

Metody Monte Carlo w fizyce

Jakub Józefiak

Kwantowa metoda wariacyjna (VQMC)

1 Opis ćwiczenia

Celem zajęć jest rozwiązanie problemu kwantowego polegającego na wyznaczeniu stanu podstawowego oraz stanu wzbudzonego atomu wodoru. Rozważania prowadzone są we współrzędnych sferycznych, w których jednoelektronowy hamiltonian, po odseparowaniu zależności kątowej, przyjmuje postać

$$H = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{1}{r} \quad (1)$$

W metodzie wariacyjnej Monte Carlo (QVMC) korzystamy z zależności na wartość oczekiwaną energii:

$$\langle \epsilon \rangle = \int_0^\infty p(r) \epsilon_{\text{loc}}(r) dr \quad (2)$$

gdzie:

$$p(r) = \frac{r^2 |\Psi_T(r)|^2}{\int_0^\infty r^2 |\Psi_T(r)|^2 dr} \quad (3)$$

to unormowana funkcja gęstości prawdopodobieństwa, skonstruowana z funkcji próbnej $\Psi_T(r)$, a:

$$\epsilon_{\text{loc}}(r) = \frac{H\Psi_T(r)}{\Psi_T(r)} \quad (4)$$

to tzw. energia lokalna.

1.1 Funkcja próbna

Interesują nas dwa rozwiązania o najniższej energii przy zerowym momencie pędu ($l = m = 0$), których postaci analityczne są znane:

$$\Psi_{100}^{\text{exact}}(r) = 2e^{-r} \quad (5)$$

$$\Psi_{200}^{\text{exact}}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} (2-r)e^{-r/2} \quad (6)$$

Funkcję próbną definiujemy jako:

$$\Psi_T(r) = (1+cr)e^{-ar} \quad (7)$$

Przy odpowiednich wartościach parametrów a i c funkcja ta odtwarza dokładne rozwiązania:

$$a = 1, \quad c = 0, \quad E_{100} = -\frac{1}{2} \quad (8)$$

$$a = \frac{1}{2}, \quad c = -\frac{1}{2}, \quad E_{200} = -\frac{1}{8} \quad (9)$$

1.2 Energia lokalna

Podstawiając funkcję próbną do operatora hamiltonianu otrzymujemy wyrażenie na energię lokalną:

$$\epsilon_{\text{loc}}(r) = \frac{-a^2 cr^2 + (-a^2 + 4ac - 2c)r + 2a - 2c - 2}{2cr^2 + 2r} \quad (10)$$

1.3 Całkowanie i algorytm Metropolis'a

W metodzie Monte Carlo wartość całki (np. energii czy drugiego momentu) dla ustalonych parametrów a i c szacujemy za pomocą próbkowania:

$$\langle \varepsilon_m(a, c) \rangle \approx \varepsilon_m(a, c) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_{\text{loc}}^{(m)}(r_i; a, c), \quad m = 1, 2 \quad (11)$$

Położenia r_i generujemy przy pomocy algorytmu Metropolis'a. Nowe proponowane położenie wyznaczamy jako:

$$r_{\text{new}} = r_i + \Delta r \cdot (2U_1 - 1), \quad U_1 \sim \mathcal{U}(0, 1) \quad (12)$$

Obliczamy prawdopodobieństwo akceptacji:

$$p_{\text{acc}} = \min \left\{ \frac{p(r_{\text{new}}; a, c)}{p(r_i; a, c)}, 1 \right\} \quad (13)$$

i stosujemy kryterium akceptacji:

$$r_{i+1} = \begin{cases} r_i & \text{jeśli } r_{\text{new}} < 0 \\ r_{\text{new}} & \text{jeśli } U_2 < p_{\text{acc}}, \quad U_2 \sim \mathcal{U}(0, 1) \\ r_i & \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$$

1.4 Wariancja jako miara dopasowania

Z mechaniki kwantowej wiadomo, że dla funkcji własnej operatora hamiltonianu:

$$H\Psi_n = \varepsilon_n \Psi_n \quad (14)$$

co implikuje, że energia lokalna:

$$\varepsilon_{\text{loc}}(r) = \frac{H\Psi_n(r)}{\Psi_n(r)} = \varepsilon_n \quad (15)$$

jest niezależna od położenia. W takim przypadku energia całkowita dana jest jako:

$$\varepsilon = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_{\text{loc}}(r_i) = \varepsilon_n \quad (16)$$

