

## 8. Termes correctius a les correlacions de backflow.

Tot i haver inclòs correlacions a dos, tres cossos i de backflow, els valors calculats amb el mètode variacional mostren encara una considerable diferència amb el valor experimental de l'energia de l'estat fonamental del  $^3\text{He}$ , i queden encara significativament lluny dels obtinguts amb mètodes com el difusiu. Això pot entendre's com a símptoma que a la funció d'ona del sistema li manca encara la descripció d'algun mecanisme important de correlació del sistema. El camí triat per a millorar la funció d'ona variacional recull els mecanismes que han mostrat tenir un pes important: la interacció a tres cossos i la de backflow [BC97], però a més aquesta tria té una important justificació, i és que els successius termes que s'aniran introduint es deriven d'una manera natural de l'equació d'Schrödinger.

### 8.1. El desenvolupament.

Per una funció d'ona complexa, l'equació d'Schrödinger es pot escriure com un conjunt de dues equacions acoblades, una corresponent al mòdul i l'altra a la fase. De forma iterativa es van obtenint nous termes correctius a la fase. Així, partint de l'ona plana s'obté el backflow com a primer terme correctiu. Les següents correccions es dedueixen fent servir el backflow com a entrada a la mateixa equació. El resultat n'és un conjunt de termes totalment nous. Alguns d'ells impliquen només dues partícules, però d'altres en posen en joc tres, i aquest procés, inclòs en la part antisimètrica de la funció d'ona no ha estat estudiat fins ara. És per això que s'ha vist interessant investigar en quina mesura aquests termes poden contribuir a l'obtenció d'una millor cota variacional per a l'energia total. Els detalls matemàtics es troben als apèndixs D i E.

La deducció consisteix en repetir el procés explicat al capítol 7, però introduint com a fase inicial  $\Omega_0$ , la obtinguda anteriorment com a expressió del backflow:

$$\Omega = \Omega_0 + \tau D 2 \bar{k} \sum_{i \neq k} u'(r_{ki}) \frac{\vec{r}_{ki}}{r_{ki}} = \sum_k \bar{k} \left( \vec{r}_k + \lambda_B \sum_{i \neq k} \eta(r_{ki}) \vec{r}_{ki} \right) \quad (8.5)$$

Així la nova  $\Omega$  serà la suma dels dos termes:

$$\Omega = \Omega_0 + \tau D \left[ \left( \nabla_{\vec{R}}^2 \Omega_0 \right) + 2 \left( \nabla_{\vec{R}} \Omega_0 \right) \frac{(\nabla_{\vec{R}} \Phi)}{\Phi} \right] \quad (8.6)$$

Es tracta doncs de desenvolupar el segon sumant. Aplicant els operadors sobre  $\Omega_0$  tal com es detalla a l'apèndix D, i simplificant, s'arriba a escriure una funció d'ona formalment igual a la d'abans, però amb una fase diferent que escriurem com a  $e^{i\vec{k}\vec{r}_i}$ , és a dir:

$$\Psi(\vec{R}) = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\vec{r}_i} \Phi_0(\vec{R}) \quad (8.7)$$

Aquest nou vector  $\tilde{r}_i^a$  ve definit per:

$$\tilde{r}_i^a = r_i^a + A Z_i^a + B T_i^a + C \left( (W_i)_b^a Z_i^b - Y_i^a \right) \quad (8.8)$$

