd. Ukupno ima  $s$  koraka, gde je  $s$  broj koji određuje broj  $N$ , odnosno  $N = 2^s$ . Takođe, u svakom koraku se menja širina gausijana u Gausovoj raspodeli kao

$$\sigma = \sqrt{p \cdot \frac{T}{2^n}} \quad (7),$$

gde je  $n$  trenutni broj koraka,  $n \in \{1, \dots, s\}$ , a  $p$  konstanta. U ovom istraživanju generisaće se trajektorije za različite vrednosti konstante  $p$  između 0 i 1 kako bi se utvrdilo za koju vrednost konstante se dobija najmanja vrednost greške amplitude verovatnoće, a tako ćemo i ispitati efikasnost algoritma. Standardni bisekcioni metod Levi (Ceperley 1995), malo pre opisan, koristi vrednost parametra  $p = 0.5$ . U ovom radu ćemo takođe pokazati da se za ovu vrednost parametra dobija najmanja relativna greška.

U algoritmu su dodate funkcije za računanje izlomljenosti, relacija (4), i relativnog doprinosa trajektorija, relacija (6), kao i za računanje fizičke vrednosti izlomljenosti trajektorija, relacija (5).



Kasnije je i izvršena izmena osnovnog algoritma u generisanju trajektorija (*Speedup-serial1*). Nove trajektorije se generišu na sličan način, prva tačka se generiše isto kao u prethodnom slučaju, dok se ostale generišu na drugačiji način. U drugom koraku se generišu dve tačke, prva kao aritmetička sredina između vrednosti početne i srednje tačke, a druga kao aritmetička sredina vrednosti srednje i krajnje tačke. Razlika je u tome što se za vrednost srednje tačke uzima ona vrednost pre generisanja slučajnog broja oko ove tačke (slika 3). Tako se nastavlja i u ostalim koracima. Pokazaćemo da je izmenjena verzija algoritma (*Speedup-serial1*) mnogo manje efikasna od algoritma koji koristi bisekcioni metod, ali da daje širi opseg izlomljenosti trajektorija.

Osnovna i izmenjena verzija algoritma prikazane su u Dodatku.

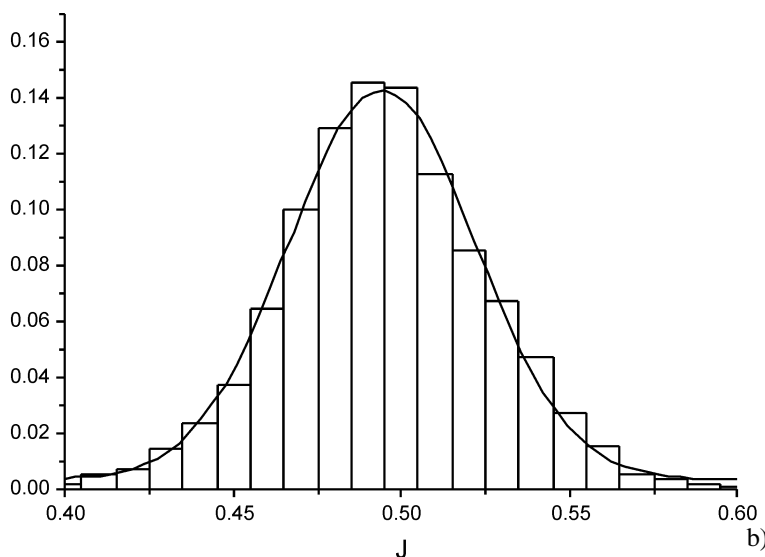
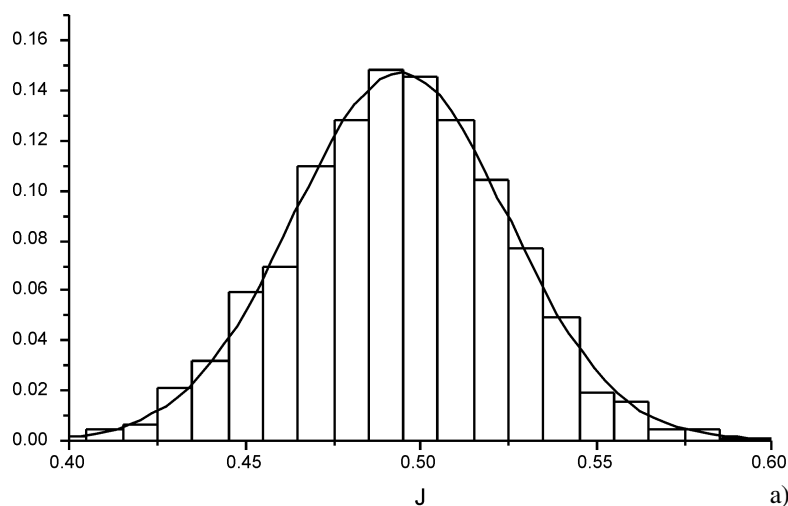
Slika 3. Ilustracija generisanja trajektorija metodom prikazanom u algoritmu *Speedup-serial1*

