

Part 0

Introducció

I. Resum històric del mètode de Monte Carlo

Potser el document més antic on es fa ús d'un mètode aleatori per a resoldre una integral és a un assaig del Comte de Buffon, l'any 1777 [B1777]. En ell s'hi descriu la solució al següent problema: si es llança una vareta de longitud L sobre un pla contenint línies rectes paral·leles separades per una distància $d > L$, quina és la probabilitat P que la vareta intersekti una d'aquestes línies? Per a resoldre'l Buffon va fer l'experiment llançant molts cops la vareta, trobant finalment un valor, però també en va fer l'anàlisi matemàtica demostrant que el valor d'aquesta probabilitat és:

$$P = \frac{2L}{\pi d}$$

Posteriorment, l'any 1886, Laplace va suggerir que aquesta mateixa idea podia ser emprada per a determinar el valor de π [L1886].

A principis del segle passat, cap el 1901, Lord Kelvin va emprar un mètode experimental similar per a ajudar-se a avaluar algunes de les integrals de l'energia cinètica que apareixien en la teoria cinètica de gasos.

Ja en la dècada dels anys 30 Enrico Fermi va fer les primeres simulacions numèriques que podrien ser qualificades de precedents dels càlculs Monte Carlo. Però el que actualment coneixem com a mètode de Monte Carlo nasqué a Los Alamos l'any 1947, de la mà de John von Neumann i Stanislaw Ulam, degut al seu interès per a calcular processos estocàstics.

Aquest mètode de càlcul científic treballa sobre sèries de números aleatoris, i possiblement la reconeguda fama dels jocs d'atzar de la ciutat de Monte Carlo en va suggerir el nom. Des del primer moment fou impulsat per Enrico Fermi, qui l'any 1947 va construir el FERMIAC, un curiós "carretó Monte Carlo", que amb tot l'aspecte d'un carretó d'uns quaranta centímetres, era una petita computadora analògica que generava les històries individuals dels neutrons en passar a través de diversos materials, on podien ser dispersats, absorbits o provocar fissió.

Per aquelles dates acabava de posar-se en marxa l'ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Computer), que tot i haver estat impulsat per a calcular taules balístiques per a la segona guerra mundial, va ser acabat massa tard per a aquest us. Al febrer de 1948 John i Klari von Neuman i Metropolis el van emprar en uns primers càlculs Monte Carlo.

Mentrestant, les conferències que sobre el mètode Monte Carlo va fer Stanislaw Ulam a Los Alamos i Los Angeles van anar despertant un ampli interès en aquesta nova tècnica [Me87]. La demanda de potències de càlcul més grans per a l'ús de les tècniques de Monte Carlo van portar que Los Alamos construís el seu propi ordinador, el MANIAC (Mathematical Analyzer, Numerical Integrator, and Computer). L'ordinador va ser construït per Metropolis, i estava basat en un disseny de John von Neumann.

El MANIAC va ser una utilíssima eina tant en la recerca científica com aplicada [FPU55]. Amb ell, Metropolis, Edward i Mici Teller i Marshall i Arianna Rosenbluth van calcular amb el mètode de Monte Carlo, un model d'esferes dures en dues dimensions, simulant matèria en condicions d'alta densitat i pressió. El codi emprat tenia poquíssimes línies. Era l'inici del que ara coneixem com a l'algorisme de Metropolis [Me87]. Aquest

algorisme va ser usat després en molts sistemes físics en què les forces entre partícules eren conegudes.

La millora en els codis Monte Carlo i en les tècniques matemàtiques de generació de números aleatoris, va permetre l'aplicació d'aquesta tècnica de càlcul a molts altres problemes [La78].

Aviat van construir-se altres ordinadors: el MANIAC II (Los Alamos 1954), el MANIAC III (University of Chicago, construït per Metropolis), i tot un seguit de nous ordinadors que van contribuir a l'extensió dels mètodes de Monte Carlo.

L'entrada d'IBM en aquest món fou també un fet important, i també està relacionada amb els mètodes de Monte Carlo. Cuthbert Hurd, un físic que treballava en processos de difusió gasosa, va organitzar la primera conferència sobre mètodes de Monte Carlo i seminaris de càlculs científics d'IBM. Així va convèncer l'empresa a entrar de ple en el camp del càlcul científic, i l'any 1952 va quedar acabat l'IBM 701, la primera de tot un seguit de màquines pensades per a càlculs d'aquesta mena [Se96].