On  $A$ ,  $B$  i  $C$  són constants a determinar, i els altres termes tenen les següents expressions:

$$Z_i^a = \sum_{j \neq i} \eta(r_{ij}) r_{ij}^a \quad (8.9)$$

$$T_i^a = \sum_{j \neq i} \left( 5\beta(r_{ij}) r_{ij}^a + \beta'(r_{ij}) r_{ij} r_{ij}^a \right) \quad (8.10)$$

$$(W_i)_b^a = \sum_{j \neq i} \left( \beta(r_{ij}) r_{ij}^a r_{ij}^b + \eta(r_{ij}) \delta_b^a \right) \quad (8.11)$$

$$Y_i^a = \sum_{\substack{j \neq i \\ k \neq j}} \left( \beta(r_{ij}) \eta(r_{jk}) r_{ij}^a r_{ij}^b r_{jk}^b + \eta(r_{ij}) \eta(r_{jk}) r_{jk}^a \right) \quad (8.12)$$

amb  $\eta(r)$  la funció habitualment usada en el backflow, i  $\beta(r) \equiv \eta'(r)/r$ .

De tots aquests termes obtinguts, el sumant corresponent al factor  $C$  és el més novedós, ja que inclou termes on intervenen tres partícules. Donat el seu caràcter totalment nou, és en aquest terme en el que ens fixarem per a intentar millorar la funció d'ona.

## 8.2. Consideracions sobre cadascun dels nous termes obtinguts

Com es pot veure a l'expressió de  $\tilde{r}_i^a$ , el primer sumant correspon a l'ona plana, el segon sumant,  $AZ_i^a$ , al backflow, i els altres dos són nous. D'entre aquests dos darrers, el terme corresponent al factor B conté combinacions de les coordenades de les partícules amb les derivades primera i segona de la funció  $\eta$  de backflow. És un terme que només implica dues partícules. En canvi, com ja hem comentat abans, el terme corresponent al factor C,  $(W_i)_b^a Z_i^b - Y_i^a$ , conté coordenades de tres partícules diferents, i això el diferencia dels anteriors.

Considerem amb més detall cadascun dels dos sumands d'aquests segon terme. La part de la fase que correspon al desenvolupament del primer sumant,  $(W_i)_b^a Z_i^b$ , s'escriu:

$$\sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^a r_{ik}^b \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^b + \sum_{k \neq i} \eta(r_{ik}) \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^a \quad (8.13)$$

que constitueixen els termes més senzills a tres cossos que apareixen, ja que es poden escriure com a productes de sumatoris dobles. L'altre sumant,  $Y_i^a$ , conté ja un sumatori realment triple:

$$\sum_{\substack{j \neq i \\ k \neq j}} (\beta(r_{ij}) \eta(r_{jk}) r_{ij}^a r_{ij}^b r_{jk}^b + \eta(r_{ij}) \eta(r_{jk}) r_{jk}^a) \quad (8.14)$$

El present estudi es centra en els dos primers, ja que el tercer és encara més costòs des del punt de vista de l'esforç computacional.

Pel que fa al terme  $T_i^a$  és construït com a combinació de  $\beta$ ,  $\beta'$  i distàncies que posen en joc només dues partícules. Ara bé, el nostre interès no es millorar la descripció a dos partícules, que ja ha estat optimitzada anteriorment, i per tant aquest serà un terme que s'ignorarà d'ara endavant.

En conclusió, de l'expressió completa de  $\tilde{r}_i^a$  ens quedem només amb tres termes, i la fase objecte d'anàlisi en aquest treball serà:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_i^a &= r_i^a + AZ_i^a + C(W_i)_b^a Z_i^b = \\ &= r_i^a + A \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^a + C \sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^a r_{ik}^b \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^b + C \sum_{k \neq i} \eta(r_{ik}) \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^a \end{aligned} \quad (8.15)$$

Fer aquests nous càlculs comporta tres aspectes que convé analitzar.

