

BACHELORARBEIT

**Rekonstruktion des dynamischen Strukturfaktors
für das stark korrelierte Elektronengas**

Paul Hamann

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

September 2019

Erklärung der Selbstständigkeit

Hiermit erkläre ich gemäß §10 Absatz 6 der Prüfungsverfahrensordnung der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel für Bachelor- und Masterstudiengänge 2019, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und die Arbeit in keinem anderen Prüfungsverfahren eingereicht habe.

Abstract

The investigation of dynamics with Path Integral Monte Carlo methods is severely hindered by the so called dynamical sign problem arising due to fast oscillations of the time evolution operator. Instead, time correlation functions can be evaluated for an imaginary argument of time, but one needs to perform analytic continuation to determine physical properties. This is an ill-posed task. Methods for dealing with this problem are briefly discussed, their limitations tested on exactly known test spectra and then used to reconstruct the dynamic structure factor $S(\mathbf{q}, \omega)$ of the uniform electron gas. Following this, a method, which instead searches for the response function, linked to $S(\mathbf{q}, \omega)$ by the fluctuation-dissipation theorem, is expanded upon, investigating its applicability to the strongly correlated UEG.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	4
2.1	Dynamischer Strukturfaktor und Lineare Responsefunktion . . .	4
2.2	Das homogene Elektronengas	6
2.3	Analytische Fortsetzung von QMC-Berechnungen	8
2.3.1	Maximum-Entropie-Methode	9
2.3.2	Andere Ansätze	10
2.4	Stochastische Optimierungsverfahren	11
2.4.1	Simuliertes Abkühlen	11
2.4.2	<i>stochastic optimization method</i>	11
2.4.3	Genetische Algorithmen	12
3	Genetic Inversion via Falsification of Theories	13
3.1	Verfahren	13
3.1.1	Parametrisierung	13
3.1.2	Evolutionsschritte	14
3.2	Numerische Tests mit bekannten Spektren	16
3.3	Erweiterungen	20
3.4	Anwendung auf das homogene Elektronengas	21
4	Suche nach der Local Field Correction	25
4.1	Neuformulierung des Problems	25
4.2	Bisheriges Verfahren	26
4.3	Genetischer Ansatz	30
4.4	Optimierung einzelner Lösungen	31
4.5	Ergebnisse	31
5	Zusammenfassung und Ausblick	35
	Literatur	36

1 Einleitung

Quanten-Monte-Carlo-Methoden (QMC) bilden seit mehreren Jahrzehnten essentielle Werkzeuge zur Untersuchung quantenmechanischer Vielteilchensysteme. Während bei vielen anderen Verfahren zur Bewältigung der hohen Komplexität dabei auf vereinfachte Modelle zurückgegriffen wird, die insbesondere Wechselwirkung nur näherungsweise behandeln, ist mit QMC-Methoden – zumindest prinzipiell – eine exakte Beschreibung möglich. Dies erlaubt es auch für Systeme, deren Eigenschaften wesentlich von der Wechselwirkung beeinflusst sind, akkurate Ergebnisse zu liefern.

Eine solche Beschreibung ist notwendig im Bereich der sogenannten *warmen dichten Materie* (WDM), einem Materiezustand hoher Temperaturen und Dichten, der unter anderem im Innern von Sternen und Braunen Zwergen auftritt, dessen genaue Charakterisierung aber auch im Kontext der technischen Nutzung von Trägheitsfusion an Bedeutung gewonnen hat und mit Hochintensitätslasern auf der Erde erzeugt wird. Grob lässt sich WDM dadurch kennzeichnen, dass Energie ungefähr gleich auf kinetischen und potentiellen Teil verteilt ist (Kopplungsparameter $\Gamma = E_{pot}/E_{kin} \sim 1$) und die Temperatur in einer ähnlichen Größenordnung wie die der Fermitemperatur (20) liegt, somit sowohl Korrelations- als auch Quanteneffekte eine zentrale Rolle einnehmen [1].

In den vergangenen Jahren ist es gelungen, eine Vielzahl von Eigenschaften warmer dichter Materie im Modellsystems des homogenen Elektronengases (HEG) mit Pfadintegral-Monte-Carlo-Methoden (PIMC) zu untersuchen [1–3]. Eine Beschränkung dieser stellt jedoch dar, dass im wesentlichen nur statische Größen bestimmt werden können und Dynamik aufgrund des mit dem Oszillieren des Zeitentwicklungsoperators einhergehenden *dynamical sign problem* kaum zugänglich ist, was zum Beispiel die Auswertung von Korrelationsfunktionen, an deren spektraler Zusammensetzung¹

$$S_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t} \hat{B} \rangle_0 \quad (1)$$

oft großes Interesse besteht, verhindert [1, 4].

¹Im Folgenden werden atomare Einheiten verwendet: $e = m_e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$.

Dies betrifft unter anderem den dynamischen Strukturfaktor $S(\mathbf{q}, \omega)$, der in Streuexperimenten, einer wichtigen Diagnostik für WDM, direkt untersucht werden kann [5]. Während der statische Strukturfaktor $S(\mathbf{q})$ die Intensität der Streuung an einem System für mit dem Wellenvektor \mathbf{q} einfallende Strahlung insgesamt angibt, erteilt $S(\mathbf{q}, \omega)$ zusätzlich Auskunft über die Verteilung der dabei übertragenen Energie $\hbar\omega$ [6].

Die Intensität der Streuung ist durch den Erwartungswert für das Betragsquadrat der Fouriertransformation der Teilchenzahldichte $\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i)$ gegeben:²

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \langle \hat{n}_{\mathbf{q}} \hat{n}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}(\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j)} \right\rangle . \quad (2)$$

$S(\mathbf{q}, \omega)$ gibt hingegen die spektrale Verteilung von Dichtefluktuationen an, beschrieben durch die intermediäre Streufunktion:

$$F(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{N} \langle \hat{n}_{\mathbf{q}}(t) \hat{n}_{\mathbf{q}}^\dagger(0) \rangle . \quad (3)$$

Dabei gilt:

$$S(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{q}, \omega) d\omega . \quad (4)$$

Für ein imaginäres Argument der Zeit (Ersetzung $it \rightarrow \tau$) wird der Zeitentwicklungsoperator reell und positiv, das dynamische Vorzeichenproblem verschwindet. Er besitzt nun die Form des Dichteoperators:

$$e^{-i\hat{H}t} \longleftrightarrow e^{-\tau\hat{H}} . \quad (5)$$

Eine solche sogenannte Wick-Rotation wird auch in der Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik auf den im Pfadintegral auftretenden, das Wirkungsfunktional \mathcal{S} enthaltenden Phasenfaktor $e^{i\mathcal{S}}$ angewandt, wodurch das Pfadintegral als Zustandssumme interpretiert und mit dem Metropolis-Algorithmus ausgewertet werden kann. Die mit dem dynamischen Strukturfaktor zusammenhängende Korrelationsfunktion lässt sich mit in imaginärer Zeit formulierten PIMC-Methoden dabei direkt mit der für die Pfade gewählten Diskretisierung (Zahl der *time slices*) zu imaginären Zeiten $\tau \in [0, i\beta]$ auswerten [1].

² $\hat{n}(\mathbf{q}) = \sum_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}$

Um daraus Rückschlüsse auf reale Größen ziehen zu können, sind jedoch weitere Berechnungen notwendig, in diesem Fall eine inverse Laplacetransformation zur Rekonstruktion von $S(\mathbf{q}, \omega)$ aus endlich vielen, fehlerbehafteten Werten für $F(\mathbf{q}, \tau)$. Es gilt, ein Funktion $S(\mathbf{q}, \omega)$ zu finden, welche die Integralgleichung

$$F(\mathbf{q}, \tau) = \int S(\mathbf{q}, \omega) e^{-\omega\tau} d\omega \quad (6)$$

an allen bekannten Stellen τ_i im Rahmen der Unsicherheit erfüllt.

Dies ist ein numerisch instabiles Problem ohne eindeutige Lösung. Es existieren eine Vielzahl verschiedener Ansätze, um nach gewissen Kriterien eine „physikalischste“ zu wählen. Dabei kann es hilfreich sein, zur weiteren Einschränkung zusätzliche Information heranzuziehen. Für das HEG sind durch Summenregeln mehrere Momente des dynamischen Strukturfaktors bekannt [7].

Im Rahmen dieser Bachelorarbeit soll das vorliegende Rekonstruktionsproblem genauer untersucht und aus vorhandenen PIMC-Ergebnissen für $F(\mathbf{q}, \tau)$ der dynamische Strukturfaktor des HEG im Bereich starker Korrelationseffekte bestimmt werden. Dazu wurden zwei Verfahren, *stochastic optimization method* (SOM) [8] und *genetic inversion via falsification of theories* (GIFT) [4] implementiert, die heuristisch eine große Zahl verschiedener Lösungen finden und durch Mitteln über diese ein Gemeinsamkeiten zeigendes Spektrum liefern. Da beide prinzipiell den gleichen Beschränkungen unterliegen, wird sich auf GIFT fokussiert.

Zum Vergleich dienen dabei Ergebnisse eines neuen Verfahrens [9], welches statt der direkten Rekonstruktion von $S(\mathbf{q}, \omega)$ die mit diesem über das Fluktuations-Dissipations-Theorem verknüpfte lineare Responsefunktion $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ des Systems bestimmt, deren Eigenschaften genauer bekannt sind, und die sich insbesondere durch einen Korrekturterm gegenüber der Responsefunktion des idealen (nicht-wechselwirkenden) Systems ausdrücken lässt.

Eine vorliegende Implementierung dessen wird anschließend um einen genetischen Algorithmus erweitert, in der Hoffnung, so effizienter Lösungen zu finden, und dabei einen größeren Suchraum betrachten zu können.

2 Theoretische Grundlagen

Benötigte Eigenschaften linearer Responsefunktionen und deren Zusammenhang zu Korrelationsfunktionen werden vorgestellt und das untersuchte physikalische System, das homogene Elektronengas eingeführt. Anschließend wird auf das Rekonstruktionsproblem und verschiedene Lösungsansätze eingegangen.

2.1 Dynamischer Strukturfaktor und Lineare Responsefunktion

Die *linear response theory* beschäftigt sich mit der Reaktion im Gleichgewicht befindender Systeme auf äußere sich zeitlich verändernde Störungen. Für eine Störung $F(t)$ des Hamiltonoperators $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + F(t)\hat{B}$ mit $F(t) = 0$ für $t < t_0$, beschreibt die lineare Responsefunktion χ_{AB} in erster Ordnung der Störung die zeitliche Entwicklung einer Größe \hat{A} [6]:³

$$\langle A(t) \rangle = \langle A \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t-t') F(t') + \dots \quad (7)$$

Von besonderem Interesse ist dabei deren spektrale Zusammensetzung $\chi(\omega)$, die der Antwort auf eine harmonische Schwingung mit der Frequenz ω entspricht. Zerlegt man $\chi(t)$ in einen geraden $\chi_g(t)$ und einen ungeraden Teil $\chi_u(t)$, so korrespondiert bei der Fouriertransformation $\chi_g(t)$ mit dem Real-, der Imaginärteil mit $\chi_u(t)$:

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt (\chi_g(t) + \chi_u(t)) e^{-i\omega t} = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \chi_g(t) \cos(-\omega t) dt}_{\text{Re } \chi(\omega)} + i \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \chi_u(t) \sin(-\omega t) dt}_{\text{Im } \chi(\omega)} \quad (8)$$

Der irreversible (ungerade) Teil der Antwort, und damit alle beteiligten dissipativen Prozesse, werden also durch $\text{Im } \chi(\omega)$ beschrieben, $\text{Re } \chi(\omega)$ bezeichnet man als reaktive Komponente der Response. $\text{Re } \chi(\omega)$ ist selbst gerade, $\text{Im } \chi(\omega)$ ungerade.

³ $\langle \dots \rangle_0$ meint die Bildung des quantenstatistischen Erwartungswerts für das ungestörte System
 $\langle \hat{A} \rangle_0 = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{A})$

Aus Gründen der Kausalität (Störungen in der Zukunft haben keinen Einfluss auf den vorherigen Verlauf) muss $\chi(t) = 0$ für $t < 0$ gelten, woraus die Kramers-Kronig-Beziehungen folgen:⁴

$$\operatorname{Re} \chi(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{CH} \int d\omega' \frac{\operatorname{Im} \chi(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (9)$$

$$\operatorname{Im} \chi(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{CH} \int d\omega' \frac{\operatorname{Re} \chi(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (10)$$

Die Responsefunktion ist also allein durch Imaginär- bzw. Realteil vollständig bestimmt. CH bezeichnet dabei die Bildung des Cauchyschen Hauptwerts.

