

ТОЧНЫЙ ПРОЦЕСС КВАНТОВОГО МОНТЕ КАРЛО ДЛЯ СТАТИСТИКИ ДИСКРЕТНЫХ СИСТЕМ

Н.В.Прокофьев, Б.В.Свистунов, И.С.Тупицын

Российский Научный Центр "Курчатовский Институт"

123182 Москва, Россия.

Поступила в редакцию 20 ноября 1996 г.

Мы предлагаем точный монтекарловский подход для статистики дискретных квантовых систем, который не использует стандартного разбиения мнимого времени на сетку и не содержит малых параметров. Метод оперирует дискретными объектами – кинками, описывающими виртуальные переходы в разные моменты времени. Глобальная статистика кинков воспроизводится точными локальными процедурами, главная из которых основывается на известном решении для асимметричной двухуровневой системы.

PACS: 05.30.Ch, 02.50.Ng

1. Метод квантового Монте-Карло (МК) является наиболее мощным, если не единственным доступным методом получения точных результатов для сложных систем [1-7], где аналитическое решение невозможно, а метод точной диагонализации не работает из-за высокой размерности гильбертова пространства. Обычно стартуют с общего выражения для температурного среднего $\langle A \rangle = \text{Sp} A e^{-\beta H} / Z(\beta)$, где $Z(\beta) = \text{Sp} e^{-\beta H}$ – статистическая сумма для гамильтониана H , и преобразуют шпур в фейнмановский интеграл по траекториям [8]. При суммировании по траекториям с весовыми функциями e^{-S} , определяемыми действием S , интервал мнимого времени $[0, \beta]$ разбивается на $N_\beta = \beta / \Delta\tau$ интервалов размером $\Delta\tau$ и траектория параметризуется заданием состояний системы $|\alpha_k\rangle$ в каждый момент времени $\tau_k = k\Delta\tau$, где $k = 0, 1, \dots, N_\beta$. Для суммирования только по траекториям с действием, близким к оптимальному, полная сумма заменяется на стохастическую (известный алгоритм Метрополиса [9]). В наиболее часто используемой схеме вероятности $W_{1,2}$ встретить траектории $\{\alpha_k\}_{1,2}$ в статистической сумме связаны соотношением:

$$W_1 / W_2 = e^{S_2 - S_1} . \quad (1)$$

После того, как траектория принята в статистику, МК процесс предлагает малое изменение этой траектории, которое принимается либо нет в соответствии с (1).

Приближенные действия с некоммутирующими операторами, обусловленные разбиением оси времени на сетку в тех точках, где траектория меняется, то есть когда $|\alpha_k\rangle \neq |\alpha_{k+1}\rangle$ (такие точки в дальнейшем называются кинками), ведут к погрешности схемы $\sim \Delta\tau^2$ (см., например, [10]). Уменьшение $\Delta\tau$ ликвидирует эту погрешность, но при этом алгоритм начинает набирать статистику все более медленно. Рассмотрим как характерный случай гамильтониан частицы на решетке

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j + \sum_i U_i n_i , \quad (2)$$

где a_i^\dagger – оператор рождения частицы на узле i , t – амплитуда перескока, $n_i = a_i^\dagger a_i$, а $\langle ij \rangle$ означает суммирование по ближайшему окружению.

В качестве набора состояний $\{\alpha\}$ может быть выбрана координата частицы. Типичное расстояние во времени между двумя соседними кинками имеет величину порядка $1/t$ и не зависит от $\Delta\tau$, так что при малом $\Delta\tau$ имеется $1/t\Delta\tau \gg 1$ интервалов временной сетки между кинками. Если МК процесс предлагает создать новую пару кинк-антикинк, то соответствующее изменение траектории, вероятнее всего, отвергается, поскольку $W_{new}/W_{old} \sim (t\Delta\tau)^2$ пропорционально квадрату малого параметра. Если же МК процесс предлагает переместить положение уже существующего кинка в соседнюю точку по времени, то соответствующее изменение траектории принимается с вероятностью $\sim O(1)$. Таким образом, в среднем, предпринимается порядка $1/(t\Delta\tau)^2$ попыток для рождения новой пары кинк-антикинк, и порядка $1/(t\Delta\tau)$ попыток на минимальное смещение кинка по времени. В результате алгоритм становится все более неэффективным, когда $\Delta\tau$ уменьшается.