En primer lloc el desenvolupament analític. El nou terme dona contribucions tant al càlcul de la força que rep cadascuna de les partícules,  $F_i^a$ , com a l'energia cinètica. Com s'ha fet a l'estudi del backflow, la component  $i$  de la força que actua sobre la partícula  $a$ , l'escrivim  $F_i^a = 2 \sum_{j=1}^N H_b^{ij} T_{ij}^{ab}$  on, si bé el terme  $H$  es manté invariant per ser una derivació

respecte a  $\tilde{r}_i^a$ , no succeeix igual amb  $T$ , que són el conjunt de derivacions  $\frac{\partial \tilde{r}_j^b}{\partial r_i^a}$  respecte a

les coordenades reals. Aquests termes tenen ara unes expressions força més complicades, que es fan encara més llargues en calcular les seves derivades per al càlcul exacte de l'energia cinètica. S'anomenarà  $EB_{ij}^{ab}$  a aquestes derivades.

En segon lloc la implementació en el programa. Cal triar una escriptura de les expressions prou pràctica i estructurada. Això per dues raons: per fer-les fàcilment traduïbles a un programa de càlcul, i per evitar que el programa sigui excessivament lent degut a càlculs innecessaris.

En tercer lloc el càlcul. Per una banda la difícil optimització de les constants. Per altra banda la gran durada dels càlculs necessaris per a obtenir uns promitjos bons o, com a mínim, acceptables.

A la vista de les dues primeres dificultats (l'optimització era en qualsevol cas inevitable) es va cercar una via de càlcul aproximat per a evitar el càlcul exacte de tots els termes, i fer així un programa de càlcul més àgil. A l'apartat següent s'expliquen aquests intents. Però les dificultats trobades en intentar obtenir una bona aproximació van imposar el retorn al càlcul exacte, que ve explicat a l'apartat 8.4.

### 8.3. El càlcul aproximat dels nous termes

El càlcul complet d'aquests nous termes és complex i allarga moltíssim tant el programa com el temps de càlcul, ja que conté uns llargs loop triples. Per tant va semblar que mereixia la pena estudiar la possibilitat de substituir el càlcul dels termes més llargs per certes quantitats constants.

Com a primera tasca s'havia de decidir quines quantitats podrien ser considerades com a constants, i un cop triades, avaluar-ne un valor promig. D'entrada s'esperava que les seves contribucions podrien ser avaluades aproximadament a partir de paràmetres com la densitat. Amb l'esperança d'obtenir millores apreciables en l'energia, i poder fer un estudi a polarització variable, es va analitzar aquesta substitució per a diferents graus de polarització.

En el càlcul exacte apareixen termes de la forma:  $\sum_{i=1}^N \sum_{j,l=1}^N H_b^{jl} T_{ij}^{ab} H_c^{lj} T_{il}^{ac}$  i

$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N H D_{cb}^{ij} T_{ij}^{ac} T_{ij}^{ab}$ , molt costosos en temps de càlcul. Aquests van semblar els més adients

per ser substituïts per dues constants  $\alpha$  i  $\beta$ , ja que es sospitava que tindrien un comportament prou estable per a cada valor de la polarització. D'aquesta forma en càlculs posteriors podria substituir-se el llarg càlcul dels anteriors sumatoris per una d'aquestes constants, i obtenir l'energia aproximada  $(E)_\alpha$  o  $(E)_\beta$ . Usar una o l'altra dependria de quina donés uns millors resultats, ja que a priori això era desconegut. En tot cas s'esperava que l'ús de dues vies aproximades ajudés a comprovar i/o a afinar els resultats.

En la determinació dels valors de les constants  $\alpha$  i  $\beta$  apareixen oscil·lacions molt grans i un error associat que no permet determinar amb la precisió necessària l'energia.

Polarització	$\alpha$	$\beta$	$(E)_\alpha$	$(E)_\beta$
0	0.113±0.008	-0.56±0.03	-1.90	-1.88
0.17	0.160±0.02	-0.56±0.02	-1.70	-1.71
0.5	0.130±0.01	-0.49±0.01	-1.65	-1.78
0.78	0.152±0.008	-0.43±0.01	-1.76	-1.97
1	0.169±0.008	-0.41±0.01	-1.89	-1.73

Taula 8.1

Es pot veure també a la taula 8.1 que les energies així calculades no són gaire coincidents entre elles, i no mostren comportament regular en variar la polarització. És comprova que lleus variacions en els valors de les constants duen a variacions de l'energia inacceptablement grans, ja que es tracta de trobar diferències d'energia molt petites.

