

# Montecarlo

MCI

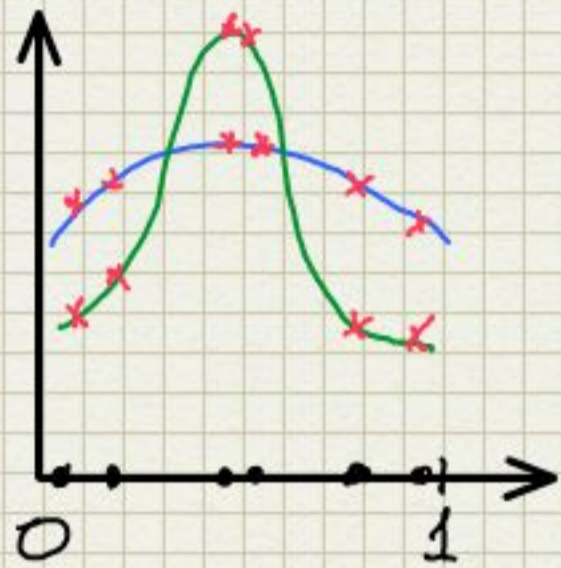
## 1. Integrazione

$$\int_a^b f(u) du = (b-a) \int_0^1 f(x) dx \quad x = \frac{u-a}{b-a}$$

La stima dell'integrale può essere fatta considerando una scelta di variabili casuali

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = I$$

Si cerca un valore medio



La stima è tanto migliore quanto più tranquilla è la funzione. Una strategia utile per rendere quasi costante la funzione integranda è quella di moltiplicarla, e dividerla, per una funzione peso definita positiva che si comporta come una densità di probabilità.

$$\int_0^1 P(x) dx = 1$$

$$I = \int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{P(x)} P(x) dx = \int_0^1 F(x) P(x) dx$$

Definiamo una nuova variabile

MC2

$$y(x) = \int_0^x P(x') dx'; \quad \frac{dy(x)}{dx} = P(x) \quad y(x=0) = 0 \quad (2)$$
$$y(x=1) = 1$$

$$\int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 F(x) P(x) dx = \int_0^1 F(x(y)) dy \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x(y))}{P(x(y))}$$

P scelta in modo da rendere il rapporto  $f/P$  quasi costante. P densità di probabilità molti punti quando  $f$  è grande, pochi quando il valore è trascurabile.

Problema nell'inversione della (2)

### • Teorema centrale del limite

$$S_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(x)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(S_N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_N^2}} \exp\left(-\frac{(S_N - \langle F \rangle)^2}{2\sigma_N^2}\right)$$

$$\langle F \rangle = \int F(x) P(x) dx \quad \langle F^2 \rangle = \int F^2(x) P(x) dx$$

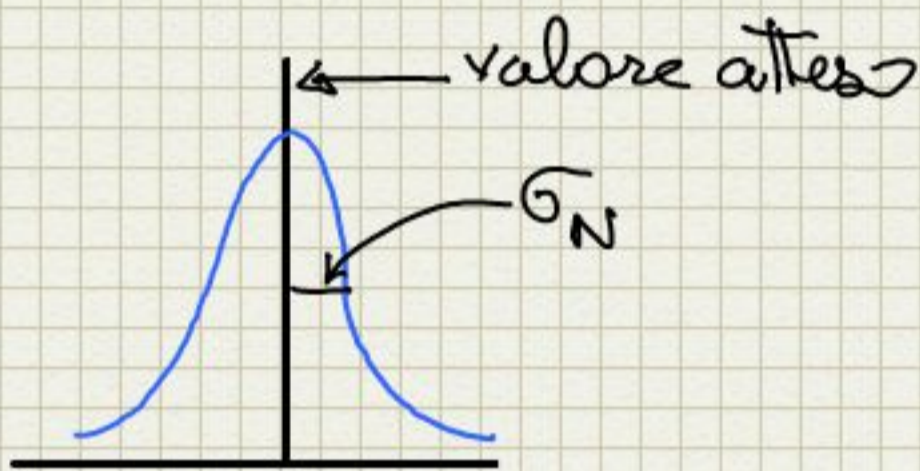
$$\sigma_N^2 = \frac{1}{N} (\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2)$$

