

# Symulacje Monte Carlo w przybliżeniu dynamicznego pola średniego

Karol Makuch



**INNOVATIVE ECONOMY**  
NATIONAL COHESION STRATEGY



**EUROPEAN UNION**  
EUROPEAN REGIONAL  
DEVELOPMENT FUND



# Układ elektronów w potencjale periodycznym (zaburzonym) w temperaturze T

Przybliżenie dynamicznego pola średniego



Model Andersona pojedynczej domieszki



$$H = H_0 + H_1$$



Bez zaburzenia rozwiązywalny ściśle

# Układ kwantowy w temperaturze T

$\alpha$  - numeruje stany własne układu N-cząstkowego

Suma statystyczna :

$$Z = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \exp[-\beta H] | \alpha \rangle = \text{Tr} \exp[-\beta H]$$

Średnia operatora O:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} O \exp[-\beta H]$$

# Układ kwantowy z zaburzeniem w temperaturze T

$$H = H_0 + H_1$$

Wzór Matsubary:

$$e^{-\beta(H_0 + H_1)} = e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_{\beta'} e^{-\int_0^\beta d\beta' H_1(\beta')}$$

$$H_1(\beta') = e^{\beta' H_0} H_1 e^{-\beta' H_0}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\beta'} e^{-\int_0^\beta d\beta' H_1(\beta')} &= \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \dots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n H_1(\beta_1) \dots H_1(\beta_n) \end{aligned}$$

# Wartości średnie operatorów

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr } O \exp[-\beta H]$$

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha} \int_0^{\beta} d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \dots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \frac{(-1)^n}{Z} e^{-\beta E_{\alpha}} \\ &\times \langle \alpha | H_1(\beta_1) \dots H_1(\beta_n) O | \alpha \rangle \end{aligned}$$

$|\alpha\rangle$  - stany własne  $H_0$

Symbolicznie powyższe:

$$\langle O \rangle = \int_X p(X) F(X)$$

$$X \equiv \alpha, n, \beta_1, \dots, \beta_n$$

# Symulacje Monte Carlo

Wyznaczenie liczby Pi

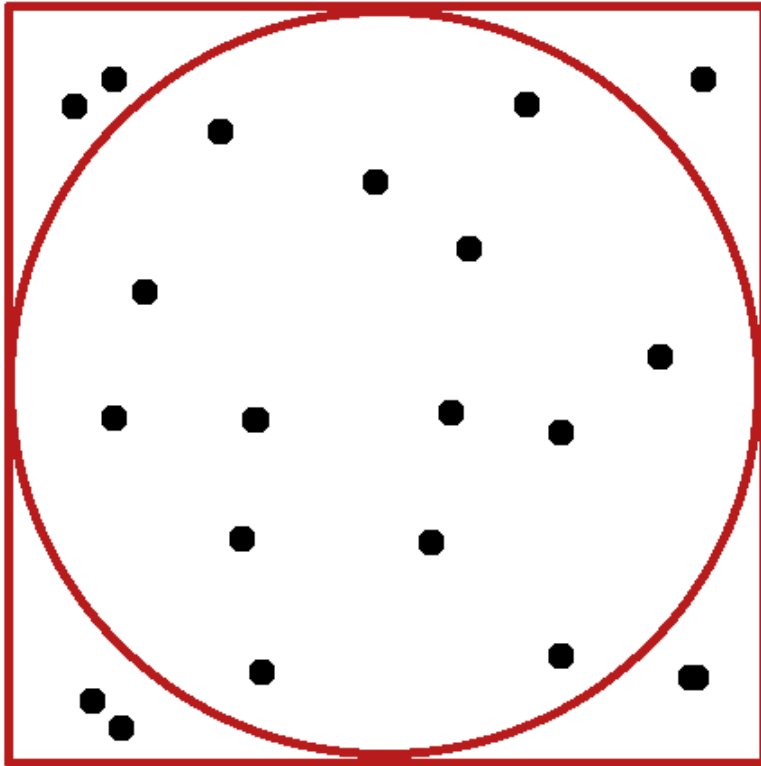
$$\frac{P_O}{P_{\square}} = \frac{\pi}{4}$$

Rzucamy losowo (rozkład jednorodny):

