

# Kvantové Monte-Carlo

- několik různých přístupů k nalezení základního stavu a energie systému s více částicemi  
→ např. variační MC, difúzní MC a další

## a) Variační metoda Monte-Carlo

- variační přístup k hledání základního stavu s využitím vhodných <sup>zkusobných</sup> testovacích funkcí, kde integrály jsou spočteny metodou MC:

1) zvolíme vhodnou funkci  $\Psi_\alpha(\mathbf{q})$  závislou na s parametrech,  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_s)$ , kde obecně  $\mathbf{q} = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  pro N-částicový systém

2) spočítáme střední energii

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi_\alpha | H | \Psi_\alpha \rangle}{\langle \Psi_\alpha | \Psi_\alpha \rangle}$$

3) měníme parametry  $\alpha$  dokud nedosáhneme minima  $\langle E \rangle$

- otázka výpočtu  $\langle E \rangle$ :

- standardně analyticky, případně numericky pro nalo stupně volnosti, ovšem již pro 2 elektrony (částice) máme 6-rozm. integrál!

- problém přímého použití metody MC → vlnová fce je ve většině konfigur. prostoru zanedbatelná → nelze použít MC s vhodnou rozdělovací funkcí závislejší na  $\Psi_\alpha$   
→ Metropolisův algoritmus

- pro základní stav vlnová fce nemá nody (nuly) a lze ji uvážovat reálnou (BÚNO) pro reálný hamiltonián ⇒

⇒ má smysl definovat tzv. lokální energii

$$E(\mathbf{q}) = \frac{H\Psi_\alpha(\mathbf{q})}{\Psi_\alpha(\mathbf{q})} \quad (\text{konstanta, pokud } \Psi_\alpha(\mathbf{q}) \text{ je vlastní funkce } H)$$

- střední energii lze nyní vyjádřit

$$\langle E \rangle = \frac{\int d\mathbf{q} \Psi_\alpha^2(\mathbf{q}) E(\mathbf{q})}{\int d\mathbf{q} \Psi_\alpha^2(\mathbf{q})}$$

⇒ integrace pomocí MC s využitím Metropol. alg. s rozdělením  $S(\mathbf{q}) = \Psi_\alpha^2(\mathbf{q})$

## b) Difúzní Monte-Carlo

- umožňuje najít „přesnou“ energii základního stavu  $E_0$   
a příslušnou vlnovou funkci  $\psi_0$  z rozumného počátečního odhadu

- základní myšlenka: počáteční odhad  $\phi_0(x)$  vyvíjí se v čase

pomocí „difúzní rovnice“  $\partial_t \phi(x,t) = -H\phi(x,t)$

(jde o Schrödingerovu rovnici v imaginárním čase)

neboli  $\phi(x,t) = N(t) e^{-Ht} \phi_0(x)$ , kde  $N(t)$  je vhodný normalizační faktor

protože pro  $t \rightarrow \infty$  a nenulový překryv  $\phi_0$  s  $\psi_0$

konverguje  $\phi(x,t)$  právě k  $\psi_0$

proč? jsou-li  $\psi_i$  vlastní stavy  $H\psi_i = E_i\psi_i$ ,  $i=0,1,\dots$

a  $\phi_0(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \psi_i(x)$ , přičemž  $c_0 \neq 0$

pak vezmeme-li jako  $N(t) = e^{E_0 t}$ , pak

$$\begin{aligned}\phi(x,t) &= \sum_{i=0}^{\infty} e^{E_0 t} e^{-Ht} c_i \psi_i(x) = \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i e^{(E_0 - E_i)t} \psi_i(x) = \\ &= c_0 \psi_0(x) + \sum_{i=1}^{\infty} c_i e^{(E_0 - E_i)t} \psi_i(x) \\ &\quad \text{kde } E_0 - E_i < 0 \text{ pro } \forall i > 0\end{aligned}$$

a tedy  $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi(x,t) = c_0 \psi_0(x)$

- protože však  $E_0$  neznáme, nelze  $e^{E_0 t}$  použít přímo,

ale stačí rozumný odhad, protože ostatní členy jsou potlačovány výrazně rychleji než  $\psi_0(x)$

typická volba

$$N(t) = \exp\left(\int_0^t E_n(\tau) d\tau\right)$$

kde  $E_n(t)$  je „náštel“ správné hodnoty v čase  $t$ ,

např. období střední energie a pod. tak, aby  $E_n(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} E_0$

- takovou veličinou je

$$E(t) = \frac{\langle \phi_0 | H | \phi(t) \rangle}{\langle \phi_0 | \phi(t) \rangle}$$

kteřá pro  $t \rightarrow \infty$  jde k  $E_0$ , neboť  $\phi(t)$  jde k  $\psi_0$  a na normalizaci nezáleží

- pokud máme reálné funkce  $\phi_0$  a tedy i  $\phi$ , pak

$$E(t) = \frac{\langle \phi(t) | H | \phi_0 \rangle}{\langle \phi(t) | \phi_0 \rangle} = \frac{\int dx \phi(x,t) \phi_0(x) \varepsilon(x)}{\int dx \phi(x,t) \phi_0(x)} = \frac{\int G(x,t) \varepsilon(x) dx}{\int G(x,t) dx}$$

kde  $\varepsilon(x)$  je opět jako u variační metody M-C

$$\text{lokální energie} \quad \varepsilon(x) = \frac{H\phi_0(x)}{\phi_0(x)} \quad (*)$$

ovšem nyní máme místo  $|\psi(x)|^2$  váhu  $G(x,t)$ , která není známá a podle ní bychom měli generovat náhodné proměnné, pokud chceme  $E(t)$  počítat pomocí integrace Monte-Carlo

