

## POGLAVJE IV: Klasični in kvantni Monte-Carlo

V statistični fiziki nas često zanimajo povprečne vrednosti opazljivk v ravnovesnem, termalnem stanju, pri dobro znani vrednosti temperature in ostalih termodinamskih potencialov. Ker pa nas bo zanimala makroskopska (termodinamska) limita, se takoj pojavijo težave, saj je sistematično povprečenje v visokodimenzionalnem faznem (klasično) oz. Hilbertovem (kvantno) prostoru za numerične računanije neizvedljivo.

V takšnih primerih se naravno zatečemo k metodam stohastičnega povprečenja, ki jih v fiziki imenujemo metode *Monte Carlo*. Osnovna ideja je zelo preprosta, izvira pa iz same statistične definicije verjetnosti. Recimo, da bi želeli izračunati povprečje opazljivke  $a(\underline{x})$  v visokodimenzionalnem faznem prostoru  $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$ ,  $N \gg 1$ , kjer poznamo verjetnostno porazdelitev  $w(\vec{x})$ ,  $d\mu(\vec{x}) = w(\vec{x})d^N\vec{x}$ . Če nam kdo pripravi algoritem – črno škatlo, ki pljuva točke iz faznega prostora  $\underline{x}_j$ ,  $j = 1, 2, \dots$ , porazdeljene z gostoto  $w(\underline{x})$ , potem je

$$\langle a \rangle = \int d^N \underline{x} w(\underline{x}) a(\underline{x}) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M a(\underline{x}_j). \quad (1)$$

Seveda je v praksi velikost vzorca  $M$  vedno končna. Pod predpostavko, da nam algoritem pljuva slučajno neodvisne izmerke pa lahko celo ocenimo statistično napako

$$\varepsilon_a \approx \frac{1}{\sqrt{M}} \sigma_a, \quad \sigma_a = \sqrt{\left( \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M a(\underline{x}_j)^2 \right) - \left( \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M a(\underline{x}_j) \right)^2}. \quad (2)$$

### 1 Metropolisov algoritem

V praksi, ko je  $N$  velik, je glavna težava kako praktično vzorčiti primerke  $\vec{x}_j$  iz porazdelitve  $w(\vec{x})$ . Če bi konstruirali vzorčenje po principu ‘poskusi in zavrzi’ bi v režimu velikih  $N$  tipično sprejeli le eksponentno majhen delež

poskusov. Uporabna ideja pa se porodi ob razmišljanju o konstrukciji markovske verige (oz. markovskega procesa), to je nekakšnega naključnega sprehoda po faznem prostoru), ki s pomočjo majnih korakov (t.i. ‘potez’), konstruira  $w(\vec{x})$  z deležem sprejetih potez, ki je tipično reda  $\sim 1$ , vendar za ceno dejstva, da so zaporedni poskusi precej slučajno odvisni (kar je posebno upoštevati ob ocenjevanju napake povprečenja).

Najpreprostejšo in najatraktivnejšo idejo te vrste najdemo pod imenom *Metropolisov algoritem*. Ideja algoritma je zelo preprosta, deluje tako v primerih, ko je fazni prostor  $\mathcal{X} \ni \vec{x}$  zvezen ali diskreten. V zveznem primeru moramo pač, da dobimo verjetnost iz gostote verjetnosti, pomnožiti z volumnom faznega prostora  $d\vec{x} = \prod_j dx_j$ . Naj bo torej  $w(\vec{x})$  neka znana porazdelitev (gostota verjetnosti), npr. Boltzmanova (a ne nujno), po kateri želimo vzorčiti.

Naj bo  $w(\vec{x} \rightarrow \vec{x}')$  prehodna verjetnost nekega markovskega procesa. Spodaj bomo pokazali, da je porazdelitev  $w(\vec{x})$  stacionarna porazdelitev markovskega procesa natanko tedaj, ko prehodna verjetnost uboga princip *detajlnega ravnovesja*:

$$w(\underline{x})w(\underline{x} \rightarrow \underline{x}') = w(\underline{x}')w(\underline{x}' \rightarrow \underline{x}). \quad (3)$$

Z besedami detajlno ravnovesje povemo takole: verjetnost, da smo v stanju  $\underline{x}$  in gremo v stanje  $\underline{x}'$  mora biti natanko enaka verjetnosti, da smo v stanju  $\underline{x}'$  in gremo v stanje  $\underline{x}$ . Sprehodi med stanjema  $\underline{x}$  in  $\underline{x}'$  morajo biti torej *reverzibilni*.