Figure 3. Illustration of trajectory generating using method represented in the modified algorithm

## Rezultati i diskusija

Sve simulacije su urađene za iste početne parametre, koordinate  $a=0$  i  $b=1$ , vreme  $T=1$ . Broj Monte Karlo uzorka iznosio je  $N_{MC} = 10^7$  sa najviše  $N = 2048$  podeonih tačaka na svakoj trajektoriji.

Na slikama 4a i 4b prikazana je relativna distribucija trajektorija u zavisnosti od njihove izlumljenosti za  $N = 256$ . Grafik 4a dobijen je korišćenjem algoritma *Speedup-serial*, a grafik 4b izmenjene verzije algoritma *Speedup-serial1*. Grafici pokazuju da oba algoritma generišu najviše trajektorija sa izlumljenošću 0.5, međutim opseg izlumljenosti algoritma *Speedup-Serial1* je veći od opsega osnovnog algoritma za  $0.07 \cdot \sigma$ .



Slika 4.  
Distribucija trajektorija za algoritme *Speedup-serial* i *Speedup-serial1*.

Početni parametri:  
 $a=0$  i  $b=1$ ,  $T=1$ ,  
 $N_{MC} = 10^7$ ,  $N = 256$ .

Dobijeni rezultati:

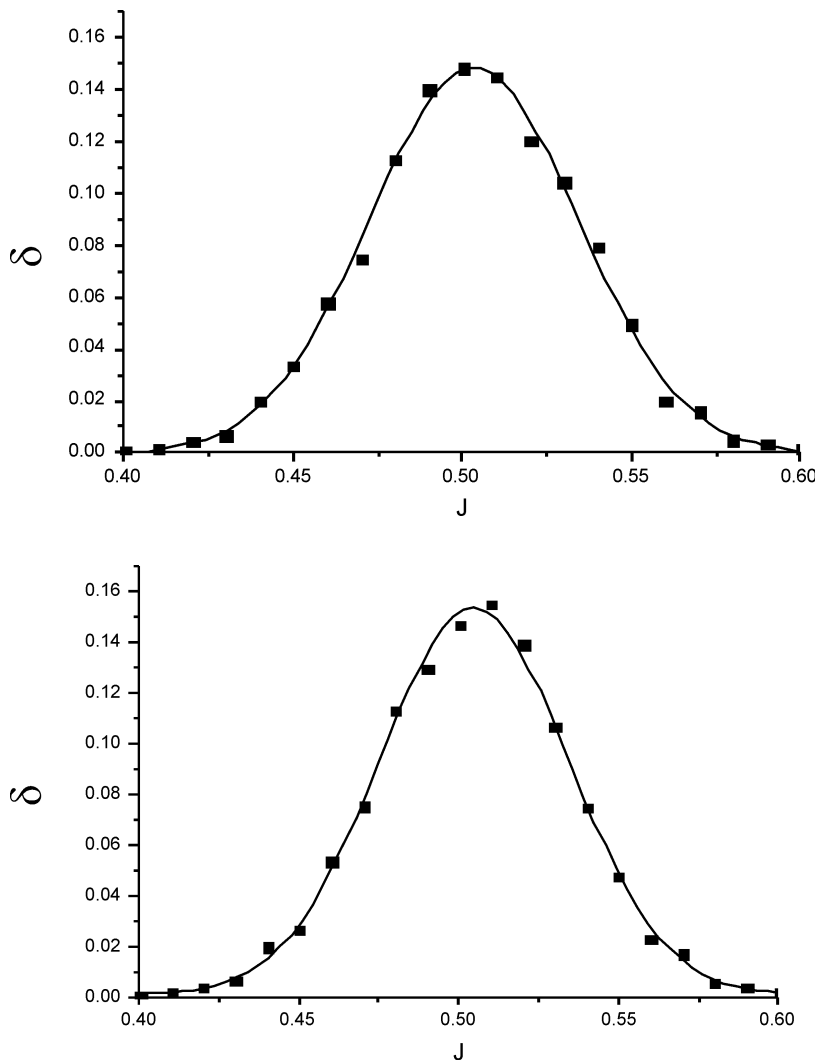
a) Algoritam *Speedup-serial*:  
srednja izlumljenost  
 $\langle J \rangle = 0.501 \pm 0.005$ ,  
širina gausijana  
 $\sigma = 0.0595 \pm 0.0009$ .

