

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

Мостовой Сергей Дмитриевич

**Исследование фазовых явлений в решеточных моделях
физики конденсированного состояния вещества и теории
поля**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
О.В. Павловский

Москва — 2023

Оглавление

Введение	3
1 Компактная электродинамика	9
1.1 Определение модели	9
1.2 Фазовые переходы	10
1.3 Геометрический метод исследования состояния монополей . . .	21
2 Численный метод	32
2.1 Методы Монте-Карло: общие характеристики	32
2.2 Краткий обзор методов Монте-Карло	33
2.3 Ряды измерений, порождаемых Монте-Карло	50
3 Расширенная модель Хаббарда	62
3.1 Обоснование модели	62
3.2 Вывод рабочих формул	64
3.3 Вывод уравнений молекулярной динамики	70
3.4 Использование двух полей	74
3.5 Введение пяти полей	84
3.6 Нарушение подрешеточной симметрии	97
Заключение	102
Список литературы	104
Приложения	110
A Средний квадрат гамильтониана	110

Введение

В теоретической физике некоторая модель (будь то простейшая решеточно-спиновая по типу модели Изинга, либо богатейшая по своим свойствам КХД) характеризуется набором постоянных параметров, задающих ее состояние. Значения этих чисел привносятся в модель извне. Это может случиться в результате сопоставления рассчитанных по модели наблюдаемых с экспериментом (например, углы матрицы Кабиббо-Кобаяси-Маскавы), редукции более общей модели к частному случаю (константа электромагнитного взаимодействия в классической теории из низкоэнергетического квантово-полевого рассмотрения), получены из других соображений (постоянная Стефана-Больцмана в термодинамике может быть рассчитана с привлечением статистической физики). От конкретных величин параметров зависят как сами свойства рассматриваемых систем, так и набор явлений в ней. Следовательно, правильный выбор значений постоянных может влиять на предсказательную силу (например, соотношение суммы плотностей вещества и темной энергии и т.н. критической плотности определяет судьбу Вселенной Фридмана).

Параметры, характеризующие модель, можно охарактеризовать по принципу изменяемости и постоянства. Так, существуют *мировые постоянные*: постоянная Планка, скорость света в вакууме, массы покоя частиц. Бывает так, что значения параметров в рамках процессов системы не меняются, но от эксперимента к эксперименту могут быть изменены: константы связи фундаментальных взаимодействий зависят от масштаба энергии; интенсивность связи электронов с атомами можно менять, изменив состав материала или внешние поля, в которые он помещен. Наконец, остается возможным, что само изменение параметров запускает интересные процессы. Примером последнего может служить смена агрегатных состояний вещества при изменении температуры, давления, внешнего поля (так, сильное магнитное поле разрушает сверхпроводящее состояние проводника).

Если различные состояния какой-либо модели, существующие в определенных диапазонах значений ее параметров, обобщенно называть *фазами*, то в такой модели возможны фазовые переходы. По этому принципу в КХД можно противопоставить друг другу режимы асимптотической свободы и конфайнмента, которые имеют место в разных энергетических масштабах, что задается величиной константы связи. Спиновые системы могут быть упорядочены и формировать магнитные домены или проявлять беспорядок. Приводимые

примеры показывают, что рассмотрение через призму фаз и фазовых переходов возможно как в случае квантово-полевых моделей, так и для конденсированного состояния вещества. В данной диссертационной работе оказалось возможным работать с примерами из каждого класса.

Началом использования современных методов описания фаз общетеоретических моделей можно считать работу [1], в которой рассматривалась калибровочная модель Изинга, где спонтанное нарушение симметрии не реализуется. Вегнер не мог поэтому использовать намагниченность, но предложил исследовать поведение корреляционных функций, что привело к открытию двух режимов модели, которые различаются по отношению к асимптотическому поведению т.н. петли Вильсона.

Реализацией соответствующей идеи в контексте квантовой теории поля является решеточная формулировка калибровочной теории [2]. С этого момента стало возможным выйти за рамки пертурбативного разложения и рассмотреть различные состояния модели. Даже простейшая калибровочная симметрия $U(1)$ в четырехмерном пространстве-времени позволяет выделить режимы конфайнмента и деконфайнмента.

Известно [3], что в силу требования компактности модели на решетке возникают топологические дефекты, связанные с дираковскими струнами, несущими 2π единицы потока каждая. С этой точки зрения решеточные теории поля могут быть описаны в терминах топологических возбуждений — монополей или монополярных токов, а сам фазовый переход выражается в развязывании замкнутых токовых петель. Свойства, которые проявляют топологические дефекты, могут быть использованы для различения фаз, потому что, во-первых, дефекты являются устойчивыми состояниями (т.к. не сводимы к вакуумному состоянию), а значит, ведут себя подобно частицам в статистических моделях, во-вторых, они влияют на локальные свойства модели, нарушают ее порядок, могут образовывать собственные структуры (конденсат). Например, в 4D $U(1)$ -калибровочной модели (компактной электродинамике) фазы с большой и малой константами связи отличаются поведением потенциала взаимодействия. Только в фазе конфайнмента существует характеристика, называемая натяжением струны, потому что между парой монополь-антимонюль существует тонкая трубка потока, следовательно, энергия линейно растет с расстоянием между элементами пары.

Дальнейшие исследования касались решеточной $SU(3)$ -глюодинамики, в которой были достигнуты значительные успехи (см. обзор [4]). Так, при возрастании температуры происходит фазовый переход 1 рода по удержанию цвета с параметром порядка — петлей Полякова. В процессе их исследования оказывается, что свойства монополярной части модели по-прежнему существенны. Именно монополи вносят наибольший вклад в области критического перехода по параметру фермионной части действия модели.

Немаловажным историческим фактом является сближение способов описания изменения состояний модели в решеточных теориях поля и средах кон-

денсированного состояния. Представление о параметрах порядка, корреляторах, упорядочении структур активно используется в обеих областях. В качестве доказательства упомянем попытки сформулировать механизмы дуальной сверхпроводимости [5, 6] и дуального эффекта Мейсснера. Сами названия указывают на глубокую связь техник и методов описания.

В представляемой диссертационной работе продолжается уточнение фазовой диаграммы компактной электродинамики. В Части 1 уже известный и описанный выше переход конфайнмент-деконфайнмент дополняется новым, характеризующимся изменением дальнего порядка расположения монополей. Ставится целью описание структуры магнитных токов, связывающих эти дефекты, посредством пространственных геометрических образов.

В Части 3 представлена часть результатов, полученных в процессе исследования двумерной расширенной модели Хаббарда [7, 8, 9]. Модель описывает поведение спинов электронов в узлах гексагональной решетки в режиме сильной связи (tight-binding) с учетом перемещения последних между узлами решетки и их электростатического взаимодействия. Фазовые переходы в такой модели основаны на изменении относительной интенсивности перескоков между узлами и потенциального взаимодействия. С практической точки зрения эта модель применяется к графену — перспективному материалу для применения в областях нанoeлектроники, спинтроники [10], биосенсорике [11]. С теоретической точки зрения, модель представляет пример генерации магнитных моментов без нарушения глобальной $SU(2)$ -симметрии. Возможно появление топологически упорядоченных фаз [12]. Взаимное влияние заряда и спина является краеугольной чертой t - J -модели и модели Хаббарда.

Следует отметить, что расширенная модель Хаббарда активно исследовалась и продолжает привлекать внимание, как с точки зрения физических свойств и приложений, так с точки зрения тестирования новых компьютерных методов исследования. Можно указать, что в разное время данную модель исследовали при помощи статической и динамической теорий среднего поля, аппроксимацией динамических кластеров, метода функционала плотности, квантовых методов Монте-Карло [13, 14]. Фазовая диаграмма модели очень богата, а простота выбора значений параметров позволяет подойти к вопросу с различных сторон [15, 16].

В Части 3 затронуты некоторые частные темы в отношении расширенной модели Хаббарда, исследования по которым, впрочем, автору неизвестны. Так, будет рассказано о том, что нарушение подрешеточной симметрии по энергии взаимодействия электронов на одном узле приводит к сдвигу границы фазового перехода полуметалл-диэлектрик. Будет рассмотрен вопрос расширения конфигурационного пространства модели при моделировании методом Монте-Карло с вспомогательными полями. Количественно обосновывается, что вычисления при помощи линковых полей обладают рядом достоинств с точки зрения технического применения и качества получаемых результатов. Показываются положительные изменения статистических свойств наблюдаемых при

вычислениях с пятью полями. В качестве практического примера приводятся результаты для теплоемкости электронной подсистемы в модели Хаббарда.

В качестве основного технического приема работы были использованы методы Монте-Карло с марковскими цепями, которые позволяют исследовать конфигурационное пространство решеточных моделей, соответствующих исходным, с целью определения термодинамических и квантово-механических характеристик. Следует отметить, что аккуратное применение данного подхода требует учета ряда обстоятельств и особой пост-обработки получаемых данных. В силу важности данного аспекта работы, который необходим для получения достоверных результатов, Часть 2 содержит обзор методов Квантового Монте-Карло и описание процедур статистической обработки получаемых временных рядов. Следует подчеркнуть, что детальное понимание принципов работы QMC позволяет предлагать различные усовершенствования техник, а углубленный статистический анализ получаемых выходных данных может существенно улучшить качество результатов моделирования.

Научная новизна заключается в новых, полученных в рамках диссертационной работы, результатах, а именно: обнаружены новые фазы внутри состояния конфайнмента компактной электродинамики, предложен новый формализм описания упорядоченных структур магнитных токов, связывающих монополи и антимнополи, с помощью которого возможно исследовать геометрические структуры и дальний порядок. Проанализированы эффекты от расширения конфигурационного пространства модели при помощи введения дополнительных (линковых) вспомогательных полей Хаббарда в рамках реализации метода Квантового Монте-Карло для решеточной фермионной системы. Получены данные для теплоемкости в диапазоне температур от 0.49 до 5.6 эВ. В качестве примера исследован случай отличающихся на подрешетках значений интенсивности взаимодействия электронов на одном узле.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Получен фазовый портрет решеточной калибровочной $U(1)$ -модели с введенным топологическим слагаемым магнитных токов. Обнаружена область существования дальнего порядка монополей в решеточной $U(1)$ -компактной модели. Предложены параметры порядка фазового перехода от неупорядоченного состояния к данному новому состоянию, и найдены условия его разрушения.
2. Предложен новый способ описания магнитных токов, связывающих пары монополь-антимнополь. Выдвигаемый способ имеет достоинства наглядности, однозначности и возможности алгоритмизации построения. Получены гистограммы распределения, совместное рассмотрение которых позволяет детально охарактеризовать свойства топологических дефектов.
3. Предложено новое развитие метода полей Хаббарда-Стратоновича: вве-

дение дополнительных линковых полей позволяет: уменьшить термализационные длины до 5 раз; уменьшить автокорреляционное время для наблюдаемых до 4 раз, вплоть до значений 0.5-0.7 (практически независимые измерения); улучшить флуктуационные свойства наблюдаемых; подавить возникновение метастабильных состояний в ходе обхода конфигурационного пространства в цепи Маркова; явно выявить ограничения на область значений параметров, доступную для метода Монте-Карло. Модификация особенно эффективна в области низких температур до 0.8 эВ.

4. Предложено два независимых способа вычисления теплоемкости электронных возбуждений расширенной модели Хаббарда при температурах системы от 0.56 до 5.6 эВ. Продемонстрирована роль пост-обработки рядов измерений Монте-Карло для улучшения качества получаемых результатов.

Достоверность результатов и апробация работы.

Основные идеи и положения работы изложены в 4 публикациях автора [17, 18, 19, 20] в рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Результаты диссертации докладывались на 4 конференциях. В написанных в соавторстве работах все результаты, представленные в диссертации, получены лично Мостовым С.Д. В работе применялись строгие постановки решаемых задач, математически обоснованные и широко применяемые методы их решения, общие принципы и положения теории физики критических явлений, использование общепризнанных научных методов. Базовые результаты проверялись на соответствие уже известным (положение фазового перехода конфайнмент-деконфайнмент, объемный эффект параметров порядка в фермионной задаче на гексагональной решетке, поведение теплоемкости в пределах низких и высоких температур), для получения новых использовались технические приемы, зарекомендовавшие себя в стохастическом моделировании на решетке. Работа компьютерной программы проверялась рядом стандартных тестов.

Личный вклад.

Во всех опубликованных работах вклад автора является определяющим. Автор принимал активное участие в постановке научных задач, разработке методов их решения, осуществлении вычислений, анализе их результатов и написании статей. Аналитические выражения подготовлены к кодированию на ЭВМ соискателем лично. Все компьютерные программы моделирования и обработки данных Монте-Карло были написаны лично Мостовым С.Д. и являются продуктом его интеллектуальной деятельности. Сторонней является лишь библиотека линейной алгебры Eigen, используемая для нахождения собственных значений и собственных векторов и низкоуровневого матричного

умножения. Мостовым С.Д. реализован ряд оптимизаций компьютерных программ. Мостовым С.Д. выдвигается *новый*, геометрический метод интерпретации магнитных токов, что нашло отражение в отзыве рецензента на статью[18]. Мостовым С.Д. проводились все запуски программ на выполнение, сбор и систематизация данных.

Объем, структура и содержание работы.

Диссертационная работа состоит из введения, трех частей, разбитых на 12 глав, заключения, списка литературы и приложения. Полный объем диссертации — 111 страниц, диссертация содержит 45 рисунков, 2 таблицы, список литературы включает в себя 73 наименования.

Часть 1

Компактная электродинамика

1.1 Определение модели

Бозонная часть компактной калибровочной электродинамики на четырехмерной евклидовой решетке размера L определяется следующим образом. Вся решетка покрывается плакетками, которые представляют собой ориентированные замкнутые контуры длиной 4 линка и характеризуются произведениями линковых переменных, в них входящих. Плакетная переменная равна

$$u_p = u_{x,\mu} u_{x+\mu,\nu} u_{x+\mu+\nu,-\mu} u_{x+\nu,-\nu}.$$

Здесь использовано обозначение $x + \mu$ — соседний узел решетки в направлении μ , а направление $-\mu$ противоположно направлению μ , $\mu = \overline{0, 3}$. С целью обеспечить вещественность действия и калибровочную инвариантность плакетов, линки противоположного направления выбираются комплексно-сопряженными линкам прямого: $u_{x,-\mu} = u_{x-\mu,\mu}^*$, тогда исходное выражение приобретает вид

$$u_p = u_{x,\mu} u_{x+\mu,\nu} u_{x+\nu,\mu}^* u_{x,\nu}^*.$$

Действие модели составляют [21] из плакетов и вклада от числа магнитных монополей

$$S = -\beta \sum_p \operatorname{Re} u_p + \lambda \sum_{x,\mu} |M_{x,\mu}|, \quad (1.1)$$

$\beta = 1/e^2$, e — постоянная взаимодействия.

В $U(1)$ -калибровочной модели каждый линк $u_{x,\mu} = \exp\{i\theta_{x,\mu}\}$ параметризуется углом $\theta_{x,\mu}$ из диапазона $[-\pi; \pi)$, что приводит к “полному плакетному” углу $\theta_p = \theta_{x,\mu} + \theta_{x+\mu,\nu} - \theta_{x+\nu,\mu} - \theta_{x,\nu}$. Требование компактности модели заставляет выделить из полного угла физическую часть, добавив необходимое число слагаемых 2π так, чтобы

$$\theta_p^{\text{phys}} = \theta_p + 2\pi n_p \in [-\pi; \pi).$$

Величина $n_p \equiv n_{x,\mu\nu}$ называется *дефектностью плакета* и связана с возникновением топологических дефектов — магнитных монополей [3] — в модели. Так, магнитный ток

$$M_{x,\mu} = \sum_{\nu} \epsilon_{\mu\nu\lambda\rho} (n_{x+\nu,\lambda\rho} - n_{x,\lambda\rho})$$

связывает два магнитных монополей через т.н. дираковскую струну. $\epsilon_{0123} = 1$. Отметим сразу, что $M_{x,\mu}$ в силу определения может принимать значения $0, \pm 2, \pm 4$.

Традиционно в моделях данного типа используют $\lambda > 0$ для подавления возникновения монополей [3], которых нет в непрерывной электродинамике. В самом деле, это увеличивает вклад второго слагаемого в действие, следовательно, появление магнитных токов становится невыгодным. В нашей работе мы используем $\lambda < 0$ с целью повышенной генерации монополей для уплотнения их структуры. Это вынуждает сформировать упорядоченные “магнитные” объекты, изучение которых и является целью первой части представляемых исследований. Оговоримся, что моделирование ведется, конечно же, с использованием гиббсовского веса e^{-S} , т.е. более выгодными являются состояния с меньшим значением действия.

Согласно (1.1) модель содержит два параметра β, λ , поведение системы в зависимости от которых и является предметом рассмотрения [21, 22]. Моделирование и вычисления средних, распределений и точек фазовой диаграммы выполняется методом Монте-Карло семплирования с распределением Гиббса согласно действию модели. Определяемые средние соответствуют обходу части конфигурационного пространства, вклады от наблюдаемых учитываются согласно стандартному определению

$$\langle O \rangle = \frac{\int O(x) e^{-S(x)} dx}{\int e^{-S(x)}} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n O(x_i),$$

где x — вся совокупность переменных, характеризующих конфигурацию, а суммирование ведется по сгенерированным согласно алгоритму Метрополиса-Гастингса конфигурациям. Верно реализованный алгоритм генерации новых конфигураций (обхода конфигурационного пространства) в пределе $n \rightarrow \infty$ воспроизводит *целевое* распределение $\sim e^{-S}$. Детали теоретического основания и практической реализации будут особо изложены в Части 2.

1.2 Фазовые переходы

Начнем представление свойств компактной электродинамики с рассмотрения топологического фазового перехода по рождению монополей в случае $\lambda = 0$. Традиционно [2] это выполняется посредством петель Вильсона. Так называется калибровочно-инвариантный объект, произведение линковых переменных,

ограничивающих плоский прямоугольник площади $A = T \times R$:

$$W(T, R) = u_{x,\mu} u_{x+\mu,\mu} \cdots u_{x+T\mu,\nu} \cdots u_{x+T\mu+R\nu,-\mu} \cdots u_{x+R\nu,-\nu} \cdots u_{x+\nu,-\nu}. \quad (1.2)$$

В фазе конфайнмента $\beta \rightarrow 0$ эта величина подчиняется закону площадей [23]

$$W = \beta^A + \cdots = a e^{-V(R)T} = a^{-\sigma(\beta,\lambda)R \cdot T} \sim e^{-\sigma T}, \quad (1.3)$$

где σ есть т.н. натяжение струны, что связано с возможной интерпретацией линий петли Вильсона как пары кварк-антикварк, которые связаны глюонной струной. Поэтому в показателе экспоненты содержится потенциал взаимодействия двух частиц на расстоянии R друг от друга. В пределе $\beta \rightarrow \infty$, напротив, имеет место периметрический закон

$$W \sim e^{-b(T+R)},$$

что воспринимается как состояние деконфайнмента. Таким образом, при приближении к линии фазового перехода со стороны малых β натяжение струны σ уменьшается и обращается в 0 в точке фазового перехода. Поэтому изменение асимптотики $\ln W(T, R)$ от $T \cdot R$ к $T + R$ является хорошим тестом на смену состояния модели. Это можно наблюдать на Рис. 1.1, где приведены черные точки значений σ , посчитанные по формальной аппроксимации поведения петель Вильсона при фиксированном значении β , и ожидаемый аналитический ответ для натяжения струны из (1.3). Около значения $\beta \approx 1.0$ начинается отход от предполагаемой асимптотики для малых β , что сигнализирует о нарушении площадного закона, что и интерпретируется как свидетельство фазового перехода в указанной точке.

Общее поведение петель Вильсона в зависимости от β и A приведено на Рис. 1.2. График содержит степенные функции по β для лучшей наглядности: можно оценить степень точности установления фазы конфайнмента, в которой выполнен закон площадей. Значение $\beta \approx 1$ [3] также хорошо идентифицируется.

Исследование асимптотик петли Вильсона не является единственной возможностью обнаружить фазовый переход. Другим параметром порядка может служить плакет-плакетный коррелятор $u_p u_{p'}$ на разных расстояниях d друг от друга. Пример приведен на Рис. 1.3. При всех расстояниях между плакетами наблюдают изменение значений данной величины при переходе через критическое значение $\beta \approx 1$, а в самой этой точке все кривые проявляют сингулярное поведение, что лишним раз указывает на наличие фазового перехода.

С точки зрения автора заслуживает внимания тот факт, что добавляемое “магнитное” слагаемое в действие также может быть использовано в качестве параметра порядка. Рассмотрим Рис. 1.4. Легко видеть, что по причине отсутствия монополей в фазе деконфайнмента среднее $\langle |M_{x,\mu}| \rangle$, рассчитанное по всей решетке, резко “обрушивается” в 0 сразу после точки фазового перехода. Хотелось бы подчеркнуть, что данная переменная хоть и не является

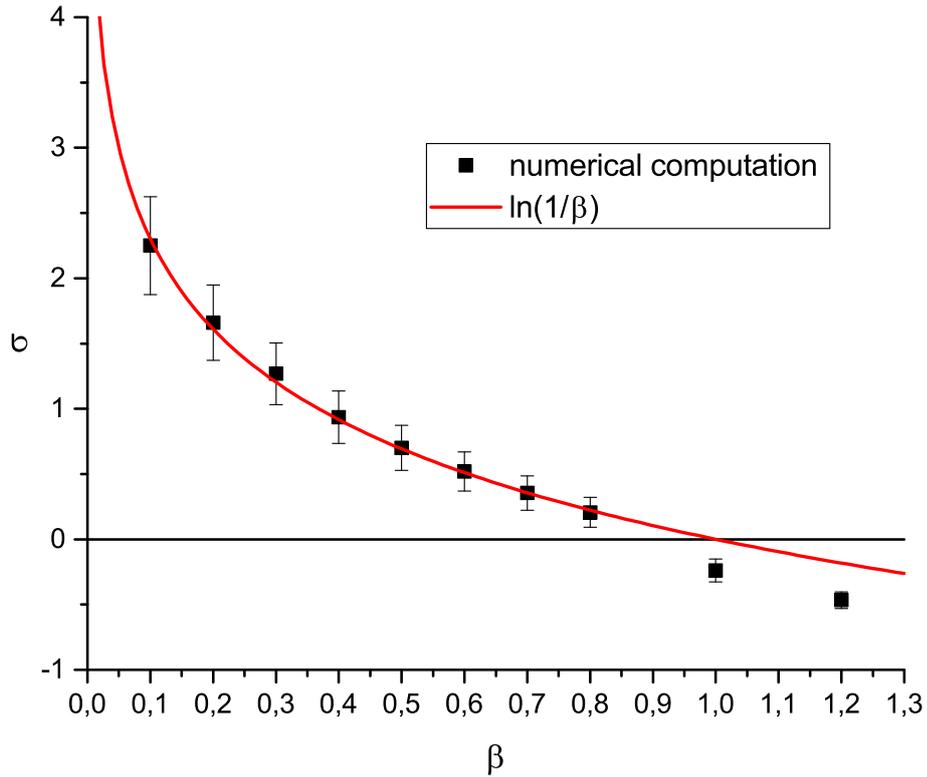


Рис. 1.1: Натяжение струны как функция β . Добавлена ожидаемая асимптотика в области конфайнмента, что позволяет сделать вывод о хорошем качестве вычисленных значений (точки хорошо согласуются с теоретической кривой). Обращение σ в 0 характеризует точку фазового перехода.

калибровочно-инвариантной, но *естественным* образом (согласно самому своему определению) различает две фазы модели. Именно поэтому с ее помощью возможно идентифицировать точку фазового перехода по β с существенной точностью (ср. локализацию для случая коррелятора плакетов Рис. 1.3 и для токов Рис. 1.4).

Можно продвинуться дальше: работа посвящена исследованию свойств компактной электродинамики при ненулевых значениях λ , что уже невозможно выполнить аналитически. Поэтому был использован метод Монте-Карло для написания компьютерной программы с целью вычисления значений наблюдаемых в большой совокупности точек для дальнейшего анализа. После нескольких тестов выбор пал на коррелятор магнитных токов

$$C(d) = \left\langle \frac{1}{4} \sum_{\nu} M_{x,\mu} M_{x+\nu d,\mu} \right\rangle_{x,\mu} \equiv \frac{1}{16} \left\langle \sum_{\nu,\mu} M_{x,\mu} M_{x+\nu d,\mu} \right\rangle_x. \quad (1.4)$$

К достоинствам указанной величины можно отнести: ее значение характеризует тип и геометрическое расположение пространственных структур монополей

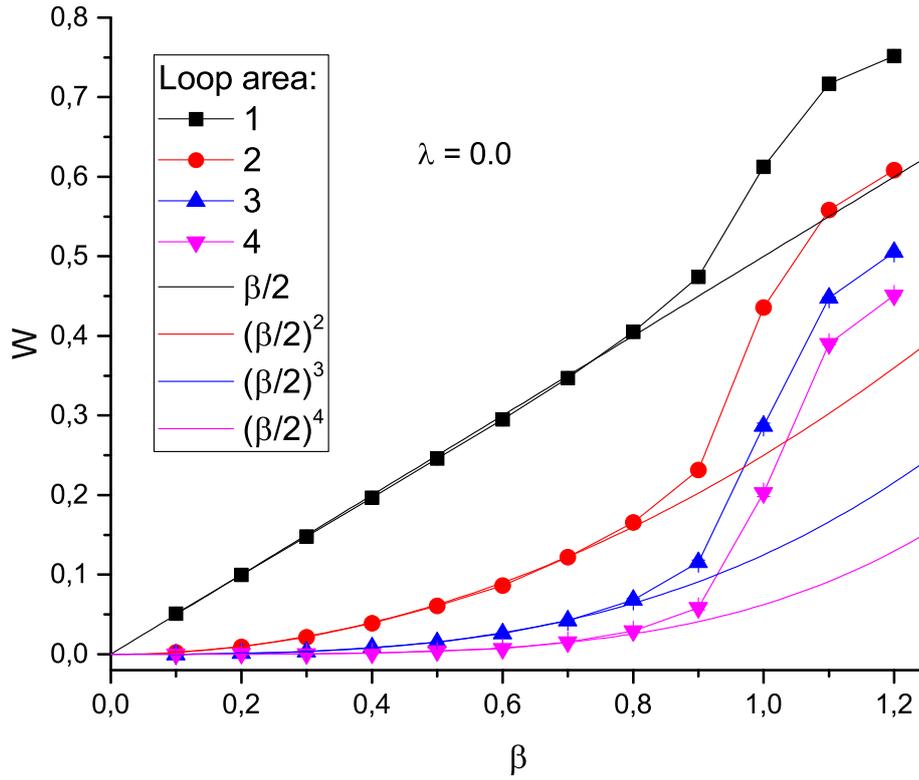


Рис. 1.2: Петля Вильсона разных размеров как функция β . Добавлены графики степенных функций по β с целью выделения области, где хорошо выполнен площадной закон.

(см. ниже), хорошую “заложенную” статистику (по определению усреднение ведется по всем узлам и всем направлениям), наличие физической интерпретации величины в области физики конденсированного состояния.

Начнем с последнего. Построение графиков зависимости $C(d)$ от расстояния d между токами выявляет осциллирующий характер. Хорошо известно, что это соответствует дальнему порядку расположения молекул и атомов в жидкостях и твердых телах. Так, кристаллические тела имеют радиальные корреляционные функции (pair correlation function) [24] с ярко выраженной долгой осциллирующей составляющей, а жидкости проявляют меньше колебаний, зато большей амплитуды на малых расстояниях. В результате вид функции позволяет судить о наличии порядка в расположении структур в системе. В нашем случае это представляют собой монополи.

С целью конкретизации рассуждений обратимся к Рис. 1.5 и Рис. 1.6. Вычисления при значениях $\lambda = -0.4$ и $\lambda = -0.8$ не дают сколько-нибудь определенной взаимозависимости значений токов $M_{x,\mu}$ на расстояниях, больших одной длины линка ($d = 1$). Это означает, что корреляции (порядок) токов в системе отсутствует, а монополи беспорядочно расположены в толще решетки. Можно привести аналогию с газообразной фазой в теории конденсированно-

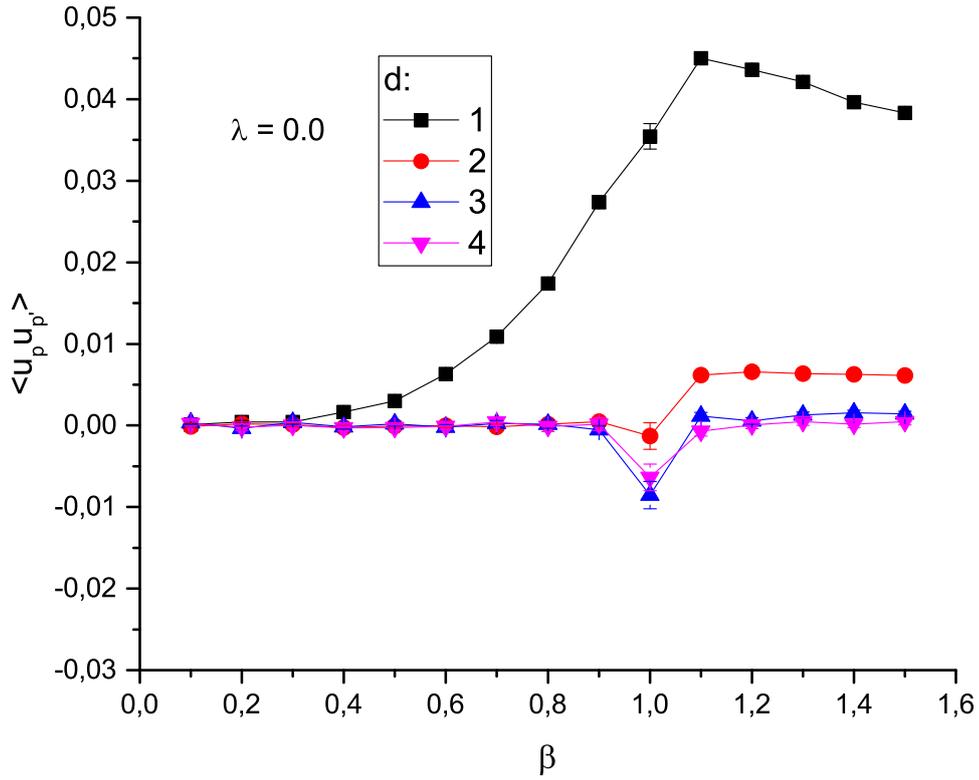


Рис. 1.3: Плакет-плакетный коррелятор для разных расстояний d между ними как функция β . Можно наблюдать резкую смену поведения в точке фазового перехода конфайнмент-деконфайнмент.

го состояния. Усиление генерации монополей путем уменьшения λ до -1.0 провоцирует переход модели в качественно новое состояние: можно видеть появление длинных осцилляций, а характер изменения $C(d)$ больше напоминает периодический, хотя и затухающий. Это имеет прямую аналогию с радиальным распределением для расположения молекул в жидком состоянии. Дальнейшее усиление роли второго слагаемого в действии (1.1) приводит к росту корреляций на всех расстояниях, впрочем, при больших d эффект сильно подавлен.

Теперь рассмотрим, что изменится при моделировании для разных λ при фиксированном $\beta = 0.2$. Лишь при $\lambda = -0.4$ имеет место отсутствие скоррелированности расположения монополей на решетке. Однако при всех других показанных значениях λ реализуется дальний порядок, причем на всех рассмотренных расстояниях. Следует обратить внимание на любопытное обстоятельство: при уменьшении λ , т.е. при усилении генерации, $C(4)$ снижается, а не повышается, как в случае $\beta = 2.0$! Это свидетельствует о новом, третьем режиме существования модели. Если при $\beta = 0.2$, $\lambda = -0.8$ поведение монополей можно было бы сравнить с кристаллическим состоянием конденсированной среды, то при $\beta = 0.2$, $\lambda = -2.0$ величина взаимного влияния в половину мень-

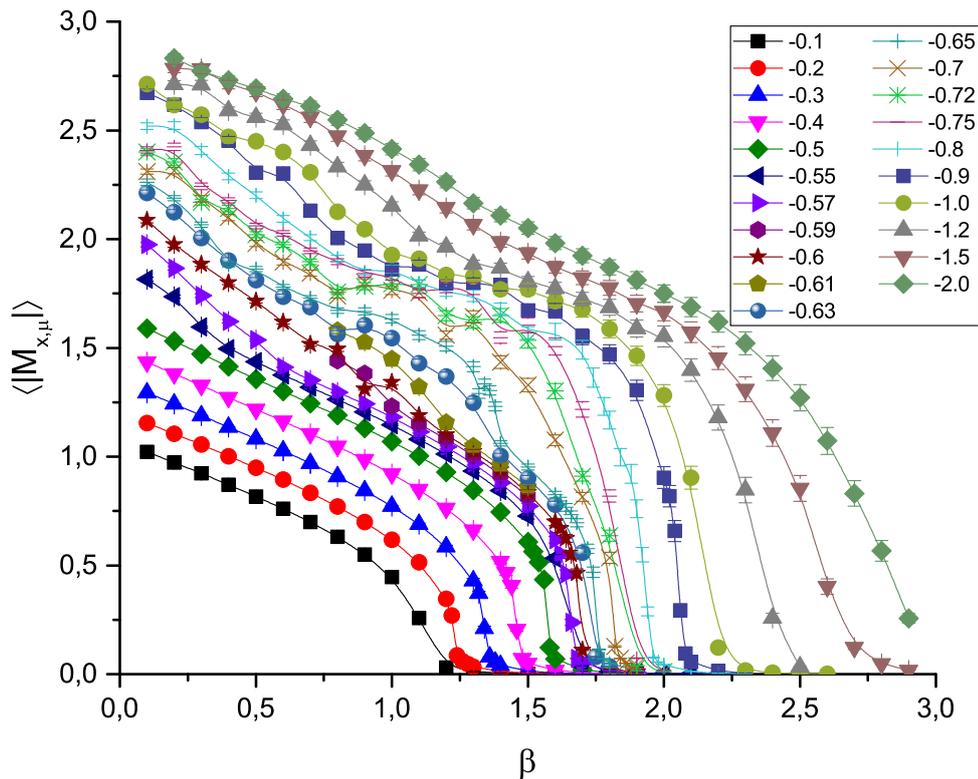


Рис. 1.4: Средняя величина магнитного тока также позволяет обнаружить фазовый переход конфеймент-деконфеймент. Обращает на себя внимание резкое падение величины на границе фаз.

ше, что может интерпретироваться как формирование “жидкой среды”. Таким образом, чрезмерная генерация монополей разрушает идеальный порядок их расположения. Можно предположить существование оптимальной плотности монополей, когда их структура проявляет наилучшую симметрию.

Чтобы проиллюстрировать закономерность реакции коррелятора $C(d)$ на изменение фаз модели, приведем результаты вычислений для последовательного ряда значений λ и β (см. Рис. 1.7 и Рис. 1.8). Черные квадратные точки отражают величину $C(1)$, в то время как красные круглые — аналогичную величину, где вместо $M_{x,\mu}$ были взяты их знаки $\text{sgn } M_{x,\mu}$. Идея первого рисунка обобщает только что рассмотренные: при фиксированном значении β изменяется значение λ , что приводит к фазовому переходу, выражающемуся в изменении порядка расположения монополей из хаотического состояния в наиболее упорядоченное. Это можно видеть, сравнив значения ненормированного коррелятора на двух рисунках: значения порядка -8 являются наибольшими достижимыми. Нормированный коррелятор добавляет новую информацию при исследовании зависимости $C(1)(\beta)$: при уменьшении этого параметра сначала осуществляется “конденсация”, затем порядок постепенно изменяется до достижения наилучшего из возможных. Таким образом, при данном значении

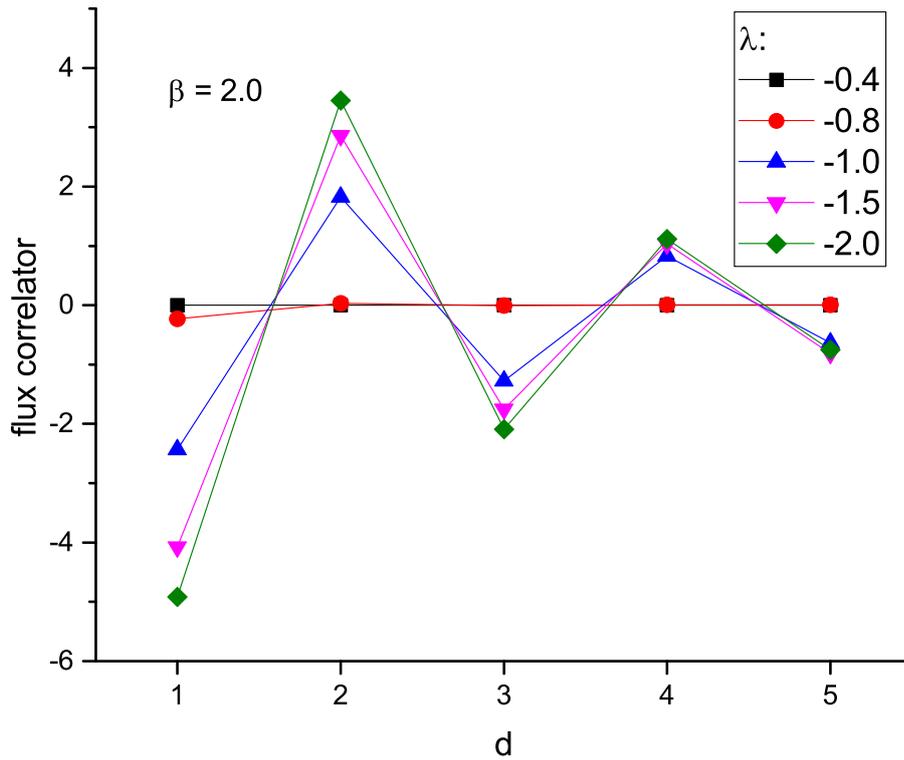


Рис. 1.5: Коррелятор токов в зависимости от расстояния d показывает существование упорядоченных структур монополей. Кривые $\lambda = -0.8$ и $\lambda = -1.5$ принадлежат разным фазам, потому что различаются поведением в отношении к дальнему порядку.

