

## Fortsetzung Weltlinien - QMC

$$\text{Berechnung von Observablen } \langle O \rangle = \frac{\text{Sp}[e^{-\beta H} O]}{\text{Sp}[e^{-\beta H}]}$$

Für Observablen, die lokal in der imaginären Zeit sind, kann man schreiben:  $\langle O \rangle = \frac{\sum_{\omega} \Omega(\omega) O(\omega)}{\sum_{\omega} \Omega(\omega)}$

Die Kunst ist es nun, einen Schätzer  $O(\omega)$  zu bestimmen, der (i) korrekt ist und (ii) möglichst kleine Varianz hat.

## Berechnung der Energie

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{2} \text{Sp} \left[ \left( e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} \right)^M (H_1 + H_2) \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Sp} \left[ \left( e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} \right)^{M-1} \left( e^{-\Delta\tau H_1} H_1 e^{-\Delta\tau H_2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} H_2 \right) \right] \end{aligned}$$

Durch Einschleiben von Einheitsoperatoren  $1 = \sum_{\vec{\sigma}_i} |\vec{\sigma}_i\rangle \langle \vec{\sigma}_i|$  erhalten wir:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_{2M}} \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \dots \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \vec{\sigma}_1 \rangle \\ &\quad + \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \dots \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} H_1 | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle \end{aligned}$$



Allerdings ist es praktischer, die logarithmische Ableitung für die Berechnung des Quotienten zu benutzen:

		$e^{-\Delta T \gamma_z / 4}$	$\gamma_z / 4$
		$e^{\Delta T \gamma_z / 4} \cosh(\Delta T \gamma_x / 2)$	$-\gamma_z / 4 - \frac{\gamma_x}{2} \tanh(\Delta T \frac{\gamma_x}{2})$
		$e^{\Delta T \gamma_z / 4} \sinh(\Delta T \gamma_x / 2)$	$-\gamma_z / 4 - \frac{\gamma_x}{2} \coth(\Delta T \frac{\gamma_x}{2})$

$$E_{loc} = -\frac{\partial}{\partial \Delta T} \ln[\omega]$$

Insgesamt erhalten wir den Erwartungswert der Energie für ein Sample (eine Konfiguration  $w$ ) als Summe über die Plaketten in den unteren beiden Reihen:

$$\langle H \rangle_{w, \text{einzel}} = \sum_{\substack{\text{Plakette } p \text{ mit} \\ \text{Zeiten } \tau_1, \tau_2 \\ \text{bzw. } \tau_2, \tau_1}} E_{loc}(p)$$

Um die Varianz zu reduzieren, dürfen wir wegen der Äquivalenz der imaginären Zeiten über alle Plaketten summieren. Für  $N$  Messungen (z.B. nach jeweils einem vollen Sweep, bei dem alle schwarzen Plaketten betrachtet wurden) erhalten wir:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\text{sweeps} \\ s=1}}^N \frac{1}{M} \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Plaketten } p}} E_{loc}(p, s)$$

$NN$ -Spinkorrelation:  $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_s \frac{1}{M} \sum_p c_{loc}(p, s)$  mit

$$c_{loc} = 1 \quad \text{für } p = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$$

$$c_{loc} = -1 \quad \text{sonst}$$

### III.4 WL-QMC mit Loop-Updates

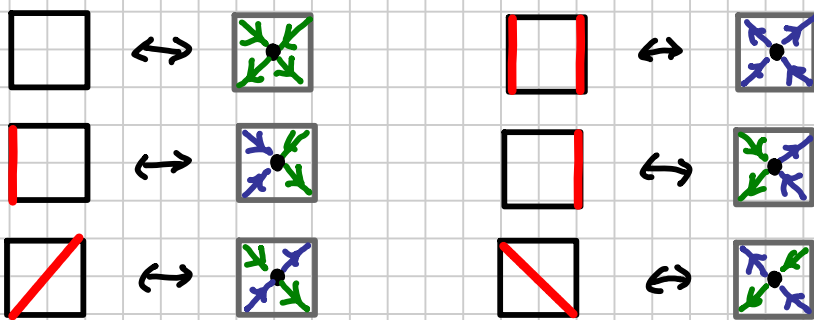
Probleme des in III.3 vorgestellten Weltlinien-QMC-Verfahrens mit lokalen Updates:

- (i) konstante Anzahl der Weltlinien ( $\sim S^z$  konstant im XXZ-Modell,  $n$  konstant in Hubbard-Modellen)
- (ii) Autokorrelationszeiten divergieren für  $\Delta\tau \rightarrow 0$   
( $\Rightarrow \Delta\tau$ -Extrapolation schwierig + teuer)

Beide Nachteile werden in Schleifen (=Loop)-Algorithmen überwunden.