b) *Speedup-serial1*:  
srednja izlumljenost  
 $\langle J \rangle = 0.497 \pm 0.005$ ,  
širina gausijana  
 $\sigma = 0.0639 \pm 0.0009$ .

Figure 4.  
Relative distribution of jaggedness for the basic algorithm (a) and modified algorithm (b).  
Boundary conditions:  
 $a=0$  i  $b=1$ ,  $T=1$ , the number of Monte Carlo samples is  $N_{MC} = 10^7$  with  $N = 256$  partition points for each trajectory. Also shown is the fit to a Gaussian:

a) basic algorithm  
average jaggedness  
 $\langle J \rangle = 0.501 \pm 0.005$ ,  
standard deviation  
 $\sigma = 0.0595 \pm 0.0009$

b) for modified algorithm  
average jaggedness  
 $\langle J \rangle = 0.497 \pm 0.005$   
standard deviation  
 $\sigma = 0.0639 \pm 0.0009$



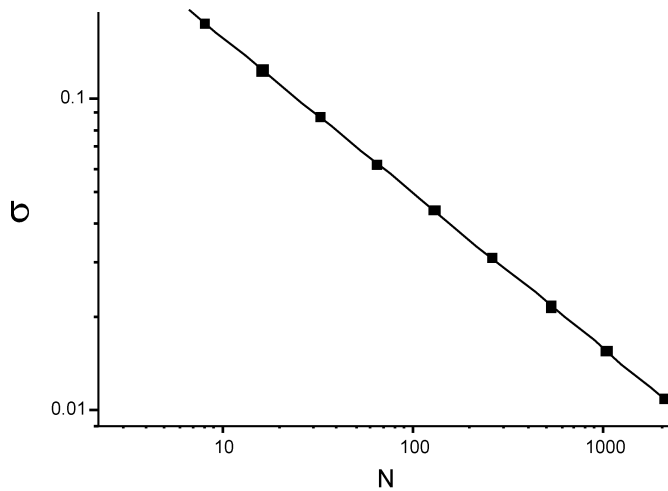
Slika 5.  
Zavisnost relativnog doprinosa trajektorija amplitudi verovatnoće od izlomljenosti trajektorije za algoritme *Speedup-serial* i *Speedup-serial1*. Početni parametri:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ ,  $N_{MC} = 10^7$ ,  $N = 256$ . Fitovanjem Gausovom krivom dobijeni su sledeći rezultati:  
a) *Speedup-serial*: srednja izlomljenost  $\langle J \rangle = 0.503 \pm 0.005$ , širina gausijana  $\sigma = 0.0537 \pm 0.0009$ .  
b) *Speedup-serial1*: srednja izlomljenost  $\langle J \rangle = 0.506 \pm 0.005$ , širina gausijana  $\sigma = 0.0609 \pm 0.0009$ .