Segue  $\longrightarrow$

→ Il valore di  $\bar{I}$  ha, per  $N$  abbastanza grande, una distribuzione gaussiana attorno al valore atteso. L'ampiezza della distribuzione è  $\sigma_N$  e scala come  $N^{-1/2}$  MC3

Quindi

$$\int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 F(x) P(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(x_i) \pm \sigma_N$$



Estensione ad integrali a molte dimensioni. L'incertezza gaussiana è indipendente dal numero di dimensioni.

---

## 2. L'idea di base

Il calcolo del valore di aspettazione di un operatore può essere fatto con MC

$$\langle O \rangle_{\beta\alpha} = \frac{\langle \psi_\beta | O | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle}$$

dove  $|\psi\rangle$  è una funzione a molti corpi che descrive il sistema

### 3. Montecarlo Variazionale (VMC)

MC4

Principio variazionale

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

corrisponde a

$$\delta E[\psi] = \delta \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0$$

$$E \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$$

Facendo la variazione

$$\delta E \langle \psi | \psi \rangle + E \delta \langle \psi | \psi \rangle = \delta \langle \psi | H | \psi \rangle$$

$$\delta E \langle \psi | \psi \rangle = \delta \langle \psi | H | \psi \rangle - E \delta \langle \psi | \psi \rangle$$

$$\delta E = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \delta \langle \psi | H - E | \psi \rangle$$

$$\delta E = 0 \text{ implica } \delta \langle \psi | (H - E) | \psi \rangle = 0$$

$$\langle \delta \psi | H - E | \psi \rangle + \langle \psi | H - E | \delta \psi \rangle = 0$$

Dato che  $|\psi\rangle$  è complessa, si può far variare indipendentemente la parte reale e quella immaginaria. I due termini sono indipendenti. Quindi

$$(H - E)|\psi\rangle = 0 \quad \text{c.v.d.}$$

Consideriamo una funzione prova  $|\psi_T\rangle$  scritta come combinazione lineare degli autostati  $|\psi_n\rangle$  dell'hamiltoniana

$$|\psi_T\rangle = \sum_n D_n |\psi_n\rangle \quad ; \quad H|\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

$D_n$  numero complesso

$$E[\psi_T] = \frac{\langle \psi_T | H | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \psi_T \rangle} = \frac{\sum_{nn'} \langle \psi_n | D_n^* H D_{n'} | \psi_{n'} \rangle}{\sum_{\alpha\alpha'} \langle \psi_\alpha | D_\alpha^* D_{\alpha'} | \psi_{\alpha'} \rangle}$$

$$\frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \langle \psi_n | H | \psi_{n'} \rangle}{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} E_{n'} \delta_{n,n'}} = \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} E_{n'} \delta_{n,n'}}{\sum_n |D_n|^2}$$

$$\geq \frac{\sum_n |D_n|^2 E_0}{\sum_n |D_n|^2} = E_0$$

La  $|\psi_T\rangle$  produce un limite superiore al corretto valore dell'energia dello stato fondamentale.

VMC calcola con Tecniche MC

$$E_V = \frac{\langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle}$$

Per sistemi fermionici

$$|\Psi_T\rangle = F |\Phi\rangle \leftarrow \text{Determinante di Slater}$$

$\uparrow$   
 $\hookrightarrow$  Funzione di correlazione

$$F = \prod_{i < j} f(r_{ij}) \quad \text{correlazione Jastrow}$$

Fisica nucleare

$$F = S \prod_{i < j} \left( \sum_P f^P(r_{ij}) O_{ij}^P \right) \quad S\text{-simmetrizzatore}$$

$$O_{ij}^P = 1, \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j, \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j, (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j)(\vec{r}_i \cdot \vec{r}_j), S_{ij}, S_{ij} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j$$

Parametrizzazione delle  $f$  e la variazione è manuale. Il determinante composto da funzioni d'onda radiali generate da un campo medio.

