

### III.3 Weltlinien - Quanten - Monte - Carlo - Methode (world line QMC)

Weltlinien-QMC ist ein konzeptionell relativ einfacher Zugang für Modelle wechselwirkender Quanten-Spins oder Fermionen, der erste Simulationen erlaubt und Basis für effizientere Algorithmen (Schleifen-, Wurm-Algorithmen) ist.

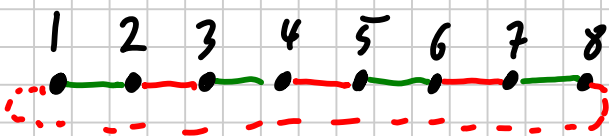
Grundidee von Weltlinien-Verfahren ist es nun, den Hamilton-Operator so aufzuteilen, dass jeder der Teile in kommutierende 2-Platz-Terme zerfällt. Bei Modellen, in denen  $H$  maximal nächste Nachbarn auf einem hyperkubischen Gitter verbindet, sind das

$$2d \text{ Teile: } H = H_1^x + H_2^x + H_1^y + H_2^y + \dots$$

**Wichtig:** Notwendige Voraussetzung ist, dass die Systemlänge in jeder Richtung gerade ist:  $L^d = 2n_d$

Speziell im vorliegenden 1-d-Fall:

$$H = \underbrace{\sum_{n=1}^{L/2} H^{(2n)}}_{H_1} + \underbrace{\sum_{n=1}^{L/2} H^{(2n-1)}}_{H_2}$$



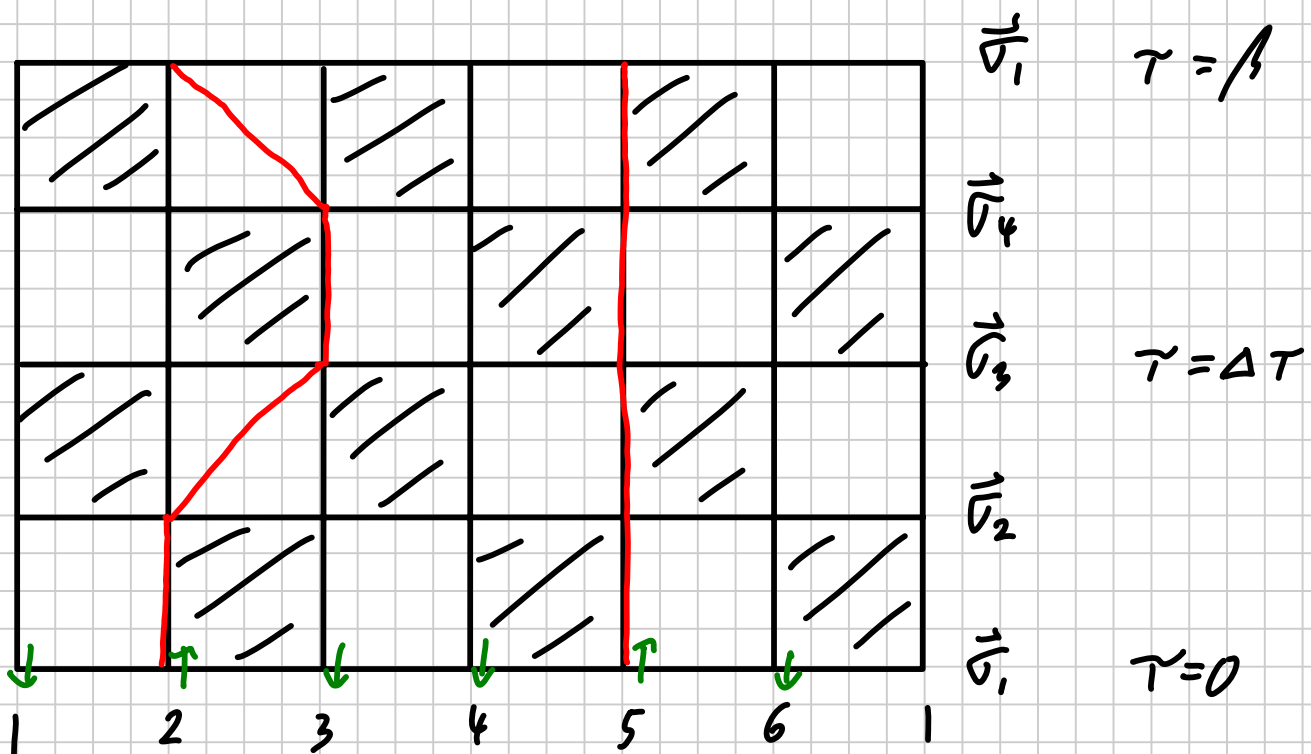
Diese Aufteilung wird nun in einer Trotter-Zerlegung der Zustandssumme benutzt ( $\Delta\tau = \beta/M$ ):

