بسم الله الرحمن الرحیم — جلسه — ۱۴۰۰/۹/۱۶

Expectation value — "چشم داشتی"

observable quantity → $\langle f(x) \rangle$ = کمیت مرکزی

ensemble average

Recall: to evaluate Macroscopic Properties of a many-Body system from microscopic behavior, at first we should

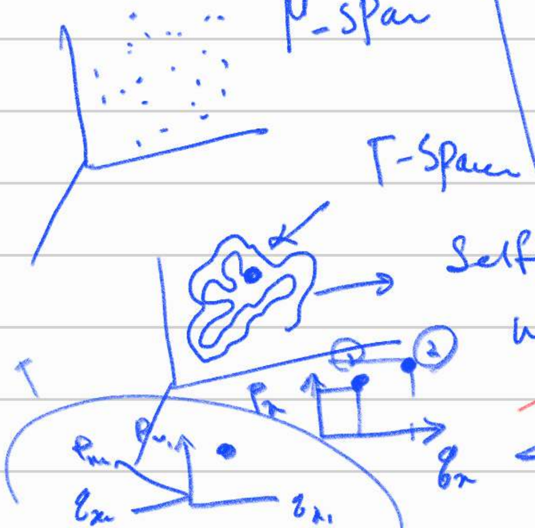
Distribution of microstate in phase space { determine the Probability of finding a point in phase space "(Γ-Space)

$\{\mu$-Space$\}$ "6D"

Γ-Space for N-Particle System in e.g. 3D

has 6N-D : { 3D for location (q); 3D for momentum (p) }

{ one Particle ←

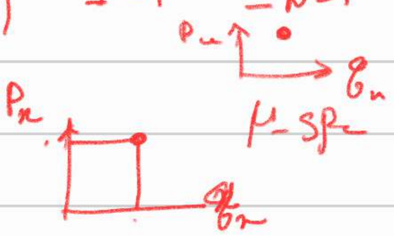


$N=2$, $D=1$

Γ-Space } 1-P. — N-P

μ-Space } 1-P. — N-P

$N=1$, $D=1$



$$\langle f(x)\rangle = \int d\Gamma \; f(x)\; \rho(x)$$

$(\bar{q}, \bar{p})$

$\langle \psi | f | \psi \rangle$

$$\boxed{\langle f(x)\rangle = \int dx \; f(x)\; \rho(x)}$$

$$\langle f(x)\rangle = \sum_{i=1}^{M} f(x_i)\, \overset{p(x_i)}{\downarrow}$$

discrete form

In order to show you the Relation between trying to compute a typical Expectation value of a Physical quantity and Random Number I should show you two approaches.

A: first approach.
$$\langle f(x)\rangle = \sum_{i=1}^{M} f(x_i)\, p(x_i)$$

ابتدا تمام x های دامنه گسسته را در نظر می‌گیرید. و به هر آن وزن می دهید.

$p(x) \cdot f(x) \longrightarrow$

We take into account all available x and then compute the corresponding f(x) and then add the proper weigh ($p(x)$)

To make more sense let me show you

an Example

What is the average height of students

in a class ?

متوسط قد دانشجویان در یک کلاس چقدر است

$$\langle h \rangle = ? = \sum_{i=1}^{M} h_i \, p(h_i)$$

$N = 20$ # of students

$\Delta h = 1$ cm

$M = 1000$

$h_1 = 0 \, , \; p(0) = \checkmark$

$h_2 = 1 \, , \; p(1) = \checkmark$

$h_2 = 2 \, , \; p(2) =$

$\vdots$

h 1000 cm

$$\Rightarrow \langle h \rangle = 0 \times p(0) + 1 \times p(1) + \dots + 1000 \times p(1000)$$

$h = \{0, 1, 2, \dots \; 1000\}$

ابتدا تمام hها که در نظر گرفته می‌شوند با احتمال یک (نوشتن آن)

سپس هرکدام از این مقادیر در وزن احتمال رخ دادن این اعداد در سیستم ضرب می‌شوند

$$\langle h \rangle = \cancel{0 \times p(0) + 1 \times p(1) + 2 \times p(2) + 3 \times p(3) + \cdots}$$

$$+ \underline{150 \times p(150)} + \underline{151 \times p(151)} + \cdots$$

$$\underline{200 \times p(200)} + \cancel{\cdots + 1000\, p(1000)}$$

B: Second approach.