Die Antwort auf Störungen ist eine Eigenschaft des ungestörten Systems. Die lineare Responsefunktion lässt sich angeben durch:

$$\chi_{AB}(t) = -i \Theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}] \rangle_0 . \quad (11)$$

Der Ausdruck für $\operatorname{Im} \chi_{AB}(\omega)$ kann auf eine Form gebracht werden, die nur noch die mit dem Strukturfaktor $S_{AB}(\omega)$ zusammenhängende Korrelationsfunktion $\langle \hat{A}(t) \hat{B}(0) \rangle$ enthält, was das Fluktuations-Dissipations-Theorem liefert:

$$\operatorname{Im} \chi_{AB}(\omega) = -\pi(1 - e^{-\beta\omega}) S_{AB}(\omega) . \quad (12)$$

Es besteht also ein grundlegender Zusammenhang zwischen der Antwort auf äußere Störungen und den Schwankungen im Gleichgewicht.

Für den statischen Fall $\omega = 0$ gilt:

$$\chi_{AB}(0) = - \int_0^\beta d\tau \langle \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle_0 . \quad (13)$$

Weiterhin lässt sich zeigen, dass für $\hat{A} = \hat{B}^\dagger$:

$$S(-\omega) = e^{-\beta\omega} S(\omega) \quad (14)$$

gilt.

⁴Ein direkt einzusehender Zusammenhang zwischen $\operatorname{Im} \chi(\omega)$ und $\operatorname{Re} \chi(\omega)$ besteht darin, dass sich $\chi_g(t)$ und $\chi_u(t)$ für $t < 0$ gegenseitig aufheben, sodass $\chi_g(t) = \operatorname{sgn}(t) \cdot \chi_u(t)$ gilt. Fouriertransformation unter Anwendung des Faltungstheorems liefert die KK-Beziehungen.

Die zu lösende Integralgleichung lässt somit schreiben als:

$$F(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) e^{-\tau\omega} d\omega = \int_0^{\infty} S(\omega) (e^{-(\beta-\tau)\omega} + e^{-\tau\omega}) d\omega . \quad (15)$$

Wie man sehen kann, ist $F(\tau)$ symmetrisch um $\tau = \beta/2$, enthält dieselbe Information über $S(\omega)$ also doppelt.

2.2 Das homogene Elektronengas

Das homogene Elektronengas (HEG), auch Jellium genannt, ist ein häufig verwendetes Modellsystem der Vielteilchentheorie, das ursprünglich aus der Festkörperphysik stammt. Es beschreibt miteinander wechselwirkende Elektronen unter einem statischen positiven Hintergrund, dessen Ladung als homogen über den Raum verteilt angenommen wird. So können mit der Wechselwirkung der Elektronen zusammenhängende Effekte untersucht werden, ohne z.B. den genauen Aufbau eines realen Festkörpers einfließen zu lassen.

Der Hamiltonoperator lässt sich angeben als [7]:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|} + \hat{H}_{e-b} + \hat{H}_{b-b} \quad (16)$$

wobei \hat{H}_{e-b} die Interaktion der Elektronen mit dem Hintergrund:

$$\hat{H}_{e-b} = -e^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{n}(\mathbf{r}) n_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (17)$$

und \hat{H}_{b-b} die Interaktion des Hintergrunds mit sich selbst beschreibt:

$$\hat{H}_{b-b} = \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{n_b(\mathbf{r}) n_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \quad (18)$$

Die Dichte des positiven Hintergrunds ist dabei so groß, dass die Ladung der Elektronen genau ausgeglichen wird: $n_b(\mathbf{r}) = n = N/V$.

Praktisch lassen sich mit PIMC-Methoden nur Systeme mit endlich vielen Teilchen untersuchen. Um dennoch Eigenschaften im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = \text{const.}$) beschreiben zu können, simuliert man in einem Würfel eingeschlossene Teilchen, die mit identischen Abbildern ihrer selbst in

einer periodischen Fortsetzung des Würfels wechselwirken [1].

Zur Angabe der beiden das System festlegenden Parameter, Dichte und Temperatur werden üblicherweise einheitenlose Größen verwendet. Der in Vielfachen des Bohrradius ausgedrückte Wigner-Seitz-Radius r_s spannt das Kugelvolumen auf, das im Mittel genau ein Elektron enthält, der Entartungsparameter θ ist als das Verhältnis der Temperatur zur Fermitemperatur definiert:

$$r_s = \frac{1}{a_B} \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}, \quad \theta = \frac{k_B T}{E_F}. \quad (19)$$

Die Fermi-Energie E_F gibt dabei die maximale Energie (bzw. die Fermi-Wellenzahl k_F den Impuls) eines Teilchens im Grundzustand ($T = 0$ K) an. Für das freie Elektronengas in drei Dimensionen gilt:⁵

$$E_F = \frac{k_F^2}{2} \quad \text{mit} \quad k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}. \quad (20)$$

Während für $\theta \gg 1$ die thermische de-Broglie-Wellenlänge der Elektronen sehr klein gegenüber deren mittlerem Abstand und damit eine klassische Beschreibung als Punktteilchen möglich ist, treten für kleine θ zunehmend Quanteneffekte auf.

Hingegen übernimmt r_s die Rolle eines Kopplungsparameters. Für sehr hohe Dichten ($r_s \rightarrow 0$) überwiegt die kinetische Energie, die Interaktion mit anderen, durch den positiven Hintergrund abgeschirmten Elektronen ist zu vernachlässigen. Für große r_s (geringe Dichten) überwiegt die Coulombwechselwirkung. Sofern die Temperatur nicht zu hoch ist, kann sich eine Fernordnung bilden [7].

Der Bereich der WDM lässt sich grob durch $0.1 \leq r_s \leq 10$ und $0 < \theta \leq 10$ abgrenzen.

Eine typische Zeitskala für kollektive Prozesse ist die Plasmafrequenz:

$$\omega_p = \sqrt{3}/r_s^{3/2}. \quad (21)$$

Für das HEG sind einige Summenregeln bekannt, sodass sich Momente:

$$\langle \omega^k \rangle = \int d\omega \omega^k S(\omega, \mathbf{q}) \quad (22)$$

des dynamischen Strukturfaktors angeben lassen [3, 7].

⁵Im Folgenden wird ausschließlich das unpolarisierte System, $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$, betrachtet.

Für das erste Moment gilt:

$$\langle \omega^1 \rangle = \frac{\mathbf{q}^2}{2} . \quad (23)$$

Das dritte Moment lässt sich durch die mittlere kinetische Energie K , direkt verfügbar in QMC-Simulationen, und den statischen Strukturfaktor $S(\mathbf{q})$ (Parametrisierung aus [10] bekannt) ausdrücken:

$$\langle \omega^3 \rangle = \frac{q^2}{2} \left(\left(\frac{q^2}{2} \right)^2 + 4\pi n + 2q^2 K + \omega_p^2 (1 - I(q)) \right) \quad (24)$$

mit

$$I(q) = \frac{1}{8\pi^2 n} \int_0^\infty dk k^2 (1 - S(k)) \times \left(\frac{5}{3} - \frac{k^2}{q^2} + \frac{(k^2 - q^2)^2}{2kq^3} \log \left| \frac{k+q}{k-q} \right| \right) . \quad (25)$$

Das inverse Moment ergibt sich aus dem statischen Limes (13) der Dichte-Dichte-Responsefunktion:

$$\langle \omega^{-1} \rangle = -\frac{\chi(\mathbf{q}, 0)}{2n} . \quad (26)$$

Das nullte Moment, im Folgenden für die Normierung von $S(\omega)$ benötigt, ist der statische Strukturfaktor:

$$\langle \omega^0 \rangle = S(\mathbf{q}) = F(\mathbf{q}, \tau \rightarrow 0) . \quad (27)$$

2.3 Analytische Fortsetzung von QMC-Berechnungen

Das vorliegende Problem besteht also nun darin, ein Spektrum $S(\omega)$ zu finden, welches $F(\tau)$ für die bei $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_i, \dots, \tau_N \in [0, i\beta]$ aus QMC-Berechnungen bekannten Werte im Rahmen ihrer Unsicherheit σ_i reproduziert und sich durch irgendein Kriterium als die geeignetste unter allen Lösungen auszeichnet.

Ein naheliegendes Maß für die Abweichung eines Spektrums $S(\omega)$ von den Eingabedaten ist:

$$\Phi_S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\int S(\omega) e^{-\omega\tau_i} d\omega - F(\tau_i) \right]^2 . \quad (28)$$

Wie bereits erwähnt ist die inverse Laplace-Transformation jedoch numerisch

instabil. Veränderungen an $S(\omega)$ haben wenig Einfluss auf $F(\tau)$, solange die Fläche in der nächsten Umgebung erhalten bleibt, was dazu führt, dass auch stark verrauschte Spektren die Eingabedaten reproduzieren (vgl. Abb. 1). Unterhalb des Unsicherheitsniveaus ist Φ_S kein geeignetes Kriterium für die Qualität der Lösung mehr, die Φ_S minimierende Lösung ist wahrscheinlich selbst von dem Rauschen betroffen und eignet sich kaum für physikalische Interpretationen.

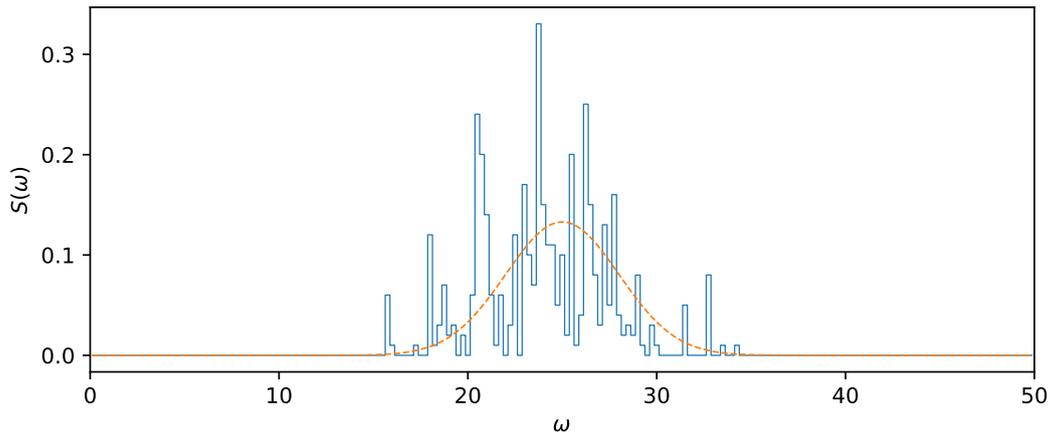


Abbildung 1: Eine die Eingabedaten reproduzierende Lösung bei der Rekonstruktion eines gaussförmigen Spektrums (gefunden mit GIFT)

2.3.1 Maximum-Entropie-Methode

Einen Weg, dieses Rauschen zu unterdrücken, bietet die Maximum-Entropie-Methode (MEM) – ein Standardverfahren, um Information aus beschränkten oder fehlerbehafteten Daten zu extrahieren [11]. Dieses versucht, eine *wahrscheinlichste* Lösung zu finden, gegeben durch ein Maximum der Entropie, üblicherweise definiert als relative Entropie gegenüber einem den Zustand maximaler Entropie festlegenden Standardmodell $M(\omega)$:

$$\mathcal{S}[S(\omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) \ln \frac{S(\omega)}{M(\omega)} d\omega \quad (29)$$

Es soll also unter allen Lösungen diejenige, die $M(\omega)$ am ähnlichsten ist, gewählt werden. Wenn keine weitere Information vorliegt, verwendet man für $M(\omega)$ ein flaches Spektrum.

In der Praxis kann die MEM als Minimieren des Terms $\Phi - \eta \mathcal{S}$ realisiert werden, wobei $\eta \geq 0$ die Gewichtung der Entropie gegenüber den Eingabedaten bestimmt. Während für kleine η das Rauschen überwiegt, nähert sich für große η , die Lösung immer stärker an $M(\omega)$ an, was z.B. zu einer Verflachung des Spektrums (siehe Abb. 10 für Beispiele) führt. Solange keine (z.B. experimentellen) Vergleichsdaten vorliegen, lässt sich schwer beurteilen, ob eine geeignete Gewichtung getroffen wurde, und ob es sich bei rekonstruierten Merkmalen um Rauschen oder z.B. Mehrfachanregungen handelt. Während für diese Wahl etablierte Faustregeln [12] existieren und die MEM bei hoher Auflösung und Genauigkeit der Eingabedaten durchaus gute Ergebnisse liefern kann [13], besteht zumindest prinzipiell die Gefahr, dass Merkmale verloren gehen, und ohne einen passenden Ansatz für $M(\omega)$ insbesondere die genauere Form des Spektrums nur eingeschränkt wiedergegeben wird.

2.3.2 Andere Ansätze

Ein anderer Ansatz basiert auf der Überlegung, dass sich gemeinsame Merkmale beim Mitteln über mehrere Lösungen zeigen. Um eine gute Abschätzung für $S(\omega)$ liefern zu können, müssen nur genug Lösungen herangezogen, der Lösungsraum möglichst vollständig und gleichmäßig abgetastet werden.