параметра λ происходит последовательно два фазовых перехода — условно, газ-жидкость, жидкость-кристалл — причем нормированный коррелятор реагирует, по всей видимости, только на первый, а ненормированный позволяет отследить полную эволюцию смены состояний.

Подчеркнем, однако, что Рис. 1.7 и Рис. 1.8 представляют собой сечения фазовой диаграммы вдоль разных направлений, поэтому прямое сравнение эффектов (например, при таком-то значении существует три фазы, а при таком-то — только две) выполнять не следует. Для этого необходимо рассматривать два параллельных сечения вдоль одного направления, но при разных значениях зафиксированного параметра. В данном же обсуждении мы просто иллюстрируем возможности использования величины $C(d)$ и даем представление о ее чувствительности к изменению симметрии монополей.

Объединение всех полученных результатов расчетов для двумерной совокупности точек на плоскости $\lambda-\beta$ дает *фазовую диаграмму* модели, показанную на Рис. 1.9. Штриховая кривая, отсекающая верхний правый угол, представляет известный переход конфайнмент-деконфайнмент [25]. При больших значениях λ и β возникновение монополей сильно подавлено, имеют место все те

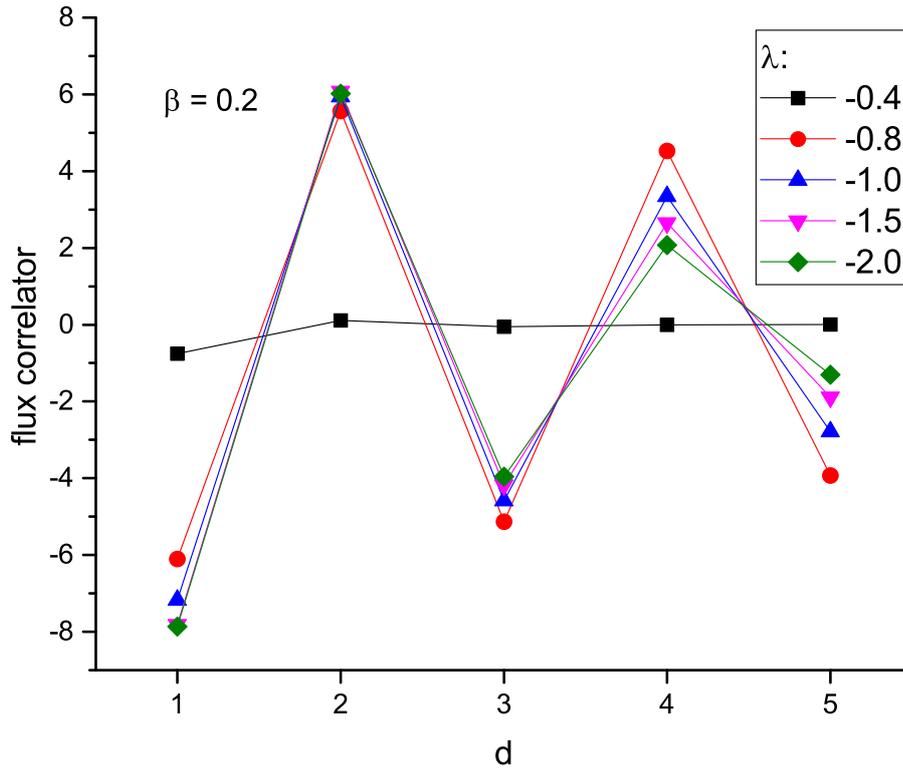


Рис. 1.6: То же, что на Рис. 1.5, но для меньшего значения β . Следует видеть, что при $\lambda = -0.8$ модель перешла в другую фазу, а сами корреляции при небольших $|\lambda|$ на расстоянии 4 усилились. Таким образом, следует различать не две фазы, а три.

поведения петли Вильсона и плакетных корреляторов, о которых рассказано выше. Мы называем это состояние **свободным от монополей**. Область фазовой диаграммы под указанной кривой предлагается (по итогам работ автора) к разделению еще на две части *кривой конденсации монополей*. При $\lambda > \lambda_{cr}(\beta)$ дальний порядок не существует, коррелятор в зависимости от расстояния ведет себя так, как это показано на Рис. 1.5 при $\lambda = -0.4$. Предлагается рабочее название **газ монополей**: они существуют, их концентрация может быть заметная (см. Рис. 1.4), но они совершенно хаотично расположены в толще решетки. Кривая $\beta_{cr} = \beta_{cr}(\lambda)$, нанесенная точками на обсуждаемой фазовой диаграмме, представляет собой новый результат, полученный автором: при уменьшении λ происходит “конденсация” монополей, с резким возрастанием корреляционной длины, установлением дальнего порядка, образованием пространственных структур (см. ниже). Разницу между состояниями модели можно почувствовать, взглянув на Рис. 1.6 (следует сравнить поведение коррелятора для $\lambda = -0.4$ и $\lambda = -0.8$). Предлагается называть эту фазу **конденсатом**. Свойства магнитных монополей (плотность, геометрическое расположение, формирование структур) компактной электродинамики в этом состоянии

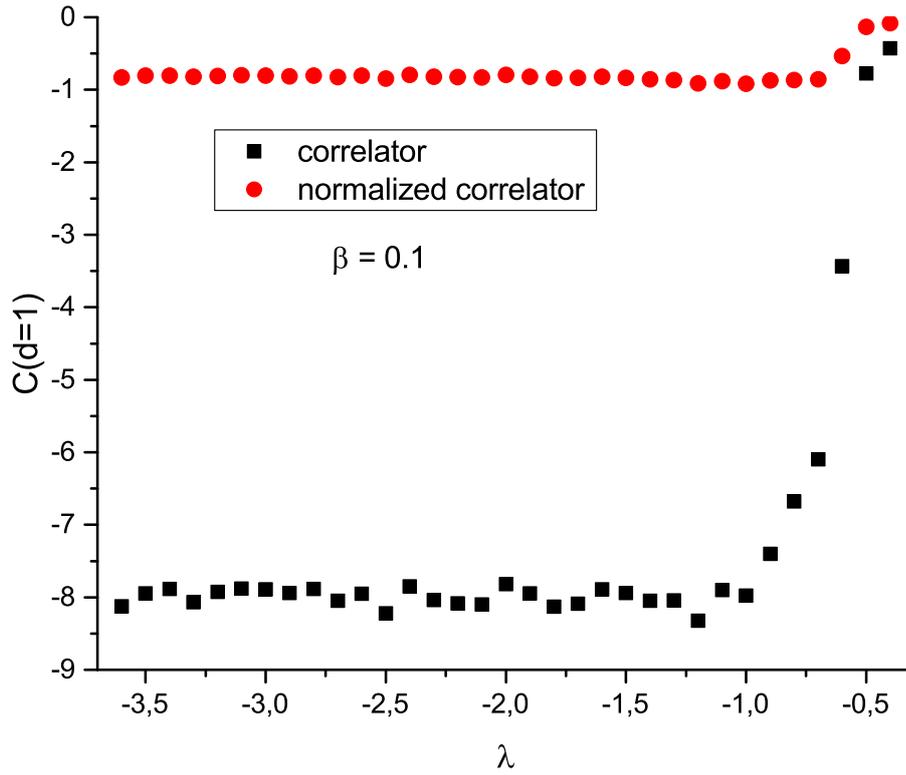


Рис. 1.7: Величины коррелятора магнитных токов (1.4) и коррелятор знаков магнитных токов (см. основной текст) при $\beta = 0.1$. Показывается возможность обнаружить изменение состояния модели с точки зрения упорядочения пространственного расположения монополей на решетке. Наблюдают один фазовый переход.

являются главным вопросом исследования, представленного ниже.

Следует особо отметить, что автором получены свидетельства в пользу существования двух подсостояний (возможно, фаз, хотя переход между ними весьма размыт): условно, жидкого и твердого. Аргументом в пользу такого разделения может служить различие темпов убывания амплитуды корреляций с расстоянием d , на что уже указывалось при обсуждении Рис. 1.5 и Рис. 1.6. При использовании величины $C(1)$ данный эффект увидеть, по всей видимости, невозможно. В таком случае следует воспользоваться дополнительной величиной *наклона* (slope, [17])

$$\gamma = \frac{C(3) - C(1)}{C(1)}, \quad (1.5)$$

которая показывает относительное уменьшение амплитуды второго максимума коррелятора магнитных токов по сравнению с амплитудой первого максимума. Эта величина будет тем *меньше*, чем скорее падает скоррелированность, следовательно, значения, *близкие* к 0, соответствуют предполагаемому состоя-

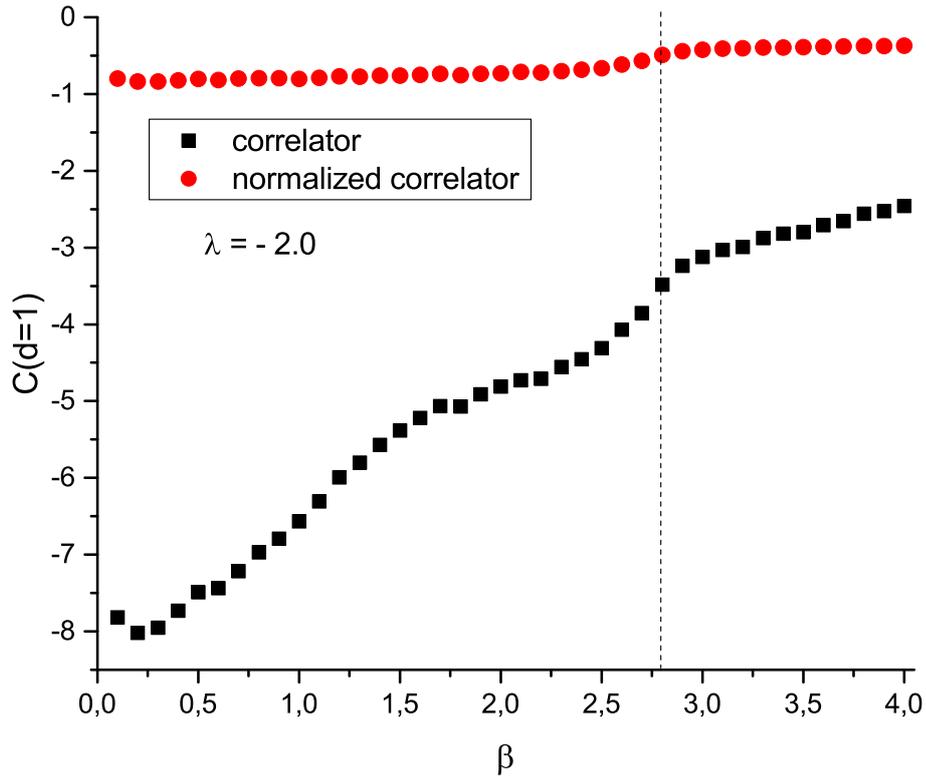


Рис. 1.8: Аналогично Рис. 1.7, но при $\lambda = -2.0$. Предполагается существование двух фазовых переходов, причем разные типы корреляторов по-разному реагируют на каждый.

нию “кристалла”. Если построить фазовую диаграмму с использованием γ , что сделано на Рис. 1.10, то ярко выявляется участок вблизи границы конденсации, который проявляет наибольший дальний порядок. Эту область и предполагается отождествить с регулярным расположением монополей в толще модели.

Было проведено дополнительное исследование геометрического взаимного расположения монополей в указанной области. Оказалось, что реализуется особый, идеально упорядоченный, случай, когда значения $M_{x,\mu} = \pm 4$ и $M_{x,\mu} = \pm 2$ окружены исключительно значениями противоположного знака (но модуль может быть иным). В результате образуется строгая периодическая решетка с большой плотностью пар монополю-антимонюполь, представляющих собой кубическую решетку. Весьма вероятно, ортогональная геометрия навязывается решеточно-узловой дискретизацией, а не является естественной симметрией состояния, но, тем не менее, ни в какой другой области фазовой диаграммы подобного эффекта автору наблюдать не удалось. Более того, будучи окруженными своими соседями противоположного знака со всех сторон, подобное состояние монополей проявляет высокую степень изотропии, что также выгодно выделяет данное предполагаемое состояние из числа других наблюдаемых, где значения $M_{x,\mu} = \pm 4$ в той или иной степени “разбавлены”

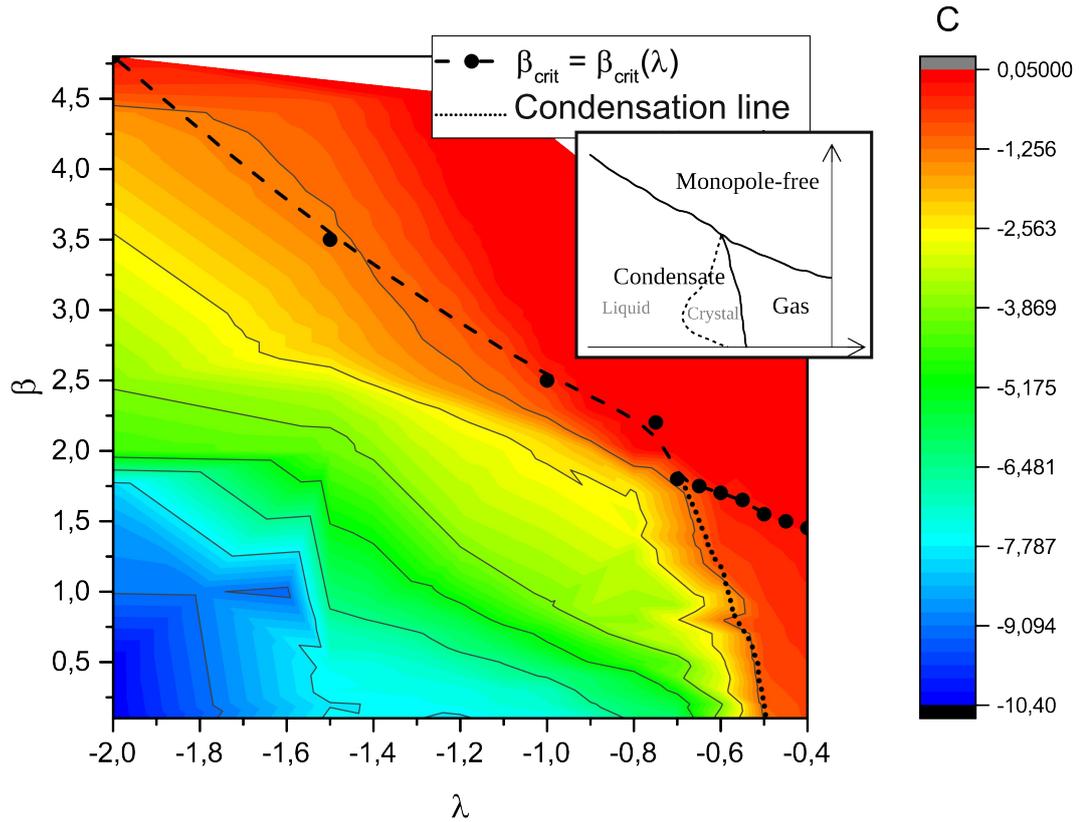


Рис. 1.9: Значения $C(1)$ для двумерного набора точек (λ, β) представляют фазовую диаграмму. Основной текст содержит комментарий относительно трех выделяемых фаз и двух подсостояний в рамках одной из фаз. Врезка показывает предлагаемую автором интерпретацию полученных данных.

вкраплениями ± 2 .

Были предприняты попытки матричного описания данного “кристаллического” состояния, однако окончательный результат опубликован в рецензируемых изданиях не был, потому не включается в положения, выдвигаемые на защиту диссертационной работы. По мнению автора требуется дальнейшее исследование свойств корреляторов, направленное на доказательство или опровержение отличий свойств “кристаллической” области от области “жидкости”. Автор может утверждать уже сейчас, что при сильно отрицательных значениях λ усиленное появление монополей $|M_{x,\mu}| = 4$ уничтожает сформированный порядок и приводит к появлению менее упорядоченного жидкого состояния с постепенным ростом среднего количества токов, равных по модулю четырем. Именно поэтому область, предполагаемая в качестве наиболее симметричной, ограничена *слева* на фазовой диаграмме.

В завершение обзора данной части результатов хотелось бы указать, что нормированный коррелятор $C(d = 1)$, в котором вместо $M_{x,\mu}$ используются $\text{sgn } M_{x,\mu}$ также дает некоторое свидетельство в пользу существования сверху-

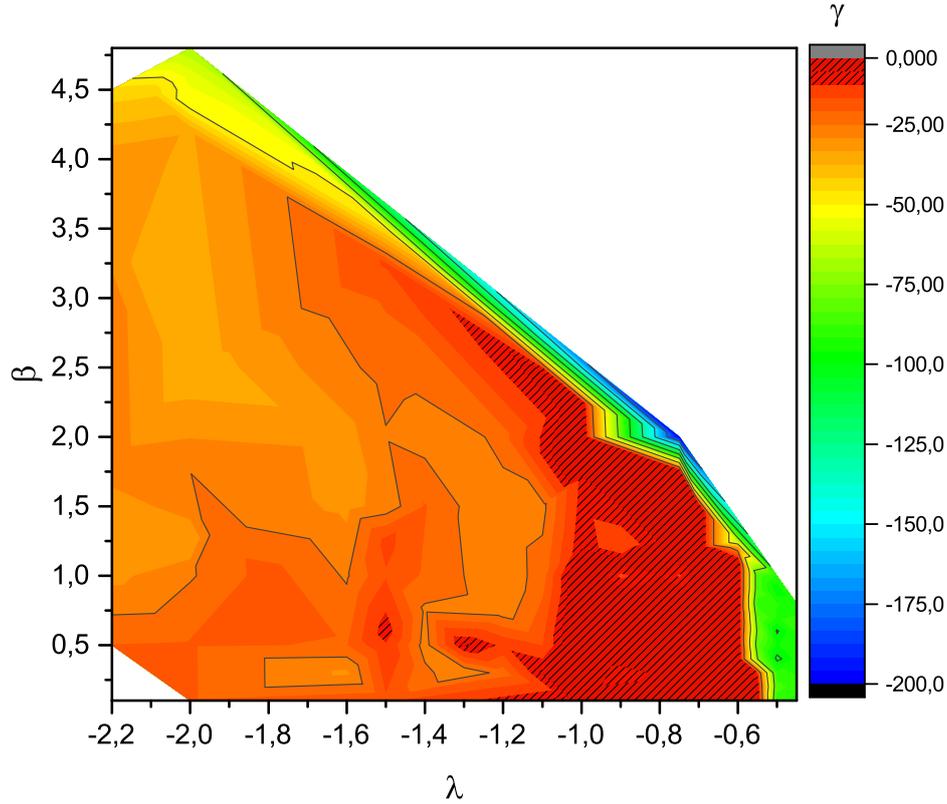


Рис. 1.10: Фазовая диаграмма в терминах (1.5) (выражено в %). Возможно выделить внутренний участок фазы конденсата, где реализуется самый дальний порядок. См. основной текст.

порядоченного состояния. Это можно проиллюстрировать Рис. 1.11, где темно-синий цвет выделяет область, примерно совпадающую с областью, указанной по γ . Тем не менее, следует признать расхождение предсказаний по γ и по нормированному $C(1)$ в области $\beta \lesssim 1.0$ и прилегающей к линии фазового перехода конденсат-газ.

1.3 Геометрический метод исследования состояния монополей

Принципиально новым результатом, выносимым на защиту, и не встречающимся автору ни в какой известной автору работе, является предлагаемый *геометрический метод* исследования взаимного расположения магнитных токов в толще модели при помощи **токовых объектов** [18]. Метод был опубликован в рецензируемом издании и получил оценку от рецензента “I’m not aware of similar approaches to dense monopole states, and therefore I believe that the approach of the authors is original. New evidence is given in the existence of several distinct phase transitions, the presentation is clearer now”, что подтверждает научную но-

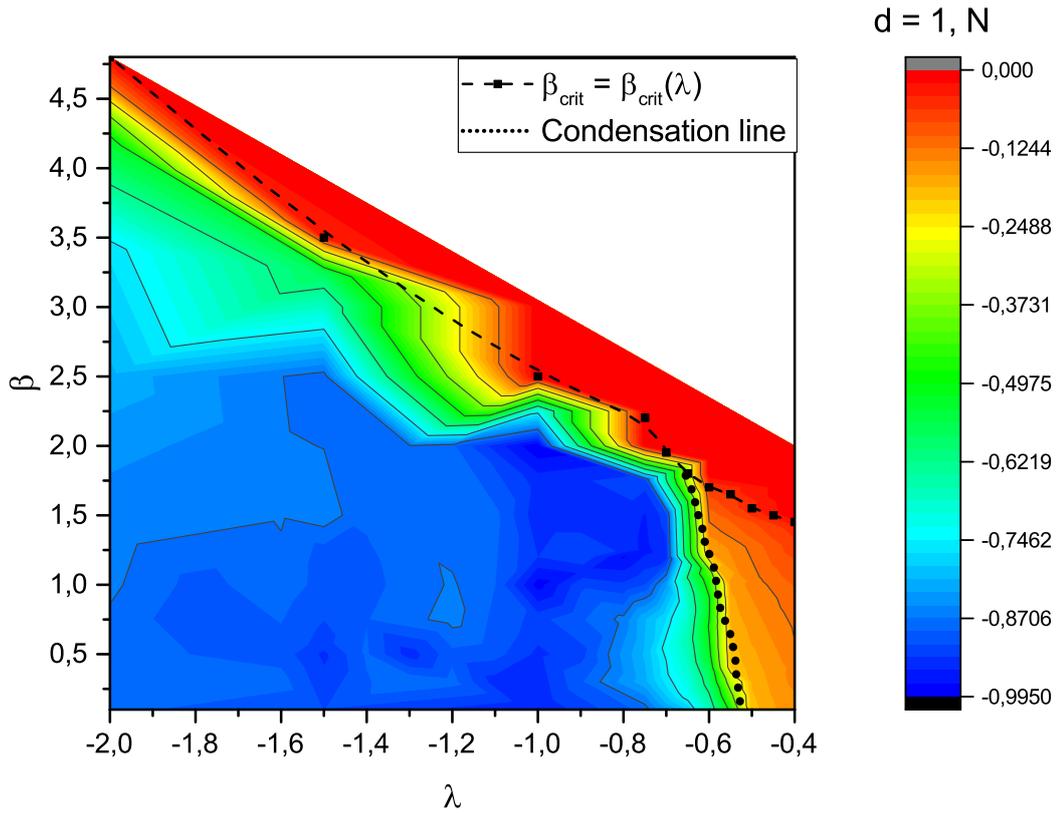


Рис. 1.11: Фазовая диаграмма в терминах $C(1)$, в котором вместо токов использованы их знаки. Темно-синий участок, возможно, подтверждает существование состояния “кристалла” в области $-1.05 \lesssim \lambda \lesssim -0.7$ и $1.0 \lesssim \beta \lesssim 2.0$.

визну подхода.

Изложим его суть последовательно, а затем приведем результаты, получаемые с его помощью.

Вводится понятие *окружения* (neighbourhood) токов $M_{x,\mu}$, которое состоит из линков, имеющих с данным линком общий узел. Моделирование показало, что при построении объектов следует исходить из опоры на линки с $M_{x,\mu} = \pm 4$. Описание конденсированной фазы, приведенное в предыдущем разделе, показывает, что особо следует рассматривать соседние линки, обладающие противоположным знаком значений $M_{x,\mu}$. Таким образом, мы будем рассматривать только лишь $M_{x,\mu} = \pm 4$, расположенные рядом так, что они имеют различные знаки.

Вводятся **токовые объекты** (current objects) — четырехмерные наборы линков, ассоциированных с токами $M_{x,\mu}$, модули которых равны 4, а знаки соседних токов противоположны. Такой объект создается компьютерным алгоритмом по данной (предварительно подготовленной в результате процесса Монте-Карло) конфигурации (совокупности всех линковых переменных решетки), сгенерированной в результате некоторого обхода конфигурационного пространства согласно алгоритму Метрополиса-Гастингса, о чем будет расска-

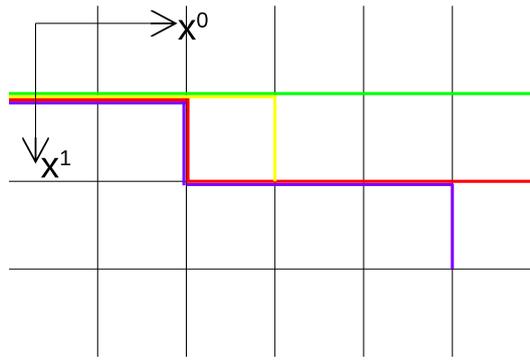


Рис. 1.12: Токковый объект — нить. Описание см. в основном тексте.

зано в Части 2. Оказалось возможным ввести как минимум два типа токковых объектов, отличающихся построением (определением), с целью разностороннего анализа каждой получаемой конфигурации. После конструирования токкового объекта производится анализ его геометрических свойств с целью характеризовать текущее состояние модели.

Везде ниже использовано значение параметра $\beta = 0.2$, и несколько значений λ , специально выбранных в разных фазах.

Объект первый — **нить** (fiber). На Рис. 1.12 показан объект, который предлагается называть нитью. Выбирают какой-нибудь линк из рассматриваемых (со значением $M_{x,\mu} = \pm 4$), затем среди *окружения* разыскивают линк противоположного знака (с тем же модулем 4), который был бы расположен в положительном направлении какой-либо из осей ($\mu > 0$). Каждый из найденных таким образом линков становится новым элементом нити. Причем, если найдено более одного линка, то на данном шаге получают столько новых нитей, сколько найдено линков, потому что нить по определению не может ветвиться. Очевидно, все текущие конструируемые нити содержат общие линки, близкие к корню и добавленные ранее. Это проиллюстрировано на Рис. 1.12, где в точке визуального разделения зеленой и желтой нитей алгоритм создает *два* объекта: отдельно зеленую нить, отдельно желтую. Аналогично тройное разделение имело место в точке деления красной и зеленой нитей в точке левее на Рисунке. Разумеется, конструирование начиналось с добавления линков к одной-единственной красной нити, но в соответствующих точках, в которых было найдено сразу два подходящих новых линка, были созданы копии. Каждый линк может быть включен лишь в один объект, поэтому желтая нить упирается в красную, расположенную ниже, и ее конструирование с этого момента не продолжается.

Объект второй — **дерево** (tree). На Рис. 1.13 приводится пример созданного алгоритмом дерева. Конструирование снова начинается с некоторого линка, но соседние линки выбираются из претендентов в любом направлении (т.е., как $\mu > 0$, так и $\mu < 0$), а к дереву добавляются *все* найденные новые элементы. Поэтому такой объект активно начинает “ветвиться”.

Может возникнуть вопрос, почему для объектов установлены именно та-

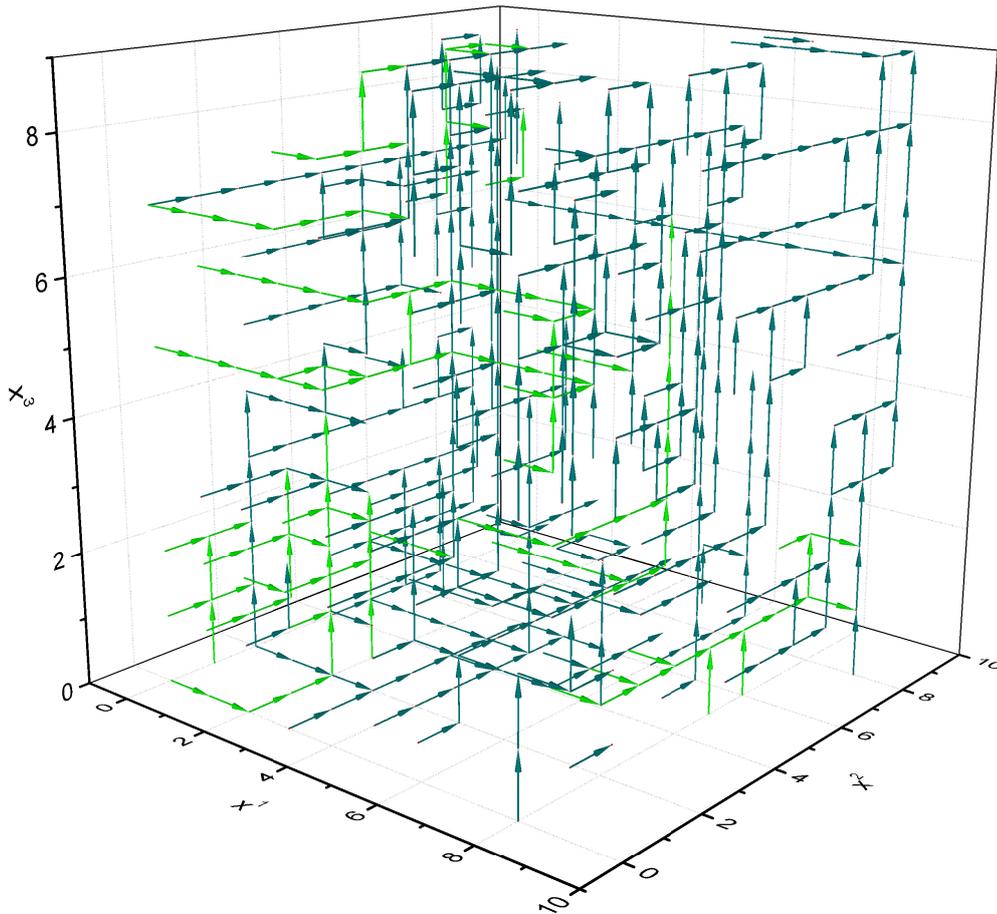


Рис. 1.14: Пример построения нитей из магнитных токов. Стрелки показывают направление построения при работе алгоритма. Два цвета различают те объекты, построение которых началось со значения $M_{x,\mu} = 4$ и $M_{x,\mu} = -4$.

Число линков: количество линков в объекте;

Размерность: число размерностей внутри четырехмерного пространства, в которых располагается дерево (см. ниже);

Объем: оценка размеров решетки, занятого объектом;

Окруженность (neighbouring): число линков дерева, соседних с каждым рассматриваем по очереди узлом; возможный способ описать плотность объекта.

Прокомментируем понятие *размерности дерева*. Рассматривая линки данного дерева один за другим, вычисляют, сколько различных измерений (от 1 до 4 включительно) задействовано. Вычисления показывают, что в конфигурации очень часто существуют деревья с максимальным значением данной характеристики, равной 4, однако частотность деревьев различной размерности не одинакова. Именно эта особенность отражает изменение коллективных

свойств монополей.

Объем дерева определялся двумя способами. Во-первых, можно заключить весь объект в гипер-параллелепипед наименьшего объема так, чтобы он полностью включал первый в себя, и приписать объекту получаемый объем. Формулой это записывается как

$$V = \Delta x^0 \Delta x^1 \Delta x^2 \Delta x^3,$$

где $\Delta x^k, k = \overline{0, 3}$ представляет соответствующие ребра прямоугольника. Извлечение корня четвертой степени позволяет вернуться к привычным значениям размерности длины, сравнимым с размером решетки L . Однако очевидно, что такой подход не работает в случае деревьев размерности меньшей, чем 4. Для исправления ситуации предлагается второй вариант — определение величины диагонали прямоугольной m -мерной области ($m = \overline{1, 4}$), ограничивающей всю фигуру:

$$R = \sqrt{(\Delta x^0)^2 + (\Delta x^1)^2 + (\Delta x^2)^2 + (\Delta x^3)^2},$$

где $\Delta x^k, k = \overline{0, 3}$ суть минимальные изменения координат решетки, включающие все линки рассматриваемого объекта. Второе определение распространяется на все деревья для данной конфигурации и потому является более общим.

Анализ конфигураций состоит в построении гистограмм вычисляемых характеристик с целью выявления трендов при изменении λ . Приведем ряд примеров.

Длины нитей (Рис. 1.15, Рис. 1.16) распадаются на две группы в зависимости от параметра λ . При небольшой интенсивности порождающего монополи члена в действии наблюдается преобладание относительно коротких (до 10) нитей. Поскольку это число совпадает с ограничением на линейный размер решетки ($L = 10$), а четвертое измерение не задействовано, то можно ожидать формирования слабо связанных линейно-вытянутых комплексов линков с чередующимися значениями $M_{x,\mu} = \pm 4$. Это следует сравнить с результатами для $\lambda = -2.0$, когда линки расположены во всех направлениях (т.к. нити становятся четырехмерными, см. Рис. 1.16), а их длина превышает $L = 10$, что означает распространение в среднем по направлению диагонали решетки с вовлечением ряда изгибов (колен, knees). Случай $\lambda = -1.5$ иллюстрирует промежуточную ситуацию, когда нити уже начинают изгибаться, но это происходит преимущественно лишь в трех измерениях (следует сравнить два Рисунка).

Для подтверждения высказанных только что соображений рассмотрим распределения для изгибов и плотности изгибов (Рис. 1.17, Рис. 1.18). Для значений $\lambda \gtrsim -1.0$ объекты формируют преимущественно прямолинейные структуры, что автоматически подразумевает ограниченность в отношении числа задействованных измерений. Напротив, конфигурации $\lambda \approx -2.0$ помимо линейных содержат и изогнутые нити с большой плотностью изгибов. Поскольку каждая нить по построению содержит лишь один “путь”, то по причине наличия большого числа соседних линков с $M_{x,\mu} = \pm 4$ количество самих объектов резко

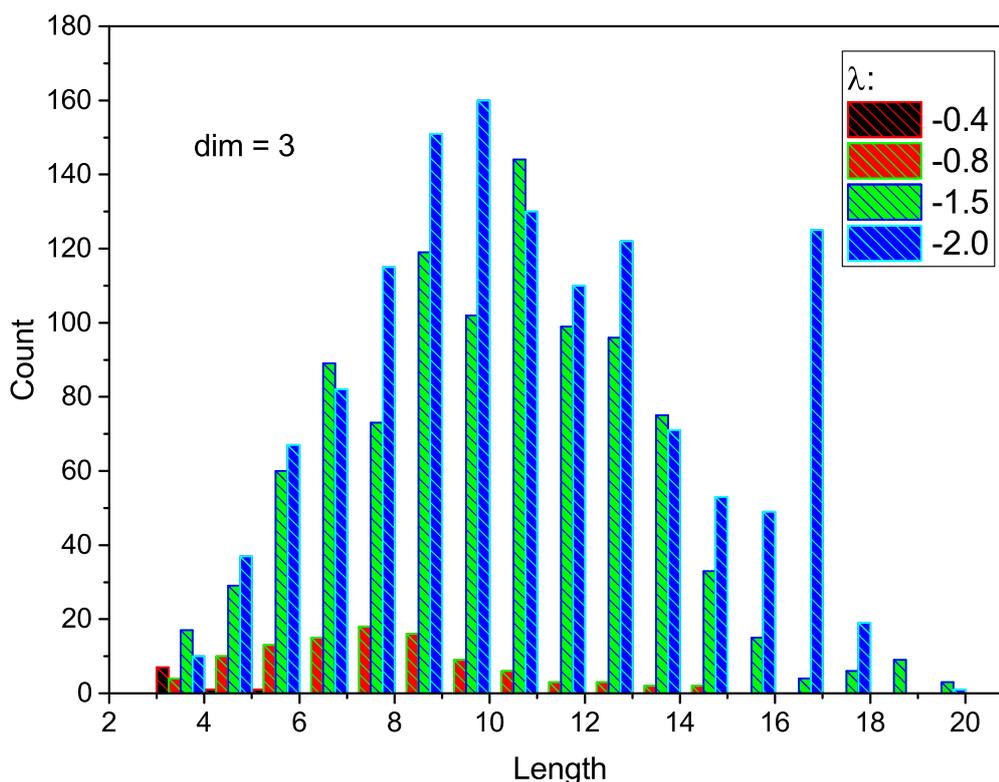


Рис. 1.15: Распределение длин трехмерных деревьев.

возрастает, а само их определение не позволяет нитям бродить вокруг исходного линка, с которого начиналось построение. Это выражается в широком максимуме на Рис. 1.18.

Теперь продемонстрируем данные, полученные для деревьев.

На Рис. 1.19 представлено распределение суммарного числа линков, составляющих каждое отдельное дерево. Если до $\lambda \gtrsim -1.0$ нет деревьев, объединяющих более 50 линков, то при дальнейшем усилении генерации монополей структуры соседних ± 4 захватывают весь объем решетки, фактически пронизывая ее по всем направлениям. Это согласуется с данными Рис. 1.20, в которых согласно определению $V^{1/4}$ включены лишь четырехмерные деревья, практически не возникающие при $\lambda \gtrsim -1.0$. Второй подход к определению характерного объема дерева, R , дает более однородные результаты (см. Рис. 1.21), но резкое различие между двумя состояниями, до и после отметки $\lambda \approx -1.0$, наглядно присутствует и в этом случае.

