

Klasični in kvantni Monte Carlo

Miha Čančula

22. april 2013

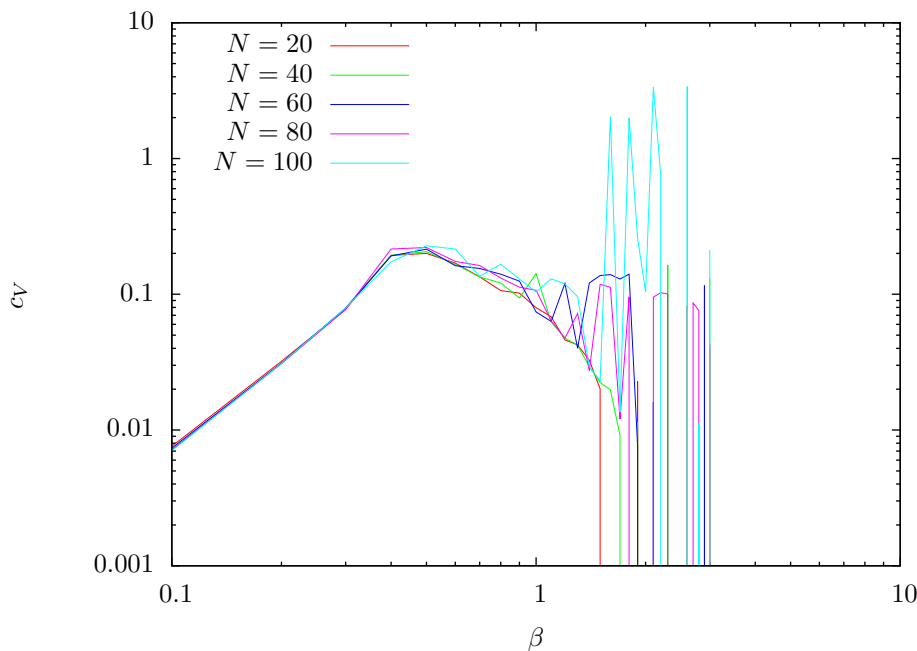
1 Isingov model

Metropolisov algoritem sem uporabil na 2D Isingovem modelu brez zunanje polja

$$H = - \sum_{\langle r, r' \rangle} \sigma_r \sigma_{r'} \quad (1)$$

Uporabil sem enostavno implementacijo, kjer ob vsaki potezi naključno izberem en delec in mu z določeno verjetnostjo obrnem spin. Kot začetni pogoj sem vsakih uporabil povsem naključno mrežo.

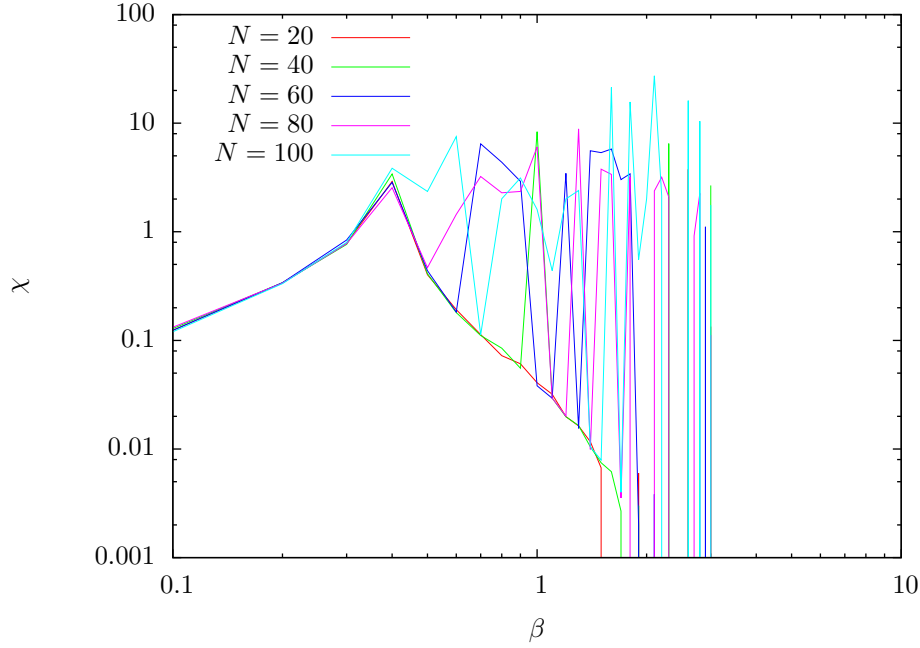
Kritično temperaturo sem ocenil s pomočjo sprotnega merjenja energije, magnetizacije, specifične toplote in magnetne susceptibilnosti. V termodinamskih sistemih v bližini faznega prehoda specifična toplota in susceptibilnost divergirata, zaradi prostorske omejitve računskega modela pa imata pri prehodu le vrhove.