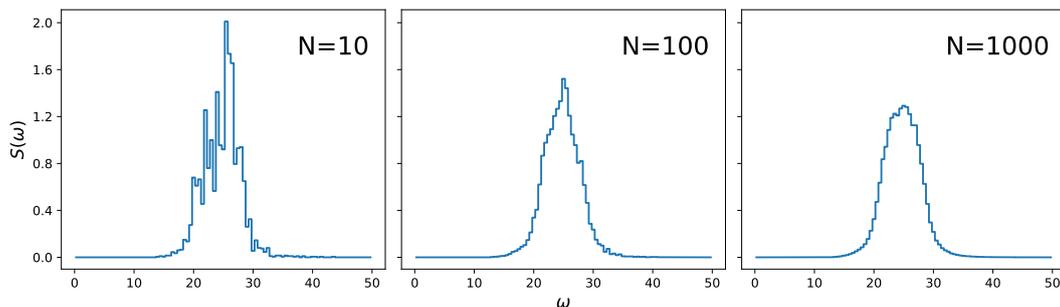


Abbildung 2: Rauschunterdrückung durch Mitteln über N verschiedene Lösungen

Für ein Spektrum ohne Rauschen sind dazu eine große Zahl von Lösungen ($\sim 10^3$) erforderlich. Es bietet sich an, zur Erzeugung dieser stochastische Optimierungsverfahren zu verwenden.

2.4 Stochastische Optimierungsverfahren

Während klassische Optimierungsverfahren deterministisch sind und z.B. lokal immer die optimale Änderung an einer Lösung vollziehen, arbeiten stochastische Optimierungsverfahren zufallsbasiert. Dies erlaubt es bei Problemen, für die klassische Verfahren aufgrund der hohen Komplexität effektiv scheitern, oft in kurzer Laufzeit Näherungslösungen zu finden [14].

2.4.1 Simuliertes Abkühlen

Zu den stochastischen Optimierungsverfahren gehört das vom Metropolis-Algorithmus inspirierte *simulierte Abkühlen*, bei dem die zu minimierende Zielfunktion $\Phi : S \rightarrow \mathbb{R}$ als Energie eines Systems S mit der fiktiven Temperatur T interpretiert wird. Mit einem zufälligen Ansatz für S startend, werden wiederholt zufällige Änderungen $S \rightarrow S'$ vorgeschlagen und mit der Wahrscheinlichkeit $p = \min(1, \exp(-\Delta\Phi/kT))$ akzeptiert. T wird dabei mit der Zeit gesenkt, sodass, während am Anfang auch Verschlechterungen oft akzeptiert und auf diesem Weg viele verschiedene S erreicht und lokale Minima verlassen werden können, dies immer seltener geschieht und schließlich *wahrscheinlich* ein Zustand mit niedrigem Φ nicht mehr verlassen wird [15].

2.4.2 *stochastic optimization method*

Es stellt sich heraus, dass, da beim vorliegenden Rekonstruktionsproblem die Anzahl zugänglicher Konfigurationen mit Φ stark zunimmt, dort durch das Akzeptieren von Verschlechterungen oft suboptimale Zustände erreicht werden, die nicht wieder zu besseren Lösungen führen. Um trotzdem lokale Minima über mehrere Schritte, die eine Verschlechterung von Φ bedeuten, verlassen zu können, wird bei der *stochastic optimization method* (SOM) [8], einem verbreiteten Verfahren zur Rekonstruktion,⁶ eine Kette von Änderungen zunächst temporär akzeptiert. Wird dadurch ein Zustand mit kleinerem Φ erreicht, wird dieser als neuer Startpunkt gewählt, wenn nicht, die Kette verworfen.

Als Akzeptanzwahrscheinlichkeit eines Vorschlags $S \rightarrow S'$ wird dabei folgende

⁶Dieses wird hier nur skizziert, eine ausführliche Beschreibung findet sich in [16].

Form gewählt:

$$p_{S \rightarrow S'} = \begin{cases} 1 & , \quad \Phi_{S'} < \Phi_S \\ (\Phi_S / \Phi_{S'})^{1+d} & , \quad \Phi_{S'} > \Phi_S \end{cases} \quad (30)$$

wobei für eine Kette nacheinander zwei zufällige Werte für d verwendet werden: am Anfang $d_1 < 1$, um das Verlassen von Minima zu begünstigen, gegen Ende $d_2 > 1$ um in einer günstige Konfiguration zu enden.

Dargestellt werden die Spektren dabei durch eine Summe von Rechteckfunktionen mit Breite w_i , Höhe h_i und Mitte bei $\omega = c_i$:

$$S(\omega) = \sum_k \begin{cases} h_k & , \quad \omega \in [c_k - w_k/2, c_k + w_k/2] \\ 0 & , \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (31)$$

Damit jede Konfiguration erreicht werden kann, sind viele verschiedene Arten von vorzuschlagenden Änderungen erforderlich, die Fläche im Spektrum durch Hinzufügen, Entfernen, Verschieben, Skalieren, Aufteilen oder Zusammenfügen der Rechtecke neu verteilen, dabei aber immer die Normierung erhalten.

Jede Art von Update enthält dabei einen kontinuierlichen Parameter ζ (z.B. die Distanz, um die ein Rechteck verschoben oder die Fläche, die zwischen zwei Rechtecken übertragen wird). Um diesen günstig zu wählen, wird Φ für die sich bei einer zufällige Schrittweite ζ und $\zeta/2$ ergebenden Spektren ausgewertet und durch quadratische Interpolation die Lage des Minimums abgeschätzt.

Für eine möglichst effiziente Nutzung der Rechenzeit erfolgt die Optimierung vieler verschiedener Spektren rundenweise. Am Ende jeder Optimierungsphase werden diejenigen Spektren, für die Φ bisher am weitesten konvergiert ist, ausgewählt und nur diese weiter optimiert.

2.4.3 Genetische Algorithmen

Genetische Algorithmen hingegen optimieren eine „Population“ von Lösungen durch Nachahmen der bei der Evolution stattfindenden natürlichen Auslese. Die zu extremalisierende Größe wird als *Fitness* einer Lösung interpretiert. Mit dieser gewichtet werden wiederholt zufällig zwei Lösungen ausgewählt und zu einer neuen rekombiniert, sodass sich wahrscheinlich die gesuchten Merkmale durchsetzen. Zur weiteren Erkundung des Suchraums wird üblicherweise mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit eine Mutationsoperation durchgeführt [17].

3 Genetic Inversion via Falsification of Theories

Im Folgenden wird ein genetischer Algorithmus zur Rekonstruktion vorgestellt und dessen Beschränkungen anhand von bekannten Testspektren untersucht. Anschließend wird er zur Bestimmung des dynamischen Strukturfaktors des HEG verwendet.

3.1 Verfahren

Die Beschreibung folgt im Wesentlichen dem in [4] vorgestellten Verfahren.

3.1.1 Parametrisierung

Intern werden Spektren durch eine Summe auf einem Raster $\omega_k \in [\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N]$ verteilter Delta-Distributionen dargestellt:

$$\tilde{S}(\omega) = \sum_{k=1}^{N_\omega} s_k \delta(\omega - \omega_k) \quad (32)$$

Dieses wird in allen folgenden Anwendungen gleichmäßig ($\omega_k = \omega_{min} + (k-1) \cdot \Delta\omega$) gewählt. Die Flächenbeiträge nehmen dabei nur diskrete Werte $s_k \in \mathbb{N}$ an und ergänzen sich zur Auflösung $\mathcal{M} = \sum_k s_k$, sodass sich gegenüber dem tatsächlichen Spektrum $S(\omega)$ ein Umrechnungsfaktor von $\langle \omega^0 \rangle / \mathcal{M}$ ergibt. Für die Laplace-Transformierte $F(\tau)$ folgt:

$$F(\tau) = \frac{\langle \omega^0 \rangle}{\mathcal{M}} \tilde{F}(\tau) = \frac{\langle \omega^0 \rangle}{\mathcal{M}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{S}(\omega) e^{-\tau\omega} = \frac{\langle \omega^0 \rangle}{\mathcal{M}} \sum_{k=1}^{N_\omega} s_k e^{-\tau\omega_k} \quad (33)$$

Prinzipiell sind andere Repräsentationen, z.B. als Stufenfunktionen, Trapeze oder die Interpolation der Stützstellen durch höhere Polynome denkbar, bei Tests konnte dabei jedoch keine Verbesserung der Ergebnisse beobachtet werden.

Die Momente ergeben sich analog zu:

$$\langle \widetilde{\omega^n} \rangle = \frac{\langle \omega^0 \rangle}{\mathcal{M}} \sum_{k=1}^{N_\omega} s_k \omega_k^n . \quad (34)$$

Damit deren numerischen Auswertung sinnvolle Werte, die mit dem analytisch

bekanntem verglichen werden können, liefert, muss die ω -Auflösung N_ω fein genug gewählt werden. Für das inverse Moment, dessen Beiträge für Spektren mit $S(\omega \rightarrow 0) \neq 0$ eine Polstelle besitzen, lässt sich direkt der Cauchysche Hauptwert bestimmen, wenn das Raster gleichmäßig um $\omega = 0$ liegend, diese Stelle jedoch nicht enthaltend gewählt wird.

Als zu minimierendes Maß der Abweichung von den Eingabedaten dient:

$$\Phi [\tilde{S}] = \frac{1}{N_\tau} \sum_{i=1}^{N_\tau} \left(\frac{\langle \omega^0 \rangle}{\mathcal{M}} \tilde{F}(\tau_i) - F(\tau_i) \right)^2 + \sum_n \gamma_n \left(\langle \widetilde{\omega^n} \rangle - \langle \omega^n \rangle \right)^2$$

wobei $\gamma_n \geq 0$ die Gewichtung der Abweichungen der Momente bestimmt.

3.1.2 Evolutionsschritte

Als Anfangspopulation werden N zufällige Spektren erzeugt. Dazu wird bei einem leeren Spektrum ($s_k = 0 \forall k$) \mathcal{M} mal an einer zufällig gewählten Stelle s_k um eins erhöht, bis die Normierungsbedingung erfüllt ist.

Zu Beginn eines jeden Evolutionszyklus wird die Fitness Φ für jedes Spektrum ausgewertet. Dies ist der performancekritischste Schritt, der Rechenaufwand steigt mit $N \cdot N_\tau \cdot N_\omega$, es bietet sich an, die Berechnung der Summe in (33) zu parallelisieren. Anschließend werden die Spektren der Fitness nach sortiert, sodass die am meisten mit den Eingabedaten übereinstimmenden die kleinsten Indizes besitzen ($\Phi_1 \leq \Phi_2 \leq \dots \leq \Phi_N$) und wiederholt zwei Spektren mit Index

$$k = \lfloor N r^{1/3} \rfloor + 1, \text{ zufälliges } r \in [0, 1) \quad (35)$$

gewählt. Für die Selektion sind prinzipiell alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen geeignet, die gute Lösungen bevorzugen. Die aus diesen durch Rekombination und Mutation erzeugten Spektren bilden die nächste Generation.

Zur Rekombination wird zufällig gewählte Fläche s_k der Eltern-Spektren an der selben Stelle im Kind-Spektrum eingefügt, sodass dieses Merkmale beider Eltern trägt. Dies wird aus praktischen Gründen als Austausch von Fläche zwischen identischen Kopien der Elternteile realisiert, auf diesem Weg erhält man gleich zwei die Normierungsbedingung erfüllende Nachfolger.

Als häufigste Mutationsoperation wird ein Stück Fläche von einer zufälligen Stelle k nach links oder rechts verschoben: $s_k := s_k - 1$ und $s_{k+1} := s_{k+1} + 1$ bzw.

$s_{k-1} := s_{k-1} + 1$. An sich ermöglicht diese zusammen mit der Rekombination schon ein weites Erkunden des Suchraums. Es können jedoch Situationen auftreten, bei denen sich bei allen Spektren einer Population die Fläche auf einen Bereich konzentriert (z.B. weil dies bei starker Gewichtung eines Moments ein lokales Minimum von Φ darstellt), die ohne eine nicht-lokal arbeitenden Mutationsoperation nicht verlassen werden. Mit einer deutlich geringeren Wahrscheinlichkeit, da dies große Änderungen in $F(\tau)$ bewirkt, wird ein Stück Fläche von einer zufälligen Position zu einer anderen transferiert: $s_k := s_k - 1, s_j := s_j + 1$. Weitere Operationen sind denkbar (vgl. [18]).

Um zu garantieren, dass sich die beste Lösung mit steigender Zahl simulierter Generationen nicht verschlechtert und die Wahrscheinlichkeit zu erhöhen, dass sich dessen Merkmale durchsetzen, werden die besten N_{elite} unverändert in die nächste Generation übernommen. Für eine Beschleunigung der Konvergenz beginnt man mit einer großen Zahl zufälliger Spektren und reduziert die Populationsgröße von Generation zu Generation.

