

2.14-16. Квантовые алгоритмы Монте-Карло в непрерывном времени

Представление взаимодействия. Общая формулировка CTWL-алгоритма.
Процедуры обновления конфигураций.
Расчет средних

Недостатки дискретных методов

- Одной из главных проблем дискретных по мнимому времени квантовых методов Монте-Карло является погрешность троттеровского разложения:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}\left(\prod_{k=1}^M e^{-\Delta\tau(V+K)}\right) \approx \text{Tr}(e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K} \dots e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K}) + O((\Delta\tau)^2)$$

- Систематическая погрешность разложения приводит к невозможности расчетов при достаточно низких температурах; кроме того, проблема неэргодичности схем расчета траекторных методов, связанная с локальностью алгоритма шахматной доски и трудностями расчета winding numbers, функций Грина и других нелокальных корреляторов, а также с работой алгоритма при постоянном числе частиц, тоже ограничивает эффективность использования дискретных методов
- Малая вероятность обновления траекторий. Вероятность создания пары кинк – антики $\frac{W_{new}}{W_{old}} \propto (t\Delta\tau)^2$

CTWL-алгоритм

- В 1996 г. Прокофьев, Свистунов и Тупицын предложили новый квантовый метод МК – *траекторный метод в непрерывном времени* (английская аббревиатура – CTWL, Continuous-Time World Line)
- Метод основывается на точном выражении для разбиения статистической суммы в представлении взаимодействия
- Метод свободен от систематической ошибки, связанной с троттеровским разбиением мнимого времени, и может быть применен для исследования достаточно произвольных решеточных (и не только) моделей; возможны расчеты как в малом, так и большом каноническом ансамблях
- CTWL-алгоритм напрямую суммирует ряды диаграмм для моделей в дискретном и непрерывном базисах

Представление взаимодействия

- Разобьем гамильтониан системы на основную часть и возмущение; это разбиение условно и диктуется только конкретной моделью и удобством работы с конкретными базисными функциями $H = H_0 + H_{int}$

- Мацубаровский оператор
$$e^{-\tau H} = e^{-\tau(H_0 + H_{int})} = e^{-\tau H_0} \sigma(\tau)$$
$$e^{\tau H} = \sigma^{-1}(\tau) e^{\tau H_0}$$

- Вид операторов
$$\tilde{H}(\tau) = e^{\tau H_0} H e^{-\tau H_0}; \quad \tilde{H}_{int}(\tau) = e^{\tau H_0} H_{int} e^{-\tau H_0}$$

- Уравнение для матрицы эволюции:
$$\sigma(\tau) = T_\tau \exp \left(- \int_0^\tau H_{int}(\tau') d\tau' \right)$$

- Упорядочение по времени для двух произвольных операторов:

$$T_\tau \{A(\tau_1) B(\tau_2)\} = \begin{cases} A(\tau_1) B(\tau_2), & \tau_1 > \tau_2; \\ \pm B(\tau_2) A(\tau_1), & \tau_1 < \tau_2 \end{cases}$$

Представление взаимодействия

- Свойства мацубаровского оператора эволюции:

$$\sigma(\tau_1, \tau_3) = \sigma(\tau_1, \tau_2)\sigma(\tau_2, \tau_3); \quad \tau_1 > \tau_2 > \tau_3$$

$$\sigma(\tau_1, \tau_2) = \sigma(\tau_1)\sigma^{-1}(\tau_2)$$

- Статистическая сумма системы:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\tau H_0} \sigma(\beta))$$

$$\sigma(\beta) = T_\tau \exp \left(- \int_0^\beta H_{int}(\tau) d\tau \right)$$

- Мацубаровская функция Грина в представлении взаимодействия:

$$G_{\sigma_1 \sigma_2}(i, j; \tau_1, \tau_2) = e^{\beta F} \begin{cases} -\text{Tr}[e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau_1) a_{i\sigma_1}(\tau_1) \sigma(\tau_1, \tau_2) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\tau_2)]; & \tau_1 > \tau_2 \\ +\text{Tr}[e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau_2) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\tau_2, \tau_1) a_{i\sigma_1}(\tau_1) \sigma(\tau_1)]; & \tau_1 < \tau_2 \end{cases}$$

$$e^{\beta F} = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\beta H_0} \sigma(\beta))$$

- С учетом временного упорядочения:

$$G_{\sigma_1 \sigma_2}(i, j; \tau_1, \tau_2) = -\frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H_0} T_\tau \{ a_{i\sigma_1}(\tau_1) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\beta) \})$$

Ряд возмущений для статистической суммы

- Разложение по степеням возмущения для мацубаровского оператора эволюции:

$$\begin{aligned}\sigma(\beta) &= 1 - \int_0^\beta V(\tau) d\tau + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' T_\tau \{V(\tau') V(\tau'')\} - \dots = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n T_\tau \{V(\tau_1) \dots V(\tau_n)\}\end{aligned}$$

- Выражение для статистической суммы:

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta H_0} \left[1 - \int_0^\beta d\tau V(\tau) + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V(\tau_1) V(\tau_2) - \dots \right] \right)$$

- Дискретный аналог:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_1, n_2, \dots, n_N\} \\ \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_N \\ \tau_{N+1} \equiv \tau_1}} (-\Delta\tau)^N \prod_{k=0}^N (\langle n_k | V(\tau_k) | n_{k+1} \rangle e^{-(\tau_{k+1} - \tau_k) E_k})$$

Общая формулировка CTWL-алгоритма

- Недиагональная часть гамильтониана:

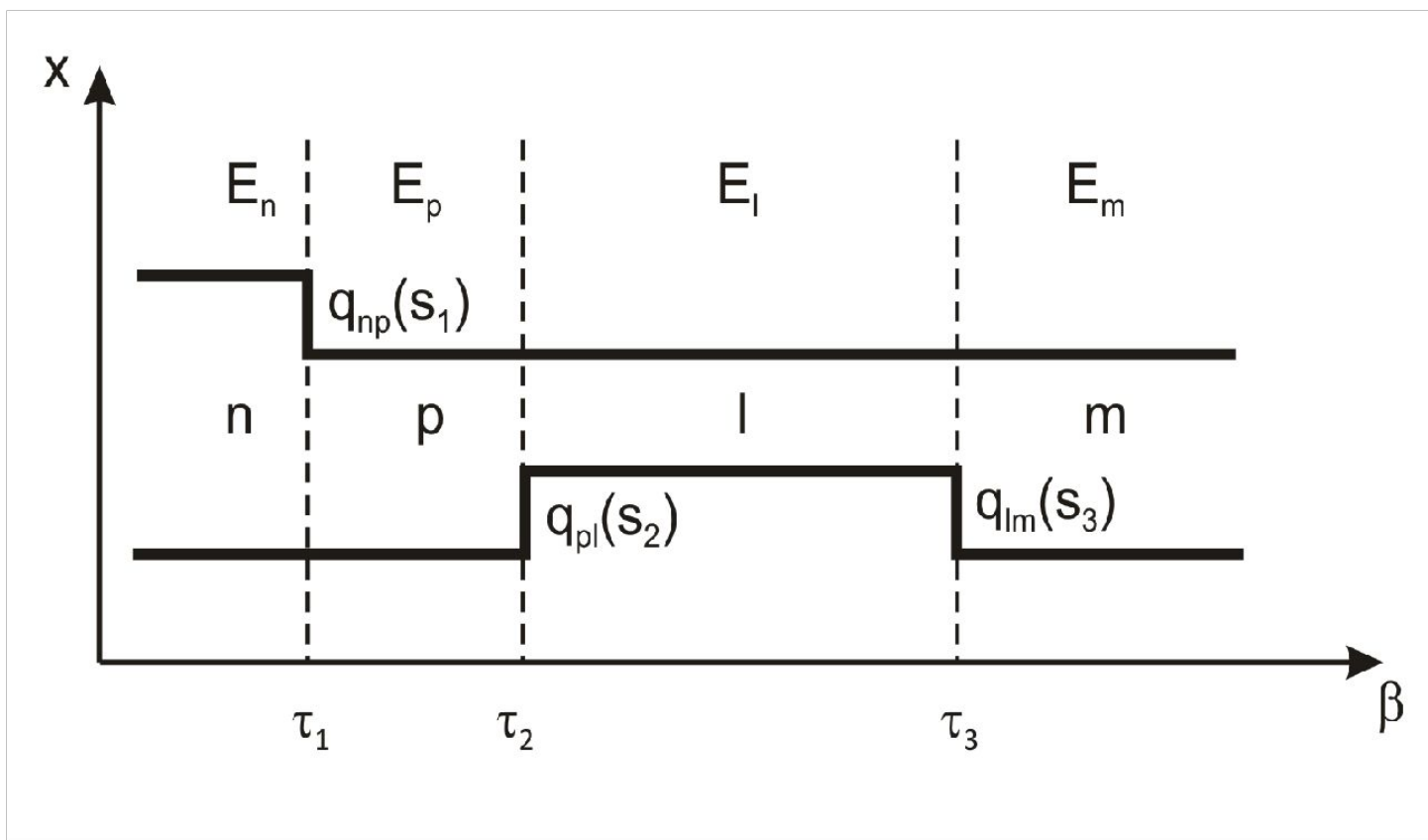
$$V = \sum_s Q_s; \quad Q_s |n\rangle = -q_{mn}(s) |m\rangle$$

- Разложение оператора эволюции:

$$\begin{aligned} \sigma_{nm} = & \delta_{nm} + \sum_s \int_0^\beta d\tau q_{nm}(s) e^{\tau E_{nm}} + \dots + \\ & + \sum_{s_1, \dots, s_k} \int_0^\beta d\tau_k \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 q_{np}(s_p) e^{\tau_k E_{np}} \dots q_{lm}(s_1) e^{\tau_1 E_{lm}} + \dots \end{aligned}$$

- Теперь мгновенную конфигурацию системы составляет совокупность кинков с соответствующими энергиями переходов и временными интервалами

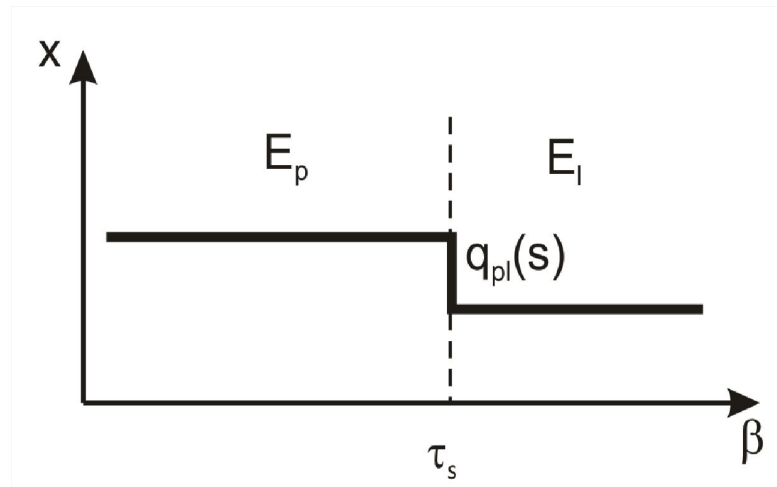
Общая формулировка CTWL-алгоритма



$$\sum_{s_1, s_2, s_3} \int_0^\beta d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 q_{np}(s_1) e^{\tau_1 E_{np}} q_{pl}(s_2) e^{\tau_2 E_{pl}} q_{lm}(s_3) e^{\tau_3 E_{lm}}$$

Общая формулировка CTWL-алгоритма

- Главный элемент конфигурации – кинк сорта s и его параметры – матричный элемент, диагональная энергия переходов и его положение на временной шкале:

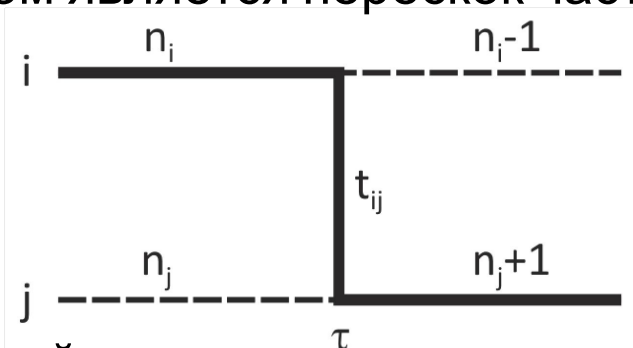


- Фактически CTWL-метод Монте-Карло производит полное суммирование фейнмановских диаграмм