В этой статье мы показываем, что для любого гамильтониана с дискретным гильбертовым пространством существует точный МК процесс, в котором описание как траекторий во времени так и их действий не основано ни на каких приближениях, и который по крайней мере в $1/(t\Delta\tau)^2$ раз быстрее в наборе статистики, чем общепринятые схемы.

Прежде всего, для дискретных систем, типа (2), любая траектория может быть описана без временной сетки – достаточно задать начальное состояние в $\tau = 0$ и в конечном числе точек $\{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$, где состояние менялось с $|\alpha_{k-1}\rangle$ на $|\alpha_k\rangle$. В данном описании действие траектории известно точно, поскольку при вычислении S можно формально перейти к пределу $\Delta\tau \rightarrow 0$. Однако проблема рождения новых пар кинк-антикинк ставит непреодолимое (на первый взгляд) препятствие: вероятность принятия траектории с одной дополнительной парой кинков формально стремится к нулю ($W_{new}/W_{old} \sim (t\Delta\tau)^2 \rightarrow 0$), так что алгоритм, на уровне сравнения двух траекторий, не позволяет изменить число кинков. Данная проблема может быть разрешена, если известна точная интегральная статистика траекторий с заданным числом кинков. Количество кинков на траектории варьируется тогда путем сравнения этих интегральных вероятностей. Мы показываем в явном виде, как получить такую интегральную статистику для произвольной дискретной системы в заданном временном интервале шириной τ_0 , путем сведения ее к статистике асимметричной двухуровневой системы.

2. Пусть H_0 и V описывают соответственно диагональную и недиагональную части гамильтониана H в представлении, отвечающем полному набору $\{\alpha\}$ собственных векторов H_0 , $H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$. Тогда статистический оператор может быть выражен через мацубаровский оператор эволюции σ в представлении взаимодействия $e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0}\sigma$, где

$$\sigma = 1 - \int_0^\beta d\tau V(\tau) + \dots + (-1)^m \int_0^\beta d\tau_m \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 V(\tau_m) \dots V(\tau_1) + \dots, \quad (3)$$

а $V(\tau) = e^{\tau H_0} V e^{-\tau H_0}$. Без ограничения общности и в соответствии с типичной формой гамильтонианов, представляющих интерес, оператор V может быть записан в виде суммы элементарных членов Q_s , чье действие на произвольную функцию из набора $\{\alpha\}$ переводит ее в другую функцию из того же набора:

$$V = \sum_s Q_s; \quad Q_s|\alpha\rangle = -q_{\gamma\alpha}(s)|\gamma\rangle \quad (\gamma = \gamma(s, \alpha)). \quad (4)$$

Из эрмитовости V следует, что для любого s из суммы (4) найдется s' , такое что $Q_{s'} = Q_s^\dagger$. Перепишем (3) в матричном виде (обозначая $E_\alpha - E_\gamma = E_{\alpha\gamma}$):

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\gamma} &= \delta_{\alpha\gamma} + \sum_s \int_0^\beta d\tau q_{\alpha\gamma}(s) e^{\tau E_{\alpha\gamma}} + \dots \\ &+ \sum_{s_1, \dots, s_m} \int_0^\beta d\tau_m \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 q_{\alpha\nu}(s_m) e^{\tau_m E_{\alpha\nu}} \dots q_{\lambda\gamma}(s_1) e^{\tau_1 E_{\lambda\gamma}} + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Заметим, что здесь нет дополнительного суммирования по индексам промежуточных полных наборов (обозначенным греческими буквами), поскольку они определяются единственно возможным способом по заданной конфигурации (s_1, s_2, \dots, s_m) .

Ограничимся случаем взаимодействия конечного радиуса действия, потребовав, чтобы для каждого элементарного оператора сорта s_1 из набора $\{Q_s\}$ имелось лишь конечное число сортов s_2 , для которых не выполняется условие

$$[Q_{s_1}(\tau_1), Q_{s_2}(\tau_2)] = 0. \quad (6)$$

Тогда структура ряда (5) существенно упрощается, что является важным для практической реализации нашего алгоритма. Из (6) следует, что с точностью до непринципиального изменения индексов у энергии состояний и матричных элементов, можно не обращать внимания на хронологическое упорядочение Q_{s_1} и Q_{s_2} в операторе эволюции. Это позволяет представить общий член ряда (5) в следующем виде. Определим понятие кинка сорта s . Будем описывать его (i) положением τ во времени, (ii) матричным элементом $q_{\alpha\gamma}(s)$ и (iii) разностью диагональных энергий $E_{\alpha\gamma}$. Последние две характеристики мы будем называть параметрами кинка. Существенно, что (i) для определения параметров кинка нам не нужна полная информация о состоянии $|\alpha\rangle$ или $|\gamma\rangle$ - достаточно лишь локальной информации; (ii) для задания структуры члена ряда (5), включая хронологический порядок всех некоммутирующих операторов, достаточно определить для каждого кинка только его *ассоциативных соседей*, то есть ближайшие к нему по времени кинки, с кем он не может быть переставлен местами.