Ogni calcolo MC è fatto considerando una funzione d'onda di prova del tipo

$$|\Psi_T(\vec{R}); S; T\rangle = \sum_{\Lambda=1, 2^A} \sum_{t=1, 2^A} \Phi(\vec{R}) \bar{X}(S) \bar{X}(T)$$

$\bar{\Phi}(\vec{R})$  è la parte radiale  $\vec{R}$  indica le coordinate di tutte le particelle

$\bar{X}(S)$  è funzione d'onda di spin che considera tutte le 3 componenti dello spin  $S$  - spin totale

$$X_1 = (\downarrow_1 \downarrow_2 \dots \downarrow_A) ; X_2 = (\uparrow_1 \downarrow_2 \dots \downarrow_A) \dots X_{2^A} = (\uparrow_1 \uparrow_2 \dots \uparrow_A)$$

Il numero delle configurazioni di spin e isospin sarebbe  $2^A 2^A$

$\uparrow$  spin       $\uparrow$  isospin

La conservazione della carica trasforma il termine di isospin limitando globalmente si hanno

$$2^A \left( \frac{A!}{N! Z!} \right) \text{ configurazioni}$$

$\uparrow$  isospin

Nucleo	Z	N=A-Z	$N_{conf}$
$^3\text{H}$	1	2	24
$^3\text{He}$	2	1	24
$^4\text{He}$	2	2	96
$^6\text{He}$	2	4	960
$^6\text{Li}$	3	3	1280
$^8\text{He}$	2	6	7168
$^{12}\text{C}$	6	6	3784704
$^{16}\text{O}$	8	8	$8.4 \cdot 10^8$
$^{40}\text{Ca}$	20	20	$1.5 \cdot 10^{23}$
$^{48}\text{Ca}$	20	28	$4.7 \cdot 10^{27}$

$|\psi|^2$  funzione peso

Problema del segno.

#### 4. Green's function Monte Carlo (GFMC)

MC8

Consideriamo una funzione d'onda di prova come combinazione di autostati di  $H$

$$|\psi_T\rangle = \sum_n D_n |\psi_n\rangle$$

Facciamola evolvere per il limite del tempo immaginario  $z \rightarrow \infty$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} e^{-\frac{(H-E_0)z}{\hbar}} |\psi_T\rangle = \lim_{z \rightarrow \infty} e^{-\frac{(H-E_0)z}{\hbar}} \sum_n D_n |\psi_n\rangle$$

$$= \lim_{z \rightarrow \infty} \sum_n e^{-\frac{(E_n-E_0)z}{\hbar}} D_n |\psi_n\rangle = D_0 |\psi_0\rangle$$

dato che per  $n \neq 0$   $E_n > E_0$

Un passo temporale  $dz$  proiettando  $|\psi(z)\rangle$  su una rappresentazione  $|R\rangle$  di tutte le posizioni delle varie particelle si può scrivere come

$$\begin{aligned} \psi(\vec{R}, z+dz) &\equiv \langle R | \psi(z+dz) \rangle = \langle R | e^{-\frac{(H-E_0)dz}{\hbar}} |\psi(z)\rangle \\ &= \int \langle R | e^{-\frac{(H-E_0)dz}{\hbar}} |R'\rangle \langle R' | \psi(z)\rangle dR' \end{aligned}$$

propagatore

dove ho usato la completezza  $\int |R'\rangle \langle R'| = I$

Il calcolo del propagatore è la parte più complicata.



$$H = T + V \rightarrow \text{potenziale}$$

↑ energia cinetica

Il calcolo è facilitato se si considera  $V$  diagonale nella base  $(R)$ . Località del potenziale

$$e^{-\frac{(T+V-E_0)dz}{\hbar}} = e^{-\frac{V-E}{2} \frac{dz}{\hbar}} e^{-\frac{T}{\hbar} \frac{dz}{\hbar}} e^{-\frac{V-E}{2} \frac{dz}{\hbar}} + O(dz^3)$$