Així doncs l'esperança inicial d'aproximar els esmentats termes per constants no ha estat factible. Les diferències d'energia en joc són molt petites, i han de ser calculades el més exactament possible. D'aquí que l'única via per assolir uns bons resultats sigui fer-ne el càlcul exacte.

#### 8.4. Anàlisi exacte de cadascun dels nous termes implementats.

Es presenten en aquest apartat els resultats obtinguts en fer el càlcul amb l'expressió exacta dels dos nous termes correctius al backflow. Estudiarem per separat l'efecte de cadascun dels termes proposats.

**Estudi del terme**  $C_1 \sum_{k \neq j} \eta(r_{jk}) \sum_{l \neq j} \eta(r_{jl}) \vec{r}_{jl}$

Dels dos termes nous obtinguts en el desenvolupament, aquest és el més senzill, ja que està construït només com a producte de dues funcions  $\eta$  de backflow (ja conegudes) i el vector distància entre cada parell de partícules. Apareix també una nova constant  $C_1$  a determinar. L'altre terme correctiu, en canvi, conté productes que inclouen tant  $\eta$  com  $\eta'$ , i potències d'ordre superior dels vectors  $\vec{r}_{ij}$ , i, com abans, una nova constant a determinar.

En incloure aquest terme, el determinant de la funció d'ona estarà format per un conjunt d'exponencials de la forma:

$$\exp\left\{\vec{k}_\alpha \left( \vec{r}_i + \lambda_B \sum_{j \neq i} \eta(r_{ij}) \vec{r}_{ij} + C_1 \sum_{k \neq i} \eta(r_{ik}) \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) \vec{r}_{il} \right)\right\} \quad (8.16)$$

La deducció analítica detallada de la contribució a l'energia d'aquest nou terme ve feta íntegrament a l'apèndix E, on es troba la nova energia cinètica corresponent a la component  $a$  de la partícula  $i$

$$[E_c]_i^a = \frac{\nabla_i^a \nabla_i^a \Psi}{\Psi} = \frac{1}{4} F_i^a F_i^a + \nabla_i^a \left( \frac{\nabla_i^a \Psi}{\Psi} \right) \quad (8.17)$$

que en aquest cas val:

$$[E_c]_i^a = \sum_{j=1}^N H_b^{jj} T_{ij}^{ab} \cdot \sum_{j=1}^N H_b^{jj} T_{ij}^{ab} + \sum_{j=1}^N H D_{cb}^{jj} T_{ij}^{ac} T_{ij}^{ab} - \sum_{j,l=1}^N H_b^{jl} T_{ij}^{ab} H_c^{lj} T_{il}^{ac} + \sum_{j=1}^N H_b^{jj} E B_{ij}^{ab} \quad (8.18)$$

en la qual apareixen les quantitats  $H_b^{jj}$ ,  $T_{ij}^{ab}$  i  $E B_{ij}^{ac}$ , definides a l'apèndix E. Aquestes inclouen força més termes que les corresponents quantitats obtingudes per al backflow. Això significa definir dins del programa moltes més quantitats que han de ser calculades a cada pas del programa per a obtenir els valors de  $T_{ij}^{ab}$  i  $E B_{ij}^{ac}$ , i que redueixen considerablement la velocitat de càlcul, ja que en algun punt apareix ara un *loop* triple sobre  $N$ .

Un fet a tenir en compte, tant en aquesta correcció com en la que s'estudiarà després, és que d'entre tots els nous termes que introdueix, n'hi ha que inclouen només correlacions a parelles. Això implica una modificació a la descripció a dos cossos, descripció que ja ha estat optimitzada, i que no es vol modificar. La manera d'evitar aquesta modificació és eliminar els termes a través de les taules construïdes per al càlcul de la funció d'ona. El procés ve detallat a l'apèndix H.