Toplotna kapaciteta sistema je sorazmerna z varianco energije, $C_v = \beta^2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$. Če izraz delimo s številom delcev, torej N^2 , dobimo specifično toploto, ki je prikazana na zgornji sliki. Opazimo, da položaj in ostrina vrha nista odvisna od N , vsaj pri dovolj majhnih N , kjer še dosežemo termalizacijo.

Z grafa lahko odčitamo temperaturo prehoda oz. β_c kot najvišjo točko krivulje. Tudi pri velikem N vrh ni oster, zato lahko maksimum le ocenimo na $\beta_c \approx 0.5$. Prava vrednost je $\beta_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44$, kar je precej blizu rezultatom simulacije.

Vidne so tudi močne oscilacije specifične toplote pri velikih β . Pri manjšem številu korakov so oscilacije močnejše, zato domnevam, da se sistem tam še ni termaliziral. Zaradi nizke temperature zelo težko pride iz lokalnih minimumov energije. Pri večjem N , kjer za termalizacijo potrebujemo ustrezno večje število korakov, so oscilacije izrazitejšje, vseeno pa razločimo vrh pri $\beta \approx 0.5$.



Magnetna susceptibilnost sistema $\chi = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$ se obnaša podobno kot specifična toplota. Pri majhnih N je vrh bolj izrazit, z večanjem velikosti sistema in konstantnem številu potez pa postaja vse manj viden, povečujejo pa se tudi oscilacije pri velikih β . Položaj vrha je spet v bližini analitične vrednosti.

Za gornjo grafo sem naredil po 1000 meritev vsake spremenljivke, med zaporednimi meritvami pa sem izvedel 10000 korakov Metropolisovega algoritma. Pre začetkom meritev sem napravil 10^7 korakov, da je sistem prišel vsaj približno v ravnovesje. Največji sistem je imel $100 = 10000$ spinov, tako da sem vsak spin poskušal obrniti približno 1000-krat. Kljub temu pa sistem ne doseže termičnega ravnovesja, zlasti pri nizki temperaturi. Poleg tega ni dovolj korakov med posameznimi meritvami energije in magnetizacije, tako da te med seboj niso neodvisne. V primeru največjega obravnavanega sistema med dvema meritvama vsak spin v povprečju poskusim obrniti le enkrat, kar ni dovolj za neodvisnost meritev. Žal mi omejena računalniška zmogljivost ni dovoljevala obravnavanja sistemov z večim številom korakov.