CTWL-алгоритм для дискретного базиса

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} (a_i^+ a_j + h.c.) + \sum_i \Delta_i n_i + \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j$$

- Удобным базисом для узельной модели является представление чисел заполнения, так что за возмущение выбирается недиагональная в этом базисе кинетическая энергия, и тогда кинком является перескок частицы между узлами:

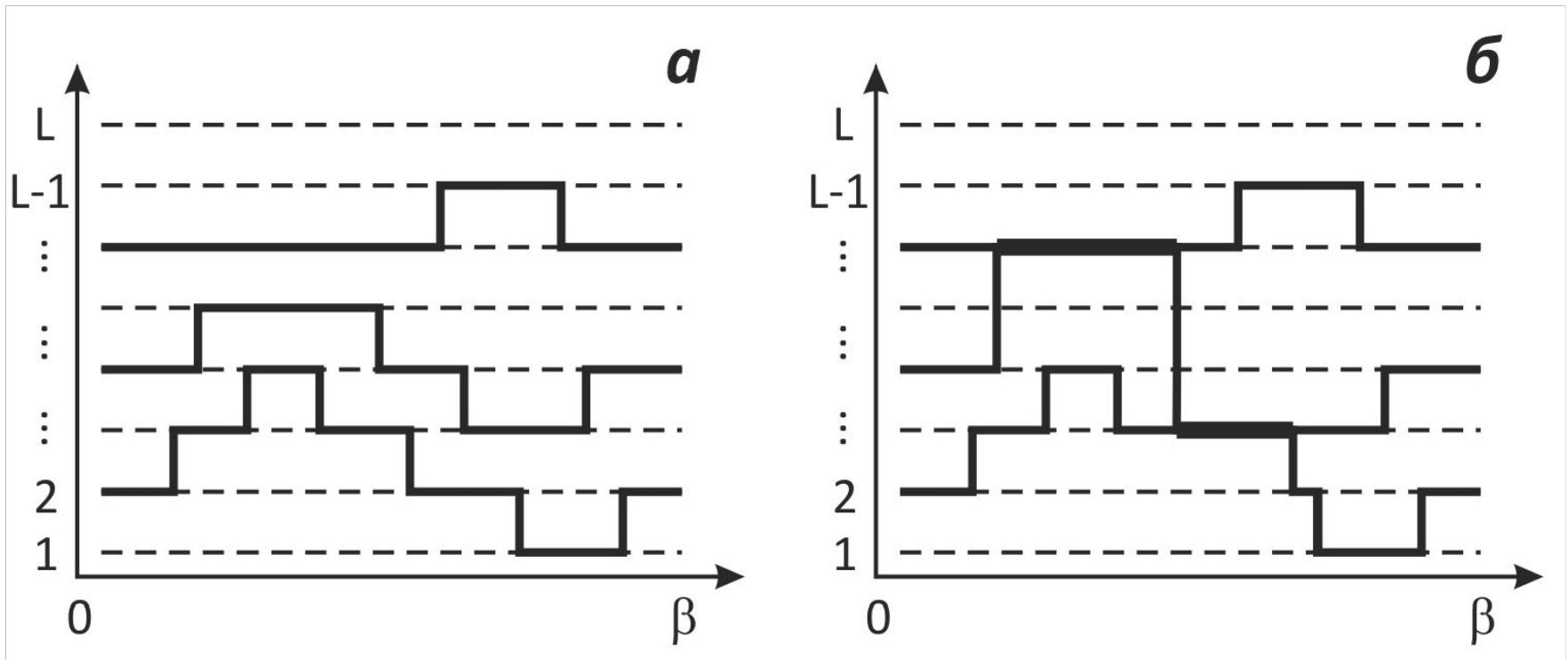


$$\sqrt{n_i(n_j + 1)} t_{ij} d\tau e^{\tau(\Delta_i - \Delta_j)}$$

- Каждый кинк вносит в статистический вес малый множитель $\sim d\tau$, но это не препятствует вычислениям – взвешивается *не отдельная конфигурация, а их совокупность* в некотором интервале. Малость статистического веса в точности компенсируется большим количеством возможных топологически равных конфигураций, отличающихся только расположением времен на шкале мнимого времени

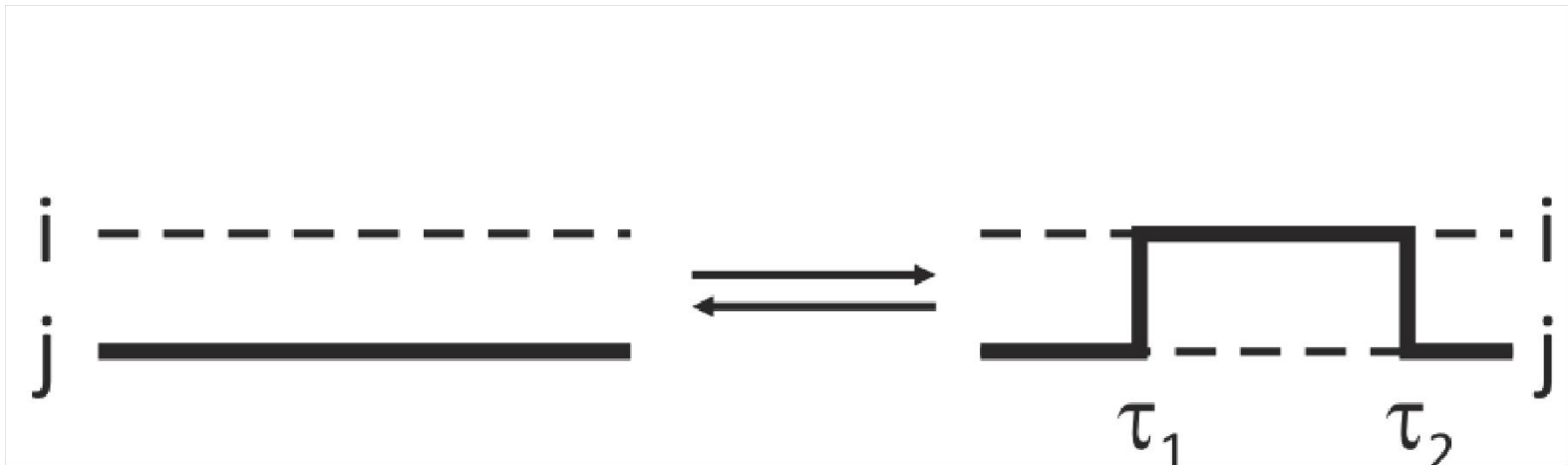
Общая формулировка CTWL-алгоритма

- Вид мгновенных конфигураций для ферми- и бозе-систем:



Общая формулировка CTWL-алгоритма

- Простейший способ изменения конфигурации – процедура *kink-antikink*:



- Помимо процедуры *kink-antikink* требуются глобальные обновления системы, изменяющие числа оборотов траекторий

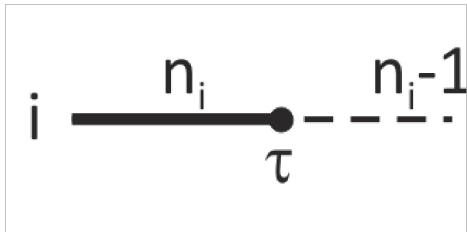
Общая формулировка STWL-алгоритма

- Проводить вычисления более удобно в большом каноническом ансамбле, т.е. с нефиксированным числом частиц. Для того чтобы схема могла работать с переменным числом частиц, в гамильтониан можно ввести *фиктивное слагаемое*:

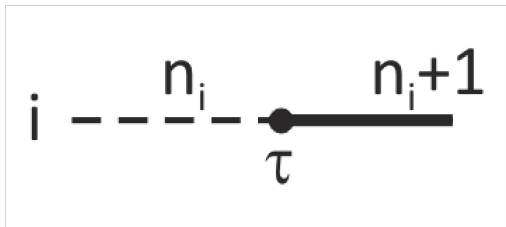
$$\Delta H = \eta \sum_i (a_i^+ + a_i)$$

- Фиктивному слагаемому в гамильтониане соответствуют кинки, создающие разрывы траекторий. При расчете физических величин учитываются только те конфигурации, в которых нет разрывов траекторий. Фиктивные конфигурации используются только как промежуточные для эффективного обновления реальных конфигураций

Общая формулировка STWL-алгоритма



$$-\sqrt{n_i}\eta d\tau e^{\tau(\Delta_i-\mu)}$$

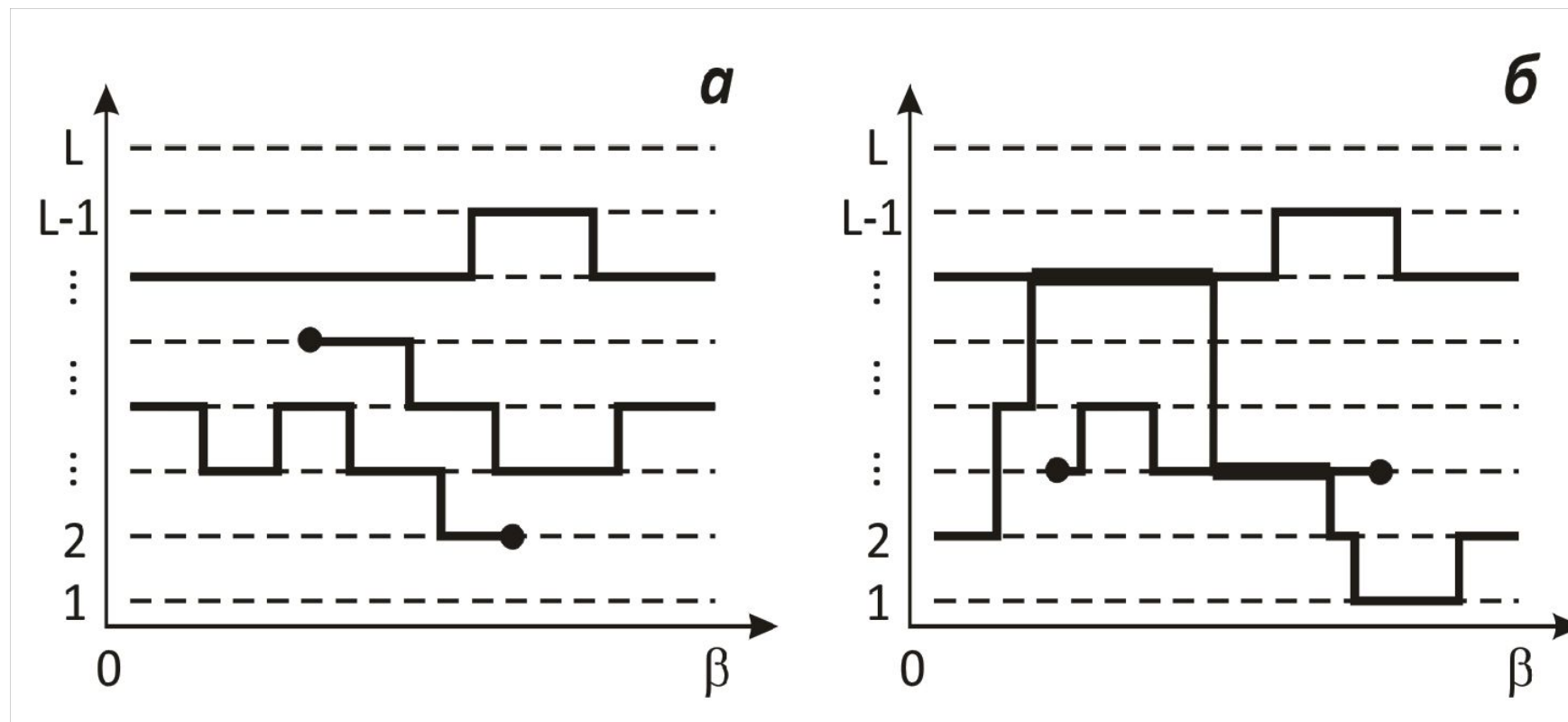


$$-\sqrt{n_i+1}\eta d\tau e^{-\tau(\Delta_i-\mu)}$$

- Теперь множество вариантов конфигураций с замкнутыми траекториями оказалось дополненным фиктивными конфигурациями траекторий с разрывами
- Разрывы, перемещаясь по системе, могут встречаться и взаимно уничтожаться на любом узле, изменяя полное число частиц в системе и числа оборотов траекторий. Разомкнутые траектории с разрывами называются *червями (worms)*, а сам алгоритм называется *червячным алгоритмом (worm algorithm)*
- Фиктивные (виртуальные) состояния с присутствием червей чрезвычайно ускоряют сходимость