С целью определить густоту дерева внутри себя предлагается ориентироваться на распределение по *окруженности* — числу линков дерева, соседних с каждым узлом, входящим в него. Такой узел может быть окончательным (входить в линк, который не продолжается в какую-либо сторону), двойным (входить между двумя соседними линками, не имеющими ответвлений), либо соединять большее число (до 8) линков. Рис. 1.22 доказывает, что при $\lambda = -0.4$ в

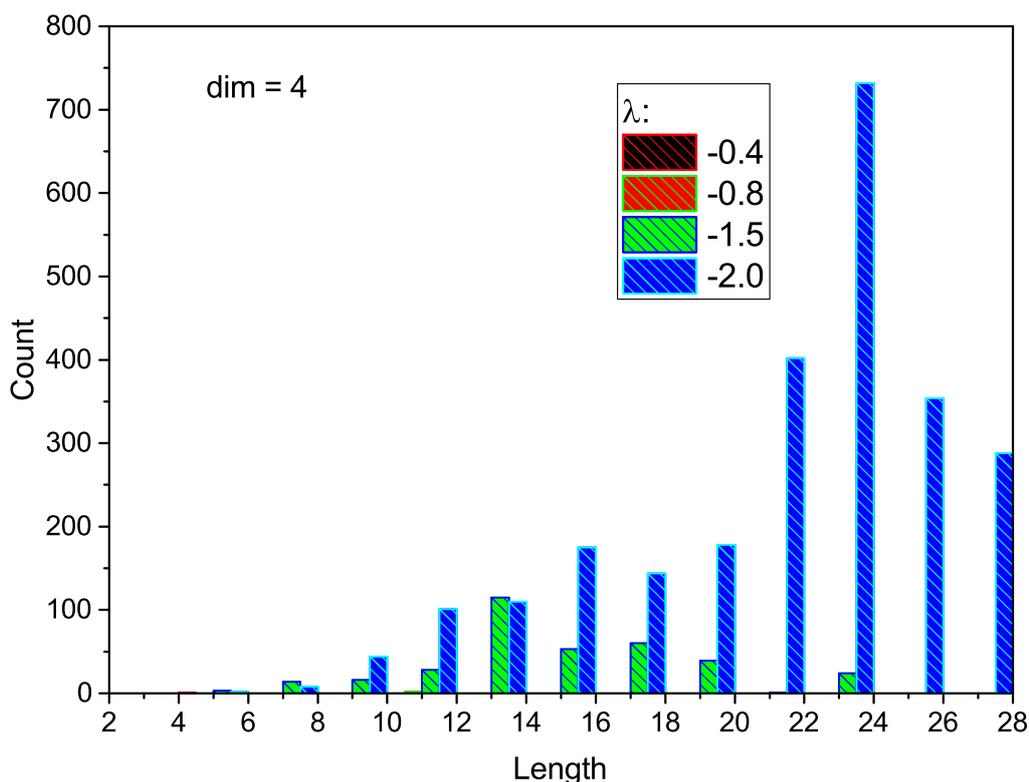


Рис. 1.16: Распределение длин четырехмерных деревьев. Пик соответствует наиболее плотной части “кристалла”.

системе преобладают изолированные ± 4 линки, поскольку велико число оконечных узлов. С другой стороны, при $\lambda = -2.0$ доли токов ± 2 и ± 4 сравнимы, ведь пик расположен в значении 4. Более детальное рассмотрение позволяет дополнительно предположить, что распространенность окруженности, равной 4, свидетельствует о вихреобразной структуре деревьев, потому что большинство узлов дерева находится внутри него, а не на внешних линках и значение 4 возникает в глубине 2D и 3D деревьев, но лишь в углах 4D объектов.

Все вышесказанное может быть обобщенно следующим образом: при переходе через значение порядка $\lambda \approx -1.0$ состояние модели меняется кардинально: возникающие токи, равные 4, формируют широкие, переплетенные структуры. Между ними устанавливаются устойчивые связи. Их расположение обладает высокой симметрией с точки зрения чередования знаков. При этом $M_{x,\mu} = \pm 4$ формируют некое подобие остова, промежутки между ними заполнены $M_{x,\mu} = \pm 2$, опять же с соблюдением чередования знаков (это подтверждается изучением коррелятора знаков $M_{x,\mu}$, см. Рис. 1.11).

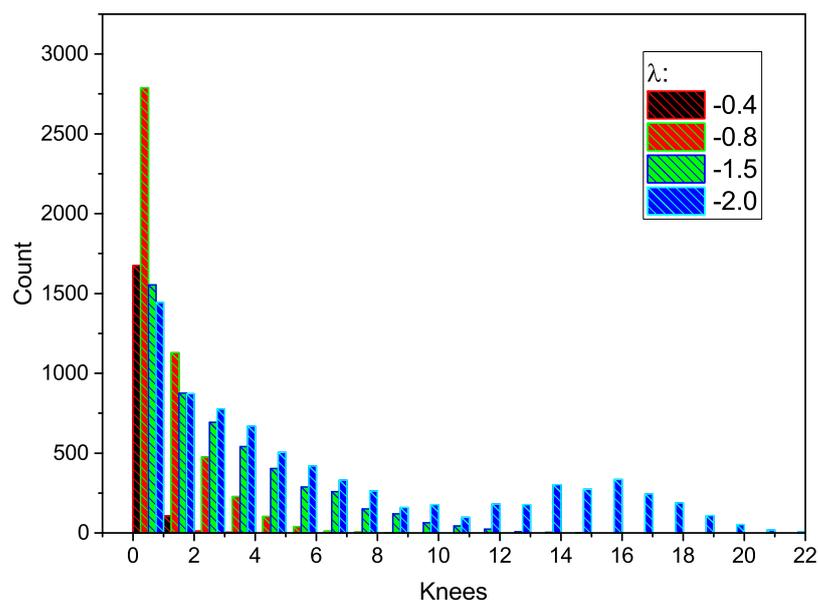


Рис. 1.17: Распределение нитей по количеству изгибов. Первый пик соответствует почти прямолинейным объектам, в то время как второй — широким, обильно изогнутым пространственным.

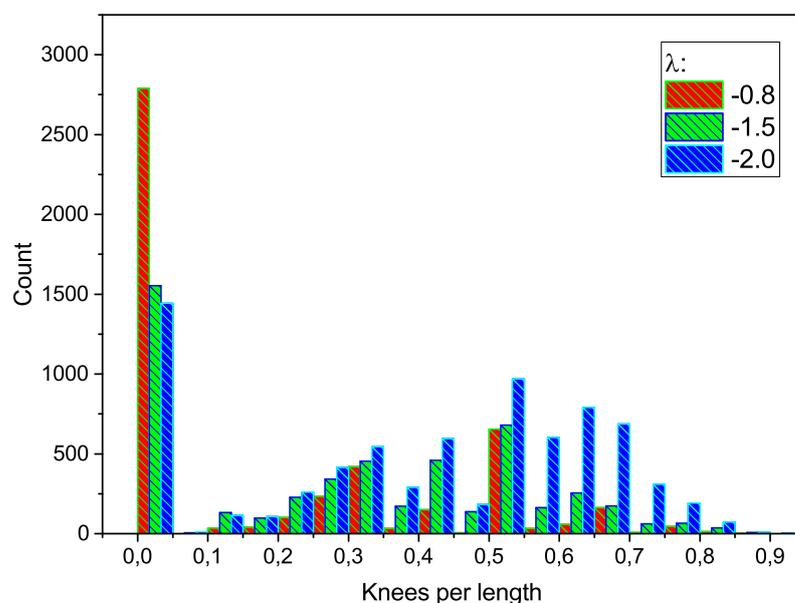


Рис. 1.18: Распределение по плотности изгибов. Наличие большого (суммарного) числа нитей с существенной долей изгибов на единицу длины характеризует изрезанный, широкий характер структур.

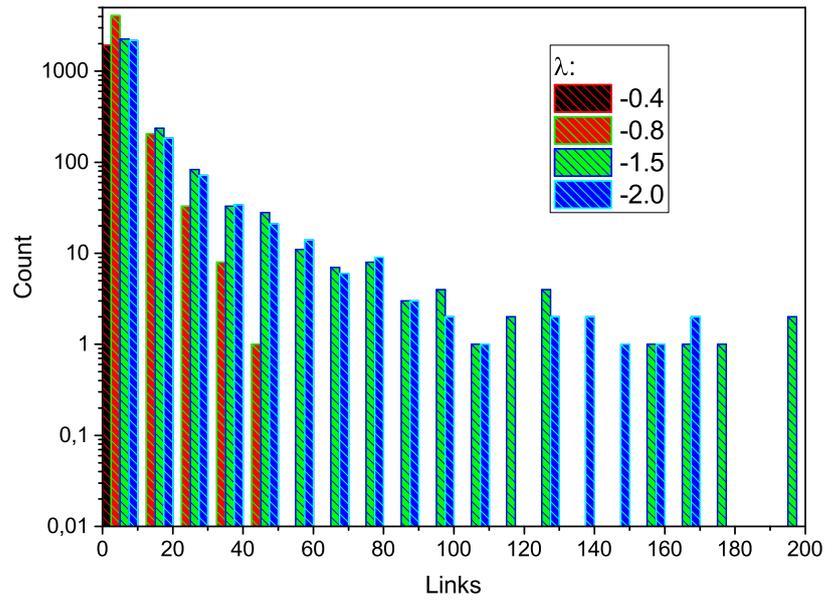


Рис. 1.19: Распределение деревьев по количеству линков в них. Формирование “кристалла” начинается с момента объединения примерно 50 линков. Равное количество больших объектов связано с объединением большого числа магнитных токов в рамках небольшого числа широких объектов.

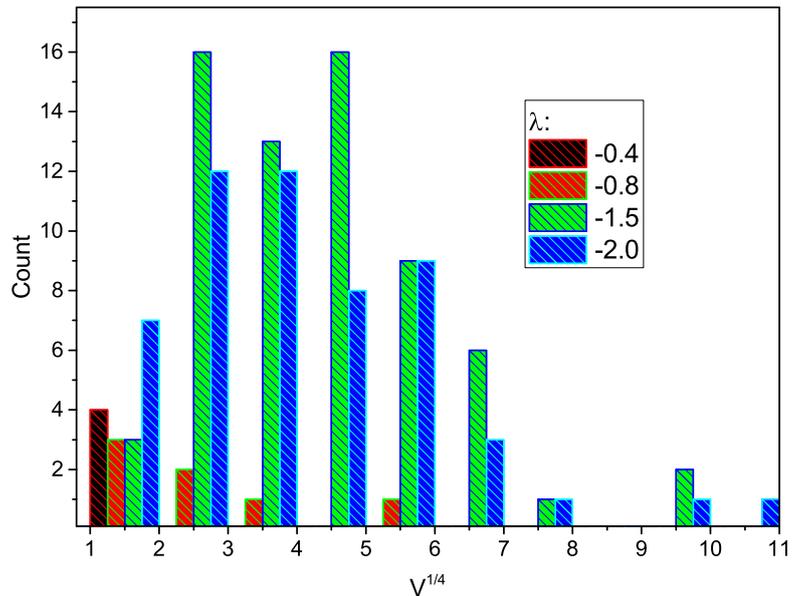


Рис. 1.20: Первый способ определения объема решетки, занятого деревьями. Как описано в основном тексте, учтены лишь 4D объекты. Достоинством способа является яркое разграничение широких и разветвленных структур при малых λ и компактных, коротких при больших λ .

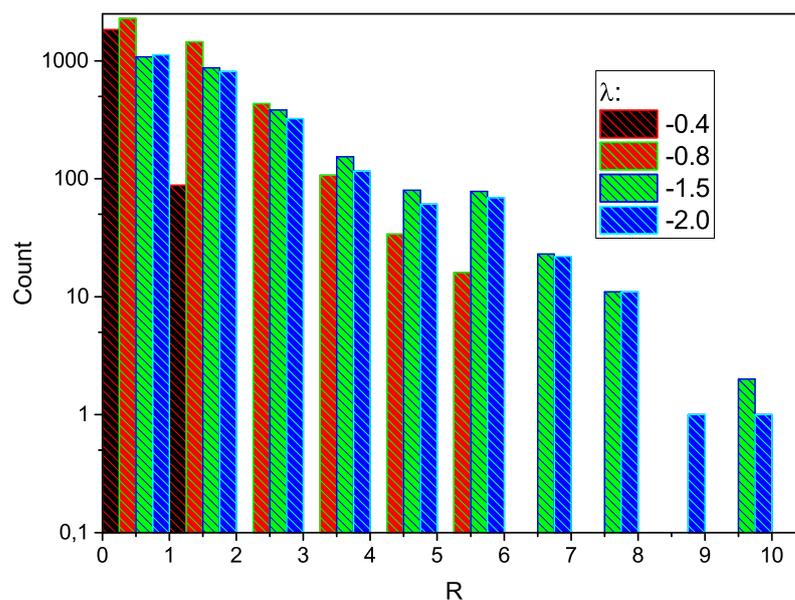


Рис. 1.21: Второй способ определения характерного размера дерева в толщине решетки. Преобладание коротких объектов вокруг основной обширной структуры скрывает различие деревьев по размерности, очевидное из Рис. 1.20.

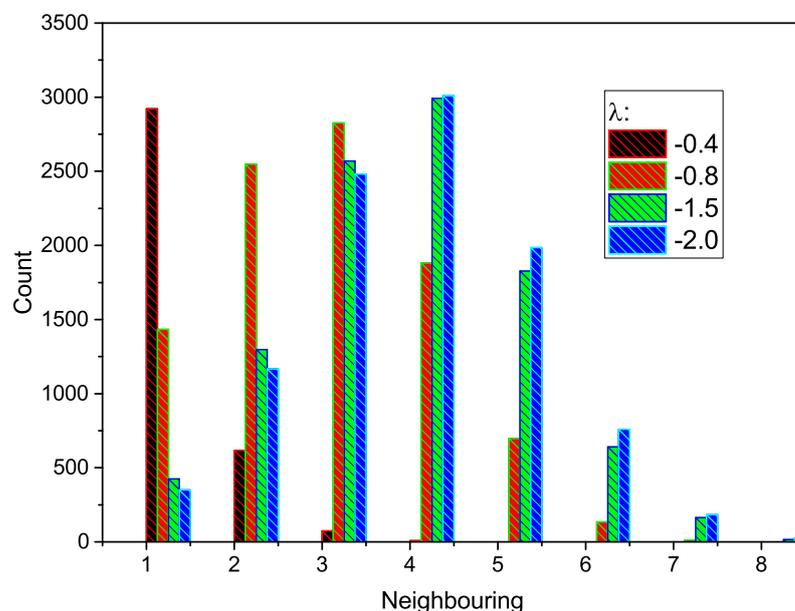


Рис. 1.22: Гистограмма показывает количество линков, соседнее с каждым отдельным узлом внутри дерева. В сочетании с другими характеристиками деревьев оказывается возможным сделать определенные выводы о структуре расположения монополей внутри решетки.

Часть 2

Численный метод

В целях определения средних значений наблюдаемых при произвольных значениях параметров в обеих моделях было использовано компьютерное моделирование методом Монте-Карло для генерации конфигураций моделей по равновесному распределению. Опишем основные теоретические основы, доказывающие возможность и преимущества такого подхода (по сравнению с общетеоретическим — аналитическим), и уточним методику вычислений и получения конкретных результатов для физических величин.

2.1 Методы Монте-Карло: общие характеристики

Под данным названием объединяют несколько больших классов компьютерных алгоритмов [26, 27, 28], основанных на использовании (псевдо)случайных чисел с целью получения средних определенного вида. В основании метода лежит теория вероятности, теория случайных процессов и Байесовский анализ.

В настоящее время обнаруживается множество областей применения методов Монте-Карло как в физике, как и в других науках (химии [29], биологии, инженерии, экономике [30], аналитике в банковской сфере). Все чаще появляются примеры задач, принципиально недоступных для решения методами, отличными от Монте-Карло. В физике можно назвать две главные сферы использования метода: сильно скоррелированные системы и решеточная теория поля. Однако такое деление слишком грубо, поэтому перечислим конкретные примеры.

- Модели с сильными коллективными эффектами (t-J-модель, модель Хаббарда);
- Спиновые модели — классические и квантовые [31];
- Модели конденсированных сред [32], в т.ч. квантовые (например, жидкий гелий [33]);

- Электронный газ;
- Ядерная материя;
- Атомные кластеры и молекулярные комплексы;
- Моделирование электронной структуры твердых тел;
- Квантовые теории поля (всевозможные вариации и многочисленные модели);
- Решение детерминистических уравнений в частных производных стохастическим способом.

Последний пункт перечисления обращает на себя внимание, поскольку демонстрирует, что границы применимости метода Монте-Карло выходят за рамки стохастических по своей природе систем.

Можно утверждать, что с момента возникновения в 1940-ых годах (Н. Метрополис и С. Улам) [34] методы Монте-Карло развились в обширную и полную систему математических инструментов, пригодных для решения самых разноплановых задач. Как известно, исходной задачей метода было упрощение оценки значения многомерного интеграла. Поскольку вычисление неаналитических интегралов актуально в любом разделе современной науки, по всей видимости, сфера применимости метода со временем будет только расти.

2.2 Краткий обзор методов Монте-Карло

В данном разделе делается попытка кратко сформулировать идеи и технические описания *лишь нескольких* направлений среди огромного количества методов, относящихся к решению проблем при помощи случайных чисел.

Сами методы могут быть классифицированы (отнесены к той или иной категории) по отношению к критериям:

1. Применимость к классической или квантовой системе;
2. Дискретность или непрерывность пространства состояний модели;
3. Исследование основного состояния ($T = 0$) или при конечной температуре ($T > 0$);
4. Системы ограниченного числа частиц или (предельно) большого (статистические системы).

Монте-Карло с марковской цепью (Markov chain Monte Carlo).

Основная идея методов Монте-Карло заключается в *семплировании* (выборке из распределения) *по значимости* с целью получения надежных средних значений наблюдаемых. Под выборкой по значимости подразумевается реализация такого распределения вероятности, которое минимизирует дисперсию наблюдаемой. Это противопоставляется прямому семплированию, когда выбирается множество значений равновероятных случайных чисел в попытке покрыть максимально возможную область интегрирования. Сравним:

$$\int O(x)dx = \int S_{\text{area}} O(x) \frac{1}{S_{\text{area}}} dx = S_{\text{area}} \cdot \langle O \rangle \approx \frac{S_{\text{area}}}{N} \sum_{i=1}^N O(x_i)$$

и

$$\int O(x)dx = \int \frac{O(x)}{P(x)} P(x) dx = \left\langle \frac{O}{P} \right\rangle_P \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{O(x_i)}{P(x_i)},$$

где в первом случае x_i распределены равномерно по области интегрирования размером S_{area} с плотностью вероятности $1/S_{\text{area}}$, а во втором — выбраны из распределения $P(x)$. При семплировании по значимости значения точек x_i учитывают наличие частых и редких областей распределения $P(x)$, которое можно подобрать таким образом, чтобы минимизировать затраты по подсчету аппроксимирующей суммы путем выборки x_i преимущественно из наиболее репрезентативного диапазона. Одновременно возможно наилучшим образом задействовать “интересные” области, дающие важнейшие вклады в среднее значение наблюдаемой в случае распределения сложной формы (очень часто встречается в физике, когда распределение определяется видом действия $S(x)$ модели). Прямое же семплирование можно интерпретировать как подсчет интеграла по теореме о среднем, что в случае сильно меняющейся подынтегральной функции дает плохое приближение, поскольку не принимает во внимание относительную значимость отдельных значений x_i для искомого результата.

В разнообразных приложениях статистической физики требуется вычисление интегралов вида

$$\int O(x)p(x, \alpha)dx, \quad (2.1)$$

где α символизирует совокупность параметров распределения, а x — переменную распределения, по которой ведется усреднение. Методы **классического Монте-Карло** по своему построению подходят для оценки средних указанного вида, поскольку при использовании семплирования по значимости указанную величину можно оценить как

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{O(x_i)}{P(x_i)} p(x_i, \alpha), \quad (2.2)$$

где случайные числа x_i распределены согласно $P(x)$. Требуется подобрать такое удачное распределение, чтобы минимизировать дисперсию наблюдаемой O , рассчитанную по нему. Для практических приложений технически это невыполнимая задача. Поэтому, если исходная физическая ситуация подразумевает реализацию некоторого распределения $p(x, \alpha)$, то в случае, когда флуктуации наблюдаемой меньше характерного изменения значений функции $p(x, \alpha)$, можно положить $P(x) = p(x, \alpha)$, и формула (2.2) принимает вид

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(x_i). \quad (2.3)$$

Теперь путем расчета простых средних в процессе перебора некоторых конфигураций физической системы можно оценить искомые значения средних. В самом деле, если из конфигурационного пространства выбирать удачные конфигурации, то потребуется не слишком большое количество слагаемых в (2.3), чтобы получить достоверное среднее с хорошей точностью. Под “удачными” конфигурациями в данном случае подразумеваются те, которые дают наибольший вклад в приведенную сумму. Последнее означает, что они должны быть распределены согласно $p(x, \alpha)$.

Таким образом, проблема переносится с вычисления интеграла в область создания “типичных” состояний модели. Следовательно, необходим численный метод получения (псевдо)случайных чисел x_i , распределенных согласно $p(x)$ (ниже α опущено ради краткости). Это было осуществлено в статье Метрополиса, Розенблютов, Теллера [35] и носит название метода Метрополиса.

Идея состоит в следующем. Интересующие физические системы имеют высокоразмерные конфигурационные пространства, поэтому классический метод обратной функции распределения (по равномерно распределенной случайной переменной получают случайную переменную с аналитически заданной функцией распределения) не подходит. Было предложено использовать случайный марковский процесс перехода от одного состояния x_i к другому x_{i+1} так, чтобы полный ансамбль таких состояний был бы распределен согласно $p(x)$. Реализуют итерационный процесс в воображаемом (марковском) времени, удовлетворяющий следующим требованиям:

Неприводимость. Любое состояние достижимо из текущего за конечное число шагов с конечной вероятностью.

Апериодичность. Наибольшее число шагов, через которые система возвращается в текущее состояние, равно 1. Т.е., после ухода из текущего состояния возврата не произойдет никогда.

Стационарность. Вероятности переходов сохраняются после каждого отдельного шага в марковском процессе. Иными словами, распределения переходов $w(i \rightarrow j)$ неизменны.

Последнее свойство дополняется рядом чисто математических теорем, таких как “Неприводимый марковский процесс имеет стационарное распределение, и притом единственное” и “Неприводимый апериодический марковский процесс сходится к стационарному распределению вне зависимости от исходного состояния”. Для нас же существенным фактом будет теорема “удовлетворение условию детального баланса достаточно для свойства стационарности”, где уравнение детального баланса имеет вид

$$p(x_i)w(i \rightarrow j) = p(x_j)w(j \rightarrow i).$$

Возвращаясь к цели генерации новых состояний, конструируют такой марковский процесс, что его стационарное распределение совпадает с целевым $p(x)$. Алгоритм Метрополиса-Гастингса [36] использует вероятность перехода специального вида, которая удовлетворяет условию детального баланса:

$$w(i \rightarrow j) = \min \left(1, \frac{p_j T_{ji}}{p_i T_{ij}} \right),$$

где p_i — вероятность состояния x_i по целевому распределению, T_{ij} — матрица вероятности предложить (создать) состояние x_j , если текущее состояние x_i . Последняя нужна для более тонкой настройки смены состояний в алгоритме в том случае, если конфигурационное пространство содержит области, стохастический обход которых затруднен. В частности, это имеет место при наличии долин с плоским дном, широких в одном “направлении” и узких в других. В исходной работе (1953) Метрополиса $T_{ij} = T_{ji}$, несимметричное обобщение дано Гастингсом в 1970.

Распространенным примером использования метода классического Монте-Карло является спиновая модель с гамильтонианом

$$H(S) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i,$$

заданная на решетке с узлами i в магнитном поле H , первая сумма берется по всем соседним парам узлов модели. Конфигурация (полный перечень значений спинов) обозначена как S . При рассмотрении системы в термостате с температурой $T = 1/(k\beta)$ целевое распределение имеет вид Больцмановского

$$p(S) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(S)},$$

где Z есть статистическая сумма. Тогда, согласно общему рецепту,

$$w(i \rightarrow j) = \min \left(1, \frac{e^{-\beta E(S_j)}}{e^{-\beta E(S_i)}} \right) = \min (1, e^{-\beta \Delta E})$$

при использовании равновероятной генерации нового состояния.

Следует отметить, что для систем с дискретным конфигурационным пространством (что имеет место в рассмотренном только что примере) существует модификация-упрощение общего алгоритма Метрополиса, называемая **тепловой баней** или **семплированием по Гиббсу** (Gibbs sampling). Рассмотрим его в применении к приведенной спиновой системе.

Пусть спиновая переменная может принимать лишь значения $s_i = \pm 1$ (модель Изинга). Тогда представим себе конфигурацию системы, в которой на выбранном месте i оказался спин, направленный сначала вверх, а затем — вниз. Можно рассчитать вероятности таких конфигураций

$$p(\pm) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(S)} \Big|_{s_i = \pm 1},$$

где в экспоненте учитывается конфигурация с изменением одного выбранного спина. Поскольку вероятность получения *какого-либо* нового значения спина в узле удовлетворяет условию полноты $p(+) + p(-) = 1$, определяется вероятность получить значение $+1$ в данном узле

$$p(+)=\frac{e^{\beta H_1}}{2 \cosh \beta H_1},$$

где H_1 — значение гамильтониана при подстановке $s_i = +1$. Значение $p(+)$ используется в компьютерной программе совместно с (псевдо)случайной равномерно распределенной величиной $r \in [0; 1)$ для установки нового значения $s_i \leftarrow +1$ в случае $r < p(+)$ и $s_i \leftarrow -1$ в противоположном случае.

Подчеркнем разницу: в алгоритме Метрополиса сначала выбирается “предлагаемая” конфигурация, затем проверяется, будет ли она принята, а в алгоритме тепловой бани само новое значение определяется после вероятностного теста.

Альтернативой прямому случайному выбору новых значений переменных конфигурационного пространства является опосредованная генерация в результате моделирования какого-либо (вспомогательного, технического) физического процесса. В качестве примера рассмотрим **динамику Ланжевена** (Langevin dynamics). Использование уравнения диффузии Ито позволяет проинтегрировать уравнение динамики, в котором координатам сопоставляются переменные конфигурационного пространства исходной модели:

$$x' = x + \Delta t \ln p(x) + \sqrt{2\Delta t} \xi.$$

В качестве ξ (в самом уравнении этому соответствует винеровский процесс) используются нормально распределенные случайные величины. Новая конфигурация x' становится *предложением* в тесте Метрополиса, описанного выше.

Еще одним способом выбора новой конфигурации является *молекулярная динамика*, рассмотренная ниже, в контексте Гибридного метода Монте-Карло.

Ее идея состоит в минимизации изменения энергии, приписываемой конфигурации, с целью увеличения вероятности положительного решения Метрополиса.

Квантовые методы Монте-Карло (Quantum Monte Carlo).

Огромный класс разнообразных методов, общей целью которых является решение уравнения Шредингера стохастическим подходом. Все многообразие методов можно (условно) разделить на 5 семейств, которые будут описаны ниже. Принципиальным делением является отношение к температуре системы, потому что отдельно рассматривают основное состояние ($T = 0$) и возбужденные (термические, квантовая теория при конечной температуре). Следует заметить, что аналогичное деление имеет место и в аналитических подходах, что находит отражение, в том числе, и в структуре студенческих учебных курсов.

Общей идеей является переформулировка исходной квантовой записи (через статистическую сумму, операторный вид, задачу на собственные значения) в классических терминах, что делает возможным применение подхода классического Монте-Карло.

Вариационный метод Монте-Карло (Variational) [37].

Метод аппроксимации волновой функции основного состояния системы. Основан на утверждении, что энергия пробной волновой функции не меньше, чем энергия точной (истинной) волновой функции. В таком случае возможно аккуратно оценить специальную форму волновой функции многочастичной задачи с целью определения средних значений наблюдаемых основного состояния.

Среднее интересующей наблюдаемой представляется в специальном виде. Покажем это на стандартном примере энергии. Пусть выбрана пробная волновая функция $\psi_T(x)$.

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_T &= \left(\int |\psi_T(y)|^2 dy \right)^{-1} \int \psi_T^*(x) H \psi_T(x) dx = \\ &= \left(\int |\psi_T(y)|^2 dy \right)^{-1} \int \psi_T^*(x) \psi_T(x) \frac{H \psi_T(x)}{\psi_T(x)} dx = \int \rho(x) \frac{H \psi_T(x)}{\psi_T(x)} dx \approx \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L(x_i), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \left(\int |\psi_T(y)|^2 dy \right)^{-1} |\psi_T(x)|^2, \\ E_L(x) &= \frac{H \psi_T(x)}{\psi_T(x)} \end{aligned}$$

называется локальной энергией, значения которой вычисляются по набору

конфигураций, распределенных согласно $\rho(x)$. Вариация локальной энергии

$$\sigma_E^2 = \int \rho(x)(E_L(x) - \langle E \rangle_T)^2 dx$$

позволяет оценить точность приближения пробной волновой функцией истинной, потому что истинная волновая функция является собственным состоянием гамильтониана и ее вариация равна нулю. Вычисление $E_L(x)$ является краеугольным моментом алгоритма и представляет ряд технических сложностей. Предложено несколько улучшений метода, в т.ч., различные оптимизации выбора пробных волновых функций. Это важно, потому что $\psi_T(x)$ должна хорошо приближать точное решение, если вычислитель планирует получать хорошие оценки средних. С другой стороны, сам метод не накладывает ограничений на вид пробной волновой функции, важна лишь возможность вычисления H на выбранном выражении.

Следует, однако, уточнить, что для получения корректных и устойчивых результатов $\psi_T(x)$ должна соответствовать предполагаемым свойствам точного решения. К таким, например, относится требование антисимметрии волновой функции тождественных фермионов. В системах электрон-ядро также должны быть учтены дополнительные физические свойства производных от волновой функции.

Сам компьютерный алгоритм реализует последовательность шагов: вначале используется произвольная конфигурация (например, координаты частиц), предлагается смещение одной из частиц, для которого вычисляется вероятность $p = \rho(x')/\rho(x) = |\psi_T(x')/\psi_T(x)|^2$. Принимается решение Метрополиса с вероятностью $\min(1, p)$. Существует отдельная методика, учитывающая вероятность принятия в решении Метрополиса, позволяющая улучшить статистические характеристики среднего значения наблюдаемых.

Диффузионный метод Монте-Карло (Diffusion) [38, 39].

Частный случай общего проекционного метода Монте-Карло, связан с функциями Грина. Позволяет с существенной точностью вычислить энергию основного состояния. Идея метода состоит в том, что после виковского поворота ($\tau = it$) и сдвига уровня отсчета энергии уравнение Шредингера совпадает по форме с уравнением диффузии с дополнительным распадным членом

$$-\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + (V(\vec{r}) - E_T) \psi(\vec{r}, t),$$

где $\nabla^2 = \sum_{i=1}^N \nabla_i^2$. Решение этого уравнения $\psi(\vec{r}, t)$ имеет смысл плотности диффундирующих и распадающихся частиц. Поскольку потенциальная энергия $V(\vec{r})$ имеет минимум в области локализации волновой функции основного состояния, “частицы” в процессе эволюции собираются в окрестности минимума. Данное уравнение умножают на пробную функцию $\psi_T(\vec{r})$ и для новой

функции $f(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)\psi_T(\vec{r})$ получают

$$-\hbar \frac{\partial f(\vec{r}, t)}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \nabla^2 f + \nabla \left(\frac{\nabla \psi_T(\vec{r})}{\psi_T} f \right) + (E_L(\vec{r}) - E_T) f,$$

где $E_L(\vec{r}) = -\nabla^2 \psi_T / (2\psi_T) + V$ — локальная энергия. Последнее уравнение имеет хорошо известное решение через функцию Грина

$$f(\vec{r}, \tau) = \int G(\vec{r}, \vec{q}, \tau) f(\vec{q}, 0) d\vec{q},$$

$$G(\vec{r}, \vec{q}, \tau) \approx \frac{1}{(2\pi\tau)^{3N/2}} \exp \left\{ -\frac{(\vec{r} - \vec{q} - \vec{F}(\vec{r})\tau)^2}{2\tau} + \left(E_T - \frac{1}{2}(E_L(\vec{r}) + E_L(\vec{q})) \right) \tau \right\}.$$

Функция Грина в данном случае является приближенной, потому что в уравнении содержатся вклады от диффузии, дрейфа и распада, функции Грина которых известны по отдельности. Их перемножают, чтобы написать решение обсуждаемого уравнения. Локальная энергия, как и в вариационном методе, вычисляется через пробную волновую функцию. Новшеством по сравнению с предыдущим рассмотрением является появление так называемой квантовой силы $\vec{F} = \nabla \psi_T / \psi_T$.

Пробная энергия вначале равна энергии пробной функции из вариационного метода Монте-Карло и обновляется по мере моделирования. Правильно выбранная пробная функция сокращает различие между локальной и пробной энергиями, что уменьшает флуктуации функции f . Это может быть сделано предварительным запуском вариационного метода.

Решение Метрополиса принимается с использованием вероятности

$$p = \frac{|\psi_T(\vec{r}')|^2 G(\vec{r}', \vec{r}, \tau)}{|\psi_T(\vec{r})|^2 G(\vec{r}, \vec{r}', \tau)}.$$

Следует оговориться, что учет антисимметрии фермионной волновой функции требует дополнительной доработки метода, которая носит название fixed-node-аппроксимации. Накладывают граничное (по τ) условие, что искомое (основное) состояние обладает теми же узлами волновой функции, что и пробная. Это необходимо, потому что фермионная волновая функция основного состояния должна иметь нули в отличие от бозонной. Поэтому при поиске антисимметричного решения требуется следить, чтобы процесс не сходил к бозонной (симметричной) функции. Последнее имеет место, потому что часто основное состояние бозонной системы обладает меньшей энергией, чем соответствующее фермионное состояние.

Алгоритм диффузного Монте-Карло в целом имеет следующие шаги:

1. Создают ансамбль конфигураций, распределенных согласно $|\psi_T|^2$. Пробная энергия E_T инициализируется при помощи средней энергии ансамбля, полученного вариационным Монте-Карло.

2. Для каждой конфигурации смещают каждую частицу по очереди, учитывая контроль пересечения узлов (см. ниже) и вероятность решения Метрополиса, для которой требуется вычислить функцию Грина. В конце этого шага с некоторой вероятностью создаются копии конфигураций ансамбля, чтобы учесть возможную генерацию “частиц”, описываемых распадным слагаемым в уравнении диффузии.
3. После повторения предыдущего до 1000 раз обновляют пробную энергию, чтобы она точнее описывала среднюю энергию ансамбля.

Контроль пересечения узлов выполняется так: если знак $\psi_T(\vec{r}')$ не совпадает со знаком $\psi_T(\vec{r})$, то шаг для частицы не применяется.

Детерминантный метод Монте-Карло (Determinant) [40].

К этому семейству методов относятся, например, метод мировых линий (World-line Approach), **метод со вспомогательными полями** (auxiliary) и собственно **детерминантный**. Методы позволяют моделировать при отличной от нуля температуре. Именно эти методы были использованы в настоящей работе.

Кратко опишем их основную идею, поскольку отдельный раздел ниже будет посвящен детальному выводу рабочих формул.

Вычисляемая статистическая сумма

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$$

рассматривается как произведение многих экспонент с целью уменьшения промежутка β евклидова времени в соответствующее число раз. Приближенным равенство становится при попытке представить экспоненту от суммы слагаемых в гамильтониане как произведения соответствующих экспонент, поскольку слагаемые не коммутируют друг с другом, а, следовательно, тождество Бейкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа не обрывается на первом слагаемом. Затем при помощи полного набора состояний (для каждой модели используют приемлемый выбор) вычисляются отдельные вклады от полученных экспонент, что представляет собой выражение

$$Z = \prod_{\{\alpha\}} \langle \alpha | e^{-\frac{\beta}{M} H} | \alpha \rangle,$$

где M — количество разбиений экспоненты.

Дополнительные (вспомогательные) поля возникают в том случае, когда H по определению включает в себя поля взаимодействия, например калибровочные, либо когда фермионный H содержит слагаемые с произведением квантово-механических операторов в количестве превышающем 2 и может быть выражен через какое-нибудь выражение, содержащее только лишь *пары* операторов при помощи преобразования Хаббарда-Стратоновича, который вводит вспомогательные поля в виде переменных интегрирования.

Второй пример фактически составляет основу фермионной части представляемой работы (расширенная модель Хаббарда, Часть 3) и будет рассмотрен во всех подробностях в соответствующем разделе, поэтому здесь приведем пример квантовой теории поля с бозонными полями.

Пусть решеточная аппроксимация $SU(N)$ -модели Янга-Миллса имеет вид

$$S = -\beta N \sum_x \sum_{\mu \neq \nu} \text{Tr} U_{x,\mu} U_{x+\mu,\nu} U_{x+\nu,\mu}^\dagger U_{x,\nu}^\dagger,$$

где $U_{x,\mu} = \exp\{iaA_\mu(x)\}$, $\beta = \lambda^{-1}$. Переменными, задающими конфигурацию полевой системы, являются матрицы $A_\mu(x)$, определенные в узлах решетки. Если их обновлять случайным образом, реализуя прямой метод Метрополиса, то изменения действия S будут так сильны, что вероятность решения по смене конфигурации в алгоритме Метрополиса окажется чрезвычайно низкой, а это, в свою очередь, сильно подавляет величину принятия (acceptance). Преодолеть проблему можно было бы путем постепенного обновления переменных решетки, но это приведет к сильной скоррелированности последовательных измерений, что крайне плохо скажется на качестве выдаваемых результатов. Потребуется долгие запуски и, возможно, выбрасывание промежуточных вычислений для достижения приемлемого по статистической погрешности искомого среднего.

Решение описанной проблемы может быть достигнуто при реализации такого массового обновления конфигурации, что величина действия S меняется не слишком сильно. Для самого действия этого достичь крайне затруднительно, зато можно воспользоваться вспомогательной величиной, определив “гамильтониан”, объединяющий потенциальный вклад, вносимый линковыми полями и кинетический вклад, являющийся чисто техническим. Причина такого подхода состоит в том, что существуют методы *классической* динамики, сохраняющие энергию (гамильтониан) системы многих частиц. Это возможно сделать, если интегрировать уравнения движения в форме Гамильтона

$$\frac{dp_i}{d\tau} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad \frac{dx_i}{d\tau} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.4)$$

при помощи симплектического интегратора. Он обладает свойством обратимости (интегрирование “вперед” и “назад” во времени не приводит к накоплению ошибки) и сохранения объема элемента фазового пространства. Известно несколько симплектических интеграторов различного порядка точности по τ .

В качестве обобщенных координат выбирают переменные поля (вспомогательные) поля, тогда как импульсы вводят дополнительно. После этого рассматривают гамильтониан

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2} + S(x), \quad (2.5)$$

который и управляет динамикой в течение небольшого времени интегрирования. Как правило, вычисление реализуется в виде последовательности смежных шагов, чередующих использование первого и второго уравнений системы Гамильтона, результатом которых является *одна* новая конфигурация. Эта стадия алгоритма называется **молекулярной динамикой**. Таким образом, предложение Метрополиса достигается путем эволюции конфигурации (совокупности значений вспомогательных полей) во времени согласно законам классической механики.