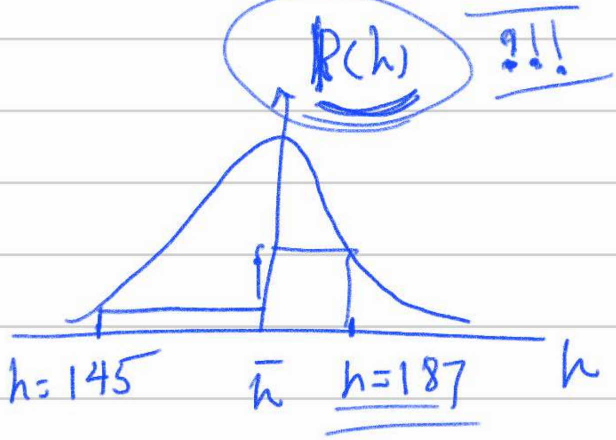
$$\langle h \rangle = \frac{1}{N_{student}} \sum_{j=1}^{N_{stu}} h_i = \cancel{1} + \cancel{2} + \cancel{1000}$$

$N=20$

$$= \frac{1}{N_{stu}} \left[150 + 155 + 150 + 180 + 183 + 185 + 180 + 182 + 175 + 195 + 170 + 180 + \cdots + 160 \right]$$

$$\frac{1}{N_{stu}} \left[150 \times 2 + 155 \times 1 + 180 \times 3 \right]$$

تولید h ها، به نسبت احتمال وجود آنها. ← در این حالت از h ها ابتدا مبنی بر وزن رخ داد این اعداد، تولید می‌شوند



$$\langle f(\bar{q},\bar{p})\rangle = \int d\Gamma\, \underbrace{\rho(q,p)}\, \underbrace{f(q,p)}$$

موضوع چشم‌داشتی ← تولید حالت‌های سیستم براساس احتمال رسیدن به آنها
و محاسبه چشم

* و نه تولید حالت‌های سیستم با احتمال یکسان و سپس وزن ρ به آنها. *

$$\langle f(x)\rangle = \int dx\, f(x)\, p(x) = \underbrace{\sum_{i=1}^{M} f(x_i)\, p(x_i)}_{\text{A: approx}} \; *$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f(x_j)$$

x_j is generated Randomly

with probability Distribution of $p(x)$

$$\underbrace{\{x_1, \ldots \quad x_N\}}_{p(x)}$$

$\boxed{\text{if - Condition to check}}$

Metropolis algorithm

We essential encounter to a method to generate a

Series with arbitrary PDF

$$\rightarrow \mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + \mathcal{U}$$

$$\rho(\vec{q}, \vec{p}) = \underline{e^{-\beta\mathcal{H}}}$$

c

Thermodynamical equilibrium $\frac{d\rho}{dt} = 0 \Longrightarrow$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, \mathcal{H}\} = 0$$

$$p(n) \Leftarrow \boxed{\rho(\mathcal{H})} = \checkmark$$

$$\langle f(q,p) \rangle = \int d\Gamma \; f(q,p) \; \underline{\rho(q,p)}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(q_i, p_i)$$

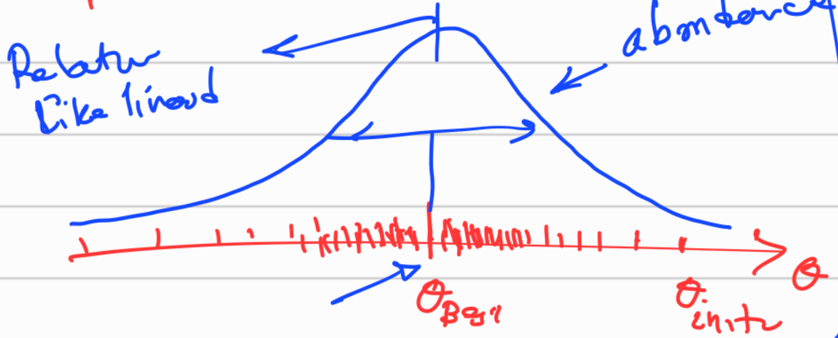
$(q_i, p_i) \rightarrow$

Data modeling problem

فقط θ
یک پارامتر آزاد

$$\boxed{\langle\theta\rangle = ?} = \sum \theta_i \, p(\theta_i) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \theta_j$$