2 Kvantni harmonski oscilator

Simuliral sem tudi kvantni harmonski oscilator. Harmonski oscilator ima le eno prostostno stopnjo, to je položaj q . Ker pa operatorja kinetične in potencialne energije ne komutirata, sem izraz $e^{-\beta H}$ razcepil na produkt M členov

$$e^{-\beta H} = \left[e^{-\frac{\beta}{M} H} \right]^M = \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \cdots \quad (2)$$

$$Z = \sum_q \left\langle q \left| \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \cdots \right| q \right\rangle \quad (3)$$

$$= \sum_{q_1, q_2, \dots} \left\langle q_1 \left| \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \right| q_1 \right\rangle \left\langle q_1 \left| \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \right| q_2 \right\rangle \cdots \quad (4)$$

Metropolisov algoritem je podoben kot v klasičnem primeru. Trenutno stanje namesto mreže spinov predstavlja M skalarjev q_j , člen fazne vsote pa je enak

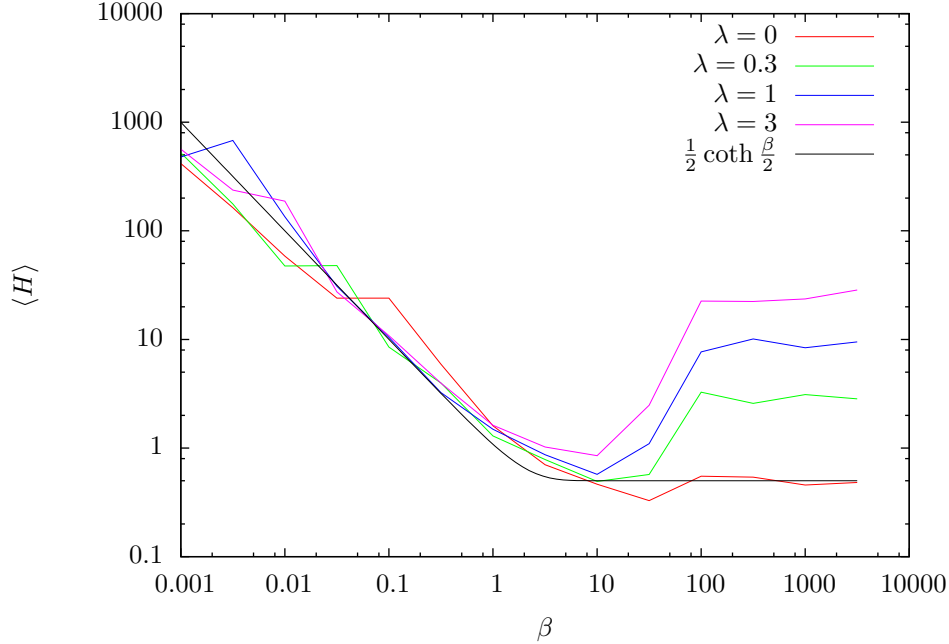
$$\exp(-\beta E(q_1, q_2, \dots, q_M)) = \exp\left(-\sum_{j=1}^M \left(\frac{M}{2\beta} (q_{j+1} - q_j)^2 + \frac{\beta}{M} V(q_j) \right)\right) \quad (5)$$

Poteza je bila sprememba enega izmed q_j , $q_j \rightarrow q_j + \varepsilon \xi$, kjer je ξ normalno Gaussovo porazdeljeno število. Parameter ε , ki določa povprečno velikost poteze, sem dinamično spreminjal v odvisnosti od β in M , da je bil delež sprejetih potez vedno blizu 1/2. Za primerno vrednost se je izkazal izraz $\varepsilon = 0.1 \min\{1, \sqrt{\beta}\}$

2.1 Anharmonski oscilator

Algoritem se ne spremeni, če uporabimo drugačen potencial, ki je še vedno diagonalen v bazi $|q\rangle$. Zato sem isti račun ponovil še z anharmonskim oscilatorjem, $V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \lambda q^4$, za nekaj različnih vrednosti λ .

S pomočjo Metropolisovega vzorčenja sem opazoval odvisnost povprečne energije $\langle H \rangle$ od inverzne temperature β . Rezultati so na spodnjem grafu.