Abbildung auf 6-Vertex-Modell:

Im ersten Schritt werden die Weltlinien-Konfigurationen auf Konfigurationen des 6-Vertex-Modells abgebildet. Dieses besteht aus Vertizes auf einem um  $45^\circ$  grad rotierten Gitter (Mittelpunkte der weißen Plaketten), die divergenzfrei durch Pfeile verbunden sind. Auf der Ebene der Plaketten gilt folgende Zuordnung:

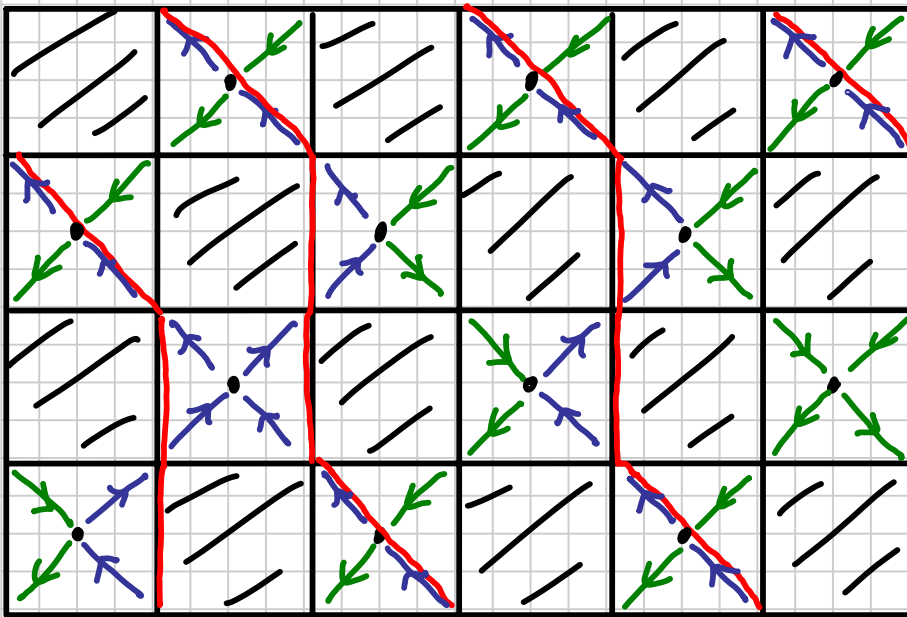


Grundsätzlich gilt also, dass aufwärtsgerichtete Pfeile zu Weltlinien korrespondieren.

Anwendungsbeispiel (der Klarheit halber sind beide Systeme übereinander gezeichnet):



(iv) Spin-Flip der Schleife und Weltlinien-Update:



Mit dem Update hat sich also (i) die Zahl der Weltlinien erhöht und (ii) ist jetzt die Windungszahl (in L-Richtung) endlich.

Im Prinzip könnte man ein Loop-QMC-Verfahren wie im Beispiel beschrieben implementieren:

- (i) Initialisierung etc. (wähle Startvertex, dann jeweils einen ↓ der auslaufenden Pfeile)
- (ii) Für Konfiguration  $w$ : wähle Loop zufällig  $\Rightarrow w_{\text{neu}}$
- (iii) Berechne  $\Omega(w_{\text{neu}})/\Omega(w)$
- (iv) Akzeptiere z. B. nach Metropolis-Regel
- (v) Messe Observablen

**Problem:**

- Schritt (iii) ist i.A. sehr teuer
- Akzeptanzrate in (iv) ist oft niedrig

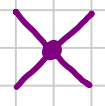
**Lösung:** Verlagere Akzeptanzschritt auf Konstruktion der Schleife (analog zur Clusterkonstruktion bei Fortuin-Kasteleyn). Führe dazu neue Variablen ein, sogenannte Graphen, die gegebenen WL- bzw. Vertex-Konfigurationen mit einer zu bestimmenden Wahrscheinlichkeit zugewiesen werden. Dabei definiert ein Satz von zulässigen Graphen eindeutig Schleifen, analog den F-k-Clustern im Ising-Fall.