Stacionarna porazdelitev markovskega procesa  $w_\infty(\underline{x})$  mora ubogati pogoj

$$w_\infty(\underline{x}) = \sum_{\underline{x}'} w_\infty(\underline{x}')w(\underline{x}' \rightarrow \underline{x}), \quad (4)$$

t.j.  $w_\infty$  mora biti lastni vektor matrike  $P_{\underline{x}',\underline{x}} = w(\underline{x} \rightarrow \underline{x}')$  z lastno vrednostjo 1, kjer pri zveznih porazdelitvah vsoto pač nadomestimo z  $\int d\underline{x}'$ .

**Trditev:** Vsaka porazdelitev, ki uboga detajlno ravnovesje (3), mora očitno biti stacionarna, kar je posledica normiranosti pogojne verjetnosti:

$$\sum_{\underline{x}'} w(\underline{x} \rightarrow \underline{x}') = 1. \quad (5)$$

**Dokaz:** Seštejmo enačbo (3) po  $\underline{x}'$ , upoštevajmo (5) in dobimo (4).

Da bi bila zgornja trditev zares uporabna, t.j. da bi veljalo tudi obratno in bi vsaka stacionarna porazdelitev markovskega procesa tudi ubogala detajlno ravnovesje, moramo pokazati še enoličnost stacionarne porazdelitve

$w_\infty$ . V teoriji markovskih procesov rečejo, da je proces *ergodičen*. To je ekvivalentno izjavi, da je 1 *izolirana* lastna vrednost markovske matrike  $P_{\underline{x}', \underline{x}}$ . Zadosten pogoj za ergodičnost bi bila npr. v našem primeru stroga pozitivnost vseh prehodnih verjetnosti  $P_{\underline{x}', \underline{x}} > 0$  (Perron-Frobeniusov izrek), vendar je takšna zahteva po navadi prestroga in nepotrebna.

Recimo, da znamo iz vsakega stanja  $\underline{x}$  učinkovito generirati set stanj  $\underline{x}'$  v faznem prostoru v *okolici*  $\underline{x}$ , z nekimi znanimi verjetnostmi  $p(\underline{x} \rightarrow \underline{x}')$ . V praksi je npr. privzeta pogojna porazdelitev čisto kar enakomerna  $p(\underline{x} \rightarrow \underline{x}') = 1/N(\underline{x})$ , kjer je  $N(\underline{x})$  število vseh stanj  $\underline{x}'$  dosegljivih iz  $\underline{x}$ . Če potezo  $\underline{x} \rightarrow \underline{x}'$  sprejmemo z verjetnostjo

$$A(\underline{x} \rightarrow \underline{x}') = \min \left\{ 1, \frac{w(\underline{x}')p(\underline{x}' \rightarrow \underline{x})}{w(\underline{x})p(\underline{x} \rightarrow \underline{x}')} \right\}, \quad (6)$$

v obratnem primeru pa jo zavrnamo, t.j.  $\underline{x} \rightarrow \underline{x}$ .

Metropolisov markovski proces je tedaj podan s prehodno matriko pogojnih verjetnosti

$$w(\underline{x} \rightarrow \underline{x}') = A(\underline{x} \rightarrow \underline{x}')p(\underline{x} \rightarrow \underline{x}'), \quad \text{if } \underline{x} \neq \underline{x}', \quad (7)$$

$$w(\underline{x} \rightarrow \underline{x}) = 1 - \sum_{\underline{x}' \neq \underline{x}} w(\underline{x} \rightarrow \underline{x}'). \quad (8)$$

Po konstrukciji takšen markovski proces uboga detajlno ravnovesje (3) in, ob primeru pametne izbire a-priornih potez  $p(\underline{x}' \rightarrow \underline{x}')$ , ne trpi za prevelikim zavračanjem. Po zadosti dolgem času simulacije torej lahko računamo termodinamična povprečja fizikalnih količin  $a(\underline{x}_j)$  kar kot povprečja po zgoraj opisanem markovskem sprehodu.

## 1.1 Isingov model

Oglejmo si kako naj bi Metropolisov algoritem deloval pri računanju ravnovesne termodinamike za Isingov model klasičnih spinov  $\sigma_r \in \{+1, -1\}$ ,  $r \in L \subseteq \mathbb{Z}^d$ . Tu je prostor vseh stanj diskreten  $\{-1, 1\}^L$ , čeravno eksponentno velik  $2^{|L|}$ . Energijo stanja Isingovega modela v magnetnem polju  $h$  zapišemo kot

$$E(\sigma) = -J \sum_{\langle r, r' \rangle} \sigma_r \sigma_{r'} - h \sum_r \sigma_r. \quad (9)$$