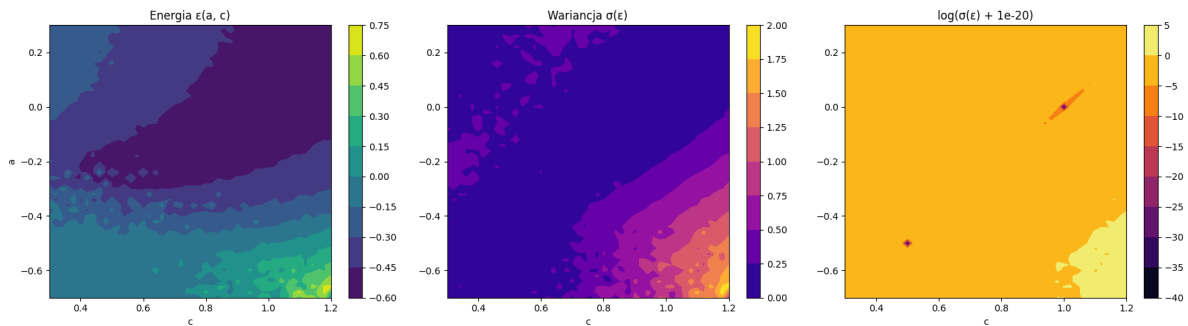
a wariancja:

$$\text{var}\{\varepsilon\} = \int_0^\infty p(r) [\varepsilon_{\text{loc}}(r) - \varepsilon_n]^2 dr = \langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2 = 0 \quad (17)$$

Wynika stąd, że minimalizacja wariancji energii może być wykorzystana jako kryterium dopasowania funkcji próbnej do rzeczywistego stanu własnego.

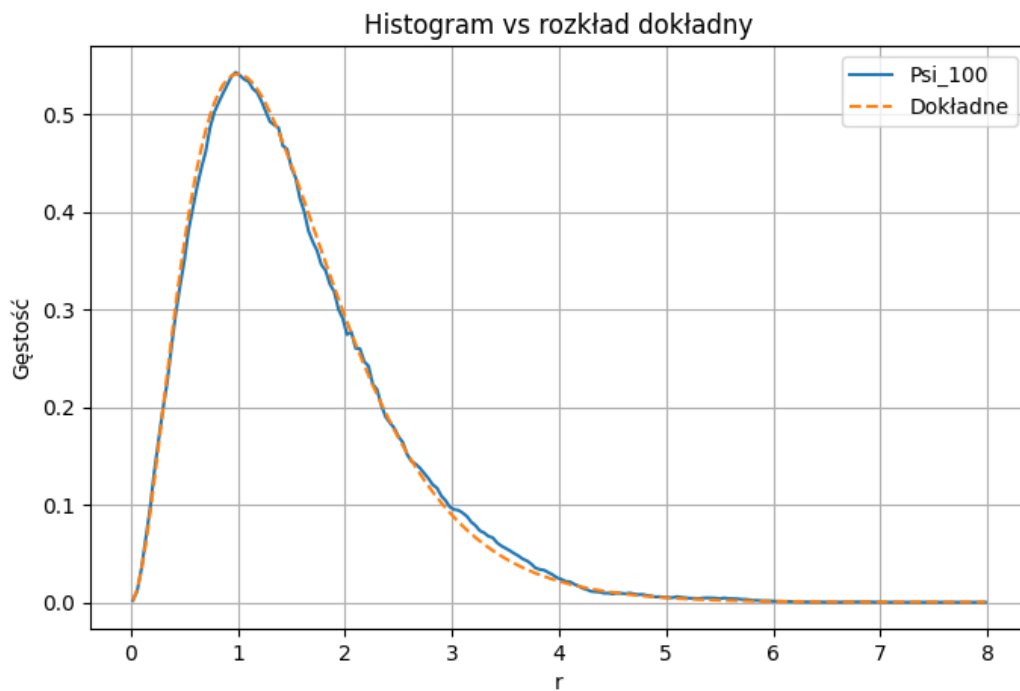
2 Wyniki ćwiczenia

Ćwiczenie przeprowadzono dla $N = 10^6 + 1000$, zaczynając poszukiwania od wartości $r=1$ oraz **eliminując** pierwsze 1000 kroków w celu osiągnięcia układu częściowo stabilnego. Na rysunku 1 przedstawiono rozkład energii w funkcji parametrów a i c ; wariancję tego rozkładu w funkcji liniowej i logarymicznej.