Figure 5.  
The relative contributions to transition amplitudes for different values of jaggedness for the basic algorithm (a) and modified algorithm (b). Boundary conditions:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ , Number of Monte Carlo samples is  $N_{MC} = 10^7$ , with  $N = 256$  partition points at each trajectory. Fits to Gaussian distribution curve with center at jaggedness  
a) for basic algorithm:  $\langle J \rangle = 0.503 \pm 0.005$ , standard deviation  $\sigma = 0.0537 \pm 0.0009$ .  
b) for modified algorithm:  $\langle J \rangle = 0.506 \pm 0.005$ , standard deviation  $\sigma = 0.0609 \pm 0.0009$ .

Na graficima 5a i 5b prikazane su zavisnosti relativnog doprinosa amplitudi verovatnoće trajektorija ( $\delta$ ) od izlomljenosti. Grafik 5a je rezultat metoda generisanja trajektorija osnovnog algoritma, dok je grafik 5b rezultat metoda generisanja trajektorija izmenjenog algoritma *Speedup-serial1*. Sa grafika se vidi da u oba slučaja najveći relativni doprinos amplitudi verovatnoće daju trajektorije čija je izlomljenost  $J = 0.5$ .

Primećeno je i da se širina Gausove krive menja zavisno od broja po-deonih tačaka trajektorije  $N$ . Na grafiku 6 prikazana je ova zavisnost. Sa grafika je dobijeno da se širina Gausove krive smanjuje srazmerno sa  $\frac{1}{\sqrt{N}}$ . Konkretno za parametre na grafiku dobijeno je  $\sigma = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}}$ . Ovako





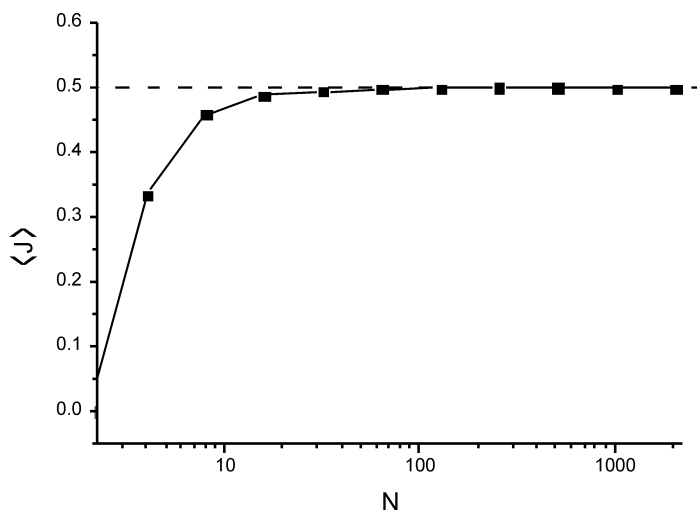
Slika 6.  
Zavisnost širine Gausove krive  $\sigma$  od broja podeonih tačaka za algoritam *Speedup-serial*. Početni parametri:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ ,  $N_{MC} = 10^7$ ,  $N = 2048$ . Zavisnost dobijena fitovanjem:  $\sigma = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}}$ .

Figure 6.  
Standard deviation  $\sigma$  versus number of partition points  $N$  of trajectories for basic algorithm.

Edge conditions  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ , number of Monte Carlo samples is  $N_{MC} = 10^7$  with greatest number of 2048 partition point at each trajectory. Fits to  $\sigma = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}}$ .

dobijena zavisnost govori da značajan doprinos amplitudi verovatnoće daju samo one trajektorije čija se vrednost izlomljenosti nalazi u okolini vrednosti 0.5. U slučaju  $N \rightarrow \infty$  vidimo da jedini ne nulti doprinos daju samo trajektorije čija je izlomljenost 0.5. Na osnovu ovoga zaključujemo da su efikasni algoritmi za generisanje trajektorija oni koji isključivo generišu trajektorije sa izlomljenošću 0.5.