Porazdelitev, po kateri želimo vzorčiti, pa je kar Boltzmanova

$$w(\sigma) = Z^{-1} \exp(-\beta E(\sigma)) \quad (10)$$

Simbol  $\langle r, r' \rangle$  označuje, da sta mesti  $r, r'$  sosednji na mreži  $L$ . Ker je energija vsota *lokalnih* členov, je tudi sprememba energije pri lokalni potezi (npr. flip enega samega spina) preprosto izračunljiva lokalno. Metropolisov postopek je tedaj posebej preprost:

**Algoritem** (ponavljaj in povpreči fizikalne količine izračunane v stanju  $\underline{\sigma}$ ):

1. Izberi naključno mesto na mreži  $r$ .
2. Izračunaj razliko v energiji med prvotno konfiguracijo in tisto v kateri je spin na mestu  $r$  obrnjen:

$$\Delta E_r = 2\sigma_r \left( J \sum_{r'}^{\langle r, r' \rangle} \sigma_{r'} + h \right). \quad (11)$$

3. Če  $\Delta E_r < 0$  po tezo sprejmi in ažuriraj  $\sigma_r \rightarrow -\sigma_r$ . Sicer, izžreбай naključno število  $\xi \in [0, 1]$  po enakomerni porazdelitvi in, če je

$$\xi < \exp(-\beta \Delta E_r), \quad (12)$$

potezo sprejmi in ažuriraj  $\sigma_r \rightarrow -\sigma_r$ . Sicer ne stori ničesar.

4. Ažuriraj povprečja fizikalnih količin.
5. Vrni se na korak 1.

Na kvadratni mreži (v dveh dimenzijah  $d = 2$ ) ima vsota v izrazu (11) samo 4 člene. Če je ažuriranje fizikalnih količin bolj zamudno, je priporočljivo napraviti večje število primitivnih Metropolisovih korakov na vsako ažuriranje fizike.

Isingov model je en najprejprostejših netrivialnih fizikalnih modelov, ki ima fazni prehod (drugega reda, t.j. zvezni prehod kjer ni latentne toplote). Obstaja celo točna rešitev modela, ki jo je prvi našel Onsager (1944), kasneje pa je Baxter razvil celotno teorijo točno rešljivih modelov v dveh dimenzijah, ki je intimno povezana s kvantno fiziko modelov v eni dimenziji (npr. s Heisenbergovo verigo spinov  $1/2$ ).

Izraz za kritično (inverzno) temperaturo se glasi

$$\beta_c = \frac{\log(1 + \sqrt{2})}{2J}, \quad (13)$$

V odsotnosti zunanega magnetnega polja  $h = 0$ , se, pod kritično temperaturo  $\beta > \beta_c$  sistem spontano uredi, nad kritično temperaturo pa je

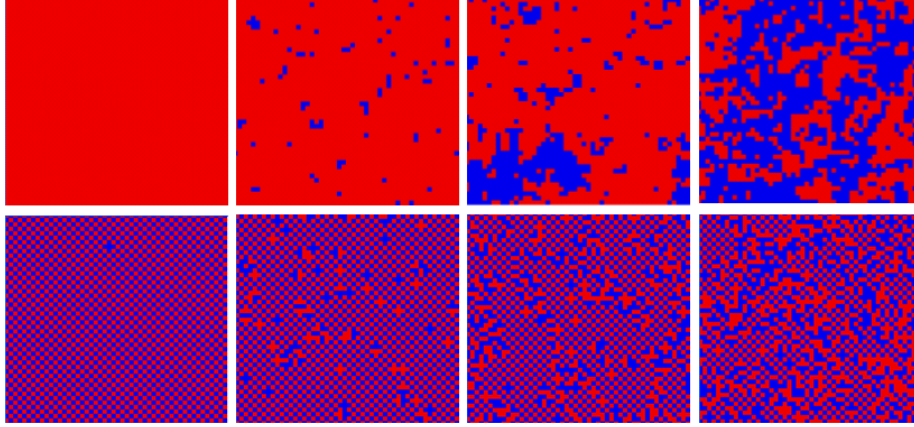


Figure 1: Tipične konfiguracije 2D Isingovega modela za  $T = 1/\beta = J, 2J, T_c, 3J$  (od leve proti desni), ter za feromagnetni  $J > 0$  (zgoraj) ali anti-feromagnetni  $J < 0$  (spodaj) primer.

povprečna magnetizacija  $M = |L|^{-1} \langle \sum_r \sigma_r \rangle$  enaka nič. Onsager je celo dobil ekspliciten izraz za spontano magnetizacijo

$$M(\beta) = \left( 1 - \sinh^{-4} \left\{ \log(1 + \sqrt{2}) \frac{\beta}{\beta_c} \right\} \right)^{1/8}. \quad (14)$$

Nekatere fizikalne količine, kot npr. magnetna susceptibilnost in specifična toplota se izražajo kar preko flukcuacij

$$\chi = \beta \left\{ \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right\}, \quad C_V = \beta^2 \left\{ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right\}, \quad (15)$$

ki se dajo udobno simulirati z Metropolisom.