Как же используется стохастичность? Перед первым интегрированием уравнений (2.5) выбираются значения импульсов по нормальному распределению. Поэтому движение изображающей точки данного абстрактного фазового пространства начинается в случайном направлении. После последнего шага при помощи старой (заблаговременно сохраненной в памяти компьютера) и новой конфигураций вычисляется вероятность

$$p = e^{-\Delta H},$$

используемая в принятии решения Метрополиса.

Описанный метод носит название **гибридного метода Монте-Карло** и применялся в качестве базового во второй части данной диссертационной работы. Несмотря на некоторую техническую сложность получения аналитических выражений для производных в случае фермионных теорий, этот метод отличается прямолинейностью достижения целей моделирования и простотой настройки. В частности, требуется подбор значений параметров молекулярной динамики (числа шагов последовательного между двумя решениями Метрополиса интегрирования и величины шага по τ), но это не вызывает особых затруднений. Принципы подбора значений описаны в Части 3.

Обратимся теперь к фермионному случаю и покажем, откуда возникают вспомогательные поля в таких моделях и почему семейство методов получило название “детерминантного”.

Пусть задана модель в терминах грассманновых чисел

$$S[x; \xi, \bar{\xi}] = \sum_i \frac{x_i^2}{2} + \bar{\xi}_a D_{ab}(x) \xi_b,$$

где $D_{ab}(x)$ представляет оператор Дирака, а антикоммутирующие числа ξ_a комплексны. Первым шагом следует упростить выражение, избавившись от недоступных компьютеру абстракций,

$$Z = \int \mathcal{D}[x, \xi, \bar{\xi}] e^{-S[x; \xi, \bar{\xi}]} = \int \prod_i dx_i e^{-\sum_i x_i^2/2} \det D(x),$$

получив эффективную модель с бозонным действием $S_{\text{eff}} = \sum_i x_i^2/2 - \ln \det D(x)$.

При таком виде плотности распределения формула вероятности для решения Метрополиса имеет вид

$$p = e^{-\Delta S_{\text{bos}}} \frac{\det D'}{\det D}, \quad S_{\text{bos}} = \sum_i \frac{x_i^2}{2}.$$

Оставим в стороне знаменитую *проблему знака*. Как известно, нахождение определителя представляет вычислительную задачу существенной сложности, как по времени выполнения, так и по плохой численной устойчивости. Следует избегать явного использования определителя в виде разложения по минорам.

В случае особой, удобной структуры матрицы D_{ab} возможно дифференцировать эффективное действие ровно так, как оно получается (с логарифмом) и аналитически получить пригодные для использования в компьютерной программе выражения благодаря свойству

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \det D = \text{Tr} \left(D^{-1} \frac{\partial D}{\partial \alpha} \right).$$

Но так везет далеко не всегда. В таком случае приходится подключить псевдофермионные поля, вводимые следующим образом

$$Z = \int \mathcal{D}[x] e^{x^2/2} \det D(x) = \int \mathcal{D}[x, \Phi, \Phi^\dagger] e^{x^2/2 - \Phi^\dagger D^{-1} \Phi}.$$

При моделировании значения полей Φ (комплексные числа) перед интегрированием выбирают при помощи набора комплексных чисел ζ , распределенных по нормальному распределению

$$\sim e^{-\zeta^\dagger \zeta}, \quad \zeta = D^{-1/2} \Phi$$

и фиксируют в течение одной последовательности шагов молекулярной динамики (между решениями Метрополиса). Для эволюции используется полный гамильтониан

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2} + \sum_i \frac{x_i^2}{2} + \Phi^\dagger D^{-1} \Phi.$$

Разумеется, в для каждой конкретной модели изыскивают улучшения и оптимизации, пробуют применить различные параметризации. В нашем иллюстративном примере, конечно же, бросается в глаза использование корня из оператора; в реальной работе фермионную часть попытаются представить в виде произведения *фермионных* матриц: MM^\dagger . Пользуются разреженностью вида этих матриц для реализации matrix-free-вычислений (действие на правый столбец по некоторому правилу, вместо прямого умножения двумерной матрицы на столбец в цикле).

Более того, перспективным развитием данного формализма может оказаться т.н. **рациональный гибридный Монте-Карло** (rational), эксплуатирующий представление в виде рациональной аппроксимации

$$D^{-1/2} \approx a_0 + \sum_{k=1}^K \frac{a_k}{D + b_k}$$

с положительными числами a_0, a_k и b_k . Для обращения возникающих матриц разработаны эффективные по времени итеративные численные алгоритмы. Континуально-интегральный метод Монте-Карло (Path integral) [41, 42].

Этот способ является логическим обобщением аналитического метода, предложенного Р. Фейнманом и носящем его имя. Основной техникой прием: отображение квантово-механической системы в термостате в некоторую классическую теорию поля, которую можно исследовать методом *классического* Монте-Карло. Используется сочетание двух идей.

Во-первых, квантово-механические средние

$$\langle O \rangle = \frac{1}{\text{Tr } \hat{\rho}} \text{Tr } \hat{O} \hat{\rho}$$

с использованием квантово-статистической матрицы плотности $\hat{\rho} = \exp\{-\beta \hat{H}\}$ для системы в каноническом распределении с обратной температурой $\beta = (kT)^{-1}$ можно сопоставить по форме с оператором эволюции в квантовой механике при отождествлении $t = -i\hbar\beta$.

Во-вторых, среднее *по распределению* значение наблюдаемой A

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta E_i}}$$

для системы с гамильтонианом $H = T + U$ представимо в виде

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{\int dx \langle x | A e^{-\beta H} | x \rangle}{\int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle} = \frac{\int dx dy \langle x | A | y \rangle \langle y | e^{-\beta H} | x \rangle}{\int dx P(x, \beta)} = \\ &= \frac{\int dx dy \langle x | A | y \rangle \langle y | \left(e^{-\frac{\beta}{M} H} \right)^M | x \rangle}{\int dx P(x, \beta)} \approx \\ &= \frac{\int \prod_k dx_k A(x_0) \sum_k (2\pi\tau)^{-3N/2} e^{-\tau \left(\left(\frac{x_k - x_{k+1}}{2\tau} \right)^2 + V(x_k) \right)}}{\int dx P(x, \beta)}. \end{aligned}$$

В процессе выводов используются декомпозиция Сузуки-Троттера [43], полный набор импульсных состояний и дельта-нормировка скалярного произведения $\langle p | x \rangle$. Псевдовремя $\beta = M\tau$ имеет смысл обратной температуры.

Средние, таким образом, выражаются в терминах решеточной аппроксимации континуального интеграла вдоль контуров $x_0, x_1, \dots, x_K = x_0$ при произвольной температуре. Полученное выражение представляет собой аналог классической статистической суммы для некоторой системы. Метод позволяет вычислять термодинамические величины при конечных температурах $T = 1/(k\beta)$.

Общепринятой графической интерпретацией полученного результата является цилиндр, на поверхности которого расположены замкнутые траектории.

Рассмотрим принцип моделирования данным методом. Действие классической модели определяется как

$$\rho(x_0, x_K, \beta) = \int dx_1 \dots dx_{K-1} e^{-\sum_{k=1}^K S_k}.$$

Используя метод Монте-Карло с марковскими цепями (см. выше), определяют несколько типов смещений. *Сдвиг* (displacement) представляет собой трансляцию всего пути нескольких траекторий без изменения относительных положений узловых точек x_k внутри каждой. Кинетическая энергия также не изменяется. *Послойное движение* смещает отдельные узловые точки внутри траектории, следовательно, изменяет взаимное расположение и кинетическую энергию. Обычно изменяют сразу несколько значений x_k в целях эффективности, например, слой $\{x_k, k = \overline{k_0, k_0 + k_1}\}$. Применяют несколько алгоритмов. Можно отталкиваться от одного из концов траектории, либо начинать выбор новых значений из центра и продолжать рассматривать точку в центре каждой половины траектории до тех пор, пока решение Метрополиса положительно. Длина изменяемого слоя может выбираться перед изменением случайным образом. В некоторых задачах используются и иные алгоритмы изменения x_k .

В практике применения данного метода особой проблемой возникает поддержание приемлемого уровня принятия (acceptance) решений Метрополиса. При выборе “хорошего” с точки зрения семплирования распределения (например, при малых значениях $\tau = \beta/K$) доля принятий может достигать весьма высоких значений, близких к 1.0. Факторы, влияющие на этот показатель (например, среднее взаимное расположение узлов пути), могут изменяться в процессе работы алгоритма. Так, после перемещения части узлов значение действия S может улучшаться, что позволяет алгоритму легче деформировать остальные участки.

Особняком стоит проблема моделирования распределений матрицы плотности бозе-частиц, которая, как известно, должна быть полностью симметрична. Можно использовать явный симметризованный вид

$$\rho_B(x_0, x_K, \beta) = \frac{1}{K!} \sum_{\pi} \rho_B(x_0, \pi(x_K), \beta),$$

где суммирование ведется по всем перестановкам индексов, а последний аргумент выбран таким, какой окажется последним в ряду x_0, x_1, \dots, x_K после

перестановки. Требуется тяжеловесное вычисление $K!$ слагаемых в сумме. Прибегают к следующей хитрости: воспринимают величину π как дискретную переменную в пространстве перестановок и используют методику Монте-Карло для случайной выборки из этого пространства. При низких температурах (β велико) все перестановки могут возникнуть с одинаковой вероятностью. На практике, однако, рассматривают лишь 2-, 4-узловые перестановки с целью экономии вычислительных ресурсов, поскольку вероятность их успеха в принятии решения Метрополиса наибольшая.

Метод Монте-Карло с применением интеграла по траекториям использовался для исследования задач для систем из атомов гелия и других [44], квантовых эффектов в твердых телах [45], плавлении и переходах жидкость-пар, вращении молекул [46], расположенных на поверхностях материалов. Известны рассмотрения и в контексте сверхтекучести жидкого гелия [47].

Квантовые спиновые модели [48, 49, 50].

Отдельным широким классом методов Монте-Карло является моделирование свойств решеточных спиновых систем. Так, возможно детальное изучение фазовых переходов в системах 20 тыс. спинов и наблюдение поведения квантовых магнитов и бозонных систем. Популярно направление, связанное с определением критических показателей.

Каноническим примером системы, исследуемой при помощи данного подхода является спиновая модель Гейзенберга

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i S_i^2. \quad (2.6)$$

Рассмотрение начинается с перезаписи квантовой статистической суммы

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_n e^{-\beta E_n},$$

которая требует предварительного определения уровней квантово-механической системы (это часто невозможно), в виде, пригодном для моделирования эффективной классической модели, соответствующей исходной. Гамильтониан (2.6) представляют в виде суммы двух частей, которые содержат вклады от чередующихся связей между спинами:

$$H = H_1 + H_2 + H_{\text{mag}} = J \cdot \left(\sum_{\langle i,j \rangle \in \text{odd}} + \sum_{\langle i,j \rangle \in \text{even}} \right) \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i S_i^2.$$

Полностью аналогично процедурам, описанным выше при обсуждении Детерминантного и Континуально-интегрального Монте-Карло, единая экспонента $e^{-\beta H}$ представляется в виде произведения M вкладов, каждый из которых разлагается по декомпозиции Сузуки-Троттера. Между каждой парой сомножителей вставляется 1, представленная суммой проекторов на полный набор

базисных состояний, которые собираются в виде прямого произведения одночастичных собственных векторов. В данном случае оператор S_z диктует выбор в пользу состояний спин вверх-вниз. В результате базис N -спиновой системы составляется из 2^N гильбертовых векторов с определенными направлениями проекций спина в каждом узле. Имеет место следующий промежуточный результат:

$$Z = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_{2M}} \langle \sigma_1 | e^{-\tau H_1} | \sigma_{2M} \rangle \cdots \langle \sigma_2 | e^{-\tau H_2} | \sigma_1 \rangle,$$

где σ_k — многочастичные базисные состояния в слое k , $\tau = \beta/M$. Слой 1 соответствует исходной операции следа в статистической сумме. Представление Сузуки-Троттера имеет наглядную интерпретацию, если представить себе, что начальная конфигурация спинов $|\sigma_1\rangle$ переходит из слоя в слой в течение временной эволюции в псевдовремени. Каждый (не)четный слой состоит из произведения (коммутирующих) вкладов (не)четных связей.

Оператор (вклад) вида $e^{-\tau H_i}$ имеет смысл оператора эволюции в течение эвклидова времени τ пары соседних спинов, т.е. его действие переносит эти спины из предыдущего слоя на следующий. Разрешенные переходы одних состояний $|\sigma_k\rangle$ в другие определяется матричной структурой $e^{-\tau H_i}$ в базисе двухчастичных спиновых состояний. Для обсуждаемой модели их оказывается 6 штук:

$$\begin{array}{ll} |\uparrow\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle \end{array}$$

Только такие переходы могут быть реализованы на т.н. шахматной доске — графической схеме, показывающей одну из возможных конфигураций спиновой модели в данном представлении. Поскольку вклады $e^{-\tau H_i}$ приводят к сохранению или перестановке пар соседних спинов, соединение одинаковых спинов линиями от слоя к слою приводит к появлению непрерывных линий, каждая из которых отражает воображаемое путешествие спина из узла в узел. Они называются *мировыми линиями*. По причине взятия следа в определении статистической суммы состояния спинов на первом и последнем слое должны совпадать (кстати, формализм континуально-интегрального Монте-Карло обладал таким же свойством). Мировые линии поэтому периодичны при переходе через временную границу, следовательно, они непрерывны.

Набор временных линий и определяет конфигурацию классической модели, соответствующей исходной квантовой.

Алгоритм изменения текущей конфигурации состоит в деформации мировых линий. Простейшие (локальные) деформации состоят в “горизонтальном сдвиге” мировой линии с образованием или уничтожением одного или двух изгибов. Однако такие, минимальные, изменения неудовлетворительны: они не могут изменить глобальные свойства конфигурации (например, намагни-

ченность), а также могут приводить к наборам конфигураций, в окрестности которых алгоритм перебора Монте-Карло становится крайне неэффективным.

В конце предыдущего века было предложено несколько эффективных алгоритмов *глобального* обновления конфигураций в форме мировых линий, первым из которых стал т.н. Loop-update [52]. Другими подобными алгоритмами являются worm algorithm, operator loops, directed loops. Основная идея *петлевого обновления* заключается в следующих шагах. Выбирают несколько квадратов на “шахматной доске” конфигурационного пространства, в которых мировые линии разрывают. Из спинов одинакового направления образуются замкнутые петли (loops). Выбирают несколько петель, все спины в которых переворачивают. После этого восстанавливается непрерывность мировых линий. *Червячный алгоритм* заключается в том, что проходят по мировым линиям, изменяя посещенные участки и выбирая в местах поворота один из четырех исходов (идти вперед, перепрыгнуть на параллельную пространственную линию, повернуть на параллельной линии против направления времени, отпрыгнуть от места поворота назад). При движении и смене состояния участков должно соблюдаться условие детального баланса. Завершают при возвращении в исходную точку. Существуют и квантовые *кластерные алгоритмы* обновления конфигураций.

Другое представление квантовых спиновых моделей называется **стохастическим разложением в ряд** (stochastic series expansion) [51], которое заключается в представлении статистической суммы в виде

$$\mathrm{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \mathrm{Tr} (-H^n) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \mathrm{Tr} \left(\sum_{b_1, \dots, b_n} \prod_{i=1}^n (-H_{b_i}) \right),$$

где H_{b_i} параметризован парой $b = (t, j)$, t означает тип оператора (диагональный (d) или вне-диагональный (o) в базисе собственных состояний S_z), а j обозначает узел решетки,

$$H = - \sum_{j=1}^{N_b} (H_{d,j} - H_{o,j}) + CN_b,$$

N_b — число связей в модели, константа C подбирается, чтобы новое выражение равнялось исходному гамильтониану. При практической реализации выбирают некоторое максимальное количество M операторов, что определяет длину мировых линий. Конфигурацией является начальное состояние спинов и цепочка операторов $H_{t(p),j(p)}$ (среди которых могут быть единичные), действующих во временном слое p , так что произведение

$$\prod_{p=1}^M H_{t(p),j(p)},$$

действует на вектор состояния спинов при $p = 1$. Совместно они формируют набор мировых линий.

Смена конфигураций в компьютерной программе реализуется путем изменения наборов цепочек операторов. Заметим, что в силу ограничения на допустимые состояния спинов при изменении одного из операторов в конфигурации набор спинов при $p = 1$ тоже должен быть изменен, иначе может возникнуть ситуация, когда новая конфигурация предоставляет нулевой вклад в статистическую сумму. Принято поступать иначе: изменить пару операторов в двух слоях так, чтобы суммарный эффект на состояниях при $p = M$ был бы незаметен. Разработаны эффективные алгоритмы обновления, изменяющие на первом своем шаге диагональный элемент при сохранении начального спинового состояния и набора недиагональных элементов, а на втором шаге изменяющие недиагональные элементы вместе с начальным состоянием.

На этом заканчивается краткий обзор многообразия методов Монте-Карло. Мы приступаем к описанию особенностей и алгоритмов обработки результатов, получаемых в результате работы компьютерных программ.

2.3 Ряды измерений, порождаемых Монте-Карло

Во всех исследованиях, представляемых в данной диссертационной работе, использовались методы Монте-Карло, которые порождают в результате обработки различных точек конфигурационного пространства модели ряды значений наблюдаемых, повторно вычисляемых после каждого решения Метрополиса. Традиционно такие ряды называют *временными*. Это удобно как с точки зрения применения общих методов анализа наборов последовательности измерений [53, 54], так и со смысловой точки зрения: алгоритм Монте-Карло как будто “путешествует” в конфигурационном пространстве, посещая те или иные его точки в рамках случайного марковского процесса в воображаемом (говорят: мнимом, в связи с виковским поворотом) времени. Кроме того, по мнению автора, такая терминология соответствует и психологическому восприятию последовательности порождаемых данных, которые появляются в распоряжении исследователя постепенно, в определенном порядке, в течение времени от 10 минут до 5 дней. Последнее соответствует реальной экспериментальной технике при снятии показаний с приборов наблюдения за системой.

Возникает необходимость обработки сотен и тысяч значений с целью нахождения среднего значения и оценки его статистической погрешности. В этом аспекте проявляются определенные отличия от традиционного эксперимента.

Во-первых, марковский процесс, порождая последовательность конфигураций друг из друга, автоматически поддерживает их автокорреляции, т.е. взаимное влияние конфигураций, память о предшествующих состояниях модели. Определение *марковости* — вероятность перехода из одного состояния в другое зависит только лишь от предпоследнего

$$w(i \rightarrow j) = P(j|i) = P(j|i, k, \dots, m),$$

где $P(j|i)$ есть условная вероятность нахождения в состоянии j после пребывания в i — не препятствует появлению “эха” предыстории. Во-вторых, в компьютерных вычислениях вынужденно используются псевдослучайные числа, которые, по их природе, не совсем случайны, а значит, возможна частичная реконструкция последовательности значений псевдослучайной величины. Современные программные средства позволяют лишь ограниченный доступ к малому количеству истинно случайных значений, что, как правило, не используется.

Итак, приходим к выводу, что требуется особая обработка статистики по полученному набору, потому что получаемые числа не совсем случайны в том смысле, как это имеет место в реальном эксперименте. Методы корректного вычисления дисперсии и некоторых статистических свойств к настоящему времени достаточно глубоко разработаны [55, 56, 57, 58, 59] и будут описаны ниже. Важность включения данной Главы в текст диссертационной работы связана с тем, что

- Игнорирование факта наличия корреляций значений величин в методе Монте-Карло приводит к некорректным числовым результатам, что может исказить наблюдаемую физическую картину явлений в моделях и приводить к неверным выводам.
- Данный вопрос упускается из общих учебных курсов; автору известно, что большинство студентов определенного факультета конкретного вуза не знакомы с особенностями работы с рядами скоррелированных случайных величин.

Следует надеяться, что в будущем тема обработки рядов скоррелированных значений получит большее распространение за кругом специалистов в областях, напрямую сталкивающихся с необходимостью рассмотрения таких рядов.

Автокорреляционный анализ.

Пусть в результате одного запуска компьютерной программы получена последовательность вычислений некоторой наблюдаемой O : $\{O_n, n = \overline{1, N}\}$. Будем считать, что одно значение получается в результате вычислений по одной конфигурации¹. Везде ниже будем полагать, что процесс Монте-Карло уже достиг стационарности (см. выше), поэтому для значений $O(x)$ существует некоторое характерное для данных значений параметров модели распределение $f(O)$. Здесь x — конфигурация, т.е. совокупность переменных, характеризующих положение точки в конфигурационном пространстве.

Оценим среднее значение наблюдаемой как

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O_n. \quad (2.7)$$

¹Может быть и иначе, например величины, подобные магнитной восприимчивости или теплоемкости, требуют целого ряда значений намагниченности и энергии соответственно. Некоторые из описанных методов применимы и к такого рода величинам.

Поскольку процесс Монте-Карло всегда содержит конечное число шагов, а обойти непрерывное конфигурационное пространство, посетив все его точки, невозможно, найденная оценка будет отличаться от истинного среднего, которое могло бы быть найдено, если распределение величины $f(O)$ по всему конфигурационному пространству было бы известно:

$$\langle O \rangle = \int O f(O) dO. \quad (2.8)$$

Для наших условий “измерений” будем полагать

$$\langle O \rangle \approx \bar{O}.$$

Дисперсию же следует оценивать именно согласно ряду измерений O_n , что естественным образом подводит к вопросу о статистических (в т.ч., спектральных) характеристиках эмпирического распределения ряда O_n . В данном тексте мы опишем лишь часть, связанную со статической зависимостью этих значений.

Определяют автокорреляционную функцию

$$R(t) = \frac{\text{cov}(O_1, O_{1+t})}{\text{std}^2 O_1} \equiv \frac{\langle (O_1 - \langle O_1 \rangle)(O_{1+t} - \langle O_{1+t} \rangle) \rangle}{\langle (O_1 - \langle O_1 \rangle)^2 \rangle} = \frac{\langle O_1 O_{1+t} \rangle - \langle O_1 \rangle^2}{\langle O_1^2 \rangle - \langle O_1 \rangle^2}, \quad (2.9)$$

где все средние вычисляются по истинному распределению $f(O)$, что невозможно практически. В переходах (2.9) сделано допущение, что для стационарного процесса $\langle O_1 \rangle = \langle O_n \rangle$ для любого n .

Для практического вычисления оценки автокорреляционной функции для данного ряда значений O_n можно поступить следующим образом. Заменяем средние по распределению на средние по “времени” согласно

$$\langle O \rangle \rightarrow \bar{O}, \quad \langle O_1 O_{1+t} \rangle \rightarrow \overline{O_1 O_{1+t}}.$$

Тогда получим

$$R(t) \rightarrow A(t) = \frac{\overline{(O_n - \bar{O})(O_{n+t} - \bar{O})}}{\overline{(O_n - \bar{O})^2}}, \quad (2.10)$$

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O_n,$$

$$\overline{(O_n - \bar{O})(O_{n+t} - \bar{O})} = \frac{1}{N-t} \sum_{n=1}^{N-t} (O_n - \bar{O})(O_{n+t} - \bar{O}).$$

Индекс n включен в формулы, чтобы показать интервал смещения переменных значений ряда.

Определенная таким образом автокорреляционная функция позволяет оценить т.н. *интегральное время автокорреляции* τ_{int} , которое характеризует общий спад взаимозависимости значений одного и того же ряда при его параллельном переносе относительно самого себя на t отсчетов. Следует упомянуть о возможности использования *эмпирической автокорреляционной функции*, определяемой независимо как

$$\hat{A}(t) = \frac{\sum_{n=1}^{N-t} (O_n - \bar{O}_t)(O'_n - \bar{O}'_t)}{\sqrt{\sum_{n=1}^{N-t} (O_n - \bar{O}_t)^2 \sum_{m=1}^{N-t} (O'_m - \bar{O}'_t)^2}},$$

$$O'_n = O_{n+t},$$

$$\bar{O}_t = \frac{1}{N-t} \sum_{n=1}^{N-t} O_n,$$

$$\bar{O}'_t = \frac{1}{N-t} \sum_{n=1+t}^N O_n.$$

Эмпирическая автокорреляционная функция характеризует данную реализацию марковского процесса и описывает отклонение отдельных результатов измерений друг от друга при смещении рядов на t отсчетов. Эта функция может давать представление о наличии или отсутствии взаимосвязи последовательных значений чисел, однако для оценки дисперсии среднего, рассчитанного по такому набору, необходимо использовать именно $A(t)$, поэтому ниже мы будем рассматривать именно определение (2.10).

Следует указать на *физическое содержание* наличия автокорреляций. Допустим, на каком-то этапе работы компьютерного алгоритма получена некоторая конфигурация x_1 модели, по которой рассчитано значение наблюдаемой O_1 . Затем процесс Монте-Карло продолжает обход конфигурационного пространства, пытаясь создать новые наборы чисел x_2, x_3, \dots . Успех и качество работы программы будет зависеть, кроме всего прочего, от самого ландшафта в окрестности “точки” x_1 . В хорошем случае действие модели $S(x)$ оказывается достаточно мало меняющимся в различных направлениях весьма многомерного пространства, чтобы случайное движение по целому ряду направлений не приводило к заметному изменению $S(x_2) - S(x_1)$. Если это верно, возможно далеко отдалиться от исходной точки x_1 , получив в *среднем* существенно отличающийся набор чисел x_2 , так что между двумя наборами координат связь будет достаточно мала.

В плохом же варианте развития событий либо решение Метрополиса вообще отвергнет предложение и алгоритм вернется в точку x_1 (изменения нет, локальная автокорреляция максимальна), либо с малой вероятностью шаг будет осуществлен, но лишь благодаря малому отклонению x_2 от x_1 , что также

не способствует нескоррелированности двух конфигураций. Последний вариант, как правило превалирует. Причин тому может быть несколько. Во-первых, сильный рост значений $S(x)$ в окрестности текущей точки x_1 , что имеет место около ложных минимумом (метастабильных состояний модели). Во-вторых, изрезанный рельеф, подобный узкому ущелью с острыми отрогами, вытянутому в одном направлении и сильно ограниченному в остальных. Такая ситуация позволяет движение только лишь вдоль ущелья, что, в силу случайности выбора направления движения, не обязательно произойдет.

Вычислитель будет наблюдать резкое падение доли принятия (acceptance), а последовательные значения наблюдаемой будут сильно скоррелированы, поскольку алгоритму приходится выбирать лишь из весьма ограниченного набора возможностей движения (изменения конфигурации x). Взаимосвязь переменных конфигурации отражается на связи значений наблюдаемых $O(x)$.

Что же возможно предпринять? Прежде всего, следует выбирать максимально возможное значение шага изменения переменных конфигурации, совместимое с высокими значениями доли принятия (acceptance) *на стадии установления стационарного движения*. Последняя оговорка важна: доля принятия может быть высока в начале движения, когда случайно выбранная конфигурация не отражает наиболее вероятное состояние модели при данных значениях параметров, поэтому алгоритм стремится изменить ее. Это можно сравнить со спуском с вершины невысокой горы, когда вниз “открыты все пути”. После прохождения определенного участка возможности целенаправленного существенного изменения $S(x)$ будут исчерпаны, начинается долгое блуждание по областям с близкими значениями действия. В целом, выбор максимально возможных Δx позволяет на пологих участках быстро проходить конфигурации с близкими значениями x , а в сильно изрезанных — выбираться из глубоких, окруженных высокими “стенками” уступов расщелин.

Второй способ: увеличение размерности конфигурационного пространства путем введения дополнительных степеней свободы, в нашем случае — вспомогательных полей. Именно этот способ был подробно исследован во второй части представляемой работы. Были получены определенные аргументы в пользу применения такого подхода. К сожалению, это улучшение очень модельно-зависимо, могут встречаться ситуации, когда расширение конфигурационного пространства невозможно.

Третьим вариантом может служить изменение способа генерации новых конфигураций. Во-первых, следует следить за качеством генератора псевдослучайных чисел. От его характеристик (автокорреляционные свойства, покрытие диапазона значений $[0, 1)$, период, устойчивость относительно среднего) методы типа Монте-Карло зависят существенно. Это можно продемонстрировать, заменив качественный (внешний) генератор на стандартный, взятый из библиотеки языка программирования. Впрочем, в последние годы качество библиотечных генераторов повышается. Тем не менее, в открытых источниках легко найти проверенные, надежные алгоритмы (например, вихрь Мерсенна

[60]), которые и следует применять.

Во-вторых, можно пробовать различные алгоритмы генерации предложения Метрополиса. Так, в нашей работе для фермионной модели было опробовано два базовых подхода: **псевдофермионные поля** и **точные фермионные силы**. Разница в использовании проявляется как на уровне аналитических выражений, так и при кодировании, и тем более, при запусках программы. Псевдофермионные поля представляют собой определенное удобство в работе и хорошо укладываются в концепцию матрично-векторного характера модели. Точные фермионные силы позволяют делать существенно меньше шагов при обходе конфигурационного пространства, а также проявляют устойчивость при попадании алгоритма в окрестности локальных минимумов. Их использование, однако, вносит дополнительные погрешности, связанные с вычислением ΔH перед принятием решения Метрополиса. С другой стороны, следование стилю рассуждения точных фермионных сил позволяет внести в программу ряд оптимизаций вычислений, существенно улучшающих производительность. Так, автором было достигнуто уменьшение времени работы программы в 30 раз.

Применение **автокорреляционного анализа с практической точки зрения** важно потому, что значения, получаемые по ряду сильно скоррелированных значений, имеют смещение (bias) от истинного, оцениваемого значения (2.8), что может приводить к ошибочным заключениям относительно процессов в модели, использованию неверных (неточных) исходных данных для фитирования, появлению “фантомных” эффектов, наподобие печально известных эффектов конечного объема (например, появление конденсата в тех областях, где с физической точки зрения его не должно быть). Особое негативное воздействие смещение оказывает на те физические величины, которые имеют смысл *производных* или *дисперсий*. Этот факт проявляется в нашей работе на примере определения теплоемкости электронного газа. Самое ценное в данном контексте является то, что погрешности за счет автокорреляций могут быть устранены, следовательно, правильный анализ временных рядов Монте-Карло является хорошим инструментом для **улучшения** получаемых **данных**, чем следует обязательно пользоваться. О том, как именно это сделать, пойдет речь далее.

Оценка дисперсии временных рядов с автокорреляциями.

Истинная дисперсия величины O по стационарному (установившемуся) распределению определяется

$$\sigma_O^2 = \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2, \quad (2.11)$$

где средние определены согласно (2.8). Для дисперсии среднего, рассчитанного

по данному временному ряду значений Монте-Карло, запишем

$$\begin{aligned}\sigma_O^2 &\equiv \langle \bar{O}^2 \rangle - \langle \bar{O} \rangle^2 = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{n,m=1}^N \langle O_n O_m \rangle - \frac{1}{N^2} \sum_{n,m=1}^N \langle O_n \rangle \langle O_m \rangle = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{n=1}^N (\langle O_n^2 \rangle - \langle O_n \rangle^2) + \frac{1}{N^2} \sum_{n \neq m} (\langle O_n O_m \rangle - \langle O_n \rangle \langle O_m \rangle).\end{aligned}$$

Первое слагаемое приобрело вид дисперсии (2.11) одиночного измерения. Далее, используя симметрию во втором слагаемом и производя суммирование по индексу m ,

$$\begin{aligned}\sigma_O^2 &= \frac{\sigma_O^2}{N} + \frac{2}{N} \sum_{n=1}^{N-1} (\langle O_1 O_{1+n} \rangle - \langle O_1 \rangle \langle O_{1+n} \rangle) \left(1 - \frac{n}{N}\right) = \\ &= \frac{1}{N} \left[\sigma_O^2 + 2 \sum_{n=1}^N R(n) \sigma_O^2 \left(1 - \frac{n}{N}\right) \right] \equiv \frac{\sigma_O^2}{N} \cdot 2\tau,\end{aligned}$$

где использована величина $R(n)$ автокорреляционной функции (2.9) и введено *интегральное время автокорреляции*. Именно τ характеризует общие свойства взаимозависимости последовательности временных отсчетов. По этой величине можно судить и об истинной дисперсии временного ряда.

Действительно, полученное соотношение между дисперсией среднего и дисперсией истинной величины (2.8) показывает, что эффективное значение независимых измерений составляет

$$N_{\text{eff}} = \frac{N}{2\tau}. \quad (2.12)$$

Типичное значение интегрального времени автокорреляции составляет 0.7-2.3, следовательно каждый запуск программы может приводить к количеству измерений в 1.4-4.6 раз меньше, чем можно было бы ожидать! Например, набор 2000 чисел следует “воспринимать” только как 500. В указанное число раз возрастает дисперсия, т.е. статистическая погрешность за счет скоррелированности увеличивается до 2.1 раз. Это ярко демонстрирует необходимость учета автокорреляций во временных рядах.

К счастью, величину τ можно легко оценить на практике, применив (как один раз уже сделано выше) замену среднего по распределению на среднее по выборке, что приводит к $R(t) \rightarrow A(t)$. Тогда

$$\hat{\tau} = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{N_m} A(n). \quad (2.13)$$

На практике для подавления флуктуаций в $\hat{\tau}$ суммирование прекращают при появлении первого отрицательного слагаемого в сумме. Кроме того, для достаточно больших N множитель $(1 - n/N)$ не дает заметного вклада, поэтому им пренебрегают.

Практическая работа потребовала тысяч применений (2.13) для временных рядов длиной от 500 до 15000. Автор мог бы утверждать, что вычисление $\hat{\tau}$ по определению, описанному выше, себя хорошо зарекомендовало, отражало качество полученных данных в каждом случае и представляло ценную информацию о скрытой взаимосвязи последовательности чисел.

Для определения погрешности среднего (2.7) временного ряда в выведенной выше формуле для дисперсии среднего заменим дисперсию истинного значения на оценку последней, определенной так, как если бы измерения ряда были независимыми:

$$\hat{\sigma}_O^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (O_n - \bar{O})^2.$$

Затем разделим результат на N_{eff} согласно доказанному выше. Это позволяет оценить дисперсию среднего по ряду измерений.

Прежде чем идти далее, скажем, что существует еще одно эмпирическое правило определения времени автокорреляции, основанное на требовании тысячекратного уменьшения $A(t)$ по сравнению с $A(0)$ в сумме (2.13). Кроме того, быстрое преобразование Фурье дает удобный и универсальный способ оценки τ посредством рассмотрения *частотных* характеристики временного сигнала. Последнее представляет отдельный интерес в связи с развитыми Фурье-методами анализа и фильтрации зашумленных данных, но их обсуждение выходит за рамки данной диссертационной работы.

Алгоритмическое определение погрешностей временных рядов.

Метод определения погрешности серии измерений Монте-Карло, приведенный в конце предыдущего раздела, в принципе, отвечает всем необходимым требованиям для хорошей оценки получаемых результатов, однако можно сделать еще лучше. Главное, что хотелось бы улучшить, — по возможности автоматизировать процесс определения оценки автокорреляционного времени $\hat{\tau}$. Разумеется, прямое отображение в выводе программы анализа результатов вычисления (2.13) является надежным методом контроля правильности действий вычислителя, и его не следует забывать.

Так, разработаны достаточно удобные и универсальные методы прямого определения статистической погрешности временного ряда значений, генерируемых методами Монте-Карло, минуя определение автокорреляционной длины. Это позволяет не только получить практические оценки дисперсии и времени автокорреляции, но и улучшить результат, которой извлекается из ряда входных данных. Например, возможно устранить общую скоррелированную компоненту, вносящую смещение (bias) в целые блоки последовательных значений.

```

T = 0.3   U = 3.2   V = 0.8
out6_0.txt: 2000
+-----+-----+-----+
|col type |           k           |           v           |           E           |
+-----+-----+-----+
|tau_int  |           0.8         |           0.7         |           0.7         |
|tau_bin  |           0.8         |           0.7         |           0.6         |
|decayb/B |          1.9/20       |          3.1/20       |          1.5/20       |
|R2       |          0.7335       |          0.6782       |          0.5491       |
|slope    |           0.5^        |           11.3^       |           1.4^       |
+-----+-----+-----+
|average  | -2.917911e+02  3.710240e-01 | 9.243311e+01  3.992757e-01 | 3.974879e+04  2.191480e+02 |
+-----+-----+-----+
|result   | -2.917911e+02  3.710240e-01 | 9.243311e+01  3.992757e-01 | 3.974879e+04  2.191480e+02 |
+-----+-----+-----+

```

Рис. 2.1: Пример работы автоматизированной программы статистической обработки временного ряда.

Ниже подробно рассмотрены два основных метода обработки временных рядов Монте-Карло, которые были использованы автором в рамках выполнения представляемой работы.

Биннинг (binning)

Метод смежной группировки последовательности значений с целью подавления взаимной скоррелированности набора данных меньшего объема. За счет усреднения внутри групп (“бинов”) получаемые средние оказываются разделены временными интервалами, заметно превышающими время автокорреляции (которое в начале работы алгоритма неизвестно), следовательно, они могут восприниматься как новые независимые измерения. Это позволяет корректно провести наивную обработку согласно общеизвестным простейшим формулам, которые справедливы для истинно независимых данных. Поскольку τ неизвестно, следует повторить процесс для разных, все возрастающих объемов групп с целью добиться стабилизации получаемого результата. Тогда можно считать, что размер группы превышает время автокорреляции в достаточной степени и взаимозависимость подавлена.

Итак, после выбора длины блока B следует сделать следующее.

