

Klasični in kvantni Monte Carlo

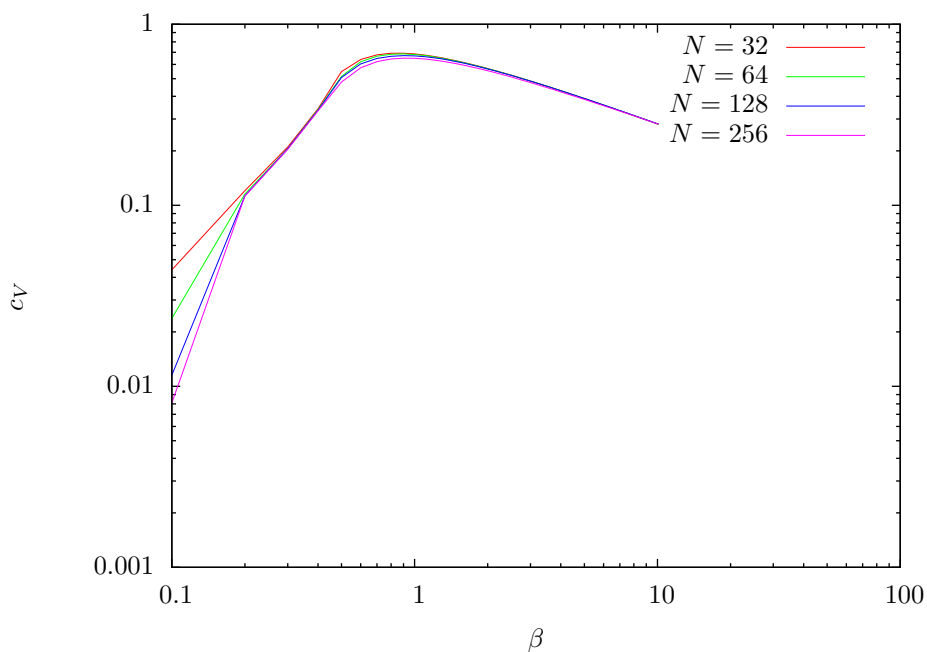
Miha Čančula

21. april 2013

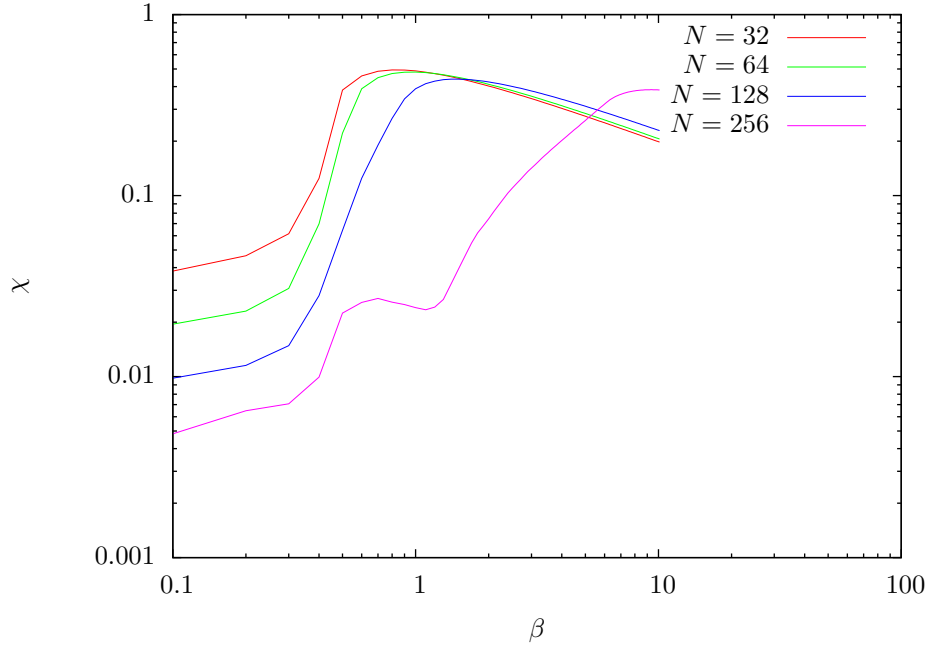
1 Isingov model

Metropolisov algoritem sem uporabil na 2D Isingovem modelu. 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, $C_v \propto \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$. Če izraz delimo s številom delcev, torej N^2 , dobimo do konstante natančno specifično toploto, ki je prikazana na zgornji sliki. Opazimo, da položaj in ostrina vrha nista odvisna od N .