Diese Schritte werden solange wiederholt, bis Φ konvergiert. Typischerweise sind dazu einige tausend Generationen erforderlich. Über das jeweils beste Spektrum vieler verschiedener Evolutionsvorgänge $\{S_1(\omega), S_2(\omega), \dots, S_N(\omega)\}$ wird gemittelt (vgl. Abb. 2):

$$S_{GIFT}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(\omega) \quad (36)$$

Es stellt sich heraus, dass sich die Effizienz weiter steigern lässt, indem zusätzlich simuliertes Abkühlen durchgeführt wird, und Kinder ihre Eltern in der nächsten Generation nur mit einer Wahrscheinlichkeit $p = \min(1, \exp(-\Delta\Phi/kT))$ ersetzen. Dies erlaubt es, über die Temperatur die Diversität in einer Population zu kontrollieren und mit einer hohen Mutationsrate aggressiv den Suchraum zu erkunden, ohne, dass sich dies negativ auf die Konvergenz der Fitness auswirkt.

3.2 Numerische Tests mit bekannten Spektren

Um auftretende Probleme bei der Rekonstruktion zu untersuchen, wird nun die analytisch bestimmte Laplacetransformation $F(\tau)$ eines bekannten Spektrums, gezeigt sind hier Sägezahnpulse und Kombinationen von Normalverteilungen, auf einem Intervall $\tau \in [0, \tau_{max}]$ mit einer begrenzten Auflösung ausgewertet. Zusätzlich wird normalverteiltes Rauschen mit $\sigma = \sigma_{rel} \cdot F(0)$ addiert, um die Fehlerbehaftung von MC-Ergebnissen zu simulieren.

Bei Tests mit Spektren mit einem normalverteilten Peak zeigt sich, dass während Position und Breite bei einem niedrigen Rauschen $\sigma_{rel} \approx 10^{-4}$ auch ohne Verwendung von Momenten wiedergegeben werden können (siehe Abb. 2), für höhere σ_{rel} zunehmend Formverluste zu beobachten sind (vgl. [4]). Verschiebungen lassen sich dabei durch Berücksichtigung des ersten Moments $\gamma_1 > 0$ in der Fitnessfunktion korrigieren. In dem Fall resultiert zunehmendes Rauschen in einer Verbreiterung.

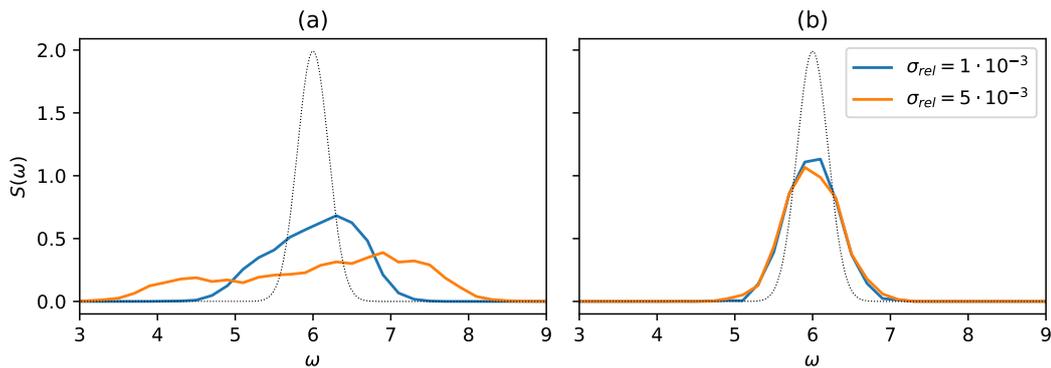


Abbildung 3: Rekonstruktion für unterschiedliche Fehler der Eingabedaten
 (a) ohne Berücksichtigung von Momenten
 (b) unter Berücksichtigung des ersten Moments

Eine andere Art von Informationsverlust ergibt sich dadurch, dass in echten Anwendungen $F(\tau)$ aus QMC-Berechnungen nur bis zu einem $\tau_{max} = \beta$ bekannt ist. Die Auswirkungen lassen sich durch eine unterschiedliche Wahl von τ_{max} , dargestellt in Abb. 4, untersuchen. Da die Beiträge zu $F(\tau)$ bei kleinen Frequenzen deutlich langsamer abfallen (siehe Abb. 5), geht beim Reduzieren von τ_{max} zuerst Information über die Spitze des Sägezahnimpulses verloren. Die Position lässt sich der Fläche nicht mehr genau zugeordnen, es kommt zu einer Abflachung.

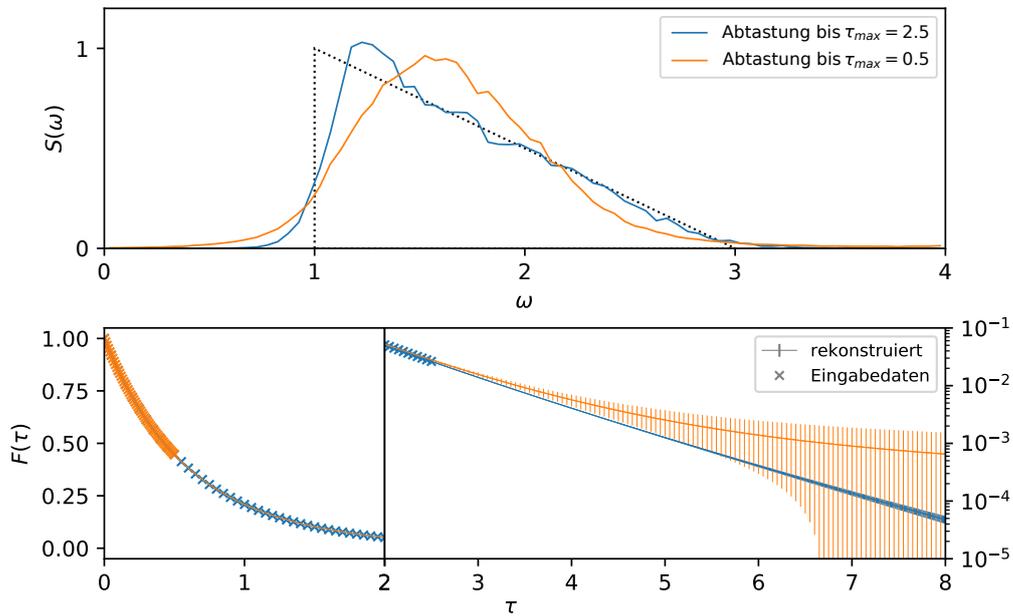


Abbildung 4: Rekonstruktion eines Sägezahnimpulses aus Abtastungen von $F(\tau)$ bis zu verschiedenen τ_{max} . Bei $\tau = 0.5$ ist $F(\tau)$ um etwas über die Hälfte, bei $\tau = 2.5$ auf ca. $1/40$ abgefallen.

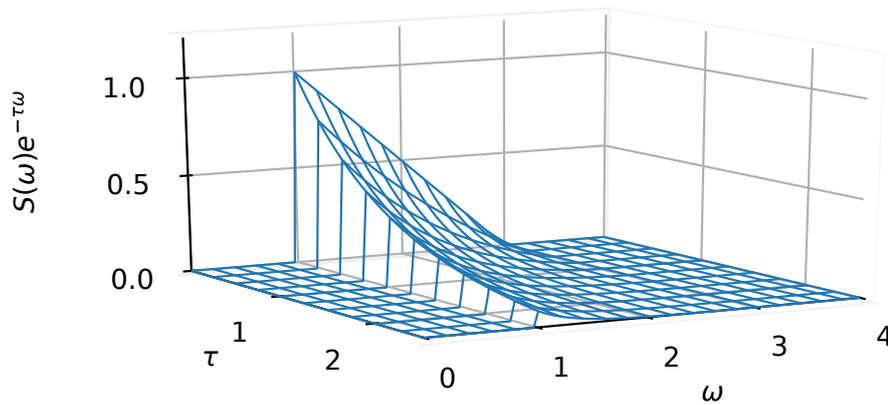


Abbildung 5: Integralbeiträge $S(\omega)e^{-\tau\omega}$ zur Laplacetransformation $F(\tau)$ des gezeigten Sägezahnimpulses

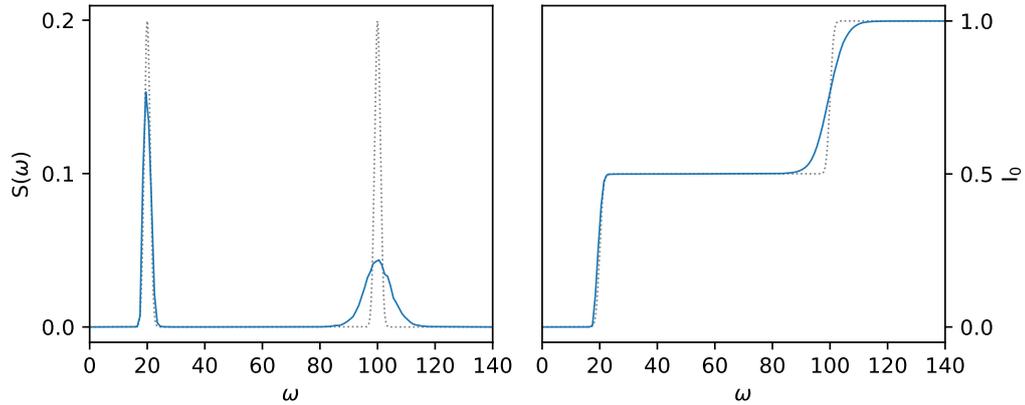


Abbildung 6: Rekonstruktion von $S(\omega)$ für ein Spektrum mit zwei Peaks

Auf der anderen Seite ist das Rekonstruktionsvermögen durch die Auflösung der Abtastung von $F(\tau)$, bei gleichmäßiger Unterteilung also der Wahl der Schrittweite $\delta\tau$, begrenzt. Dies lässt sich an der Rekonstruktion von Spektren mit zwei Peaks untersuchen. Dargestellt in Abb. 6 ist zusätzlich das kumulierte Spektrum I_0 , mit:

$$I_n(\bar{\omega}) = \int_{-\infty}^{\bar{\omega}} d\omega \omega^n S(\omega). \quad (37)$$

Während die Positionen beider Peaks genau bestimmt werden, fehlt Information über die Form/ Breite des zweiten Peaks. Verdopplungen der Auflösung liefern nur abnehmend Verbesserungen.

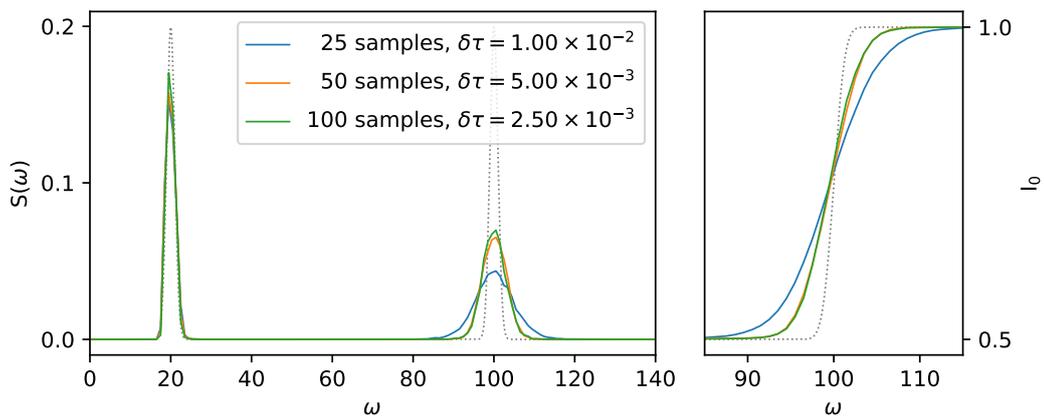


Abbildung 7: Rekonstruktion von zwei Peaks für verschiedene τ -Auflösungen

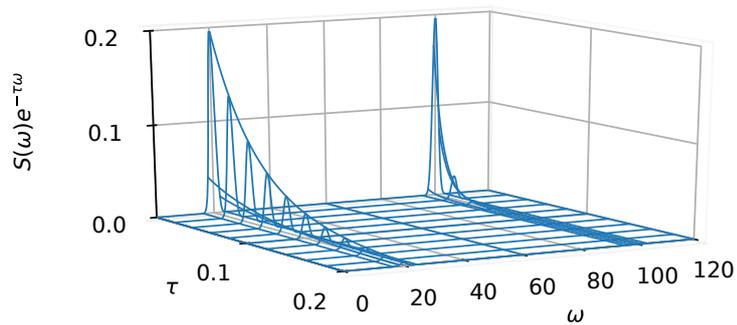


Abbildung 8: Integralbeiträge $S(\omega)e^{-\tau\omega}$ zur Laplacetransformation $F(\tau)$ eines Spektrums mit zwei Peaks

Wie in Abb. 8 dargestellt, enthält $F(\tau)$ nur für kleine τ signifikante Beiträge des zweiten Peaks, da diese exponentiell schneller gegenüber denen des ersten abfallen. Bei einer linearen Wahl der *time slices* bleibt also auch für höhere Auflösungen der durch Abweichungen in der Form des zweiten Peaks hervorgerufene Anteil an Φ klein. Die entstehende Verbreiterung sorgt dafür, dass sich Spektren, die einen Peak und noch weitere Fläche enthalten in Fällen, wo diese vor dem Peak liegt, deutlich schlechter rekonstruieren lassen als wenn sich diese dahinter befindet. Dargestellt in Abb. 9 ist ein Extrembeispiel.

