
7. naloga: Kvantni Monte Carlo

POROČILO PRI PREDMETU VIŠJE RAČUNSKE METODE

2024/25

Avtor:

Rok MLINAR VAHTAR
28242004

24. april 2025

1 UVOD

Podobno kot prejšnja, se tudi ta naloga vrti okrog Metropolisovega algoritma, le da nas tokrat zanima ravnovesno stanje v kvantni in na klasični mehaniki. Osnovna količina ki jo bomo računali je particijska funkcija $Z(\beta) = \text{tr} \exp(-\beta H)$, saj nam ta omogoča izračun pričakovanih vrednosti količin, ki nas zanimajo. Izračun particijske funkcije lahko preko zapisa z kompletnim setom $\mathbb{1} = \sum |n\rangle \langle n|$

$$Z(\beta) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_M} \langle n_1 | e^{-\frac{\beta}{M} H} | n_2 \rangle \langle n_2 | e^{-\frac{\beta}{M} H} | n_3 \rangle \dots \langle n_M | e^{-\frac{\beta}{M} H} | n_1 \rangle$$

in približkom

$$\langle n_1 | e^{-\frac{\beta}{M} H} | n_2 \rangle \approx \delta_{n_1, n_2} - \frac{\beta}{M} \langle n_1 | H | n_2 \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{\beta^2}{M^2}\right) = P_{n_1, n_2}$$

prevedemo na izračun povprečja preko klasične verjetnostne porazdelitve nad M različnimi konfiguracijami n_1, n_2, \dots, n_M .

$$\langle A \rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_M} a_{n_1} P_{n_1, n_2} P_{n_2, n_3} \dots P_{n_M, n_1}$$

2 KVANTNI ANHARMONSKI OSCILATOR

V nadaljevanju bomo reševali problem kvantnega anharmonskega oscilatorja. Naš hamiltonian ima zato strukturo

$$H = -\frac{1}{2} \partial_j^2 + V, \quad V = \frac{1}{2} q_j^2 + \lambda q_j^4$$

kar nam omogoči, da problem privedemo na iskanje ravnovesnega stanja polimera z energijo

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

tega pa lahko rešimo na enak način kot, kot smo reševali klasičen problem prejšnji teden. To storimo tako, da stanje zapišemo v vektor M števil, kjer je M dovolj velik, da je razmerje β/M majhno. Poteza, ki jo večkrat ponovimo je potem to, da izberemo en element tega vektorja naključno in ga spremenimo za neko majhno zvezno spremembo. Jaz sem se jo odločil žrebati iz normalne porazdelitve z varianco $\sigma = 0.5$. To spremembo pa sprejmemo glede na spremembo energije z verjetnostjo

$$P = \min(1, e^{-\Delta E})$$

Da sem dobil bolj gladek rezultat, sem postopek ponovil N -krat in kot rezultat vzel povprečje.

Zdaj pa nam ostane še to, da vidimo kaj sploh hočemo izračunati. Zelo enostavno je izračunati potencialno energijo, saj je operator \hat{V} diagonalen v bazi q , ki jo uporabljamo. To pomeni, da jo lahko kar direktno iz vrednotimo na stanju, ki ga dobimo po zadnji iteraciji. Ostane pa še kinetična energija T , ki pa jo je,