Na slici 7 prikazana je zavisnost fizičke vrednosti izlomljenosti  $\langle J \rangle$  od broja podeonih tačaka  $N$  za algoritam *Speedup-serial*. Sa grafika se vidi da se veoma brzo uspostavlja konstantna vrednost izlomljenosti  $\langle J \rangle = 0.5$ , što opet pokazuje da su najznačajnije trajektorije (one koje najviše doprinose amplitudi verovatnoće) one sa izlomljenošću 0.5. Algoritmi kod kojih se brže uspostavlja konstantna vrednost fizičke izlomljenosti su efikasniji, jer



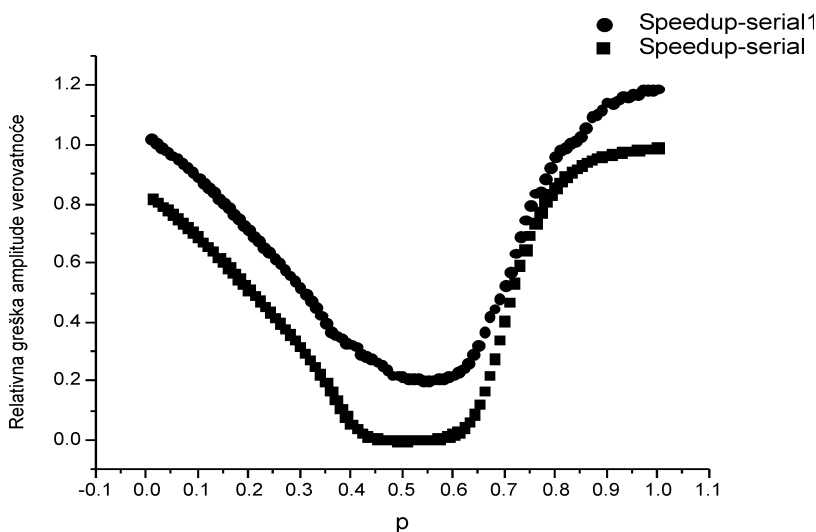
Slika 7.  
Zavisnost fizičke vrednosti izlomljenosti  $\langle J \rangle$  od broja podeonih tačaka trajektorije  $N$  za algoritam *Speedup-serial*. Početni parametri:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ ,  $N_{MC} = 10^7$ ,  $N = 2048$ .

Figure 7.  
Dependance of the average value of jaggedness on the number of trajectory partition points  $N$  for the basic algorithm. Starting parameters:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ , number of Monte Carlo samples is  $N_{MC} = 10^7$  with up to 2048 partition points for each trajectory.

se kod njih generišu samo one trajektorije koje daju ne nulti doprinos amplitudi verovatnoće, pa je tako vreme njihovog izvršavanja kraće.

Efikasnost algoritama koji su ovde korišćeni, proverena je i na drugačiji način. Posmatrana je zavisnost relativne greške amplitude od parametra  $p$ , opisanog u relaciji (7). Na slici 8 prikazana je zavisnost relativne greške amplitude verovatnoće od vrednosti parametra  $p$  za oba algoritma. Sa grafika se vidi da izmenjena verzija algoritma daje veću grešku nego metoda generisanja trajektorija u osnovnom algoritmu, međutim, za vrednost parametra  $p = 0.5$ , oba algoritma daju najmanju relativnu grešku.

## Zaključak



Slika 8. Zavisnost relativne greške amplitude verovatnoće od parametra  $p$  za algoritme *Speedup-serial* i *Speedup-serial1*. Početni parametri:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ ,  $N_{MC} = 10^7$ ,  $N = 1024$ .

Figure 8. Relative error of transition amplitude versus parameter  $p$  for basic and modified algorithms. Parameter  $p$  goes from 0 to 1 with step 0.01. The boundary conditions:  $a = 0$  i  $b = 1$ ,  $T = 1$ , number of Monte Carlo samples is  $N_{MC} = 10^7$  with 1024 partition point at each trajectory.