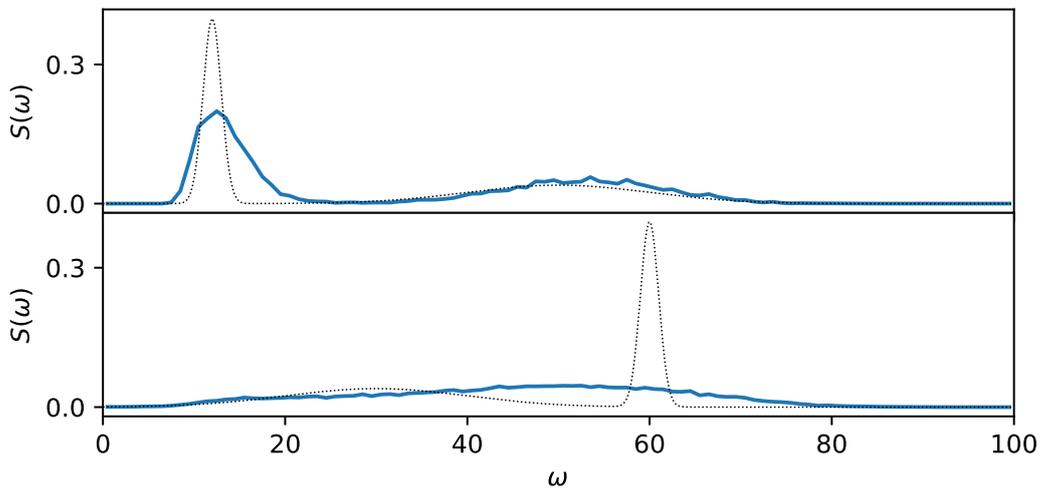


Abbildung 9: Rekonstruktion von aus einer breiten und einer schmalen Normalverteilung bestehenden Spektren

3.3 Erweiterungen

Durch Hinzufügen eines Entropieterms (29) zur Fitnessfunktion lässt sich GIFT als Implementierung der Maximum-Entropie-Methode verwenden [4].

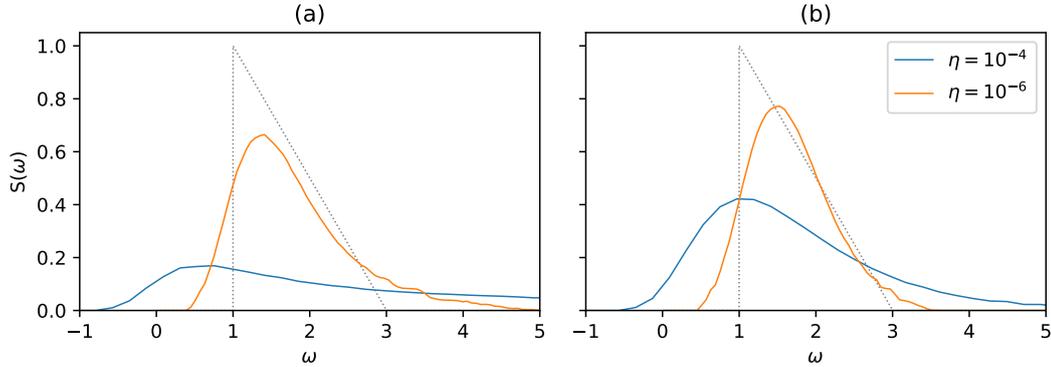


Abbildung 10: Rekonstruktion mit Entropieterm $-\eta\mathcal{S}$ in der Fitnessfunktion. (a) ohne Beachtung der Momente, (b) Verwendung des ersten Moments

Eine Darstellung von Spektren, die die *detailed balance equation* (14) direkt nutzt, sodass stattdessen (15) gelöst werden kann, ist mit der gewählten internen Diskretisierung einer gleichmäßig Aufteilung von $\langle\omega^0\rangle$ nicht ohne weiteres möglich, da die Beiträge eines s_k dazu so von der ω -Position abhängig wären ($1 \rightarrow 1 + e^{-\beta\omega}$). Um dennoch eine solche Einschränkung des Suchraums durchführen zu können, kann zu einer Darstellung durch Gleitkommazahlen für s_k übergegangen werden, wobei das Spektrum nach Änderungen immer passend skaliert wird, sodass die Normierung:

$$\int_0^{\infty} d\omega S(\omega)(1 + e^{-\beta\omega}) = \langle\omega^0\rangle \quad (38)$$

erfüllt ist. Die anderen Momente ergeben sich zu:

$$\langle\omega^n\rangle = \int_0^{\infty} S(\omega)(1 + (-1)^n e^{-\beta\omega})\omega^n d\omega \quad (39)$$

Das Verfahren bleibt im Wesentlichen das gleiche, lediglich die Mutations- und Kreuzungsoperationen müssen angepasst werden.

3.4 Anwendung auf das homogene Elektronengas

Nun wird das Verfahren auf das Homogene Elektronengas angewendet. Daten für $F(\mathbf{q}, \tau)$ für verschiedene Wellenzahlen $q = |\mathbf{q}|$ liegen aus PIMC-Berechnungen für $r_s = 2$, $r_s = 10$ und $r_s = 100$ mit $\theta = 1$ vor. Da die in $F(\mathbf{q}, \tau)$ für $\tau \in [0, \beta/2]$ und $\tau \in [\beta/2, \beta]$ enthaltene Information identisch ist (15), werden nur die Datenpunkte der ersten Hälfte benutzt. Abb. 11 zeigt die Ergebnisse einer Rekonstruktion ohne Verwendung von Momenten. Dargestellt sind außerdem durch Rekonstruktion der Responsefunktion mit dem in [9, 19] vorgestellten Verfahren erhaltene Ergebnisse.

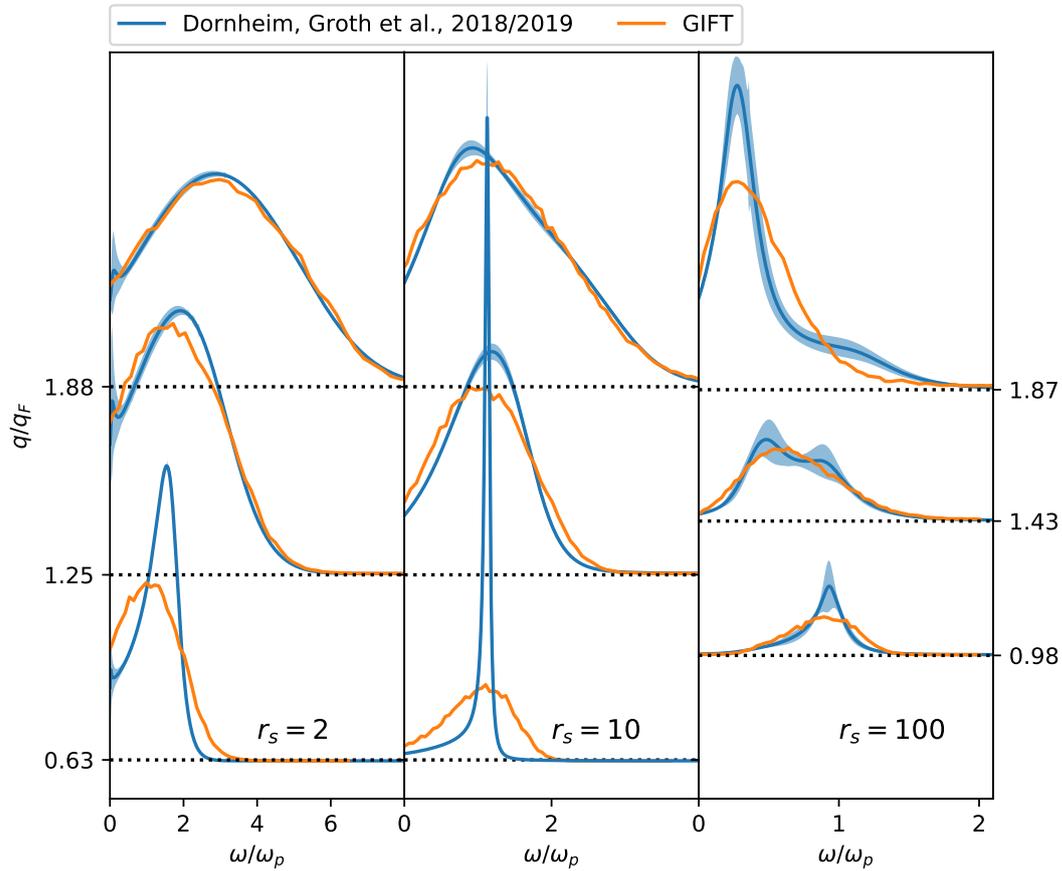


Abbildung 11: Rekonstruktion des dynamischen Strukturfaktors $S(\mathbf{q}, \omega)$ für $\theta = 1$. Die Kurven sind jeweils um $|\mathbf{q}|$ verschoben und für eine gemeinsamen Darstellung skaliert. $N = 34$ für $r_s = 2$ und $r_s = 10$, $N = 200$ für $r_s = 100$.

Während alle Ergebnisse grob im Verlauf den Vergleichsdaten ähneln, geht vor allem bei kleinen Wellenzahlen zunehmend die Form verloren. Dies zeigt sich besonders stark bei $r_s = 10$ und $q/q_F \approx 0.63$, wo ein Peak gar nicht reproduziert wird. Für $r_s = 100$ ergeben sich die größten Abweichungen bei $q/q_F \approx 1.87$.

Bei Betrachtung der Momente (Abb. 12) fällt auf, dass die ersten Momente nahezu mit den durch (23) bekannten Werten übereinstimmen. Die dritten Momente werden gegenüber (24) übertroffen, können also Korrekturen liefern.

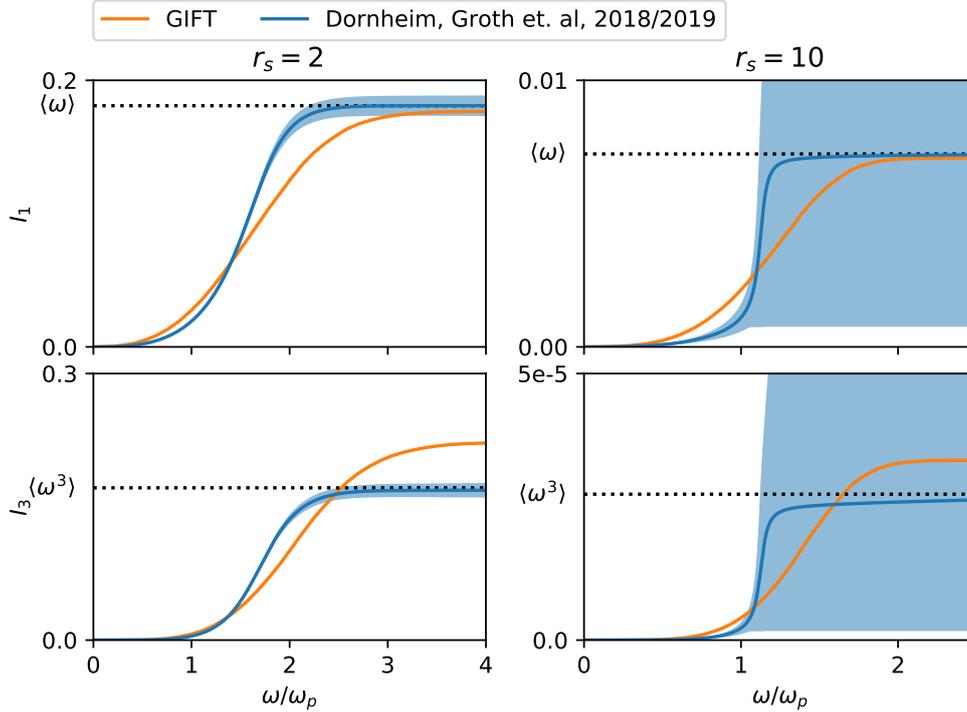


Abbildung 12: Kumulierte Beiträge I_n zu den ersten und dritten Momenten des dynamischen Strukturfaktors, dargestellt für den jeweils niedrigsten Wellenvektor. Die gestrichelte Linie gibt die analytisch bekannten Werte aus (23) und (24) an.

Lässt man die Abweichung der dritten Momente in die Fitnessfunktion einfließen (Abb. 13), so wird für $r_s = 2$ das durch Suche der Responsefunktion gefundene Ergebnis nahezu reproduziert, die Peaks stimmen nun in der Höhe überein, auch die Asymmetrie wird gegenüber der Rekonstruktion ohne Moment besser getroffen. Ein Unterschied besteht jedoch im Verhalten für $\omega \rightarrow 0$. Bei $r_s = 10$ ergeben sich kleinere Veränderungen, die vorliegende Information reicht nach wie vor nicht aus, um die Form des Peaks zu bestimmen.