Formula di Trotter-Suzuki valida per

$$|dz^3(TV - VT)| \ll 1$$

Considerando questa espressione

$$\Psi(\vec{R}, z+dz) \approx \int \langle R | e^{-\frac{V-E_0}{2\hbar} dz} e^{-\frac{T}{\hbar} dz} e^{-\frac{V-E_0}{2\hbar} dz} | R' \rangle \Psi(R', z) dR'$$

$$= \underbrace{\int e^{-\frac{1}{2} \left[ (V(R') + V(R)) - E_0 \right] \frac{dz}{\hbar}}}_{G_V(R \leftarrow R', dz)} \underbrace{\langle R | e^{-\frac{T}{\hbar} dz} | R' \rangle}_{G_0(R \leftarrow R', dz)} \Psi(R', z) dR'$$

- Calcolo del propagatore libero -

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} \Psi(\vec{R}, z) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{R}, z) = 0 \\ \Psi(\vec{R}, 0) = \Phi(\vec{R}) \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{Eq. di Schrödinger} \\ \text{con } t \text{ immaginari} \\ \text{per particella} \\ \text{libera} \end{array}$$

Equazione di Fokker-Planck

Trasformata di Fourier

$$F(\Psi) = \tilde{\Psi}(\vec{k}, z) = \int d\vec{R} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Psi(\vec{R}, z)$$

segue  $\longrightarrow$

Il sistema diventa

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} \tilde{\psi}(\vec{k}, z) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{k}, z) = 0 \\ \tilde{\psi}(\vec{k}, 0) = \tilde{\Phi}(\vec{k}) \end{cases}$$

con  $\tilde{\psi}(\vec{k}, z) = \tilde{\Phi}(\vec{k}) e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} z}$

Definisco  $\tilde{g}(\vec{k}) = e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} z} = e^{-Az}$

$$\psi(\vec{k}, z) = \tilde{\Phi}(\vec{k}) \tilde{g}(\vec{k})$$

Il prodotto di convoluzione è

$$F(\tilde{\Phi} * \tilde{g}) = \tilde{\Phi}(\vec{k}) \tilde{g}(\vec{k})$$

$$\psi(\vec{R}, z) = \int \tilde{\Phi}(\vec{R}') g(\vec{R} - \vec{R}') d\vec{R}'$$

$$g(\vec{R}) = F^{-1}(\tilde{g}(\vec{k})) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{R} - Ak^2 z} d\vec{k}$$

$$= \frac{\exp\left(-\frac{R^2}{4Az}\right)}{(4\pi Az)^{n/2}}$$

La trasformata di una gaussiana è un'altra gaussiana

n-dimensionalità di  $\vec{R}$  e  $\vec{k}$

$$\psi(\vec{R}, z) = \frac{1}{(4\pi Az)^{n/2}} \int e^{-\frac{(\vec{R} - \vec{R}')^2}{4Az}} \tilde{\Phi}(\vec{R}') d\vec{R}'$$