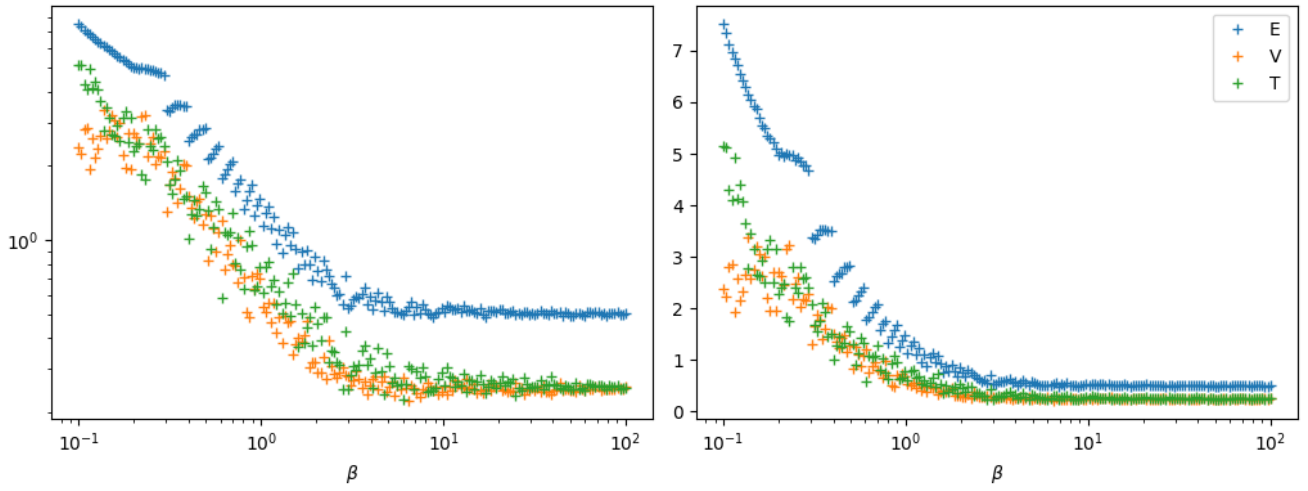
zato ker je vezana na hitrost, težje iz vrednotiti. Lahko pa iz vrednotimo celotno energijo, ki je povezana z particijsko funkcijo kot

$$E = \langle H \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \left\langle \frac{M}{2\beta} - \frac{M}{2\beta^2} \sum_{j=1}^M (q_{j+1} - q_j)^2 + \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M V(q_j) \right\rangle \quad T = E - V.$$

2.1 HARMONSKI OSCILATOR

Če kot prvo pogledamo navaden harmonski oscilator z $\lambda = 0$,

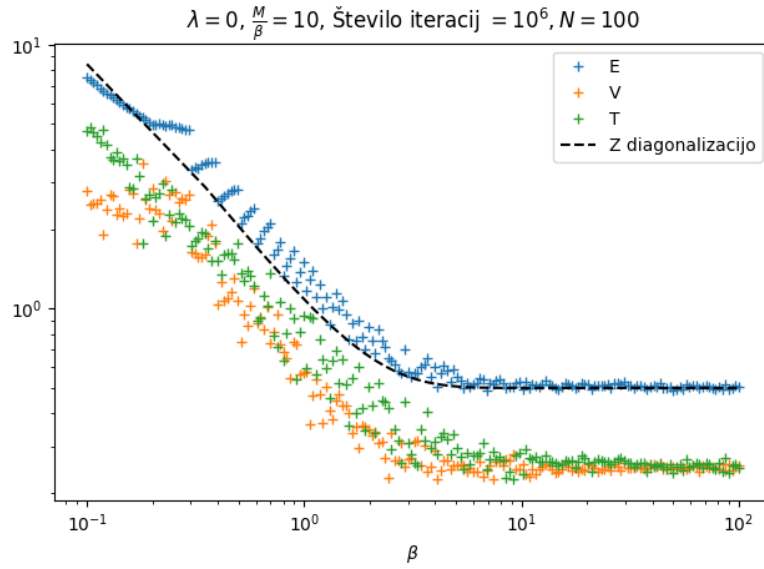
$$\lambda = 0, \frac{M}{\beta} = 10, \text{Število iteracij} = 10^6, N = 100$$



Slika 1: E , V in T pri različnih temperaturah za harmonski oscilator z različnima y skalama

V sami obliki ni večjih presenečenj. Za velike β dosežemo stabilen minimum, za manjše pa energija narašča. Zanimivo pa je tudi to, da vidimo da se energija enakomerno razporedi med kinetično in potencialno. Pomembno pa je tudi to, da se rezultati ujemajo z realnostjo. Limita $\beta \rightarrow \infty$ nam mora namreč dati energijo osnovnega stanja. Poleg tega poznamo tudi analitično rešitev za odvisnost energije od β