### Optimització de $C_I$

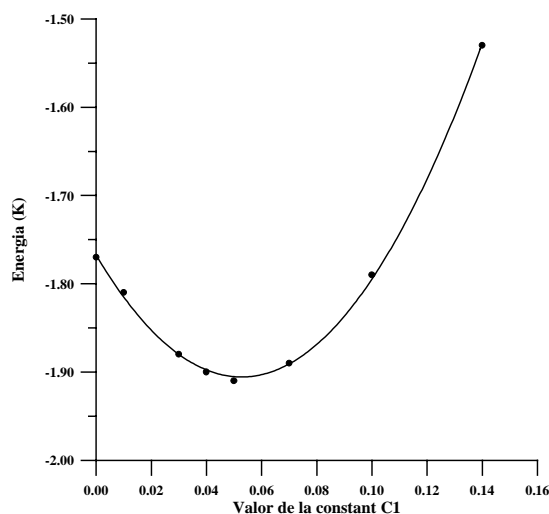
El primer pas per a obtenir resultats és trobar quin valor assignar a la constant  $C_I$ .

El mètode emprat en l'optimització d'aquesta constant consisteix en avaluar el valor promig obtingut sobre un cert nombre de configuracions fixades. Aquestes

configuracions s'obtenen de l'evolució d'un sistema amb backflow situat ja en una zona prou estable. Les configuracions es trien prou separades en el temps com per poder considerar que no estan correlacionades entre elles. El programa llegeix cadascuna d'elles i en treu el valor de l'energia, però no les fa evolucionar. Així es repeteix el càlcul sobre les mateixes configuracions per a diversos valors dels paràmetres.

Si el conjunt de configuracions triades és prou representatiu del sistema a descriure, de manera que no inclogui situacions que es surtin molt del valor promig, els valors obtinguts permeten observar de manera bastant clara i fiable, a quins valors de la constant es situen els mínims. Els gràfics obtinguts, si bé sovint il·lustren molt clarament la seva posició, no donen informació sobre quin serà el descens aconseguït en l'energia, ja que per a això cal fer sèries molt llargues.

Per aquest mètode, i emprant un fitxer amb 1000 configuracions diferents corresponents al backflow, s'obté el gràfic de la figura. En ell s'observa clarament un valor òptim per a  $C_1 = 0.05$ . Com s'ha dit les energies obtingudes en aquest procés no són realistes, i no cal parar esment en els valors que apareixen en el gràfic d'optimització. Per obtenir-ne un valor vàlid cal deixar evolucionar el sistema.



Gràfic 8.1

Optimització de  $C_1$



### Resultats obtinguts.

Amb una sèrie prou llarga i havent-hi inclòs la funció de Reatto i la constant de backflow optimitzada, en resulta un número pràcticament igual al que pot obtenir-se sense incloure aquest nou terme. El descens en energia obtingut sembla que millora lleument l'anterior, passant de  $-2.03K$  a  $-2.05K$  però amb un error d'una centèsima en tots dos, la qual cosa els fa equivalents.

Amb la constant de backflow encara no optimitzada ( $\lambda_b = 0.14$ ) la introducció del nou terme si que provoca un descens apreciable en l'energia, fent-la passar de  $-1.98K$  a  $-2.05K$ .

És a dir, s'observa que la millora que es pot obtenir incloent aquest nou terme, és la mateixa que s'ha pogut aconseguir amb una acurada optimització de la constant de backflow. Per tant aquesta correcció té un paper molt petit, que en cap cas rebaixa significativament l'energia del sistema.