$\uparrow$   
 $\psi(\vec{R}', 0)$

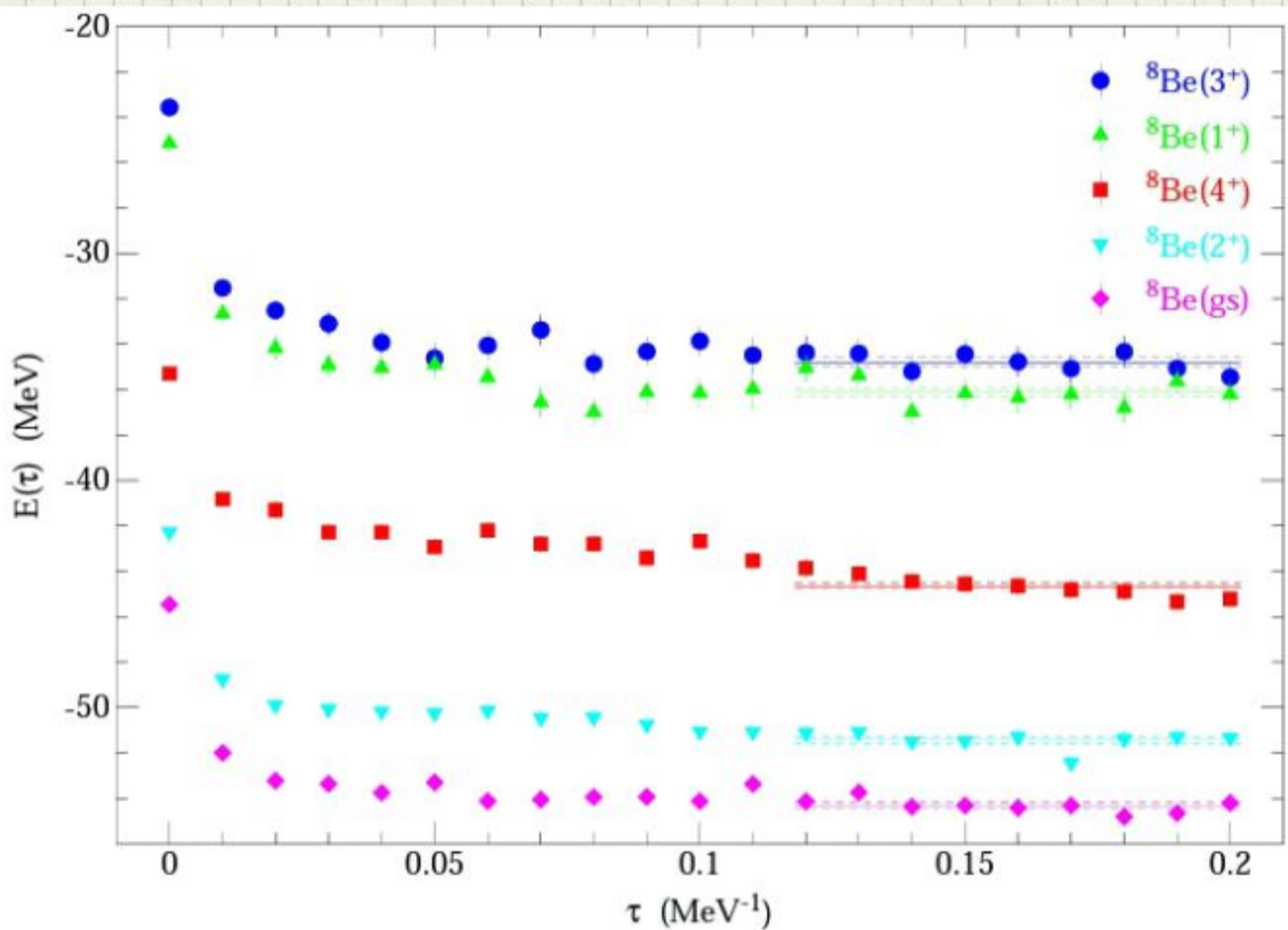
$$G_0(\vec{R} \leftarrow \vec{R}', z) = \left(4\pi \frac{\hbar^2}{2m} z\right)^{n/2} \exp\left[-\frac{(\vec{R} - \vec{R}')^2}{4\hbar^2/2m z}\right]$$

$$\psi(\vec{R}, z+dz) \approx \int \exp\left(-\frac{1}{2}(V(\vec{R}') + V(\vec{R}) - E_0) \frac{dz}{\hbar}\right) \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} dz\right)^{n/2} \exp\left[-\frac{(\vec{R}-\vec{R}')^2}{\frac{2\hbar^2}{m} dz}\right] \psi(\vec{R}', z) d\vec{R}'$$

