

PI-QMC

ירון דה ליאו

Path Integral – Quantum Monte Carlo

פיסיקה חישובית, סמסטר א' תשע"א 2.1.2011

אוניברסיטת בן-גוריון בנגב 

נושאי המצגת

- האינטגרל המסלולי של פיינמן (Path Integral Formulation)
- האתגר החישובי
- התוכנה הקיימת
- רשיון GPL

פרופגטור

■ מייצג את אמפליטודת ההסתברות לעבור מנקודה x', t_0 לנקודה x'', t .

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'' | \frac{\exp[-iH(t-t_0)]}{\hbar} | x' \rangle$$

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'' | \exp \frac{-iHt}{\hbar} \cdot \exp \frac{iHt_0}{\hbar} | x' \rangle = \langle x'', t | x', t_0 \rangle \quad \text{או:}$$

■ ניתן לפרק את התהליך לחלקים:

$$\langle x''', t''' | x', t' \rangle = \int dx'' \langle x''', t''' | x'', t'' \rangle \langle x'', t'' | x', t' \rangle$$

אינטגרל מסלול

■ או בעצם לאינסוף אינטרגלים:

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \iint dx_N dx_{N-1} \cdots dx_0 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \cdots \langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle$$

$$\langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \rightarrow \exp\left[i \int_{t_1}^{t_2} dt L_{\text{classical}}(x, \dot{x})\right] \quad \text{לפי דיראק:}$$

■ נסמן את הפאזה באקספוננט כך:

$$S(2,1) = \int_{t_1}^{t_2} dt L_{\text{classical}}(x, \dot{x})$$

■ ניתן להגיע ל:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \sim \sum_{\text{all paths}} \exp\left[\frac{i S(N,1)}{\hbar}\right]$$

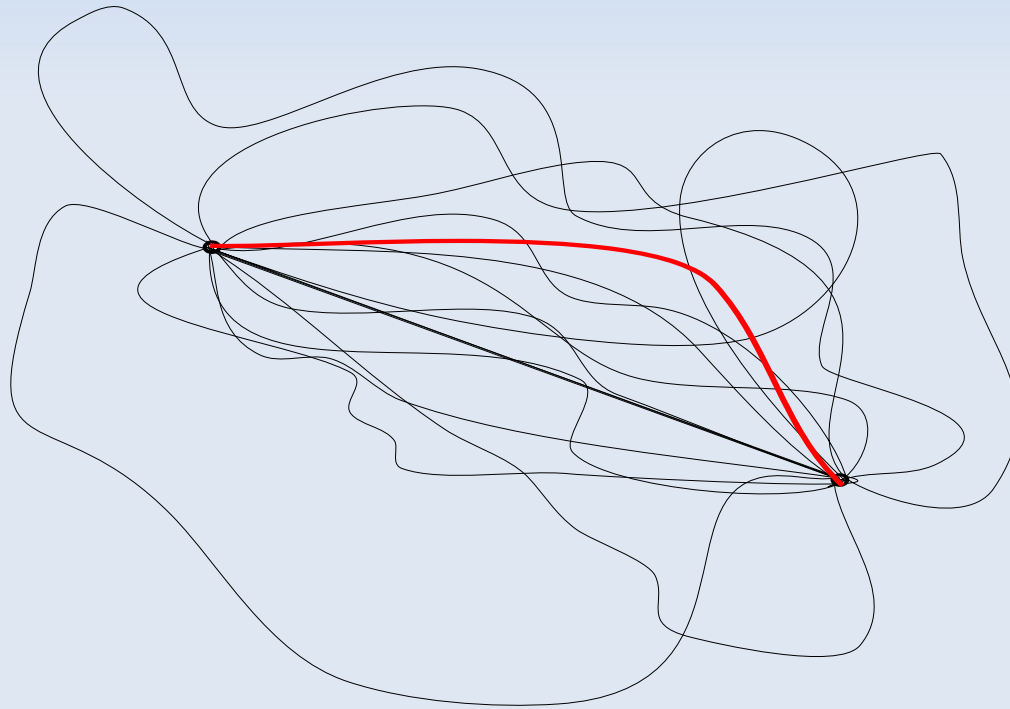
אינטגרל מסלול

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \sim \sum_{\text{all paths}} \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right]$$

- איך זה מתנהג בגבול הקלאסי?
- בגבול שבו \hbar הולך לאפס, האוסליציות נהיות חזקות, ורוב המסלולים מתאפסים. המסלול היחיד שלא יתאפס הוא בפעולה המינימלית.
- במצב הקוונטי כל מסלול משמעותי. נסכום עליהם, ונקבל התאבכות.

אינטגרל מסלול

- קלאסית, רק מסלול אחד נחשב
- קוונטית, כולם חשובים



האתגר החישובי

- יש אינסוף מסלולים.
- יש לחשב את הפאזה של כל אחד מהם.
- ככל שמחשבים יותר מסלולים התוצאה הולכת ונהיית קוונטית (בשני סדקים, אהרונוב בוהם וכדומה)

הפתרון

- עבור כל צעד זמן, נחשב את ההסתברויות לעבור לנקודה אחרת. נזרוק כדור לרולטה ונחליט לאיזו נקודה לעבור.



Some rights reserved by clry2

<http://www.flickr.com/photos/clry2/1366937217/>

PI-QMC

- ישנה תוכנה קיימת:

<https://code.google.com/p/pi-qmc/>

- של קבוצת Shumway מאוניברסיטת אריזונה.
- התוכנה כתובה בcpp, עם mpi לחישוב מקבילי, hdf5 לאיכסון מידע, משתמשת בxml להגדרת הריצות, ובפייתון לצורך ממשק עם המשתמש.
- יש מספר מצומצם של הדגמות מוכנות.

PI-QMC

- הממשק בפייתון לא מוכן. אין תצוגה של התוצאות.
- התיעוד חלש מאוד.
- אין חבילה מוכנה להתקנה.
- הרצה של סימולציה היא לא פשוטה.
- אנסה ליישם את התוכנה על מערכת של פרמיון שנע על חוט קוונטי, ונתקל בהפרעה.

רשיון הֶאָרְט

- .GPL – GNU Public License
- רשיון copyleft הראשון.
- הרשיון מחייב לספק את קוד המקור לכל דורש.
- על מנת להפיץ תוכנה שהיא שינוי של תוכנה עם רישיון gpl או שכוללת רכיבים ברשיון gpl, יש חובה להפיצה תחת אותו רשיון, בצירוף קוד המקור.
- על הרשיון עצמו כן יש copyright