## 1.2 Heisenbergov model

Popolnoma analogno lahko uporabljamo Metropolisov algoritem tudi v primerih, ko je fazen prostor zvezen. Za primer si nekoliko podrobneje oglejmo Heisenbergovo verigo klasičnih spinov. Energija konfiguracije  $\vec{\sigma} = (\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_N)$ , kjer so vektorji (vrtilne količine)  $\vec{\sigma}_j$  normirani, npr  $|\vec{\sigma}_j| = 1$ , je

$$E(\vec{\sigma}) = - \sum_{j=1}^N (J \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} - h \sigma_j^z). \quad (16)$$

Primerna privzeta poteza je tedaj kar naključna rotacija naključno izbranega spina, oz. nova izbira naključno orientiranega spina  $\vec{\sigma}'_j$ . **Vaja:** Razmisli kako parametrizirati, oz. žrebat naključne rotacije, oz. naključno orientirane vektorje (Problem je še bolj zanimiv v  $n$ -razsežnem vektorskem prostoru).

Sprememba energije pri takšni potezi se spet izraža lokalno

$$\Delta E_j = \Delta \vec{\sigma}_j \cdot (J\vec{\sigma}_{j+1} + J\vec{\sigma}_{j-1} + h(0, 0, 1)). \quad (17)$$

### 1.2.1 Metropolis z vezjo

Včasih je npr. potrebno simulirati vzorčenje po delu faznega prostora, ki uboga kako fizikalno vez. V Heisenbergovem modelu je npr. pri študiju spinskega transporta zanimivo gledati povprečja po sektorju faznega prostora stanj ki imajo magnetizacijo natanko enako nič,

$$\vec{M} := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \vec{\sigma}_j = 0. \quad (18)$$

Želimo torej vzorčiti po porazdelitvi, ki je kombinacija kanonične in ‘mikro’-kanonične

$$w(\vec{\sigma}) = Z^{-1} \delta^3(\vec{M}(\vec{\sigma})) \exp(-\beta E(\vec{\sigma})). \quad (19)$$

Privzete poteze morajo biti sedaj takšne, da ohranjajo vez. Npr. vzamemo par sosednjih spinov in ju naključno zavrtimo tako da ohranjamo  $\vec{\sigma}_j + \vec{\sigma}_{j+1}$ . **Vaja:** Izdelaj detajle algoritma.

### 1.3 Simulirano ohlajanje

Metropolisov algoritem lahko s pridom uporabljamo tudi za stohastično minimizacijo funkcij v visokodimenzionalnih prostorih. Če žemimo npr. poiskati točko  $\vec{x} \in \mathcal{X}$ , ki minimizira neko funkcijo ali funkcional  $E(\vec{x})$  (t.i. ‘cost function’), potem nam Metropolisov algoritem sugerira sledeč postopek:

**“Simulated annealing”.** Izberi začetno inverzno temperaturo  $\beta_0$ , npr.  $\beta_0 = 0$ . Potem zaženi Metropolisov algoritem. Na vsake toliko Metropolisovih potez pa inverzno temperaturo nekoliko zmanjšamo, t.j.  $\beta$  povečujemo z neko hitrostjo  $\beta(t) = vt$ , kjer je  $t$  čas simulacije (sorazmeren s številom opravljenih Metropolisovih potez). Asimptotsko se temperatura približuje ničli, t.j.  $\beta \rightarrow \infty$ , kar pomeni da bi morali tedaj najti sistem v minimumu funkcije (funkcionala)  $E(\vec{x})$ . Če običimo v kakem lokalnem minimumu,

lahko prehodno spet dvignemo temperaturo (zmanjšamo  $\beta$ ) in nadaljujemo z ohlajanjem.

Postopek dokazljivo deluje, t.j. poišče globalni minimum, če je hitrost ohlajanja  $v$  zadosti majhna, vendar pa so zahtevani časi simulacije tedaj eksponentno dolgi.

## 1.4 Naloga

1. Pokaži fazni prehod v Isingovem modelu na kvadratni mreži, oceni kritično temperaturo in nariši diagrame  $\chi(\beta)$  in  $C_V(\beta)$ . Kako se obnaša simulacija v okolici faznega prehoda?
2. \* Simuliraj klasično Heisenbergovo verigo s fiksirano ničelno magnetizacijo. Razišči npr. pojemanje spinskih korelacij

$$C(r) = \langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle \quad (20)$$

v odvisnosti od temperature.