$\theta_1 \ldots\ldots\ldots \theta$



χ^2

$$\rho = \mathcal{L} = e^{-\frac{\chi^2}{2}}$$

y

effective Hamiltonian $\rightarrow$ $\mathcal{H} = +\chi^2$ $\rightarrow$ effective potential

$\theta_i \rightarrow \theta_{i+1}$

Markov Jumping

Rate of acceptance

$$RA = \min\left\{1, \frac{\rho_{i+1}}{\rho_i}\right\}$$

Metropolis

$\leftarrow \{\theta\}$

$\rightarrow \{\theta_1, \theta_2, \ldots \theta_N\}$

تقریب

$\langle\theta\rangle = \theta_{Best}$

$$P(\theta) = ? \longrightarrow \boxed{\mathcal{L} = e^{-\frac{\Delta\chi^2}{2}} \sim e^{-\frac{(\theta - \theta_{Best})^2}{2\sigma_\theta^2}}}$$

{ Variational Monte Carlo and Diffusion Monte Carlo }

We are going to use Metropolis method to examine a quantum Many-Body system

ground state → ground wavefunction?

ground state → ground Energy?

* Time-Independent Schrödinger Eq

* Time dependent

در بحث محاسبه مقدار چشم داشتی یک سوال مطرح شد که به طور کلی $p(x)$ را از کجا بیاوریم؟

① در خصوص اغلب مسایل ما، هامیلتونی شروع می کنیم. در نتیجه مطابق با دانشی که از مکانیک آماری داریم

$$p = \rho \sim e^{-\mathcal{H}\beta}$$

است. و این یعنی اینکه تولید حالت ها باید با این احتمال صورت بگیرد.

② در مورد بحث مدل سازی داده که ما به دنبال θ_{Best} هستیم نیز می توان از این نقطه نظر به مسئله توجه کرد

که می خواهیم $\theta_{Best} \equiv \langle \theta \rangle$ را به دست آوریم پس می آییم و

$$\theta_{Best} = \langle\theta\rangle = \frac{1}{N_\theta}\sum_{j=1}^{N_\theta}\theta_j$$

θ ها با تابع توزیع مناسب خودش تولید شوند.

خب تابع توزیع مناسب خودش یعنی چه نوع تابع توزیع، مگر ما شکل تابع توزیع را داریم؟

خب اگر شکل تابع توزیع θ را داشته باشیم به جای محاسبات کامپیوتری بیاییم و بنویسیم

$$\theta_{Best} = \langle\theta\rangle = \int d\theta\, \theta\, P(\theta)$$

و خلاص

اما باید توجه کرد که ما شکل $P(\theta)$ را به صورت غیرمستقیم از $\mathcal{L} \sim e^{-\chi^2/2}$ داریم. پس مثل اینکه

$$\mathcal{H}_{effective} = \frac{\chi^2}{2}$$

یک هامیلتونی مؤثر داشتیم

و بعد

$$P(\theta) \sim \rho(\theta) \sim \mathcal{L} = e^{-\mathcal{H}_{eff}} \sim e^{-\chi^2/2}$$

و نهایتاً به الگوریتم متروپلیس θ هایی انتخاب می‌شوند که $\mathcal{L}$ بیشتری داشته باشند

چون می‌نوشتیم

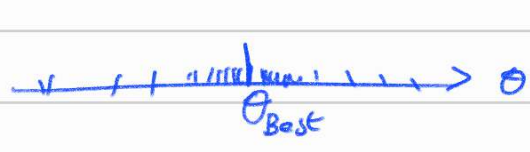
$$RA = \min\left\{1, \frac{\mathcal{L}_{i+1}}{\mathcal{L}_i}\right\}$$

و پس اگر یک سری θ های تولید شده را بررسی کنیم و تابع توزیع آنها را حساب کنیم

داریم:

$$\{\theta_1, \theta_2 \dots \theta_{N_\theta}\}$$

توزیع حول θ_{Best} به این صورت خواهد بود که از روی آن ⟶



به صورت عددی (θ) ها به دست می‌آید و بقیه کمیت‌ها استخراج می‌شود.