Integrale a dimensioni n fatto con MC

Le due funzioni di Green sono esponenziali

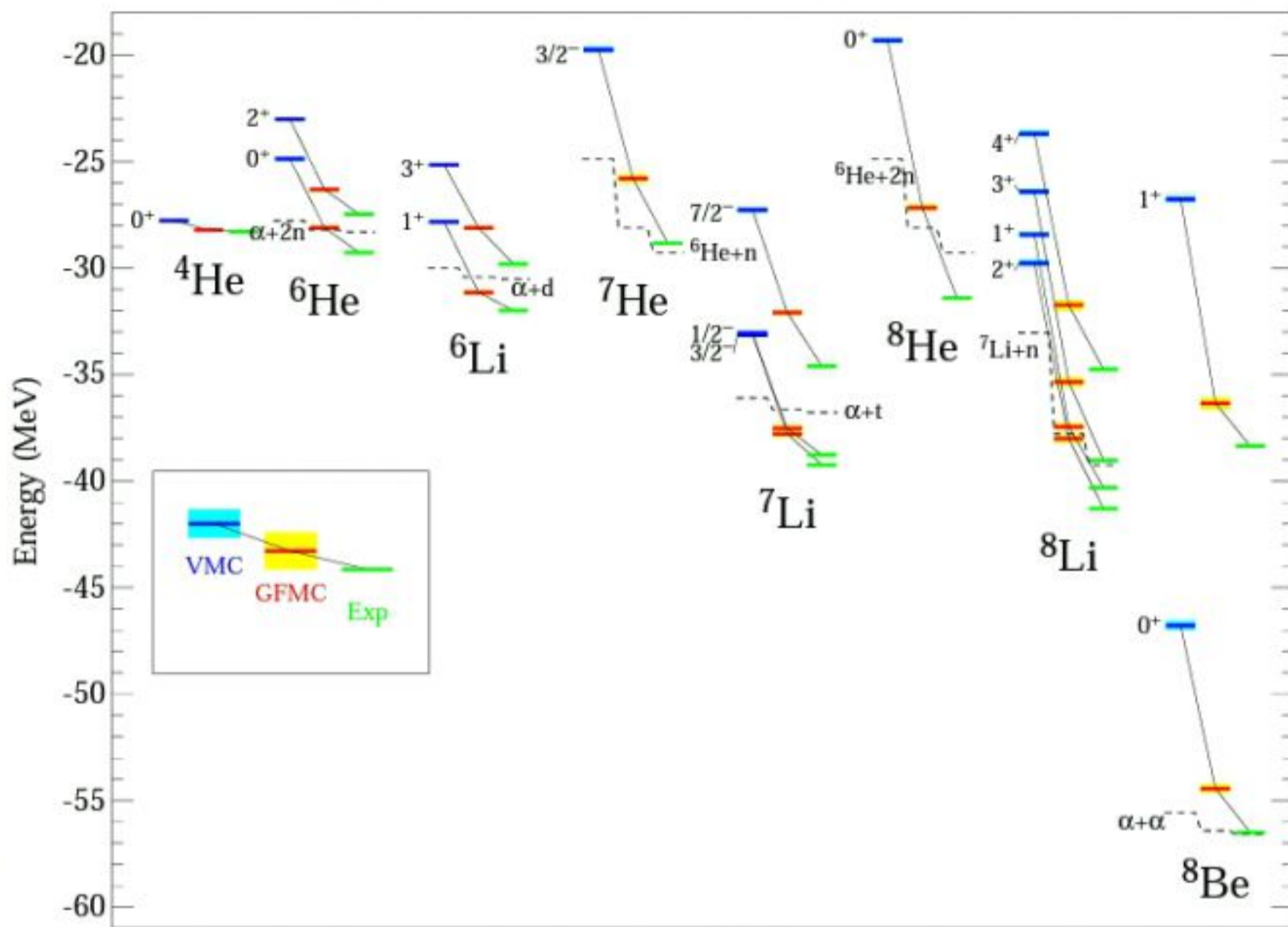
$G_0$  gaussiana



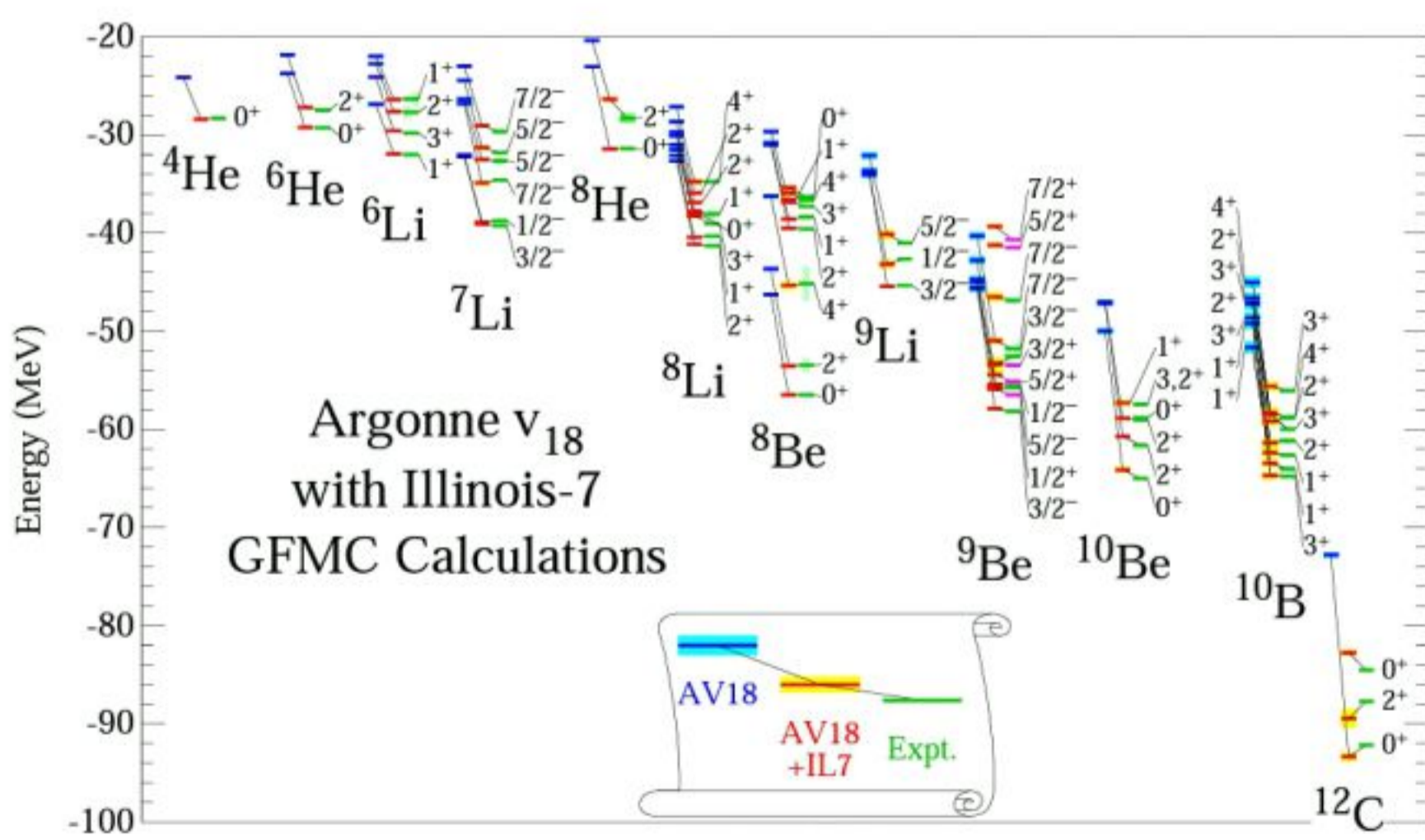
Il calcolo viene ripetuto varie volte per raggiungere

$z \rightarrow \infty$  con convergenza.

$dz$  piccolo perché sia valida Trotter-Suzuki



VMC  $\rightarrow$  GFMC



Forze a 3 corpi

Il valore di aspettazione di un operatore MC 13 qualsiasi viene calcolato in rappresentazione mista

$$\langle O \rangle_{\text{Mixed}} = \frac{\langle \psi_T | O | \psi(z) \rangle}{\langle \psi_T | \psi(z) \rangle}$$