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Sp} [e^{-\beta H}] = \text{Sp} [(e^{-\Delta\tau H})^M] \\
&\approx \text{Sp} [(e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2})^M] \\
&= \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_{2M}} \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \langle \vec{\sigma}_{2M} | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_{2M-1} \rangle \dots \\
&\quad \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle
\end{aligned}$$

mit dem Gesamtspinvektor  $\vec{\sigma}_\tau$  zur imaginären Zeit  $\tau$ :

$$\vec{\sigma}_\tau = (\sigma_{1,\tau}, \sigma_{2,\tau}, \dots, \sigma_{L,\tau})$$

Graphische Repräsentation: Weltlinien – Evolution von  $\uparrow$ -Zuständen (bei Fermion-Simulationen: von besetzten Zuständen) in der imaginären Zeit:



$L = 6$  Spins, davon 2 up-Spins ( $S^z = -1$ ),

$M = 2$  Diskretisierungsschritte der imaginären Zeit.

Als Anwendungsbeispiel wählen wir das XXZ-Modell:

$$H = \sum_{i=1}^L H^{(i)}; \quad H^{(i)} = \frac{\gamma_x}{2} (\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+) + \gamma_z (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)$$

mit  $\sigma_i^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_i^- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_i^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

und periodischen Randbedingungen:  $\vec{S}_{L+1} \equiv \vec{S}_1$

Basis des Hilbert-Raums sind  $\sigma_i \in \{ |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \}$

Mit  $S^+ = S^x + iS^y$ ,  $S^- = S^x - iS^y$  gilt:

$$H = \frac{\gamma_x}{2} \sum_{i=1}^L (\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+) + \gamma_z \sum_{i=1}^L (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)$$

Für 2 Teilchen  
mit offenen Randbed.

$$H_{12} \stackrel{\wedge}{=} \begin{pmatrix} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \\ \gamma_z/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_z/4 & \gamma_x/2 & 0 \\ 0 & \gamma_x/2 & -\gamma_z/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_z/4 \end{pmatrix} \begin{matrix} \uparrow\uparrow \\ \uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow \\ \downarrow\downarrow \end{matrix}$$

Damit ergeben sich für Eigenvektoren und Eigenwerte des 2-Spin-Systems:

$S^z$	$S^z$	EV	EW
1	1	$ \uparrow\uparrow\rangle$	$\gamma_z/4$
1	-1	$ \downarrow\downarrow\rangle$	$\gamma_z/4$
1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} ( \uparrow\downarrow\rangle +  \downarrow\uparrow\rangle)$	$\gamma_x/2 - \gamma_z/4$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} ( \uparrow\downarrow\rangle -  \downarrow\uparrow\rangle)$	$-\gamma_x/2 - \gamma_z/4$

(\*)

Wir führen noch einige Bezeichnungen ein:

Konfiguration  $w = (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \dots, \vec{\sigma}_{2M})$

Gewicht einer Konfiguration

$$\Omega(w) = \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta T H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \langle \vec{\sigma}_{2M} | e^{-\Delta T H_2} | \vec{\sigma}_{2M-1} \rangle \dots$$

$$\langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta T H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta T H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle$$

Damit gilt:  $Z = \sum_w \Omega(w)$

Die Matrixelemente in  $\Omega(w)$  faktorisieren:

$$\langle \vec{\sigma}_{i+1} | e^{-\Delta T H_2} | \vec{\sigma}_i \rangle = \prod_{j=1}^{L/2} \langle \sigma_{2i+1, j} | \sigma_{2i+1, j+1} | e^{-\Delta T H} | \sigma_{2i, j} | \sigma_{2i, j+1} \rangle$$

Damit ist die Berechnung der Gewichte auf das 2-Platz-Problem zurückgeführt. Z.B. erhalten wir mit  $\times$ :

$$\langle \downarrow \uparrow | e^{-\Delta T H_2} | \uparrow \downarrow \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow \uparrow | e^{-\Delta T H_2} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow \downarrow) - \downarrow \uparrow \right] + \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow \downarrow) + \downarrow \uparrow \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow \uparrow | \left[ e^{-\Delta T (-\gamma_z/4 - \gamma_x/2)} \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow \downarrow) - \downarrow \uparrow \right]$$

$$+ e^{-\Delta T (-\gamma_z/4 + \gamma_x/2)} \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow \downarrow) + \downarrow \uparrow \rangle$$

$$= -e^{\Delta T \gamma_z/4} \sinh\left(\frac{\Delta T \gamma_x}{2}\right)$$

Analog erhält man für die Plaketten:



$$e^{-\Delta T \gamma_z/4}$$



$$e^{\Delta T \gamma_z/4} \cosh(\Delta T \gamma_x/2)$$



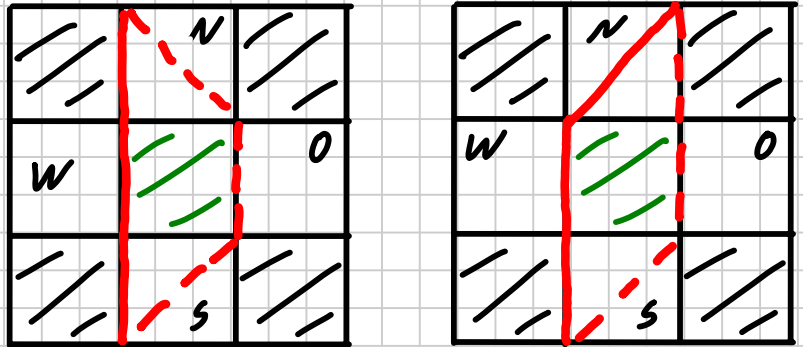
$$-e^{\Delta T \gamma_z/4} \sinh(\Delta T \gamma_x/2)$$

Beachte: negative Gewichte würden i. A. zu einem Vorzeichenproblem führen. Bei nächst-Nachbarkrüpfen auf bipartiten Gittern ist die Anzahl der Diagonalkassetten jedoch in jeder Konfiguration gerade, das Vorzeichen also irrelevant.

## Weltlinien-Algorithmus

(i) initialisiere Weltlinien (z. B. senkrecht) für gewünschtes  $L, S_2$

(ii) Wähle schattierte Plakette, schlage Update vor (möglich, falls schatt. Plakette AF, stationär):



(iii) Berechne Verhältnis der Gewichte aus 4 umgebenden weissen Plaketten für  $w_{alt}, w_{neu}$ :

$$r = \frac{\Omega(w_{neu})}{\Omega(w_{alt})} = \frac{(\boxed{N} \cdot \boxed{0} \cdot \boxed{S} \cdot \boxed{W})_{neu}}{(\boxed{N} \cdot \boxed{0} \cdot \boxed{S} \cdot \boxed{W})_{alt}}$$

Akzeptiere Update mit  $w'$   $p = \frac{r}{1+r}$  (heat bath)

(Alternative: Metropolis -  $p = \min\{r, 1\}$ )

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_{2M}} \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \dots \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle \\
&\quad \left[ \frac{\langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} H_1 | \vec{\sigma}_2 \rangle}{\langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle} + \frac{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \vec{\sigma}_1 \rangle}{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle} \right] \\
&= \frac{\sum_w \Omega(w) E(w)}{\sum_w \Omega(w)} \equiv \langle E(w) \rangle_w
\end{aligned}$$

Die Matrixelemente lassen sich als Summen über (weisse) Plaketten schreiben, z. B.

$$\begin{aligned}
\frac{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \vec{\sigma}_1 \rangle}{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle} &= \sum_{i=1}^{L/2} \frac{\langle \sigma_{2i, T+1} | \sigma_{2i+1, T+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} | \sigma_{2i, T} | \sigma_{2i+1, T} \rangle}{\langle \sigma_{2i, T+1} | \sigma_{2i+1, T+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} | \sigma_{2i, T} | \sigma_{2i+1, T} \rangle} \\
&= \sum_{i=1}^{L/2} \frac{\partial}{\partial \Delta\tau} \ln \left[ \langle \sigma_{2i, T+1} | \sigma_{2i+1, T+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} | \sigma_{2i, T} | \sigma_{2i+1, T} \rangle \right]_w
\end{aligned}$$

Zuerst berechnen wir das neue Matrixelement direkt (d.h. gemäß erster Zeile) für  $\square$ :

$$\begin{aligned}
&\langle \downarrow \uparrow | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \uparrow \downarrow \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow \uparrow | e^{-\Delta\tau H_2} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \downarrow\rangle - |\downarrow \uparrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \downarrow\rangle + |\downarrow \uparrow\rangle) \right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow \uparrow | \left[ e^{-\Delta\tau (-\gamma_z/4 - \gamma_x/2)} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \downarrow\rangle - |\downarrow \uparrow\rangle) \right. \\
&\quad \left. + e^{-\Delta\tau (-\gamma_z/4 + \gamma_x/2)} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \downarrow\rangle + |\downarrow \uparrow\rangle) \right] \\
&= -e^{\Delta\tau \gamma_z/4} \left[ \sinh\left(\frac{\Delta\tau \gamma_x}{2}\right) \left(-\frac{\gamma_x}{4}\right) + \cosh\left(\frac{\Delta\tau \gamma_x}{2}\right) \left(-\frac{\gamma_x}{2}\right) \right]
\end{aligned}$$

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

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