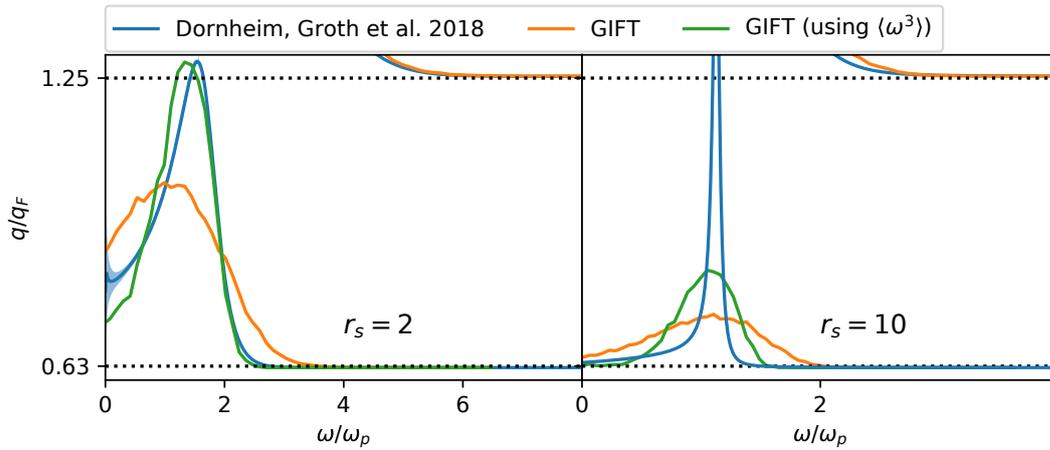


Abbildung 13: Rekonstruktion unter Berücksichtigung des dritten Moments

$F(\mathbf{q}, \tau)$, dargestellt in Abb. 14, fällt auf dem bekannten Intervall nur sehr langsam ab, sodass ähnliche Effekte wie in Abb. 4 zu vermuten sind. In der Tat zeigt ein Vergleich mit den Integralbeiträgen zur Laplacetransformation der Ergebnisse aus [9], dass $F(\beta/2)$ von Beiträgen aus genau den Bereichen dominiert wird, in denen sich die größten Unterschiede ergeben.

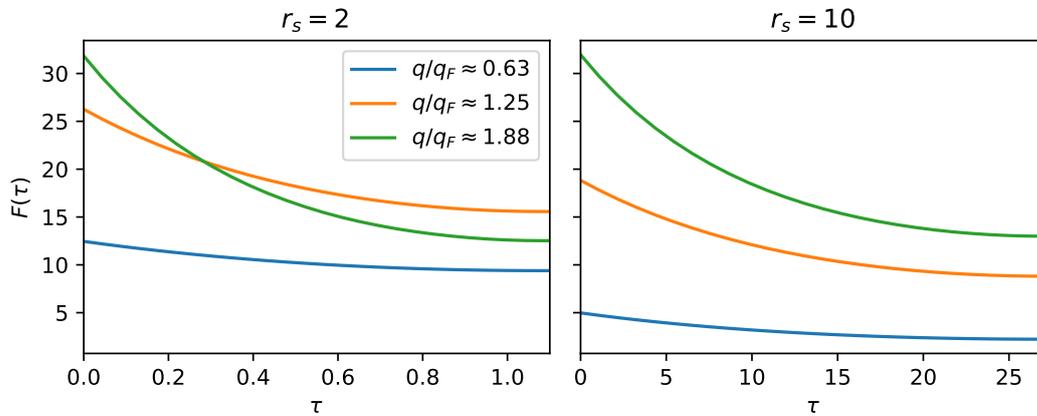


Abbildung 14: $F(\mathbf{q}, \tau)$ für verschiedene Wellenzahlen auf dem Intervall $[0, \beta/2]$.

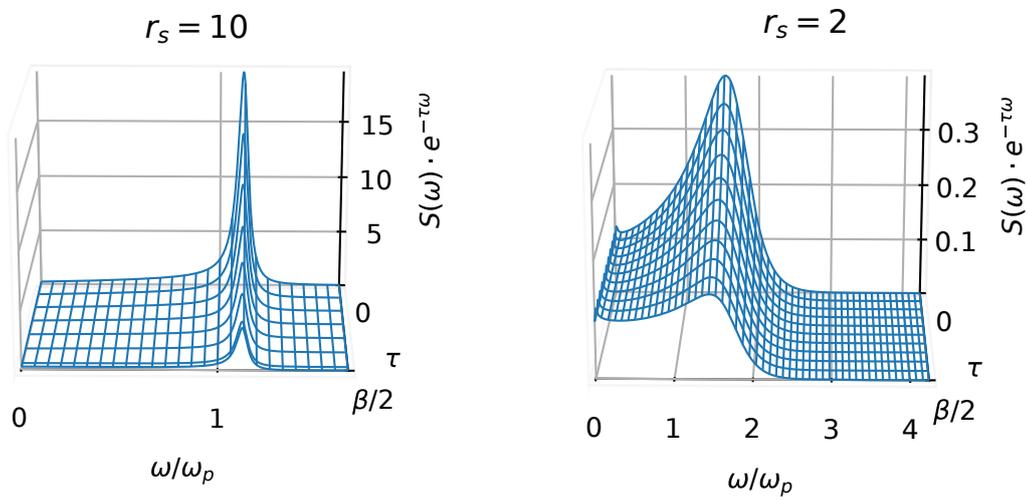


Abbildung 15: Integralbeiträge $S(\omega)e^{-\tau\omega}$ zur Laplacetransformation $F(\tau)$ der Ergebnisse aus [9] für den jeweils niedrigsten Wellenvektor

4 Suche nach der Local Field Correction

Wie anfangs beschrieben hängt der dynamische Strukturfaktor über das Fluktuations-Dissipations-Theorem (12) mit der Responsefunktion zusammen. Das Rekonstruktionsproblem ist also prinzipiell äquivalent zu der Suche nach der Dichte-Dichte-Responsefunktion $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, für welche sich jedoch weitere Einschränkungen treffen lassen. Im Folgenden soll das Verfahren aus [9, 19] vorgestellt und erweitert werden.

4.1 Neuformulierung des Problems

Für das freie Elektronengas (Energie eines Teilchens rein kinetisch $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2$) kann (11) direkt ausgewertet werden, man erhält die lineare Responsefunktion des idealen Systems, auch Lindhard-Funktion genannt [1, 7]:

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = 2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\eta} \quad \text{für } \eta \rightarrow 0^+ \quad (40)$$

wobei $f(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$ einer Fermi-Verteilung folgt.

Die Responsefunktion des HEG lässt sich durch diese und einen sämtliche Wechselwirkungseffekte beschreibenden Korrekturterm $G(\mathbf{q}, \omega)$, die *local field correction* (LFC) ausdrücken [7]:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - \frac{4\pi}{q^2}(1 - G(\mathbf{q}, \omega))\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (41)$$

Eine erste Korrektur, die *static local field correction* (SLFC), ergibt sich durch das über (13) aus QMC-Berechnungen direkt bestimmbaren statischen Limit der Responsefunktion:

$$G_{stat}(\mathbf{q}, \omega) = G(\mathbf{q}, 0) = 1 - \frac{q^2}{4\pi} \left(\frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, 0)} - \frac{1}{\chi(\mathbf{q}, 0)} \right) \quad (42)$$

Im Allgemeinen kann $G(\mathbf{q}, \omega)$ jedoch nicht als frequenzunabhängig angesehen werden. Dornheim, Groth et. al haben ein Verfahren entwickelt, dass die frequenzabhängige *dynamic local field correction* (DLFC), im Folgenden mit $G(\mathbf{q}, \omega)$ gemeint, unter genauerer Berücksichtigung von $F(\tau)$ rekonstruiert [9].

Aus den Kramers-Kronig-Beziehungen (9, 10) ergeben sich folgende Zusam-

menhänge zwischen Real- und Imaginärteil der LFC:

$$\operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \omega) = \operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \infty) + \frac{1}{\pi} \operatorname{CH} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (43)$$

$$\operatorname{Im} G(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{CH} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \omega') - \operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \infty)}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (44)$$

wobei:

$$\operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \infty) = I(q) - \frac{2q^2}{\omega_p^2} K_{xc} \quad (45)$$

gilt. $I(q)$ ist durch den statischen Strukturfaktor über (25) gegeben, K_{xc} ist der kinetische Teil der Austausch-Korrelations-Energie, für die im untersuchten Bereich des HEG eine Parametrisierung bekannt ist [2]. Es kann sich bei der Suche also auf $\operatorname{Im} G(\mathbf{q}, \omega)$ – alternativ $\operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \omega)$ – beschränkt werden.

4.2 Bisheriges Verfahren

Mit dem Wissen, dass $\operatorname{Im} G(\mathbf{q}, \omega)$ eine ungerade Funktion ist (vgl. Glg. (8)), wird für die DLFC folgende Padé-Approximation gewählt:

$$\operatorname{Im} G(\mathbf{q}, \omega) = \frac{a_0\omega + a_1\omega^3 + a_2\omega^5 + a_3\omega^7 + a_4\omega^9}{(b_0 + b_1\omega^2)^c} \quad (46)$$

Die Koeffizienten werden zufällig über mehrere Größenordnungen gewählt:

$$-10^{-5} \leq a_i \leq 10^5, \quad 10^{-3} \leq b_0 \leq 10^5, \quad 10^{-5} \leq b_1 \leq 10^5, \quad 4 \leq c \leq 11.$$

Aus (43) folgt für $\omega = 0$:

$$\operatorname{Re} G(\mathbf{q}, 0) = \operatorname{Re} G(\mathbf{q}, \infty) + \frac{1}{\pi} \operatorname{CH} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a_0 + a_1\omega^2 + a_2\omega^4 + a_3\omega^6 + a_4\omega^8}{(b_0 + b_1\omega^2)^c} \quad (47)$$

Um nur Lösungen zu betrachten, die diese Beziehung erfüllen, wird nach einem zufälligen a_i aufgelöst und der Koeffizient entsprechend geändert. Es zeigt sich, dass dieser dann in der Regel mehrere Größenordnungen außerhalb des ursprünglich betrachteten Intervalls liegt.

Die zur Überprüfung, ob eine Lösung im Rahmen der gegebenen Toleranzen zu $F(\mathbf{q}, \tau)$ und den Momenten passt, durchzuführenden Integrationen sind rechenaufwändig. Aus diesem Grund werden zunächst eine Reihe von Plausibilitätstests durchgeführt:

1. Lassen sich $\operatorname{Re} G(\omega)$ und $\operatorname{Im} G(\omega)$ numerisch auswerten, oder kommt es z.B. zu einem Überlauferfehler?
2. Ist $\operatorname{Re} G(\omega)$ für große ω bereits hinreichend konvergiert?
3. Liegt das Maximum von $\operatorname{Im} G(\omega)$ in dem zu erwartenden Frequenzbereich?

Wenn diese scheitern, wird der Lösungskandidat direkt verworfen und ein neuer Ansatz erzeugt. Andernfalls wird $\operatorname{Im} G(\omega)$ mit der gewählten Auflösung abgetastet und über (12) dazugehörig $S(\omega)$ berechnet und daraus die Momente (39) und $F(\tau)$ bestimmt. Ist deren Abweichung von den Eingabedaten klein genug und liegt innerhalb einer gewählten Toleranz, wird der Kandidat als gültige Lösung gespeichert, wenn nicht, ein neuer Versuch gestartet. Es werden viele ($\sim 10^3$) Lösungen erzeugt und über diese gemittelt. Um ein Unsicherheitsintervall angeben zu können, wird die Standardabweichung berechnet.

aufgelöst nach	$q \approx 0.63 q_F$	$q \approx 1.25 q_F$	$q \approx 1.88 q_F$	$q \approx 2.35 q_F$	$q \approx 2.94 q_F$
a_1	52/52	90/90	96/96	86/86	204/204
a_2	64/64	71/71	111/111	105/105	211/211
a_3	176/176	224/224	332/332	334/334	498/500
a_4	239/239	359/360	464/466	408/410	671/673

Tabelle 1: Anzahl gültiger Lösungen/plausibler Kandidaten bei einer Stichprobe 10 000 zufälliger LFC. $\theta = 1$, $N = 34$, $r_s = 2$

Bei Anwendung des Verfahrens zeigt sich, dass für das schwach gekoppelte HEG, $r_s = 2$, wo $G(\mathbf{q}, \omega)$ nur geringe Korrekturen gegenüber $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ liefert und die Beschreibung durch die SLFC ausreicht (vgl. [9, 19]), nahezu alle plausiblen Kandidaten bereits valide Lösungen sind. Für $r_s = 10$ und $r_s = 100$ ist dies nur noch für einen kleinen Teil davon der Fall. Auch werden insgesamt deutlich weniger Lösungen gefunden, genug Spektren für ein aussagekräftiges Ergebnis zu finden ist mit enormem Rechenaufwand verbunden. Ferner unterscheidet sich

aufgelöst nach	$q \approx 0.63 q_F$	$q \approx 1.25 q_F$	$q \approx 1.88 q_F$	$q \approx 2.35 q_F$	$q \approx 2.94 q_F$
a_1	12/12	15/26	0/44	1/34	0/67
a_2	14/14	7/20	0/32	2/28	2/30
a_3	45/65	23/128	10/166	8/171	5/140
a_4	67/118	32/196	13/216	8/224	10/204

Tabelle 2: Anzahl gültiger Lösungen/plausibler Kandidaten bei einer Stichprobe 10 000 zufälliger LFC. $\theta = 1$, $N = 34$, $r_s = 10$

aufgelöst nach	$q \approx 0.98 q_F$	$q \approx 1.43 q_F$	$q \approx 1.87 q_F$	$q \approx 2.46 q_F$	$q \approx 3.11 q_F$
a_1	4/13	5/53	4/9	1/61	0/26
a_2	1/8	1/21	4/7	0/9	1/25
a_3	9/49	2/49	14/50	10/50	4/109
a_4	8/91	10/96	12/116	16/106	6/161

Tabelle 3: Anzahl gültiger Lösungen/plausibler Kandidaten bei einer Stichprobe 10 000 zufälliger LFC. $\theta = 1$, $N = 200$, $r_s = 100$

die Zahl der gefundenen Lösungen abhängig davon, nach welchem a_i aufgelöst wurde. Für a_3 und a_4 werden im Allgemeinen deutlich mehr Lösungen gefunden als für a_1 und a_2 . In der vorliegenden Implementierung wird darum mit einer höheren Wahrscheinlichkeit nach a_3 oder a_4 aufgelöst.