Liczba trafień w koło

$$\frac{N_O}{N} \approx \frac{\pi}{4}$$

Liczba wszystkich rzutów

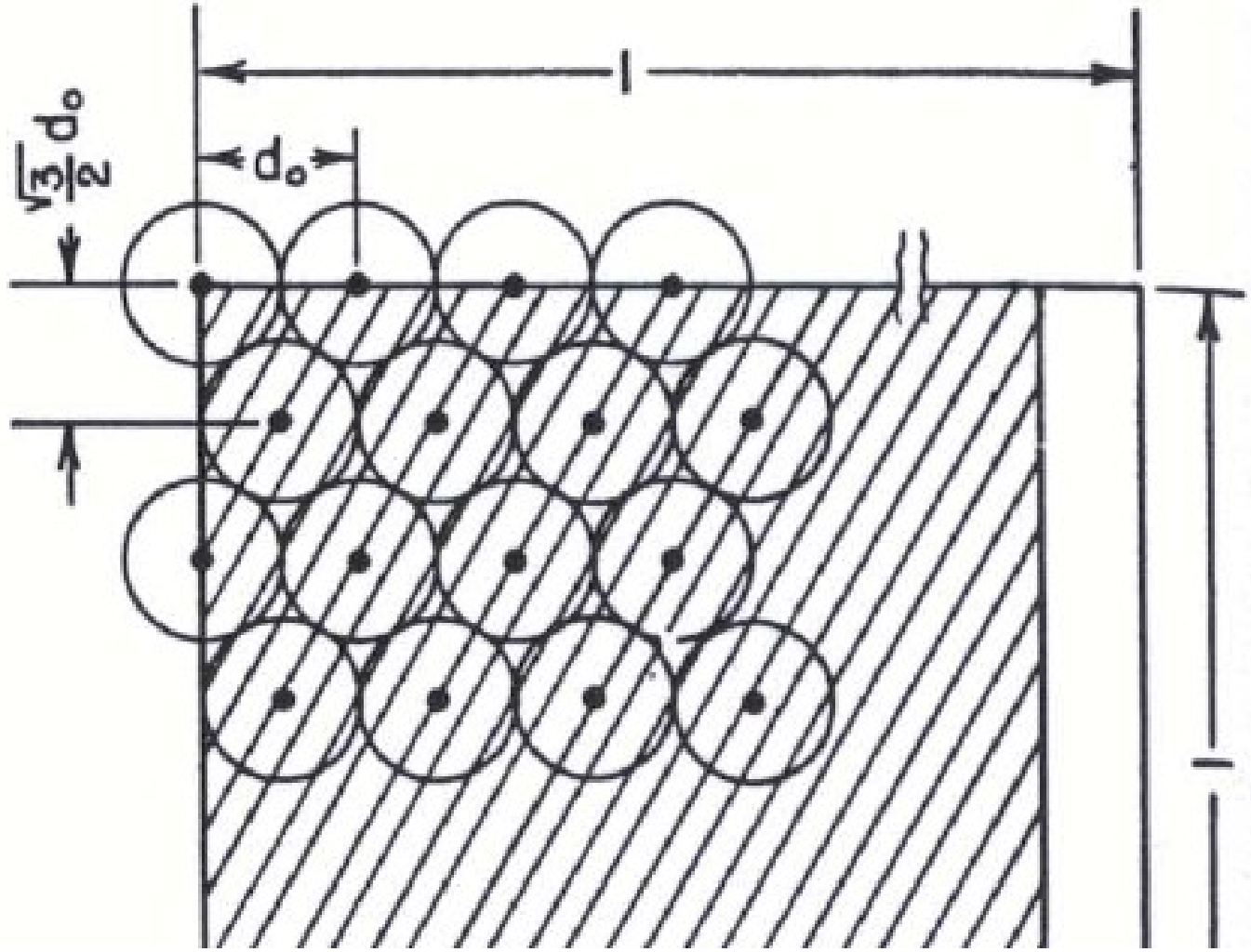


Ogólnie

$$\sum_{i=1}^N F(X_i) \approx \int dX p(X) F(X)$$

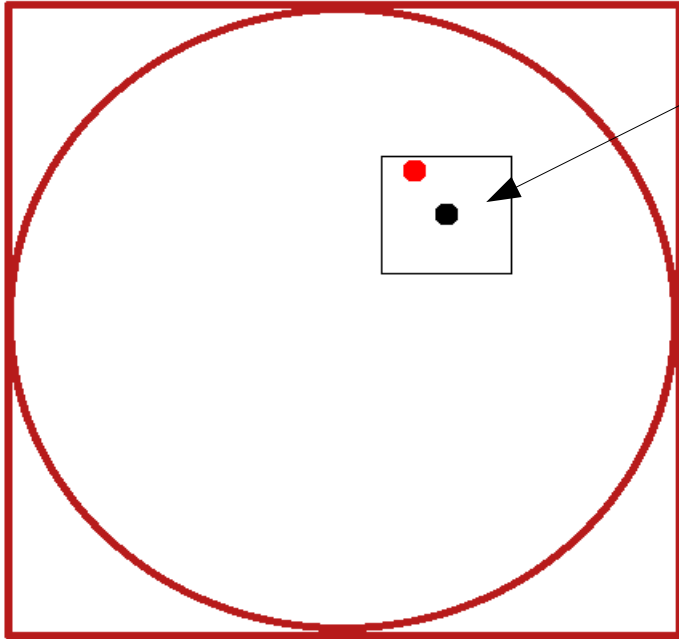
Zmienne niezależne:

$$p(X_1, \dots, X_N) = p(X_1) \dots p(X_N)$$



www.ck12.org

# Łańcuch Markowa



Aktualny stan układu:  $X$

Przejście do stanu  $X'$  z prawdopodobieństwem:

$$T(X \rightarrow X')$$

Własności macierzy przejścia  $T$ :