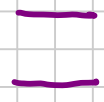



Umgekehrt sollen zu einem gegebenen Graphen alle kompatiblen Vertex-Konfigurationen gleichwahrscheinlich sein.

Konkret muss man in diesem Ansatz maximal 4 Plaketten-Graphen einführen:

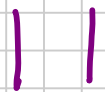
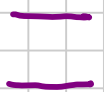














①  „vertikal“

③  „eingefroren“

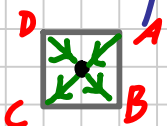
②  „horizontal“


④  „diagonal“

Dabei gilt die Kompatibilitätstabelle:

	① 	② 	③ 	④ 
 ↔ 	✓	—	✓	✓
 ↔ 				
 ↔ 	—	✓	✓	✓
 ↔ 				
 ↔ 	✓	✓	✓	
 ↔ 				—

Zur Logik: die Linien in den Graphen sind ungerichtet und müssen möglichen Vertex-Pfaden entsprechen. Dies gilt allerdings nicht für den eingefrorenen Graphen, der dem Umklappen aller Spins entspricht und immer kompatibel ist. Als Beispiel betrachten wir die 1. Zeile:



Es gibt Pfade  $A \rightarrow B$ ,  $A \rightarrow C$ ,  $D \rightarrow B$ ,  $D \rightarrow C$ , aber z.B. keine Verbindung  $A \rightarrow D$  oder  $D \rightarrow A \rightarrow$  kein Graph .

Formalismus: für die betrachtete Plakette sei  $S$  eine Spinkonfiguration,  $G$  ein Graph und  $W(S)$  das in III.3 bestimmte Gewicht zu  $S$ .

Es sollen nun Gewichte  $W(S, G)$  für jede kompatible Konfiguration  $\{S, G\}$  bestimmt werden, so dass gilt:

$$(i) \sum_G W(S, G) = W(S)$$

$$(ii) W(S, G) = W(S', G) \quad \forall S, S' \text{ kompatibel mit } G$$

Wenn dieses lineare Gleichungssystem gelöst ist, lautet der Algorithmus wie folgt:

(i) Initialisiere Weltlinien

(ii) Weise jeder (weissen) Plakette mit Spinkonfiguration  $S$  einen Graphen  $G$  zu mit  $W'$ :

$$P(S \rightarrow \{S, G\}) = \frac{W(S, G)}{W(S)}$$

(iii) Identifiziere alle Schleifen (jeweils verbundene Linien). Lege für jede Schleife die Spinrichtung neu fest (jeweils  $W' \frac{1}{2}$ ).

(iv) Messe Observablen

Dies entspricht dem Swendsen-Wang-Algorithmus.

Alternative: Wolff-artige Modifikation

(iii') Wähle einen Spin und flippe die assoziierte Schleife



Offensichtlich erfüllen beide Varianten das detaillierte Gleichgewicht.

Die Gewichte  $W(S, G)$  sind i. A. nicht eindeutig festgelegt. Es empfiehlt sich, die gefrorenen Graphen zu minimieren, da sonst die Clusters zu groß werden (und im Fall eines einzigen Clusters effektiv nichts passiert).

Speziell für das Heisenberg-Modell (XXZ-Modell mit  $J_x = J_z$ ) können wir auf den gefrorenen Graphen ganz verzichten und auch den Diagonalgraphen eliminieren:

		$e^{\Delta\tau J/4}$	$\cosh(\Delta\tau J/2) \equiv W_1 =$	$W_{1,1} + W_{1,2}$	$  $	$---$
/	\	$e^{\Delta\tau J/4}$	$\sinh(\Delta\tau J/2) \equiv W_2 =$	$W_{2,2}$		
		$e^{-\Delta\tau J/4}$	$\equiv W_3 =$	$W_{3,1}$		

Dabei folgt aus der Gleichverteilungsbedingung:

$$W_{1,1} \stackrel{!}{=} W_{3,1} = W_3$$

$$W_{1,2} \stackrel{!}{=} W_{2,2} = W_2$$

Dies ist konsistent, da

$$W_{1,1} + W_{1,2} = W_3 + W_2$$

$$= e^{\Delta\tau J/4} (e^{-\Delta\tau J/2} + \sinh(\Delta\tau J/2))$$

$$= e^{\Delta\tau J/4} \frac{2e^{-\Delta\tau J/2} + e^{\Delta\tau J/2} - e^{-\Delta\tau J/2}}{2}$$

$$= e^{\Delta\tau J/4} \cosh(\Delta\tau J/2) = W_1$$