Общая формулировка CTWL-алгоритма

- Мгновенные конфигурации мировых линий с разрывами:

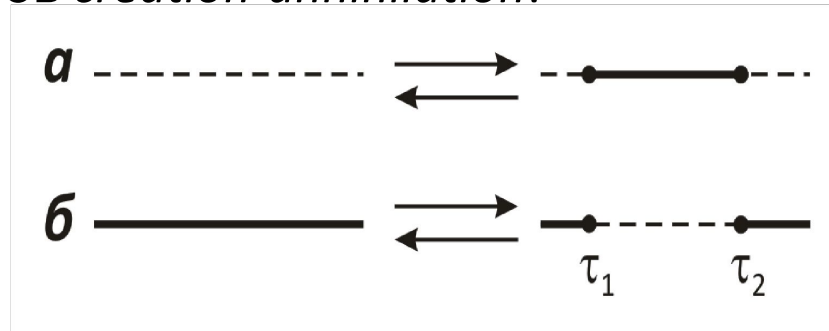


Общая формулировка STWL-алгоритма

- Квантово-механические средние от физических величин по-прежнему вычисляются по состояниям без разрывов
- Фиктивные состояния также несут физическую информацию, например, они отражают статистику мацубаровской функции Грина
- Главные процессы обновления траекторий, формирующие статистику, – процедуры изменения состояний разрывов траекторий (червей)
- В статистический вес конфигурации без разрывов множитель η не входит, а потому соотношения между статистическими весами состояний без червей остаются неизменными. Следовательно, значение η можно выбирать произвольно, исходя из соображений удобства и скорости расчета
- В зависимости от задачи можно либо ввести ограничение на количество червей в системе, либо допустить возможность появления произвольного числа червей

Процедура *creation-annihilation*

- Пара процессов *creation-annihilation*:



- Статистический вес новой конфигурации:

$$W^{(new)} = W^{(old)} (-\eta_i d\tau \sqrt{n_i + 1})^2 e^{-(\tau_2 - \tau_1)(\Delta_i - \mu)}$$

- Уравнение детального баланса:

$$W^{(old)} P_{\rightarrow} p_{\rightarrow} = W^{(new)} P_{\leftarrow} p_{\leftarrow}$$

- Согласно алгоритму Метрополиса

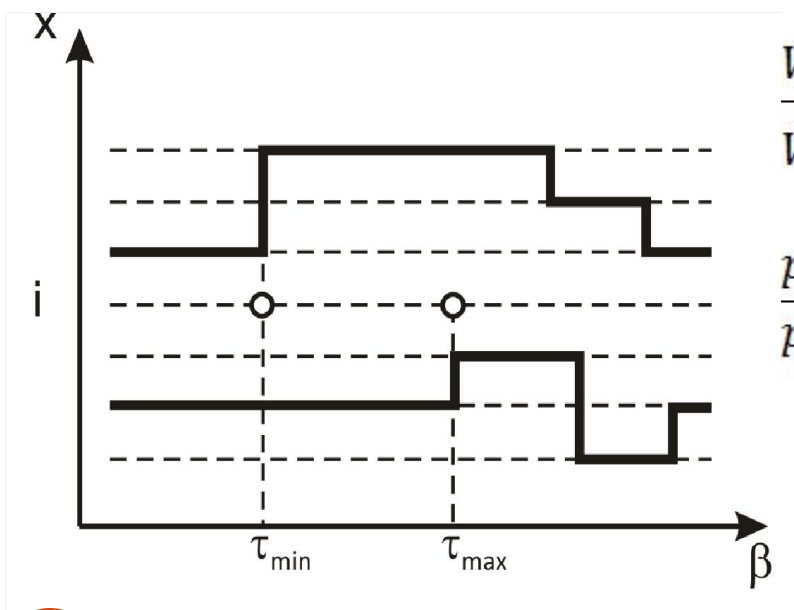
$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \begin{cases} W_c = \frac{W^{(new)}}{W^{(old)}} \frac{P_{\rightarrow}}{P_{\leftarrow}} = J(-\eta_i d\tau \sqrt{n_i + 1})^2 e^{-(\tau_2 - \tau_1)(\Delta_i - \mu)}, & W_c < 1; \\ 1, & W_c \geq 1 \end{cases}$$

Процедура *creation-annihilation*

- Такая реализация процедуры неэффективна:

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} \sim (d\tau)^2 \rightarrow 0$$

- Нужно сравнивать не две конкретные конфигурации, а *классы* конфигураций
- Временное окно для класса конфигураций:



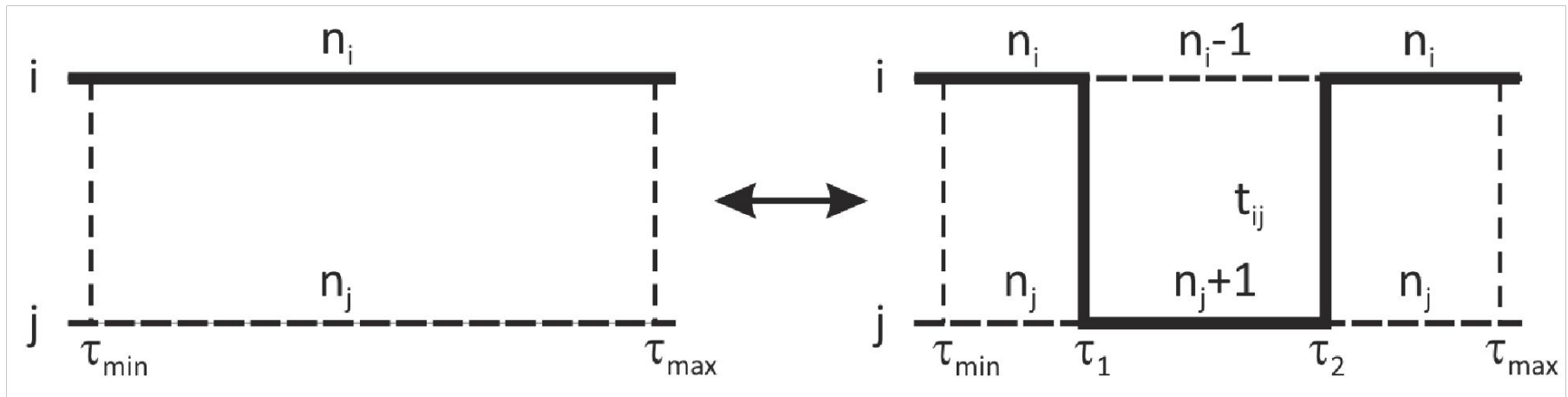
$$\frac{W_{new}^f}{W_{old}^f} = \eta_i^2 (n_i + 1) \int_{\tau_{min}}^{\tau_{max}} d\tau_2 \int_{\tau_{max}}^{\tau_{max}-\tau_2} d\tau_1 e^{(\tau_2-\tau_1)(\Delta_i-\mu)}$$

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \frac{W_{new}^f}{W_{old}^f} \frac{P_{\rightarrow}}{P_{\leftarrow}} = J \eta_i^2 (n_i + 1) Z_2(\tau_{max} - \tau_{min}, \Delta_i - \mu)$$

$$Z_2(\tau, Q) = \frac{e^{\tau Q} - \tau Q - 1}{Q^2}$$

Процедура рождения пары КИНК-АНТИКИНК

- Процедуры рождения и уничтожения пары кинк-антикинк с изменением чисел заполнения:



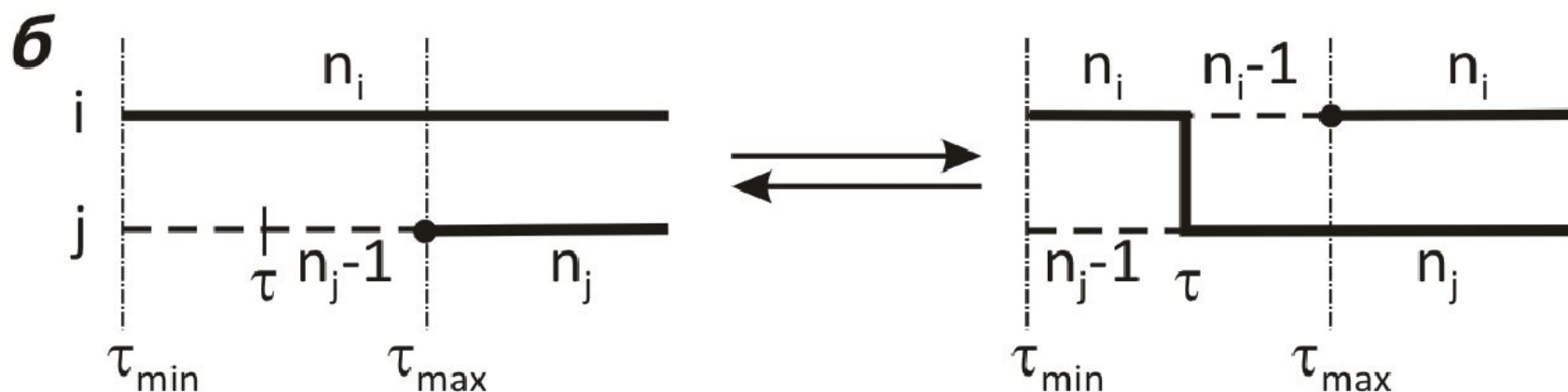
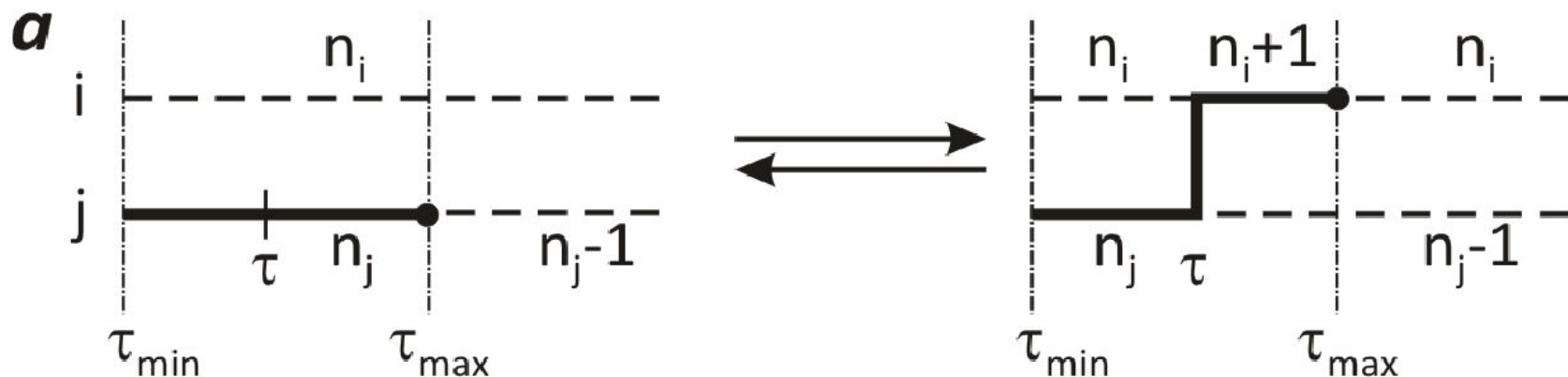
Процедура рождения пары КИНК-АНТИКИНК

- Формулы для балансного уравнения:

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \begin{cases} W_c = \frac{W^{(new)} p_{\rightarrow}}{W^{(old)} p_{\leftarrow}} = \\ = \frac{J}{J+4} t_{ij}^2 n_i (n_j + 1) Z_2(\tau_{max} - \tau_{min}, \Delta_j - \Delta_i), & W_c < 1, \\ 1, & W_c \geq 1 \end{cases}$$

$$\frac{p_{\leftarrow}}{p_{\rightarrow}} = \begin{cases} W_a = \frac{W^{(old)} p_{\leftarrow}}{W^{(new)} p_{\rightarrow}} = \\ = \frac{J-4}{J} \frac{1}{t_{ij}^2 n_i (n_j + 1) Z_2(\tau_{max} - \tau_{min}, \Delta_j - \Delta_i)}, & W_a < 1, \\ 1, & W_a \geq 1 \end{cases}$$

Процедуры *jump-antijump* и *reconnection-antireconnection*



Процедуры *jump-antijump* и *reconnection-antireconnection*

- Процедура *jump-antijump* – процесс переброса хвоста траектории на другой пространственный узел

$$W^{(old)} \sim (-d\tau\eta_i\sqrt{n_i})e^{-(\tau_{max}-\tau_{min})(\Delta_i-\mu)}$$

$$W^{(new)} \sim \left(-d\tau\eta_j\sqrt{n_j+1}\right)\left(d\tau t_{ij}\sqrt{n_i(n_j+1)}\right) \times e^{-(\tau_{max}-\tau_{min})(\Delta_i-\mu)}e^{-(\tau-\tau_{min})(\Delta_j-\mu)}$$

$$\frac{W^{(new)}}{W^{(old)}} = d\tau t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) e^{(\tau-\tau_{min})(\Delta_j-\Delta_i)}$$

- Сравним теперь исходную траекторию с прямым хвостом с *классом* траекторий, у которых прыжок червя (кинк) не фиксирован по времени

Процедуры *jump-antijump* и *reconnection-antireconnection*

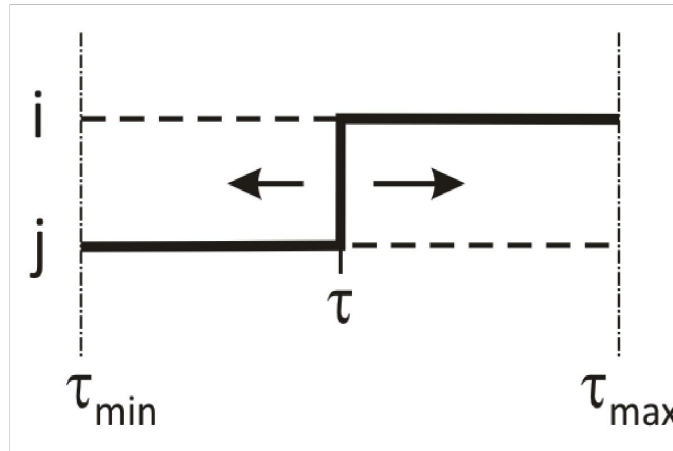
- Для класса траекторий:

$$\frac{W_{new}^f}{W_{old}^f} = t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) Z_1(\tau_{max} - \tau_{min}, Q); \quad Z_1(\tau, Q) = \frac{e^{\tau Q} - 1}{Q}$$

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \begin{cases} W_{jump} = z \frac{W^{(new)}}{W^{(old)}} W_{\rightarrow}(\tau) = \\ = z t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) Z_1(\tau_{max} - \tau_{min}, Q), & W_{jump} < 1; \\ 1, & W_{jump} \geq 1 \end{cases}$$

$$\frac{p_{\leftarrow}}{p_{\rightarrow}} = \begin{cases} W_{antijump} = \frac{W^{(old)}}{z W^{(new)} W_{\rightarrow}(\tau)} = \\ = \frac{\eta_i}{z \eta_j t_{ij} (n_j + 1) Z_1(\tau_{max} - \tau_{min}, Q)}, & W_{antijump} < 1; \\ 1, & W_{antijump} \geq 1 \end{cases}$$

Процедура *shift*



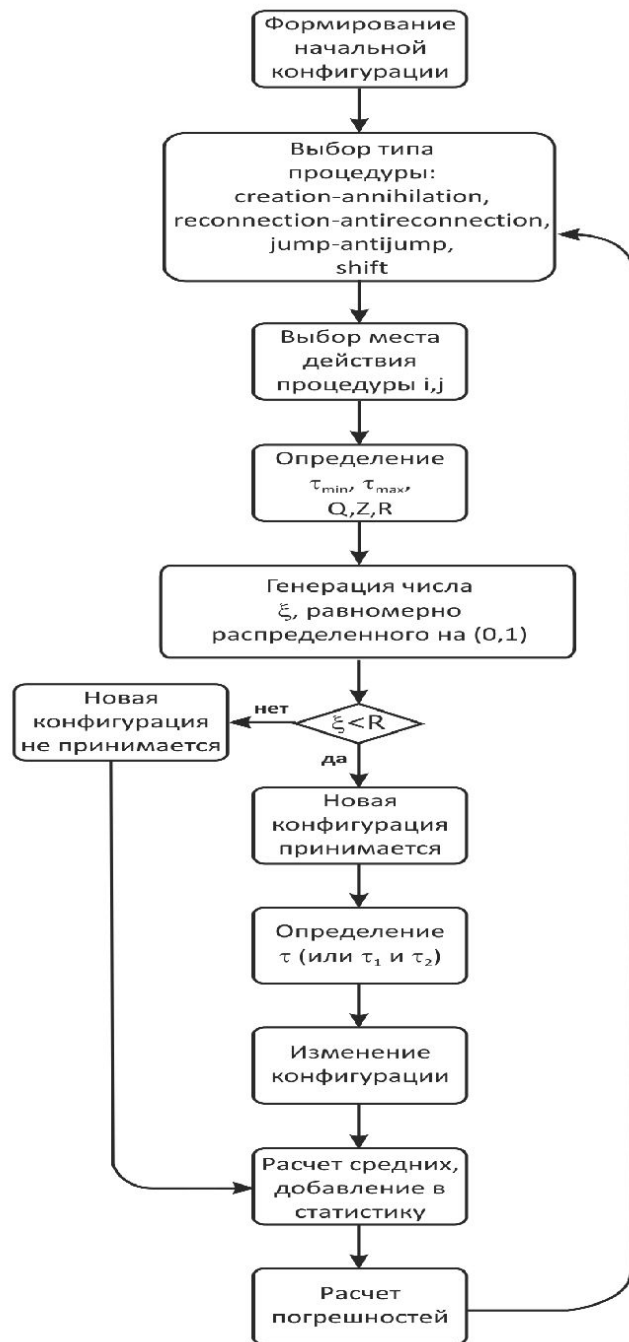
- Процедура сдвига не нуждается в обратном процессе, потому что самf себе служит обратным процессом

$$W(\tau) = \frac{1}{Z_1} e^{(\tau - \tau_{min})Q};$$
$$R \equiv \frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = 1$$

