

Monte Carlo Quântico

Tiago Pinheiro Ursulino
Aluno de doutorado do Prof. Dr. Nestor Caticha

Instituto de Física da USP
PGF5295 - Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada
Prof. Dr. Luis Gregório Dias

1 de dezembro de 2015

Sumário

- 1 O que é um método de Monte Carlo?
- 2 Método de Monte Carlo na Física
- 3 MC Clássico
- 4 Monte Carlo Quântico
 - Introdução
 - Modelo XXZ 1D
 - Decomposição de Trotter e soma sobre trajetórias
 - Diagrama de uma trajetória
 - Equivalência com sistema clássico
 - Exemplo de algoritmo de update
 - Problema do sinal
 - Problemas, ineficiências e suas soluções
- 5 Referências

O que é um método de Monte Carlo?

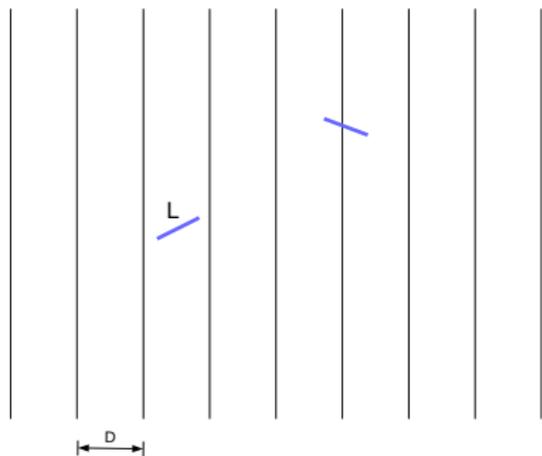
Queremos calcular quantidade I .

Para isso, inventamos processo estocástico tal que uma de suas variáveis aleatórias, X , tem justamente média I :

$$I = \mathcal{E}(X)$$

Exemplo clássico da matemática: experimento das agulhas de Georges-Louis Leclerc, Conde de Buffon (1707-1788)

$$p = \frac{2L}{\pi D} \Rightarrow \pi \simeq \frac{2L N}{D n}$$



Método de Monte Carlo na Física

Em física, em geral (mas não necessariamente), o próprio sistema físico sugere um processo estocástico.

Em outras palavras, métodos de Monte Carlo na física são feitos para “imitar” o sistema sob estudo.

Podemos pensar em duas grandes classes de métodos de MC na física:

- Simulações com muitos corpos (mecânica estatística, mecânica quântica de muitos corpos, ...)
- Foco na interação de 1 partícula com um meio (fenômenos de transporte...)

MC Clássico

Dado um sistema com configurações acessíveis $\{\sigma_i\}$, uma média envolve uma soma sobre todas as configurações: proibitivo! ($2^{L \times L}$ para Ising 2D.)
Melhor fazer o sistema evoluir aos poucos para a distribuição de equilíbrio:

$$\{\sigma_i\} \xrightarrow{W} \{\sigma_i\}'$$

privilegiando configurações mais prováveis de acordo com o peso de Boltzmann:

$$P(\{\sigma_i\}) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(\{\sigma_i\})}}{\mathcal{Z}}$$

A probabilidade de transição W deve obedecer:

- $W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_i\}') \geq 0$
- $\sum_{\{\sigma_i\}'} W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_i\}') = 1$
- $\sum_{\{\sigma_i\}} P(\{\sigma_i\}) W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_i\}') = P(\{\sigma_i\}')$

Soluções podem ser:

- Locais: modificam o estado de um grau de liberdade por vez (Metropolis, heat-bath, Glauber, ...). Bastante gerais!
- Não-locais: modificam regiões inteiras do sistema por vez (algoritmos de cluster). Muito dependentes do sistema!

O mais clássico: algoritmo de Metropolis.

$$W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_i\}') = \begin{cases} 1 & , \text{ se } E' < E \\ e^{-\beta(E'-E)} & , \text{ se } E' > E \end{cases}$$

Monte Carlo Quântico - Introdução

Há vários métodos sob esse nome. Em geral, aplica-se a qualquer método de Monte Carlo que ajude a calcular uma média num sistema quântico (e.g. minimização em métodos variacionais).

Vamos explorar o método da linha-de-mundo. Lembra a formulação da Mecânica Quântica com as integrais de trajetória de Feynman.