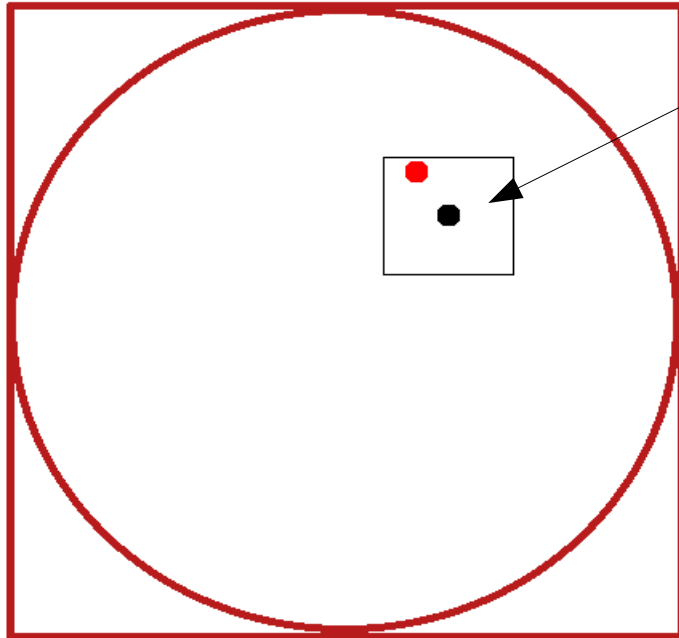
$$\sum_{X'} T(X \rightarrow X') = 1$$

$$T(X \rightarrow X') \geq 0$$

Jak wybrać  $T$ , aby punkty układały się zgodnie z rozkładem  $p(X)$ ?



# Algorytm Metropolisa



Aktualny stan układu:  $X$

1) Losowanie stanu  $X'$  (z rozkładem a priori  $A$ ):

$$\sum_{X'} A(X \rightarrow X') = 1$$

2) Stan  $X'$  akceptowany z prawdopodobieństwem

$$p^{acc}(X \rightarrow X') = \min\left[1, \frac{p(X')A(X' \rightarrow X)}{p(X)A(X \rightarrow X')}\right]$$

Dla  $X$  różnego od  $X'$ :

$$T(X \rightarrow X') = A(X \rightarrow X')p^{acc}(X \rightarrow X')$$

Metropolis:  $T$  spełnia warunek równowagi szczegółowej

$$p(X)T(X \rightarrow X') = p(X')T(X' \rightarrow X)$$

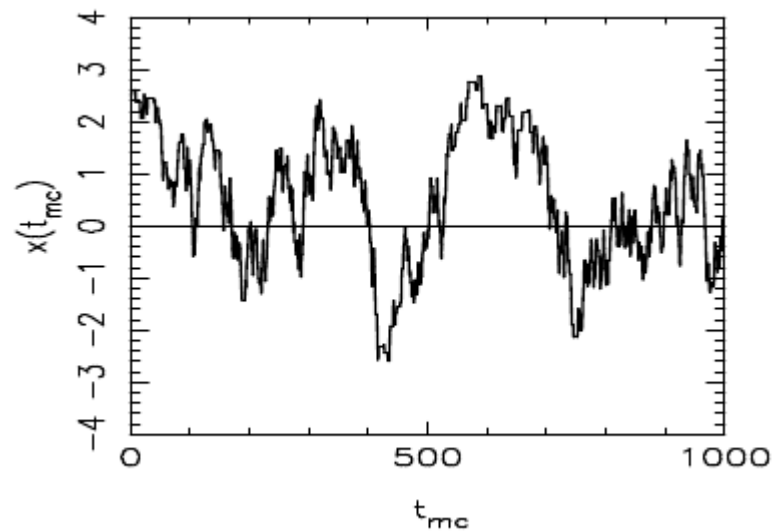
(erogdywność)

# Przebieg symulacji Monte Carlo - Metropolis

- wyrzutowanie
- właściwa symulacja
- pomiar co pewną liczbę kroków (czas autokorelacji)