1. Среди первых чисел временного ряда (полным количеством N) выделить $N_B = \lfloor N/B \rfloor$ блоков, где $\lfloor \cdot \rfloor$ означает целую часть от числа. Все невостребованные данные после окончания последнего блока в дальнейшем анализе не участвуют.
2. Для каждого блока рассчитать среднее

$$O_j^{(B)} = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B O_{(j-1)B+i}, \quad j = \overline{1, N_B}.$$

Среднее по всем блокам совпадает со средним по задействованному участку ряда:

$$\overline{O^{(B)}} = \overline{O}.$$

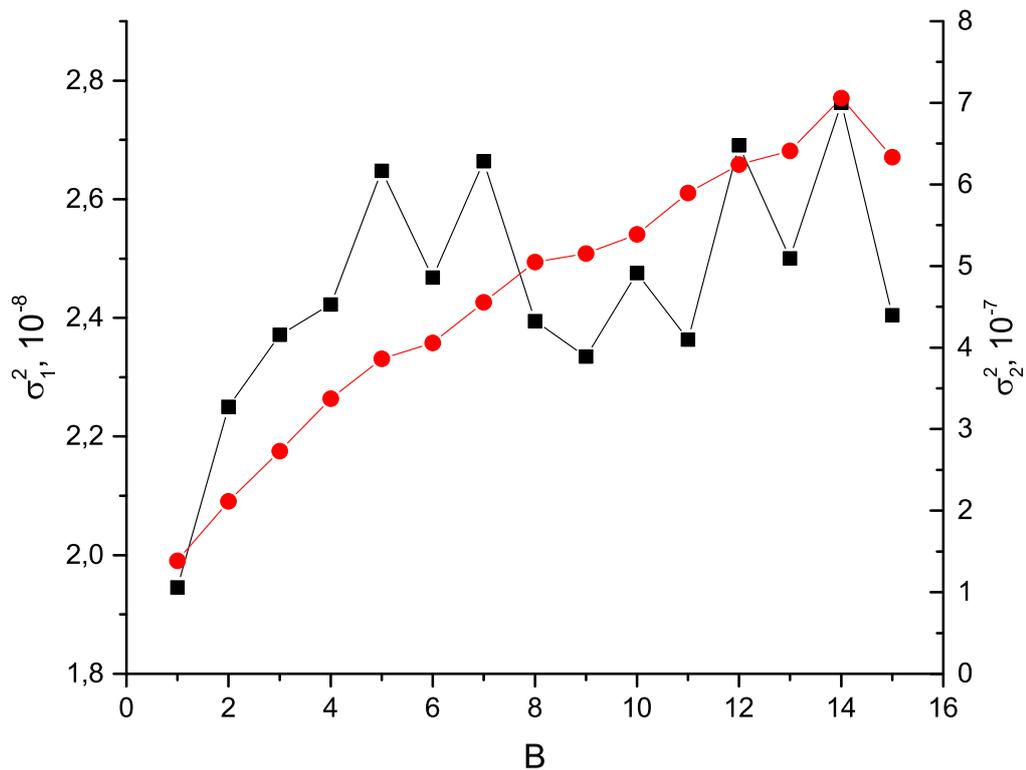


Рис. 2.2: Поведение дисперсии временного ряда данных при использовании биннинга при возрастании длины блока B . Черные квадратные точки отложены по левой оси, красные круглые — по правой. Приведены две физические величины, первая из которых слабо скоррелирована, и соответствующий график быстро достигает области “насыщения”, а вторая проявляет сильную корреляцию, и вопрос о достаточности данного объема выборки для ее надежного определения требует дальнейшего анализа.

3. Рассчитать оценку дисперсии среднего по блокам

$$\sigma_{\bar{O}}^2 = \frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{j=1}^{N_B} (O_j^{(B)} - \bar{O})^2 \quad (2.14)$$

как если бы они представляли собой независимые измерения.

4. Повторить процедуру для размеров блоков длин $B = 1, 2, \dots$

Следующим этапом работы является построение графика $\sigma_{\bar{O}}^2(B)$ и анализ, достигается ли насыщение в какой-либо области значений B . Если это так, исходная выборка данных Монте-Карло оказалась достаточной для достоверного определения среднего и его погрешности. Результат равен

$$\bar{O}^{(B)} \pm \sigma_{\bar{O}},$$

а время автокорреляции по биннингу оценивается как

$$\hat{\tau}_{\text{bin}} = \frac{1}{2} \frac{\sigma_O^2(B \rightarrow \infty)}{\sigma_O^2(B = 1)}.$$

Пример из практической обработки ряда Монте-Карло автором показан на Рис. 2.2. Хорошо видно отличие в поведении дисперсии по биннингу двух наблюдаемых. Для первого ряда значений результат может считаться достоверным (само значение, погрешность и статистические, в т.ч., флуктуационные, характеристики), тогда как для второй наблюдаемой следует либо добавить больше значений измерений, либо скорректировать параметры проведения вычисления, добиваясь снижения автокорреляций.

Следует оговорить важную деталь: количество блоков N_B не должно быть меньше 100, в силу ограничений на стабильность применяемой формулы погрешности прямых измерений. Это связано с тем, что (2.14) выводится в математической статистике из допущения о гауссовом характере флуктуаций прямо измеряемых случайных величин.

Швейцарский нож (jackknife)

Данный метод оценивают [55, 56] как вершину искусства и универсальности при оценке погрешности вычислений временных рядов для прямо и косвенно измеряемых величин. Примером последних может служить теплоемкость, определяемая по дисперсионной формуле. Также периодически встает вопрос вычисления отношений двух величин, каждая из которых предварительно определяется методом Монте-Карло из одного и того же марковского процесса. Метод jackknife, во-первых, автоматически переносит погрешность (error propagation) с исходных величин на вычисляемые из них, во-вторых, самостоятельно преодолевает автокорреляции благодаря самому своему алгоритму.

Кроме того, jackknife может естественным образом использоваться в рамках биннинга, что позволяет повторить процедуру проверки достижения насыщения погрешности, как описано выше.

Снова разобьем все данные на $N_B = \lfloor N/B \rfloor$ блоков длины B . Имеет место ограничение $N_B \gtrsim 30$ для получения относительной неопределенности в результирующей погрешности порядка $1/\sqrt{30} \approx 18\%$. Затем выполняются следующие шаги.

1. Для каждого из N_B блоков вычисляются искомые величины (среднее значение, теплоемкость, автокорреляционная функция при конкретном значении аргумента, результат фитирования (fitting) некоторой функции или что-либо другое) по данным всех блоков за исключением текущего. Это можно записать так

$$\bar{O}_j^{(J)} = \frac{1}{B(N_B - 1)} \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^{N_B} \sum_{i=1}^B O_{(b-1)B+i}, \quad j = \overline{1, N_B}.$$

С точки зрения программной реализации для увеличения скорости счета следует сохранить полную сумму величин, рассчитанных во всем блоке, и из нее вычитать сумму по данному блоку. Либо можно поступить еще хитрее: посчитать отдельно суммы по блокам, и складывать все за исключением суммы для текущего.

2. В качестве ответа принимается среднее от найденных величин

$$O_J = \frac{1}{N_B} \sum_{j=1}^{N_B} \bar{O}_j^{(J)}.$$

3. Дисперсия по полученному (сильно скоррелированному) набору ответов вычисляется по формуле

$$\sigma_J^2 = \frac{N_B - 1}{N_B} \sum_{j=1}^{N_B} \left(\bar{O}_j^{(J)} - O_J \right)^2.$$

Эта формула применима для искомых величин, вычисляемых как по каждому отдельному элементу временного ряда, так и по совокупности. Следует обратить внимание на множитель $N_B - 1$ в числителе, который отличает формулу для дисперсии по jackknife от дисперсии для независимых измерений (2.14), что происходит из отличия $\langle f(O) \rangle$ от $f(\langle O \rangle)$. Доказательство можно найти в [57].

Важным достоинством метода jackknife является включение почти всех данных в анализ на каждом шаге. Это стабилизирует N_B вычисляемых значений и приводит к надежной оценке статистической погрешности. С другой стороны, размеры блоков должны быть как минимум сравнимы с временем автокорреляции. Для подбора удачного значения B , как уже упоминалось выше, можно последовательно рассмотреть $B = 4, 5, \dots$, объединив jackknife и binning.

Часть 3

Расширенная модель Хаббарда

3.1 Обоснование модели

Данная часть диссертационной работы посвящена исследованию свойств π -валентных электронов на поверхности графена. Вся техническая часть выполнена в рамках т.н. tight-binding-модели, предложенной Уоллесом в [61]. В наше время вторично-квантованный вид гамильтониана модели воспринимается как должное и в публикациях выписывается первой формулой. Тем не менее, в рамках диссертационной работы представляется корректным пролить свет на истоки используемого формализма и привести аргументы в пользу гамильтониана в терминах операторов рождения-уничтожения с параметром хоппинга (перескока) и кулоновским потенциальным слагаемым, который в данной работе является исходным.

Графен представляет собой плоскую решетку атомов углерода с тремя электронными орбиталями в состоянии sp^2 -гибридизации. Они расположены в плоскости решетки и перекрываются у соседних атомов, образуя σ -связи. Это каркас вещества. Невостребованной оказывается p -орбиталь, ориентированная перпендикулярно плоскости решетки графена. Электрон на ней называется π -электроном, потому что может образовывать одноименную химическую связь. Энергии π -состояний выше, чем σ -состояний, поэтому именно π -электроны участвуют в тепловых возбуждениях.

Tight-binding-модель описывает состояния π -электронов, потому что они могут быть рассмотрены независимо от σ -состояний. Элементарная ячейка графена состоит из двух атомов (см. Рис. 3.1), поэтому достаточно двух блоховских орбиталей, построенных по атомным орбиталям $\varphi_j(\vec{r})$, для описания зонной структуры. Первые выбирают [62] в виде

$$\chi_{j,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}), \quad j = 1, 2,$$

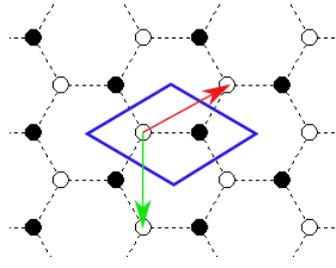


Рис. 3.1: Элементарная ячейка графена. Путем смещения пары узлов в синем ромбе на всевозможные расстояния по направлениям, заданным красной и зеленой стрелками, реконструируется вся решетка.

где \vec{R} задает позицию атома в элементарной ячейке. Решение уравнения Шредингера на собственные функции и собственные значения следует производить на пробных функциях, взятых в виде линейных комбинаций блоховских волн $\chi_{j,\vec{k}}$. Собственные значения $E_{n,\vec{k}}$, где n — зонный индекс, \vec{k} — волновой вектор, представляют собой зонную структуру.

Далее действуют следующим образом. Выписав действие гамильтониана на линейную комбинацию $\chi_{j,\vec{k}}(\vec{r})$, ищут коэффициент разложения по блоховским состояниям. При этом получают компоненты гамильтониана в виде

$$H_{ij,\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \langle \chi_i | \hat{H} | \chi_j \vec{R} \rangle, \quad \chi_j \vec{R}(\vec{r}) = \chi_j(\vec{r} - \vec{R}).$$

В приближении взаимодействия ближайших соседей вклады в указанные матричные элементы дает только $\vec{R} = \vec{0}$, поэтому

$$H_{11,\vec{k}} = H_{22,\vec{k}} = \langle \chi_1 | \hat{H} | \chi_1 \rangle = E_1, \\ H_{12,\vec{k}} = H_{21,\vec{k}}^* = \langle \chi_1 | \hat{H} | \chi_2 \rangle \left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{b}} \right) = t \left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{b}} \right) = t_{\vec{k}},$$

где \vec{a} и \vec{b} суть периодические вектора элементарной ячейки, E_1 — энергия атома, t — параметр хоппинга. В этих обозначениях задача на собственные вектора и собственные значения имеет матричный вид

$$\begin{bmatrix} E_1 & t_{\vec{k}} \\ t_{\vec{k}}^* & E_1 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{C} = E_{\vec{k}} \mathbf{C}.$$

Решение этой задачи

$$E_{\vec{k}}^{\pm} = E_1 \pm \sqrt{|t_{\vec{k}}|^2}$$

представляет собой знаменитую картину шести соприкасающихся конусов в импульсном пространстве.

Каждый атом углерода предоставляет листу графена один π -электрон, но каждое состояние может быть занято двумя электронами благодаря наличию у

последнего спина. Говорят, что зоны проявляют половинное заполнение (half-filling). Уровень, соответствующий энергии Ферми, проходит точно через точки соприкосновения конусов. Вблизи данных точек гамильтониан линеен по импульсу, а именно

$$v_F \vec{p} \cdot \sigma,$$

$v_F \approx 1000$ км/с — скорость Ферми, а собственные значения энергий вблизи каждого из атомов равны соответственно

$$E_p^\pm = \pm v_F p.$$

Этот вид и позволяет говорить о дисперсионном соотношении в виде дираковских конусов.

Данное краткое описание показывает, как появляется параметр хоппинга в случае т.н. первичного квантования. В представляемой работе используется вторично-квантованный гамильтониан, в который необходимые коэффициенты, выражающие *интенсивности* процессов, следует внести извне. Обычно для этого используются методы функционала плотности (DFT) и cRPA (constrained random phase approximation) [63], который дает конкретные значения для параметра хоппинга и кулоновского взаимодействия (с учетом эффекта экранировки) на различных расстояниях между электронами. Так, в указанной работе предлагается использование значений $U_{00} = 9.3$ эВ и $U_{01} = 5.5$ эВ. Следует уточнить, что рассчитаны также значения и U_{02} и U_{03} , но в нашей работе эти координационные радиусы не используются, поэтому ниже будет использовано *эффективное* значение для $U_{01,\text{eff}} \approx 0.8$ эВ, автоматически учитывающее дальние вклады.

Обобщенный гамильтониан Хаббарда, для которого определялись параметры, учитывал переходы электронов как между ближайшими соседями, так и между электронами, разделенными одним атомом, а также два потенциальных вклада. Мы не будем учитывать next-to-nearest-хоппинг, потому что он составляет менее 0.2 от величины хоппинга между ближайшими соседями ([63]).

Мы обосновали выбор формы гамильтониана. Теперь следует провести целую последовательность математических преобразований для сведения абстрактной квантово-механической формы статистической суммы модели к форме эффективной классической модели со вспомогательными полями, пригодной для использования в методе Монте-Карло.

3.2 Вывод рабочих формул

Гамильтониан модели записывают в виде двух слагаемых: кинетической части, описывающей перемещения электронов между узлами, и потенциальной части взаимодействия двух электронов, расположенных на одном узле и на соседних. Возможен учет и более дальних порядков, это может быть легко сделано включением членов вне субдиагоналей.

$$\hat{H} = -\kappa \sum_{x \neq y, \sigma} \hat{c}_{x, \sigma}^\dagger \hat{c}_{y, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{x, y} \hat{q}_x V_{xy} \hat{q}_y. \quad (3.1)$$

Используются следующие обозначения. $\hat{c}_{x, \sigma}$ — оператор уничтожения электрона на узле x с проекцией спина $\sigma = \pm 1$,

$$\hat{q} = \hat{c}_{x, +1}^\dagger \hat{c}_{x, +1} + \hat{c}_{x, -1}^\dagger \hat{c}_{x, -1} - 1 \quad (3.2)$$

есть оператор электрического заряда, сосредоточенного в узле x , суммирование в потенциальном слагаемом идет по всем парам (x, y) , в т.ч. совпадающим, а в кинетическом — по парам соседей без совпадений, но учтены как прямые, так и обратные переходы с узла на узел. Константа хоппинга (перескока) $\kappa = 2.8 \text{ eV}$, постоянные энергий имеют значения порядка $V_{00} = 3.2\kappa$, $V_{01} = 0.8\kappa$. Их конкретные значения могут меняться в зависимости от целей исследования и будут уточняться каждый раз. Периодически используются переобозначения $U \equiv V_{00}$, $V \equiv V_{01}$.

В целях получения явно положительно-определенной вероятностной меры распределения для вспомогательных полей в методе гибридного Монте-Карло электроны с различными направлениями спина рассматривают как собственно электроны (спин вверх) и дырки (спин вниз). При таком подходе операторы двух сортов частиц представляют собой

$$\begin{aligned} \hat{a}_x &= \hat{c}_{x, +1}, & \hat{a}_x^\dagger &= \hat{c}_{x, +1}^\dagger \\ \hat{b}_x &= \pm \hat{c}_{x, -1}^\dagger, & \hat{b}_x^\dagger &= \pm \hat{c}_{x, -1}, \end{aligned}$$

где на разных подрешетках графена выбраны разные знаки во второй строчке. Это необходимо, что в кинетическом слагаемом получить сумму вместо разности вкладов от электронов и дырок. Антиккоммутаторы преобразуются

$$[a_{x\sigma}, a_{y\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{xy} \delta_{\sigma\sigma'} \rightarrow [a_x, a_y^\dagger]_+ = \delta_{xy}, [b_x, b_y^\dagger]_+ = \delta_{xy},$$

остальные равны 0. Это приводит к выражениям

$$\hat{H} = -\kappa \sum_{x \neq y} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_y) + \frac{1}{2} \sum_{x, y} \hat{q}_x V_{xy} \hat{q}_y, \quad (3.3)$$

$$\hat{q}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x - \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x \equiv n_x - n_x^h. \quad (3.4)$$

Дополним этот набор оператором спина в узле

$$\hat{s}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x \equiv n_x + n_x^h.$$

Полученные соотношения подтверждают определение дырки как незаполненной валентной связи. Электроны могут быть интерпретированы как частицы с зарядом +1, а дырки — с зарядом -1. Это означает, что наличие электрона

повышает заряд узла на 1 (отсчитывая заряд голого узла от 0), а наличие дырки, наоборот, уменьшает. Наличие любой из частиц повышает величину проекции спина на $+1/2$ по сравнению со спином голого узла, равного $-1/2$. В целом, наличие дырки в узле означает *отсутствие* электрона со спином вниз, а наличие электрона в узле — присутствие электрона со спином вверх. Это видно из следующей таблицы для значений заряда и проекции спина четырех базисных состояний узла, которая приводит соответствие между состояниями в старом и новом базисах:

	q	S_z	
$ -\rangle$	-1	0	$ h\rangle$
$ \uparrow\rangle$	0	1/2	$ eh\rangle$
$ \downarrow\rangle$	0	-1/2	$ -\rangle$
$ \uparrow\downarrow\rangle$	1	0	$ e\rangle$

Далее следует найти решеточную аппроксимацию статистической суммы

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}.$$

Сделаем это в базисе *грассмановых когерентных состояний* [64]

$$|\psi, \eta\rangle \equiv e^{-\sum_x \psi_x \hat{a}_x^\dagger} e^{-\sum_x \eta_x \hat{b}_x^\dagger} |0\rangle,$$

где грассмановы числа коммутируют с операторами рождения-уничтожения. Нашей целью является приведение гамильтониана (3.3) к такому виду, чтобы оказалось возможным использовать соотношение

$$\text{Tr} \prod_{k=0}^{K-1} e^{-A_{ij}^k \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} = \det M, \quad (3.5)$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & +e^{-A^{K-1}} \\ -e^{-A^0} & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & -e^{-A^1} & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & -e^{-A^2} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Доказательство этого факта основано на соотношении [64]

$$\langle \psi_{k+1} | e^{-A_{ij}^k \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} | \psi_k \rangle = e^{-\psi_k^* \psi_k} e^{\psi_{k+1}^* e^{-A^k} \psi_k},$$

которое, в свою очередь, следует из

$$\langle \psi | F(a^\dagger, a) | \psi \rangle = F(\psi^*, \psi) e^{\psi^* \psi}$$

для нормально упорядоченной функции операторов рождения-уничтожения. Подробности можно увидеть в [65]. Поскольку (3.5) имеет место для квадратичной комбинации операторов рождения-уничтожения, а исходный гамильтониан (3.3) содержит потенциальную часть с произведениями четырех операторов, следует понизить степень в выражении. Это осуществляется применением тождества (преобразования) Хаббарда-Стратоновича в форме

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2} \hat{q} V \hat{q} \delta^{2m-n} \right\} = \int \mathcal{D}[\varphi] \exp \left\{ -\frac{\delta^n}{2} \varphi V^{-1} \varphi - i \delta^m \varphi \hat{q} \right\}, \quad (3.7)$$

где $2m - n = 1$, $\mathcal{D}[\varphi] \sim \prod_x d\varphi_x$. Поле φ_x носит название вспомогательного поля Хаббарда.

Целью представляемой работы являлось обобщить простейший подход, использующий одно (“зарядовое”) поле Хаббарда на большее число полей, в т.ч., с привлечением новых, линковых полей. В известной автору работе [66] был сделан первый шаг в данном направлении: введено второе поле, связанное с плотностью спина. Ниже будет показано, что можно улучшить качество моделирования Монте-Карло, если ввести еще три поля, определенные на линках. Использование **пяти полей** представляет научную новизну данной диссертационной работы. Ниже будет обосновано, почему это дает большие преимущества как с технической, так и с физической точек зрения по сравнению с двухполевым подходом.

Преобразуем потенциальную часть гамильтониана следующим образом.

$$\begin{aligned} \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{2} \sum_{x \neq y} \hat{q}_x \hat{q}_y &= \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x \neq y} ((\hat{q}_x + \hat{q}_y)^2 - \hat{q}_x^2 - \hat{q}_y^2) = \\ \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 - 3 \frac{V_{01}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x \neq y} (\hat{q}_x + \hat{q}_y)^2 &= \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x \neq y} (\hat{q}_x + \hat{q}_y)^2 = \\ \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x, \mu} (\hat{q}_x + \hat{q}_{x+\mu})^2, \end{aligned}$$

где $V'_{00} = V_{00} - 3V_{01}$ означает модифицированный потенциал on-site взаимодействия, суммирование вкладов от соседних узлов ведется с учетом наличия трех линков, связывающих каждый узел с соседями, $x + \mu$, $\mu = \overline{1, 3}$ означает соседний узел с узлом x в направлении μ . Данные выкладки имеют простой вид в силу $[\hat{q}_x, \hat{q}_y] = 0$.

Спиновое поле вводится, как и в работе [66], в узле:

$$\begin{aligned} \hat{q}_x^2 &= \alpha \hat{q}_x^2 + (1 - \alpha) \hat{q}_x^2 = \alpha \hat{q}_x^2 + (1 - \alpha)(n_x^2 + (n_x^h)^2 - 2n_x n_x^h) = \\ \alpha \hat{q}_x^2 - (1 - \alpha)(n_x^2 + (n_x^h)^2 + 2n_x n_x^h) + 2(1 - \alpha)(n_x^2 + (n_x^h)^2) &= \\ \alpha \hat{q}_x^2 - (1 - \alpha) \hat{s}_x^2 + 2(1 - \alpha) \hat{s}_x. \end{aligned}$$

Выкладки возможны благодаря $[\hat{n}_x, \hat{n}_y] = 0$, $[\hat{n}_x, \hat{n}_y^h] = 0$, учтено $n_x^2 = n_x$. При подстановке в on-site-часть потенциальной энергии доказанное дает

$$\frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 = \alpha \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 - (1 - \alpha) \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{s}_x^2 + (1 - \alpha) V'_{00} \sum_x \hat{s}_x.$$

Следует обратить внимание на появление *линейного* по спину слагаемого. Знаки перед слагаемыми с квадратом заряда и квадратом спина подобраны не случайно. Ниже станет очевидным, что противоположные знаки хотя бы в одном слагаемом не позволяют получить произведение эрмитово сопряженных M и M^\dagger , что ставит под сомнение положительную определенность вероятностной меры.

Полученный вид гамильтониана

$$\begin{aligned} \hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = & -\kappa \sum_{x \neq y} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_y) + \alpha \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 - (1 - \alpha) \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{s}_x^2 + \\ & (1 - \alpha) V'_{00} \sum_x \hat{s}_x + \frac{V_{01}}{4} \sum_{\mu=1}^3 \sum_x (\hat{q}_x + \hat{q}_{x+\mu})^2 \end{aligned}$$

следует обработать в рамках идеи континуального интеграла, о чем подробно рассказано в Части 2. Для этого единый “шаг” β в мнимом времени разбивают на T шагов величины $\delta = \beta/T$ и применяют декомпозицию Сузуки-Троттера

$$e^{-\beta \hat{H}} \approx \prod_{t=0}^{T-1} e^{-\delta \hat{T}} e^{-\delta \hat{U}}.$$

Затем все экспоненты взаимодействия преобразуют согласно (3.7) и упрощают выражение. Мы учтем, что в силу линейности слагаемого со спином можно дополнительно осуществить преобразование

$$\chi_{xt} \rightarrow \chi_{xt} - (1 - \alpha) V'_{00} \delta^{1-m}$$

с целью убрать линейное преобразование спинового поля. Имеем

$$\begin{aligned} e^{-\delta \hat{U}} \sim & \int \mathcal{D}[\varphi, \chi, \xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}] \prod_t e^{-\frac{1}{2} \frac{\sum_x \varphi_{xt}^2}{\alpha V'_{00}} \delta^n - i \delta^m \sum_x \varphi_{xt} \hat{q}_x} e^{-\frac{1}{2} \frac{\sum_x \chi_{xt}^2}{(1-\alpha) V'_{00}} \delta^n - i \delta^m \sum_x \chi_{xt} \hat{s}_x} \cdot \\ & e^{-\delta(1-\alpha) V'_{00} \sum_x \hat{s}_x} \cdot \prod_{\mu} e^{-\frac{1}{2} \frac{2}{V_{01}} \sum_x (\xi_{xt}^{(\mu)})^2 \delta^n - i \delta^m \sum_x \xi_{xt}^{(\mu)} (\hat{q}_x + \hat{q}_{x+\mu})} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int \mathcal{D}[\varphi\chi\xi] \prod_t e^{-\frac{1}{2} \frac{\sum_x \varphi_{xt}^2}{\alpha V'_{00}} \delta^n - \frac{1}{2} \frac{\sum_x (\chi_{xt} - (1-\alpha)V'_{00}\delta^{1-m})^2}{(1-\alpha)V'_{00}} \delta^n - \frac{1}{V_{01}} \sum_{x,\mu} (\xi_{xt}^{(\mu)})^2 \delta^n} \\
& e^{-\delta^m \left(i \sum_x \varphi_{xt} \hat{q}_x + i \sum_\mu \sum_x \xi_{xt}^{(\mu)} (\hat{q}_x + \hat{q}_{x+\mu}) + \sum_x \chi_{xt} \hat{s}_x \right)} = \\
& \int \mathcal{D}[\varphi\chi\xi] \prod_t e^{-S_{\text{HS},t}} e^{-\delta^m \left(i \sum_x \left(\varphi_{xt} + \sum_\mu (\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)}) \right) \hat{q}_x + \sum_x \chi_{xt} \hat{s}_x \right)}.
\end{aligned}$$

В последней строчке сделана замена $\xi_{xt}^{(\mu)} \hat{q}_{x+\mu} \rightarrow \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)} \hat{q}_x$, справедливая под двойной суммой по всем узлам и всем направлениям (линкам). Оператор \prod_t в каждом случае перемножает все сомножители до конца выражения (строчки). Такая вольность в обозначениях (операторы как числа) возможна в силу упомянутой выше коммутации операторов заряда, поэтому они действительно ведут себя как числа. Под *действием Хаббарда-Стратоновича* подразумевается часть действия, связанная со вспомогательными бозонными полями:

$$S_{\text{HS}} = \frac{1}{2} \frac{\sum_{x,t} \varphi_{xt}^2}{\alpha V'_{00}} \delta^n + \frac{1}{2} \frac{\sum_{x,t} (\chi_{xt} - (1-\alpha)V'_{00}\delta^{1-m})^2}{(1-\alpha)V'_{00}} \delta^n + \frac{\sum_{x,t,\mu} (\xi_{xt}^{(\mu)})^2}{V_{01}} \delta^n. \quad (3.8)$$

К текущему моменту получена квадратичная форма показателя в подынтегральном выражении статистической суммы. Далее следует взять операторный след явно, руководствуясь (3.5). Распишем подробно, как это делается в случае *двух сортов* частиц и пяти полей.

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \prod_t e^{\delta\kappa \sum_{x \neq y} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_y)} e^{-\delta^m \left(i \sum_x \left(\varphi_{xt} + \sum_\mu (\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)}) \right) \right)} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a} - \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x) + \sum_x \chi_{xt} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_y) = \\
& \text{Tr} \prod_t e^{\delta\kappa \sum_{x \neq y} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + (a \rightarrow b))} e^{-\delta^m \sum_x \left(i \left(\varphi_{xt} + \sum_\mu (\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)}) \right) + \chi_{xt} \right)} \hat{a}_x^\dagger \hat{a} + \begin{pmatrix} a & \rightarrow & b \\ i & \rightarrow & -i \end{pmatrix} = \\
& \text{Tr} \prod_t e^{\delta\kappa \sum_{x \neq y} \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y} e^{-\sum_x \hat{a}_x^\dagger B_{xt} \hat{a}_x} \cdot \begin{pmatrix} a & \rightarrow & b \\ i & \rightarrow & -i \end{pmatrix} = \det MM^* = \det MM^\dagger,
\end{aligned}$$

где введен координатно-временной столбец высоты $N_s \cdot T$

$$B_{xt} = \delta^m \left(i \left(\varphi_{xt} + \sum_\mu (\xi_{xt}^{(\mu)} + \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)}) \right) + \chi_{xt} \right),$$

а фермионная матрица линейного размера $N_s \cdot 2T$ состоит из диагональных

единиц и субдиагонально-временных координатных блоков

$$M_{2t+1,2t} = -e^{\delta\kappa \left\| \sum_{\mu} \delta_{y,x+\mu} \right\|_{N_s \times N_s}},$$

$$(M_{2t+2,2t+1})_{xy} = s \delta_{xy} e^{-B_{xt}}, \quad s = \begin{cases} -1, & t = \overline{0, T-2} \\ +1, & t = T-1. \end{cases}$$

Заметим, что матрицы $M_{2t+1,2t}$ плотные. Для их поиска применяется следующий алгоритм. Если матрица A диагонализуема, то

$$A = PDP^{-1} \Rightarrow e^A = Pe^D P^{-1},$$

где P — матрица, составленная из столбцов, в которых расположены собственные вектора матрицы A . Таким образом, если заполнить матрицу A элементами $\delta\kappa$ для индексов (x, y) , которые являются соседними узлами, и затем решить для нее задачу на собственные вектора и собственные значения, то перемножением трех матриц ищется экспонента от исходной матрицы A , поскольку e^D дается элементарным потенцированием диагональных элементов.

Итак, статистическая сумма переписана в следующем виде, пригодном для моделирования Монте-Карло

$$Z = \int \mathcal{D}[\varphi\chi\xi] e^{-S_{\text{HS}}} |\det M|^2. \quad (3.9)$$

3.3 Вывод уравнений молекулярной динамики

В методе Монте-Карло с принятием решения Метрополиса необходимо создавать новую конфигурацию, исходя из текущей, с целью оценить ее выгодность по отношению к величине действия модели. В случае генерации удачной конфигурации алгоритм “делает шаг” в данном направлении. Это называется принятие (acceptance) решения Метрополиса. Противоположная ситуация — отклонение (rejection) — вынуждает программу оставаться на месте и попробовать следующий вариант движения в конфигурационном пространстве.

Простейшим способом создания новой конфигурации является случайное движение по каждой степени свободы. Это достигается путем добавления (псевдо)случайной величины к каждой текущей степени свободы. Однако, как рассказано в Главе 2.2, это крайне неэффективно. Вместо это лучше использовать метод молекулярной динамики, который генерирует новую конфигурацию, исходя из текущей, при помощи технической эволюции согласно воображаемому гамильтониану, содержащему в качестве потенциальной своей части действие модели $S(x)$.

Соответствующая эволюция в техническом фазовом пространстве дается уравнениями Гамильтона (2.4) для системы (2.5) в форме

$$\frac{dp_i}{d\tau} = -\frac{\partial S}{\partial x_i}, \quad \frac{dx_i}{d\tau} = p_i.$$

Пусть мы вычисляем среднее значение наблюдаемой O согласно (2.1). В предыдущем разделе мы доказали, что статистическая сумма (3.9) может быть выражена через действие

$$S(\varphi, \chi, \xi) = S_{\text{HS}}(\varphi, \chi, \xi) - \ln |\det M(\varphi, \chi, \xi)|^2 \quad (3.10)$$

специальной полевой теории, тогда

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int O(x) e^{-S(x)} dx.$$

Это означает, что после представления исследуемой модели через вспомогательные поля Хаббарда необходимо вычислить производные от действия. Они дают скорости изменения импульса, которые используются в молекулярной динамике для эволюции системы в техническом времени.

На данном этапе возможен выбор одной из двух методик: **псевдофермионные поля** или **точные фермионные силы**. Последняя встречается, например, в [67]. Первая же традиционно используется в огромном количестве работ. В пределе бесконечно долгого марковского процесса результаты двух способов эквивалентны. Но в условиях ограниченных ресурсов второй метод оказывается намного более эффективным. Более того, при использовании специального алгоритма решения СЛАУ алгоритм точных фермионных сил допускает ряд (неочевидных) оптимизаций, что делает его использование еще более предпочтительным.

Данные, представленные в настоящей диссертационной работе, были получены как одним, так и другим способом. Автор программировал, настраивал и использовал оба подхода. Опишем их математическую сторону.

Псевдофермионные поля.

Воспользуемся параметризацией следующего вида

$$|\det M|^2 = \det MM^\dagger \sim \int \mathcal{D}[\zeta, \zeta^*] e^{-\zeta^*(MM^\dagger)^{-1}\zeta},$$

где введено бозонное комплекснозначное поле ζ . Теперь вычисление квадрата модуля определителя в исходной статистической сумме можно производить путем гауссова моделирования поведения дополнительных степеней свободы. Для получения точного соответствия исходного и нового выражений для Z требуется смоделировать изменение полей ζ в некоторой области с вероятностью, задаваемой гауссовым распределением. Однако это приводит к необходимости многократного решения СЛАУ для разных сгенерированных значений псевдофермионных полей, что, разумеется, существенно замедлит процесс создания новой конфигурации. Поэтому идут на компромисс и фиксируют лишь единственный набор значений полей ζ , надеясь на достаточную хаотичность гауссова шума благодаря большому их количеству (а именно, $N_s \cdot 2T$). На практике это предположение оправдывается, но только в “полсилы”: результаты

моделирования соответствуют физическим ожиданиям и их качество достаточно высоко, однако это требует множества шагов в конфигурационном пространстве и длинной статистики.

Тем не менее, способ чрезвычайно удобен в плане выражения формул, не содержит источника роста погрешностей (ниже мы сравним по этому параметру со вторым способом — точными фермионными силами), явно содержит операции матрично-векторного умножения, что существенно облегчает кодирование. Последнее является не таким небольшим преимуществом, как могло бы показаться! Программы такого уровня *всегда* содержат скрытые дефекты. Роль программиста состоит в минимизации их количества и локализации вреда.

Приведем конкретные формулы для определения скоростей изменения импульсов при использовании метода псевдофермионных полей.

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_F}{\partial \varphi_{\tau,z}} &= -\zeta^* \left(M^{\dagger-1} \frac{\partial M^{\dagger}}{\partial \phi_{\tau,z}} M^{\dagger-1} M^{-1} + M^{\dagger-1} M^{-1} \frac{\partial M}{\partial \phi_{\tau,z}} M^{-1} \right) \zeta = \\ &= -2\Re \left[\zeta^* (MM^{\dagger})^{-1} \frac{\partial M}{\partial \phi_{\tau,z}} M^{-1} \zeta \right] = -2\Re \left[\vartheta^* \frac{\partial M}{\partial \phi_{\tau,z}} \eta \right] = \\ &= -2\Re \left[\vartheta_{2\tau+2,z}^* s E_{\tau z} (-i\delta^m) \eta_{2\tau+1,z} \right] = -2s\delta^m \Im \left[\vartheta_{2\tau+2,z}^* E_{\tau z} \eta_{2\tau+1,z} \right], \end{aligned}$$

где $\eta = M^{-1}\zeta$, $\vartheta = M^{\dagger-1}\eta$, $E = \|\delta_{xy} e^{-B_{xt}}\|_{N_s \times N_s}$, $s = \pm 1$ есть знак перед экспонентой в матрице вида (3.6). Для спинового поля получаем

$$\frac{\partial S_F}{\partial \chi_{\tau,z}} = 2s\delta^m \Re \left[\vartheta_{2\tau+2,z}^* E_{\tau z} \eta_{2\tau+1,z} \right].$$

Для линкового поля необходимы два слагаемых

$$\frac{\partial S_F}{\partial \xi_{\tau,z}^{(\mu)}} = -2s\delta^m \Im \left[\vartheta_{2\tau+2,z}^* E_{\tau z} \eta_{2\tau+1,z} + \vartheta_{2\tau+2,z+\mu}^* E_{\tau z+\mu} \eta_{2\tau+1,z+\mu} \right].$$

Изменение же импульсов за счет бозонной части действия учитывается следующими соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{HS}}{\partial \varphi_{\tau,z}} &= \frac{\varphi_{z\tau}}{\alpha V'_{00}} \delta^n, \\ \frac{\partial S_{HS}}{\partial \chi_{\tau,z}} &= \frac{(\chi - (1 - \alpha) V'_{00} \delta^{1-m})_{z\tau}}{(1 - \alpha) V'_{00}} \delta^n, \\ \frac{\partial S_{HS}}{\partial \xi_{\tau,z}^{(\mu)}} &= \frac{2\xi_{z\tau}^{(\mu)}}{V_{01}} \delta^n. \end{aligned}$$

В рамках этого подхода перед использованием приведенных формул (перед началом интегрирования) генерируют значения поля ζ так, что величины

$M^{-1}\zeta$ распределены по нормальному распределению. Это достигается [56] путем задания вспомогательных комплексных значений согласно $(x_1, x_2)/\sqrt{2}$, где x_1 и $x_2 \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Затем на них следует подействовать матрицей M . Во время молекулярной динамики значения ζ фиксированы. После завершения интегрирования решают СЛАУ $M\eta = \zeta$ для определения нового фермионного вклада $\eta^\dagger\eta$. Вклад меняется, поскольку после интегрирования изменились вспомогательные поля, от которых зависит фермионная матрица M .

Точные фермионные силы.