Susceptibilnost sistema v odsotnosti zunanega polja se s spreminjanjem N obnaša bolj nepredvidljivo. Namesto vrha s potenčnim padanjem na obe strani opazimo hiter skok v bližini β_c . Dodatno opazimo precejšnje razlike v obnašanju pri različnih velikostih sistema. Pri $N = 256$ se pojavita celo dva vrha. Pri zmanjšanju števila korakov enak pojav vidimo tudi pri manjših N , tako da je to le posledica dejstva, da sistem še ni v ravnovesju.

Za gornjo grafo sem naredil po 1000 meritev vsake spremenljivke, med zaporednimi meritvami pa sem izvedel 10000 korakov Metropolisovega algoritma. Največji sistem je imel $256 \approx 65000$ spinov, zato posamezne meritve niso več korelirane, sistem pa tudi ne doseže ravnovesja.

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

$$e^{-\beta H} = \left[e^{-\frac{\beta}{M} H} \right]^M = \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \cdots \quad (1)$$

$$Z = \sum_q \left\langle q \left| \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \cdots \right| q \right\rangle \quad (2)$$

$$= \sum_{q_1, q_2, \dots} \left\langle q_1 \left| \exp\left(-\frac{\beta}{M} V\right) \right| q_1 \right\rangle \left\langle q_1 \left| \exp\left(-\frac{\beta}{M} T\right) \right| q_2 \right\rangle \cdots \quad (3)$$

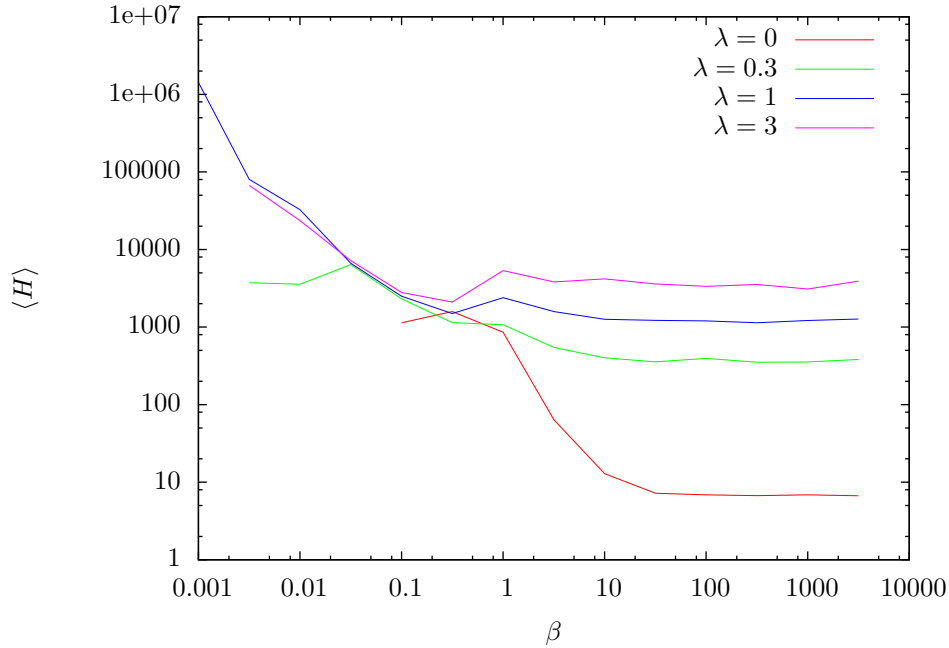
Metropolisov algoritem je podoben kot v klasičnem primeru. Trenutno stanje namesto mreže spinov predstavlja M skalarjev q_j , člen fazne vsote pa je enak

$$\exp(-\beta E(q_1, q_2, \dots, q_M)) = \exp\left(-\sum_{j=1}^M \left(\frac{M}{2\beta} (q_{j+1} - q_j)^2 + \frac{\beta}{M} V(q_j) \right)\right) \quad (4)$$

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 $1/2$.