## 2 Kvantni Monte Carlo

Oboroženi z Metropolisovim postopkom lahko takoj napademo tudi probleme iz kvantne fizike.

Osnovna, količina, ki jo želimo računati, je kvantna particijska funkcija

$$Z(\beta) = \text{tr} \exp(-\beta H) \quad (21)$$

oziroma ravnovesna vrednost fizikalne opazljivke

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr} A \exp(-\beta H)}{\text{tr} \exp(-\beta H)}. \quad (22)$$

Z uporabo prikladnega kompletnega sistema stanj  $|\underline{n}\rangle$ ,  $\sum_{\underline{n}} |\underline{n}\rangle \langle \underline{n}| = \mathbb{1}$  (kjer  $\underline{n}$  označuje zbirko kvantnih števil, npr. zasedbena števila) ter razcepom eksponentne funkcije  $\exp(-\beta H) = [\exp(-\beta H/M)]^M$  lahko sled takoj prepisemo v  $M$ -kratno vsoto

$$Z(\beta) = \sum_{\underline{n}_1, \underline{n}_2, \dots, \underline{n}_M} \langle \underline{n}_1 | e^{-\frac{\beta}{M} H} | \underline{n}_2 \rangle \langle \underline{n}_2 | e^{-\frac{\beta}{M} H} | \underline{n}_3 \rangle \cdots \langle \underline{n}_M | e^{-\frac{\beta}{M} H} | \underline{n}_1 \rangle, \quad (23)$$

pri računanju opazljivke  $\langle A \rangle$ , ki naj bo diagonalna v bazi  $|\underline{n}\rangle$ , pa zgornji sumand pač pomnožimo z  $a_{\underline{n}_1} := \langle \underline{n}_1 | A | \underline{n}_1 \rangle$ . Za veliko število  $M$  t.i. časovnih

rezin (če si termalni gostotni operator predstavljamo kot propagator v imaginarnem času) velja

$$P_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} := \langle \underline{n}_1 | e^{-\frac{\beta}{M} H} | \underline{n}_2 \rangle = \delta_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} - \frac{\beta}{M} H_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} + \mathcal{O}(M^{-2}). \quad (24)$$

Za velike  $M$  torej lahko upoštevamo le procese v prvem redu  $H$  in tedaj običajno lahko najdemo takšno bazo  $\underline{n}$ , da je matrika  $P_{\underline{n}_j, \underline{n}_{j+1}}$  nenegativna

$$P_{\underline{n}_j, \underline{n}_{j+1}} \geq 0. \quad (25)$$

Tedaj lahko ravnovesno vrednost kvantne opazljivke razumemo kot verjetnostno povprečje preko ‘klasične’ verjetnostne porazdelitve nad  $M$ -terico konfiguracij  $(\underline{n}_1, \underline{n}_2, \dots, \underline{n}_M)$

$$\langle A \rangle = \sum_{(\underline{n}_1, \underline{n}_2, \dots, \underline{n}_M)} a_{\underline{n}_1} P_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} P_{\underline{n}_2, \underline{n}_3} \cdots P_{\underline{n}_M, \underline{n}_1} \quad (26)$$

Za vzorčenje porazdelitve

$$P_{(\underline{n}_1, \underline{n}_2, \dots, \underline{n}_M)} = Z^{-1} P_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} P_{\underline{n}_2, \underline{n}_3} \cdots P_{\underline{n}_M, \underline{n}_1} \geq 0, \quad (27)$$

pa tipično lahko učinkovito implementiramo Metropolisov postopek. Npr. za privzete poteze lahko vzamemo kar *lokalno*, simetrično spremembo kvantnih števil, npr. naključno izberemo  $j \in \{1, \dots, M\}$  ter izžrebamo potezo  $\underline{n}_j \rightarrow \underline{n}'_j$ , ki jo sprejmemo z verjetnostjo

$$\min \left\{ 1, \frac{P_{\underline{n}_{j-1}, \underline{n}'_j} P_{\underline{n}'_j, \underline{n}_{j+1}}}{P_{\underline{n}_{j-1}, \underline{n}_j} P_{\underline{n}_j, \underline{n}_{j+1}}} \right\}. \quad (28)$$