Данный подход избегает погрешностей, связанных со стохастической параметризацией, на которой основаны псевдофермионные поля. Следует рассматривать фермионную часть действия напрямую согласно (3.10). Дифференцирование дает

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{\text{F}}}{\partial \varphi_{\tau,z}} &= -2\Re \left[\frac{\partial \ln \det M}{\partial \varphi_{\tau,z}} \right] = -2\Re \left[\text{Tr} M^{-1} \frac{\partial M}{\partial \varphi_{\tau,z}} \right] = \\ &= -2\Re \left[M_{2\tau+1,z,2\tau+2,z}^{-1} \cdot sE_{\tau z}(-i\delta^m) \right]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Далее следует воспользоваться явной структурой фермионной матрицы. Обозначим ее блоки, стоящие в столбце t , как D_t . Фермионная матрица имеет вид

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & D_{2T-1} \\ D_0 & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & D_1 & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & D_2 & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

а обратная ей (плотная) матрица составлена из блоков $M^{-1} = \|m_{ij}\|_{2N_s T \times 2N_s T}$. Тождество $MM^{-1} = I$, записанное через блоки, дает соотношения

$$m_{i+1,i+1} = D_i m_{ii} D_i^{-1}, \quad m_{i,i+1} = D_{i-1} m_{i-1,i} D_i^{-1},$$

Из которых выводится рекуррентное соотношение ($g_i = m_{i-1,i}$)

$$g_{i+2} = D_i D_{i-1} g_i D_i^{-1} D_{i+1}^{-1},$$

что дает

$$g_{2\tau+2} = e^A (sE_{\tau-1}) g_{2\tau} (e^A)^{-1} (sE_{\tau})^{-1}. \quad (3.12)$$

Знаки s при каждой матрице выбираются согласно виду (3.6).

Полученное означает, что достаточно найти один блок при помощи явного решения СЛАУ, а затем по (3.12) рассчитать соседние. Найденные матрицы входят в (3.11) для вычисления производных от фермионной части действия и дают скорости изменения импульсов (2.4).

Описанный метод имеет существенный недостаток, известный еще с 1981 года [68]: из-за перемножения матриц размера $N_s \times N_s$ накапливается ошибка округления. Через каждые K шагов необходимо заново решать СЛАУ, получая некоторый блок в середине алгоритма. Например, каждая 17-ая матрица, полученная по (3.12), отличается по норме L_2 от результата точного решения СЛАУ на 10^{-8} , тогда как решение СЛАУ может быть выполнено с точностью 10^{-14} .

С другой стороны, вычисления, выполненные при помощи *точных фермионных сил*, проявляет необыкновенную численную устойчивость с точки зрения молекулярной динамики. Кроме того, в процессе практического применения оказывается, что величина шага молекулярной динамики может быть выбрана в 100-350 раз больше, чем в методе псевдофермионных полей! Это обеспечивает более дальние “шаги” в конфигурационном пространстве, что способствует лучшей изменчивости конфигураций и снижению автокорреляций наблюдаемых, вычисляемых в течение марковского процесса. Наконец, данный подход существенно сокращает количество шагов, необходимых для достижения “типичных” конфигураций при заданных параметрах моделирования и для получения приемлемой статистики временных рядов Монте-Карло.

3.4 Использование двух полей

В Главе 3.2 подробно описана процедура введения пяти полей — двух узловых и трех линковых. Следует отметить, что отказ от последних не выполняется простым выкидыванием слагаемых, содержащих $\xi_{xt}^{(\mu)}$. Требуется *изменить* вывод потенциальной части. Выполним это сейчас и получим выражения, аналогичные приведенным в [66]. После этого обсудим отличие двух форм действия. Становится возможным сравнение результатов работы программ, реализующих каждый из способов.

Преобразуем слагаемое с on-site-взаимодействием, вводя спиновое поле так, как показано выше.

$$\begin{aligned} \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{2} \sum_{x \neq y} \hat{q}_x \hat{q}_y &= \frac{V_{00}}{2} (\alpha \hat{q}_x^2 - (1 - \alpha) \hat{s}_x^2 + 2(1 - \alpha) \hat{s}_x) + \frac{V_{01}}{2} \sum_{x \neq y} \hat{q}_x \hat{q}_y = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} (\alpha V_{00} \delta_{xy} + V_{01} (1 - \delta_{xy})) \hat{q}_x \hat{q}_y - \frac{V_{00}}{2} ((1 - \alpha) \hat{s}_x^2 - 2(1 - \alpha) \hat{s}_x) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} \tilde{V}_{xy} \hat{q}_x \hat{q}_y - \frac{V_{00}}{2} ((1 - \alpha) \hat{s}_x^2 - 2(1 - \alpha) \hat{s}_x). \end{aligned}$$

Поскольку мы не преобразовывали слагаемое с взаимодействием между соседями к виду полного квадрата, произведение операторов заряда продолжило содержать как диагональные, как и внедиагональные вклады. Это приведет к тому, что применение преобразования Хаббарда-Стратоновича имеет место в

виде

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2} \hat{q} \tilde{V} \hat{q} \delta^{2m-n} \right\} = \int \mathcal{D}[\varphi] \exp \left\{ -\frac{\delta^n}{2} \varphi \tilde{V}^{-1} \varphi - i \delta^m \varphi \hat{q} \right\},$$

что требует обращения модифицированной матрицы взаимодействия \tilde{V} . Это реализуется легко, при помощи метода триангуляции Гаусса, более того, возможно осуществить предварительные вычисления один раз перед началом моделирования Монте-Карло, что является хорошей оптимизацией. Тем не менее, метод пяти полей содержит только диагональную матрицу в произведении операторов заряда, что избавляет от какой-либо необходимости обращения матриц. Этот факт также облегчает кодирование и отладку, что немаловажно для программ такого уровня сложности, какой используется для метода Монте-Карло фермионных систем.

Конечно же, вычисление скорости изменения импульса претерпевает изменение и имеет вид

$$\frac{\partial S_{\text{HS}}}{\partial \varphi_{\tau, z}} = \left(\tilde{V}^{-1} \varphi \right)_{z\tau} \delta^n,$$

требующий еще одной операции обращения матрицы (точнее, решения СЛАУ с вектором φ в правой части).

Проверка работоспособности компьютерной программы

Сразу после написания и отладки компьютерного кода, реализующего метод Монте-Карло, программа была проверена следующими способами:

1. Проверка на обратимость интегрирования молекулярной динамики. Задается случайная конфигурация вспомогательных полей, затем производится интегрирование с некоторым шагом $\Delta\tau$ молекулярной динамики и подсчитывается изменение $H_f - H_i$ технического гамильтониана (2.5), которое составляет порядка 0.5-1.2. После этого из данного промежуточного состояния запускают алгоритм интегрирования “обратно во времени”, с шагом $-\Delta\tau$. Определяется $H_b - H_i$. Удостоверяются, что последняя разность составляет величину порядка машинного нуля. Это позволяет проверить правильность написания алгоритма в отношении обратимости (свойство, закладываемое в интегратор аналитически).
2. Проверка на консервативность молекулярной динамики (Рис. 3.2). Фиксируя $N_\tau \Delta\tau$, постепенно увеличивают число шагов молекулярной динамики (что автоматически уменьшает величину элементарного шага), проверяя, будет ли погрешность вычисления $H_f - H_i$ уменьшаться. Должно оказаться, что она падает линейно в дважды логарифмическом масштабе, начиная с некоторого $N_{\tau,0}$. Таким образом определяется минимальное количество шагов, требуемое для данного вида действия модели. Кроме того, проверяется консервативность молекулярной динамики в пределе бесконечно малого элементарного шага, поскольку погрешность метода составляет $\mathcal{O}((\Delta\tau)^2)$.

3. Кривые термализации. Под *термализацией* понимают достижение вспомогательными полями значений, характерных для данного набора значений параметров модели. Это коллективный эффект, поскольку все координаты всех полей Хаббарда должны синхронно достичь “типичной” окрестности конфигурационного пространства, после чего действие модели престаёт значительно меняться, а характер эволюции теряет направленность. В течение первых N_{th} шагов алгоритма и действие, и среднеквадратичные поля изменяются существенно и направленно. Проверка заключается в том, что при ошибочном кодировании или неверном использовании параметров модели в коде происходит экспоненциальное возрастание значений (хотя бы одного) хаббардовских полей, что указывает на ошибку или нарушение области применимости. Например, последнее имеет место в фазе CDW ($V_{01} > V_{00}/3$).
4. Для метода псевдофермионных полей актуальна проверка насыщения значений энергетических наблюдаемых (Рис. 3.3). После завершения термализации вычисляют значение кинетической энергии T , а конфигурацию сохраняют. Затем запускают программу снова, стартуя с сохраненного состояния и проводят дальнейшую термализацию. Вычисляют новое значение кинетической энергии. Это повторяется несколько раз. Правильный результат заключается в том, что получаемые значения перестают существенно меняться после нескольких таких последовательных продвижений в конфигурационном пространстве модели.
5. Проверка вычисления фермионных сил. Сравнивают значения, которые дают явные формулы, закодированные в методе молекулярной динамики для скорости изменения импульсов, и конечно-разностная производная, вычисленная по действию при помощи отклонения значения поля “вручную”. Удаётся достичь совпадения с точностью до 10^{-5} . Малейшая ошибка в коде сразу проявляется скачком различия на 4-5 порядков.
6. Проверка подпрограмм решения СЛАУ для фермионной матрицы и матрицы \tilde{V} . На произвольный столбец чисел следует подействовать прямым оператором (в случае фермионной матрицы это явно заданная операция), затем применить функцию нахождения решения СЛАУ и сравнить полученный столбец с исходным по норме. Можно достичь точности около машинного нуля для \tilde{V} и точности 10^{-11} для M . Последнее зависит от значения параметра температуры.

Параметры порядка. Сравнение с существующими данными

Следующим этапом проверки работоспособности написанной программы стало вычисление параметров порядка упорядоченных спиновых состояний при различных условиях модели. Традиционными параметрами порядка для

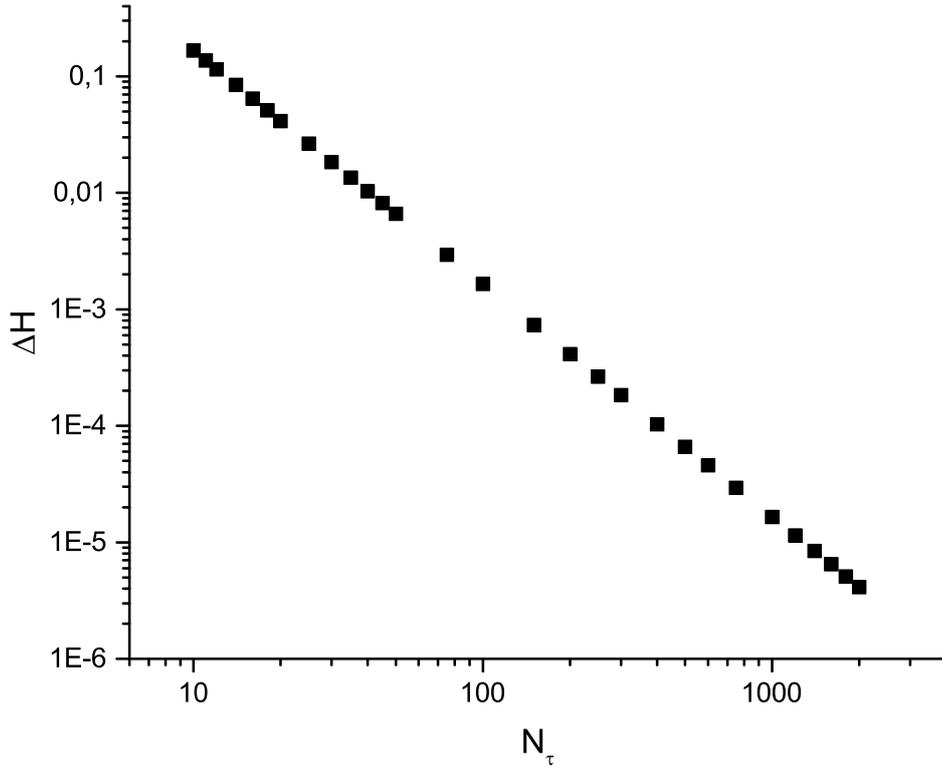


Рис. 3.2: Тест на погрешность метода молекулярной динамики в зависимости от величины элементарного шага в техническом времени. В дважды логарифмическом масштабе следует наблюдать уменьшение ошибки интегрирования при фиксированном полном времени $N_\tau \Delta\tau$ и возрастающем числе шагов интегратора.

модели Хаббарда считаются [66] средний квадрат проекции спина на подрешетке и средний квадрат заряда на подрешетке. Первая величина характеризует образование SDW — состояния, когда от узла к узлу колеблется значение проекции спина. Это фаза формируется при больших значениях параметра V_{00} [16]. При больших значениях V_{01} имеет место состояние CDW, при котором от узла к узлу колеблется значение заряда. На одном узле сидят два электрона, а на соседнем — ни одного. В этой ситуации ненулевое значение приобретает $\langle q^2 \rangle$.

$$\langle S_z^2 \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{L^4} \left\langle \left(\sum_{x \in A} \hat{S}_{zx} \right)^2 \right\rangle + \frac{1}{L^4} \left\langle \left(\sum_{x \in B} \hat{S}_{zx} \right)^2 \right\rangle \right\}, \quad (3.13)$$

$$\langle q^2 \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{L^4} \left\langle \left(\sum_{x \in A} \hat{q}_x \right)^2 \right\rangle + \frac{1}{L^4} \left\langle \left(\sum_{x \in B} \hat{q}_x \right)^2 \right\rangle \right\}. \quad (3.14)$$

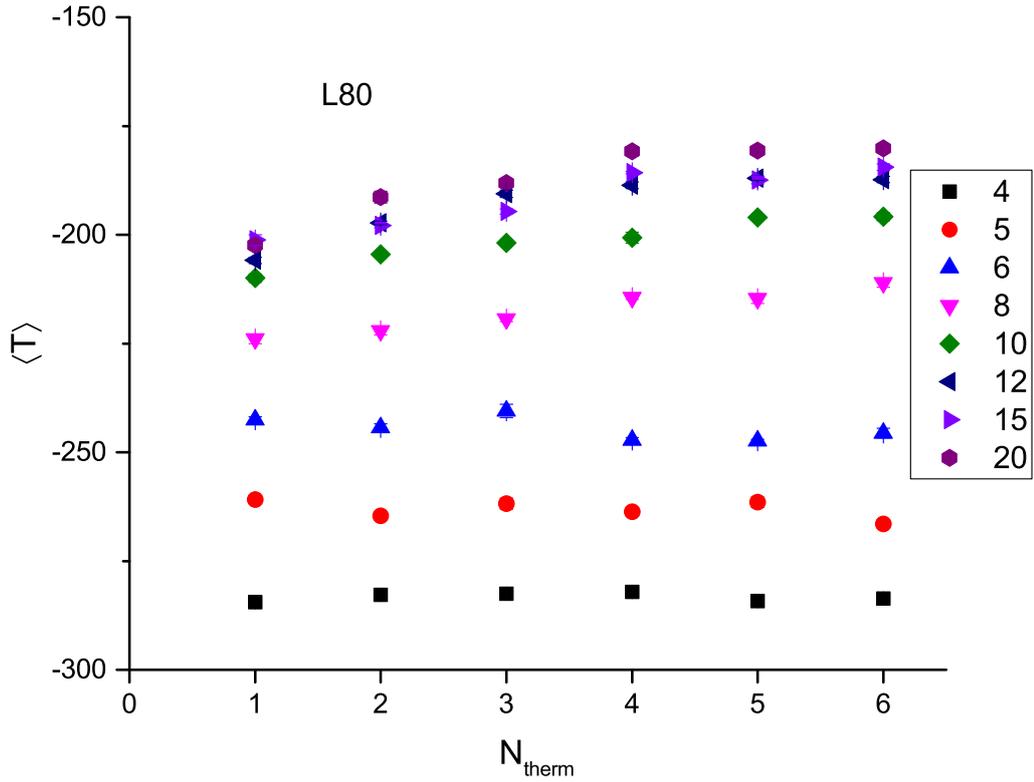


Рис. 3.3: При использовании метода псевдофермионных полей энергетические переменные не сразу достигают своих равновесных значений. Может потребоваться несколько последовательных запусков программы, чтобы средние для кинетической энергии стабилизировались. Отсутствие стабилизации указывает на возможные проблемы с кодом программы.

Выражения \hat{q}_x дается формулой (3.4), тогда как

$$\hat{S}_{zx} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{c}_{x,+1}^\dagger & \hat{c}_{x,-1}^\dagger \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{x,+1} \\ \hat{c}_{x,-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x - 1)$$

есть проекция спина в узле x на ось квантования. Заметим, что в данной диссертационной работе рассматривается проекция спина на ось квантования Oz , хотя в процессе исследования проверялась и симметрия проекций на две другие оси, вызываемая прецессией спина в квантовой механике.

CDW имеет место в области $V_{01} > V_{00}/3$ и недоступна для моделирования методом Монте-Карло со вспомогательными полями, потому что приводит к наличию отрицательных собственных значений в фермионной матрице, что вызывает экспоненциальный рост хаббардовских полей. По другую сторону от “запрещенной прямой” $\langle q^2 \rangle$ должен быть 0 в пределе бесконечного объема. Это позволяет контролировать правильность работы программы.

Значения $\langle S_z^2 \rangle$ и $\langle q^2 \rangle$, вычисленные при разных температурах, параметрах V_{00} и V_{01} для решетки фиксированного размера, можно сравнить по порядку

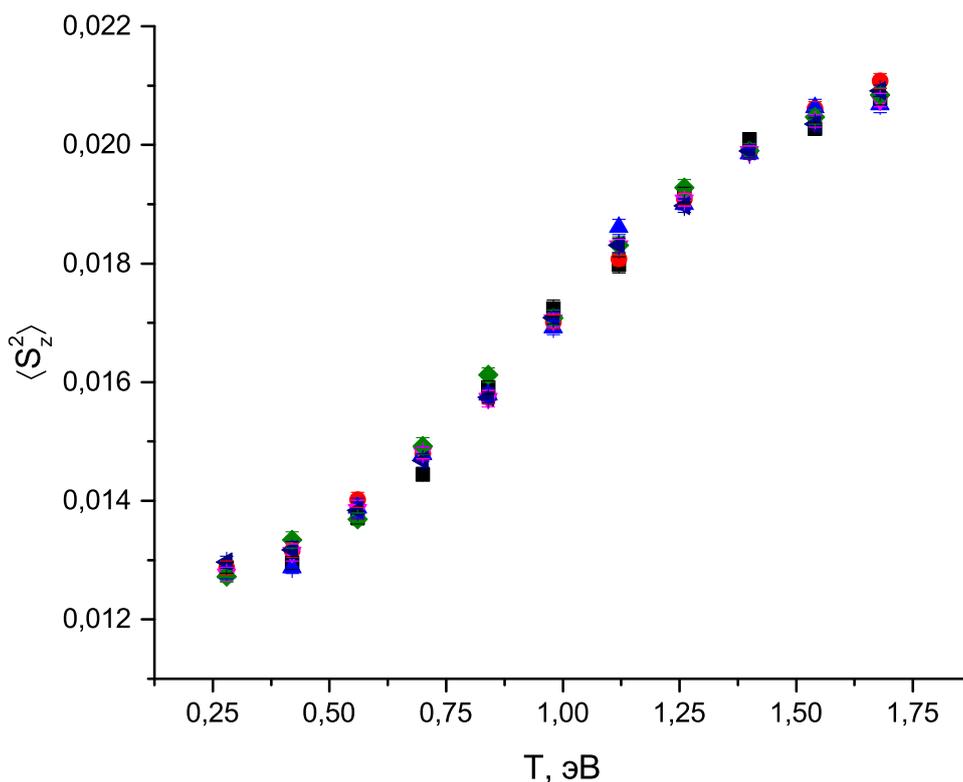


Рис. 3.4: Параметр порядка SDW для различных температур. Полученные при разных запусках значения не выявляют попадание алгоритма в метастабильные состояния, а сами величины могут быть использованы для сравнения с имеющимися данными в целях проверки корректности работы программы.

величины с имеющимися в рецензируемых изданиях данными с целью проверки на удовлетворительное согласие. Оно достигается. Примеры расчетов можно увидеть на Рис. 3.4 и Рис. 3.5. Следует оговориться, что к особой точности совпадения можно не стремиться. Данные величины являются сильно флуктуирующими и содержат скрытую зависимость от параметризации модели и способа вычисления. Более того, физически имеет смысл предел бесконечного объема (см. ниже), но на данном этапе требуется лишь удостовериться в работоспособности модели.

С другой стороны, уже в самом начале работы с расширенной моделью Хаббарда можно наблюдать достаточно интересные низкотемпературные эффекты, такие как образование *экситонного конденсата*. Под этим термином имеется в виду наличие связанных пар электрона и дырки. Результат вычислений, демонстрирующих тенденцию к переходу в данный режим, можно видеть на Рис. 3.6, где представлен коррелятор операторов заряда в соседних узлах. $\langle \hat{q}_x \hat{q}_y \rangle$ подходит для выявления экситонного конденсата, потому что соседние электрон ($|e\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$) и дырка ($|h\rangle = |-\rangle$) имеют заряды разных знаков. Согласно представленным данным коррелятор растет по абсолютной величине, остава-

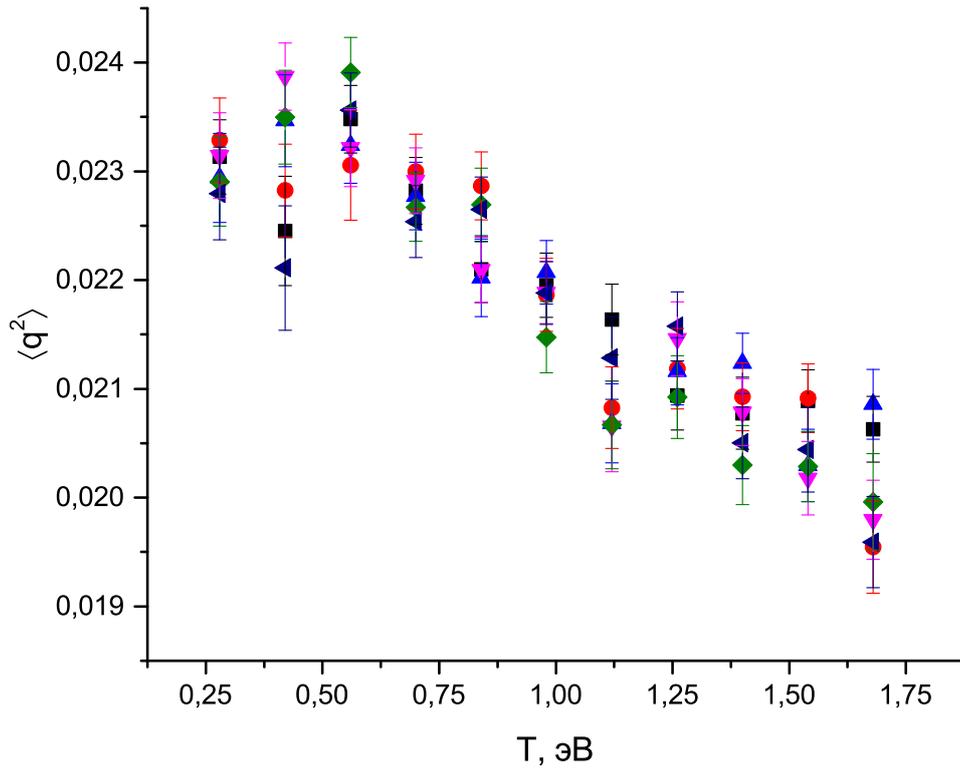


Рис. 3.5: Параметр порядка CDW. Величина конечная (не 0), но сильно флуктуирует. Так и должно быть, потому что в пределе бесконечного объема решетки она должна уходить в 0 при доступных моделировании Монте-Карло значениях параметров модели.

ясь отрицательным, при понижении температуры. В совокупности с проверкой факта падения величины проекции спина (см. снова 3.4), это свидетельствует в пользу обсуждаемого эффекта. Дальнейшее исследование феномена может быть продолжено в терминах компонент кулоновской энергии, что будет сделано ниже.

Как известно, решеточные вычисления, производимые при некотором фиксированном объеме решетки, заключают в своих ответах некоторый сдвиг (bias), уменьшающийся по мере увеличения объема. Этот эффект называется *объемным*. Для получения значений величин, свободных от данной поправки, необходимо провести несколько вычислений при разных объемах с целью уточнения зависимости $\langle O \rangle(V^\alpha)$, где V — объем решетки, а α — некоторое число. Типичный рецепт состоит в экстраполяции нескольких рассчитанных точек в область $V^{-1} \rightarrow 0$. Для моделирования графена описываемым способом оказывается [66], что параметры порядка с достаточной степенью точности могут быть экстраполированы линейными функциями от $1/L$.

Расчеты производились для решеток $L = 6, 8, 10, 12$, и полученные результаты хорошо подчинялись указанному рецепту получения их “истинных” зна-

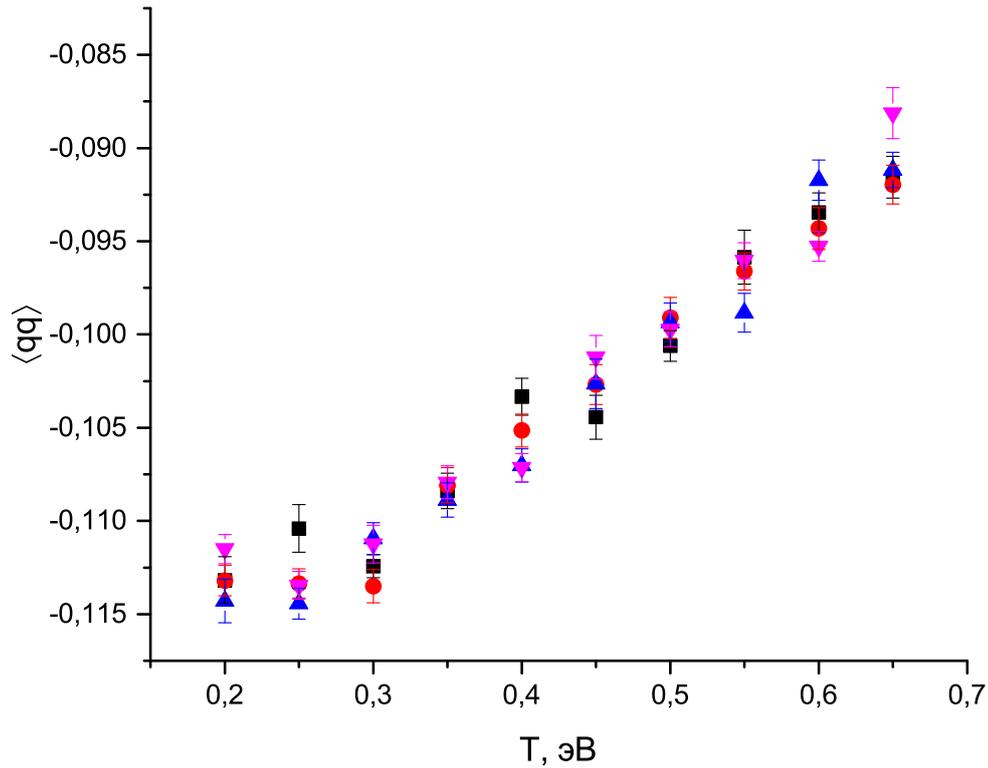


Рис. 3.6: Коррелятор зарядов в соседних узлах решетки. В силу определения электрона и дырки уменьшение значения этой величины в области низких температур свидетельствует в пользу образования экситонного конденсата.

чений в пределе бесконечно большой решетки. Кроме того, параметр порядка $\langle q^2 \rangle$ стремился к 0 и слабо отрицательным значениям. Последнее позволительно в силу артефактов решеточных вычислений, стохастичности результатов и приближенности объемного поведения как $1/L$. Таким образом, CDW в исследуемой области параметров ($V_{01} < V_{00}/3$) является эффектом конечного объема и был успешно отбракован в расчетах при проверке работоспособности кода, как и ожидалось из известных автору результатов других работ.

Теплоемкость в случае двух полей.

Одним из нескольких направлений исследований автора в области расширенной модели Хаббарда было определение температурного хода теплоемкости при параметрах, которые ожидаются от физического графена. В качестве таковых примем $V_{00} = 3.2\kappa$, $V_{01} = 0.8\kappa$ [63]. Выбор теплоемкости в качестве наблюдаемой объясняется достаточной простотой в ее интерпретации, наличием предварительных ожиданий от поведения и диапазона значений этой величины, измеримостью в эксперименте. Это выгодно отличает C от параметров порядка (3.13) и (3.14), являющихся чисто техническими величинами и характеризующими состояния взаимного упорядочения электронов.

Рассмотрим вначале результаты по определению теплоемкости в методе

двух полей. Из курса статистической физики известно, что существуют две возможности определить теплоемкость, которые можно условно назвать *определением по производной и дисперсионной формулой*. Два варианта даются выражениями

$$C = \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial T} \quad (3.15)$$

и

$$C = \frac{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}{T^2} \quad (3.16)$$

соответственно ($k = 1$). Следует обратить внимание на принципиальное смысловое различие двух вариантов. В первом случае вычисления Монте-Карло производятся независимым образом при двух различных температурах, после чего используется конечно-разностная аппроксимация производной¹. Второй вариант подразумевает одновременное определение как энергии, так и ее квадрата с последующим вычислением числителя.

Важным для понимания является следующее обстоятельство: в силу квантово-механического характера модели не следует пытаться определить дисперсию по временному ряду Монте-Карло для значений $E_i = \langle \hat{H} \rangle(i)$, где i — номер шага марковского процесса. Это легко видеть из следующего соображения:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^2 \rangle &= \langle (\hat{T} + \hat{U})^2 \rangle = \langle \hat{T}^2 \rangle + \langle \hat{U}^2 \rangle + \langle \hat{T}\hat{U} \rangle + \langle \hat{U}\hat{T} \rangle \neq \langle \hat{T} + \hat{U} \rangle^2 = \left(\langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{U} \rangle \right)^2, \\ &\langle \hat{T}\hat{U} \rangle + \langle \hat{U}\hat{T} \rangle \neq 2\langle \hat{T} \rangle \langle \hat{U} \rangle. \end{aligned}$$

Более того, если рассмотреть некоторый полный набор состояний $\{|m\rangle\}$ и представить интересующее нас среднее $\langle \hat{T}\hat{U} \rangle$ как $\sum_m \langle \hat{T}|m\rangle \langle m|\hat{U}\rangle$, то в силу различного знака сомножителей в данном разложении (это показывает моделирование и вся совокупность данных, полученных в ходе работы), то становится понятным факт *уменьшения* $\langle \hat{H}^2 \rangle$ с ростом температуры даже когда $\langle \hat{H} \rangle$ растет, как и ожидалось.

Перейдем к технической стороне вопроса о вычислении теплоемкости. Среднюю энергию будем определять как

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \equiv \langle \hat{H} \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{H} e^{-\beta \hat{H}} \right) = 2\Re \left[\sum_{x \neq y} M_{yx}^{-1} + \frac{V_{00}}{2} \sum_x (M_{xx}^{-1} - |M_{xx}^{-1}|^2) + \right. \\ &\left. \frac{V_{01}}{2} \sum_{x \neq y} (-M_{yx}^{-1} M_{xy}^{-1} + M_{xx}^{-1} M_{yy}^{-1} - M_{xx}^{-1} M_{yy}^{-1*}) \right]. \end{aligned}$$

Выражение через матричные элементы обратной фермионной матрицы получено в результате применения теоремы Вика[69] для средних $\langle a_x a_y^\dagger \rangle$, вычисляемых при помощи операторного вида статистической суммы $\text{Tr} \exp\{-\beta \hat{H}\}$, выраженной через операторы рождения-уничтожения.

¹Можно иначе: аппроксимировать точки графика $\langle \hat{H} \rangle(T)$ некоторой гладкой кривой и найти аналитическую производную.

Ниже будут подробно обсуждаться термические и флуктуационные характеристики отдельных вкладов (кинетического, on-site-взаимодействия и взаимодействия соседей) в полученное выражение для сравнения двух- и пятиполевого подходов. Сейчас же сосредоточим внимание на особенностях результатов, полученных в начале работы для двух полей.

Энергия \mathcal{E} была рассчитана как функция температуры для широкого диапазона от 0.3 эВ до 11 эВ с целью построения графика с плотным содержанием точек, что давало бы возможность вычисления теплоемкости по температурной производной. Полученная зависимость $\mathcal{E}(T)$ проявляет физически корректное поведение с учетом факторов решеточных вычислений. Например, в области выше 5 эВ начинает сказываться эффект конечного объема, потому что рост кинетической энергии электронов ограничен по волновым числам объемом решетки. Можно провести аналогию, что высокоскоростным возбуждениям “тесно” в границах решетки линейного размера L . Поэтому рост $\mathcal{E}(T)$ замедляется, а теплоемкость, формально определенная по темпу роста, уменьшается. Это, конечно же, не означает уменьшение теплоемкости в реальности, но является решеточным артефактом. К счастью, область выше нескольких эВ нас и не интересует: на практике графен просто испарился бы при столь высоких температурах.

Намного более интересной задачей является определение конкретного значения теплоемкости в районе 1-2 эВ. Это значение можно было бы использовать для проверки классического (высокотемпературного) предела модели. Известно[70], что классический идеальный газ обладал бы средней удельной теплоемкостью 1 в расчете на одну молекулу в случае двух степеней свободы. Моделирование дает стабильный результат 0.8 в области 2 эВ. Причем получается совпадение результатов вычислений по (3.15) и (3.16). Отклонение результата от 1 выяснилось после применения методов **рафинированной** обработки статистики, о чем рассказано в Главе 2.3. Оказалось, что при использовании биннинга и устранения взаимных корреляций, больших в случае использования двух полей (см. ниже), результат определения теплоемкости “исправляется” до 1! Это определенно доказывает важность использования специальной пост-обработки временных рядов Монте-Карло и обосновывает необходимость включения соответствующего описания в текст данной диссертационной работы. Автору хотелось бы надеяться на более широкое освещение данного вопроса в учебных курсах, посвященных численным методам.

Если касаться вопроса вычислений при средних температурах (0.2-1.0 эВ), то наиболее ярким эффектом является отличие величины C , извлекаемой из дисперсии временного ряда энергии E_i , и теплоемкости, определенной согласно (3.16). Теоретический аргумент в пользу несовместимости двух способов уже был приведен. Это подтверждается практическим моделированием. Дисперсия собственно энергии \mathcal{E} при понижении температуры неограниченно устремля-

ется вверх, это сопровождается ростом погрешности определения C через

$$\frac{1}{T^2} \left(\sum_{i=1}^N E_i^2 - \mathcal{E}^2 \right).$$

Квантово-механическое же вычисление, учитывающее операторную природу

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{H}^2 e^{-\beta \hat{H}} \right),$$

ведет себя корректно и в пределах ошибок вычислений совпадает с температурным определением теплоемкости (3.15). Сама ее величина понижается до 0.5 в районе 0.5 эВ. Выражение для $\langle \hat{H}^2 \rangle$ получается весьма сложным как по операторной структуре (оно содержит вклады от произведения восьми, шести, четырех и двух операторов рождения-уничтожения), так и в терминах матричных элементов обратной фермионной матрицы. Технические трудности, связанные с вычислениями Монте-Карло будут описаны ниже, при сравнении 5 и 2 полей. Само выражение вынесено в Приложение А.

При температурах ниже 0.8 эВ поведение теплоемкости становится менее устойчивым, а сама ее величина резко начинает уменьшаться. Это же видно и в случае 5 полей. По полученным в начале работы данным оказывается возможным провести линейную аппроксимацию значений теплоемкости в этом диапазоне, откуда можно оценить значение энергии Ферми для материала. Это так, потому что теоретически для случая идеального ультрарелятивистского идеального двумерного газа получено [70]

$$c_v = \frac{2}{3} \pi^2 \frac{T}{\varepsilon_F},$$

откуда, если найден экспериментальный коэффициент прямой пропорциональности $\mathcal{E}(T)$, оценивают значение энергии Ферми ε_F . Наши вычисления дают ответ порядка 8.7 эВ, что по порядку величины **согласуется** с работой выхода электрона из графена с никелевым напылением (5 эВ). Учитывая погрешности метода и грубость оценки, автор расценивает данное согласование как хорошее свидетельство в пользу правильности рассуждений и проводимых вычислений.

3.5 Введение пяти полей

В Главе 3.2 подробно описано, как с математической точки зрения два узловых поля дополняются тремя линковыми и что изменяется с формальной точки зрения. Наши ожидания от расширения конфигурационного пространства сводятся к следующему:

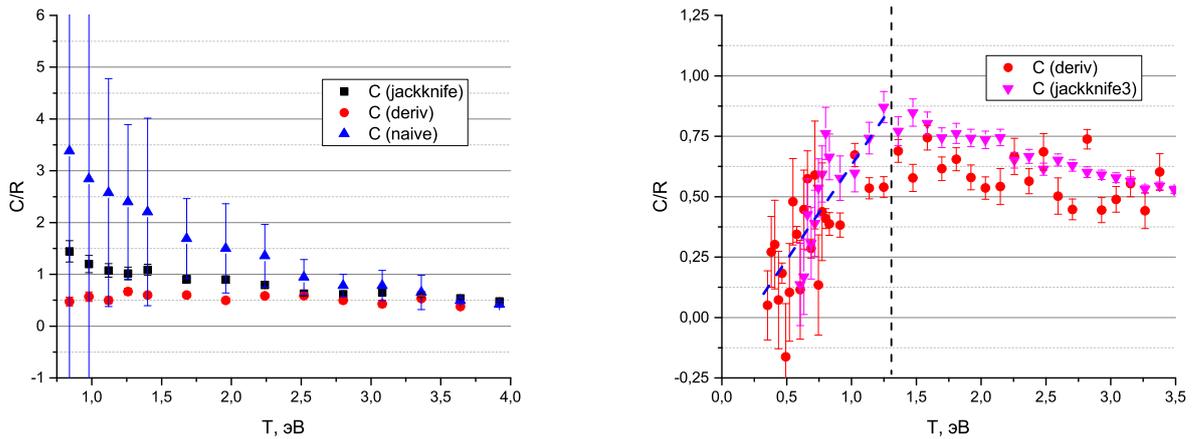


Рис. 3.7: Слева: поведение теплоемкости в области “средних” температур. Приведены три способа вычисления: по наклону кривой $\mathcal{E}(T)$, по дисперсии квантово-механической энергии (с обработкой по jackknife, см. Часть 2) и по “наивной” дисперсии, с использованием временного ряда значений энергии. График демонстрирует, что последний подход является ошибочным. Значение теплоемкости, равное 1, теоретически ожидаемо для высоких температур, что подтверждает правильность расчетов.