Mittelt man jeweils über die Lösungen, die nach dem gleichen a_i aufgelöst wurden (dargestellt in Abb. 16), so zeigen sich für $r_s = 10$ und insbesondere $r_s = 100$ deutliche Unterschiede zwischen diesen Lösungsklassen, während die Ergebnisse für $r_s = 2$ einander (und dem durch die SLFC erhaltenen Spektrum) gleichen. Es stellt sich aufgrund der großen Abweichungen bei starker Kopplung die Frage, welche Gewichtung der Klassen am ehesten $S(\mathbf{q}, \omega)$ beschreibt, und inwiefern, dem Verfahren und der Darstellung (46) geschuldet, der Suchraum überhaupt ausreichend abgetastet wird, und ob weitere Lösungen außerhalb oder zwischen den bisherigen Klassen liegen. Eine Vergrößerung der Intervalle, in denen die Koeffizienten erzeugt werden, könnte weitere Lösungen liefern, scheint jedoch angesichts der Tatsache, dass bei einer Wahl über zehn Größenordnungen die Trefferquote bereits äußerst gering ist (vgl. Tabelle 3), nicht praktikabel.

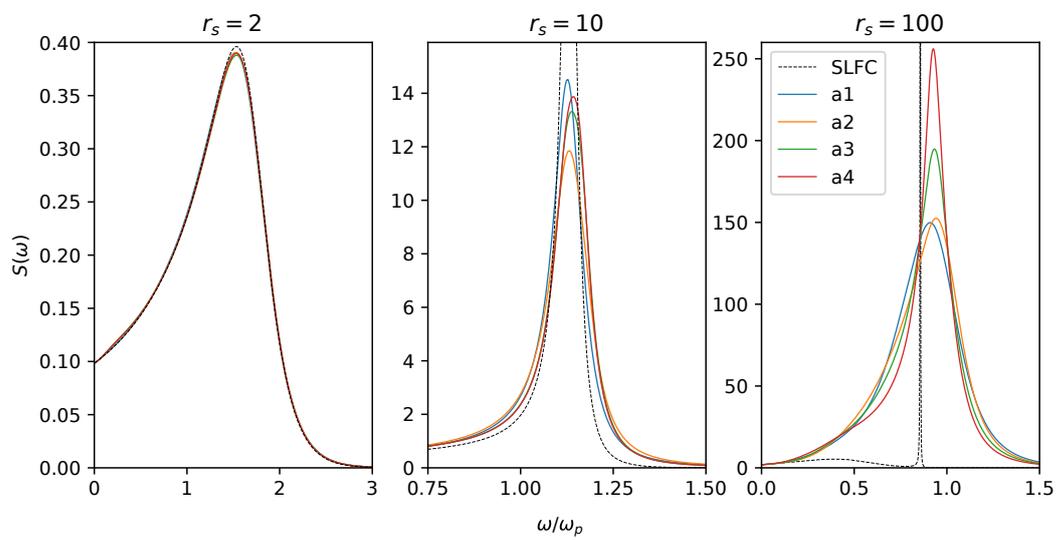


Abbildung 16: Mittelwert über jeweils 500 durch Auflösen von (47) nach verschiedener a_i gewonnener Lösungen für $S(\omega)$, dargestellt für jeweils den niedrigsten betrachteten Wellenvektor. Zusätzlich eingezeichnet ist das durch Verwendung der *static local field correction* (SLFC), $G_{static}(\mathbf{q}, \omega) = G(\mathbf{q}, 0)$ erhaltene Spektrum.

4.3 Genetischer Ansatz

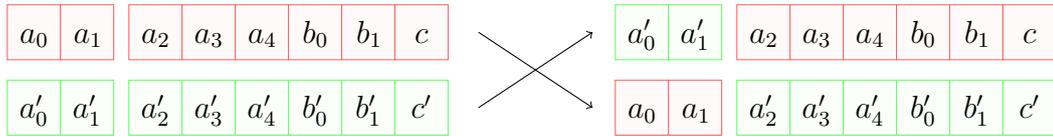
Statt jedes Mal einen neuen Versuch mit zufälligen Koeffizienten zu starten, liegt es nahe, gefundene wohlgeformte Lösungskandidaten zu optimieren. Dies zumindest in Fällen, bei denen die Abweichung nur knapp außerhalb der Toleranzen liegt, zu tun, könnte eine Steigerung der Effizienz mit sich bringen. Außerdem ist es denkbar, dass sich Kandidaten aus dem Bereich, in dem die Koeffizienten ursprünglich erzeugt werden, herausentwickeln – der Lösungsraum also vollständiger abgetastet wird. Dies wird im Folgenden mit genetischen Algorithmen versucht.

Zunächst wird ein initialer Pool an Kandidaten, die die Randbedingungen erfüllen, jedoch noch nicht innerhalb der Fehlertoleranzen liegen, als Startpopulation mit der selben Vorgehensweise wie im bisherigen Verfahren erzeugt. Zur internen Darstellung werden diese als Liste der Koeffizienten $[a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, b_0, b_1, c]$ gespeichert und jedem Kandidaten eine Fitness zugewiesen, für die sich folgende Form bewährt hat:

$$\Phi = \sum_i \begin{cases} \Delta_i/\bar{\sigma}_i & : \Delta_i \geq \bar{\sigma}_i \\ 0 & : \textit{sonst} \end{cases} \quad (48)$$

mit $\Delta = \{\Delta\langle\omega^1\rangle, \Delta\langle\omega^3\rangle, \Delta\langle\omega^{-1}\rangle, \Delta\langle\omega^0\rangle, \Delta F(\tau)\}$ und der Fehlertoleranz $\bar{\sigma}_i$. Optimiert werden sollen also nur die Aspekte, die mit noch außerhalb der Toleranz liegenden Größen zusammenhängen.

Zur Rekombination werden zwei solche Listen ab einer zufälligen Stelle miteinander vertauscht.



Anschließend werden die einzelnen Koeffizienten normalverteilt zufällig variiert und wie beim alten Verfahren nach einem a_i aufgelöst, sodass (47) erfüllt ist. Erfüllt ein auf diesem Weg gewonnener Ansatz wieder die Plausibilitätstests, wird er in die nächste Generation übernommen, wenn nicht, werden erneut zwei Spektren rekombiniert.

4.4 Optimierung einzelner Lösungen

Es zeigt sich, dass während die Fitness beim beschriebenen genetischen Algorithmus zwar konvergiert und irgendwann eine gültige Lösung gefunden wird, dies äußerst lange dauert und das Verfahren deutlich ineffizienter als die alte Methode arbeitet. Dies liegt daran, dass die Rate an durch Rekombination gewonnener plausibler Kandidaten äußerst klein ist, auch wenn nur Spektren einer einzigen Klasse betrachtet werden, was sich durch zu weit verteilte gültige Parameterkombinationen erklären lässt.

Eine Alternative stellt dar, den Suchraum in der näheren Umgebung eines einzelnen plausiblen Kandidaten zu erkunden. Dazu werden mehrere Kopien mit leicht variierten Koeffizienten angelegt und dann mit diesen wie beschrieben Evolution simuliert.

4.5 Ergebnisse

Löst man die Kandidaten zum Erfüllen von (47) dabei immer nach dem gleichen a_i auf, ist gegenüber dem alten Verfahren bei $r_s = 100$ eine Steigerung der Effizienz möglich.

aufgelöst nach	zufällig raten	genetische Optimierung
a_1	171	170
a_2	111	137
a_3	190	287
a_4	240	310

Tabelle 4: In 5 h Rechenzeit (1 Kern, 1.7 GHz) gefundene Lösungen für $\theta = 1$, $N = 200$, $r_s = 100$, $q \approx 0.98 q_F$

Wird jedes Mal nach einem zufälligen Koeffizienten aufgelöst, so kommt es dazu, dass Lösungsansätze in einer Generation nach einem a_i , in einer anderen – leicht verändert – nach einem anderen aufgelöst werden und Kreuzung zwischen Kandidaten verschiedener Klassen stattfindet. Unter den Lösungen finden sich bei einer Stichprobe Ansätze, die mit bis zu drei a_i mehrere Größenordnungen außerhalb der Intervalle liegen, in denen sie am Anfang erzeugt werden.

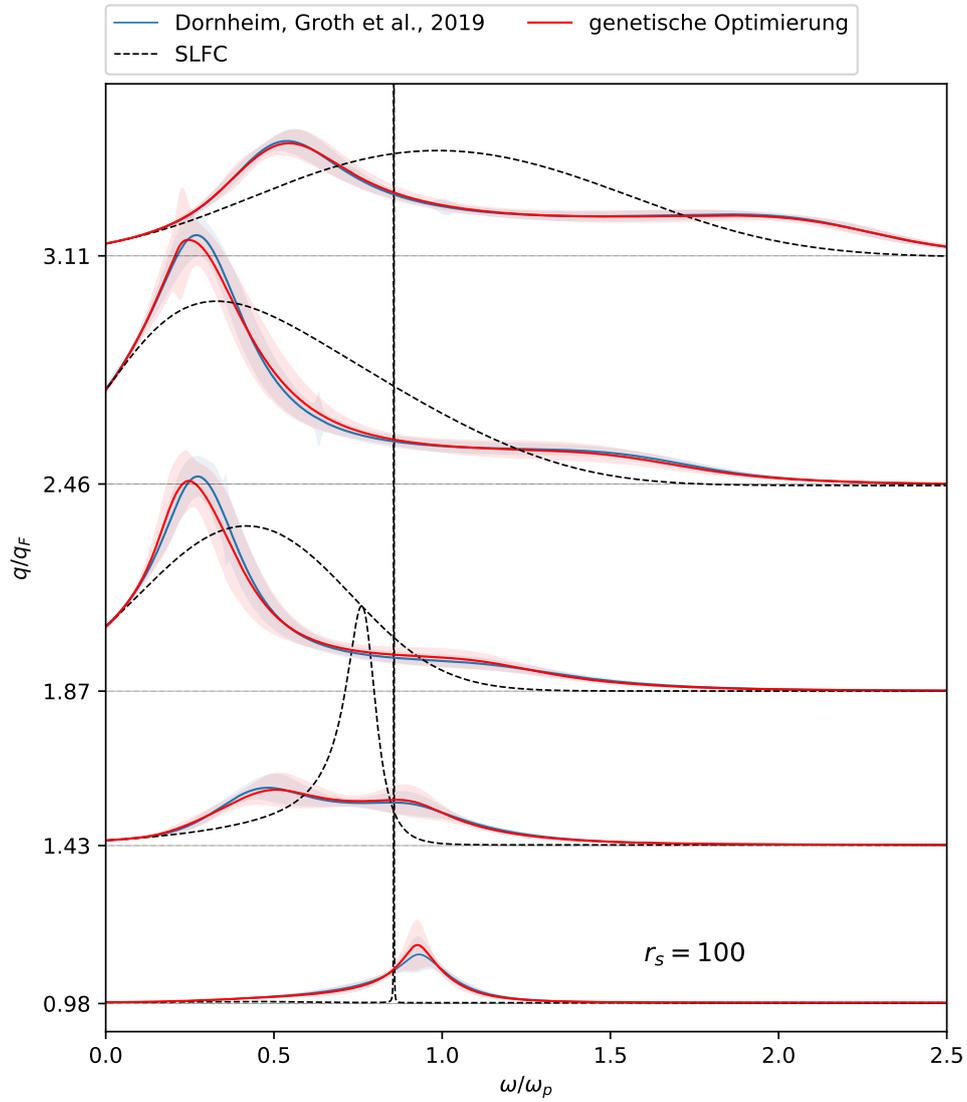


Abbildung 17: Mit Kreuzung zwischen den Lösungsklassen gefundene dynamische Strukturfaktoren für $\theta = 1$, $r_s = 100$, $N = 200$. Die Kurven sind jeweils um $|\mathbf{q}|$ verschoben und für eine gemeinsame Darstellung skaliert.