El mètode va ser aplicat des del principi a l'anàlisi d'una gran varietat de problemes. Alguns dels primers on fou aplicat van ser: la difusió pió-protó, l'equació d'estat d'un sistema d'esferes dures en un espai bidimensional, la difracció de raigs X, el càlcul de paràmetres d'una xarxa cristal·lina, l'estudi de les reaccions nuclears, i la cinètica de la difusió de gasos.

Amb el temps aquesta tècnica es va anar consolidant i estenent el seu ús. És especialment útil en la simulació numèrica de problemes on intervenen integrals en moltes dimensions, ja que solen ser de molt difícil resolució amb altres mètodes numèrics. I tot i que els mètodes de Monte Carlo proporcionen resultats de natura estadística existeixen mètodes molt eficients per a poder reduir la variància. En l'actualitat podem trobar càlculs Monte Carlo no només en diversos camps de la física, sinó també en moltes altres àrees de coneixement on els investigadors s'afronten a complicats problemes de càlcul, sovint inabordables amb altres tècniques.

I les perspectives no són dolentes. Tot i els seus quasi 60 anys d'antiguitat, els mètodes de Monte Carlo segueixen essent una potent eina de càlcul en molts camps científics.

II. L'heli líquid

L'evolució dels mètodes de Monte Carlo va anar fortament lligada a l'estudi de la matèria condensada. L'heli líquid ha estat un dels sistemes que ha rebut una atenció més gran ja des dels seus inicis. Dues raons poden explicar aquest interès especial envers l'heli: la relativa senzillesa de la interacció, que és ben coneguda, i el descobriment de la superfluidesa l'any 1938 [Ka38] [AM38].

La descripció quàntica d'aquests sistemes de molts cossos no era fàcil, però el desenvolupament dels ordinadors a partir dels anys 50 (vegeu l'apartat anterior), va oferir la possibilitat d'encetar càlculs fins al moment impensables, donant una empenta decisiva a l'estudi dels líquids quàntics.

Més endavant es fa un breu repàs històric de l'evolució d'aquest camp de la física [CK79], però abans pot ser aclaridor respondre algunes preguntes més elementals: a què ens referim quan parlem de líquids quàntics i quines característiques té l'heli que l'hagin fet especialment interessant.

Considerem un gas clàssic. En ell els àtoms es mouen de forma essencialment lliure, llevat d'ocasionals col·lisions amb d'altres àtoms o bé amb les parets del recipient. Si s'incrementa la pressió i se'n disminueix la temperatura la situació canvia. Per una banda amb l'augment de la densitat creixeran els efectes de la interacció entre els àtoms. Per altra banda la disminució de temperatura en farà disminuir la seva energia cinètica, portant-la a valors potser comparables a l'energia d'interacció. Com a conseqüència es produeix una transició de primer ordre del gas cap a l'estat líquid. Aquesta és una transició essencialment dinàmica, deguda a efectes purament clàssics. Estem davant *d'un líquid clàssic*.

A baixes pressions, imaginem ara que seguim disminuint-ne la temperatura, l'energia cinètica es farà encara més petita, i els efectes de la interacció interatòmica seran més importants. Com a conseqüència en molts casos trobarem una transició de primer ordre de l'estat líquid cap a l'estat sòlid. I aquí és on apareix la peculiaritat de l'heli, i és

que tant l' ^4He com l' ^3He en són l'excepció, i romanen líquids fins a les temperatures més baixes. Dos fets es combinen en l'explicació d'aquest comportament anòmal: (i) l'heli és el segon element més lleuger de la taula periòdica, la seva petita massa permet forts moviments de punt zero (ii) la feblesa de les forces interatòmiques. Així ens trobem amb un sistema líquid en el qual els efectes quàntics poden ser observats a escala macroscòpica. Estem davant del que anomenem un *líquid quàntic* [PN89].

Al diagrama de fases de l' ^3He i l' ^4He (figures 1.1 i 1.2 respectivament) es pot veure com, a diferència d'altres líquids, a molt baixes temperatures l'heli se segueix trobant en fase líquida, i cal augmentar la pressió fins als 35 bars en l' ^3He i 25 bars en l' ^4He per aconseguir-ne la solidificació.