Bolj konkretno opišimo idejo implementirano na Hamiltonki za nerelativističen sistem z  $N$  prostostnimi stopnjami, ki jo lahko razcepimo na vsoto dveh členov

$$H = T + V, \quad (29)$$

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \partial_j^2, \quad \partial_j \equiv \frac{\partial_j}{\partial q_j}, \quad (30)$$

$$V = V(\underline{q}). \quad (31)$$

Tedaj vzemimo za kompletno bazo Hilbertovega prostora, kar zvezno bazo pozicijskih stanj  $|\underline{q}\rangle, \underline{q} \in \mathbb{R}^N$

$$\int d\underline{q} |\underline{q}\rangle \langle \underline{q}| = \mathbb{1} \quad (32)$$



v kateri je potencialni operator diagonalen

$$\langle \underline{q} | V | \underline{q}' \rangle = \delta(\underline{q} - \underline{q}') V(\underline{q}), \quad (33)$$

torej velja tudi za njegovo eksponentno funkcijo

$$\langle \underline{q} | \exp(-\beta V) | \underline{q}' \rangle = \delta(\underline{q} - \underline{q}') \exp(-\beta V(\underline{q})), \quad (34)$$

Eksponentna funkcija operatorja kinetične energije

$$G_0(\underline{q}, \underline{q}'; \beta) = \langle \underline{q} | \exp(-\beta T) | \underline{q}' \rangle \quad (35)$$

pa je – po definiciji – rešitev Schrödingerjeve enačbe za sistem prostih delcev (v imaginarnem času  $t/\hbar = -i\beta$ )<sup>1</sup>

$$\frac{\partial}{\partial \beta} G_0(\underline{q}, \underline{q}'; \beta) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial q_j^2} G_0(\underline{q}, \underline{q}'; \beta) \quad (36)$$

z 'začetnim pogojem',  $G_0(\underline{q}, \underline{q}'; 0) = \delta^{(N)}(\underline{q} - \underline{q}')$ . Oziroma, to je dobro znana Greenova funkcija  $N$ -dimenzionalne difuzijske enačbe:

$$G_0(\underline{q}, \underline{q}'; \beta) = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{N/2} \exp\left( -\frac{m}{2\hbar^2} \frac{(\underline{q} - \underline{q}')^2}{\beta} \right) \quad (37)$$

Ključno je zdaj spoznanje, da so vsi pozicijski matrični elementi operatorjev  $T$  in  $V$  nenegativni. Ker pa operatorja  $T$  in  $V$  v splošnem ne komutirata, se poslužimo Trotterjeve formule

$$\exp(-\beta(T + V)) \approx [\exp(-\beta V/M) \exp(-\beta T/M)]^M, \quad (38)$$

da zapišemo

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \int \prod_{j=1}^M d\underline{q}_j e^{-\frac{\beta}{M} V(\underline{q}_1)} G_0(\underline{q}_1, \underline{q}_2; \frac{\beta}{M}) e^{-\frac{\beta}{M} V(\underline{q}_2)} G_0(\underline{q}_2, \underline{q}_3; \frac{\beta}{M}) \\ &\quad \dots e^{-\frac{\beta}{M} V(\underline{q}_M)} G_0(\underline{q}_M, \underline{q}_1; \frac{\beta}{M}) = \end{aligned} \quad (39)$$

$$= \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{MN/2} \int \prod_{j=1}^M d\underline{q}_j \exp\left( -E(\underline{q}_1, \underline{q}_2, \dots, \underline{q}_M) \right) \quad (40)$$

<sup>1</sup>Tu zaradi nazornosti spet eksplicitno pišemo Planckovo konstanto  $\hbar$ , čeprav jo bomo kasneje spet opuščali, oz. postavili na 1.

kjer je

$$E(\underline{q}_1, \underline{q}_2, \dots, \underline{q}_M) := \sum_{j=1}^M \left( \frac{mM}{2\hbar^2\beta} (\underline{q}_{j+1} - \underline{q}_j)^2 + \frac{\beta}{M} V(\underline{q}_j) \right). \quad (41)$$

Zadnji izraz (40) je, v limiti  $M \rightarrow \infty$  (in bolj običajno v realnem času  $\beta = it/\hbar$ ), seveda dobro znan kot Feynmanov pot-integral (path-integral).

Prav tako pa izraz (40) ni nič drugega kot *klasična particijska funkcija* zgibanega periodičnega polimera, kjer  $\underline{q}_j$  predstavljajo sosednje med-atomske razdalje,  $V(\underline{q}_j)$  so energije teh med-atomskih vezi  $\frac{mM}{2\hbar^2\beta} (\underline{q} - \underline{q}')^2$  pa predstavljajo prožnostno energijo dveh sosednjih vezi zaradi zganjanja.