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}},$$



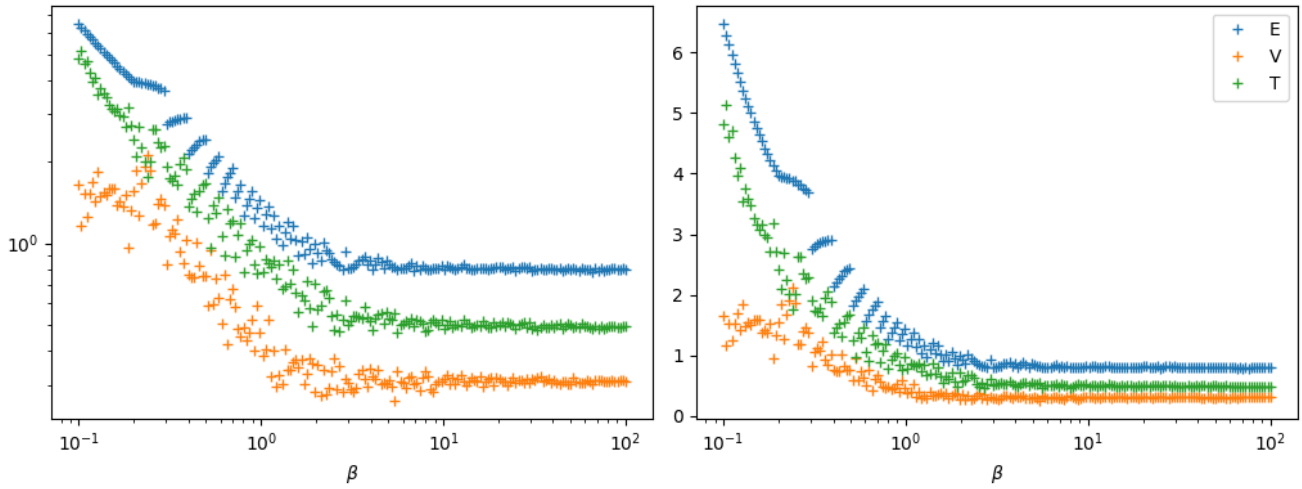
Slika 2: Primerjava z analitično rešitvjo

ki se, kot vidimo, zelo dobro ujema z dobljenim rezultatom.

2.2 ANHARMONSKI OSCILATOR

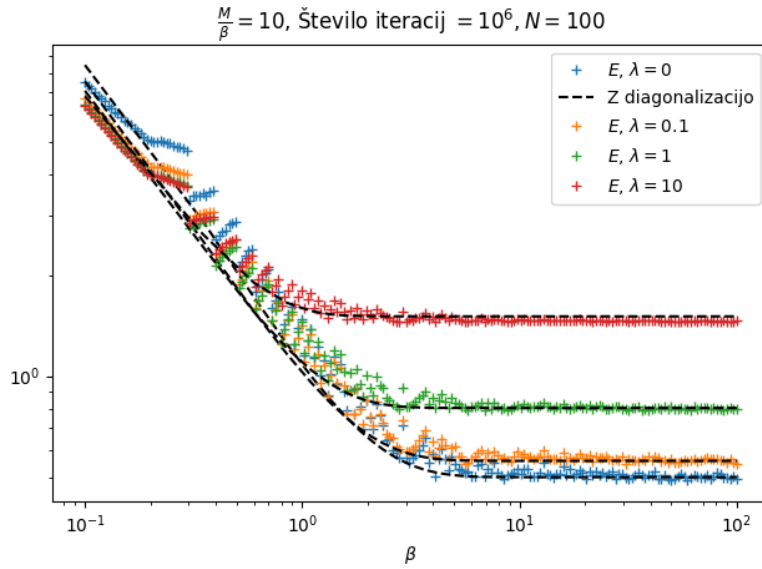
Če postopek ponovimo zdaj še z neničelnim λ , dobimo zelo podoben rezultat,

$\lambda = 1, \frac{M}{\beta} = 10, \text{Število iteracij} = 10^6, N = 100$



Slika 3: E , V in T pri različnih temperaturah za harmonski oscilator z različnima y skalama

le da je tokrat veliko bolj raztresen pri majhnih β . Vidimo pa tudi to, da kinetična in potencialna energija nista več enaki. Tudi tu lahko pogledamo še rešitev, dobljeno iz spektra, saj smo točko tega izračunali v prvih dveh nalogah. Tako dobimo graf,



Slika 4: Primerjava z rešitvijo iz spektra za različne λ

kjer se rešitve spet zelo dobro ujemajo z dobljenimi.