Exemplificaremos com modelo concreto: Cadeia de Spin XXZ 1D:

$$H = J_x \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J_z \sum_i S_i^z S_{i+1}^z$$

com $\mathbf{S}_{L+1} = \mathbf{S}_1$. Veja que \mathbf{S}_i agora são *operadores* quânticos!

$$[S_i^a, S_j^b] = i\delta_{i,j}\epsilon^{abc} S_i^c$$

1 sítio: escolhemos como base auto-estados de S^z : $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$

Definindo: $S^\pm = S^x \pm iS^y$, temos:

$$S^-|\downarrow\rangle = S^+|\uparrow\rangle = 0$$

$$S^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

$$S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

L sítios: $|\sigma\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\rangle$, onde $\sigma_i = \uparrow, \downarrow$

Fácil resolver para $L = 2$ sítios:

$$\begin{aligned} H_{(2 \text{ sítios})} &= J_x (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + J_z S_1^z S_2^z = \\ &= \frac{J_x}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) + J_z S_1^z S_2^z \end{aligned}$$

Solução para 2 sítios:

$$H_{(2 \text{ sítios})} \left(\frac{|\uparrow, \downarrow\rangle \pm |\downarrow, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \left(-\frac{J_z}{4} \pm \frac{J_x}{2} \right) \left(\frac{|\uparrow, \downarrow\rangle \pm |\downarrow, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right)$$

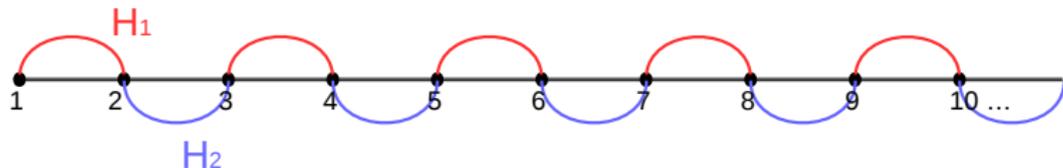
$$H_{(2 \text{ sítios})} |\uparrow, \uparrow\rangle = \frac{J_z}{4} |\uparrow, \uparrow\rangle$$

$$H_{(2 \text{ sítios})} |\downarrow, \downarrow\rangle = \frac{J_z}{4} |\downarrow, \downarrow\rangle$$

Voltando ao problema completo (L sítios), vamos separar o hamiltoniano em duas partes:

$$H = \sum_n H^{2n+1} + \sum_n H^{2n+2} = H_1 + H_2$$

Cada parte (H_1 e H_2) é agora uma soma sobre problemas independentes de 2 sítios:



Queremos, em geral, calcular coisas como a função de partição

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}[e^{-\beta H}] = \text{Tr}[e^{-\beta(H_1+H_2)}]$$

Para isso, vamos separar o intervalo de “tempo imaginário” β em pequenos passos de tempo $\Delta\tau = \beta/m$.

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}[e^{-\beta(H_1+H_2)}] = \text{Tr}[(e^{-\Delta\tau(H_1+H_2)})^m]$$

Daí, utilizamos algo conhecido como *decomposição de Trotter*:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}[(e^{-\Delta\tau(H_1+H_2)})^m] = \text{Tr}[(e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2})^m] + \mathcal{O}(\Delta\tau^2)$$