Davant d'aquests resultats negatius s'ha considerat la possibilitat que el valor trobat com a òptim per a la constant no fos més que un mínim local. Aquesta possibilitat ha portat a fer un estudi més exhaustiu per a optimitzar  $C_1$ , prenent en consideració tant els resultats de l'energia com els de la variància. Efectivament exploracions més àmplies sobre el valor de la constant mostren altres possibles mínims, com els trobats a  $C_1 = 0.15$  i  $C_1 = -0.10$ , però que proporcionen energies més altes. En cap cas les noves cotes milloren les obtingudes anteriorment, confirmant així l'escassa contribució del terme en estudi.

### Estudi del terme $C_2 \sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^a r_{ik}^b \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^b$

El segon nou terme obtingut en el desenvolupament conté productes que inclouen tant  $\eta$  com  $\eta'$ , ja que  $\beta$  ha estat definida com  $\frac{\eta'(r)}{r}$ , i també potències d'ordre superior dels vectors  $\vec{r}_{ij}$ . Apareix ara la constant  $C_2$  a determinar. A la pràctica i per a eliminar la divergència la funció  $\beta$  s'aproxima per una gaussiana.

La seva inclusió en el determinant de la funció d'ona modificarà els exponents en la següent forma:

$$\exp\left\{\bar{k}_\alpha\left(\bar{r}_i + \lambda_B \sum_{j \neq i} \eta(r_{ij}) \bar{r}_{ij} + C_1 \sum_{k \neq i} \eta(r_{ik}) \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) \bar{r}_{il} + C_2 \sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^a r_{ik}^b \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^b\right)\right\} \quad (8.19)$$

Igual com en el cas anterior, la deducció analítica detallada de la contribució a l'energia d'aquest terme ve feta íntegrament a l'apèndix E.

També ara la nova expressió dels exponents demana calcular de nou les quantitats  $T_{ij}^{ab}$  i  $EB_{ij}^{ac}$ , calculades en detall a l'apèndix E. I com abans cal deduir de les expressions les contribucions dels termes a dos cossos, ja que modificarien una descripció que ja ha estat optimitzada (vegi's l'apèndix H).

### Optimització de $C_2$ i resultats.

L'optimització d'aquesta constant ha presentat més dificultats que l'anterior, perquè no es troba clarament un mínim, sinó més aviat un conjunt de petits mínims locals. Amb la dificultat afegida de que per aquells valors en que el mínim de l'energia resulta molt clar, el valor de la variància augmenta molt.

Per a calcular la variància dels resultats s'han emprat dues definicions diferents:

$$var_1 = \frac{1}{N-1} \sum_i (E_i - E_{ref})^2 \quad (8.20)$$

$$var_2 = \frac{1}{N-1} (\langle E^2 \rangle - \langle \bar{E} \rangle^2) \quad (8.21)$$

$E_{ref}$  és un valor fix de referència, i amb el símbol  $\langle \rangle$  es representa el valor esperat de la magnitud que hi és inclosa.

Les dues han resultat igualment útils, ja que només mostren un corriment global del valor d'una respecte de l'altra, però la seva variació en funció de  $C_2$  ha estat la mateixa.

S'ha calculat el valor de l'energia per a diversos mínims de la constant. En el procés d'optimització pràcticament tots els mínims s'han trobat per a valors negatius de la constant.

Incloent només aquest terme correctiu i ignorant el corresponent a  $C_1$  els resultats han estat:

$C_2$	$E \pm \Delta E$ (K)
-0.06	-2.03 $\pm$ 0.01
-0.12	-2.04 $\pm$ 0.01

Taula 8.2

que són valors iguals als obtinguts únicament amb el backflow optimitzat.

L'anàlisi fent servir simultàniament els dos termes correctius no ha millorat els valors. Alguns càlculs més curts sobre diversos punts per a intentar cercar un millor valor de les constants han tingut els mateixos resultats: en cap cas s'ha aconseguit un descens per sota del valor obtingut només amb el backflow.