Справа: оценка поведения теплоемкости при переходе к низким температурам при помощи 2 полей. Хорошо видно уменьшение теплоемкости ниже 1.0 эВ. По наклону падения можно оценить по порядку величины энергию Ферми электронной подсистемы, которая по величине сходится с экспериментальной работой выхода.

- Кратно увеличивается число степеней свободы системы, что может облегчать методу Монте-Карло предлагать более разнообразные конфигурации и гибче обходить возможные особенности ландшафта. Это повысит долю принятия (acceptance) и сгладит вероятные резкие изменения значений вспомогательных полей.
- Флуктуации распределяются по большему количеству переменных. Это повышает стабильность работы стохастического алгоритма, одновременно уменьшая скоррелированность порождаемых методом молекулярной динамики конфигураций.
- Функции распределения наблюдаемых имеют вид комбинаций матричных элементов обратной фермионной матрицы. Поскольку существуют конфигурации, для которых $\det M = 0$, то такие элементы расходятся в окрестности областей нулевого определителя. Это вносит под эффективный интеграл по вспомогательным полям Хаббарда сингулярности, “сила” которых определяется количеством перемножаемых операторов рождения-уничтожения в исходном виде наблюдаемой. Увеличе-

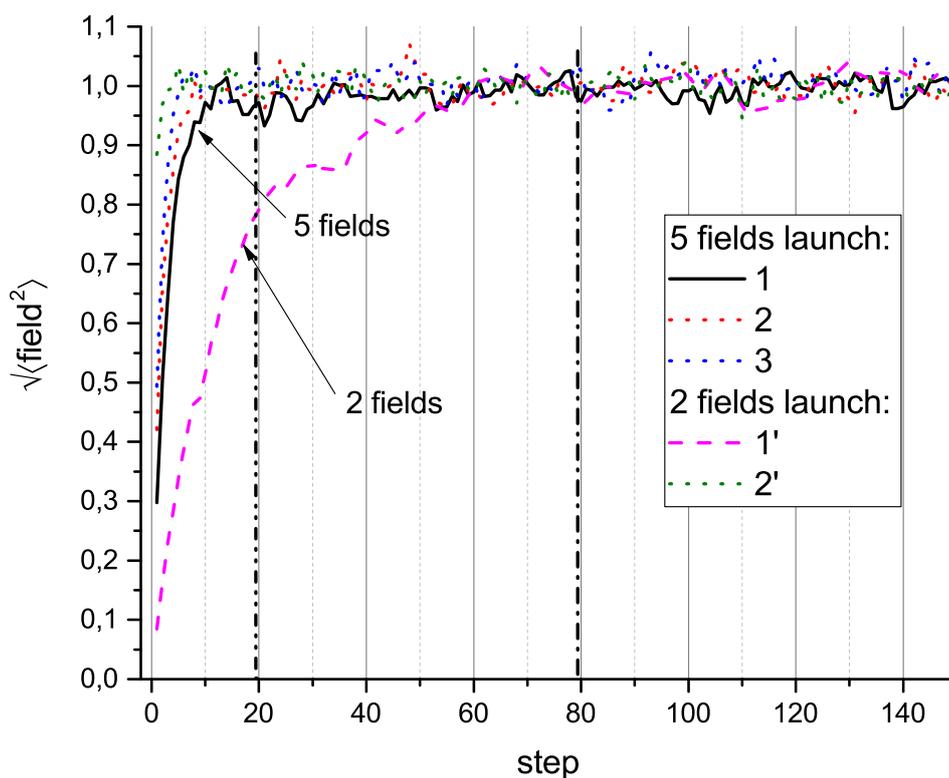


Рис. 3.8: Изменение полей Хаббарда во время первых шагов работы программы. Следует обратить внимание на различие необходимого количества итераций алгоритмов для достижения “типичных” конфигураций в случае 2 и 5 полей. Вертикальные линии показывают отличие в 4 раза. Подобное отношение темпов создания новых конфигураций имеет место и в дальнейшем марковском процессе.

ние размерности конфигурационного пространства позволяет сократить часть расходимостей, улучшая тем самым свойства статического распределения. Наблюдаемые высокого порядка сложности, такие как квадрат гамильтониана (содержит произведения до 8 операторов рождения-уничтожения в каждом из своих слагаемых), определяются с лучшей точностью.

Первые два пункта позволяют бороться с застреванием алгоритма Монте-Карло в метастабильных состояниях.

Формулы для кодирования уже были приведены выше. Здесь же покажем, что использование пяти полей действительно улучшает выходные временные ряды, порождаемые запусками моделирования методом Монте-Карло. Рассмотрим Рис. 3.8, показывающий эволюцию среднеквадратичных полей в течение процесса достижения “типичных” для данных значений параметров областей конфигурационного пространства. Легко видеть, что при использова-

нии 5 полей значительно меньшее число шагов алгоритма потребовалось для завершения подхода к нужной области, где как поля, так и величина действия перестают значительно изменяться. Этот вывод, кроме визуального наблюдения подтверждается анализом подвижных средних и автокорреляционных времен, которые, разумеется, падают, когда заканчивается направленное движение по конфигурационному пространству в сторону повышающихся значений действия.

Сокращение количества шагов важно как на стадии термализации, так и на стадии снятия данных, когда по мере порождения новых конфигураций производится вычисление наблюдаемых. В самом деле, меньшее количество шагов связано с лучшей изменчивостью значений полей и большей их независимостью. Это же будет подтверждено ниже.

Что касается скорости счета, то необходимость обработки дополнительных векторных столбцов увеличивает время исполнения программ не более, чем на 4.4%, зато само количество шагов уменьшается более, чем в 20 раз. Выгода с точки зрения времени очевидна. Бутылочным горлышком алгоритма является функция решения СЛАУ, но метод точных фермионных сил содержит возможности оптимизации, что позволяет ускорить алгоритм. Автору удалось уменьшить время исполнения дополнительно в 30(!) раз.

Итак, вывод первый: **термализационная длина уменьшается в несколько (3-4) раз при использовании 5 полей по сравнению с 2-полевым подходом.**

Наше второе ожидание относительно распределения флуктуаций между линковыми переменными может быть оценено следующим образом. По итогам нескольких запусков процесса Монте-Карло собирают распределение некоторой величины. Если это выполнить для (3.14), то результаты для 5 полей уверенно показывают более гладкое по краям распределение с бóльшим числом попаданий вокруг наиболее вероятного значения. При этом основание распределения оказывается шире, что можно интерпретировать как лучший обзор возможных значений наблюдаемой. Таким образом, **распределения наблюдаемых**, действительно, зависят от количества использованных полей.

Имеются технические особенности применения 5 полей в отношении выбора шага молекулярной динамики. Приведем пример. Для поддержания доли принятия (acceptance) в районе 95-98% в диапазоне $0.06 < T/\kappa < 0.1$ требуется $\Delta\tau = 0.009$ в обоих формализмах, тогда как для $T = 0.3\kappa$ следует выбрать 0.008, а для $T = 0.6\kappa - 0.005$ в случае 5 полей. В практическом аспекте это не создало никаких неудобств, поскольку однажды подобранное значение (а это делается за 1,5 минуты) для данной температуры остается неизменным. Поэтому достаточно создать таблицу соответствия температура-шаг молекулярной динамики, чтобы новые запуски не требовали подбора $\Delta\tau$.

Существенным аргументом в пользу 5-полевого подхода является **заметное уменьшение автокорреляционных времен** в области низких температур. Соответствующие значения показаны в таблице.

T/κ	2 поля	5 полей
0.1	5.6	0.8
0.15	5.2	1.2
0.2	4.6	1.0
0.25	4.0	0.9
0.3	3.6	0.8
0.4	2.1	1.0
0.5	1.8	1.1
0.6	1.5	1.2
0.7	1.7	1.0
0.8	1.6	1.1

Таблица 3.1: Времена автокорреляции (см. Часть 2) в зависимости от температуры в случаях 2 и 5 полей. При низких температурах удастся получить значительно бóльшую независимость последовательных значений наблюдаемых.

Это важно по двум причинам: во-первых, Монте-Карло генерирует существенно более независимые конфигурации с менее скоррелированными значениями наблюдаемых, рассчитанных по ним. Так, при использовании 5 полей для $\langle q^2 \rangle$ автокорреляции уменьшаются в 2.1-2.8 раз. Во-вторых, улучшение особенно заметно в физически интересной области низких температур, где решение проблем вычислений Монте-Карло и получения значений физических величин актуальны. Более того, приведенная таблица позволяет ожидать еще большего преимущества при исследовании более низких температур. Использование 2 полей потребовало бы значительной большей статистики для сохранения качества определения средних.

Известно, что автокорреляционное время может быть уменьшено путем увеличения шага молекулярной динамики, однако, это делается в ущерб высокой доли принятия (acceptance). Альтернативой является опущение вычисления в нескольких промежуточных сгенерированных конфигурациях. Очевидно, оба способа не способствуют эффективности работы программ, поэтому, согласно представленным доводам, метод 2 полей проигрывает предлагаемому, с пятью полями.

Распределения наблюдаемых

Проанализируем эффект, который оказывает введение пяти полей на ряды значений наблюдаемых, получаемых в процессе моделирования Монте-Карло. Для этой цели удобно построить гистограмму распределения значений некоторой наблюдаемой в течение одного запуска. Рассмотрим средний квадрат спина на подрешетке (3.14). Рис. 3.9 показывает, что распределение имеет экспоненциальную (гауссову) форму лишь с одной стороны значений $\langle q^2 \rangle$. Поведение гистограммы с противоположной стороны характеризуется “тяжелым хвостом” (heavy-tailed), что означает смещение центра тяжести распределения

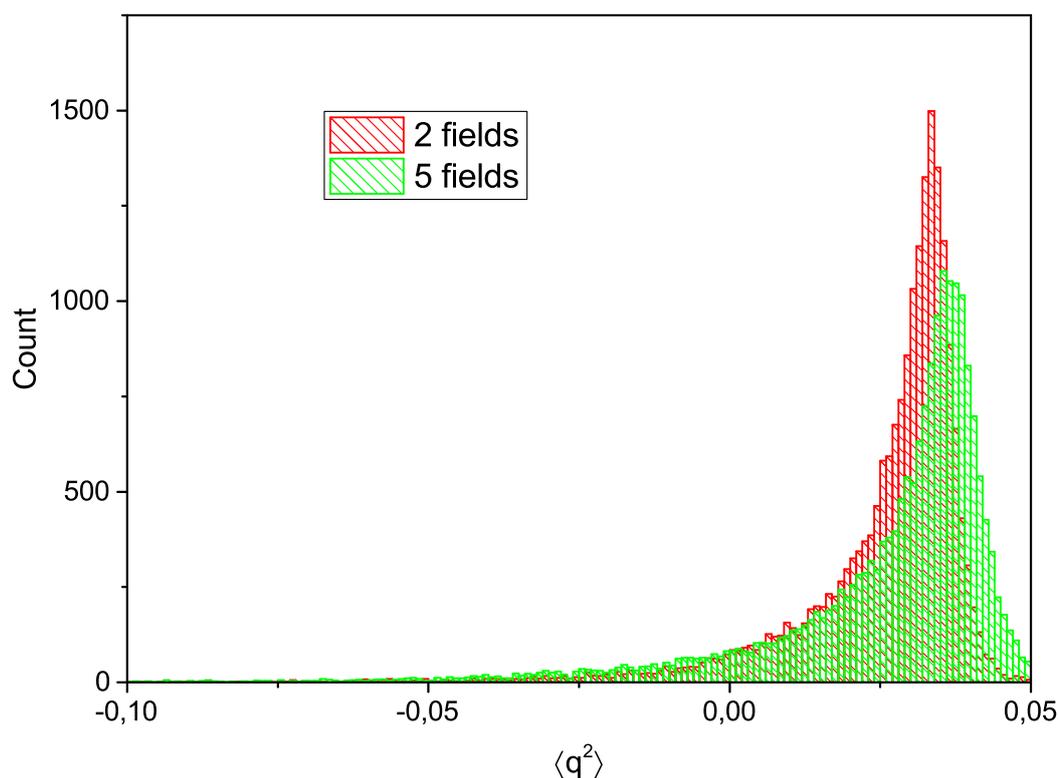


Рис. 3.9: Сравнение распределения значений наблюдаемой (3.14) в случае двух и пяти полей Хаббарда. Описание см. в основном тексте.

в сторону большого числа реализаций случайной величины в данной области благодаря падению, более медленному, чем экспоненциальное. Можно видеть, что “тяжелый хвост” присутствует в случае проведения вычислений обеими методиками, но характер кривой различен в этих случаях. Так, 5-полевой запуск позволяет получить бóльшую сосредоточенность значений наблюдаемой вокруг наиболее вероятного значения, а склоны гистограммы выглядят более плавными в их падении по обеим сторонам от центра распределения.

Более конкретный количественный анализ для возможности сравнения качества получаемых распределений предполагает работу с вероятностями, заключенными в некоторых диапазонах значений наблюдаемых. Если считать, что распределение $\langle q^2 \rangle$ абсолютно непрерывно, то площадь под графиком соответствующей кривой в некоторых границах по абсциссе имеет смысл вероятности получения значений случайной величины в определенном диапазоне. Это соображение позволяет предложить следующий метод сравнения качества получаемых методом Монте-Карло распределений в случае двух и пяти полей: предлагается сравнить вклады в общее распределение от наличия хвостов с неэкспоненциальным падением по сравнению с ситуацией, если с обеих сторон кривая соответствовала бы гауссову распределению. Результаты такого рассмотрения для конкретных данных приведены ниже.

Характеристики энергетических наблюдаемых

Как уже упоминалось, одним из последствий добавления новых, линковых полей ожидается улучшение распределений определяемых методом Монте-Карло величин благодаря уменьшению степени расходимости (“силы” сингулярностей) в распределении наблюдаемых. Сингулярности берут происхождение из элементов обратной фермионной матрицы, а дополнительные степени свободы полей способствуют их сокращению, т.к. дают свой вклад в числитель. Проверим, насколько ожидания реализуются в практических расчетах. Наша цель — показать, что 5 полей позволяют получить лучшие по качеству распределения наблюдаемых, содержащих большое количество операторов рождения-уничтожения.

Для этой цели исследуем составляющие гамильтониана (3.3)

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_1 + \hat{U}_2.$$

Кинетическое слагаемое содержит произведение двух операторов, потенциальные (on-site и взаимодействие соседей) — четырех. Мы не ожидаем особых проблем от первого слагаемого, что сейчас и будет продемонстрировано.

Важное замечание: вся совокупность полученных данных для удельных в расчете на один узел решетки энергетических наблюдаемых демонстрирует очень слабый эффект конечного объема, поэтому большинство графиков ниже приведены для решетки $L = 6$. Ряд результатов был проверен на решетке $L = 12$, они согласуются с полученными для $L = 6$, что подтверждает возможность экономить время и машинные ресурсы при использовании энергетических наблюдаемых. Для параметров порядка же данное замечание не имеет места — объемный эффект должен быть исследован, впрочем, как показывает практика вычислений (самого автора и авторов других опубликованных работ), экстраполяция к $L \rightarrow \infty$ может выполняться линейно по обратному линейному размеру решетки.

Представленные ниже данные получены из запусков длиной 20000 значений.

Итак, рассматривая поведение величины

$$\langle \hat{T} \rangle = -\kappa \sum_{x \neq y} \langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_y \rangle$$

(см. Рис. 3.10), убеждаемся, что все работает хорошо при использовании как 2, так и 5 полей. Впрочем, можно сказать, что область наиболее вероятных значений $\langle \hat{T} \rangle$ выглядит более гладкой для 5 полей. Однако для потенциальной энергии

$$\langle \hat{U} \rangle = \langle \hat{U}_1 + \hat{U}_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{x,y} \langle \left(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x - \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x \right) V_{xy} \left(\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y - \hat{b}_y^\dagger \hat{b}_y \right) \rangle$$

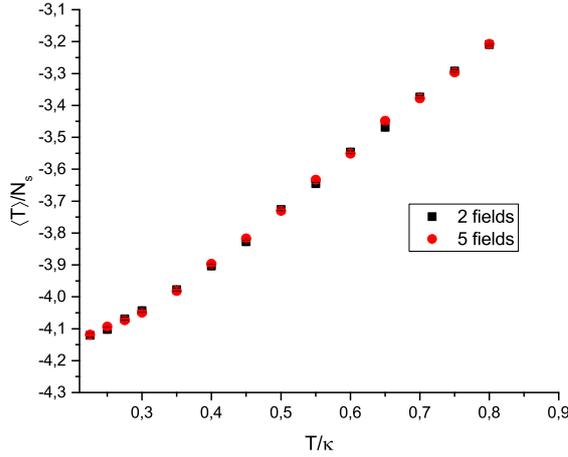


Рис. 3.10: Сравнение вычислений удельной кинетической энергии для 2 и 5 полей. Произведение двух операторов проявляет лишь слабую сингулярность, которая успешно сокращается методом 2 полей. Поэтому разницы в качестве результатов нет.

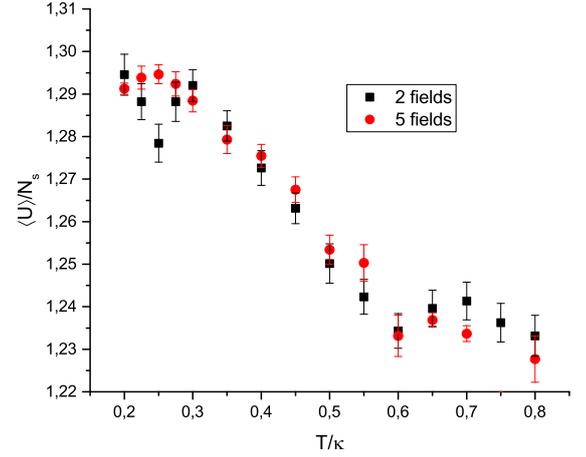


Рис. 3.11: Для потенциальной энергии различие расчетов методами 2 и 5 полей существует. Поведение точек во втором случае более регулярное, метастабильные состояния при низких температурах проявляют себя меньше.

различие уже проявляется. Из Рис. 3.11 можно увидеть, что красная кривая (соответствует случаю 5 полей) ведет себя более регулярно, флуктуации меньше, нет метастабильного состояния при $T = 0.25k$, что произошло для 2 полей. С другой стороны, можно сказать, что в обоих случаях данные имеют зашумленный характер. Это связано со сложной структурой ландшафта конфигурационного пространства модели Хаббарда в фазе полуметалла. Электроны формируют локальные группы, перестраиваются, могут менять позиции между подрешетками. Фаза SDW (существует при $V_{00} \gtrsim 3.5k$ [16]) является более устойчивой.

Рис. 3.12 представляет различие в статистических распределениях величин $\langle \hat{T} \rangle$ и $\langle \hat{U} \rangle$ для запуска, генерирующего 20000 значений наблюдаемых в процессе обхода конфигурационного пространства. Можно видеть, что конфигурации с повышенным значением энергии взаимодействия экспоненциально подавлены, но количество реализаций ситуаций с меньшими значениями $\langle \hat{U} \rangle$ значительно. Это создает “тяжелый хвост” с соответствующей стороны гистограммы. В то же время результат для $\langle \hat{T} \rangle$ совершенно не проявляет такого поведения, являясь абсолютно гауссовым. С практической точки зрения наличие “тяжелого хвоста” может создавать проблемы при расчете таких характеристик, как дисперсия, которые опираются на высшие моменты распределения. Обсуждение теоретических heavy-tailed-распределений и метода обработки результатов выборки из них содержится в [73]. Таким образом, уменьшение вклада от неэкспоненциально спадающей части распределения практически важно.

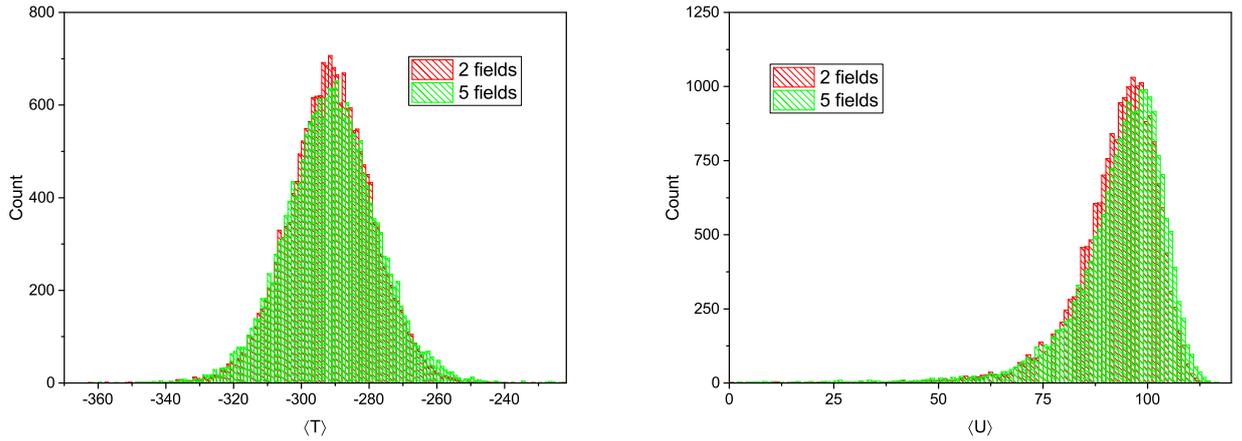


Рис. 3.12: Сравнение гистограмм значений, полученных при запусках Монте-Карло для кинетической и потенциальной энергий для 6×6 . Если $\langle \hat{T} \rangle$ обладает ярко выраженной гауссовой формой, то $\langle \hat{U} \rangle$ содержит экспоненциальный хвост только справа, однако проявляет “тяжелый хвост” слева. Последнее может создавать трудности со статистической обработкой рядов данных в силу отсутствия высших моментов (даже второго), поэтому следует уменьшить степень негауссовости хвоста. 5 полей позволяют это осуществить.

Посмотрим, что дает методика 5 полей в этом отношении.

Сравнение двух хвостов (гауссова и неэкспоненциального) предлагается производить следующим образом. На Рис. 3.12 правая часть распределения значений $\langle \hat{U} \rangle$ используются для получения параметров гауссовой кривой. Качество фитинга составляет до 0.997, что подтверждает применимость этой аппроксимации. Достроим гауссово распределение до полного, идеально симметричного с центром в точке максимума реального (эмпирического) распределения. Ширина гауссовой кривой получена из фитинга правой стороны гистограммы. Для приводимого примера относительная ошибка определения ширины составляет только 3%, что замечательно для метода Монте-Карло (где типичная погрешность может достигать 10%). Далее, численно рассчитаем площадь A , ограниченную неэкспоненциальной частью распределения (в нашем примере это левый хвост), и вычислим разность между A и соответствующей площадью гауссова распределения. Последнее может быть легко найдено аналитически из параметров, определенных выше. Наконец, разделим полученное превышение “тяжелого хвоста” над гауссовым на A для оценки относительного вклада неэкспоненциального характера распределения. Все перечисленное изображено на Рис. 3.13). Для наблюдаемой $\langle \hat{U} \rangle$ рассчитанная величина составляет 39.48% для двух полей и 33.68% — для пяти. Таким образом доказывается тенденция к улучшению скорости спадания хвоста распределения.

Повторяя вычисления для наблюдаемых из списка — $\langle S_z^2 \rangle$, $\langle q^2 \rangle$, $\langle \hat{T} \rangle$, $\langle \hat{U} \rangle$, $\langle \hat{U}_1 \rangle$, $\langle \hat{U}_2 \rangle$, $\langle \hat{H} \rangle$, $\langle \hat{H}^2 \rangle$ — вклад в распределение от негауссовой части над (симметрич-

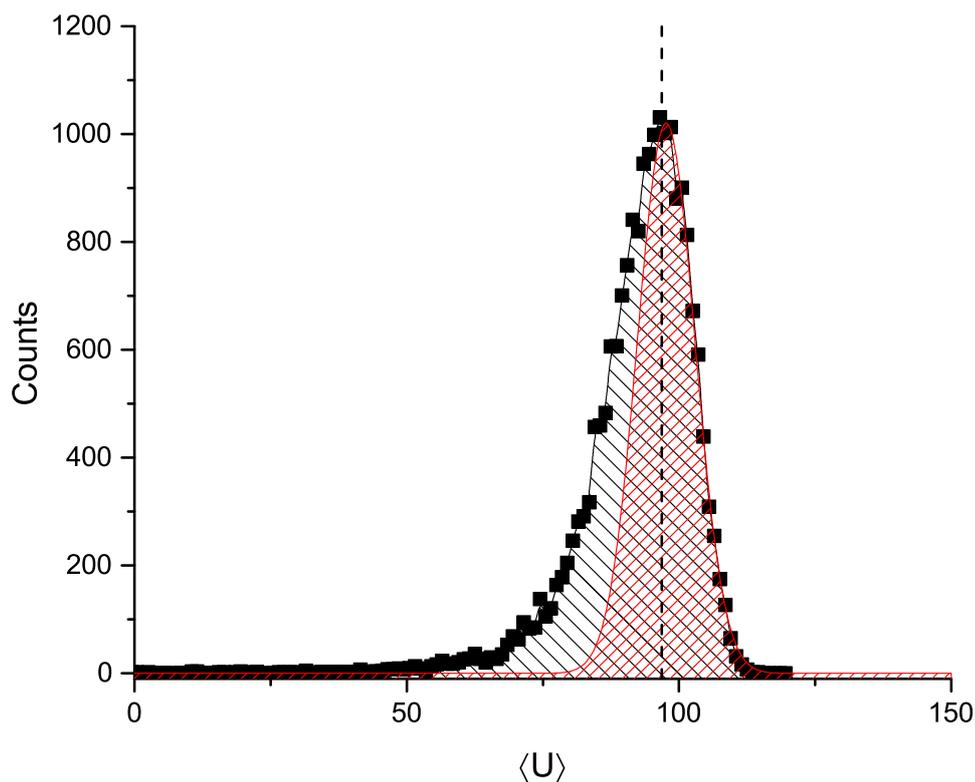


Рис. 3.13: Визуализация метода, предлагаемого для сравнения вклада от “тяжелого хвоста” распределения. Красная кривая и сеточная штриховка отображает фитинг на гауссово распределение правой части распределения по собранным данным (черные точки). Одинарная штриховка заполняет площадь под кривой эмпирического распределения. Области слева от центральной линии используются для нахождения доли негауссова вклада в общее распределение, что описано в основном тексте. Два поля, решетка 6×6 .

ным) зеркальным продолжением гауссового хвоста эмпирического распределения уменьшается в каждом случае использования 5 полей по сравнению с 2-полевым подходом. Наиболее ярким примером может служить $\langle q^2 \rangle$ (что и было анонсировано с самого начала, см. стр. 89): 40.7% для 2 полей и 26.6% для 5. Примеры приведены на Рис. 3.9, Рис. 3.14 и Рис. 3.15. Наиболее сложные комбинации операторов рождения-уничтожения (вплоть до 8 сомножителей в одном слагаемом) из числа рассматриваемых в работе (это соответствует наблюдаемой $\langle \hat{U}\hat{U} \rangle$) также улучшают распределение. Изменение для $\langle \hat{U}\hat{U} \rangle$ составляет от 39.19% в случае 2 полей до 36.46% для 5 полей.

При вычислении полного результата в виде $\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{U} \rangle$ можно наблюдать улучшение поведения полной энергии системы в случае 5 полей. Регулярное поведение кинетической части дополняется флуктуирующей потенциальной частью, качество получаемых значений для которой зависит от количества

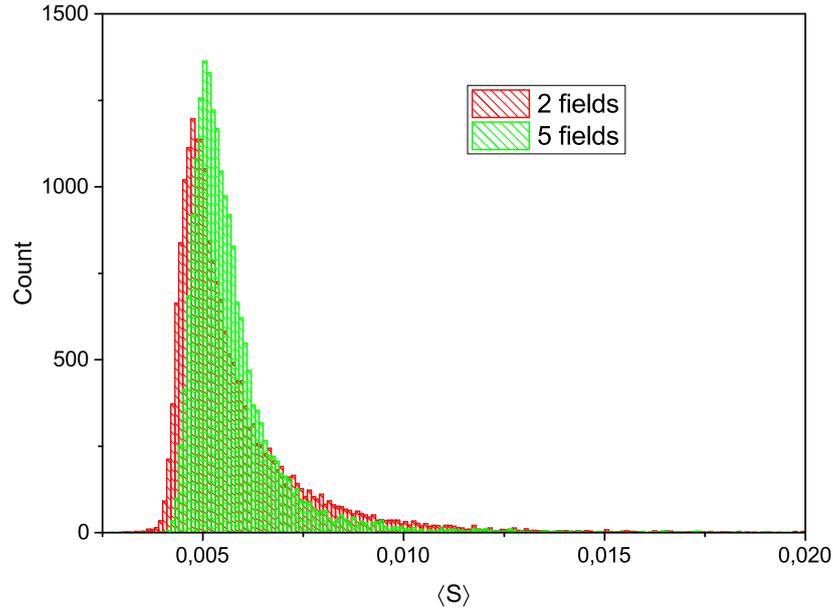


Рис. 3.14: Распределения для $\langle S_z^2 \rangle$.

используемых полей. Это хорошо видно из Рис. 3.11. На самом деле, гладкость и регулярность исходных получаемых в результате вычисления данных *может повлиять* на физические результаты, например, на значения удельной теплоемкости. Как известно, существует два способа определения этой величины: через температурную производную $\partial \mathcal{E} / \partial T$, $\mathcal{E} = \langle \hat{H} \rangle$ (см. (3.15)) и согласно дисперсионно-флуктуационной теореме (3.16). Первый способ может быть осуществлен при помощи фиттирования функции $\mathcal{E}(T)$ с целью последующего аналитического вычисления производной. Не вызывает удивления, что качество фитинга будет зависеть от флуктуаций и характера поведения отдельных точек, которые вычисляются независимо при разных температурах, если только функциональный вид кривой не известен предварительно из каких-либо

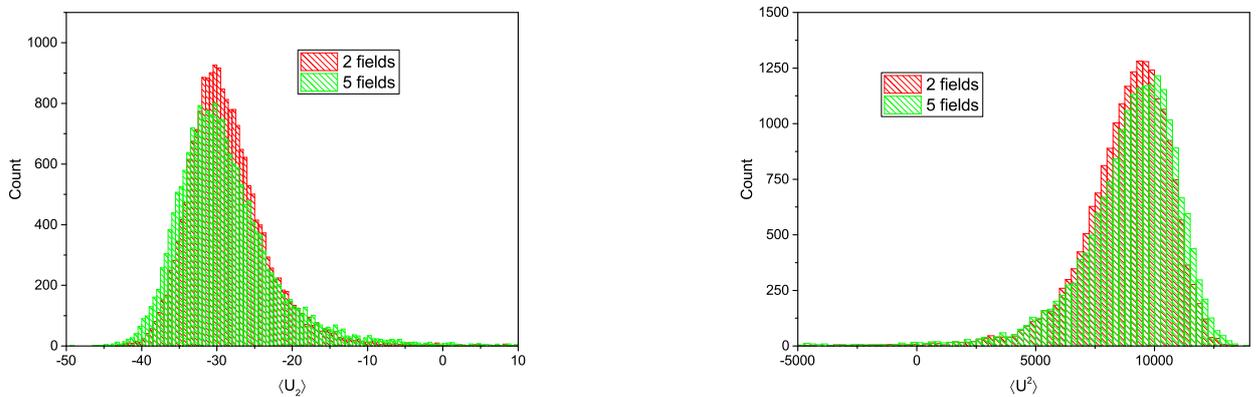


Рис. 3.15: Распределения для $\langle U_2 \rangle$ и $\langle \hat{U} \hat{U} \rangle$.

априорных аргументов. В нашем исследовании зависимость средней энергии от температуры выбирается *апостериорно*, исходя из самих полученных данных моделирования. Отсюда ясно, что к регулярному поведению точек предъявляются повышенные требования.

Однако даже если это необязательно, использование второго способа, основанного на дисперсии, требует вычисления разности двух больших чисел. Любое появление флуктуаций (что неизбежно при применении самого метода Монте-Карло) приводит к росту погрешности вычислений. При превышении некоторого порогового значения отклонений определение теплоемкости становится невозможным (погрешности затмевают сами величины). В этом контексте 5-полевой подход позволяет стабилизировать значения, получаемые при моделировании, что улучшает результаты дальнейшей обработки данных. Регулярность получаемых средних для $\langle \hat{H}^2 \rangle$ можно визуальнo оценить по Рис. 3.16.

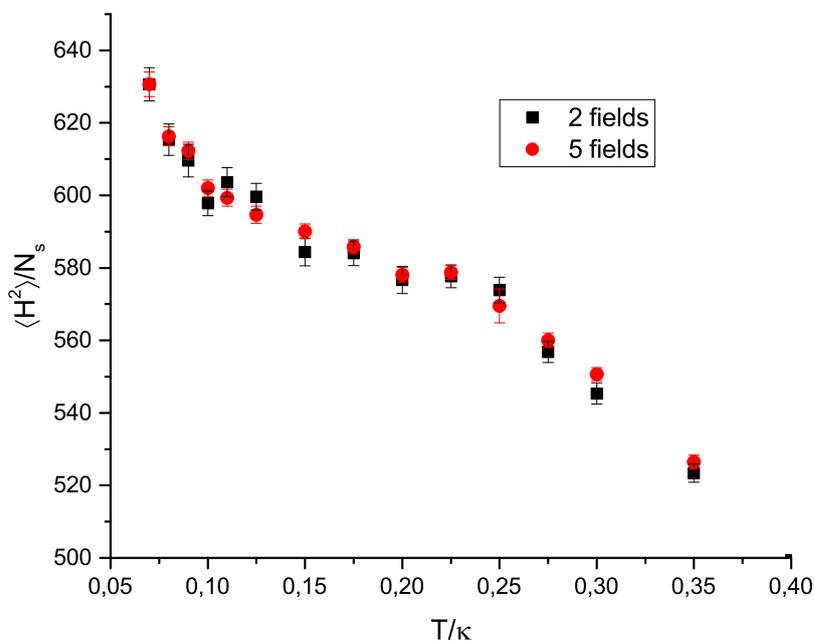


Рис. 3.16: $\langle \hat{H}^2 \rangle$ (в расчете на узел) для решетки 6×6 в случаях 2 и 5 полей. Можно видеть, что кривая, соединяющая точки, выглядит более плавной во втором случае. Это улучшает качество результатов, получаемых с использованием значений наблюдаемой.

В качестве примера продуктивности подхода пяти полей укажем на следующее. В процессе работы автору удалось вычислить полный ход кинетической и потенциальной энергий в зависимости от температуры в диапазоне параметров от 0.056 эВ до 11 эВ. Это дает возможность при помощи фитирования выяснить вид зависимости $\mathcal{E}(T)$ с целью последующего определения теплоемкости по формуле через производную. Путем использования трех дополни-

тельных линковых полей в связке с точными фермионными силами удается получить даже такие тонкие детали поведения, как наличие дискретных уровней энергии (по причине решеточной аппроксимации) при $T < 0.032\kappa$. Также были выявлены указания на фазовые переходы при $T = 0.06\kappa$ и 0.25κ . При всех расчетах контролировались значения $\delta = \beta/N_T$. Это важно, чтобы численная схема не расходилась. По мере продвижения в область низких температур значения β увеличиваются достаточно сильно (поскольку обратно пропорциональны температурам), следовательно, требуется все большее число шагов по времени в решеточной аппроксимации статсуммы для достижения аккуратной декомпозиции Сузуки-Троттера.

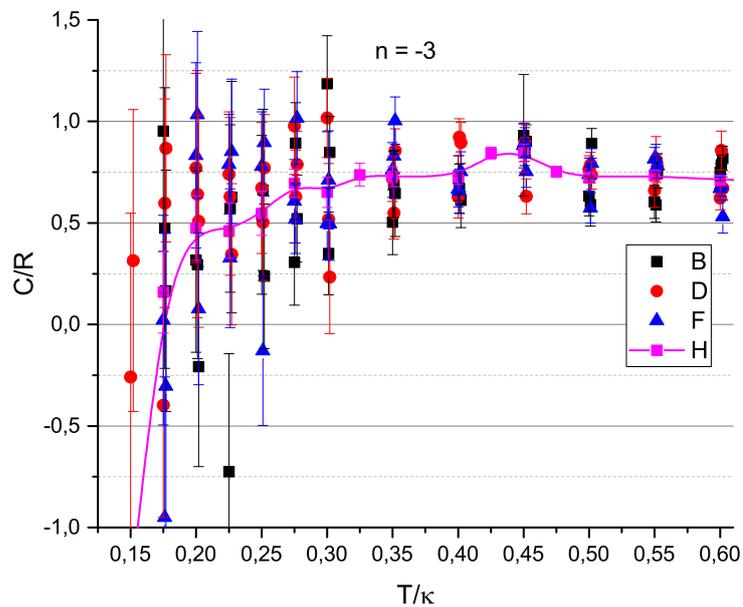


Рис. 3.17: Результаты определения теплоемкости (3.16) для моделирования при помощи пяти полей. Точки B, D, F получены в результате вычислений. Кривая H проведена через точки, каждая из которых получена путем обработки результатов нескольких запусков при фиксированной температуре. Видно, что область низких температур страдает от существенного количества метастабильных состояний. Введение пяти полей позволяет отодвинуть левую границу области, доступной для вычислений теплоемкости.