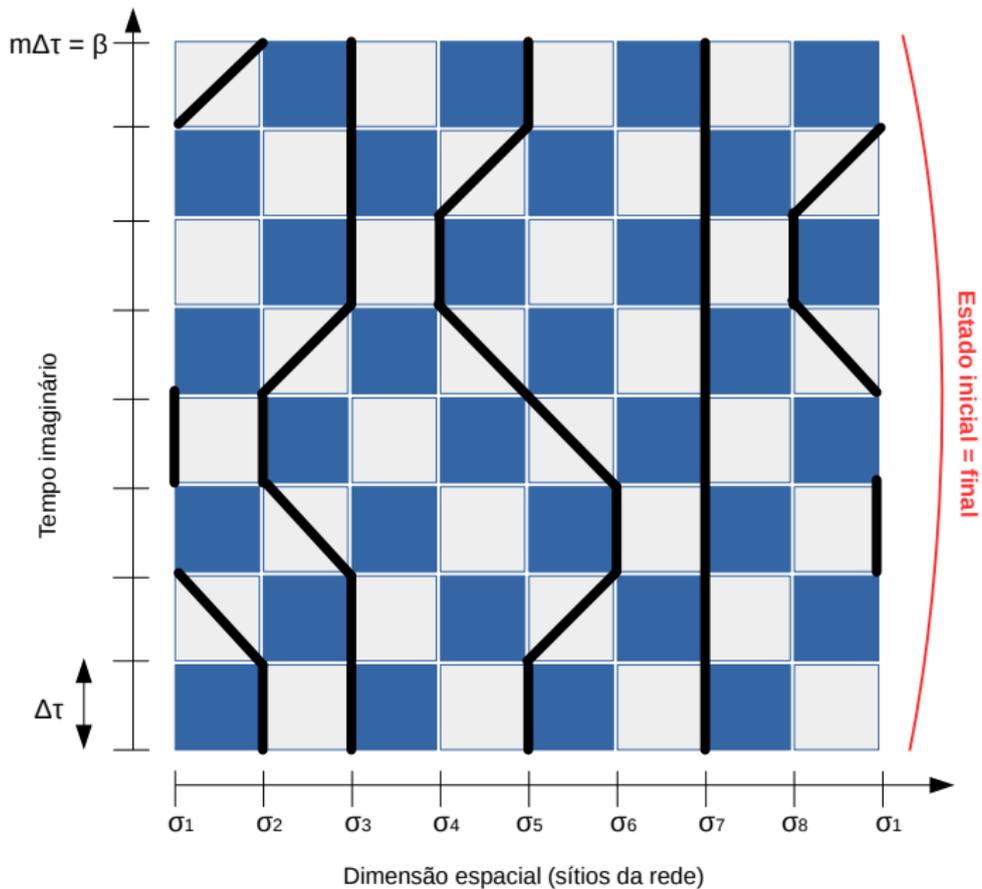
Entre cada fator $e^{-\Delta\tau H_i}$ introduzimos o operador identidade

$$\mathbf{1} = \sum_{\sigma} |\sigma\rangle\langle\sigma|$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{2m}} \langle\sigma_1|e^{-\Delta\tau H_1}|\sigma_{2m}\rangle \dots \langle\sigma_3|e^{-\Delta\tau H_1}|\sigma_2\rangle \langle\sigma_2|e^{-\Delta\tau H_2}|\sigma_1\rangle + \\ + \mathcal{O}(\Delta\tau^2) \end{aligned}$$

Ou seja, \mathcal{Z} é dado como uma soma entre trajetórias possíveis entre um estado inicial $|\sigma_1\rangle$ e um estado final $|\sigma_{2m+1}\rangle = |\sigma_1\rangle$.

$$\mathcal{Z} = \sum_w \Omega(w), \text{ onde } w \text{ é uma trajetória.}$$



No nosso modelo XXZ, para calcular os pesos $\Omega(w)$, vamos nos concentrar num elemento (o tratamento para H_1 e H_2 é o mesmo):

$$\langle \sigma_{\tau+1} | e^{-\Delta\tau H_2} | \sigma_{\tau} \rangle = \prod_{i=1}^{L/2} \langle \sigma_{2i,\tau+1}, \sigma_{2i+1,\tau+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} | \sigma_{2i,\tau}, \sigma_{2i+1,\tau} \rangle$$

ou seja, os problemas de 2 corpos dão contribuições independentes. Como já encontramos o hamiltoniano de 2 corpos na base $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, basta calcular todos os processos permitidos:

Plaqueta	Processo	Contribuição para o peso
	$ \downarrow, \downarrow\rangle \rightarrow \downarrow, \downarrow\rangle$	$e^{-\Delta\tau J_z/4}$
	$ \uparrow, \uparrow\rangle \rightarrow \uparrow, \uparrow\rangle$	$e^{-\Delta\tau J_z/4}$
	$ \uparrow, \downarrow\rangle \rightarrow \downarrow, \uparrow\rangle$	$-e^{\Delta\tau J_z/4} \sinh(\Delta\tau J_x/2)$
	$ \downarrow, \uparrow\rangle \rightarrow \uparrow, \downarrow\rangle$	$-e^{\Delta\tau J_z/4} \sinh(\Delta\tau J_x/2)$
	$ \downarrow, \uparrow\rangle \rightarrow \downarrow, \uparrow\rangle$	$e^{\Delta\tau J_z/4} \cosh(\Delta\tau J_x/2)$
	$ \uparrow, \downarrow\rangle \rightarrow \uparrow, \downarrow\rangle$	$e^{\Delta\tau J_z/4} \cosh(\Delta\tau J_x/2)$