$$= \frac{\int d\vec{P}_n \psi_T^\dagger(\vec{R}_n) G(\vec{R}_n, \vec{R}_{n-1}) \dots G(\vec{R}_1, \vec{R}_0) \psi_T(\vec{R}_0)}{\int d\vec{P}_n \psi_T^\dagger(\vec{R}_n) G(\vec{R}_n, \vec{R}_{n-1}) \dots G(\vec{R}_1, \vec{R}_0) \psi_T(\vec{R}_0)}$$

$$P_n = \vec{R}_n \vec{R}_{n-1} \dots \vec{R}_0$$

$$\langle O(z) \rangle = \frac{\langle \psi(z) | O | \psi(z) \rangle}{\langle \psi(z) | \psi(z) \rangle} =$$

$$\approx \langle O(z) \rangle_{\text{Mixed}} + \left[ \langle O(z) \rangle_{\text{Mixed}} - \langle O \rangle_T \right]$$

↳ variazionale

## 5. Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo MC14

Limite del GFMC il numero delle configurazioni di spin - isospin

La funzione d'onda da GFMC

$$|\Psi_T(\vec{R}); S; T\rangle = \sum_{\Lambda=1, 2^A} \sum_{t=1, 2^A} \Phi(\vec{R}) \bar{X}(S) \bar{X}(T)$$

implica che la trattazione dei fermioni dipendenti dallo spin siano trattati come segue

$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$  agisce solo sulla particella 1 e 2

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 2 [\sigma_+(1)\sigma_-(2) + \sigma_-(1)\sigma_+(2)] + \sigma_z(1)\sigma_z(2)$$

$$\sigma_+ \downarrow = \uparrow; \quad \sigma_+ \uparrow = 0; \quad \sigma_- \downarrow = 0; \quad \sigma_- \uparrow = \downarrow$$

$$\sigma_z \uparrow = \uparrow; \quad \sigma_z \downarrow = -\downarrow$$

$$\sigma_1 \cdot \sigma_2 \begin{pmatrix} a(\downarrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3) \\ a(\uparrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3) \\ a(\downarrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3) \\ a(\uparrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3) \\ a(\downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3) \\ a(\uparrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3) \\ a(\downarrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3) \\ a(\uparrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(\downarrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3) \\ 2a(\downarrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3) - a(\uparrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3) \\ 2a(\uparrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3) - a(\downarrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3) \\ a(\uparrow_1 \uparrow_2 \downarrow_3) \\ a(\downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3) \\ 2a(\downarrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3) - a(\uparrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3) \\ 2a(\uparrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3) - a(\downarrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3) \\ a(\uparrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3) \end{pmatrix} \quad (34)$$

$$\frac{2^A A!}{N! Z!}$$

Consideriamo un'altra base per descrivere  $\psi(\vec{R})$  con spin e isospin

$$\psi(\vec{R}, S, T) = \phi_1(\vec{r}_1) X_{st}^{(1)} \phi_2(\vec{r}_2) X_{st}^{(2)} \dots \phi_A(\vec{r}_A) X_{st}^{(A)}$$

$$X_{st} = p\uparrow, p\downarrow, n\uparrow, n\downarrow$$

Questa nuova espressione della funzione d'onda composta da termini fattorizzati ha solo  $4A$  componenti spin-isospin.

In questa nuova base i termini quadratici  $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$  non sono diagonali quindi non si può separare nel propagatore  $G_V$  e  $G_0$ .

In GFM il potenziale  $V$  era diagonale in  $(R)$  e i termini di  $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$  agiscono direttamente sulla funzione totale di spin  $X$  come mostrato prima.

Si usa la trasformazione di Hubbard-Stratonovich per passare da termini quadratici a termini lineari nell'operatore  $O$

$$e^{-dt \frac{O^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-\sqrt{-dt} x O}$$

Utilizzando operatori lineari in  $O$  è possibile trovare una trasformazione unitaria della nuova base in modo che sia composta da autostati di  $O$ .  $O$  è diagonale  $O^2$  non lo sarebbe mai

→ segue

È possibile fattorizzare i propagatori in una base con meno componenti.

Il prezzo che si paga consiste nel dover fare un altro integrale multidimensionale legato al nuovo campo ausiliario  $x$ .