В работе автора [20] приведены результаты вычисления средней энергии и теплоемкости электронной подсистемы графена (при $V_{00} = 3.5\kappa$, $V_{01} = 0.8\kappa$, $V_{02} = 0.18\kappa$) для диапазона от 0.49 до 1.68 эВ при помощи метода пяти полей. Теплоемкость определялась как (3.16). Вычисления указывают на существование значительных барьеров в ландшафте конфигурационного пространства, которые мешают работе алгоритма Монте-Карло при низких и средних температурах (менее 0.98 эВ), что легко видеть из Рис. 3.17, где точки в левой части графика значительно прыгают. Эта проблема решалась подбором

параметра n в (3.8), что влияет на амплитуду полей Хаббарда. Было продемонстрировано, что $n = -3$ и $n = -4$ позволяют проводить расчеты при более низких температурах, чем стандартное значение $n = -1$, предлагаемое в уже опубликованных работах [66]. С другой стороны, в области температур от 0.56 до 0.77 эВ поведение теплоемкости с температурой согласуется с линейным, а экстраполяция к абсолютному нулю температур приводит к нулевому значению C . Отсюда можно предполагать, что компьютерное моделирование дает корректный физический результат с точностью до членов первого порядка по температуре. Было замечено, что значения, получаемые в разных запусках при одних и тех же параметрах, ведут себя более стабильно и обладают меньшей дисперсией при использовании пяти полей, чем в случае двух полей.

3.6 Нарушение подрешеточной симметрии

Еще одним направлением исследований, проведенных автором, является изучение последствия искусственного создания неэквивалентности с точки зрения электронной подсистемы узлов на двух подрешетках. Идея появилась благодаря экспериментальному факту, что использование подложек специального вида позволяет открыть щель в энергетическом спектре электронных возбуждений. Используемые материалы геометрически схожи с решеткой графена, но содержат чередующиеся атомы разных типов, что создает неравнозначные условия для атомов двух подрешеток графена. Примерами таких материалов служат карбид кремния и нитрид бора. В перспективе подобная комбинация материалов может быть использована в полупроводниковых схемах для реализации гейтов и электронных устройств с регулируемой проводимостью.

В работе [71], выполненной автором, предлагается моделировать различие двух подрешеток путем задания разных значений on-site-взаимодействия V_{00} . Физически это означает, что требуется разная величина работы для помещения электронов на узел каждой из подрешеток, что создает преимущество той из них, где работа по размещению электрона меньше. Математически указанное осуществляется путем задания

$$V_{00} = U \pm \Delta$$

для разных подрешеток.

Таким образом, образуется энергетическая разница для электронов на узлах разных подрешеток, что модифицирует on-site-составляющую потенциальной энергии:

$$V_{00} = \frac{U - \Delta}{2} \sum_{x \in A} \hat{q}_x^2 + \frac{U + \Delta}{2} \sum_{x \in B} \hat{q}_x^2.$$

Автор желает подчеркнуть, что благодаря 5-полевой параметризации матрица взаимодействия двух электронов становится диагональной, что облегчает

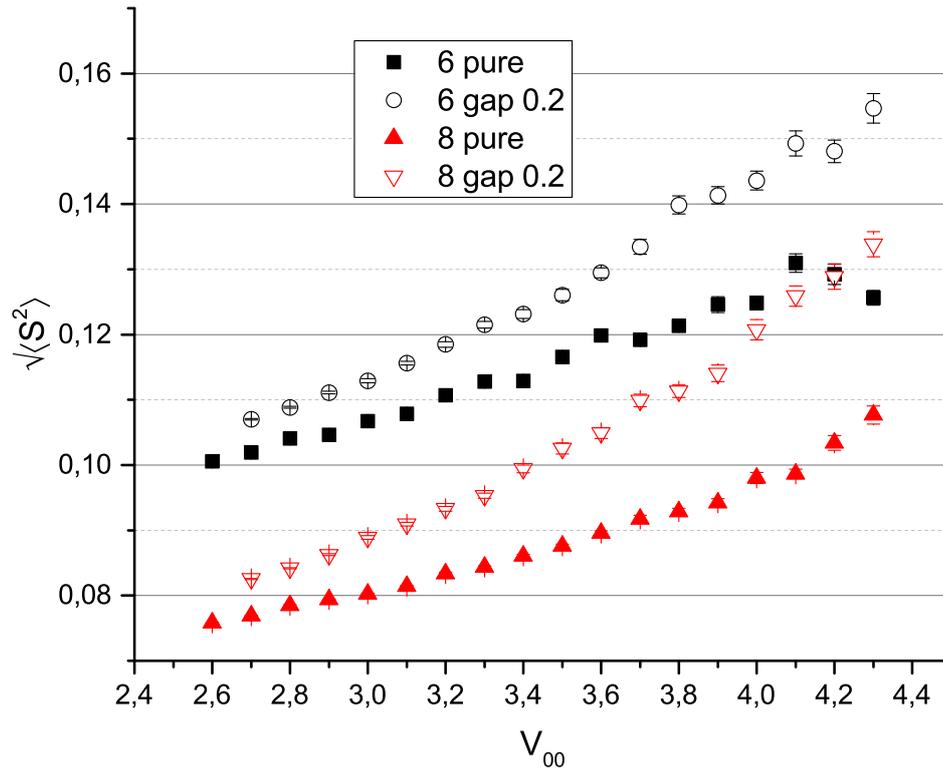


Рис. 3.18: Параметр порядка SDW при различных значениях U и двух режимах нарушения подрешеточной симметрии: $\Delta = 0$ (чистый графен, pure) и $\Delta = 0.2$. При больших значениях V_{00} наблюдается различие двух состояний. Объемный эффект также должен быть оценен, поскольку вычисления для $L = 6$ и $L = 8$ дают различие.

процедуру разделения единого (в стандартном формализме) значения V_{00} для двух подрешеток. Это облегчает кодирование, следовательно, уменьшает возможность внесения технических ошибок.

Рассмотрим, к чему приводит нарушение подрешеточной симметрии. Все значения параметров V_{00}, V_{01} приведены ниже в единицах хоппинга κ .

На Рис. 3.18 представлен результат расчета квадратного корня из параметра порядка (3.13) для решеток двух размеров ($L = 6$ и $L = 8$) в ситуациях, когда нарушения подрешеточной симметрии нет ($\Delta = 0$), либо составляет $\Delta = 0.2$ в каждую сторону от центрального значения U , изменяемого от 2.6 до 4.3. Полученные данные демонстрируют существенный эффект конечного объема, однако он легко преодолевается при экстраполяции по обратному линейному размеру решетки к 0. Результат считается оценкой значения величины при работе с бесконечным листом графена.

Приведенные графики создают впечатление, будто разделение спинов на подрешетках имеет место при всех значениях V_{00} , но в пределе бесконечного объема это не так. Этот результат ожидаем, поскольку вычисления при конеч-

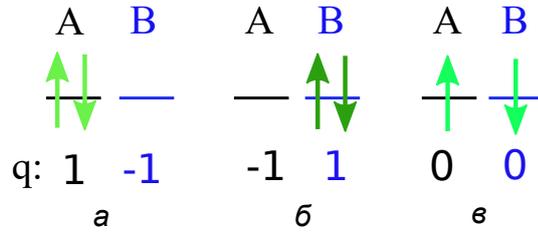


Рис. 3.19: К объяснению миграции спинов при увеличении параметра on-site-взаимодействия. При нахождении двух частиц на одном узле (а) вклад в V_{00} сильно повышает энергию системы и становится невыгодным. Спины либо переходят в состояния по-одиночке (в) с образованием SDW, либо, если нарушенная подрешеточная симметрия делает подрешетку В более выгодной, пара переходит на соседние узлы (б).

ном объеме всегда проявляют наличие остаточных конденсатов SDW и CDW, однако последний вообще не может существовать в области параметров модели, доступной методу Монте-Карло со вспомогательными полями ($V_{01} < V_{00}/3$). Но не происходит и обратного: разделение не пропадает при любом значении интенсивности on-site-взаимодействия.

SDW при больших значениях V_{00} образуется, потому что вклад в потенциальную энергию положительного U_1 становится настолько существенным, что делает невыгодным состояния с $\langle \hat{q}_x^2 \rangle > 0$. Таких вариантов два (Рис. 3.19): пустой узел ($q = -1$) и два электрона с противоположными значениями спинов на одном узле ($q = +1$). Электроны пытаются в среднем отдаляться друг от друга с целью равномерно расположиться по узлам, что дает в среднем значение 0 для заряда в каждом узле. Далее: если бы в соседних узлах находились электроны с одинаковым направлением спина (что удовлетворяет $\langle \hat{q}_x^2 \rangle = 0$, т.е. препятствует росту потенциальной энергии), то переходы таких электронов оказываются запрещены принципом Паули. Поэтому вероятность такого состояния подавлена, и в соседних узлах оказываются разно-ориентированные электроны. В результате реализуется шахматный порядок расположения спинов (ведь в каждой паре спины должны быть антипараллельны), т.е. на каждой подрешетке электроны ориентируются совместно. Поскольку параметр порядка (3.13) учитывает сумму проекций спинов на всей подрешетке, он приобретает ненулевое значение.

Теперь представим себе, что параметр V_{00} отличается на двух подрешетках. Это приводит к тому, что “вытеснение” пар электронов с одной из них работает интенсивнее, чем с другой. Получается некоторый направленный переход (отток) электронов. Но пары противоположно-ориентированных электронов не обязаны распадаться, убегая на другую подрешетку. Так, если на подрешетке А двум электронам находиться невыгодно, но такого ограничения на подрешетку В нет, то (см. Рис. 3.19б) они могут совместно перейти на последнюю. Поэтому на одной подрешетке может установиться конденсат, тогда как на другой по-прежнему будут сохраняться разные состояния: одиночных и пар-

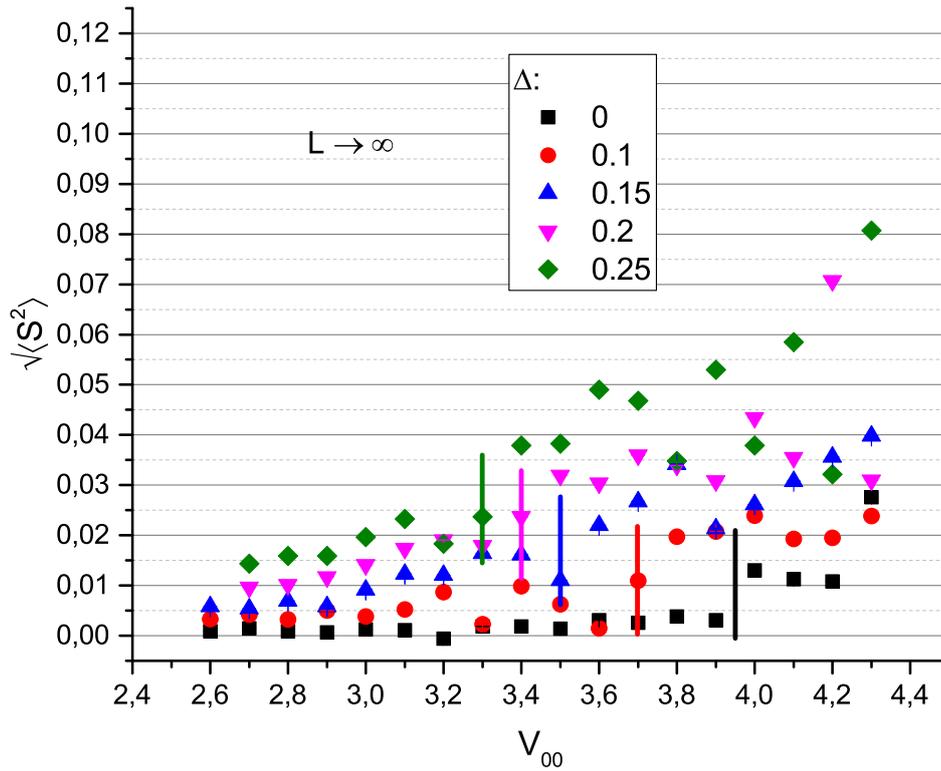


Рис. 3.20: Поведение параметра порядка SDW в пределе бесконечного объема. Для каждого нарушения Δ существует некоторое пороговое значение интенсивности on-site-взаимодействия, при котором начинается фазовый переход. Важно, что с увеличением Δ граница фазового перехода полуметалл-диэлектрик смещается влево.

ных электронов. В ситуации же, когда невыгодным становится пребывание пар электронов на всех узлах, распадаются все пары электронов, и SDW устанавливается на всей решетке. Спины начинают чередоваться в шахматном порядке (см. Рис. 3.19б).

Доказательство существования такой промежуточной области по U следует искать на Рис. 3.18 между значениями 3.6 и 4.0 горизонтальной оси для случая нарушения подрешеточной симметрии. Параметр порядка $\langle \hat{S}_z^2 \rangle$ временно меняет поведение, перестает расти так же быстро, как это было левее и будет правее по параметру V_{00} . Такое поведение свидетельствует о *перестройке* спиновых состояний. Наиболее ярко это проявится в отношении энергетических наблюдаемых, о чем речь идет чуть ниже.

Экстраполяция к пределу бесконечного объема для данных, полученных на решетках $L = 6, 8, 10$, показана на Рис. 3.20. Каждая из приведенных кривых имеет два характерных поведения — в областях малых и больших значений V_{00} . Хотя сильные температурные флуктуации не позволяют точно судить о

зависимости параметра порядка *после* фазового перехода, область изменения поведения может быть локализована достаточно точно. Это позволяет отметить примерное положение точек фазового перехода для каждого значения Δ . Соответствующие V_{00} отмечены вертикальными линиями на Рис. 3.20. Набор линий показывает устойчивое смещение границы двух фаз влево, в область малых значений параметра V_{00} .

Данный результат может быть объяснен, если учесть, что усиление энергетического различия пребывания пар электронов в одном узле между подрешетками провоцирует усиление перехода как одиночных электронов, так и их пар с одной подрешетки на другую при меньших значениях U , поскольку уже при значениях $V_{00} = U - \Delta$ пребывание пар на одной из подрешеток оказывается невыгодным. Это вызывает отток части электронов, как описано выше. Следовательно, *левая граница* переходной области смещается в сторону меньших значений on-site-интенсивности.

Какой же практический вывод можно сделать из наблюдения данного эффекта? Полагают, что *физический графен* соотносится с параметрами расширенной модели Хаббарда $V_{00} \approx 3.27, V_{01} \approx 0.8$ и находится в фазе полуметалла. Такое же состояние наблюдается и в теоретическом моделировании расширенной модели Хаббарда, о чем свидетельствуют многочисленные фазовые диаграммы из разных источников (можно обратиться, например, к [16, 72]), либо искать по запросу “honeycomb Extended Hubbard model SDW” в Интернете. Фазовая граница полуметалл-диэлектрик в расширенной модели Хаббарда при $V_{01} = 0.8$ проходит примерно при значении $V_{00} \approx 3.6$ и расположена справа от исследуемой точки на фазовой диаграмме.

Мы только что показали, что легирование, либо использование подложки смещает границу фазового перехода влево, т.е. навстречу той точке, где графен, как полагают, находится, если соотносить его состояние с состояниями расширенной модели Хаббарда. Таким образом, открывается **принципиальная возможность добиться перехода графена в диэлектрическое состояние** (антиферромагнитного конденсата, SDW), что позволит использовать его в электронных устройствах совместно с полупроводниками.

Следует указать на еще одно подтверждение интерпретации обнаруженного эффекта, приведенной выше. Для этой цели рассмотрим Рис. 3.21, где приведены значения превышения кинетической и потенциальной энергий в случае моделирования с нарушенной симметрией $\Delta \neq 0$ по сравнению с однородным случаем ($\Delta = 0$). Легко различима область явного избытка кинетической энергии и повышенных флуктуаций потенциальной энергий с небольшим понижением последней. Это имеет место между 3.8 и 4.3. Интерпретация эффекта уже приведена выше: одиночные электроны и их пары начинают активно “бегать” между подрешетками, пытаясь избежать долгого пребывания на энергетически невыгодных узлах, но при этом явного запрета на состояние типа Рис. 3.19a, где A — энергетически невыгодная подрешетка, нет. Некоторое понижение потенциальной энергии связано с долей соседних узлов — пустых

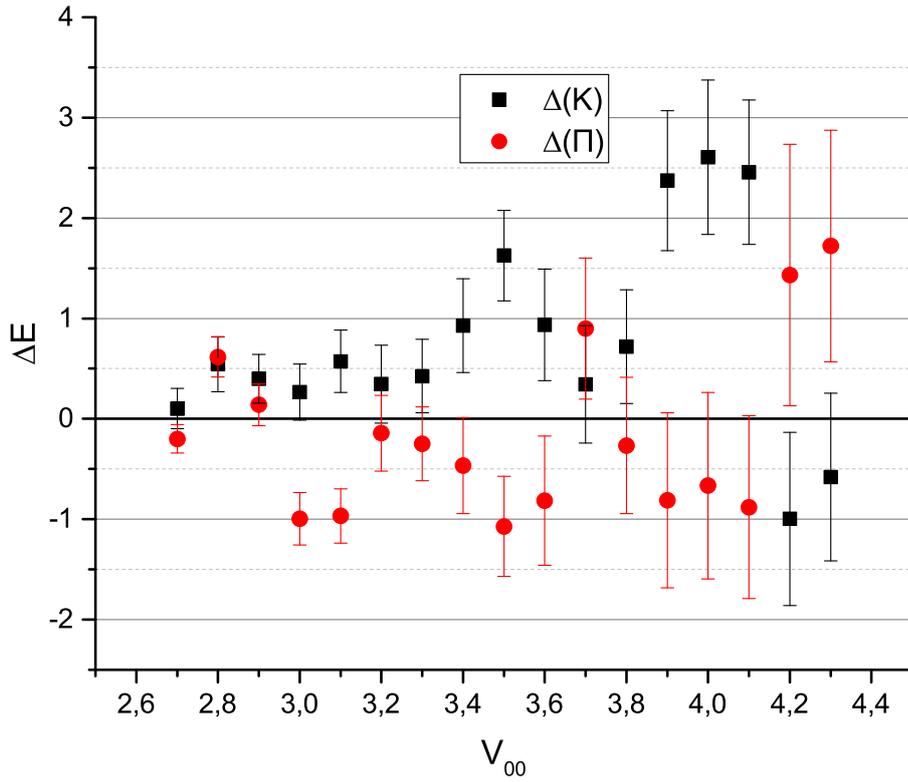


Рис. 3.21: Разности удельных кинетической и потенциальной энергий при наличии нарушения $\Delta = 0.2$ и его отсутствии. Область $3.8 \lesssim V_{00} \lesssim 4.2$ предоставляет сигналы перестройки спиновых состояний на решетке, потому что заметно совместное изменение кинетической и потенциальной энергий. Пояснение см. в основном тексте.

и полностью заполненных, которые дают отрицательный вклад в U_2 . При значениях, меньших 3.8, конденсатов нет ни на одной подрешетке, при значениях, бóльших 4.3, формируется SDW на всей решетке.

Следует подчеркнуть, что вся совокупность произведенных запусков свидетельствует в пользу слабого объемного эффекта удельных энергетических величин в расчете на один узел. Это позволяет распространять выводы, сделанные из последнего Рисунка ($L = 6$), на физическую ситуацию с исключенным эффектом конечного объема.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Исследована фазовая диаграмма компактной электродинамики в широком диапазоне параметров λ, β ; выделены области различного упорядочения топологических дефектов. Определены их корреляционные характеристики в каждой из областей.
2. Предложен принципиально новый способ описания магнитных токов и коллективных свойств топологических дефектов при помощи построения геометрических объектов. Найдены и проанализированы гистограммы распределения этих объектов в разных фазах. Показано наличие устойчивой связи характерных свойств и фаз модели.
3. Проанализирована имеющаяся научная литература на предмет способов обработки статистики рядов измерений Монте-Карло, в результате написаны программные комплексы (pipeline), позволяющие определить средние и оценку погрешностей результатов с учетом автокорреляций и смещений (bias) в марковском процессе.
4. Выведены выражения решеточной аппроксимации в расширенной модели Хаббарда с использованием формализмов двух и пяти полей при помощи двух методов: псевдофермионных полей и точных фермионных сил. Реализованы соответствующие программы, проведено моделирование в широком диапазоне параметров $V_{00}, V_{01}, \beta = 1/T$ модели.
5. Доказаны преимущества использования пяти полей при расчетах методом Монте-Карло.
6. Предложен способ нарушения подрешеточной симметрии на гексагональной решетке, который дает возможность направленного сдвига фазового перехода полуметалл-диэлектрик в сторону значений параметров модели, близких к физическим.
7. Найдены аналитические выражения для наблюдаемых — средней энергии и среднего квадрата энергии электронных возбуждений — и показана возможность вычисления теплоемкости при помощи моделирования Монте-Карло в диапазоне температур от 0.056 эВ до 5.6 эВ.

Список литературы

- [1] F. J. Wegner. Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Local Order Parameters. *J. Math. Phys.*, 12:2259, 1971.
- [2] K.G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10:2445, 1974.
- [3] T.A. DeGrand, D. Toussaint. Topological excitations and monte carlo simulation of abelian gauge theory. *Phys. Rev. D*, 22:2478-2489, 1980.
- [4] В.Г. Борняков, М.И. Поликарпов, Т. Судзуки, М.Н. Чернодуб, Г. Ширгольц. Невылетание цвета и структура адронов в решеточной хромодинамике. *УФН*, 174:19-38, 2004.
- [5] S. Mandelstam. Vortices and quark confinement in non-abelian gauge theories. *Physics Letters B*, 53(5):476-478, 1975.
- [6] G. Ripka. Dual Superconductor Models of Color Confinement. *Lecture Notes in Physics*. Springer, 2004.
- [7] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proceedings of the Royal Society of London*. 276(1365):238–257, 1963.
- [8] J. Kanamori. Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals. *Progress of Theoretical Physics*, 30(3): 275–289, 1963.
- [9] H. Tasaki. The Hubbard model - an introduction and selected rigorous results. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10:4353, 1998.
- [10] D. Pesin, A.H. MacDonald. Spintronics and pseudospintronics in graphene and topological insulators. *Nature Materials*, 11:409–416, 2012.
- [11] M. Pumera. Graphene in biosensing. *Materials today*, 14(7-8):308-315, 2011.
- [12] P.W. Anderson. The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity. *Science*, 235(4793):1196-1198, 1987.
- [13] M. Raczkowski, R. Peters, T. T. Phùng, N. Takemori, F. F. Assaad, A. Honecker, J. Vahedi. Hubbard model on the honeycomb lattice: From static and dynamical mean-field theories to lattice quantum Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. B*, 101:125103, 2020.

- [14] J. Drut, T.A. Lähde. Lattice field theory simulations of graphene. *Physical Review B. Condensed matter*, 79(16), 2009.
- [15] J. Paki, H. Terletska, S. Isakov, E. Gull. Charge order and antiferromagnetism in the extended Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 99:245146, 2019.
- [16] Wei Wu, A.M.S. Tremblay. Phase diagram and Fermi liquid properties of the extended Hubbard model on the honeycomb lattice. *Phys. Rev. B*, 89:205128, 2014.
- [17] S.D. Mostovoy, O.V. Pavlovsky. Crystals of Topological Vortices in Compact Electrodynamics. *Physics of Atomic Nuclei*, 83:1662–1666, 2020.
- [18] S.D. Mostovoy, O.V. Pavlovsky. Space clusters of magnetic currents in modified U(1) gauge model: Geometrical approach. *International Journal of Modern Physics A*, 37(24):2250140, 2022.
- [19] S. Mostovoy, O. Pavlovsky. Link auxiliary field method in the extended Hubbard model. *Physical Review E*, 107:025307, 2023.
- [20] Mostovoy S.D., Pavlovsky O.V. Development of a Method for Determining the Heat Capacity of Graphene by the Hybrid Monte Carlo Method. *Physics of Atomic Nuclei*, 85(Suppl 2):S73–S79, 2022.
- [21] W. Kerler, C. Rebbi, A. Weber. Phase structure and monopoles in U(1) gauge theory. *Phys. Rev. D*, 50:6984-6993, 1994.
- [22] L. Polley, U.-J. Wiese. Monopole condensate and monopole mass in U(1) lattice gauge theory. *Nuclear Physics B*, 356(3):629-654, 1991.
- [23] H.J. Rothe. *Lattice Gauge Theories*. World Scientific Lecture Notes in Physics, 82, 2012.
- [24] D. Chandler. *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 1987.
- [25] W. Kerler, C. Rebbi, A. Weber. Phase transition and dynamical-parameter method in U(1) gauge theory. *Nuclear Physics B*, 450(1):452-460, 1995.
- [26] H. Anderson L. Metropolis. Monte Carlo and the MANIAC. *Los Alamos Science*. 14:96–108, 1986.
- [27] K. Binder. *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*. New York: Springer, 1995.
- [28] G.S. Fishman. *Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications*. New York: Springer, 1995.

- [29] B.L. Hammond, W.A. Lester, P.J. Reynolds. Monte Carlo Methods in Ab-initio Quantum Chemistry. World Scientific, 1994.
- [30] D. Hubbard. How to Measure Anything: Finding the Value of Intangibles in Business. John Wiley & Sons, 2007.
- [31] S. Wessel. Monte Carlo Methods for Quantum Spin Models. Institute for Theoretical Solid State Physics, 2013. Режим доступа: <https://www.cond-mat.de/events/correl13/talks/wessel.pdf>.
- [32] J. Kolorenč, Lubos Mitas. Applications of quantum Monte Carlo methods in condensed systems. Rep. Prog. Phys. 74:026502, 2011.
- [33] D.M. Ceperley. Path integrals in the theory of condensed helium. Rev. Mod. Phys. 67:279, 1995.
- [34] N. Metropolis. The beginning of the Monte Carlo method. Los Alamos Science (1987 Special Issue dedicated to Stanislaw Ulam):125–130, 1987.
- [35] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. J. Chem. Phys. 21:1087, 1953.
- [36] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. Biometrika, 57(1):97–109, 1970.
- [37] D. Ceperley, G. V. Chester, M. H. Kalos. Monte Carlo simulation of a many-fermion study. Phys. Rev. B, 16:3081, 1977.
- [38] R.C. Grimm, R.G. Storer. Monte-Carlo solution of Schrödinger's equation. Journal of Computational Physics, 7(1)134-156, 1971.
- [39] J.B. Anderson. A random-walk simulation of the Schrödinger equation: H+3. J. Chem. Phys. 63:1499, 1975.
- [40] J. Grotendorst, D. Marx, A. Muramatsu. Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms. John von Neumann Institute for Computing, NIC Series, 10:99-156, 2002.
- [41] J.A. Barker. A quantum-statistical Monte Carlo method; path integrals with boundary conditions. J. Chem. Phys. 70:2914, 1979.
- [42] J. Grotendorst, D. Marx, A. Muramatsu. Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms. John von Neumann Institute for Computing, NIC Series, 10:51-61, 2002.
- [43] H.F. Trotter. On the product of semi-groups of operators. Proc. Am. Math. Soc. 10:545, 1959.

- [44] D.M. Ceperley, R.O. Simmons, R.C. Blasdell. Kinetic Energy of Liquid and Solid ^4He . *Phys. Rev. Lett.* 77:115, 1996.
- [45] E.W. Draeger, D.M. Ceperley. Debye-Waller factor in solid ^3He and ^4He . *Phys. Rev. B*, 61:12094, 2000.
- [46] D. Marx, M. H Müser. Path integral simulations of rotors: theory and applications. *J. Phys.: Condens. Matter*, 11:R117, 1999.
- [47] Y. Kwon, K.B. Whaley. Superfluid solvation structure of OCS in helium clusters. *J. Chem. Phys.* 115:10146, 2001.
- [48] M. Suzuki, S. Miyashita, A. Kuroda. Monte Carlo Simulation of Quantum Spin Systems. I. *Progress of Theoretical Physics*, 58(5):1377–1387, 1977.
- [49] M Suzuki. Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising Systems: Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations. *Progress of Theoretical Physics*, 56(5):1454–1469, 1976.
- [50] S. Wessel, M. Olshanii, S. Haas. Field-Induced Magnetic Order in Quantum Spin Liquids. *Phys. Rev. Lett.* 87:206407, 2001.
- [51] D.C. Handscomb. The Monte Carlo method in quantum statistical mechanics. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 58:594-598, 1962.
- [52] H. G. Evertz, G. Lana, M. Marcu. Cluster algorithm for vertex models. *Phys. Rev. Lett.* 70:875, 1993.
- [53] С. Уилкс. Математическая статистика. Пер. с англ. М.: Наука, 632 стр, 1967.
- [54] А. Хальд. Математическая статистика с техническими приложениями. М.: Изд. Иностр. лит., 664 стр., 1956.
- [55] H.G. Evertz. Computer Simulations, 2020. Режим доступа: <https://itp.tugraz.at/evertz/Computersimulations/cs2020.pdf>
- [56] M. Hanada. Markov Chain Monte Carlo for Dummies, [arXiv:1808.08490 [hep-th]], 2018.
- [57] P. Young. Jackknife and Bootstrap Resampling Methods in Statistical Analysis to Correct for Bias, 2010. Режим доступа: <http://physics.ucsc.edu/peter/jackboot.pdf>
- [58] W. Janke. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics – From Basic Principles to Advanced Applications. Order, Disorder and Criticality. World Scientific, pp. 93-166, 2012.

- [59] V. Ambegaokar, M. Troyer. Estimating errors reliably in Monte Carlo simulations of the Ehrenfest model. *Am. J. Phys.* 78:150-157, 2010.
- [60] M. Matsumoto, T. Nishimura. Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 8(1):3–30, 1998.
- [61] P.R. Wallace. The Band Theory of Graphite. *Phys. Rev.* 71, 622, 1947.
- [62] G. Brocks. Graphene: an introduction, Han-sur-Lesse Winterschool, 2015. Режим доступа: https://www.han-sur-lesse-winterschool.nl/downloads/2015/brocks_notes.pdf.
- [63] T. O. Wehling, E. Şaşioğlu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, S. Blügel. Strength of Effective Coulomb Interactions in Graphene and Graphite. *Phys. Rev. Lett.* 106:236805, 2011.
- [64] I. Montvay, G. Münster. *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 505 pages, 1994.
- [65] E. Fradkin. *Quantum Field Theory: An Integrated Approach*. Cambridge University Press, Part 8, 760 pages, 2021.
- [66] P. Buividovich, D. Smith, M. Ulybyshev, L. von Smekal. Hybrid Monte Carlo study of competing order in the extended fermionic Hubbard model on the hexagonal lattice. *Phys. Rev. B*, 98:235129, 2018.
- [67] P. Buividovich, D. Smith, M. Ulybyshev, L. von Smekal. Numerical evidence of conformal phase transition in graphene with long-range interactions. *Phys. Rev. B*, 99:205434, 2019.
- [68] J. E. Hirsch, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, R. Blankenbecler. Efficient Monte Carlo Procedure for Systems with Fermions. *Phys. Rev. Lett.* 47:1628, 1981.
- [69] Ж. Зинн-Жюстен. *Континуальный интеграл в квантовой механике*. М.: Физматлит, 360 стр., 2010.
- [70] И.А. Квасников. *Термодинамика и статистическая физика. Том 2. Теория равновесных систем. Статистическая физика. Едиториал УРСС*, 436 стр., 2013.
- [71] С.Д. Мостовой, О.В. Павловский. Влияние нарушения подрешеточной симметрии на фазовую диаграмму расширенной модели Хаббарда. *Ученые записки физического факультета Московского Университета*, 4:2241505, 2022.
- [72] M. Hohenadler, F. Assaad. Correlation effects in two-dimensional topological insulators. *Journal of physics. Condensed matter: an Institute of Physics journal*. 25:143201, 2013

[73] M. Ulybyshev, F. Assaad. Mitigating spikes in fermion Monte Carlo methods by reshuffling measurements. *Phys. Rev. E*, 106:025318, 2022.

Приложение А

Средний квадрат гамильтониана

Выражение среднего квадрата гамильтониана через элементы обратной фермионной матрицы (3.6):

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H}^2 \rangle = & 2\Re \left\{ \kappa^2 \sum_{x,\mu,z,\nu} (P(w, y, x, z) + \delta_{w,x} M_{yz}^{-1} + M_{yx}^{-1} M_{wz}^{-1*}) \right. \\
 & - \kappa \sum_{x,\mu,z,\nu'} V_{\nu'} \left(2P(w, y, z, w, x, z) + \delta_{w,x} P(y, z, w, z) + 2\delta_{w,z} P(w, y, w, x) \right. \\
 & - 2P(y, z, x, z) M_{ww}^{-1*} + \delta_{x,z} P(w, y, w, x) - \delta_{w,x} \delta_{x,z} M_{yw}^{-1} + \delta_{x,z} M_{yx}^{-1} M_{ww}^{-1*} \\
 & - 2P(w, y, w, x) M_{zz}^{-1*} + \delta_{w,x} M_{yw}^{-1} M_{zz}^{-1*} + 2M_{yx}^{-1} P^*(w, z, w, z) - 2\delta_{w,z} M_{yx}^{-1} M_{ww}^{-1*} \\
 & \left. \left. + \delta_{w,y} P(w, z, x, z) + \delta_{y,z} P(w, y, w, x) - \delta_{w,y} \delta_{w,z} M_{wx}^{-1} + \delta_{y,z} M_{yx}^{-1} M_{ww}^{-1*} + \delta_{w,y} M_{zz}^{-1} M_{wx}^{-1*} \right) \right. \\
 & + \sum_{x,\mu',z,\nu'} V_{\mu'} V_{\nu'} \left(P(w, x, y, z, w, x, y, z) - \delta_{w,x} P(w, y, z, w, y, z) - \delta_{w,y} P(w, x, z, w, x, z) \right. \\
 & - \delta_{w,z} P(w, x, y, w, x, y) + P(x, y, z, x, y, z) M_{ww}^{-1*} - \delta_{x,z} P(w, x, y, w, x, y) \\
 & - \delta_{w,x} \delta_{x,z} P(w, y, w, y) - \delta_{w,y} \delta_{x,z} P(w, x, w, x) + \delta_{x,z} P(x, y, x, y) M_{ww}^{-1*} \\
 & - \delta_{y,z} P(w, x, y, w, x, y) - \delta_{w,x} \delta_{y,z} P(w, y, w, y) - \delta_{w,y} \delta_{y,z} P(w, x, w, x) \\
 & + \delta_{y,z} P(x, y, x, y) M_{ww}^{-1*} + P(w, x, y, w, x, y) M_{zz}^{-1*} + \delta_{w,x} P(w, y, w, y) M_{zz}^{-1*} \\
 & + \delta_{w,y} P(w, x, w, x) M_{zz}^{-1*} + P(x, y, x, y) P^*(w, z, w, z) - \delta_{w,z} P(x, y, x, y) M_{ww}^{-1*} \\
 & - \delta_{x,y} P(w, x, z, w, x, z) - \delta_{w,x} \delta_{x,y} P(w, z, w, z) - \delta_{w,z} \delta_{x,y} P(w, x, w, x) \\
 & + \delta_{x,y} P(x, z, x, z) M_{ww}^{-1*} - \delta_{x,y} \delta_{x,z} P(w, x, w, x) + \delta_{w,x} \delta_{x,y} \delta_{x,z} M_{ww}^{-1} \\
 & - \delta_{x,y} \delta_{x,z} M_{xx}^{-1} M_{ww}^{-1*} + \delta_{x,y} P(w, x, w, x) M_{zz}^{-1*} - \delta_{w,x} \delta_{x,y} M_{ww}^{-1} M_{zz}^{-1*} \\
 & \left. \left. - \delta_{x,y} M_{xx}^{-1} P^*(w, z, w, z) + \delta_{w,z} \delta_{x,y} M_{xx}^{-1} M_{ww}^{-1*} + P(w, x, z, w, x, z) M_{yy}^{-1} \right) \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \delta_{w,x}P(w, z, w, z)M_{yy}^{-1*} + \delta_{w,z}P(w, x, w, x)M_{yy}^{-1} + P(x, z, x, z)P^*(w, y, w, y) \\
& \quad - \delta_{w,y}P(x, z, x, z)M_{ww}^{-1*} + \delta_{x,z}P(w, x, w, x)M_{yy}^{-1*} - \delta_{w,x}\delta_{x,z}M_{ww}^{-1}M_{yy}^{-1*} \\
& \quad - \delta_{x,z}M_{xx}^{-1}P^*(w, y, w, y) + \delta_{w,y}\delta_{x,z}M_{xx}^{-1}M_{ww}^{-1*} + P(w, x, w, x)P^*(y, z, y, z) \\
& \quad - \delta_{w,x}M_{ww}^{-1}P^*(y, z, y, z) + M_{xx}^{-1}P^*(w, y, z, w, y, z) + \delta_{w,y}M_{xx}^{-1}P^*(w, z, w, z) \\
& \quad + \delta_{w,z}M_{xx}^{-1}P^*(w, y, w, y) - \delta_{y,z}P(w, x, w, x)M_{yy}^{-1} + \delta_{w,x}\delta_{y,z}M_{ww}^{-1}M_{yy}^{-1*} \\
& \quad \left. + \delta_{y,z}M_{xx}^{-1}P^*(w, y, w, y) - \delta_{w,y}\delta_{y,z}M_{xx}^{-1}M_{ww}^{-1*} \right\},
\end{aligned}$$

где V_μ равняется $V_{00}/2$ если $\mu = 0$ (y есть x) и $V_{01}/2$ если $\mu = 1, 2, 3$ (y — соседний с x), $\mu = \overline{1, 3}$, $\mu' = \overline{0, 3}$, y определяется из x и μ , а w определяется из z и ν . Спаривания определены следующим образом:

$$P(x, y, z, w) = M_{yz}^{-1}M_{xw}^{-1} - M_{xz}^{-1}M_{yw}^{-1},$$

$$P(x, y, z, w, u, v) = M_{xv}^{-1}P(y, z, w, u) - M_{xu}^{-1}P(y, z, w, v) + M_{xw}^{-1}P(y, z, u, v),$$

$$\begin{aligned}
P(x, y, z, w, u, v, t, s) = & M_{xs}^{-1}P(y, z, w, u, v, t) - M_{xt}^{-1}P(y, z, w, u, v, s) + \\
& M_{xv}^{-1}P(y, z, w, u, t, s) - M_{xu}^{-1}P(y, z, w, v, t, s).
\end{aligned}$$