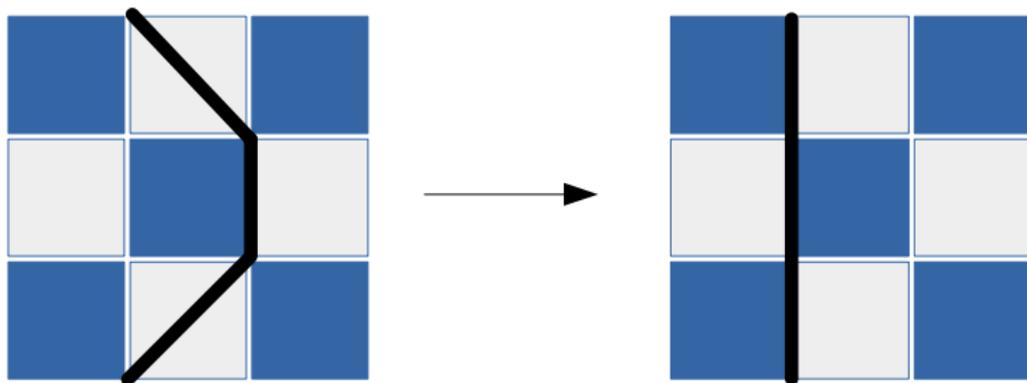
O problema agora é *equivalente* ao de um sistema clássico.

Clássico	Quântico
Configuração $\{\sigma_i\}$	Trajectoria w
Peso = $P(\{\sigma_i\})$	Peso = $\Omega(w)$
$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}} P(\{\sigma_i\})$	$\mathcal{Z} = \sum_w \Omega(w)$

Podemos aplicar portanto, por exemplo, um algoritmo de Metropolis:

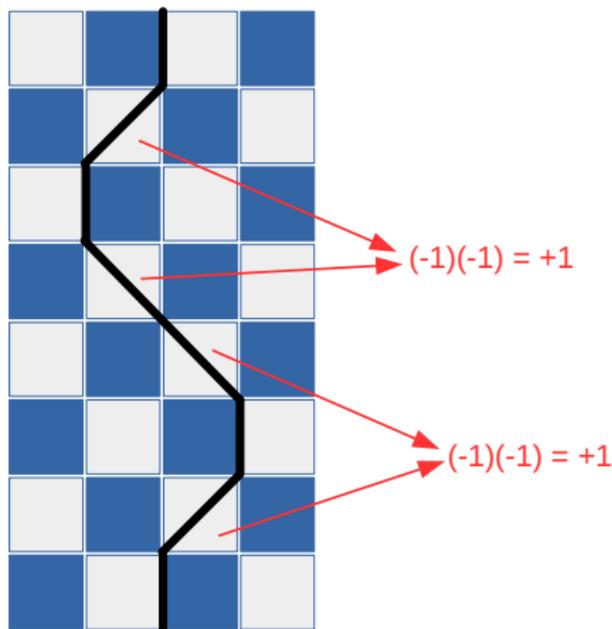
$$W(w \rightarrow w') = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \Omega(w') > \Omega(w) \\ \frac{\Omega(w')}{\Omega(w)} & , \text{ se } \Omega(w') < \Omega(w) \end{cases}$$

Um exemplo de algoritmo de update é: sorteia-se uma plaqueta escura no diagrama, e (se possível) propõe-se o deslocamento da linha vertical através dela. Aceitamos a nova configuração de acordo com a regra de Metropolis (por exemplo).



Problema do sinal

Veja que, apesar de algumas plaquetas darem contribuição negativa, estas sempre aparecem aos pares (por causa da condição periódica temporal).



Problema do sinal - férmions

O problema, porém, persiste para férmions. Exemplo: modelo tipo *tight-binding* com *hopping* entre 2 vizinhos:

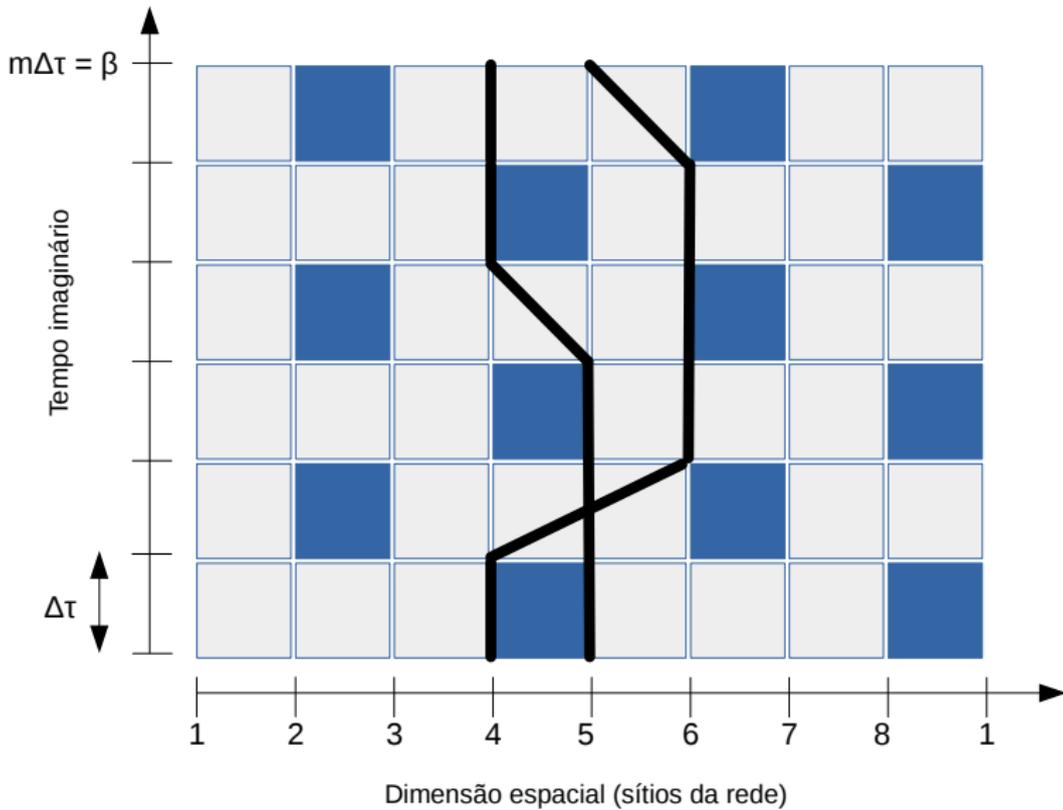
$$H - H_{\text{cinético}} = -t \sum_i c_i^\dagger (c_{i+1} + c_{i+2}) + H.c.$$

Decomposição do hamiltoniano:

$$H - H_{\text{cinético}} = H_1 + H_2 = \sum_{n=0}^{L/4-1} H^{(4n+1)} + \sum_{n=0}^{L/4-1} H^{(4n+3)}$$

onde:

$$H^{(i)} = -tc_i^\dagger (c_{i+1}/2 + c_{i+2}) - tc_{i+1}^\dagger (c_{i+2} + c_{i+3}) - tc_{i+2}^\dagger c_{i+3}/2 + H.c.$$





$$\begin{aligned} &\langle 0, 1, 0, 1 | c_2^\dagger c_3 | 0, 0, 1, 1 \rangle = \\ &= \langle 0 | (c_2^\dagger c_4) (c_2^\dagger c_3) (c_4^\dagger c_3^\dagger) | 0 \rangle \end{aligned}$$

Mas:



$$\begin{aligned} &\langle 0, 0, 1, 1 | c_4^\dagger c_2 | 0, 1, 1, 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | (c_3 c_4) (c_4^\dagger c_2) (c_3^\dagger c_2^\dagger) | 0 \rangle \end{aligned}$$

Poderíamos utilizar uma probabilidade auxiliar:

$$P(w) \equiv \frac{|\Omega(w)|}{\sum_w |\Omega(w)|}$$

Daí, uma média de um operador ficaria:

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_w P(w) \text{sinal}(w) O(w)}{\sum_w P(w) \text{sinal}(w)}$$

O denominador fica:

$$\langle \text{sinal} \rangle = \frac{\sum_w \Omega(w)}{\sum_w |\Omega(w)|} = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}{\text{Tr}[e^{-\beta H_B}]}$$

Para baixas temperaturas, o estado fundamental domina e:

$$\langle \text{sinal} \rangle \simeq e^{-\beta(E_0 - E_0^B)}$$

Logo, $\langle O \rangle$ torna-se o quociente de duas quantidades exponencialmente pequenas!

Problemas, ineficiências e suas soluções

- Erro de ordem $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$ da decomposição de Trotter
 - Solução: Limite de tempo contínuo, expansão em série estocástica (SSE)
- Algoritmo de update não acessa todas as configurações e é ineficiente.
 - Solução: Updates não-locais: loop updates, ...
- Problema do sinal para férmions, sistemas de spin-1/2 frustrados, (=) bósons *hard-core*.
 - Solução: MCQ com campos auxiliares

Referências básicas

-  Fehske, H.; Schneider, R.; Weisse, A. (eds)
Computational Many-Particle Physics (Lecture Notes in Phys., 739)
Springer, 2008
-  Thijssen, J.M.
Computational Physics
Cambridge University Press, 2nd ed., 2007