Теперь можно ввести стохастический процесс, непосредственно вычисляющий (5). Пусть все $q_{\alpha\beta}(s)$ являются действительными и положительными. (Во многих частных случаях возможно прямое обобщение на случай комплексных $q_{\alpha\beta}(s)$, но это, как правило, ведет к ухудшению набора статистики.) Суммирование и интегрирование в (5) может быть тогда проинтерпретировано как усреднение по статистике различных конфигураций кинков, где каждая конфигурация задается определением числа кинков данного сорта, их ассоциативными соседями и положениями на оси мнимого времени. Наша цель состоит в организации стохастического процесса набора такой статистики путем перебора различных конфигураций кинков в соответствии с их весами. Процесс будет состоять из ряда независимых подпроцессов, осуществляющих модификации определенного типа. Простейшим подпроцессом является случайный сдвиг кинка по оси времени на интервале между левым и правым ассоциативными соседями. Весовая функция для этого подпроцесса есть просто $\exp(\tau E_{\alpha\gamma})$, где τ - положение кинка, а $E_{\alpha\gamma}$ - соответствующее изменение энергии. Однако, такими процессами перебирается лишь часть траекторий, поскольку они не меняют ни числа кинков, ни их взаимных ассоциаций.

Подпроцессом, способным осуществлять указанные изменения (и поэтому играющим главную роль во всей процедуре), является процесс рождения пары кинк – антикинк. Определим понятие “подходящего” временного интервала (по отношению к паре кинк – антикинк сорта $s - s'$) как интервала мнимого времени длиной τ_0 , на котором (i) находится либо одна и только одна пара кинк – антикинк сорта $s-s'$ (случай A), либо нет ни одной такой пары (случай B), (ii) нет ни одного кинка, ассоциированного с одним из кинков пары $s - s'$ (для случая A). Заметим теперь, что суммарный вклад конфигураций класса A (проинтегрированный по всем положениям пары внутри интервала τ_0 и проинтегрированный и отсуммированный по всем возможным конфигурациям остальных кинков) отличается от суммарного вклада конфигураций класса B множителем

$$I_{\alpha\gamma}^{(2)}(s) = \int_{\tau_a}^{\tau_a + \tau_0} d\tau_2 \int_{\tau_a}^{\tau_2} d\tau_1 q_{\alpha\gamma}(s') e^{\tau_2 E_{\alpha\gamma}} q_{\gamma\alpha}(s) e^{\tau_1 E_{\gamma\alpha}}, \quad (7)$$

где τ_a - произвольно выбранная левая граница интервала. Элементарное интегрирование дает

$$I_{\alpha\gamma}^{(2)}(s) = \frac{|q_{\gamma\alpha}(s)|^2}{E_{\alpha\gamma}^2} [e^{\tau_0 E_{\alpha\gamma}} - \tau_0 E_{\alpha\gamma} - 1]. \quad (8)$$

Это соотношение позволяет нам взвесить указанные два класса. Найдя подходящий интервал мнимого времени, мы обновляем его содержимое по следующему правилу. Сначала мы безусловно стираем пару кинков $s - s'$, если она есть. Затем мы либо создаем другую пару $s - s'$ (с вероятностью w_A), либо (с вероятностью $w_B = 1 - w_A$) ничего не делаем. Здесь

$$w_A/w_B = I_{\alpha\gamma}^{(2)}(s). \quad (9)$$

В первом случае мы должны еще случайным образом выставить положения кинка и антикинка согласно распределению, задаваемому фактором $e^{(\tau_2 - \tau_1) E_{\alpha\gamma}}$.