- trik: místo určení  $G(x,t)$  provádíme vývoj bodů, ve kterých provádíme integraci tak, aby odpovídaly rozdělení danému  $G(x,t)$ , přičemž začínáme s rozdělením daným  $G(x,0) = |\phi_0(x)|^2$  (např. pomocí Metropolisova-Hastingsova algoritmu)

$$\text{- funkce} \quad G(x,t) = \phi_0(x) \underbrace{e^{\int_0^t E(\tau) d\tau}}_{\phi(x,t)} e^{-Ht} \phi_0(x)$$

splňuje diferenciální rovnici (při o proderivování)

$$\frac{\partial G(x,t)}{\partial t} = \left[ E_n(t) - \phi_0(x) H \frac{1}{\phi_0(x)} \right] G(x,t)$$

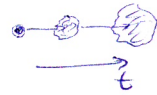
a speciálně pro  $H = -\frac{1}{2}\Delta + V(x)$  dostaneme

$$\frac{\partial G(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta G - \nabla \cdot [\vec{D}(x) G(x,t)] - [E(x) - E_n(t)] G(x,t)$$

kde  $E(x)$  je lokální energie (\*) pro  $\phi_0(x)$  a

$$\text{vektor} \quad \vec{D}(x) = \frac{1}{\phi_0(x)} \nabla \phi_0(x)$$

- kdyby nebyl přítomen člen  $-[\varepsilon(x) - E_n(t)] G(x, t)$ ,  
 měli bychom rovnici pro advekci - difúzi  
 popisující difúzi v proudící tekutině



pro niž lze řešení zapsat pomocí propagátoru (Greenovy funkce)

$$(ve\ 3D) \quad G_0(x, x', \Delta t) = \left(\frac{1}{(4\pi D \Delta t)^{3/2}}\right) e^{-\frac{1}{4\Delta t} [x - x' - \vec{D}(x') \Delta t]^2}$$

$$jako \quad \tilde{G}(x, t + \Delta t) = \int dx' G_0(x, x', \Delta t) \tilde{G}(x', t)$$

- působení členu  $-[\varepsilon(x) - E_n(t)]$  je obecně komplikované, ale

do řádu  $O(\Delta t^2)$  je možné psát (podobně jako ve split-operator metodě v QM)

$$G(x, t + \Delta t) = \int dx' P(x, x', \Delta t) G(x', t)$$

kde nyní

$$P(x, x', \Delta t) = e^{-[\varepsilon(x) - E_n(t)] \Delta t} G_0(x, x', \Delta t)$$

tento člen „maximalizuje“ řešení v místech s nejmenší lokální energií  
 člen odpovídá za posun ve směru  $\vec{D}(x)$  a difúzi během  $\sqrt{\Delta t}$

- algoritmus difúzního kvantového Monte-Carla

- 1) protože nejprve potřebujeme  $\phi_0(x)$ , může být výhodné nejprve provést variační Monte-Carlo, čímž dostaneme optimální  $\phi_0(x)$  na určitém prostoru funkce a zároveň počáteční rozdělení bodů podle  $|\phi_0(x)|^2$   
 - střední energie tohoto stavu je rovna

$$E(0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E(x_i)$$

a lze ji použít jako  $E_n(0)$

- 2) iterujeme v čase s krokem  $\Delta t$ , přičemž měníme rozdělení bodů  $\{x_i\} \xrightarrow{\Delta t} \{x'_i\}$  tak, aby odpovídalo  $G(x, t + \Delta t)$   
 což se provádí ve dvou krocích

a) posune-e a rozptýlí-e body  $x_i$  tak, že pro každé  $i$  vygenerujeme novou náhodnou polohu  $x_i'$  podle normálního rozdělení s  $\mu = x_i + D(x_i)\Delta t$  a  $\sigma = \sqrt{\Delta t}$  tj. podle

$$\sim \exp\left(-\frac{(x_i' - x_i - D(x_i)\Delta t)^2}{2\Delta t}\right)$$

b) váží-e každý nový bod faktorem

$$w_i = e^{-[\varepsilon(x_i') - E_n(t)]\Delta t}$$

přičemž pro  $w_i > 1$  (js-e v bodě s lokální energií menší než  $E_n(t)$ )

s pravděpodobností  $w_i - 1$  přidá-e další bod v  $x_i'$

zohledňuje o kolik je  $\varepsilon(x_i')$  menší než  $E_n(t)$

a pro  $w_i < 1$  naopak s pravděpodobností  $1 - w_i$

bod  $x_i'$  vyvažeme (dostali js-e se do míst s vyšší lokální energií)

- v průběhu vývoje počítá-e energii  $E(t)$ , která by měla jít k energii základního stavu  $E_0$

a  $E_n(t)$  lze upeř. nastřovat vždy na tuto energii  $E(t)$

ale jsou i jiné strategie volby