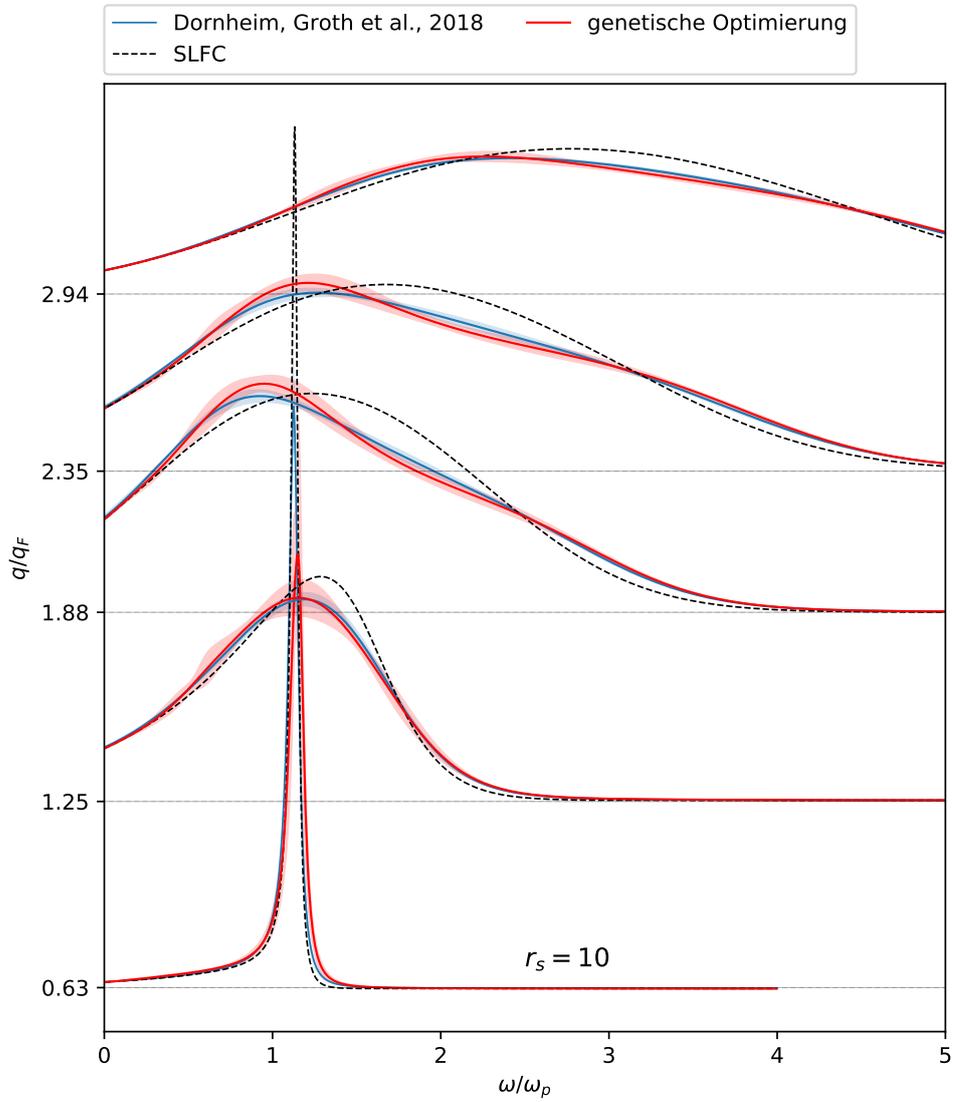


Abbildung 18: Mit Kreuzung zwischen den Lösungsklassen gefundene dynamische Strukturfaktoren für $\theta = 1$, $r_s = 10$, $N = 34$. Die Kurven sind jeweils um $|\mathbf{q}|$ verschoben und für eine gemeinsame Darstellung skaliert.

Bei Mittelwertbildung über eine große Zahl von auf diesem Weg erhaltener Lösungen zeigen sich Abweichungen gegenüber dem bisherigen Verfahren, die für $r_s = 100$ jedoch innerhalb des angegebenen Unsicherheitsintervalls liegen. Dies deutet darauf hin, dass das Verfahren ohne genetischen Algorithmus bereits ausreichend den Suchraum erkundet und genaue Ergebnisse liefert.

Für $r_s = 10$ ergeben sich jedoch deutlichere Abweichungen. Für $q/q_F \approx 1.88$ und $q/q_F \approx 2.35$ liegen diese stellenweise außerhalb des Unsicherheitsintervalls und besitzen einen zusätzlichen Wendepunkt.

Diese Abweichungen lassen sich als unterschiedliche Zusammensetzung der Lösungen deuten. Da alle Klassen äquivalent die vorliegenden Eingabedaten erklären, ist jedoch jede beliebige Gewichtung dieser als gleichberechtigtes Ergebnis anzusehen. Bei offensichtlich nicht normalverteilt gestreuten (vgl. Abb. 16) und zudem willkürlich gewichteten Lösungen ist die Standardabweichung, wie in [9, 19] verwendet, als Maß für die Unsicherheit allerdings zu hinterfragen. Eine Angabe von Minimum und Maximum könnte eine bessere Vorstellung der verbleibenden Unsicherheit vermitteln.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Es konnte bestätigt werden, dass bei der direkten Rekonstruktion des dynamischen Strukturfaktors aus $F(\tau)$ unter Einbeziehung von Momenten insbesondere bei kleinen Wellenzahlen nicht genügend Information vorliegt, um die Form des Spektrums so detailliert wie bei der Darstellung durch die ideale Responsefunktion wiederzugeben.

Bei dem die DLFC bestimmenden Verfahren konnte Optimierungspotential gefunden und teilweise ausgeschöpft werden. Die Betrachtung eines größeren Suchraums liefert weitere Lösungen, die Ergebnisse enthalten jedoch nur minimale Abweichungen, was darauf hinweist, dass das bisherige Verfahren im Rahmen der gewählten Darstellung auch für das stark korrelierte Elektronengas $r_s > 10$ bereits eine akkurate Beschreibung liefert. Bei Voruntersuchungen zur DLFC (vgl. Abb. 16) hat sich gezeigt, dass auch unter Einbeziehung sämtlicher zur Verfügung stehender Information das grundlegende Problem der Uneindeutigkeit der Lösung weiterbesteht. Fraglich ist das von Dornheim, Groth et al. angegebene Unsicherheitsintervall.

Eine Einbeziehung weiterer Lösungen – und damit möglicherweise eine noch genauere Abschätzung für $S(\mathbf{q}, \omega)$ – wäre mit einer anderen Darstellung für $\text{Im} G(\mathbf{q}, \omega)$ denkbar. Prinzipiell könnte man diese wie bei SOM oder GIFT auch diskret wählen und damit eine große Auswahl von Lösungen darstellen. Zu klären bleibt jedoch, wie sich dabei die weiteren bekannten Eigenschaften der LFC direkt nutzen lassen.

Nachdem sich dem dynamischen Strukturfaktor und der Dichte-Dichte-Response des HEG nun ausgiebig gewidmet wurde, wäre ein nächster Schritt, zu überprüfen, inwiefern sich das Verfahren auf die Rekonstruktion anderer dynamischer Größen übertragen lässt, und so auf Basis noch durchzuführender PIMC-Berechnungen z.B. Transporteigenschaften (vgl. [20]) warmer dichter Materie zu untersuchen.

Literatur

- [1] Tobias Dornheim, Simon Groth und Michael Bonitz. “The uniform electron gas at warm dense matter conditions”. In: *Physics Reports* 744 (Mai 2018), S. 1–86. DOI: 10.1016/j.physrep.2018.04.001. URL: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2018.04.001>.
- [2] Simon Groth u. a. “Ab initio Exchange-Correlation Free Energy of the Uniform Electron Gas at Warm Dense Matter Conditions”. In: *Phys. Rev. Lett.* 119 (13 Sep. 2017), S. 135001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.135001. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.135001>.
- [3] Tobias Dornheim u. a. “The Static Local Field Correction of the Warm Dense Electron Gas: An ab Initio Path Integral Monte Carlo Study and Machine Learning Representation”. In: *arXiv e-prints*, arXiv:1907.08473 (Juli 2019), arXiv:1907.08473. arXiv: 1907.08473 [physics.plasm-ph].
- [4] E. Vitali u. a. “Ab initio low-energy dynamics of superfluid and solid ^4He ”. In: *Phys. Rev. B* 82 (17 Nov. 2010), S. 174510. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.174510. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.174510>.
- [5] Siegfried H. Glenzer und Ronald Redmer. “X-ray Thomson scattering in high energy density plasmas”. In: *Rev. Mod. Phys.* 81 (4 Dez. 2009), S. 1625–1663. DOI: 10.1103/RevModPhys.81.1625. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.1625>.
- [6] F. Schwabl. *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)*. Springer Berlin Heidelberg, 2008. DOI: 10.1007/978-3-540-85076-2. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-85076-2>.
- [7] Gabriele F. Giuliani und Giovanni Vignale. *Quantum theory of the electron liquid*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2005. URL: <https://cds.cern.ch/record/826125>.
- [8] A. S. Mishchenko u. a. “Comprehensive study of Frohlich polaron”. In: *arXiv e-prints*, cond-mat/9910025 (Okt. 1999), cond-mat/9910025. arXiv: cond-mat/9910025 [cond-mat.stat-mech].

- [9] T. Dornheim u. a. “Ab initio Path Integral Monte Carlo Results for the Dynamic Structure Factor of Correlated Electrons: From the Electron Liquid to Warm Dense Matter”. In: *Phys. Rev. Lett.* 121 (25 Dez. 2018), S. 255001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.255001. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.255001>.
- [10] Tobias Dornheim, Simon Groth und Michael Bonitz. “Ab initio results for the static structure factor of the warm dense electron gas”. In: *Contributions to Plasma Physics* 57.10 (Nov. 2017), S. 468–478. DOI: 10.1002/ctpp.201700096. URL: <https://doi.org/10.1002/ctpp.201700096>.
- [11] Massimo Boninsegni und David M. Ceperley. “Density fluctuations in liquid ^4He . Path integrals and maximum entropy”. In: *Journal of Low Temperature Physics* 104.5 (Sep. 1996), S. 339–357. ISSN: 1573-7357. DOI: 10.1007/BF00751861. URL: <https://doi.org/10.1007/BF00751861>.
- [12] O. Gunnarsson, M. W. Haverkort und G. Sangiovanni. “Analytical continuation of imaginary axis data using maximum entropy”. In: *Phys. Rev. B* 81 (15 Apr. 2010), S. 155107. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.155107. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.155107>.
- [13] Youssef Kora und Massimo Boninsegni. “Dynamic structure factor of superfluid ^4He from quantum Monte Carlo: Maximum entropy revisited”. In: *Phys. Rev. B*. 98.13, 134509 (Okt. 2018), S. 134509. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.134509. arXiv: 1808.08663 [cond-mat.stat-mech].
- [14] Leonora Bianchi u. a. “A survey on metaheuristics for stochastic combinatorial optimization”. In: *Natural Computing* 8.2 (Juni 2009), S. 239–287. ISSN: 1572-9796. DOI: 10.1007/s11047-008-9098-4. URL: <https://doi.org/10.1007/s11047-008-9098-4>.
- [15] V. Černý. “Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm”. In: *Journal of Optimization Theory and Applications* 45.1 (Jan. 1985), S. 41–51. ISSN: 1573-2878. DOI: 10.1007/BF00940812. URL: <https://doi.org/10.1007/BF00940812>.
- [16] Andrey Mishchenko. “Stochastic Optimization for Analytical Continuation: When a priori Knowledge is Missing”. In: *Autumn School on Correlated*

Electrons: From Models to Materials. (Jülich, Germany). Hrsg. von Eva Pavarini u. a. Verlag des Forschungszentrum Jülich, Sep. 2012.

- [17] David E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. 1st. Boston, MA, USA: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1989. ISBN: 0201157675.
- [18] G. Bertaina, D. E. Galli und E. Vitali. “Statistical and computational intelligence approach to analytic continuation in Quantum Monte Carlo”. In: *Advances in Physics: X* 2.2 (2017), S. 302–323. DOI: 10.1080/23746149.2017.1288585. eprint: <https://doi.org/10.1080/23746149.2017.1288585>. URL: <https://doi.org/10.1080/23746149.2017.1288585>.
- [19] S. Groth, T. Dornheim und J. Vorberger. “Ab initio path integral Monte Carlo approach to the static and dynamic density response of the uniform electron gas”. In: *Phys. Rev. B* 99 (23 Juni 2019), S. 235122. DOI: 10.1103/PhysRevB.99.235122. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.235122>.
- [20] Eran Rabani u. a. “The calculation of transport properties in quantum liquids using the maximum entropy numerical analytic continuation method: Application to liquid para-hydrogen”. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 99 (März 2002), S. 1129–33. DOI: 10.1073/pnas.261540698.