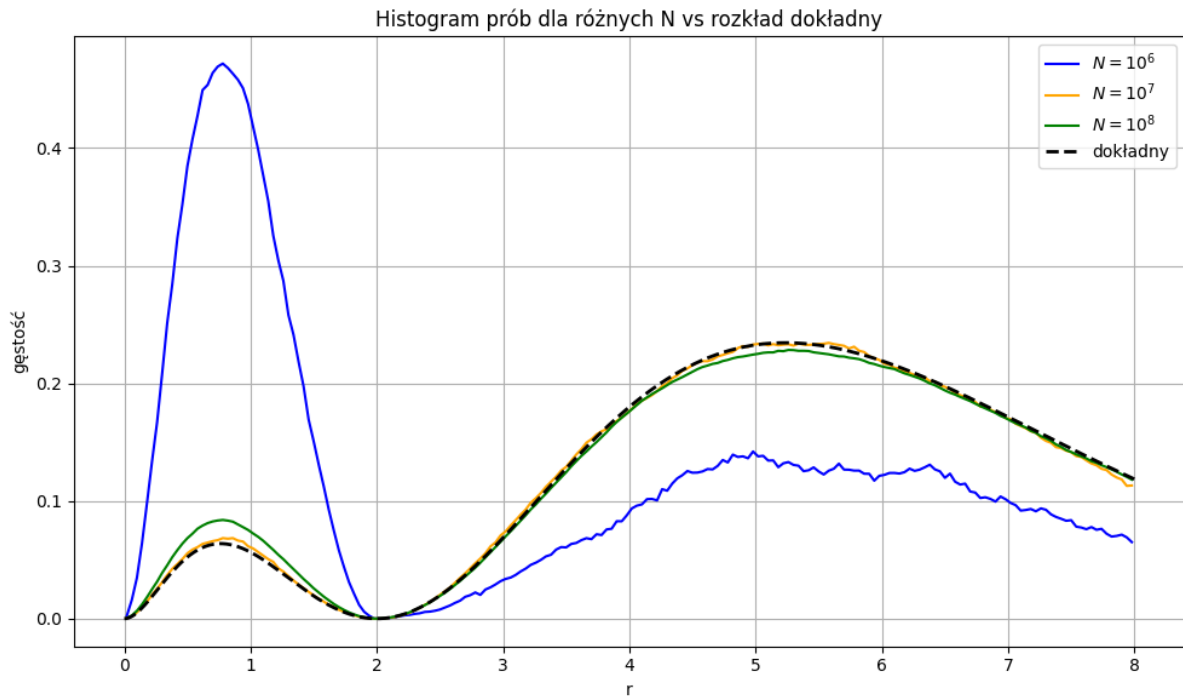
Rysunek 1: Rozkłady energii oraz jej wariancji

Na rysunku 2 przedstawiono porównanie funkcji ψ_{100} z histogramem uzyskanym za pomocą algorytmu Metropolis dla $N=10^6$.



Rysunek 2: Porównanie wyników dla ψ_{100}

Na rysunku 3 przedstawiono porównanie funkcji ψ_{200} z histogramami o różnym N . Można zauważyć zbieganie rozwiązania MC wraz ze wzrostem N do dokładnego rozwiązania.



Rysunek 3: Porównanie wyników dla ψ_{200}

3 Wnioski

W pierwszej części laboratorium można zauważyć dwa punkty (szczególnie widoczne na wykresie logarytmicznym) o niezwykle małej wariancji. Zgodnie z założeniem wykorzystania wariancji jako miary dopasowania, można przypuszczać, że te punkty odpowiadają stanom własnym. Oznacza to poprawne znalezienie poszukiwanych stanów.

W drugiej części ćwiczenia najważniejszym wnioskiem jest konieczność zwiększania liczby próbek histogramu w celu utrzymania dokładności dopasowania. Punktem dobrego dopasowania jest zawsze zero dla $r=2$, jednakże dla $r=1$ oraz dla $r>3$ (tj. ogona) występują już znaczne różnice. Mogą one wynikać z blokowania początkowej symulacji dla wartości $r \in [0, 2]$ oraz problem z 'przeskoczeniem' punktu o wartości 0 przez algorytm.

4 Załączniki

- Lab14.py