

# 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?

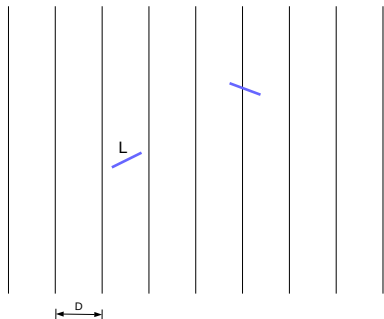
Queremos calcular quantidade  $I$ .

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:

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

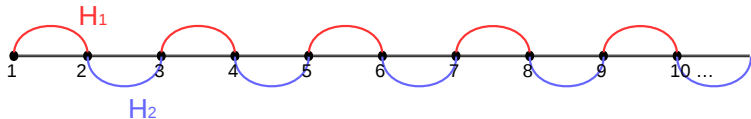
$$H_{(2 \text{ sítios})} |\uparrow, \uparrow\rangle = \frac{J_z}{4} |\uparrow, \uparrow\rangle$$

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

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”  $\beta$  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*:

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

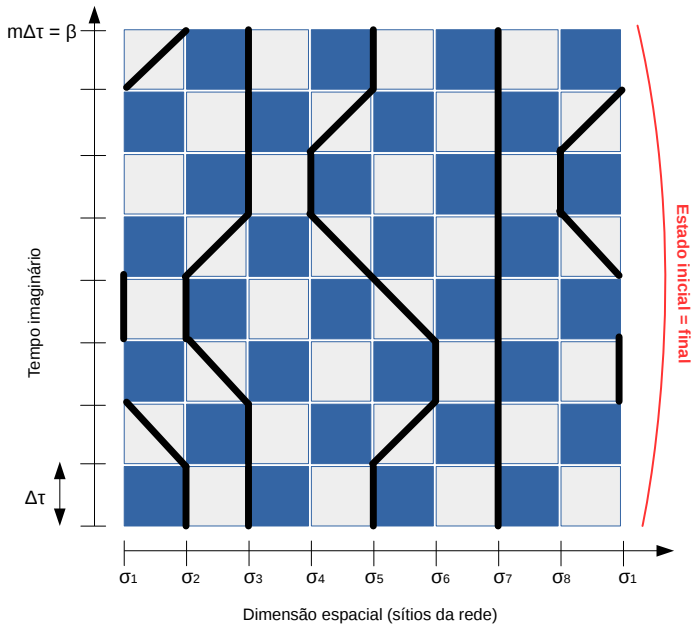
Entre cada fator  $e^{-\Delta\tau H_i}$  introduzimos o operador identidade

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

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

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$	$e^{\Delta\tau J_z/4} \cosh(\Delta\tau J_x/2)$



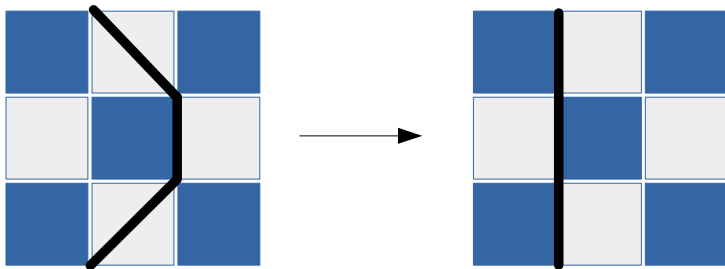
O problema agora é *equivalente* ao de um sistema clássico.

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:

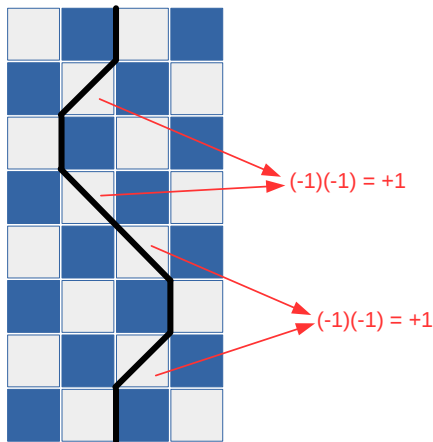
$$W(w \rightarrow w') = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \Omega(w') > \Omega(w) \\ \frac{\Omega(w')}{\Omega(w)} & , \text{ se } \Omega(w') < \Omega(w) \end{cases}$$

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:

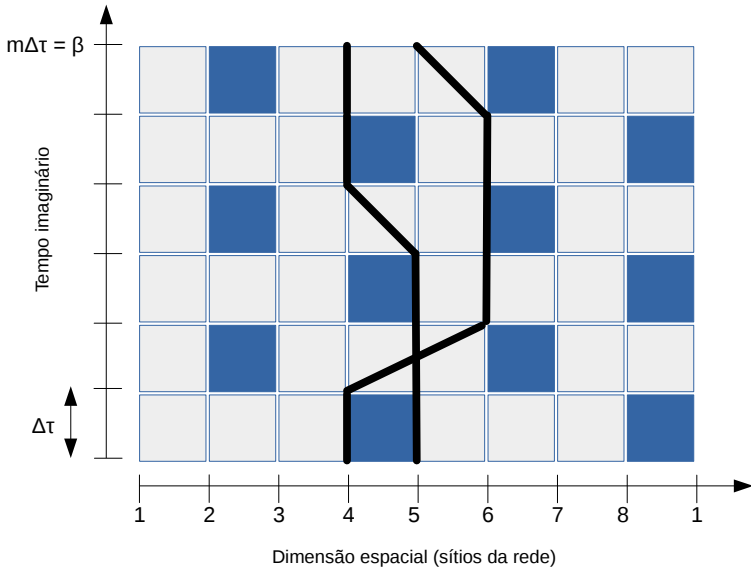
$$H - H_{\text{cinético}} = -t \sum_i c_i^\dagger (c_{i+1} + c_{i+2}) + H.c.$$

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