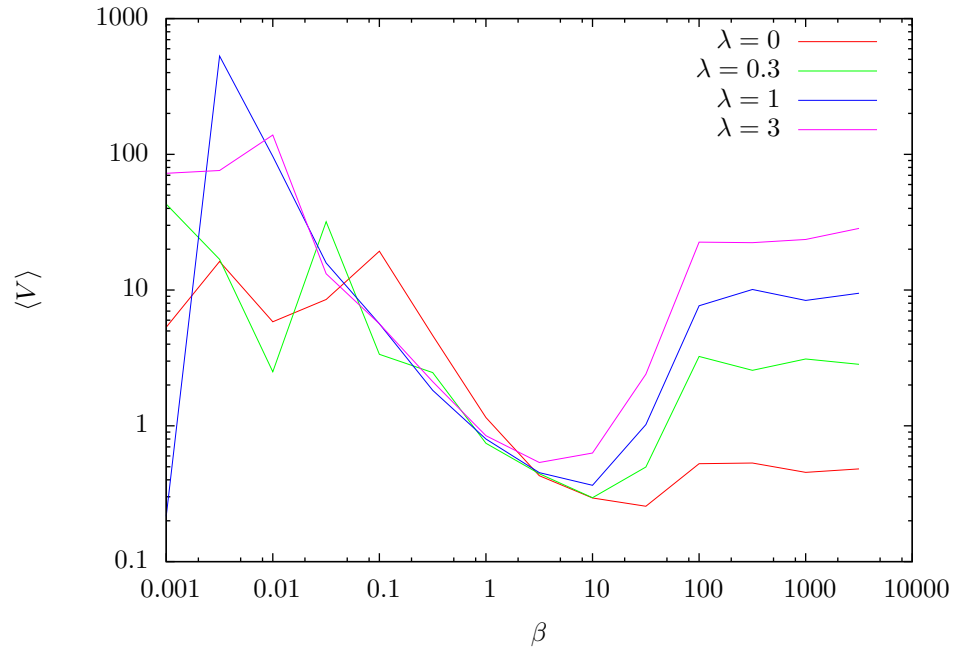


V harmonskem primeru povprečna energija pričakovano pada z inverzno temperaturo, v limiti $\beta \rightarrow \infty$ pa se ustali pri končni vrednosti $\frac{1}{2}$.

Nepričakovan in nefizikalen rezultat pa dobimo v nizkotemperaturni limiti z motenim potencialom, torej $\lambda > 0$. V tem primeru povprečna energija naraste do neke končne vrednosti, ki je odvisna od λ in tudi od ε . Padanje energije s temperaturo ni fizikalno, zato domnevam, da je posledica napak računanja. V tem primeru je $\beta/M \gg 1$, torej Trotterjev razcep ne drži več. Skok energije pri nizkih temperaturah je odvisen od vrednosti parametra λ , torej od oblike potenciala. Odvisna je tudi od izbire števila segmentov M . Če je izbrani M premajhen, potem Trotter-Suzukijev razcep ni več dober približek za $e^{-\beta H}$, saj $\Delta\beta = \beta/M$ ni več majhen parameter. Po drugi strani pa prevelik M pomeni, da potrebujemo veliko število korakov, da sistem pride v ravnovesje.

Za najboljše so se izkazale majhne vrednosti za M nekje med 5 in 25. Za predstavitev na zgorjem grafu sem izbral $M = 10$. V tem primeru dobimo dobro ujemanje med teoretično napovedjo $\langle H \rangle = \frac{1}{2} \coth \frac{\beta}{2}$ za harmonski oscilator in rezultati z $\lambda = 0$.

Za primerjavo sem posebej računal samo potencialni del energije, torej $\langle V \rangle$. Ta je diagonalen v q , zato je dovolj, da opazujemo le povprečje $V(q_1)$ po Metropolisovi porazdelitvi. Rezultati so na spodnjem grafu.



Odvisnosti so precej podobna kot na prejšnji sliki, torej zlasti pri velikem β k energiji prispeva predvsem potencialni člen. Pri majhnem β oz visoki temperaturi se pojavijo močne oscilacije. Oscilacije lahko razložimo, saj se pri visoki temperaturi energija hitro pretvarja iz potencialne v kinetično in obratno.