Кинк-антикинк-подпроцесс основывается на том важном общем обстоятельстве, легко усматриваемом из (5), что локальная статистика кинк-антикинк-цепочек, отвечающих виртуальным переходам между двумя состояниями $|\alpha\rangle$ и $|\gamma\rangle$ эквивалентна точно решаемому случаю асимметричной двухуровневой системы с расстройкой энергий $E_{\alpha\gamma}$ и амплитудой туннелирования $q_{\alpha\gamma}(s)$. Как следствие, для ненормированной вероятности встретить в пределах интервала τ_0 ровно n кинк-антикинк-пар одного сорта можно сразу написать ответ:

$$I_{\alpha\gamma}^{(2n)}(s) = \frac{(|q_{\gamma\alpha}(s)|^2 \tau_0^2)^n}{n!} \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-x} \frac{I_{n-1/2}(x) - I_{n+1/2}(x)}{(2x)^{n-1/2}}, \quad (10)$$

где $x = \tau_0 E_{\alpha\gamma}/2$, а $I_\nu(x)$ – модифицированная функция Бесселя. Поэтому, возможна и более общая процедура взвешивания классов, допускающая сравнение кинк-антикинк-цепочек произвольной длины, при которой сначала стирается вся цепочка кинк-антикинк-пар сорта $s - s'$ в пределах выбранного подходящего интервала, а затем генерируется новая цепочка согласно распределению (10). Такая процедура, однако, едва ли имеет практическое значение ввиду малости вероятности встретить подходящий интервал большой длины.

Кинк-антикинкковый процесс в определенных случаях оказывается неполным, поскольку может существовать несколько путей из состояния $|\alpha\rangle$ в состояние $|\gamma\rangle$. В качестве примера рассмотрим следующие две цепочки кинков

$$q_{\gamma\lambda}(s_2) e^{\tau_2 E_{\gamma\lambda}} q_{\lambda\alpha}(s_1) e^{\tau_1 E_{\lambda\alpha}} \quad (\text{случай } C), \quad (11)$$

$$q_{\gamma\nu}(s_4) e^{\tau_4 E_{\gamma\nu}} q_{\nu\alpha}(s_3) e^{\tau_3 E_{\nu\alpha}} \quad (\text{случай } D). \quad (12)$$

Относительные интегральные веса классов C и D легко вычисляются в полной аналогии с кинк-антикинкковым подпроцессом. Разумнее, однако, воспользоваться тем, что число кинков в обоих случаях одинаково и перейти к дифференциальному пределу, а именно, сравнить конфигурации в которых τ_1 и τ_3 (τ_2 и τ_4) меняются лишь в сколь угодно малой окрестности $d\tau$ около $\tau_1 = \tau_3 = \tau_a$ ($\tau_2 = \tau_4 = \tau_b$). В результате мы приходим к дискретному подпроцессу метрополисовского типа, заключающемуся в замене пары (s_1, s_2) на пару (s_3, s_4) и наоборот с вероятностями w_D и w_C , удовлетворяющими

$$\frac{w_D}{w_C} = \frac{q_{\gamma\nu}(s_4) q_{\nu\alpha}(s_3)}{q_{\gamma\lambda}(s_2) q_{\lambda\alpha}(s_1)} \exp[(\tau_b - \tau_a) E_{\lambda\nu}]. \quad (13)$$

Все рассмотренные до сих пор подпроцессы преобразуют "внутренность" кинковой конфигурации. Наконец мы вводим "краевой" подпроцесс, который, во-первых, меняет один из индексов $\sigma_{\alpha\gamma}$ (для определенности - γ на λ), и, во-вторых, изменяет на единицу число кинков. Подходящий временной интервал для кинка сорта s теперь определяется как интервал $[0, \tau_0]$, в котором находится либо один (случай E), либо нуль (случай F) кинков сорта s , и нет кинков, ассоциированных с s . В близкой аналогии с кинк-антикинкковым подпроцессом в новой конфигурации с вероятностью w_E будет стоять один кинк, а с вероятностью $w_F = 1 - w_E$ кинка не будет. Здесь

$$\frac{w_E}{w_F} = q_{\gamma\lambda}(s) \int_0^{\tau_0} d\tau e^{\tau E_{\gamma\lambda}}. \quad (14)$$

Положение кинка в первом случае разыгрывается в соответствии с фактором $e^{\tau E_{\gamma\lambda}}$.