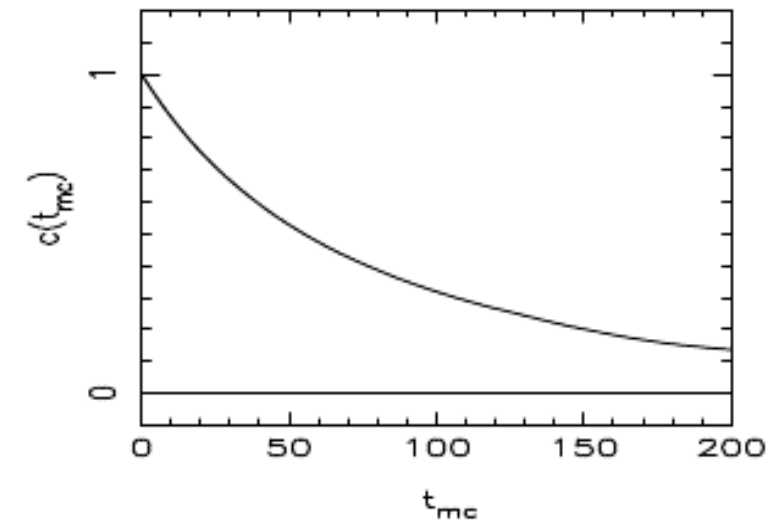
$$\int dX p(X) F(X) \approx \sum_{i=1}^N F(X_i)$$

Realizacja łańcucha  
Markova:



Funkcja autokorelacji:

$$c(\tau) = \frac{1}{N - \tau} \sum_{i=1}^{N-\tau} \frac{\bar{x}(i)\bar{x}(\tau + i)}{\sigma^2}$$

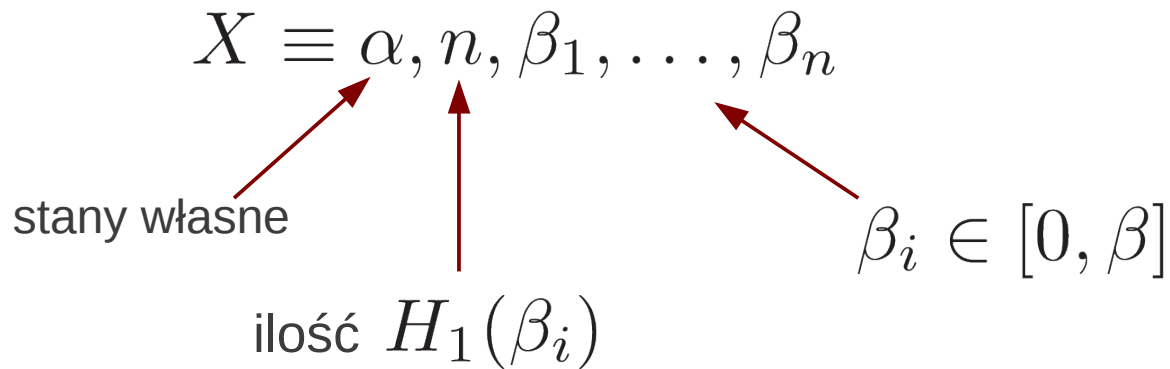


Pomiar co czas  $\gg$  czas autokorelacji



Zmienne niezależne

# Łańcuch Markowa w CT-QMC



Prawdopodobieństwo a priori  $A(X \rightarrow X')$ :

- zmiana  $n$  (np.: o  $\pm 1$ )
- zmiana stanu (np.: o  $\pm 1$ )
- przesunięcie wybranego beta
- pozostałe  $A(X \rightarrow X') = 0$

$\frac{1}{3}$

Dla zmiany  $n$ :

$$A(\{\alpha, n, \beta_1, \dots, \beta_n\} \rightarrow \{\alpha, n - 1, \beta_1, \dots, \cancel{\beta_i}, \dots, \beta_n\}) = \frac{1}{3} \frac{1}{n}$$

$$A(\{\alpha, n - 1, \beta_1, \dots, \beta_{n-1}\} \rightarrow \{\alpha, n, \beta_1, \dots, \beta_n\}) = \frac{1}{3} \frac{d\beta}{\beta}$$

# Podsumowanie

- Średnie dla układów kwantowych (zaburzenie) → wyrażone przez całki (sumy) wielowymiarowe
- Wielowymiarowe całkowanie → Monte Carlo (suma po stanach próbnych o niezależnym rozkładzie)
  - ♦ Generowanie stanów próbnych przez łańcuch Markova (twierdzenia o zbieżności do stanu stacjonarnego) – algorytm Metropolisa
  - ♦ Pomiar na zmiennych niezależnych (czas autokorelacji)