U ovom istraživanju klasifikovane su trajektorije po izlomljenosti i relativnom doprinosu amplitudi verovatnoće. Posmatrani algoritmi za generisanje trajektorija daju trajektorije različitih izlomljenosti. Efikasniji, Levi algoritam, više favorizuje trajektorije čija je izlomljenost bliska 0.5, dok manje efikasniji algoritam (*Speedup-serial1*) daje širi opseg izlomljenosti. Za oba algoritma smo pokazali da trajektorije sa izlomljenošću  $0.5 \pm \sigma$  daju praktično celokupni doprinos računatim amplitudama. Takođe pokazali smo da  $\sigma$  teži nuli, onda kada je  $N$  konačno veliki broj, upravo zato što je izlomljenost 0.5 favorizovana, a Levijev algoritam je efikasniji od drugog. Iz ovog takođe vidimo da postoji mogućnost stvaranja još efikasnijih algoritama koji isključivo stvaraju trajektorije izlomljenosti 0.5. Razmatranje ovakvih novih algoritama i proveru njihove efikasnosti planiramo kao nastavak ovoga istraživanja.

**Zahvalnost.** Zahvaljujem se svojim mentorima Jeleni i profesoru Aleksandru Bogojeviću, koji su mi odgovarali na sva moja postavljena pitanja, objašnjavali sve stvari koje ne razumem i pokazali mi jednu sasvim novu, drugačiju i izuzetno zanimljivu sferu fizike. Takođe se zahvaljujem Antunu Balažu koji mi je pomogao oko programiranja, kao i Institutu za fiziku u Beogradu, i Viši Tasiću iz Instituta za bakar u Boru, na omogućenim resursima za ostvarivanje projekta.

---

## Literatura

- Balaž A. 2005. Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantnoj mehanici. Magistarski rad. Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu
- Feynman R. P., Hibbs A. R. 1965. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. New York: McGraw-Hill
- Bogojević A., Balaž A., Belić A. 2005a. Jaggedness of path integral trajectories. *Phys. Lett. A*, **345**: 258.
- Bogojević A., Balaž A., Belić A. 2005a. Systematically Accelerated Convergence of Path Integrals. *Phys. Rev. Lett.*, **94**: 180403.
- Ceperley D. M. 1995. *Rev. Mod. Phys.*, **67**: 279.

---

*Mirjana Dimitrievska*

## Classification of Relevant Path Integral Trajectories

The path integral formalism is powerful tool for dealing with quantum theories. Unfortunately, only a limited number of problem can be analytically solved. At the same time numerical treatment of path integrals is generally computationally demanding. In order to develop significantly faster algorithms it is necessary to input into them more analytical information regarding the general properties of path integrals and particularly the trajectories that give dominant contributions to these objects. In this paper we analyze the properties of a newly introduced concept – the jaggedness of a trajectory, and use it to classify the relative contributions of trajectories to quantum mechanical amplitudes calculated using path integrals. We show that the classification according to jaggedness  $J$  is quite relevant to this problem, and that for the general  $N$ -fold discretized path integral the contributing trajectories lie in a narrow interval around  $J = 1/2$ . Using numerical simulations we show that the width of this interval scales as  $\sigma \propto N^{-\frac{1}{2}}$ .

## Dodatak: izmenjeni delovi algoritma *Speedup-serial*

Za potrebe istraživanja korišćen je osnovni algoritam *Speedup-serial* (neparalelna verzija) (Bogojević *et al.* 2005b) sa manjim izmenama.