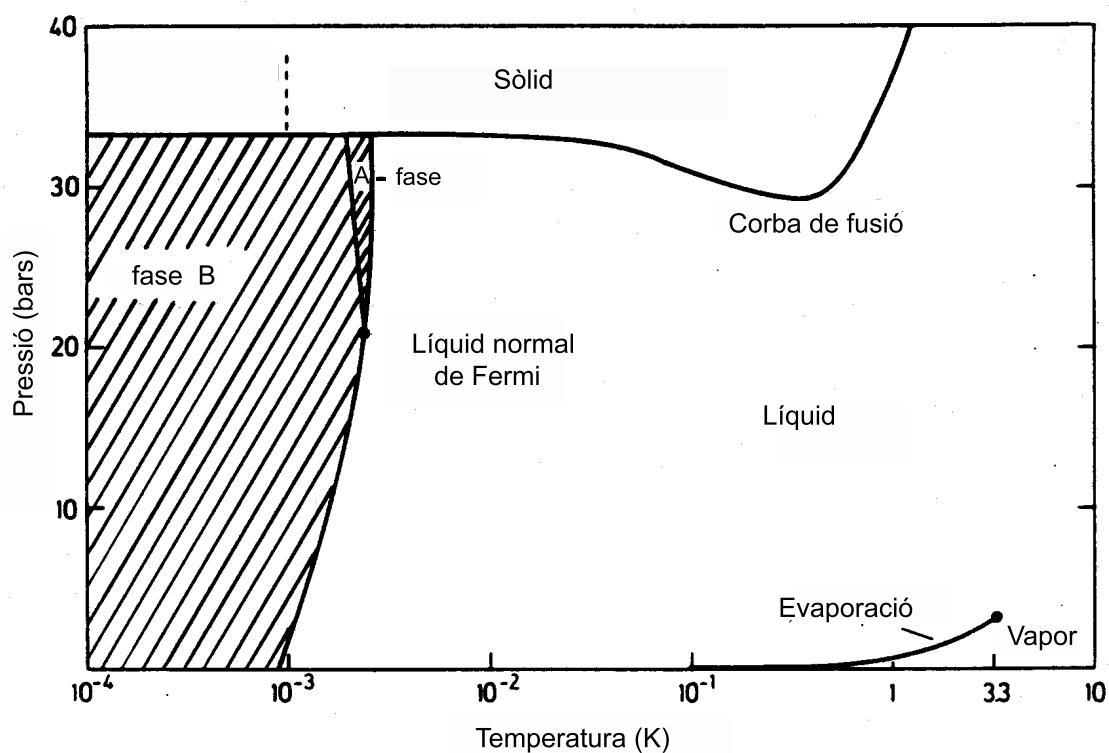


Figura 1.1

Diagrama de fases per a l' ^3He

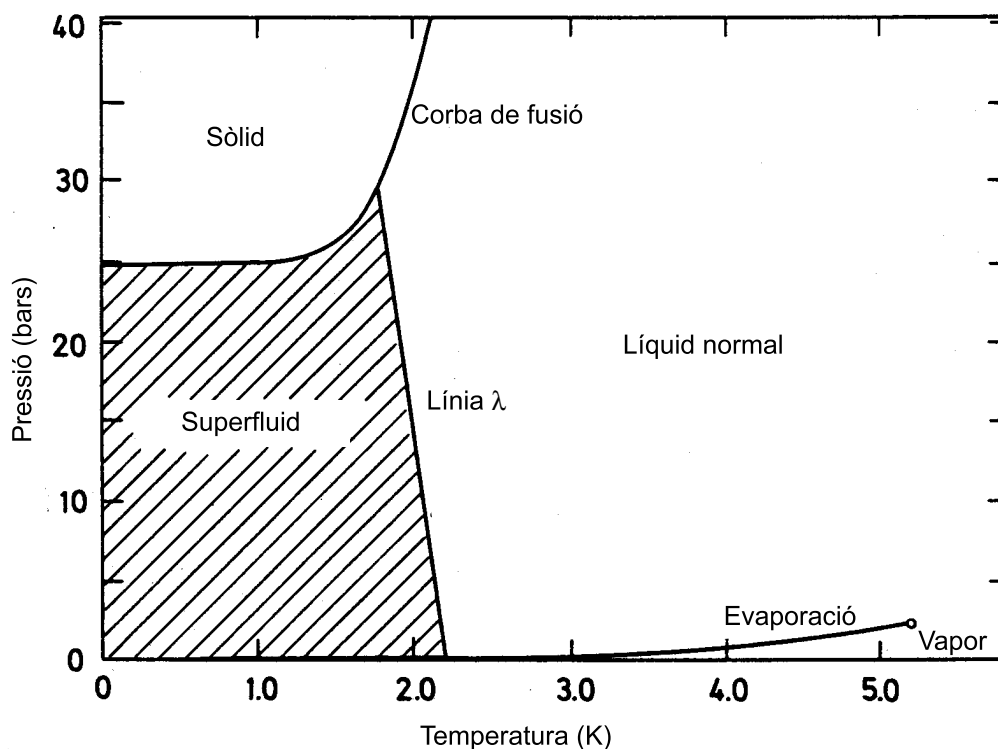


Figura 1.2

Diagrama de fases per a l' ${}^4\text{He}$

Les fases condensades de l' ${}^4\text{He}$ i l' ${}^3\text{He}$ són sistemes quàntics molt fortament correlacionats. Aquesta característica podria fer d'ells sistemes de molt difícil modelització i càlcul, però afortunadament no és ben bé així.

El gran avantatge de l'heli és que és un gas noble, i la seva primera energia d'ionització és de les més grans de la taula periòdica (24.56 eV). Aquest valor tan gran el fa químicament inactiu, de manera que no forma molècules i es manté en forma d'agregat atòmic. L'energia de lligadura de l'heli líquid a $T = 0\text{K}$ és cinc ordres de magnitud menor que l'energia d'ionització, i per tant es poden considerar els àtoms d'heli com a elements sense estructura.

Per altra banda el potencial interatòmic és molt ben conegut. És radial, a parelles, independent de spin i isospi, i a distàncies grans presenta una cua atractiva tipus Van der Waals. Tot això ha facilitat els càlculs amb heli líquid, i tot i les fortes correlacions presents en el sistema, és difícil trobar altres camps en la física de la matèria condensada on els càlculs microscòpics hagin arribat a una precisió comparable.

Els efectes quàntics són els responsables que els dos isòtops de l'heli, l' ^3He i l' ^4He , tinguin comportaments físics totalment diferents. Mentre que en l' ^4He s'observa una transició de fase de segon ordre cap a un estat superfluid, a la mateixa escala de temperatures (uns 2K) no apareix aquest canvi en l' ^3He . S'ha de baixar fins a les mil·lèsimes de kelvin