Kvantni Monte Carlo algoritem za sistem razločljivih delcev torej ni nič drugega kot klasični Metropolisov algoritem za termodinamiko polimera v mnogo-dimenzionalnem prostoru. Apriorna poteza je npr. kar izbira naključne časovne rezine  $j$ , ter žrebanje novega pozicijskega vektorja  $\underline{q}'_j$ , ki naj bo v bližnji okolici starega (sicer bi potezo z veliko verjetnostjo zavračali). Vzemimo npr. parameter  $\epsilon$  in

$$\underline{q}'_j = \underline{q}_j + \epsilon \underline{\xi} \quad (42)$$

kjer je  $\underline{\xi}$  naključen  $N$ -dimenzionalni enotski vektor.<sup>2</sup> Žrebanje takšnih privzetih potez je očitno simetrično  $p(\underline{q} \rightarrow \underline{q}') = p(\underline{q}' \rightarrow \underline{q})$ , tako da lahko verjetnost za sprejem poteze ocenimo po formuli (28), kjer je zdaj

$$P_{\underline{q}_1, \underline{q}_2} \propto \exp \left( -\frac{mM}{2\hbar^2\beta} (\underline{q}_2 - \underline{q}_1)^2 - \frac{\beta}{M} V(\underline{q}_1) \right). \quad (43)$$

Parameter  $\epsilon$  (domet privzete poteze) lahko določimo ‘on-the-fly’ tako, da delež sprejetih potez ni niti blizu 1 niti ni zelo majhen (v obeh skrajnih primerih Metropolisov algoritem postane neučinkovit).

Opazljivke, ki so diagonalne v  $|\underline{q}\rangle$  lahko računamo neposredno z Metropolisovim povprečenjem, kot je opisano zgoraj. Nekatere druge opazljivke dobimo iz znanih termodinamskih identitet. Npr. povprečna energija na delec (oz. prostostno stopnjo) je  $\langle H \rangle / N = -(NZ)^{-1} \partial_\beta Z(\beta)$  ali

$$\frac{\langle H \rangle}{N} = \left\langle \frac{M}{2\beta} - \frac{mM}{2\hbar^2\beta^2 N} \sum_{j=1}^M (\underline{q}_{j+1} - \underline{q}_j)^2 + \frac{1}{MN} \sum_{j=1}^M V(\underline{q}_j) \right\rangle. \quad (44)$$

<sup>2</sup>Ali pa vzamemo komponente vektorja  $\underline{\xi}$ ,  $\xi_n$  kot naključna normalno – Gaussovo porazdeljena števila s povprečjem 0 in variacijo  $1/N$ .

## 2.1 Sistem nerazločljivih delcev in problem s fermionskim predznakom

Za sistem nerazločljivih delcev, je mnogodelčna valovna funkcija simetrična ali antisimetrična funkcija koordinat  $\underline{q}$ . Vzemimo zaradi preprostosti, da imamo  $N$  delcev v eni dimenziji, tako da permutacijski operator  $P$  deluje kot

$$P|q_1, q_2, \dots, q_N\rangle = |q_{P_1}, q_{P_2}, \dots, q_{P_N}\rangle. \quad (45)$$

Termalni gostotni operator moramo tedaj simetrizirati (za bosone) oz antisimetrizirati (za fermione) kot

$$\rho_{\text{bose}}(\underline{q}, \underline{q}'; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \rho(P\underline{q}, \underline{q}'; \beta), \quad (46)$$

$$\rho_{\text{fermi}}(\underline{q}, \underline{q}'; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \rho(P\underline{q}, \underline{q}'; \beta). \quad (47)$$

V kvantni Monte Carlo simulaciji z  $M$  časovnimi rezinami to pomeni, da moramo, za fiksno permutacijo  $P$ , zahtevati robni pogoj

$$\underline{q}_{M+1} \equiv P\underline{q}_1 \quad (48)$$

zatem pa še sešteti po  $P$ , oziroma vzorčiti po naključnih permutacijah. V bozonskem primeru je to povsem izvedljivo, saj v vseh členih vzorčimo s pozitivnimi verjetnostmi. Poleg običajnih potez v konfiguracijskem prostoru, moramo vpeljati še poteze, ki npr. napravijo transpozicijo sosednjih delcev v permutaciji  $P$  (48).

V fermionskem primeru pa se pri lihih permutacijah pojavijo težave: tam bi morali namreč vzorčiti z negativno verjetnostjo, kar pa ne gre. Če pa pregrupiramo čene z lihimi in sodimi permutacijami skupaj in simuliramo vsake posebej, ugotovimo, da gre za primerljiva povprečja z nasprotnim predznakom. Z drugimi besedami, ugotovimo, da gre tipično za eksponentno (v  $N$ ) majhno razmerje med signalom in statističnim šumom, kar pomeni često nepremostljive težave za uspešno uporabo metod kvantnega Monte-Carla v nekaterih fermionskih sistemih.