Promenom metode generisanja trajektorija načinjene su sledeće izmene u funkciji *distr*:

```
x[0]=q[0];
x[two[s]]=q[two[s]];

for(n = 1; n < s; n++)
{
  for(i = 0; i < two[n-1]; i++)
  {
    x[(1 + 2 * i) * two[s - n]]=
      0.5 * (x[i * two[s - n + 1]] +
        x[(1 + i) * two[s - n + 1]]);
  }
}
:
:
for(n = 1; n < s; n++)
{
  for(i = 0; i < two[n - 1]; i++)
  {
    :
    :
    q[(1 + 2 * i) * two[s - n]] =
      0.5 * (x[i * two[s - n + 1]] +
        x[(1 + i) * two[s - n + 1]]) + temp;
    :
  }
}
:
:
```

Dodat je novi niz  $x[two[s]]$  koji inicijalizuje sve vrednosti podeonih tačaka trajektorije koje se nalaze na pravoj koja spaja početni i krajnji položaj, a kasnije se oko ovih tačaka gusovom raspodelom generiše broj koji će predstavljati konačni položaj podeone tačke trajektorije, vrednosti položaja tačaka trajektorije dobija niz  $q[two[s]]$ .

U funkciji *mc* dodate su relacije za računanje izlomljenosti trajektorije.

```

:
izlom = 0;
for( k = 1; k < (two[s]-1); k++)
{
if ((q[k] - q[k - 1]) * (q[k] - q[k+1]) > 0)
    izlom=izlom+1;
}
izlomljenost1=izlom/(two[s]-1);
:

```

Izlomljenost trajektorije računa se po relaciji (4), promenljiva `izlom` predstavlja trenutni broj lokalnih minimuma i maksimuma, dok promenljiva `izlomljenost1` predstavlja konačnu vrednost izlomljenosti trajektorije i njena vrednost se nalazi u intervalu  $[0, 1]$ .

U funkciji `mc` takođe je dodat deo za računanje doprinosa amplitudi verovatnoće svake trajektorije, kao i za računanje fizičke vrednosti izlomljenosti.

```

void mc(double Nmc, double *q, double *amp, double
*err, int s, double *amp1, double *err1, double *bin,
double *izlombin)
:
:
for(n = 0; n < s; n++)
{
    amp2[n]=0;
}
:
for(n = 0; n < s; n++)
{
    izlom=0;
    for(k = 2; k < two[n]; k++)
    {
        if ((q[k]-q[k-1])*(q[k]-q[k+1])>0)
            izlom=izlom+1;
    }
    izlomljenost=izlom/(two[n]-1);
    niz[n]=izlomljenost; /*pomocni niz*/
    amp1[n] += izlomljenost*foverp; /*racunanje
    fizicke vrednosti za izlomljenost*/
    err1[n] += izlomljenost*foverp
    *izlomljenost*foverp;
    amp2[n]=foverp;
}
:
if (izlomljenost1<izlombin[1])
bin[1]=bin[1]+amp2[s];

```

```

for (k3=2; k3<100; k3++)
{
    if ((izlomljenost1izlombin[k3-1]) &&
        (izlomljenost1izlombin[k3]))
        bin[k3]=bin[k3]+amp2[s];
}
:
:

```

Promenljiva `amp1[s]` predstavlja niz koji se na početku inicijalizuje na nulu a kasnije dobija vrednosti fizičke izlomljenosti za različit broj `n` podoonih tačaka na trajektorijama, dok niz `err1[s]` predstavlja grešku fizičke vrednosti izlomljenosti. Niz `amp2[s]` predstavlja vrednost dejstva trajektorije koja se upravo generisala. Niz `izlombin[k3]` predstavlja vrednosti izlomljenosti podeljene u binovima u zavisnosti od broja `k3` koji predstavlja veličinu bina, u ovom slučaju `k3=100`, dok niz `bin[k3]` dobija vrednosti zbira dejstva svih trajektorija čija vrednost izlomljenosti ulazi u opseg tog bina, odnosno sabiranjem vrednosti `amp2[s]` za trajektoriju sa određenom izlomljenošću dobija se vrednost `bin[k3]`.

Za sve vrednosti promenljivih koje se računaju u funkciji `mc`, potrebo je kasnije u glavnom delu koda, `main ()`, izvršiti usrednjavanje.

```

for(n = 1; n <= Nmc; n++)
{
    .
    .
    .
    amp1[n] /= (Nmc * amp[n]);
    err1[n] = (err1[n] / Nmc - amp1[n] * amp1[n])
              / (Nmc - 1);
    :
    .
}

```