per a observar la transició de l' ^3He a una fase superfluida (figures 1.1 i 1.2). En absència de camp magnètic extern es poden formar dues fases superfluides, anomenades fases A i B [VW90]. En qualsevol cas, les propietats de l' ^3He per dessota d'1K són molt diferents a les d'un líquid clàssic, degut a la rellevància dels efectes quàntics.

Les grans diferències de comportament entre ^4He i ^3He estan causades per l'estadística quàntica. Mentre l' ^4He té spin enter i segueix l'estadística de Bose, l' ^3He amb tres nucleons té un spin semienter, i segueix l'estadística de Fermi. En un sistema fermiònic el principi d'exclusió de Pauli limita l'ocupació dels estats. En canvi en un sistema bosònic a molt baixes temperatures s'observa el fenomen de la condensació de Bose-Einstein, en el qual una part dels àtoms ocupen l'estat mono-particular de més baixa energia, ja que l'ocupació no està limitada pel principi de Pauli.

La descripció matemàtica de sistemes fermiònics i bosònics presenta problemes diferents. L' ^3He , així com el gas d'electrons i la matèria nuclear que són els líquids de Fermi més importants, veuen complicat el seu càlcul per l'antisimetria de la funció d'ona, conseqüència del seu caràcter fermiònic. L'antisimetria, introduïda amb el determinant de Slater, dificulta i alenteix els càlculs.

Aquestes dificultats no apareixen en l' ^4He , que és un bosó. Això va permetre obtenir més ràpidament molt bons resultats per a l' ^4He , i de fet aquest va ser un dels primers sistemes quàntics estudiats. Ja l'any 1965, McMillan [Mc65] i independentment Levesque et al. [LKSV65], van fer càlculs sobre l'estat fonamental de l' ^4He líquid emprant l'algorisme de Metropolis.