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.



Po pričakovanju povprečna energija pada z inverzno temperaturo, v limiti $\beta \rightarrow \infty$ pa se ustali pri končni vrednosti. Ta vrednost je močno odvisna 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 majhnen parameter. Po drugi strani pa prevelik M pomeni, da potrebujemo veliko število korakov, da sistem pride v ravnovesje. Končna limitna vrednost energije pri $\beta \rightarrow \infty$ je lahko posledica enega izmed teh dveh težav.

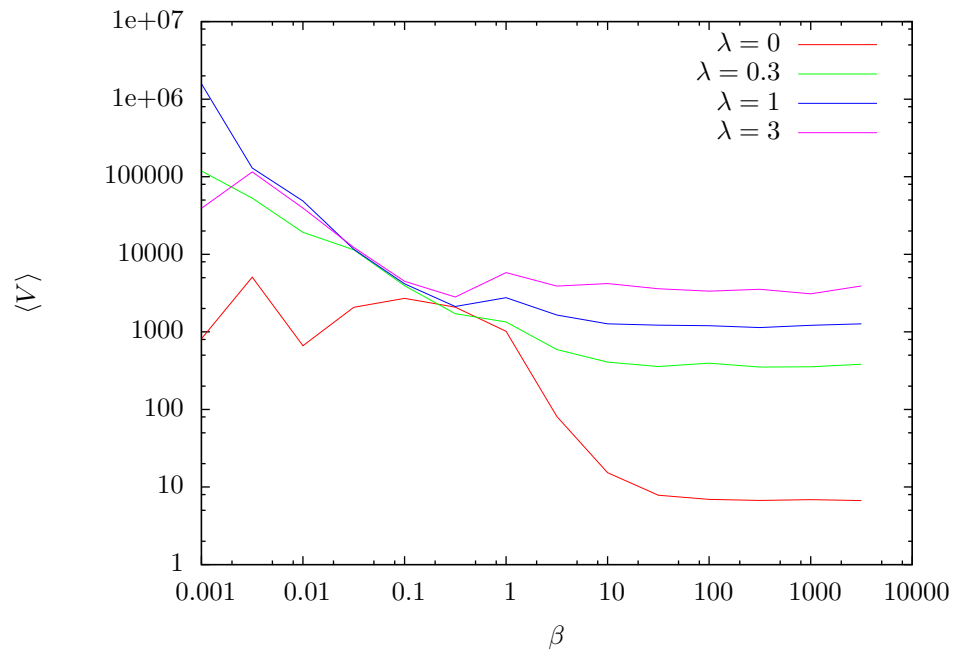
Pri majhni β oz. visoki temperaturi opazimo še en nenavaden pojav: skupna energija je negativna. Na logaritemskem grafu je to vidno le kot manjkajoče točke, ki so bolj vidne, če graf primerjamo z naslednjim. Harmonski potencial $V = \frac{1}{2}q^2$ je vedno pozitiven, negativen je lahko le kinetični del energije

$$\langle H_k \rangle = \left\langle \frac{M}{2\beta} - \frac{M}{2\beta} \sum_{j=1}^M (q_{j+1} - q_j)^2 \right\rangle$$

Ta člen je negativen, če se zaporedni q_j preveč razlikujejo med seboj. Za zgornji grafu sem uporabil $M = 20$, ampak oba nepričakovana pojava, tako negativno energijo kot končno limitno vrednost, opazimo pri vseh izbirah M med 5 in 500.

Izbira parametra ε in začetnega pogoja (vsi $q_j = 0$, ali pa naključne vrednosti) na odvisnost le malo vplivata. Da sprejmemo približno polovico potez, je dobra izbira $\varepsilon \approx \sqrt{\beta}$, pri večjih β pa deluje pa tudi konstanten $\varepsilon \approx 1$. Če izberemo ε , ki so močno razlikuje od zgornjih ocen, sistem ne doseže ravnovesja. Z dosti manjšim ε sem dobil rezultate, kjer povprečna energija ne narašča s temperaturo, kar ni fizikalno.

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.