Для иллюстрации описанного процесса сформулируем его для бозонной модели Хаббарда (и тесно связанной с ней преобразованием Холстейна - Примакова спиновой решетки). В узельном представлении диагональная часть гамильтониана, H_0 , включает в себя межчастичные взаимодействия и внешний потенциал. Недиагональная часть, V , отвечает перескокам с узла на узел, причем члены Q , описывают перескоки между заданной парой узлов. Простейшим случаем является одномерная фермионная система, особенно если вычисляются лишь кинетическая и потенциальная энергии. Легко убедиться, что в этом случае статистика воспроизводится одним лишь кинк-антикинкковым процессом. Однако для ускорения сходимости целесообразно использовать также подпроцесс случайного сдвига кинков и дискретный подпроцесс обращения пар кинков, то есть (13) с $s_2 = s'_1$, $s_4 = s_1$, $s_3 = s'_1$. При $d \geq 2$ существенно использовать дискретный двухкинкковый подпроцесс (13), чтобы воспроизвести все возможные траектории частиц. Для вычисления нелокальных (как в пространстве, так и во времени) недиагональных корреляторов или, скажем, для описания поведения системы в геометрии кольца с глобальной калибровочной фазой следует воспользоваться еще и краевым подпроцессом (14).

Нужно отметить, что требование конечности радиуса взаимодействия не является принципиальным. Процесс применим к взаимодействиям произвольного радиуса, а также позволяет работать и в импульсном представлении, если это существенно для тех или иных задач. Единственное ограничение, которое при этом возникает, состоит в малом размере подходящего временного интервала τ_0 .

Заметим также, что наш подход может оказаться очень эффективным и весьма точным методом для монте-карловских расчетов континуальных систем, если последние сначала аппроксимировать решеточными моделями. Так, например, известно, что в случае гармонического осциллятора поправки на дискретность очень малы.

3. Все рассмотренные выше подпроцессы были реализованы в виде программы для одной частицы, описывающейся гамильтонианом (2). Результаты сравнивались с получаемыми в рамках стандартного траекторного алгоритма¹⁾. Мы обнаружили, например, что для периодического потенциала $U_i = (-1)^i U$ и для дискретного осциллятора $U_i = U i^2$ стандартный алгоритм с шагом временной сетки $\Delta\tau = 0.1/t$ набирал статистику более чем на два порядка медленнее (то есть требовал более чем в 10^2 раз большего времени вычислений для достижения заданной точности), чем наш. Этот результат вряд ли можно считать неожиданным, поскольку, как обсуждалось выше, "узким горлом" стандартной процедуры является маловероятный процесс рождения пары кинк-антикинк (с вероятностью $(t\Delta\tau)^2 \sim 10^{-2}$). Важно, что, несмотря на простоту наших тестовых моделей, их описание содержит все существенные черты МК процесса для гораздо более сложных объектов.

Мы благодарны В.А. Кашурникову за его постоянный интерес и многочисленные обсуждения. Работа была поддержана Европейским Сообществом (Grant INTAS-93-2834-ext) и частично Российским фондом фундаментальных исследований (проект 95-02-06191a).

-
1. J.E.Hirsch, D.J.Scalapino, R.L.Sugar, and R.Blankenbecler, Phys. Rev. Lett. **47**, 1628 (1981); J.E.Hirsch, R.L.Sugar, D.J.Scalapino, and R.Blankenbecler, Phys. Rev. B **26**, 5033 (1982).
 2. R.Blankenbecler, D.J. Scalapino, and R.L.Sugar, Phys. Rev. B **24**, 2278 (1981); Ibid. **24**, 4295 (1981); J.E. Hirsch, Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985).
 3. A.Lagendijk and B. De Raedt, Phys. Rev. Lett. **49**, 602 (1982); H. De Raedt and A.Lagendijk, Phys. Rep. **127**, 233 (1985), and references therein.
 4. E.L.Pollock and D.M.Ceperley, Phys. Rev. B **36**, 8343 (1987).
 5. W.Krauth, N.Trivedi, and D.Ceperly, Phys. Rev. Lett. **67**, 2307 (1991).
 6. G.G.Batrouni, R.T.Scalettar, and G.T.Zimanyi, Phys. Rev. Lett. **65**, 1765 (1990); *ibid.* **66**, 3144 (1991); G.G.Batrouni and R.T.Scalettar, Phys. Rev. B **46**, 9051 (1992).
 7. А.Ф.Елесин и В.А.Кашурников, ЖЭТФ **106**, 1773 (1994); V.A.Kashurnikov, Phys. Rev. B **53**, 5932 (1996).
 8. R.P.Feynman and A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
 9. N.Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth *et al.*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
 10. R.M.Fye, Phys. Rev. B **33**, 6271 (1986).

¹⁾Мы благодарим В.А. Кашурникова и А.В. Красавина, любезно предоставивших нам программу монтекарловского алгоритма типа "шахматная доска" [1]