## 2.2 Spinske verige

Posebej zanimive in uspešne so kvantne Monte Carlo metode za spinske verige oz. kvantne spinske sisteme na diskretnih mrežah. Zaradi kompleksnosti področja pa si oglejmo samo en, naj-enostavnejši primer. Vzemimo

spet Heisenbergovo verigo  $N$  spinov  $1/2$  s periodičnimi robnimi pogoji in razcepimo Hamiltonko spet v like in sode člene:

$$H = A + B, \quad (49)$$

$$A = - \sum_{k=1}^{n/2} \vec{\sigma}_{2k-1} \cdot \vec{\sigma}_{2k}, \quad (50)$$

$$B = - \sum_{k=1}^{n/2} \vec{\sigma}_{2k} \cdot \vec{\sigma}_{2k+1}. \quad (51)$$

Zaradi tehničnih razlogov, ki bodo postali jasni kasneje, pa smo tokrat izbrali feromagnetno interakcijo, ki favorizira paralelno usmerjene sosednje spine. Za kompletno bazo si zdaj izberimo kar računsko bazo  $|\underline{b}\rangle$  lastnih stanj operatorjev  $\sigma_j^z$ . Spet, z uporabo Trotter-jeve formule in vrinkom  $M$  kompletnih sistemov  $\sum_{b_j} |b_j\rangle\langle b_j| = \mathbb{1}$ , dobimo

$$Z(\beta) \approx \sum_{(b_1, \dots, b_M)} \langle b_1 | P | b_2 \rangle \langle b_2 | Q | b_3 \rangle \cdots \langle b_{M-1} | P | b_M \rangle \langle b_M | Q | b_1 \rangle. \quad (52)$$

kjer sta  $P$  in  $Q$  ustrezna produkta lokalnih termalnih gostotnih matrik

$$\langle \underline{b} | P | \underline{b}' \rangle = \prod_{k=1}^{n/2} U^{(2)}\left(\frac{\beta}{M}\right)_{(b_{2k-1}, b_{2k}), (b'_{2k-1}, b'_{2k})}, \quad (53)$$

$$\langle \underline{b} | Q | \underline{b}' \rangle = \prod_{k=1}^{n/2} U^{(2)}\left(\frac{\beta}{M}\right)_{(b_{2k}, b_{2k+1}), (b'_{2k}, b'_{2k+1})}. \quad (54)$$

2-delčni propagator (v imaginarnem času)  $U^{(2)}$  pa smo vpeljali v Poglavju II, in ima v feromagnetnem primeru same pozitivne elemente. Vsoto (52) lahko razumemo kot particijsko vsoto *klasičnega spinskega modela*  $n \times M$  Isingovih spinov  $b_{k,j} \in \{0, 1\}$  z vezjo, ki zahteva, da je skupno število spinskih ekscitacij na vseh časovnih slojih konstantno (kar je posledica dejstva, da  $H$  ohranja število spinskih ekscitacij  $M^z = \sum_k \sigma_k^z$ ).

**Vaja:** Premislimo, kako bi implementirali Metropolisov algoritem za ta primer.

V diskretnih kvantnih sistemih lahko celo izvedemo limito  $M \rightarrow \infty$  in dobimo ekzaktne Kvantne Monte Carlo sheme v zveznem imaginarnem času, t.i. cluster Monte Carlo oz. loop Monte Carlo algoritme. Vendar je to 'beyond-the-scope' tega kurza..

### 2.3 Naloga

1. Obravnavaj termalni problem kvantnega enodimenzionalnega harmonskega oscilatorja  $m = 1$ ,  $V(q) = \frac{1}{2}q^2$  z metodo Monte Carlo. Poišči povprečno celotno/kinetično/potencialno energijo oscilatorja v odvisnosti od inverzne temperature. Preveri, da dobiš prave limitne vrednosti  $\beta \rightarrow \infty$ .
2. \* Ko si razvil delujoč računalniški algoritem za pot-integralni kvantni Monte Carlo (za nalogo zgoraj), ga uprabi še na primeru anharmonskega oscilatorja  $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \lambda q^4$ , npr. za  $\lambda = 1$ . Rezultate lahko primerjaš z rezultati dobljenimi iz točnega energijskega spektra iz prvega poglavja, npr.  $\langle E \rangle = \sum_n E_n e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n}$ .
3. \*\* Napravi kvantni Monte Carlo program za simulacijo Heisenbergove spinske verige. Izračunaj npr. povprečno energijo v odvisnosti od temperature.

### References

- [1] W. G. Hoover, "Computational Statistical Mechanics", Elsevier, Amsterdam (1991).
- [2] M. Troyer, "Computational Quantum Physics", Lecture notes, ETH Zurich.