- Процедура сдвига происходит безусловно

Схема алгоритма

- Формируется начальная конфигурация – это могут быть, например, прямые замкнутые линии без перескоков. Можно взять в качестве начального состояния вообще пустое пространство с отсутствием частиц или любую другую допустимую конфигурацию
- Случайным образом выбирается тип процедуры
- Выбирается место действия процедуры и границы временного окна
- Рассчитываются коэффициента и нормировочные множители
- В зависимости от значения R процесс случайным образом принимается или отвергается
- Для некоторых процессов определяются временные точки
- Рассчитываются и суммируются необходимые средние от физических величин. Затем процесс повторяется, начиная с п. 2
- Все погрешности величин рассчитываются в соответствии с автокорреляционным анализом



Расчет средних

- Среднее значение оператора:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n \langle n | A e^{-\beta H} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle} = \frac{\sum_{MC} \langle n_1 | A | n_1 \rangle \text{sgn} W}{\sum_{MC} \text{sgn} W}$$

- Кинетическая энергия:

$$\langle K \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\sum_{MC} N_{\text{kin}} \text{sgn} W}{\sum_{MC} \text{sgn} W}$$

- Диагональные средние, например число частиц, потенциальная энергия, рассчитываются легко. Для этого следует на каждом диагональном участке траекторий рассчитать произведение значения соответствующего оператора на этом участке на длину этого участка, и затем усреднить результат по всей конфигурации:

$$\langle N \rangle = \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_J n(\tau_J) \tau_J \right\rangle; \quad \langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_J V(\tau_J) \tau_J \right\rangle$$

Расчет средних

- Для расчета недиагональных средних следует производить сбор статистики по фиктивным состояниям. Сбор гистограммы по взаимному пространственно-временному положению двух хвостов червя приводит к расчету температурной функции Грина:

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i,j;\tau) = -\text{Tr}(a_{i\sigma_1}(\tau)a_{j\sigma_2}^+(0)); \quad 0 < \tau < \beta$$

- и ее предельного случая при равных временах – матрицы плотности:

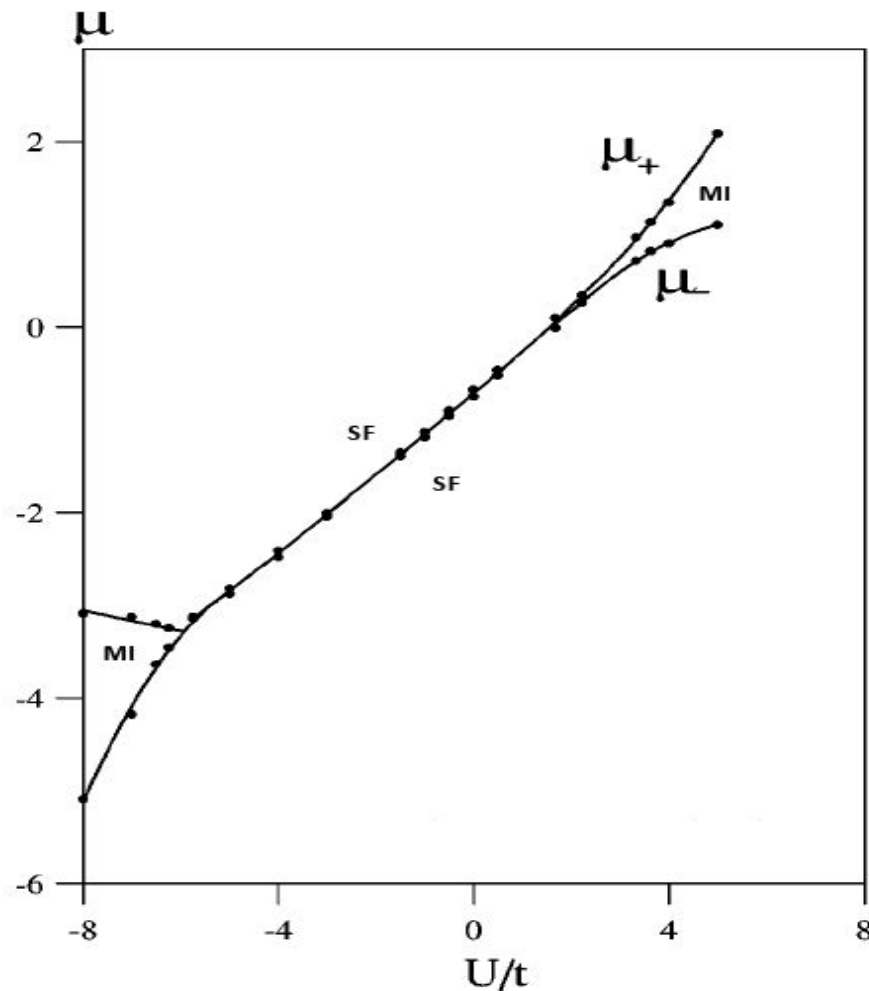
$$\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = G_{\sigma\sigma}(i,j;\tau)|_{\tau \rightarrow -0}$$

- Нормировка:

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i,j;\tau)|_{i=j;\sigma_1=\sigma_2=\sigma;\tau \rightarrow -0} = \langle n_{i\sigma} \rangle$$

Примеры расчетов при помощи CTWL-алгоритма

- Фазовая диаграмма редуцированной одномерной модели Бозе – Хаббарда:



Примеры расчетов при помощи CTWL-алгоритма

- Эволюция одночастичной матрицы плотности в зависимости от плотности системы в двумерной модели Бозе – Хаббарда:

