



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
جامعة الشهيد حمدة لخضر\_ الوادي  
كلية العلوم الدقيقة \_ قسم الفيزياء



رقم الترتيب:  
رقم التسلسل:  
المجال: علوم المادة  
التخصص: فيزياء إشعاع وطاقة

مذكرة تخرج مقدمة لنيل:

**شهادة الماستر**

**العنوان:**

**هايبرد مونتي كارلو التكامل على المسار  
للهمزازات الكمية**

من إعداد: الطالب شابي أمجد

نوقشت يوم: 2026\06\06

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا

أستاذ محاضر أ

د.يسر زويبير

مناقشا

أستاذ محاضر ب

د.سوداني شيرين

مشرفا

أستاذ محاضر أ

د.أحميم رشيد

الموسم الجامعي: 2025\2026

# إهداء

الحمد لله الذي وفقني لإتمام هذا العمل.  
أهدي ثمرة جهدي هذا إلى والديّ الكريمين، تقديراً لما قدّماه لي من دعمٍ وتضحياتٍ طوال  
مسيرتي الدراسية، سائلاً الله أن يحفظهما ويجزيهما خير الجزاء.  
إلى إخوتي وأفراد عائلتي، الذين كانوا سنداً لي وشجعوني على مواصلة الطريق.  
إلى أساتذتي الكرام الذين أناروا دربي بالعلم والمعرفة، وإلى كل من ساهم من قريب أو بعيد في  
إنجاز هذه المذكرة.  
وإلى جميع زملائي وأصدقائي الذين رافقوني خلال سنوات الدراسة.  
أهدي هذا العمل المتواضع راجياً أن يكون خطوةً نحو مستقبلٍ أفضل وعلمٍ نافع.

# شكر و عرفان

بسم الله الرحمن الرحيم، والحمد لله رب العالمين، الذي بنعمته تتم الصالحات، والصلاة والسلام  
على سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم.

الحمد لله سبحانه وتعالى على ما أنعم به عليّ من توفيق وعون وصبر، والذي لولاه ما كان لهذا  
العمل أن يرى النور.

كما أتوجه بأسمى عبارات الشكر والتقدير والامتنان إلى الأستاذ المشرف رشيد أحميم، على ما  
قدمه من توجيهات علمية قيمة ونصائح سديدة، وعلى متابعته المستمرة وصبره طوال مراحل إنجاز  
هذه المذكرة.

وأقدم بجزيل الشكر إلى أعضاء لجنة المناقشة الموقرة: الأستاذ بسر زوير، رئيس لجنة المناقشة و  
الأستاذة سوداني شيرين، عضو لجنة المناقشة.

على تفضلهما بقراءة هذا العمل وتقييمه وإثرائه بملاحظتهما القيمة.

كما أتوجه بخالص الامتنان إلى الأستاذ فرحات رحومة، أستاذ المنهجية، لما قدمه من توجيهات  
وإرشادات ساهمت في تطوير هذا العمل وإثراء مسيرتي العلمية.

ولا يفوتني أن أعبر عن عميق شكري وامتناني ل: الشيخ خنوفة نور الدين و الطالبة جميلي منال  
على دعمهما ومساندتهما طيلة أطوار البحث.

وأقدم بالشكر إلى عائلتي الكريمة، وإلى الأحباب والأصدقاء ورفقاء الدراسة، وكل من ساندني  
وشجعني وقدم لي يد العون خلال سنوات الدراسة.

وفي الختام، أتوجه بالشكر إلى كل من ساهم في إنجاز هذا العمل من قريب أو بعيد، ولو بكلمة  
طيبة أو دعوة صادقة، راجياً من الله تعالى أن يجزي الجميع خير الجزاء.

# الفهرس

1	قائمة المصطلحات العلمية
1	المقدمة العامة
5	1 ميكانيك الكم غير النسبوي
5	1.1 تمهيد
5	2.1 معادلة شرودينغر
7	3.1 العلاقة بين تمثيل هايزنبرغ و تمثيل شرودينغر
8	4.1 تكامل فاينمان لميكانيك الكم غير النسبي
12	1.4.1 الانتقال إلى الزمن الإقليدي وتحويل ويك:
13	2.4.1 من سعة الانتقال إلى دالة التقسيم الإحصائية:
14	5.1 الخاتمة
17	2 مونتي كارلو على نموذج الهزازات الكمية
17	1.2 تمهيد
17	2.2 تعريف طريقة مونتي كارلو
18	3.2 الخطوات العامة لطريقة مونتي كارلو
18	4.2 إستخدام طريقة مونتي كارلو في تقدير التكاملات في بعد واحد
19	5.2 أنواع المعانيات في طريقة مونتي كارلو
21	6.2 تطبيقات طريقة مونتي كارلو
21	7.2 سلاسل ماركوف
22	8.2 خوارزمية ميتروبولوس
23	1.8.2 الخطوات العامة في خوارزمية ميتروبولوس
24	9.2 الارتباط الذاتي Auto-correlation
25	10.2 محاكاة نموذج الهزازات الكمية
27	11.2 الخاتمة
29	3 هايبرد مونتي كارلو على نموذج الهزازات الكمية
29	1.3 تمهيد
29	2.3 مونتي كارلو الهجينة Hybrid Monte Carlo

30	.....	معادلات هاميلتون	3.3
32	.....	خصائص الديناميك الهاملتوني	4.3
33	.....	طريقة الوثب الضفدعي Leapfrog Method	5.3
34	.....	بناء خوارزمية MCMC انطلاقاً من الديناميك الهاملتوني	6.3
34	.....	1.6.3 التوزيع الاحتمالي المشترك	
36	.....	2.6.3 ضبط معاملات خوارزمية HMC	
37	.....	3.6.3 خوارزمية HMC خطوة بخطوة	
39	.....	7.3 الارتباط الذاتي (Auto-correlation)	
41	.....	8.3 حساب الكميات الفيزيائية في النموذج	
41	.....	1.8.3 متوسط الموضع $\langle x \rangle$	
41	.....	2.8.3 متوسط مربع الموضع $\langle x^2 \rangle$	
42	.....	3.8.3 الطاقة المتوسطة $\langle E \rangle$	
42	.....	9.3 محاكاة نموذج الهزازات الكمية	
47	.....	10.3 نتائج محاكاة نموذج الهزازات الكمية	
57	.....	11.3 الخاتمة	

1

الخلاصة العامة

4

المراجع

6

الملخص

# قائمة الأشكال

9	مسار يربط بين النقطتين $x,t$ و $x',t'$ . . . . .	1.1
33	خطوات الوثب الضفدعي . . . . .	1.3
48	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي بطريقة HMC . . . . .	2.3
49	مقارنة بين نتائج محاكاة mc و hmc عند الف خطوة $mcsteps = 1000$ .	3.3
	مقارنة بين نتائج محاكاة mc و hmc عند عشرة الاف خطوة $= 10000$	4.3
50	مقارنة بين نتائج محاكاة mc و hmc عند مئة ألف خطوة $= 100000$	5.3
50	نتائج محاكاة دالة الترابط الذاتي في هايبرد موني كارلو hmc . . . . .	6.3
51	نتائج محاكاة دالة الترابط الذاتي في موني كارلو mc . . . . .	7.3
52	معدل القبول عند $\epsilon = 0.05$ . . . . .	8.3
53	معدل القبول عند $\epsilon = 0.43$ . . . . .	9.3
53	معدل القبول عند $\epsilon = -0.43$ . . . . .	10.3
53	معدل القبول عند $\epsilon = 1$ . . . . .	11.3
54	نتائج محاكاة الهزازات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة $\lambda = 0$ . . . . .	12.3
55	نتائج محاكاة الهزازات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة $\lambda = 1$ . . . . .	13.3
55	نتائج محاكاة الهزازات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة $\lambda = 100$ . . . . .	14.3
55	نتائج محاكاة الهزازات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة $\lambda = 1000$ . . . . .	15.3
56	الطاقة . . . . .	16.3

# قائمة المصطلحات العلمية

<i>Simple sampling</i>	معاينة بسيطة
<i>Importance sampling</i>	المعاينة الموجهة
<i>Path integral</i>	التكامل على المسار
<i>Propagator</i>	المنتشر
<i>Feynman kernel</i>	نواة فاينمان
<i>Minkowski time</i>	زمن مينكوفسكي
<i>Euclidean time</i>	الزمن الإقليدي
<i>Discretization</i>	التقسيم
<i>Path</i>	المسار
<i>Hot start</i>	الانطلاقة الساخنة
<i>Acceptance rate</i>	معدل القبول
<i>Monte Carlo time</i>	زمن مونتي كارلو
<i>Metropolis algorithm</i>	خوارزمية ميتروبوليس
<i>Markov chains</i>	سلاسل ماركوف
<i>Auto-correlation</i>	الارتباط الذاتي
<i>Leapfrog algorithm</i>	الوثب الضفدعي

# المقرمة العامة

## المقدمة العامة

شهدت الفيزياء الحديثة خلال القرن العشرين تطوراً جذرياً أدى إلى ظهور ميكانيك الكم بوصفه إطاراً نظرياً جديداً لمعالجة العديد من الظواهر التي عجزت الفيزياء الكلاسيكية عن تفسيرها، مثل إشعاع الجسم الأسود والتأثير الكهروضوئي والبنية الطيفية للذرات. وقد مثل هذا التطور تحولاً عميقاً في فهم الطبيعة على المستوى المجهرى، حيث استبدلت الحتمية الكلاسيكية بالوصف الاحتمالي، وأصبح مبدأ عدم التحديد أحد الركائز الأساسية للنظرية الكمومية.

يُدرّس ميكانيك الكم عادةً من خلال صياغتين أساسيتين هما صياغة شرودينغر وصياغة هايزنبرغ، اللتان تنطلقان من البنية الهاملتونية للميكانيك الكلاسيكي وتعتمدان على مفاهيم رياضية متكافئة رغم اختلافهما الشكلي. ففي حين تصف صياغة شرودينغر تطور الدالة الموجية مع الزمن، تركز صياغة هايزنبرغ على تطور المؤثرات الفيزيائية نفسها. وقد شكلت هاتان الصياغتان الأساس التقليدي لدراسة الأنظمة الكمومية المختلفة. [2,1]

في سنة 1933 اقترح ديراك مقاربة جديدة تعتمد على ميكانيك لاغرانج، مفادها أن سعة الانتقال الكمومية ترتبط بالوزن  $\exp(iS/\hbar)$  حيث يمثل  $S$  الفعل الكلاسيكي. وقد طور فاينمان هذه الفكرة سنة 1948 فيما عُرف لاحقاً بصياغة التكامل على المسار، والتي تنص على أن انتقال الجسم بين حالتين يتم عبر جميع المسارات الممكنة بينهما، بحيث يساهم كل مسار بسعة احتمالية معينة. وقد قدمت هذه الصياغة تصوراً جديداً للظواهر الكمومية قائماً على تراكم المسارات بدل المسار الكلاسيكي الوحيد. [3--5]

تعد صياغة التكامل على المسار من أكثر الصياغات أهمية في ميكانيك الكم، ليس فقط لكونها مكافئة للصياغات التقليدية، بل أيضاً بسبب تطبيقاتها الواسعة في نظرية الحقول الكمومية والميكانيك الإحصائي والأنظمة العشوائية. كما أنها توضح بصورة طبيعية كيفية استرجاع الحد الكلاسيكي عندما تصبح قيمة ثابت بلانك المصغر  $\hbar$  صغيرة، حيث تهيمن مساهمة المسار الكلاسيكي على باقي المسارات. [3]

ورغم نجاح الحلول التحليلية في وصف بعض الأنظمة البسيطة كالجسيم الحر والهزاز التوافقي الكمومي وذرة الهيدروجين، فإن معظم الأنظمة الفيزيائية الواقعية تكون أكثر تعقيداً، مما يجعل

الحلول الدقيقة صعبة أو مستحيلة. لذلك أصبحت الطرق العددية أداة أساسية لدراسة هذه الأنظمة، خاصة مع التطور الكبير في قدرات الحوسبة الحديثة.

ومن بين أهم هذه الطرق طرق مونت كارلو التي تعتمد على التوليد العشوائي للعينات من أجل حساب المتوسطات الفيزيائية. وقد ازدادت فعاليتها عند دمجها مع صياغة التكامل على المسار بعد إجراء تحويل ويك والانتقال إلى الزمن الإقليدي، حيث يتحول العامل التذبذبي  $\exp(iS/\hbar)$  إلى عامل أسّي متناقص يعتمد على الفعل الإقليدي، مما يجعل المسألة الكمومية مشابهة لمسائل الميكانيك الإحصائي وقابلة للمعالجة العددية بكفاءة. [6,7]

يقوم أسلوب التكامل على المسار بمونت كارلو على استبدال التكامل المستمر على جميع المسارات الممكنة بمسألة عددية معرفة على شبكة زمنية متقطعة، الأمر الذي يسمح بحساب العديد من الكميات الفيزيائية المهمة مثل متوسطات المدركات و دوال الارتباط. غير أن طريقة مونت كارلو التقليدية تعاني غالباً من مشكلة الارتباط الذاتي بين التشكيلات المتعاقبة، مما يؤدي إلى انخفاض الكفاءة الإحصائية وزيادة زمن المحاكاة المطلوب للحصول على نتائج دقيقة.

وللتغلب على هذه الصعوبة ظهرت طريقة مونت كارلو الهجينة (Hybrid Monte Carlo) التي تجمع بين الديناميكا الجزيئية وخوارزمية ميتروبوليس. وتتميز هذه الخوارزمية بقدرتها على اقتراح انتقالات بعيدة في فضاء التشكيلات مع المحافظة على التوزيع الاحتمالي الصحيح، مما يؤدي إلى تقليل الارتباط الذاتي وتحسين كفاءة الاستكشاف الإحصائي، خاصة في الأنظمة ذات الأبعاد المرتفعة. وقد أثبتت فعاليتها في العديد من تطبيقات الفيزياء النظرية والحاسوبية. [8]

وقد تناولت العديد من الدراسات تطبيق وتطوير خوارزميات مونت كارلو في إطار التكامل على المسار. فقد قدم Westbroek وآخرون في مقالهم عرضاً عملياً لمحاكاة التكاملات على المسار باستخدام الهزاز التوافقي الكومي، مع التركيز على معالجة الارتباط الذاتي وتقدير الأخطاء الإحصائية [9]. كما استعرض Joseph في عمله الأسس النظرية والعددية لطرق ماركوف-مونت كارلو وتطبيقاتها في نظريات الحقول الكمومية [8]. ومن جهة أخرى، اقترح Ostmeyer و Buividovich في مقالهم طريقة لتقليل الارتباط الذاتي في محاكاة HMC وتحسين كفاءة أخذ العينات من خلال التسريع الفورييري الدقيق [10].

على الرغم من هذه المزايا، فإن الدراسات التي تقارن بصورة منهجية بين أداء طريقة HMC وطريقة مونت كارلو التقليدية في إطار التكامل على المسار تبقى محدودة، حتى بالنسبة لأنظمة بسيطة تمتلك حلولاً تحليلية دقيقة مثل الهزاز التوافقي الكومي. ومن هنا تنبع أهمية هذا العمل الذي يهدف إلى تقييم دقة وكفاءة طريقة هايبرد مونت كارلو HMC ومقارنتها بكل من الحلول التحليلية والعددية لطريقة مونت كارلو التقليدية.

تمثل إشكالية البحث في دراسة مدى فعالية صياغة التكامل على المسار والخوارزميات العددية المرتبطة بها وخاصة طريقة HMC في وصف الأنظمة الكمومية والحصول على نتائج فعالة حسابياً

مع اتخاذ الهزاز التوافقي الكومبي نموذجاً للدراسة والمقارنة. ولتحقيق هذا الهدف، تم تقسيم المذكرة إلى ثلاثة فصول. يتناول الفصل الأول الأسس النظرية لميكانيك الكم وصياغة التكامل على المسار وتطبيقها على الهزاز التوافقي الكومبي. أما الفصل الثاني فيُخصص لخوارزميات مونت كارلو التقليدية وتطبيقاتها العددية. في حين يُعنى الفصل الثالث بدراسة طريقة HMC وتطبيقها على النظام نفسه، ثم مقارنة نتائجها بالحلول التحليلية وبتأثير مونت كارلو التقليدية. وتُختتم المذكرة بخاتمة عامة تتضمن أهم النتائج المتوصل إليها وآفاق تطوير هذا العمل مستقبلاً.

# الفصل الأول:

مباني اللغة غير النسبوي

# الفصل 1

## ميكانيك الكم غير النسبوي

### 1.1 تمهيد

يُعدّ ميكانيك الكم غير النسبي أحد أهم الأسس النظرية في الفيزياء الحديثة، إذ يوفر الوصف الدقيق لسلوك الأنظمة المجهرية مثل الذرات والجسيمات الأولية والاهتزازات الكمومية. ويعالج هذا الإطار الفيزيائي الظواهر التي عجزت الميكانيكا الكلاسيكية عن تفسيرها. يعتمد هذا الوصف على مفاهيم جديدة تتمثل في دالة الموجة، المؤثرات الكمومية واحتمالات القياس، مما أدى إلى إعادة صياغة القوانين الفيزيائية بصورة احتمالية بدلاً من الوصف الحتمي الكلاسيكي. [11]

في هذا الفصل سنعرض المبادئ الأساسية لميكانيك الكم غير النسبي انطلاقاً من معادلة شرودينغر وتطور الحالة الكمومية، ثم نتناول العلاقة بين تمثيلي شرودينغر وهايزنبرغ باعتبارهما صيغتين متكافئتين لوصف الأنظمة الكمومية. بعد ذلك ننتقل إلى صياغة تكامل المسار لفانمان، حيث يتم التعبير عن السعات الكمومية باعتبارها مجموعاً على جميع المسارات الممكنة. كما سنستعرض الانتقال إلى الزمن الإقليدي وتحويل ويك، وصولاً إلى كتابة دالة التقسيم الإحصائية للهزاز التوافقي الكوموي في الصيغة الإقليدية، وهي الصيغة التي تُستخدم لاحقاً في الحسابات العددية والمحاكاة.

### 2.1 معادلة شرودينغر

تُعدّ معادلة إرفين شرودنغر حجر الأساس في صياغة ميكانيك الكم، إذ توفر الوصف الرياضي لتطور الحالة الكمومية للنظام الفيزيائي مع الزمن. فعلى خلاف الميكانيك الكلاسيكي الذي يعتمد على تحديد مسار الجسيم بدقة، يقوم الوصف الكوموي على دالة الموجة التي تحتوي على جميع المعلومات الممكنة حول النظام. وتحدد هذه المعادلة كيفية تغير دالة الموجة تحت تأثير مؤثر الهاميلتونيان، الذي يمثل الطاقة الكلية للنظام، مما يسمح باستخلاص الخواص الديناميكية والفيزيائية المختلفة

مثل احتمالات القياس وتطور القيم المتوقعة للمؤثرات الفيزيائية. لذلك تشكل معادلة شرودنغر نقطة الانطلاق الأساسية لفهم ديناميكا الأنظمة الكمومية في الإطار غير النسبي. [11] يصف شرودنغر ميكانيك الكم من خلال المعادلة:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

ولإيجاد الحل العام لها، نفترض أن مؤثر الهاميلتوني لا يعتمد صراحة على الزمن، مما يسمح بإجراء فصل للمتغيرات والتكامل المباشر من الحالة الابتدائية إلى الحالة النهائية:

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{|\psi(t)\rangle} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} dt$$

$$\int_{|\psi(t_0)\rangle}^{|\psi(t)\rangle} \frac{d|\psi(t)\rangle}{|\psi(t)\rangle} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H} dt$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \quad (2.1)$$

يمثل مؤثر التطور الزمني  $U(t, t_0)$  المؤثر الذي يصف تطور الحالة الكمومية للنظام من الزمن الابتدائي  $t_0$  إلى الزمن  $t$ .

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \quad (3.1)$$

وبذلك يصبح تطور الحالة الكمومية بالشكل:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (4.1)$$

ولانتقال إلى تمثيل الموضع و بإدخال علاقة الانغلاق على شعاع الحالة نحصل على :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{I} |\psi(t)\rangle \quad (5.1)$$

حيث

$$\hat{I} = \int |x\rangle \langle x| dx$$

وبالتالي:

$$|\psi(t)\rangle = \int dx |x\rangle \langle x| \psi(t)\rangle \quad (6.1)$$

أي

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle \quad (7.1)$$

### 3.1 العلاقة بين تمثيل هايزنبرغ و تمثيل شرودينغر

ترتبط صياغتا شرودينغر وهايزنبرغ بكونهما تمثلاً وصفيين مكافئين لميكانيك الكم، حيث يختلفان فقط في طريقة تمثيل التطور الزمني. ففي صياغة شرودينغر يكون التطور الزمني محمولاً على شعاع الحالة، بينما تبقى المؤثرات ثابتة. في المقابل، في صياغة هايزنبرغ تبقى الحالة ثابتة مع الزمن، وينتقل التطور الزمني إلى المؤثرات، مع الحفاظ على نفس النتائج الفيزيائية في كلا الصيغتين. [3] لتوضيح هذه العلاقة، نبدأ من المعادلة (7.1) كدالة الموجة في صياغة شرودينغر:

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle_S \quad (8.1)$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (9.1)$$

بعد تعويض شعاع الحالة بما يساويه يمكن التعبير عن دالة الموجة نفسها في صياغة هايزنبرغ كالآتي:

$$\psi(x, t) = \langle x, t | \psi(t_0) \rangle_H \quad (10.1)$$

أما بالنسبة لمؤثر الموضع، ففي صياغة شرودينغر نكتب:

$$\hat{X}_S |x\rangle = X |x\rangle \quad (11.1)$$

ثم نقوم بإدخال مؤثر التطور الزمني:

$$\hat{X}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x\rangle = X e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x\rangle \quad (12.1)$$

$$\hat{X}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x, t\rangle = X e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x, t\rangle \quad (13.1)$$

بضرب الطرفين من اليسار بـ  $e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$  نحصل على:

$$e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{X}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x, t\rangle = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} X e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x, t\rangle \quad (14.1)$$

وبالتالي نصل إلى مؤثر الموضع في صياغة هايزنبرغ:

$$\hat{X}_H |x, t\rangle = X |x, t\rangle \quad (15.1)$$

حيث:

$$\hat{X}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{X}_S e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \quad (16.1)$$

$$|x, t\rangle = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |x\rangle \quad (17.1)$$

والآن، نكتب في صياغة شرودينغر وننطلق من المعادلة الأساسية:

$$\langle x' | \psi(t') \rangle = \langle x' | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} \hat{I} | \psi(t) \rangle \quad (18.1)$$

باستخدام علاقة الإنغلاق:

$$\langle x' | \psi(t') \rangle = \int dx \langle x' | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} | x \rangle \langle x | \psi(t) \rangle \quad (19.1)$$

حيث

$$K(x', t'; x, t) = \langle x' | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} | x \rangle \quad (20.1)$$

أما من صياغة هايزنبرغ، فيمكننا كتابة:

$$\langle x' | \psi(t') \rangle = \langle x', t' | \psi \rangle_H \quad (21.1)$$

$$\langle x', t' | \psi(t) \rangle = \int dx \langle x', t' | x, t \rangle \langle x, t | \psi \rangle_H \quad (22.1)$$

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \langle x' | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} | x \rangle = K(x', t'; x, t) \quad (23.1)$$

يسمى  $K(x', t'; x, t)$  بالمنتشر أ سعة الانتقال (نواة فاينمان feynman kernal) الغاية من حسابه هو حل معادلة شرودينغر

$$\psi(x', t') = \int dx K(x', t'; x, t) \psi(x, t) \quad (24.1)$$

بات واضحاً الآن أن التكامل على المنتشر يؤدي للحصول على دالة الموجة، بعبارة أخرى حل معادلة شرودينغر دون الرجوع إلى المؤثرات أو فضاء هيلبرت الشعاعي

## 4.1 تكامل فاينمان لميكانيك الكم غير النسبي

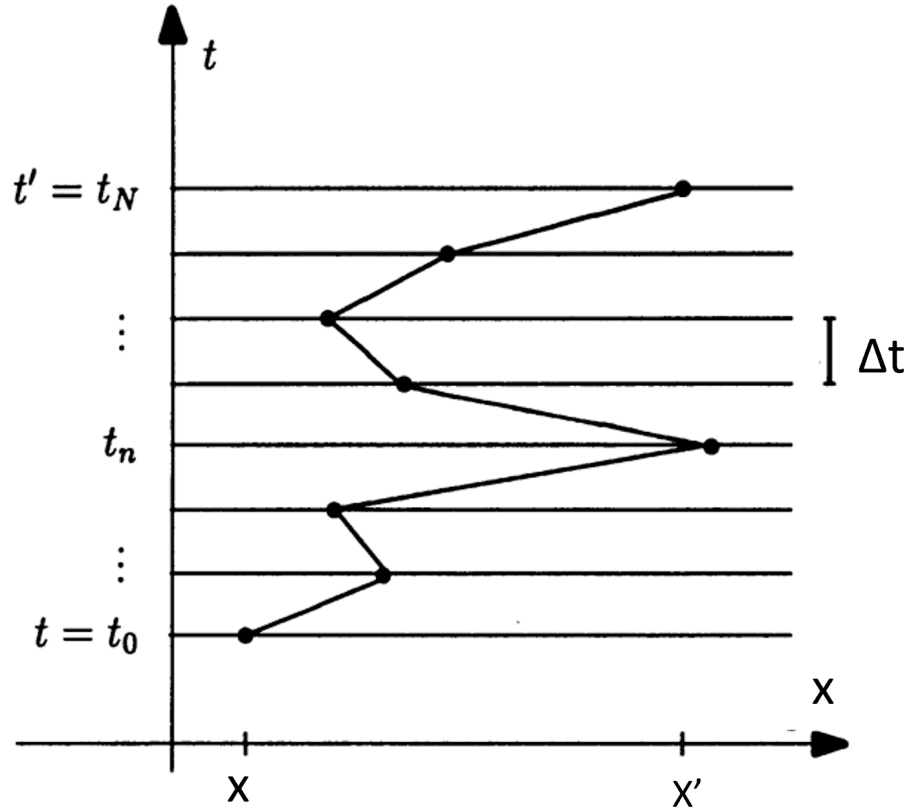
يتطلب الوصول إلى صيغة فاينمان حساب المنتشر وفيه يقسم محور الزمن إلى أجزاء صغيرة متساوية نكتوة أولى [12,3]:

$$t' = t + N \Delta t \Rightarrow \Delta t = \frac{t' - t}{N}$$

بعد ذلك نحسب سعة الانتقال للجسيم بين موضعين متتاليين، أي السعة التي تمثل انتقال الجسيم من الموضع  $x_i$  عند اللحظة  $t_i$  إلى الموضع  $x_{i+1}$  عند اللحظة  $t_{i+1}$ . في الخطوة الموالية نقوم بمضاعفة هذه السعات لجميع الفترات الزمنية الصغيرة للحصول على سعة انتقال الجسيم من الموضع  $x$  عند الزمن  $t$  إلى الموضع  $x'$  عند الزمن  $t'$  عبر مسار محدد يمر بالنقاط الوسيطة

$$[12] \cdot x_1, x_2, \dots, x_{N-1}$$

وأخيراً، نحصل على السعة الكلية للانتقال من خلال جمع مساهمات جميع المسارات الممكنة التي تربط بين النقطتين  $x$  و  $x'$ .



شكل 1.1: مسار يربط بين النقطتين  $x, t$  و  $x', t'$

لصيغة ذلك رياضياً، نستخدم خاصية التجميع لسعات الاحتمال:

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \int dx_1 \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle \quad (25.1)$$

$$= \int dx_1 dx_2 \langle x_N, t_N | x_2, t_2 \rangle \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle \quad (26.1)$$

$$= \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle \quad (27.1)$$

من هنا، نعبر عن السعة بين خطوتين زمنيتين متتاليتين بواسطة مؤثر التطور:

$$\langle x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i \rangle = \langle x_{i+1} | e^{-\frac{i\hat{H}(t_{i+1}-t_i)}{\hbar}} | x_i \rangle \quad (28.1)$$

$$= \langle x_{i+1} | e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_i \rangle$$

ثم نقوم بإدخال علاقات الإنغلاق في فضاء الدفع:

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| = \mathbb{1} \quad (29.1)$$

تظهر هذه العلاقة نتيجة اختيار تعريف مختلف للحالات الذاتية في فضاء الدفع بما يحقق شرط التنظيم. ففي هذه الحالة تصبح علاقة التعامد [3]

$$\langle p|p' \rangle = 2\pi\hbar \delta(p - p') \quad (30.1)$$

لذلك يظهر العامل  $\frac{1}{2\pi\hbar}$  لضمان الحصول على مؤثر الوحدة  $\mathbb{1}$ .

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle &= \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \\ &\times \langle x_N, t_N | p_{N-1} \rangle \langle p_{N-1} | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \langle x_1, t_1 | p_0 \rangle \langle p_0 | x_0, t_0 \rangle \end{aligned} \quad (31.1)$$

ويمكن أيضا كتابة:

$$\begin{aligned} \langle x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i \rangle &= \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \langle x_{i+1}, t_{i+1} | p_i \rangle \langle p_i | x_i, t_i \rangle \\ &= \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \langle x_{i+1} | p_i \rangle \langle p_i | e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_i \rangle \end{aligned} \quad (32.1)$$

بما أن  $\Delta t$  صغير بما فيه الكفاية يمكن اذن استعمال نشر تايلور

$$e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}} \approx 1 - \frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (33.1)$$

وبالتعويض نحصل على:

$$\begin{aligned} \langle p_i | e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_i \rangle &= \langle p_i | 1 - \frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar} + \mathcal{O}(\Delta t^2) | x_i \rangle \\ &= \langle p_i | 1 | x_i \rangle - \langle p_i | \frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar} | x_i \rangle + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \langle p_i | x_i \rangle - \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle p_i | \hat{H} | x_i \rangle + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (34.1)$$

وبالتالي تصبح السعة:

$$\langle x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i \rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \langle x_{i+1} | p_i \rangle \left[ \langle p_i | x_i \rangle - \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle p_i | \hat{H} | x_i \rangle \right] \quad (35.1)$$

نعوض الان بالعلاقة  $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$

$$\langle x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i \rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_i x_{i+1}} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar}p_i x_i} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle p_i | \hat{H} | x_i \rangle \right] \quad (36.1)$$

وبتبسيط العوامل:

$$\langle x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i \rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_i(x_{i+1}-x_i)} \left[ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \frac{\langle p_i | \hat{H} | x_i \rangle}{\langle p_i | x_i \rangle} \right] \quad (37.1)$$

هنا نستخدم الخاصية الأساسية لتمثيل الهاميلتوني في فضاء الدفع الخطي والموضع:

$$\langle p | \hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) | x \rangle = H(p, x) \langle p | x \rangle \quad (38.1)$$

وبالتالي يختصر الكسر إلى:

$$\frac{\langle p | \hat{H} | x \rangle}{\langle p | x \rangle} = \frac{H(p, x) \langle p | x \rangle}{\langle p | x \rangle} = H(p, x) \quad (39.1)$$

الآن، نلاحظ أن القوس

$$\left[ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(p_i, x_i) \right]$$

ليس سوى النشر من الرتبة الأولى للدالة الأسية

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(p_i, x_i) \Delta t\right).$$

لذلك يمكننا إعادة كتابة السعة بشكل أبسط.

$$\langle x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i \rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_i (x_{i+1} - x_i) - \frac{i}{\hbar} H(p_i, x_i) \Delta t\right] \quad (40.1)$$

والآن لنعد إلى التعبير الكامل للسعة بين النقطتين الابتدائية والنهائية في المعادلة (31.1) ونعوض بهذه النتيجة:

$$(41.1)$$

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \int dx_1 \dots dx_{N-1} \prod_{i=0}^{N-1} \left[ \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_i (x_{i+1} - x_i) - \frac{i}{\hbar} H(p_i, x_i) \Delta t\right) \right]$$

نقوم بتجميع العوامل الأسية في أس واحد:

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \int \left( \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \right) \left( \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} (p_i (x_{i+1} - x_i) - H(p_i, x_i) \Delta t)\right] \quad (42.1)$$

لجعل الصيغة أكثر وضوحاً، نخرج عامل  $\Delta t$  من المجموع:

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \int \left( \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \right) \left( \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \Delta t \left( p_i \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} - H(p_i, x_i) \right)\right] \quad (43.1)$$

نتقل الآن إلى النهاية المتصلة عندما يؤول  $N$  إلى ما لا نهاية، حيث نعرف مقاييس التكامل المستمرة:

$$\mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \quad (44.1)$$

$$\mathcal{D}p = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \quad (45.1)$$

كما نعرف أن السرعة اللحظية والتكامل الزمني يتم تعريفهما بالشكل:

$$\begin{aligned} \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} &\rightarrow \dot{x}(t_i) & (N \rightarrow \infty) \\ \sum_{i=0}^{N-1} \Delta t f(x_i, p_i) &\rightarrow \int_{t_0}^{t_N} dt f(x(t), p(t)) & (\Delta t \rightarrow 0) \\ \Rightarrow \sum_{i=0}^{N-1} \Delta t \left[ p_i \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} - H(p_i, x_i) \right] &\rightarrow \int_{t_0}^{t_N} dt [p\dot{x} - H(p, x)] \end{aligned}$$

وبالتالي نحصل على الصيغة النهائية لتكامل المسار في زمن مينكوفسكي:

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_N} dt (p\dot{x} - H) \right] \quad (46.1)$$

### 1.4.1 الانتقال إلى الزمن الإقليدي وتحويل ويك:

للتحول من زمن مينكوفسكي إلى الزمن الإقليدي نلجأ إلى هذا الإجراء لأن الحسابات العددية تكون ممكنة عملياً فقط في الفضاء الإقليدي، حيث أن التذبذبات السريعة للدالة الأسية في التكامل ضمن زمن مينكوفسكي تجعل التقييم العددي غير مستقر [3, 12, 13]. ولتجاوز هذه الصعوبة، يتم إدخال زمن تخيلي في الأس عبر الاستبدال  $t \rightarrow -i\tau$ . ويتم تدوير الفعل إلى فعل إقليدي من خلال التغيير التالي:

$$t = -i\tau \Rightarrow dt = -i d\tau$$

نبدأ بتعريف الفعل في صيغة المسار:

$$S = \int_{t_0}^{t_N} dt (p\dot{x} - H) \quad (47.1)$$

حيث تظهر السعة الكمومية على شكل أسّي متذبذب:

$$\exp \left( \frac{i}{\hbar} S \right)$$

بعد إجراء تحويل ويك ينتقل الفعل إلى الصيغة الإقليدية:

$$S \rightarrow -iS_E$$

وبالتالي تتحول السعة من طور متذبذب إلى وزن أسّي متناقص:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \rightarrow \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_E\right)$$

ومن ثم تصبح دالة الانتقال ممثلة كتكامل على المسارات في الزمن الإقليدي:

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_E(x)\right) \quad (48.1)$$

### 2.4.1 من سعة الانتقال إلى دالة التقسيم الإحصائية:

نأخذ الحالة الخاصة حيث تتطابق البداية والنهاية، أي  $x' = x$  أي هذا يعني أننا نغلق المسار وبالتالي لا ندرس انتقالاً بل دورة مغلقة في الزمن الإقليدي. من خلال أخذ الأثر (Trace) على الحالات الموضعية [9]، نحصل على:

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \quad (49.1)$$

هذا التعبير يعني أننا نجمع جميع المسارات التي تبدأ وتنتهي عند نفس النقطة، أي أننا نحول المشكلة إلى مسارات دورية في الزمن الإقليدي. وبسبب شرط الإغلاق، تصبح المسارات دورية:

$$x(\tau + \beta) = x(\tau)$$

وهكذا يتحول التكامل على الحالات إلى تكامل على جميع المسارات الدورية:

$$Z = \int_{\text{periodic}} \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_E[x]\right) \quad (50.1)$$

حيث تمثل هذه الصيغة دالة التقسيم (*Partition Function*)، أي الوصف الإحصائي الكامل للنظام في الزمن التخيلي.

في هذا العمل ندرس الهزاز الكمي اللاخطي (*Anharmonic Oscillator*)، حيث يُعطى الهاميلتوني بالشكل:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda m^2 \omega^3 x^4$$

ويمثل الحد الأخير  $x^4$  تصحيحاً لاخطياً للهزاز التوافقي، يؤدي إلى انحراف الجهد عن الشكل التربيعي البسيط. وسنستخدم هذا الهاميلتوني مباشرة في صياغة دالة التقسيم في الزمن الإقليدي

دون التطرق إلى البرهان التفصيلي، مع الاكتفاء بذكر العلاقات الأساسية المؤدية إلى الصيغة النهائية.

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

$$= \int_{\text{periodic}} \mathcal{D}x \mathcal{D}p \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^\beta d\tau \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda m^2 \omega^3 x^4 - ip\dot{x} \right) \right]$$

نقوم أولاً بإعادة ترتيب الجزء المعتمد على الزخم  $p$  داخل الأس وإكمال المربع:

$$\frac{p^2}{2m} - ip\dot{x} = \frac{1}{2m} (p - im\dot{x})^2 + \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

وبالتالي يصبح التكامل على  $p$  تكاملاً غاوسياً لا يعتمد على  $x$ ، ويُدمج ضمن عامل ثابت ناتج عن التكامل الغاوسي:

$$\int \mathcal{D}p \exp(\dots) \rightarrow \text{ثابت}$$

إذا نحصل على الصيغة الإقليدية النهائية:

$$Z = \int_{\text{periodic}} \mathcal{D}x \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^\beta d\tau \left( \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda m^2 \omega^3 x^4 \right) \right] \quad (51.1)$$

حيث يُعطى الفعل الإقليدي بالشكل:

$$S_E = \int_0^\beta d\tau \left( \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda m^2 \omega^3 x^4 \right) \quad (52.1)$$

يتضح من خلال هذه الصياغة أن السلوك الكومي للجسيم لا يُوصف بمسار وحيد كما في الميكانيك الكلاسيكي، بل ينتج عن تراكم مساهمات جميع المسارات الممكنة، حيث يحدد الفعل الإقليدي وزن كل مسار في دالة التقسيم. كما يؤدي الحد اللاخطي  $x^4$  إلى جعل التكاملات المسارية غير قابلة للحل التحليلي بشكل دقيق في أغلب الحالات، وهو ما يبرر اللجوء إلى الطرق العددية، مثل خوارزميات مونت كارلو، لدراسة الخواص الفيزيائية لهذا النظام [9].

## 5.1 الخاتمة

تناولنا في هذا الفصل الأسس النظرية لميكانيك الكم غير النسبي انطلاقاً من معادلة شرودينغر التي تصف التطور الزمني للحالة الكومية، ثم بينا التكافؤ بين تمثيلي شرودينغر وهايزنبرغ من خلال نقل

التطور الزمني من الحالات إلى المؤثرات. كما تم تقديم المنتشر الكمومي باعتباره سعة انتقال بين حالتين، الأمر الذي مهد لبناء صياغة تكامل المسار لفاينمان.

بعد ذلك قمنا باشتقاق صيغة تكامل المسار انطلاقاً من تقسيم الزمن إلى فترات صغيرة وإدخال علاقات الإنغلاق في فضائي الموضع والدفع، لنصل في النهاية إلى التعبير المستمر لتكامل المسار في زمن مينكوفسكي. ثم أجرينا تحويل ويك نحو الزمن الإقليدي، وهو تحويل أساسي يسمح بالتخلص من الطبيعة التذبذبية للتكاملات الكمومية وجعلها قابلة للمعالجة العددية. وأخيراً تم الحصول على الصيغة الإقليدية لدالة التقسيم الخاصة بالهزاز التوافقي الكمومي، والتي تشكل نقطة الانطلاق للدراسة العددية والمحاكاة باستعمال طرق مونت كارلو التي سيتم توظيفها في الفصول اللاحقة.

# الفصل الثاني:

مؤتي آثار لو علمي غوفج

الغز الزارج الكمية

## الفصل 2

# مونتي كارلو على نموذج الهزازات الكمية

### 1.2 تمهيد

بعد أن تناولنا في الفصل السابق صياغة تكامل المسار لفاينمان وتوصلنا إلى الصيغة الإقليدية لدالة التقسيم الخاصة بالهزاز التوافقي الكومي، أصبحت هذه الصيغة أساساً مهماً للدراسة العددية، خاصة أن معالجة التكاملات الناتجة عنها تحليلاً تصبح صعبة في العديد من الحالات. وفي هذا السياق، تبرز الطرق العددية باعتبارها أدوات أساسية لمعالجة مثل هذه المسائل، حيث تسمح بإيجاد حلول تقريبية لأنظمة يصعب حلها بالطرق التحليلية التقليدية. ومن بين أهم هذه الطرق، نجد طريقة مونتي كارلو التي تعتمد على التوليد العشوائي في حساب التكاملات ومحاكاة الأنظمة الفيزيائية. في هذا الفصل سنعرض طريقة مونتي كارلو باعتبارها من أهم الأساليب القائمة على التوليد العشوائي، كما سنتناول سلاسل ماركوف وخوارزمية ميتروبوليس باعتبارهما من الأدوات الأساسية في توليد العينات وفق التوزيعات الاحتمالية المطلوبة، تمهيداً لتطبيقها لاحقاً في المحاكاة العددية للنظام المدروس.

### 2.2 تعريف طريقة مونتي كارلو

تعدّ طريقة مونتي كارلو من التقنيات الحاسوبية القوية المستخدمة لحل المسائل المعقدة، وقد سُميت بهذا الاسم نسبةً إلى كازينو مونتي كارلو نظراً لاعتمادها على العشوائية. وتُعرف بأنها طريقة إحصائية تقوم على توليد عينات عشوائية لتقدير حلول مسائل معينة بالاعتماد على نظرية الاحتمالات. [6]

## 3.2 الخطوات العامة لطريقة مونتي كارلو

تمر خطوات مونتي كارلو بأربعة مراحل مهمة. [15,14]

1. تحديد المشكلة والمتغيرات: تبدأ محاكاة مونتي كارلو بتحديد المشكلة بدقة، مع تحديد المتغيرات ونطاقها وتوزيعها لضمان نتائج ذات معنى.
2. توليد القيم العشوائية: يتم توليد قيم عشوائية وفق توزيعات مناسبة، بالاعتماد على معطيات متاحة أو فرضيات مدروسة.
3. تنفيذ المحاكاة: تُجرى المحاكاة عبر أخذ عينات متكررة، حيث يمثل كل تكرار سيناريو محتملاً للنظام.
4. تحليل النتائج: تُحلل النتائج بدراسة توزيعها واستخلاص الكميات المهمة وتقدير عدم اليقين.

## 4.2 إستخدام طريقة مونتي كارلو في تقدير التكاملات في بعد واحد

من أبسط الأمثلة على إستعمال طريقة مونتي كارلو هي تقدير التكاملات في بعد واحد من خلال المعاينة البسيطة لدالة  $f(x)$  عند  $N$  نقطة  $x_i$  مأخوذة بشكل عشوائي، ثم يتم أخذ متوسط قيم الدالة عند نقاط المعاينة المولدة لنفرض انه لدينا التكامل التالي:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

نريد حسابه بطريقة مونتي كارلو من خلال المعاينة البسيطة، حيث أنه يتم توليد  $N$  نقطة عشوائية ذات القيمة  $x_i$  بتوزيع منتظم فيكون احتمال مساهمتها في التكامل ( $w_i=1$ ) إذا كانت داخل مجال المكاملة  $[a,b]$ ، وإحتمال مساهمتها في التكامل ( $w_i=0$ ) إذا كانت خارج المجال. ومن ثم نستبدل التكامل بالجمع على قيم الدالة عند كل نقطة مولدة بشكل عشوائي [16,6] فتكون القيمة التقديرية لتكامل كالتالي

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N w_i f(x_i)$$

$$I = (b-a) \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i f(x_i) \right] = (b-a) \langle f \rangle$$

يمكن توليد نقطة  $N$  عشوائية  $x_i$  مباشرة داخل المجال  $[a,b]$  حيث تكون  $w_i=1$  ويكون التكامل مباشرة من الشكل:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = (b-a) \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right] = (b-a) \langle f \rangle$$

تسمى هذه الطريقة بطريقة متوسط العينة.

ويمكن تعميمها بالنسبة للتكاملات ذات أبعاد عديدة عبر الجمع على حجم التكامل  $V$ :

$$I = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \\ = \frac{V}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^n) H(x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^n)$$

حيث أن:

$$H(x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^n) = \begin{cases} 1 & \Leftarrow (x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^n) \in V \\ 0 & \Leftarrow (x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^n) \notin V \end{cases}$$

## 5.2 أنواع المعاينات في طريقة مونتي كارلو

الفكرة الأساسية للمعاينة تتمثل في اختيار عينة من مجتمع إحصائي كبير جداً، بحيث يتمكن الباحث من دراستها وتحليلها، ثم استنتاج القيم أو الخصائص المطلوب قياسها انطلاقاً منها. وتنقسم هذه المعاينة إلى عدة أنواع، لكن نهم بنوعين أساسيين لكثرة إستخدامها في طريقة مونتي كارلو لمعالجة الظواهر الفيزيائية المختلفة وهي:

✓ المعاينة العشوائية البسيطة : تُعد من أبسط أساليب أخذ العينات، حيث يتم اختيار عناصرها بطريقة عشوائية دون أي توجيه أو قصد. تُستخدم هذه الطريقة عندما يكون المجتمع الإحصائي متجانساً بالنسبة للخاصية أو الهدف محل الدراسة. ومن الأمثلة على ذلك توليد نقاط عشوائية تُستعمل في حساب التكاملات البسيطة في بعد واحد كما ذُكر سابقاً، إذ تكون جميع هذه النقاط متساوية في مساهمتها في تقدير قيمة التكامل دون إعطاء أولوية لمجموعة دون أخرى. [15,14]

✓ المعاينة الموجهة : تعتمد على العينات الشبه عشوائية والتي يتم إختيارها بصورة متعمدة ومقصودة من قبل الباحث لتلبية إحتياجات بحثه وتنقسم إلى:

• العينة المقصودة : هي العينة التي يتم إختيارها عند التعامل مع مجتمعات متجانسة، حيث يعتمد الباحث على انتقاء المفردات بشكل مقصود ومباشر وفقاً لما يخدم هدف الدراسة. [15,14]

• العينة الحصصية : تشبه هذه العينة تلك المستخدمة في المعاينة الطبقيّة العشوائية، حيث تُستعمل عند دراسة مجتمعات غير متجانسة تتكوّن من طبقات متعددة. غير أن الاختلاف يكمن

في أن الباحث، بعد تقسيم المجتمع الإحصائي إلى طبقات، يقوم باختيار مفردات العينة داخل كل طبقة بطريقة مقصودة وليست عشوائية. [15,14]

كمثال على المعاينة القصدية وبيان الهدف من استخدامها في طريقة مونتي كارلو، سنحاول بنفس الأسلوب تقدير التكامل السابق الوارد في المعادلة . لكننا نفترض في هذه الحالة أن الدالة تكون مركزة أو ضيقة عند فترات معينة داخل المجال  $[a,b]$  أي أن النقاط ذات المساهمة الأكبر في قيمة التكامل تكون موزعة بشكل غير منتظم على امتداد مجال التكامل فعند حسابنا لقيمة الانحراف Var لمعرفة مدى دقة النتيجة للطريقة المستخدمة ومدى إنحرافنا على القيمة الحقيقية نجد أن [17,16]

$$\text{Var} = \sigma^2 = \left\langle \left( \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right\rangle - \left( \left\langle \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right\rangle \right)^2$$

$$\sigma^2 = \frac{(b-a)^2}{N} \left[ \left\langle \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right\rangle - \left( \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right\rangle \right)^2 \right]$$

$$\sigma^2 = \frac{(b-a)^2}{N} (\bar{f}^2 - \bar{f}^2)$$

نلاحظ أن الانحراف يتناسب عكسا مع العدد الكلي لنقاط المعايرة العشوائية أي:

$$\text{var} \propto \frac{1}{N}$$

حيث أنه كلما زدنا في نقاط المعايرة كلما كانت القيمة التقديرية لتكامل عن طريق مونتي كارلو أكثر دقة بشرط أن هاته النقاط المولدة تساهم بشكل متجانس في قيمة التكامل (بمعنى أن قيم الدالة عند جميع النقاط تكون ذات توزيع منتظم) [16,6]

عندما تكون الدالة  $f$  مركزة في مناطق محددة من المجال  $[a,b]$ ، فإن استخدام عينات عشوائية منتظمة يؤدي إلى توليد عدد كبير من النقاط ذات مساهمة ضعيفة في قيمة التكامل، مما يزيد من نسبة الخطأ بسبب اعتماد الطريقة على متوسط القيم على كامل المجال. ولتقليل هذا الخطأ يتم اعتماد معاينة موجهة عبر اختيار توزيع احتمالي  $\rho(x)$  يشبه سلوك الدالة  $f$ ، بحيث تتركز العينات في المناطق ذات المساهمة الأكبر، مما يحسن دقة التقدير ويقلل التباين. [16]

أولاً شرط المعايرة على المجال  $[a,b]$ :

$$\int_a^b \rho(x) dx = 1, \quad \rho(x) > 0 \quad \forall x \in [a, b]$$

ثانياً يجب أن يكون التوزيع  $\rho(x)$  مشابهاً إلى حد ما للدالة  $f(x)$  بحيث تكون النسبة  $\frac{f(x)}{\rho(x)}$  شبه ثابتة، أو بمعنى أدق يكون تغيرها متجانساً (بطيئاً) عبر كامل مجال التكامل. عندها يمكن كتابة التكامل على الشكل:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \rho(x) \frac{f(x)}{\rho(x)} dx$$

حيث أن:

1. الدالة الجديدة  $\frac{f(x)}{\rho(x)}$  تكون متجانسة (بطيئة التغير) على كامل مجال التكامل  $[a, b]$ .
  2. تمثل القيمة  $\rho(x)$  الوزن الاحتمالي للنقاط المولدة بشكل عشوائي، بمعنى آخر يمكن توليد نقاط عشوائية وفق التوزيع  $\rho(x)$  لتقييم التكامل.
- ومن ثم يمكن تقدير التكامل بالشكل التالي:

$$F_N = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)}$$

## 6.2 تطبيقات طريقة مونتى كارلو

تُستخدم طريقة مونتى كارلو في عدة مجالات مثل الفيزياء لمحاكاة الأنظمة الجسيمية، وفي المالية لتقدير سلوك الأسواق، وفي الهندسة لدراسة الأنظمة المعقدة، وفي علوم الحاسوب لتقييم أداء الخوارزميات.

## 7.2 سلاسل ماركوف

هي نماذج رياضية تعتمد على خاصية تُعرف باسم "خاصية ماركوف"، والتي تنص على أن الحالة المستقبلية لأي عملية تتوقف فقط على الحالة الحالية، وليس على التاريخ الكامل للعملية. تعود هذه السلاسل إلى عالم الرياضيات الروسي أندريه ماركوف (1856-1922)، الذي طورها بهدف تبسيط نمذجة السلاسل الزمنية والتنبؤ بها. فقبل ظهور هذه السلاسل، كانت التوقعات تعتمد على جميع القيم السابقة للظاهرة، مما كان يجعل العمليات الحسابية معقدة جداً، خاصة عند التعامل مع سلاسل طويلة من البيانات. وقد جاءت فكرة ماركوف الجوهرية لتجاوز هذا التعقيد، حيث أثبت أن معرفة الحالة الراهنة فقط تكفي لتحديد احتمالات الحالة التالية، دون الحاجة إلى الرجوع إلى التاريخ الكامل للسلسلة [18].

كما ذكر سابقاً فإن الحالة المتوقعة  $x_{i+1}$  لا تعتمد إلا على الحالة الحالية للنظام  $x_i$ ، ويمكن التعبير عن ذلك رياضياً كما يلي:

$$P_{jk} = P_r \left\{ \underbrace{x_{i+1} = k \mid x_i = j, x_{i-1} = j_1, x_{i-2} = j_2, x_{i-3} = j_3, \dots, x_0 = j_{i-1}}_{\text{تهمل حسب منطق ماركوف}} \right\}$$

أي

$$P_{jk} = P_r \{x_{i+1} = k \mid x_i = j\}$$

حيث يمثل

$P_{jk}$  احتمال انتقال العملية العشوائية (التصادفية) من الحالة  $j$  عند الخطوة  $i$  إلى الحالة  $k$  عند الخطوة  $i + 1$ . وهذا يعني بوضوح أن لدينا فضاء حالات متقطع للعملية العشوائية يُكتب على الشكل:

$$X_i, \quad n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

$X_i = j$  تعني أن العملية العشوائية تكون في الحالة أو القيمة  $j$  عند الزمن أو الخطوة  $i$ .

$X_{i+1} = k$  تعني أنها تنتقل إلى الحالة أو القيمة  $k$  عند الخطوة  $i + 1$ .

## 8.2 خوارزمية ميتروبولوس

خوارزمية ميتروبولوس هي خوارزمية عددية تُستعمل في طرق موني كارلو لتوليد سلسلة من الحالات العشوائية وفق توزيع احتمالي مطلوب، وذلك بالاعتماد على مبدأ القبول أو الرفض للانتقال بين حالات النظام. [18]

ففي هذه الأنظمة يكون من الصعب الوصول إلى حالة التوازن عبر معاينة جميع التشكيلات الممكنة، لذلك نستخدم المعاينة الموجهة انطلاقاً من حالة ابتدائية مأخوذة عشوائياً، لنصل بعد عدد كبير من الخطوات إلى حالة التوازن أو التوزيع المستهدف. وتتحقق هذه العملية من خلال تطبيق شرط القبول أو الرفض للانتقال من الحالة الحالية إلى الحالة الموالية، مما يسمح للخوارزمية بالتقارب نحو التوزيع الصحيح.

تحتوي هذه الأنظمة على عدد هائل من الجسيمات، مما يجعل دراستها ممكنة فقط باستعمال الطرق الإحصائية التي تسمح بتحديد توزيع الحالات المجهرية للنظام، ومن خلاله يمكن حساب المتوسطات للمتغيرات الترموديناميكية المختلفة مثل الطاقة والسعة الحرارية. ويتم ذلك ضمن المجموعة الإحصائية المناسبة حسب طبيعة النظام، [17]. في هذا الفصل سندرس هذه الأنظمة ضمن المجموعة القانونية المعتمدة على توزيع بولتزمان:

$$P(x) \propto \exp[-\beta H(x)], \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.2)$$

وباستخدام طريقة موني كارلو وخوارزمية ميتروبولوس المطورة سنة 1953 يمكن توليد عينات عشوائية من فضاء الحالات وحساب أوزانها الإحصائية وفق توزيع بولتزمان. غير أن المعاينة البسيطة تؤدي إلى توليد عدد كبير من العينات المرفوضة، مما يجعل الطريقة غير فعالة عملياً. لذلك نلجأ إلى المعاينة الموجهة باستعمال سلاسل ماركوف، حيث تولد الحالة الموالية اعتماداً على الحالة

الحالية فقط، ثم تُقبل أو تُرفض وفق توزيع بولتزمان. ومن هنا تظهر أهمية طريقة توليد العينات في تمثيل الحالات الممكنة للنظام، لذلك قبل اعتبار سلاسل ماركوف في توليد العينات ولفهم أكبر ندرس بشكل عام طريقة توليد عينات عشوائية حقيقية [17]، حيث يعطى احتمال توليد سلسلة غير مترابطة من  $N$  قيمة بالعلاقة التالية:

$$P(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) = P_1(x_1) P_1(x_2) P_1(x_3) \dots P_1(x_N) \quad (2.2)$$

$P_1(x_N)$  تمثل احتمال توليد القيمة  $x_N$  بعد الخطوة الأولى في سلسلة التوليد، لكن عند اعتبار سلاسل ماركوف في توليد القيم يصبح الأمر مختلفاً قليلاً، لأن توليد القيمة الموالية يعتمد على القيمة الحالية، وبالتالي ندخل ما يسمى باحتمال الانتقال  $T(x \rightarrow x')$  من القيمة  $x$  إلى القيمة  $x'$ . وعليه تصبح العلاقة السابقة تصف احتمال توليد سلسلة ماركوف مكونة من  $N$  قيمة. [17]

$$P_N(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) = P_1(x_1) T(x_1 \rightarrow x_2) T(x_2 \rightarrow x_3) \dots T(x_{N-1} \rightarrow x_N) \quad (3.2)$$

حيث ان مجموع احتمال الانتقالات الكلية يساوي الى الواحد

$$\sum_{x'} T(x \rightarrow x') = 1 \quad (4.2)$$

الهدف الآن هو كيفية توجيه قيم السلسلة المولدة بواسطة خوارزمية الحاسوب بعد  $t$  خطوة وفق توزيع مستهدف، وهو في هذه الحالة توزيع بولتزمان، وذلك بغض النظر عن القيمة الابتدائية التي تبدأ منها السلسلة وموضعها فيها. وهذا ما تقوم به خوارزمية ميتروبوليس، إذ إنها تحت شروط معينة تنتج سلسلة ماركوف تتبع توزيعاً ثابتاً، على الأقل لفترات طويلة، لأنها تحتاج إلى بعض الوقت لنسيان التوزيع الأولي المختار. وتمثل هذه الشروط فيما يلي: [17,6]

- يجب أن يكون بالإمكان الوصول إلى أي عينة مولدة انطلاقاً من أي عينة أخرى بعد عدد معين من الخطوات.
- التقليل قدر الإمكان من الدورية في العينات المولدة.

## 1.8.2 الخطوات العامة في خوارزمية ميتروبولوس

الخطوات العامة المتبعة في هذه الخوارزمية لتتقارب نحو التوزيع المستهدف وليكن  $\rho(x)$  [18] هي:

- اختيار حالة من الحالات الممكنة للنظام بشكل عشوائي  $(x_i)$ .
- يتم توليد حالة متوقعة  $y_{i+1}$  من خلال إحداث تغيير في الحالة الحالية للنظام (خاصية سلاسل ماركوف الزمنية).

• نقوم بحساب احتمال قبول الحالة الجديدة:

$$P(x_i, y_{i+1}) = T(x_i \rightarrow y_{i+1}) = \min \left[ \frac{\rho(y_{i+1}) P(y_{i+1} \rightarrow x_i)}{\rho(x_i) P(x_i \rightarrow x_{i+1})}, 1 \right] \quad (5.2)$$

• يتم قبول الحالة الجديدة أو رفضها وفقاً للقاعدة:

$$x_{i+1} = \begin{cases} y_{i+1} & \text{باحتمال } A(x_i, x_{i+1}) \\ x_i & \text{باحتمال } 1 - A(x_i, x_{i+1}) \end{cases} \quad (6.2)$$

• يتم تكرار العملية  $N$  مرة للوصول إلى حالة الاتزان.

## 9.2 الارتباط الذاتي Auto-correlation

الارتباط الذاتي هو مقياس يعبر عن درجة الترابط بين القيم المتتالية لنفس السلسلة أو العملية العشوائية عند أزمنة أو خطوات مختلفة، أي أنه يوضح مدى اعتماد القيمة الحالية على القيم السابقة لها. ويستخدم بكثرة في الإحصاء، ومعالجة الإشارات، وسلاسل ماركوف، كما يعد أداة مهمة في خوارزميات مونتي كارلو لتحليل استقلالية العينات المولدة. إذا اعتبرنا سلسلة عشوائية:

$$X_1, X_2, X_3, \dots$$

فإن دالة الارتباط الذاتي عند الإزاحة  $k$  تُعرف بالعلاقة:

$$C(k) = \langle X_i X_{i+k} \rangle - \langle X_i \rangle^2$$

حيث:

•  $\langle X_i X_{i+k} \rangle$  تمثل المتوسط الإحصائي لجداء القيمتين،

•  $\langle X_i \rangle$  تمثل المتوسط الحسابي للسلسلة،

•  $k$  هو عدد الخطوات الفاصلة بين القيمتين.

وغالباً ما تُستعمل دالة الارتباط الذاتي المُطبَّعة بالشكل:

$$\rho(k) = \frac{C(k)}{C(0)}$$

بحيث:

$$C(0) = \langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2$$

وهو التباين Variance للسلسلة،  
وتحقق الدالة:

$$\rho(0) = 1$$

وتتناقص عادةً مع زيادة  $k$ ، وعندما تصبح قريبة من الصفر فهذا يعني أن القيم أصبحت شبه مستقلة إحصائياً.

في العديد من الأنظمة الفيزيائية والعديدية يظهر الارتباط الذاتي بشكل تقريبي على صورة تناقص أسّي:

$$\rho(k) \sim e^{-k/\tau}$$

حيث إن  $\tau$  يسمى زمن الارتباط الذاتي Auto-correlation Time، وهو مقياس لعدد الخطوات اللازمة حتى تفقد السلسلة ذاكرتها الإحصائية. وترتبط هذه الكمية أيضاً بزمن الارتباط الذاتي المتكامل:

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \rho(k)$$

والذي يُستعمل لتقدير عدد العينات المستقلة الفعالة في المحاكاة العددية. في خوارزميات مونت كارلو، وخاصة خوارزميات Markov Chain Monte Carlo (MCMC) مثل خوارزمية ميتروبوليس أو مونت كارلو الهاملتوني، تكون العينات المتولدة متتابعة وغير مستقلة تماماً، لذلك يُستعمل الارتباط الذاتي لقياس جودة السلسلة وسرعة استكشاف فضاء الحالات. فكلما كان الارتباط الذاتي صغيراً تناقص الاعتماد بين العينات وأصبحت المحاكاة أكثر كفاءة.

## 10.2 محاكاة نموذج الهزازات الكمية

• **hot star** تكون في شكل دالة برمجية كما يأتي:

```

1 def hot_star(N, delta(:
2     path = np.zeros(N) # Initialize a vector of N zero positions
3
4     for i in range(len(path)(:
5         x = np.random.uniform(-delta, delta(
6         path[i] = x # Replace zero positions with random values
7             between -delta and +delta
8
9     return path # Hot start initialization(

```

دالة حساب الفعل action تكون في شكل دالة برمجية كما يأتي:

```

1 def action(path, m, omega, lambda_(:
2     S = 0.0 # Action value initialized to zero before summation
3     N = len(path) # Total number of lattice points in the proposed
4         path
5
6     for i in range(N(:
7         x_i = path[i] # Starting point of the time slice dt

```

```

7     x_ip1 = path[i + 1( % N[ # Endpoint of the time slice dt )
      periodic boundary(
8
9     kinetic = 0.5 * m * (x_ip1 - x_i)**2 # Kinetic energy
      contribution
10    potential = 0.5 * m * omega**2 * x_i**2 + lambda_ * m**2 *
      omega**3 * x_i**4 # Potential energy
11
12    S += kinetic + potential # Accumulate the Euclidean action
13    return S

```

### خوارزمية ميتروبوليس (Metropolis Algorithm) تُكتب كما يلي:

```

1  def metropolis(path, delta, m, omega, lambda_, hbar(:
2      accept_rate = 0 # Acceptance rate counter
3
4      # Metropolis updates over the entire path length
5      for j in range(len(path)):
6          i = np.random.randint(0, len(path)) # Randomly select a
              lattice site
7
8          old_x = path[i] # Store the old value for possible rejection
9          old_action = action(path, m, omega, lambda_ # Compute action
              of current path
10
11         # Propose a new value using a uniform random step
12         new_x = old_x + np.random.uniform(-delta, delta(
13         path[i] = new_x # Update temporarily
14
15         new_action = action(path, m, omega, lambda_ # Compute new
              action
16
17         # Metropolis acceptance criterion
18         if new_action > old_action or np.random.rand() > np.exp
              (-1.0 / hbar * (new_action - old_action)):
19             accept_rate += 1 # Accept the new configuration
20             pass # Keep the new state
21         else:
22             path[i] = old_x # Reject and restore old value
23     return path, accept_rate

```

وقد تم التطرق إلى محاكاة نموذج الهزازات الكمية بواسطة مونتي كارلو بتفصيل كبير في هاته المذكرة [19] لذلك لن نركز على شرحها هنا، ونكتفي بالإشارة إلى المرجع و نترك الشرح الى محاكاة النموذج في الهايبرد مونتي كارلو في الفصل القادم .

## 11.2 الخاتمة

في هذا الفصل تم التطرق إلى الأسس النظرية لطريقة مونتي كارلو باعتبارها من أهم الطرق العددية المعتمدة على التوليد العشوائي، كما تم توضيح دور سلاسل ماركوف في بناء عينات مترابطة إحصائياً تحقق خاصية فقدان الذاكرة التدريجي، مما يسمح بالوصول إلى التوزيع المستهدف. كما تم عرض خوارزمية ميتروبوليس كأداة أساسية لتوليد سلاسل ماركوف تتقارب نحو توزيع بولتزمان، من خلال آلية القبول أو الرفض التي تضمن احترام التوازن التفصيلي وتقليل التحيز الناتج عن المعاينة العشوائية البسيطة. وبذلك، تشكل هذه الأدوات الإطار الرياضي والحسابي الضروري لدراسة الأنظمة الفيزيائية ذات عدد كبير من درجات الحرية، حيث يصبح من غير الممكن الاعتماد على الحلول التحليلية المباشرة. وفي الفصل القادم سيتم الانتقال إلى دراسة مونتي كارلو الهجين HMC ، وتطبيقه في سياق تكامل المسار لفانيمان باعتباره امتداداً أكثر تطوراً لهذه الطرق وذا فعالية أكبر في محاكاة الأنظمة الكمومية عالية الأبعاد.

# الفصل الثالث:

فايرو موني كارلو علي نوفي

الغزلان والكبيرة

## الفصل 3

# هايرد مونتي كارلو على نموذج الهزازات الكمية

### 1.3 تمهيد

بعد أن تناولنا في الفصل السابق طرق مونتي كارلو وسلاسل ماركوف، واستعملنا خوارزمية ميتروبوليس في دراسة الأنظمة الفيزيائية ضمن صيغة تكامل المسار، أصبح من الضروري التطرق إلى خوارزميات أكثر كفاءة تسمح باستكشاف فضاء الحالات بصورة أسرع وتقلل من الارتباط الذاتي بين الحالات المتتالية. ومن أهم هذه الخوارزميات خوارزمية مونتي كارلو الهاملتونية (HMC)، التي تجمع بين طرق مونتي كارلو والديناميك الهاملتوني.

في هذا الفصل سنعرض المبادئ الأساسية للديناميك الهاملتوني، ثم نين كيفية بناء خوارزمية HMC انطلاقاً من التوزيع الاحتمالي المشترك للموضع والزخم، كما سنتناول طريقة الوثب الضفدعي وخطوات الخوارزمية بالتفصيل، إضافة إلى كيفية ضبط معاملات المحاكاة للحصول على أفضل أداء عددي. ونظراً لأن المفاهيم الأساسية المتعلقة بسلاسل ماركوف وخوارزمية ميتروبوليس قد تم عرضها في الفصل السابق، فسركز هنا أساساً على الجوانب الجديدة التي تميز خوارزمية HMC عن الطرق التقليدية.

### 2.3 مونتي كارلو الهجينة Hybrid Monte Carlo

قدّمت لنا الورقة الكلاسيكية لميتروبوليس وزملائه [20] الصادرة عام 1953 عالم سلاسل ماركوف لمونت كارلو (MCMC) في عملهم، استخدمت طريقة MCMC لمحاكاة توزيع الحالات لنظام من الجزيئات المثالية. في عام 1959، قدّم ألدرو واينرايت [21] نهجاً آخر للمحاكاة الجزيئية. في عملهم، استخدموا خوارزمية حتمية لحركة الجزيئات، تتبع هذه الخوارزمية قوانين نيوتن للحركة، ويمكن صياغتها بطريقة أنيقة باستخدام ديناميكا هاملتون. تعالish النهجان، الإحصائي (MCMC)

والحتمي (الديناميكا الجزئية)، بسلام لفترة طويلة. في عام 1987، جمعت ورقة استثنائية بقلم دوان وكينيدي وبندلتون وروث [22] بين نهجي MCMC والديناميكا الجزئية. يُعرف هذا النهج المدمج الآن باسم مونت كارلو الهاملتوني أو مونت كارلو الهجين (HMC). لنر كيف يمكننا استخدام ديناميكا هاملتون لبناء خوارزمية MCMC لنفترض أننا نرغب في أخذ عينات من توزيع احتمالي. نبدأ ببناء هاملتوني بدلالة هذا التوزيع الاحتمالي. بالإضافة إلى المتغيرات التي تهمننا (هي متغيرات الموضع في لغة HMC)، يجب علينا أيضاً إدخال بعض متغيرات الحقل المساعدة (متغيرات الزخم في لغة HMC) عادةً ما يكون لهذه المتغيرات المساعدة توزيعات مستقلة غاوسية. ترسم طريقة HMC متغيرات الزخم هذه من توزيع غاوسي، ثم تحسب مساراً وفقاً لنسخة متقطعة من ديناميكا هاملتون. في نهاية المسار، يتم قبول أو رفض الحالة الجديدة المقترحة بواسطة خطوة متروبوليس. تكمن ميزة هذه الطريقة في أنها تستطيع اقتراح حالة جديدة بعيدة عن الحالة الحالية، مع احتمال قبول مرتفع. وهذا يُعد مكسباً كبيراً مقارنة بطريقة متروبوليس بالسير العشوائي.

### 3.3 معادلات هاميلتون

لنعتبر متغير الموضع  $x$  ومتغير الزخم  $p$ ، بحيث يصبح فضاء الحالات فضاءً ثنائي البعد. تعمل الديناميكيات الهاملتونية داخل هذا الفضاء. يمكن وصف النظام بواسطة دالة تعتمد على  $x$  و  $p$ ، وتُعرف باسم الهاملتوني  $H(x, p)$ . ويحدد التطور الزمني لكل من  $x$  و  $p$  انطلاقاً من المشتقات الجزئية للهاملتوني [23]. وتُعطى معادلات هاملتون بالشكل:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}. \quad (1.3)$$

حيث يمثل  $t$  متغير الزمن.

وفي خوارزمية مونت كارلو الهاملتونية (HMC) نهم عادةً بالهاملتوني الذي يمكن كتابته على شكل مجموع طاقة كامنة  $U(x)$  وطاقة حركية  $K(p)$ ، أي:

$$H(x, p) = U(x) + K(p) \quad (2.3)$$

حيث تمثل  $U(x)$  الطاقة الكامنة المرتبطة بمتغير الموضع، بينما تمثل  $K(p)$  الطاقة الحركية المرتبطة بمتغير الزخم.

بعد تعريف الهاملتوني في خوارزمية مونت كارلو الهاملتونية، يمكن ربطه مباشرة بالنظام الفيزيائي المدروس، وهو الهزاز الكومي اللاخطي (Anharmonic Oscillator) في الزمن الإقليدي [23]. ففي هذا النظام يُعطى الفعل الإقليدي المنفصل بالشكل:

$$S_E[x] = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{m}{2a} (x_{i+1} - x_i)^2 + a \left( \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 + \lambda m^2 \omega^3 x_i^4 \right) \right], \quad (3.3)$$

حيث تمثل:

- $a$  خطوة الزمن الإقليدي،
- $N$  عدد نقاط الشبكة،
- $m$  كتلة الجسم،
- $\omega$  تردد الهزاز،
- $\lambda$  معامل اللا خطية (قوة الازدواج).

في خوارزمية HMC يُعتبر هذا الفعل بمثابة الطاقة الكامنة:

$$U(x) = S_E[x]. \quad (4.3)$$

أما الطاقة الحركية المرتبطة بمتغيرات الزخم  $p_i$ ، فتُختار عادة بالشكل:

$$K(p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2}. \quad (5.3)$$

وبالتالي يصبح الهاملتوني الكلي للنظام:

$$H(x, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + S_E[x]. \quad (6.3)$$

وباستخدام معادلات هاملتون نحصل على:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i, \quad (7.3)$$

و

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}. \quad (8.3)$$

ولحساب المعادلة الثانية نشتق الفعل الإقليدي بالنسبة لـ  $x_i$ ، مع الانتباه إلى أن الفعل يعتمد على  $x_i$  من خلال ثلاثة حدود: الحد الحركي (الفرق بين  $x_i$  و  $x_{i+1}$  و  $x_{i-1}$ )، والحد التربيعي، والحد اللا خطي  $x_i^4$ . نجد:

$$\frac{\partial S_E}{\partial x_i} = \frac{m}{a}(2x_i - x_{i+1} - x_{i-1}) \quad (9.3)$$

$$+ a(m\omega^2 x_i + 4\lambda m^2 \omega^3 x_i^3). \quad (10.3)$$

ومن ثم تصبح معادلة تطور الزخم:

$$\frac{dp_i}{dt} = - \left[ \frac{m}{a}(2x_i - x_{i+1} - x_{i-1}) + a(m\omega^2 x_i + 4\lambda m^2 \omega^3 x_i^3) \right]. \quad (11.3)$$

ملاحظة: يمكن بسهولة الرجوع إلى حالة الهزاز التوافقي البسيط بوضع  $\lambda = 0$ ، حيث يختفي الحد  $x_i^4$  وتُصبح المعادلات مطابقة للحالة التوافقية المعروفة.

### 4.3 خصائص الديناميك الهاملتوني

عند بناء تحديثات سلاسل ماركوف موني كارلو (MCMC) باستعمال الديناميك الهاملتوني، تظهر عدة خصائص أساسية لهذه الديناميكات، من أهمها:

1. القابلية للعكس: تتميز الديناميكات الهاملتونية بخاصية القابلية للعكس، وهي خاصية ضرورية لإثبات أن تحديثات MCMC المبنية على الديناميك الهاملتوني تُبقي التوزيع الهدف ثابتاً دون تغيير. ويمكن إثبات ذلك بإظهار أن سلاسل ماركوف الناتجة عن الحالات المقترحة بواسطة هذه الديناميكات تحقق شرط القابلية للعكس. [23]
2. انخفاض الهاملتوني: تحافظ الديناميكات الهاملتونية على قيمة الهاملتوني ثابتة أثناء التطور الزمني، أي:

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

في خوارزمية موني كارلو الهاملتونية، (HMC) تُستخدم خوارزمية ميتروبوليس لقبول أو رفض الحالة المقترحة الناتجة عن التطور الهاملتوني. وإذا بقي الهاملتوني محفوظاً تماماً، فإن احتمال القبول يصبح مساوياً لـ 1. لكن عملياً، يصعب تحقيق هذا الانخفاض بشكل دقيق، لأن معادلات الحركة تُحل عددياً بطريقة متقطعة، مما يجعل الهاملتوني محفوظاً بصورة تقريبية فقط. [23]

3. انخفاض الحجم: تحافظ الديناميكات الهاملتونية على الحجم في فضاء الطور  $(x, p)$ . وتعد هذه الخاصية مهمة في خوارزميات MCMC لأنها تعني عدم الحاجة إلى أخذ تغير الحجم بعين الاعتبار عند حساب احتمال القبول في تحديثات ميتروبوليس. فلو استخدمت ديناميكات

عامة غير هاملتونية لاقتراح حالات جديدة، لكان من الضروري حساب محدد مصفوفة جاكوبي (Jacobian determinant) المرتبطة بالتحويل الناتج عن هذه الديناميكيات، وقد يكون حساب هذا المحدد عملية معقدة جداً من الناحية العددية. [23]

### 5.3 طريقة الوثب الضفدعي Leapfrog Method

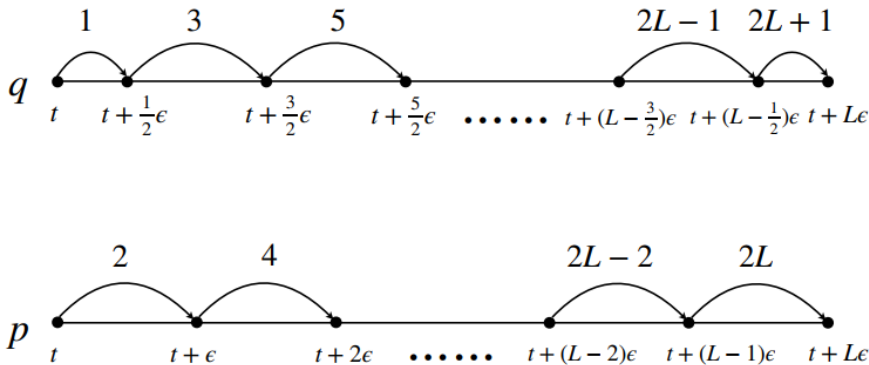
من أجل تطبيق المعادلات التفاضلية لديناميك الهاملتوني على الحاسوب، يجب تحويل معادلات التطور الزمني إلى صيغة متقطعة. توجد عدة طرق عددية لتحقيق هذا التقطيع، ومن أبسطها طريقة الوثب الضفدعي (Leapfrog).

لتنفيذ الخوارزمية عددياً، ينبغي تقريب معادلات هاملتون عبر تقسيم متغير الزمن إلى خطوات صغيرة ذات طول  $\epsilon$ . انطلاقاً من الحالة الابتدائية عند الزمن  $t = 0$ ، يمكن حساب حالة النظام تدريجياً عند الأزمنة  $\epsilon$ ، ثم  $2\epsilon$ ، ثم  $3\epsilon$ ، وهكذا، مع وجود أخطاء عددية صغيرة ناتجة عن التقريب. في النظام أحادي البعد الذي ندرسه، حيث يكون الموضع  $x$  والزخم  $p$ ، تتم خطوات طريقة الوثب الضفدعي للانتقال من الزمن  $t$  إلى الزمن  $t + \epsilon$  كما يلي:

$$x\left(t + \frac{\epsilon}{2}\right) = x(t) + \frac{\epsilon}{2}p(t). \quad (12.3)$$

$$p(t + \epsilon) = p(t) - \epsilon x\left(t + \frac{\epsilon}{2}\right). \quad (13.3)$$

$$x(t + \epsilon) = x\left(t + \frac{\epsilon}{2}\right) + \frac{\epsilon}{2}p(t + \epsilon). \quad (14.3)$$



شكل 1.3: خطوات الوثب الضفدعي (Leapfrog Method) [23]

وتتميز طريقة الوشب الضفدعي بأنها تحافظ على حجم فضاء الطور  $(x, p)$ ، كما أنها تحقق خاصية القابلية للعكس، وهما خاصيتان أساسيتان في خوارزمية مونتى كارلو الهاملتونية. (HMC)

## 6.3 بناء خوارزمية MCMC انطلاقاً من الديناميك الهاملتوني

### 1.6.3 التوزيع الاحتمالي المشترك

يمكن ربط التوزيع الاحتمالي الذي نرغب في أخذ عينات منه بدالة طاقة كامنة، وذلك بالاعتماد على مفهوم التوزيع القانوني (Canonical Distribution) في الميكانيك الإحصائي. لنفترض وجود نظام فيزيائي تُوصف حالته بالمتغير  $x$ ، وله دالة طاقة  $E(x)$ . عندئذٍ يُعطى التوزيع القانوني للحالات بدالة الكثافة الاحتمالية:

$$P(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(x)}, \quad (15.3)$$

حيث يمثل:

$$\beta = \frac{1}{T} \quad (16.3)$$

مقلوب درجة الحرارة، بينما تمثل الكمية  $Z$  ثابت التنظيم المعروف بدالة التقسيم (Partition Function)، وهي ضرورية لضمان أن يكون مجموع أو تكامل الاحتمالات مساوياً للواحد. في خوارزمية مونتى كارلو الهاملتونية، يُمثل الهاملتوني دالة طاقة للحالة المشتركة المكونة من الموضع  $x$  والزخم  $p$ ، وبالتالي يحدد التوزيع المشترك:

$$P(x, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x, p)}. \quad (17.3)$$

ويعني انخفاض الهاملتوني أثناء الحركة الهاملتونية أن المسار الناتج عن هذه الحركة في حالة غياب الأخطاء العددية يبقى على سطح ذي كثافة احتمالية ثابتة [23]. وعندما يُكتب الهاملتوني على شكل مجموع طاقة كامنة وطاقة حركية:

$$H(x, p) = U(x) + K(p), \quad (18.3)$$

فإن التوزيع المشترك يصبح:

$$P(x, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta U(x)} e^{-\beta K(p)}. \quad (19.3)$$

وتُظهر هذه العلاقة أن متغيري الموضع  $x$  والزخم  $p$  مستقلان إحصائياً، ولكل منهما توزيعه القانوني الخاص. وتمثل متغيرات الموضع  $x$  المتغيرات الفيزيائية الأساسية التي نهتم بدراستها، أما متغيرات الزخم  $p$  فهي متغيرات مساعدة أُدخلت فقط للسماح بتطبيق الديناميك الهاملتوني. [23]

وبالتالي، فإن خوارزمية HMC تقوم بأخذ عينات من التوزيع المشترك للمتغيرين  $(x, p)$ ، بينما يكون التوزيع المطلوب فعلياً ممثلاً في متغير الموضع  $x$  عبر دالة الطاقة الكامنة  $U(x)$ . أما توزيع الزخم  $p$  فيُحدد بواسطة دالة الطاقة الحركية  $K(p)$ .

في أغلب تطبيقات HMC، تُختار الطاقة الحركية بشكل تربيعي، مما يؤدي إلى كون متغير الزخم موزعاً وفق توزيع غاوسي بمتوسط صفري. وفي الحالة أحادية البعد، تُكتب الطاقة الحركية على الصورة:

$$K(p) = \frac{p^2}{2}, \quad (20.3)$$

وذلك عند اختيار الكتلة مساوية للوحدة. خلال كل دورة من خوارزمية HMC، يبقى كل من توزيعي  $x$  و  $p$  محفوظين، وبالتالي يبقى التوزيع المشترك أيضاً ثابتاً.

في الخطوة الأخيرة من الخوارزمية، يتم اختيار قيمة جديدة للزخم  $p$  عشوائياً من توزيعه الغاوسي، بشكل مستقل عن القيمة الحالية للموضع  $x$ . بعد ذلك، بدءاً من الحالة الحالية  $(x, p)$ ، يتم تطبيق الديناميك الهاملتوني لعدد  $L$  من الخطوات باستعمال خوارزمية الوثب الضفدعي (Leapfrog)، وبخطوة زمنية مقدارها  $\epsilon$ .

تمثل  $L$  و  $\epsilon$  معاملي الخوارزمية الأساسيين، ويؤثر اختيارهما بشكل كبير على كفاءة المحاكاة ودقتها.

بعد نهاية المسار الديناميكي، يتم عكس إشارة الزخم للحصول على الحالة المقترحة  $(x^*, p^*)$ ، ثم تُطبق خطوة ميتروبوليس لقبول أو رفض هذه الحالة.

إذا رُفضت الحالة المقترحة، تبقى السلسلة في الحالة الحالية نفسها، وتُعاد هذه الحالة مرة أخرى عند حساب المتوسطات الإحصائية المختلفة.

تجدر الإشارة إلى أن خوارزمية HMC تُستخدم فقط مع التوزيعات المستمرة المعرفة على الفضاء  $\mathbb{R}$ . كما أن خاصية الإرجودية (Ergodicity) تضمن أن الخوارزمية لن تبقى محصورة داخل جزء صغير من فضاء الحالات، بل ستتقارب تدريجياً نحو التوزيع التوازني الوحيد للنظام. وبما أن قيم الزخم تُولد عشوائياً في كل دورة، فإنها تسمح بتغيير متغير الموضع  $x$  بطرق متنوعة، مما يساعد الخوارزمية على استكشاف فضاء الحالات بكفاءة عالية مقارنة بخوارزميات المشي العشوائي التقليدية. [23]

### 2.6.3 ضبط معاملات خوارزمية HMC

يتطلب تطبيق خوارزمية موني كارلو الهاملتونية (HMC) ضبط معاملين أساسيين هما خطوة الزمن  $\epsilon$  في خوارزمية الوب الضفدعي، وعدد الخطوات  $L$  التي تحدد طول المسار في الزمن الوهمي:

$$l = L\epsilon. \quad (21.3)$$

وبشكل عام، يُعد ضبط معاملات خوارزمية HMC أكثر صعوبة مقارنة بخوارزمية ميتروبوليس التقليدية.

من المستحسن إجراء تشغيلات أولية باستعمال قيم تجريبية لـ  $\epsilon$  و  $L$ ، مع مراقبة التطور الزمني للكميات الفيزيائية المرصودة، وذلك من أجل تحديد زمن التوازن الحراري (Thermalization Time) وزمن الارتباط الذاتي (Autocorrelation Time). ومن أكثر الكميات استخداماً في هذه المراقبة دالة الطاقة الكامنة  $U(x)$ .

ويعطي الارتباط الذاتي للمقادير المرصودة مؤشراً على مدى كفاءة سلسلة ماركوف في استكشاف فضاء الحالات. ومن الناحية المثالية، ينبغي أن تؤدي كل دورة من خوارزمية HMC إلى حالة جديدة تكون شبه مستقلة عن الحالة الحالية. يُعد اختيار خطوة الزمن  $\epsilon$  أمراً بالغ الأهمية. فإذا كانت  $\epsilon$  كبيرة جداً، فإن معدل قبول الحالات المقترحة بواسطة المسارات الهاملتونية يصبح منخفضاً جداً. أما إذا كانت صغيرة جداً، فإن استكشاف فضاء الحالات يصبح بطيئاً، إضافةً إلى زيادة الزمن الحسابي دون فائدة كبيرة. ويلاحظ أن اختيار  $\epsilon$  يكون غالباً شبه مستقل عن عدد الخطوات  $L$ . فالخطأ في قيمة الهاملتوني والذي يحدد بدوره معدل الرفض لا يزداد عادةً مع  $L$ ، بشرط أن تكون  $\epsilon$  صغيرة بما يكفي لضمان استقرار الديناميكيات. [23]

أما إذا كانت قيمة  $\epsilon$  كبيرة إلى درجة تجعل المسارات غير مستقرة، فإن قيمة الهاملتوني تنمو أسياً مع  $L$ ، وبالتالي يصبح احتمال القبول صغيراً جداً. ولهذا السبب، فإن أداء خوارزمية HMC يتأثر بشدة بسوء اختيار  $\epsilon$ ، مما يجعلها أكثر حساسية للضبط مقارنة بخوارزمية ميتروبوليس ذات المشي العشوائي.

فيما يخص طول المسار  $L\epsilon$ ، فإن اختياره يتم غالباً بطريقة تجريبية تعتمد على المحاولة والخطأ. فإذا أظهرت التجارب الأولية --- مع اختيار مناسب لـ  $\epsilon$  --- أن الخوارزمية تصل إلى حالة شبه مستقلة بعد دورة واحدة فقط، فمن الأفضل تجربة قيمة أصغر لـ  $L$ . أما إذا لوحظ وجود ارتباط ذاتي مرتفع، فينبغي زيادة قيمة  $L$ .

في خوارزمية ميتروبوليس ذات المشي العشوائي، يُعتبر معدل قبول يقارب 25% مناسباً للحصول

على أداء جيد، بينما يتحقق الأداء الأمثل في خوارزمية HMC عند معدل قبول يقارب 65%. [23]

### 3.6.3 خوارزمية HMC خطوة بخطوة

لنعد الآن عرض خطوات خوارزمية مونتى كارلو الهاملتونية (HMC). الهدف من الخوارزمية هو توليد مجموعة من التهيئات (Configurations) انطلاقاً من تهئية ابتدائية عشوائية نرمر لها بـ  $\phi^{(0)}$ . وتولد الخوارزمية سلسلة ماركوف من التهيئات بالشكل:

$$\phi^{(0)} \rightarrow \phi^{(1)} \rightarrow \phi^{(2)} \rightarrow \dots \rightarrow \phi^{(k-1)} \rightarrow \phi^{(k)} \rightarrow \phi^{(k+1)} \rightarrow \dots \quad (22.3)$$

ومع تزايد عدد التكرارات، تتقارب هذه السلسلة نحو التوزيع الثابت الوحيد للنظام. بعد الحصول على التهيئة  $\phi^{(k)}$ ، يتم توليد التهيئة التالية  $\phi^{(k+1)}$  وفق الخطوات التالية:

#### 1. توليد متغيرات الزخم

يتم أولاً توليد الزخم المساعد  $p_{\phi^{(k)}}$  الموافق للتهيئة  $\phi^{(k)}$  عشوائياً من توزيع غاوسى:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}p_{\phi^{(k)}}^2\right). \quad (23.3)$$

#### 2. حساب الهاملتوني الابتدائي

بعد ذلك نحسب قيمة الهاملتوني الابتدائية:

$$H_i = S[\phi^{(k)}] + \frac{1}{2}p_{\phi^{(k)}}^2, \quad (24.3)$$

حيث تمثل  $S[\phi^{(k)}]$  دالة الطاقة الكامنة، والتي قد تمثل مثلاً الفعل الإقليدي في نظرية الحقل الكمية.

#### 3. تنفيذ الديناميك الهاملتوني

بعدها يتم تطبيق التطور الهاملتوني (أو الديناميك الجزئى). ويؤخذ طول المسار على الشكل:

$$l = L\epsilon. \quad (25.3)$$

حيث تُطبق خوارزمية الوثب الضفدعي  $L$  مرة بخطوة زمنية مقدارها  $\epsilon$ . في البداية نقوم بنصف خطوة لمتغير الموضع:

$$\phi^{(k)}(0 + 0.5\epsilon) = \phi^{(k)}(0) + 0.5\epsilon p_{\phi^{(k)}}(0). \quad (26.3)$$

بعد ذلك، وللقيم:

$$n = 1, 2, \dots, L - 1, \quad (27.3)$$

نكرر الخطوتين التاليتين:

$$p_{\phi^{(k)}}(n\epsilon) = p_{\phi^{(k)}}((n-1)\epsilon) - \epsilon \left. \frac{\partial S[\phi^{(k)}]}{\partial \phi^{(k)}} \right|_{(n-0.5)\epsilon}, \quad (28.3)$$

$$\phi^{(k)}((n+0.5)\epsilon) = \phi^{(k)}((n-0.5)\epsilon) + \epsilon p_{\phi^{(k)}}(n\epsilon). \quad (29.3)$$

وعند الخطوة الأخيرة  $n = L$ ، تصبح العلاقات:

$$p_{\phi^{(k')}}(L\epsilon) = p_{\phi^{(k)}}((L-1)\epsilon) - \epsilon \left. \frac{\partial S[\phi^{(k)}]}{\partial \phi^{(k)}} \right|_{(L-0.5)\epsilon}, \quad (30.3)$$

$$\phi^{(k')}(L\epsilon) = \phi^{(k)}((L-0.5)\epsilon) + 0.5\epsilon p_{\phi^{(k)}}(L\epsilon). \quad (31.3)$$

#### 4. حساب الهاملتوني النهائي

في نهاية المسار الديناميكي نحسب الهاملتوني النهائي:

$$H_f = S[\phi^{(k')}] + \frac{1}{2} p_{\phi^{(k')}}^2. \quad (32.3)$$

#### 5. اختبار ميتروبوليس

أخيراً نقرر قبول أو رفض الحالة المقترحة  $\phi^{(k')}$  باستعمال اختبار ميتروبوليس. نولد عدداً عشوائياً منتظماً  $r$  بين 0 و 1. فإذا تحقق الشرط:

$$r < e^{-\Delta H}, \quad (33.3)$$

حيث:

$$\Delta H = H_f - H_i, \quad (34.3)$$

فإن الحالة الجديدة تُقبل ويصبح:

$$\phi^{(k+1)} = \phi^{(k')}. \quad (35.3)$$

أما إذا لم يتحقق الشرط، فإن الحالة المقترحة تُرفض وتبقى السلسلة في الحالة السابقة:

$$\phi^{(k+1)} = \phi^{(k)}. \quad (36.3)$$

وبذلك تستمر الخوارزمية في توليد سلسلة من التهيئات الموزعة وفق التوزيع الاحتمالي المطلوب.

### 7.3 الارتباط الذاتي (Auto-correlation)

إن التهيئات الناتجة من خلال عملية ماركوف تعتمد على العناصر السابقة في السلسلة. يُعرف هذا الاعتماد باسم الارتباط الذاتي، ويمكن قياس هذه الكمية في المحاكاة العددية. تكون التهيئات مترابطة بشدة إذا كانت قيمة الارتباط الذاتي قريبة من 1، بينما تكون التهيئات مستقلة عن بعضها إذا كانت القيمة قريبة من 0. [23]

يجب البحث عن طرق لتقليل الارتباطات الذاتية، لأن ذلك يؤدي إلى تقليل خطأ مونتى كارلو لنفس طول سلسلة ماركوف. إن الاعتماد بين عناصر السلسلة يتناقص كلما ازدادت المسافة بينها داخل السلسلة.

عملياً، وبسبب الارتباطات الذاتية، لا ينبغي أخذ كل عنصر من عناصر السلسلة لإجراء القياسات، بل يجب تجاوز عدد معين من العناصر بين كل قياسين. يعتمد طول الارتباط الذاتي، وبالتالي عدد العناصر التي يتم تجاوزها، على تفاصيل النظرية والخوارزمية والمعاملات المختارة. [10]

نفرض أن  $O$  كمية مرصودة نحسبها في النموذج، حيث:

$$O_k = O(\phi^{(k)}) \quad (37.3)$$

تمثل  $O_k$  القيمة المحسوبة من التهيئة رقم  $k$ ، أي  $\phi^{(k)}$ . يُعطى متوسط القيمة  $\langle O \rangle$  والخطأ الإحصائي  $\delta O$  بالعلاقات:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N O_k, \quad \delta O = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (38.3)$$

حيث يكون التباين:

$$\sigma^2 = \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2$$

نلاحظ أن تقدير الخطأ السابق يكون صحيحاً فقط إذا كانت التهيئات الحرارية:

$$\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \phi^{(3)}, \dots, \phi^{(N)}$$

غير مترابطة إحصائياً. لكن في المحاكاة الحقيقية، فإن هذا الشرط لا يتحقق عادةً، إذ تكون التهيئات المتتالية مرتبطة ببعضها. ويُطلق على متوسط عدد التهيئات الفاصلة بين تهيئتين مستقلتين فعلياً اسم زمن الارتباط الذاتي.

إن التقدير الصحيح للخطأ في الكمية المرصودة يعتمد على زمن الارتباط الذاتي. [10]

لأخذ عدداً صحيحاً موجباً غير صفري  $a$  يسمى زمن التأخير (Lag Time)، عندها يمكن تعريف دالة التغير الذاتي ذات التأخير  $a$ ، والمشار إليها بـ  $\Gamma_a$ ، وكذلك دالة الارتباط الذاتي المعيارية  $\rho_a$ ، كما يلي:

$$\Gamma_a = \frac{1}{N-a} \sum_{k=1}^{N-a} (O_k - \langle O \rangle)(O_{k+a} - \langle O \rangle) \quad (39.3)$$

$$\rho_a = \frac{\Gamma_a}{\Gamma_0} \quad (40.3)$$

تتعدم هاتان الدالتان في حالة عدم وجود ارتباط ذاتي، كما أن:

$$\Gamma_0 = \sigma^2$$

في الحالة العامة، عندما لا تكون دالة الارتباط الذاتي مساوية للصفر، يصبح الخطأ الإحصائي في المتوسط:

$$\delta O = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \sqrt{2\tau_{\text{int}}} \quad (41.3)$$

حيث إن  $\tau_{\text{int}}$  يسمى زمن الارتباط الذاتي المتكامل (Integrated Auto-correlation Time)، ويُعطى بالعلاقة:

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{a=1}^{\infty} \rho_a \quad (42.3)$$

لكن عملياً، لا يمكن تحديد دالة الارتباط الذاتي بدقة عند قيم كبيرة لـ  $a$ ، ولذلك يجب قطع المجموع عند قيمة حدية  $M$ ، حتى لا يزداد الخطأ الناتج عن جمع الضجيج الإحصائي. [23] وعليه يصبح تعريف زمن الارتباط الذاتي المتكامل:

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{a=1}^M \rho_a \quad (43.3)$$

وتُختار القيمة  $M$  كأول عدد صحيح يحقق:

$$M \geq 4\tau_{\text{int}} + 1 \quad (44.3)$$

أما الخطأ في زمن الارتباط الذاتي المتكامل فيعطى بالعلاقة:

$$\delta\tau_{\text{int}} = \sqrt{\frac{4M}{N}} \tau_{\text{int}} \quad (45.3)$$

### 8.3 حساب الكميات الفيزيائية في النموذج

من أجل التحقق من صحة نتائج المحاكاة العددية، تتم مقارنة القيم المحسوبة مع النتائج التحليلية المعروفة للمهتز التوافقي الكومي. وبسبب تناظر الكمون تحت التحويل  $x \rightarrow -x$ ، فإن متوسط الموضع يساوي صفراً.

#### 1.8.3 متوسط الموضع $\langle x \rangle$

يعرف متوسط أي مؤثر  $A(x)$  بالعلاقة

$$\langle A(x) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} A(x) e^{-S(x)} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-S(x)} dx}. \quad (46.3)$$

وبالتالي

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-S(x)} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-S(x)} dx}. \quad (47.3)$$

بما أن الفعل  $S(x)$  للمهتز التوافقي زوجي بالنسبة للتحويل  $x \rightarrow -x$ ، فإن

$$e^{-S(x)} = e^{-S(-x)}, \quad (48.3)$$

بينما الدالة  $x$  فردية، لذلك يكون التكامل في البسط صفراً، ومنه

$$\boxed{\langle x \rangle = 0}. \quad (49.3)$$

#### 2.8.3 متوسط مربع الموضع $\langle x^2 \rangle$

يعرف بالعلاقة

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-S(x)} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-S(x)} dx}. \quad (50.3)$$

بالنسبة للمهتز التوافقي الكومي في الحالة القاعية نحصل على

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (51.3)$$

وعند استعمال الوحدات الطبيعية

$$\hbar = m = \omega = 1, \quad (52.3)$$

تصبح

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}. \quad (53.3)$$

### 3.8.3 الطاقة المتوسطة $\langle E \rangle$

تساوي طاقة الحالة للهزاز التوافقي

$$\langle E \rangle = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (54.3)$$

وفي الوحدات الطبيعية  $\hbar = m = \omega = 1$  نحصل على

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}. \quad (55.3)$$

تمثل هذه النتائج القيم النظرية المرجعية التي ستم مقارنتها مع النتائج المستخرجة عددياً بواسطة خوارزمية موني كارلو.

## 9.3 محاكاة نموذج الهزازات الكمية

في هذا الجزء سنعرض كيفية ترجمة خوارزمية موني كارلو الهاملتونية إلى برنامج حاسوبي باستعمال لغة بايثون (الإصدار 1.3)، وذلك من خلال بيئة التطوير Visual Studio Code. وسنتبع في تقديم مراحل بناء البرنامج منهجية تعتمد على عرض الخطوات الأساسية للخوارزمية بالتوازي مع السطور البرمجية المقابلة لها.

✓ أولاً :

أول خطوة في المحاكاة هي إنشاء تشبيكة ابتدائية تمثل إحدى الحالات المجهرية الممكنة للنظام. وفي حالة الهزاز التوافقي الكمي تمثل هذه التشبيكة مساراً من المسارات المحتملة للجسيم، أي مجموعة من مواضعه عند فواصل زمنية جزئية من الزمن الإقليدي. ويمكن تمثيل هذا المسار بمصفوفة أحادية البعد (شعاع)، حيث يمثل كل عنصر فيها قيمة الموضع عند لحظة زمنية معينة.

في هذه الدراسة استخدمت الانطلاقة الساخنة، حيث تُعطى عناصر المصفوفة قيماً عشوائية موزعة بانتظام داخل المجال  $[-\delta, +\delta]$ . ويهدف هذا الاختيار إلى البدء من تشكيلة عامة لا تحمل أي افتراض مسبق حول شكل المسار، مما يسمح للخوارزمية باستكشاف فضاء الحالات بكفاءة أكبر. ومن الناحية الفيزيائية فإن هذه الانطلاقة تعبر عن بدء عملية القياس بعد أن يكون النظام قد اتخذ بالفعل إحدى حالاته الممكنة، بدل الانطلاق من حالة خاصة محددة.

• **hot star** تكون في شكل دالة برمجية كما يأتي:

```
1 def hot_star(N, delta(:
2     # Generate random initial path between -delta and +delta #
3     path = np.zeros(N)
4     for i in range(len(path)):
5         x = np.random.uniform(-delta, delta)
6         path[i] = x
7     return path
```

✓ ثانياً:

ثاني خطوة في بناء الخوارزمية تتمثل في تعريف دالة الفعل  $\tilde{S}$ ، وهي الكمية الأساسية التي تحدد الوزن الإحصائي لكل مسار في صياغة التكامل على المسار. وتقوم هذه الدالة بحساب مجموع مساهمات اللاغرانجيان على جميع الفواصل الزمنية التي يتكون منها المسار المولد في الخطوة السابقة. في حالة المهتز غير التوافقي، يضاف إلى الكون التوافقي حد رباعي يسمح بالانتقال من النظام التوافقي إلى النظام غير التوافقي. وعليه يكتب الفعل في المتغيرات الفيزيائية على الشكل:

$$S = a \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x_i^2 + \lambda x_i^4 \right]. \quad (56.3)$$

وباستخدام المتغيرات اللابعدية تصبح علاقة الفعل:

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2\tilde{a}} (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)^2 + \frac{1}{2} \tilde{a} \tilde{\omega}^2 \tilde{x}_i^2 + \tilde{\lambda} \tilde{a}^2 \tilde{x}_i^4 \right]. \quad (57.3)$$

بعد ذلك يتم تعريف دالة برمجية باسم action تتولى حساب قيمة هذا المجموع لأي مسار يمرر إليها ضمن مدخلاتها. وتمثل القيمة المرجعة من هذه الدالة الفعل الكلي الموافق لذلك المسار، والذي يُستعمل لاحقاً في حساب الهاملتوني وتحديد احتمال قبول أو رفض التهيئة الجديدة ضمن خوارزمية موني كارلو الهاملتونية.

دالة حساب الفعل action تكون في شكل دالة برمجية كما يأتي:

```
1 def potential(x, m, omega, lamda_(:
2     # Compute potential energy for a single position #
3     return 0.5 * m * omega**2 * x**2 + lamda_ * m**2 * omega**3 * x**4
4
```

```

5 def action(path, m, omega, lamda_(:
6     # Compute Euclidean action S = kinetic + potential #
7     S = 0.0
8     N = len(path)
9     for i in range(N):
10        x_i = path[i]
11        x_ip1 = path[i + 1]
12        kinetic = 0.5 * m * (x_ip1 - x_i)**2
13        pot = potential(x_i, m, omega, lamda_)
14        S += kinetic + pot
15    return S

```

✓ ثالثاً :

بعد تعريف تدرج الفعل، يتم استعماله داخل خوارزمية الوثب الضفدعي التي تتولى حل معادلات هاملتون عددياً. ويعتمد هذا الحل على متغيرين هما المسار  $x$  والعزم المرافق  $p$  حيث يجري تطويرهما على طول زمن اصطناعي غير فيزيائي يرمز له عادة بـ  $\epsilon$  ويستعمل هذا الزمن فقط داخل الخوارزمية لتوليد تشكلات جديدة، ولا يمتلك أي معنى فيزيائي مباشر بالنسبة للنظام المدروس.

leapfrog تكون في شكل دالة برمجية كما يأتي:

```

1 def leapfrog(path, momentum, epsilon, L, m, omega, lamda_(:
2     #
3     Leapfrog integration for Hamiltonian dynamics
4     Returns new path and momentum after L steps
5     #
6     N = len(path)
7     current_path = path.copy()
8     current_momentum = momentum.copy()
9
10    # Half step for momentum
11    grad = action_gradient(current_path, m, omega, lamda_)
12    current_momentum -= 0.5 * epsilon * grad
13
14    # L-1 full steps
15    for i in range(L - 1):
16
17        # Full step for position
18        current_path += epsilon * current_momentum / m
19
20        # Full step for momentum )except at the end(
21        grad = action_gradient(current_path, m, omega, lamda_)
22        current_momentum -= epsilon * grad
23
24        # Last full step for position
25        current_path += epsilon * current_momentum / m
26
27        # Half step for momentum
28        grad = action_gradient(current_path, m, omega, lamda_)
29        current_momentum -= 0.5 * epsilon * grad
30

```

```
31 return current_path, current_momentum
```

تبدأ الدالة بإنشاء نسختين من المسار والعزم الحاليين:

```
1 current_path = path.copy() (
2 current_momentum = momentum.copy) (
```

ويهدف ذلك إلى المحافظة على التشبيكة الأصلية دون تعديلها أثناء عملية التطور الهاملتونى. بعد ذلك يتم حساب تدرج الفعل عند التشبيكة الحالية:

```
1 grad = action_gradient(current_path, m, omega, lamda_(
```

ويمثل هذا التدرج القوة المؤثرة على المسار في فضاء التشبيكات.

في المرحلة الأولى من خوارزمية الوثب الضفدعي يُجرى تحديث نصف خطوة فقط للعزم:

```
1 current_momentum -= 0.5 * epsilon * grad
```

حيث تمثل الكمية  $\epsilon$  طول الخطوة على الزمن الاصطناعي. ويؤدي هذا التحديث إلى تعديل العزم استجابة للقوة المستخرجة من تدرج الفعل. بعد ذلك تبدأ الحلقة الرئيسية للخوارزمية:

```
1 for i in range)L - 1(:
```

حيث يحدد المتغير  $L$  عدد خطوات التكامل المنفذة على طول المسار الهاملتونى. داخل كل دورة يتم أولاً تحديث الموضع (أو المسار):

```
1 current_path += epsilon * current_momentum / m
```

أي أن قيم عناصر المسار تتغير وفقاً للعزم الحالي، وهو ما يمثل خطوة كاملة للموضع. بعد تحديث الموضع يُعاد حساب تدرج الفعل عند التشبيكة الجديدة:

```
1 grad = action_gradient(current_path, m, omega, lamda_(
```

ثم يُحدّث العزم خطوة كاملة:

```
1 current_momentum -= epsilon * grad
```

وبذلك تنتقل الخوارزمية تدريجياً عبر فضاء التشبيكات مع المحافظة تقريباً على قيمة الهاملتونيان. بعد انتهاء الحلقة تنفذ خطوة إضافية أخيرة لتحديث المسار:

```
1 current_path += epsilon * current_momentum / m
```

ثم يحسب تدرج الفعل مرة أخرى:

```
1 grad = action_gradient(current_path, m, omega, lamda_(
```

ويُجرى تحديث أخير للعزم بمقدار نصف خطوة:

```
1 current_momentum -= 0.5 * epsilon * grad
```

إن استعمال نصف خطوة في بداية التكامل ونصف خطوة في نهايته يمنح خوارزمية الوثب الضفدعي خاصية التناظر الزمني وقابلية الانعكاس، وهما من أهم الأسباب التي تجعلها مناسبة لخوارزمية مونتى كارلو الهجينة.

وفي نهاية الدالة تُعاد قيم المسار والعزم بعد إتمام جميع خطوات التطور:

```
return current_path, current_momentum
```

✓ رابعاً: بعد الانتهاء من التطور الهاملتوني بواسطة طريقة الوثب الضفدعي، يتم تطبيق خطوة ميتروبوليس التي تتولى اتخاذ قرار قبول أو رفض التشبيكة الجديدة المقترحة. وتعد هذه الخطوة ضرورية من أجل تصحيح الأخطاء العددية الناتجة عن التكامل التقريبي لمعادلات هاملتون وضمان المحافظة على التوزيع الاحتمالي الصحيح للتشبيكات المولدة. في البداية يُحسب الفرق بين قيمة الهاملتونيان للتشبيكة الجديدة وقيمتها للتشبيكة الأصلية، ويُعرف بالعلاقة:

$$\Delta H = H_{\text{new}} - H_{\text{old}}. \quad (58.3)$$

إذا كانت قيمة  $\Delta H$  سالبة، فإن التشبيكة الجديدة تمتلك قيمة أصغر للهاملتونيان مقارنة بالتشبيكة السابقة، ولذلك تُقبل مباشرة وتعتمد كتشبيكة جديدة للنظام. أما إذا كانت قيمة  $\Delta H$  موجبة، فإن التشبيكة لا تُرفض مباشرة، وإنما تُقبل باحتمال يُعطى بالعلاقة:

$$P_{\text{acc}} = \exp(-\Delta H). \quad (59.3)$$

ولتنفيذ ذلك عملياً، يُولّد عدد عشوائي منتظم  $r$  بين الصفر والواحد:

$$r \in [0, 1]. \quad (60.3)$$

ثم تُقارن قيمة  $r$  باحتمال القبول  $P_{\text{acc}}$ . فإذا تحقق الشرط

$$r < P_{\text{acc}}, \quad (61.3)$$

تُقبل التشبيكة الجديدة، أما إذا لم يتحقق هذا الشرط فترفض ويُحتفظ بالتشبيكة السابقة ضمن سلسلة ماركوف.

وتضمن هذه الخطوة أن تبقى التشبيكات المولدة موزعة وفق التوزيع الاحتمالي المطلوب، كما تسمح بتصحيح الانحرافات الناتجة عن الأخطاء العددية في عملية التكامل، مما يحافظ على صحة النتائج الإحصائية للمحاكاة.

Metropolis تكون في شكل دالة برمجية كما يأتي:

```

1 # Metropolis acceptance step
2 delta_H = proposed_H - current_H
3
4 if delta_H > 0 or np.random.rand() > np.exp(-delta_H / hbar(:
5     return new_path, 1.0 # Accepted
6 else:
7     return path, 0.0 # Rejected

```

## 10.3 نتائج محاكاة نموذج الهزازات الكمية

في كل حساباتنا لمحاكاة نموذج الهزازات الكمية سوف نعتبر المتغيرات بدون أبعاد بحيث  $\bar{m} = \bar{\omega} = \Delta t$  وكذلك سوف نعتبر مسارات مقسمة  $N_\tau = 250$  هذا يعني أن الزمن الكلي يقدر ب:  $T = dt N_\tau$

سنقوم بتقييم دقة نتائج طريقة هاملتونيان موني كارلو (HMC) من خلال مقارنة القيم العددية المحسوبة لكل من متوسط الموضع  $\langle x \rangle$  ومتوسط مربع الموضع  $\langle x^2 \rangle$  مع القيم التحليلية المناظرة لهما ومقارنتها أيضاً مع نتائج طريقة موني كارلو (MC). وتعد هذه المقارنة معياراً مهماً لمدى قدرة طريقة (HMC) في تحسين دقة النتائج مقارنة ب (MC).

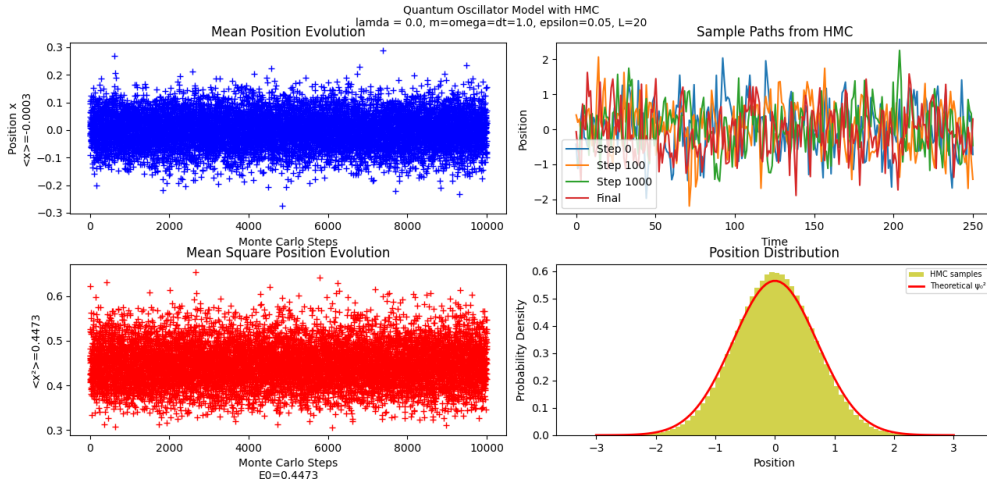
### 1 . دقة طريقة HMC مقارنة بالنتائج التحليلية

من أجل التحقق من صحة خوارزمية هايرد موني كارلو وقدرتها على إعادة إنتاج الخواص الفيزيائية للنظام المدروس، نقوم بمقارنة النتائج العددية المتحصل عليها مع النتائج التحليلية المعروفة للمهتز التوافقي الكومي. وتعد هذه المقارنة معياراً أساسياً لتقييم دقة الخوارزمية وكفاءتها في محاكاة النظام.

تشمل هذه المقارنة دراسة عدد من الكميات الفيزيائية المهمة، مثل متوسط الموضع  $\langle x \rangle$  ومتوسط مربع الموضع  $\langle x^2 \rangle$ ، بالإضافة إلى توزيع المواضع الاحتمالي. ويتم ذلك عند أعداد مختلفة من الخطوات من أجل متابعة تطور النتائج العددية ومدى اقترابها من القيم النظرية.

نلاحظ أن نتائج المحاكاة العددية المتحصل عليها باستعمال خوارزمية هايرد موني كارلو، كما هو موضح في الشكل 2.3، تتميز بدقة جيدة حيث تظهر توافقاً واضحاً مع النتائج التحليلية المرجعية. ويلاحظ أن قيم متوسط الموضع  $\langle x \rangle$  تتذبذب حول القيمة النظرية المنعدمة في المجال  $[-0.2, 0.2]$  بحيث أن متوسط الموضع يقدر ب 0.0003 بمعنى أن معدل الانحراف يساوي  $10^{-3}$  في حين تتذبذب قيم متوسط مربع الموضع  $\langle x^2 \rangle$  حول القيمة 0.45 في المجال  $[0.3, 0.6]$  بحيث أن متوسط مربع الموضع يقدر ب 0.447 بمعنى أن معدل الانحراف يساوي 0.051. وتُعزى هذه التذبذبات إلى

الطبيعة الإحصائية لخوارزميات موني كارلو، إذ يتم حساب المتوسطات انطلاقاً من عدد من العينات العشوائية، مما يؤدي إلى ظهور انحرافات صغيرة حول القيم النظرية. وهو ما يؤكد صحة الخوارزمية وقدرتها على إعادة إنتاج الخواص الفيزيائية للنظام المدروس بدقة عالية.



شكل 2.3: نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي بطريقة HMC

## 2. مقارنة زمن تنفيذ الخوارزميتين

في البداية قمنا بمقارنة الزمن التنفيذي لخوارزمية موني كارلو التقليدية مع خوارزمية هاملتونيان موني كارلو (HMC). عند اختيار عدد التقسيمات الزمنية  $N_\tau = 250$ ، استغرقت خوارزمية موني كارلو التقليدية حوالي 2.67 ثانية، بينما استغرقت خوارزمية HMC حوالي 7.7 ثوانٍ. ويُفسر ذلك بأن خوارزمية HMC تتطلب في كل تحديث إجراء عدد أكبر من العمليات الحسابية، إذ تعتمد على حل معادلات الحركة الهاملتونية باستعمال طريقة الوثب الضفدعي، بالإضافة إلى حساب العزوم والطاقة وإجراء اختبار القبول أو الرفض، مما يجعل كلفتها الحسابية أكبر عند الأبعاد الصغيرة للنظام.

عند زيادة عدد التقسيمات الزمنية إلى  $N_\tau = 2500$ ، انعكست النتيجة، حيث ارتفع الزمن التنفيذي لخوارزمية موني كارلو التقليدية إلى حوالي 14 ثانية، في حين بلغ الزمن التنفيذي لخوارزمية HMC حوالي 8 ثوانٍ فقط. ويعود ذلك إلى أن خوارزمية HMC تصبح أكثر كفاءة مع ازدياد حجم النظام وعدد درجات الحرية، إذ تسمح معادلات الحركة الهاملتونية بتحديث عدد كبير من متغيرات المسار في آن واحد واستكشاف فضاء الحالات بكفاءة أعلى. لذلك، ومع زيادة عدد نقاط الشبكة الزمنية، تصبح خوارزمية HMC أكثر ملاءمة للمحاكاة وأقل تكلفة زمنية من خوارزمية موني كارلو التقليدية، على الرغم من تعقيدها الحسابي الأكبر عند الأبعاد الصغيرة.

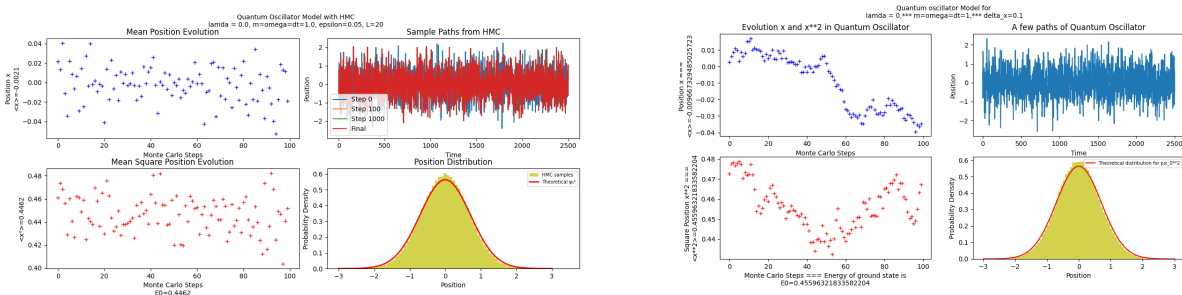
## 3. مقارنة دقة تنفيذ الخوارزميتين

نتقل الآن إلى مقارنة دقة الخوارزميتين في حساب الكميات الفيزيائية المختلفة. عند استعمال

1000 خطوة فقط، نلاحظ أن خوارزمية هايرد موني كارلو تعطي قيماً أقرب إلى النتائج التحليلية لكل من متوسط الموضع  $\langle x \rangle$  ومتوسط مربع الموضع  $\langle x^2 \rangle$  مقارنة بخوارزمية موني كارلو التقليدية. كما تُظهر الأشكال أن القيم الناتجة عن خوارزمية هايرد موني كارلو تتركز بصورة أفضل حول القيم النظرية المتوقعة.

أما بالنسبة لتوزيع المواضع، فنلاحظ أن النتائج المحسوبة باستعمال خوارزمية هايرد موني كارلو تتوافق بشكل أفضل مع التوزيع النظري، حيث تتجمع القيم حوله بكثافة أكبر، في حين تُظهر النتائج الناتجة عن خوارزمية موني كارلو التقليدية تشتتاً أوضح عند نفس عدد الخطوات. ويعكس ذلك قدرة خوارزمية هايرد موني كارلو على تحقيق درجة أعلى من الدقة والكفاءة الإحصائية حتى عند عدد محدود نسبياً من الخطوات كما نلاحظ في الشكل 3.3.

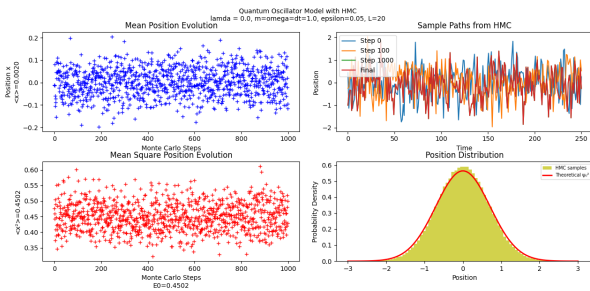
ومع زيادة عدد الخطوات تبدأ نتائج الخوارزميتين في التقارب تدريجياً، إذ تحسن تقديرات خوارزمية موني كارلو التقليدية وتقترب أكثر من النتائج التي توفرها خوارزمية هايرد موني كارلو. ويُعزى ذلك إلى أن زيادة عدد الخطوات تؤدي إلى تحسين عملية استكشاف فضاء المسارات، مما يسمح بالحصول على تقديرات أكثر دقة للكيمياء الفيزيائية المدروسة. ومع ذلك، فإن خوارزمية هايرد موني كارلو تتمكن من الوصول إلى هذه الدقة باستعمال عدد أقل من الخطوات، وهو ما يبرز تفوقها من حيث الكفاءة العددية. وفيما يلي سنعرض النتائج المتحصل عليها عند 10000 خطوة أنظر الشكل 4.3 ثم عند 100000 خطوة أنظر الشكل 5.3، بهدف دراسة تطور هذا التقارب بصورة أكثر وضوحاً.



(ب) هايرد موني كارلو hmc

(أ) موني كارلو mc

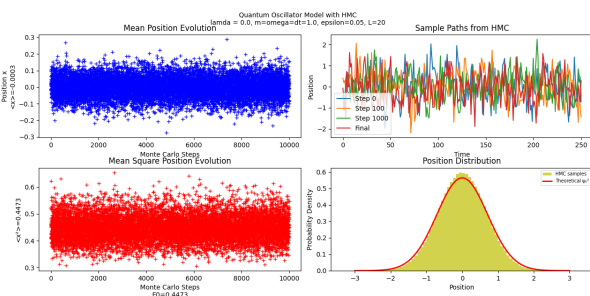
شكل 3.3: مقارنة بين نتائج محاكاة mc و hmc عند الف خطوة mcsteps = 1000



(ب) هايرد موني كارلو hmc

(أ) موني كارلو mc

شكل 4.3: مقارنة بين نتائج محاكاة mc و hmc عند عشرة الاف خطوة  $mcsteps = 10000$



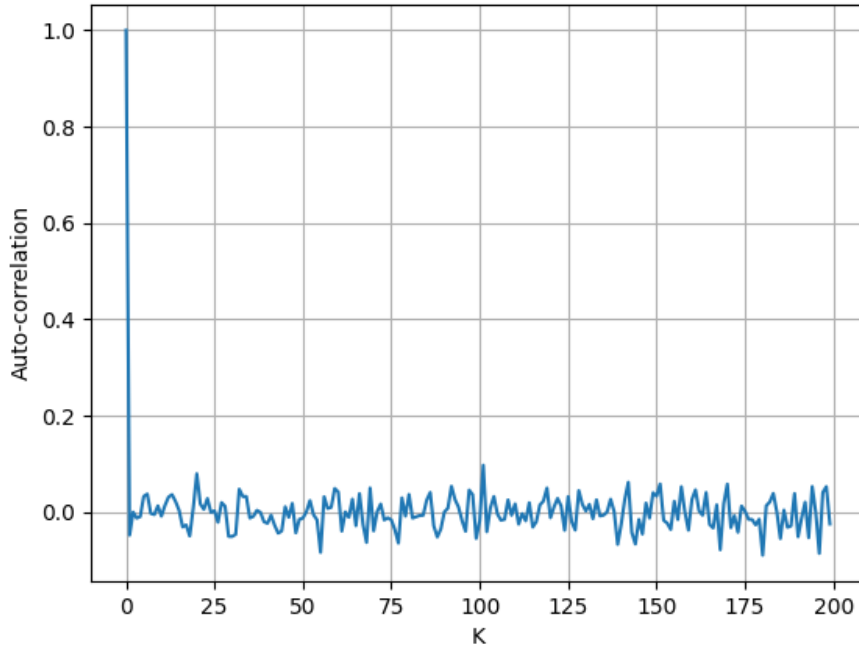
(ب) هايرد موني كارلو hmc

(أ) موني كارلو mc

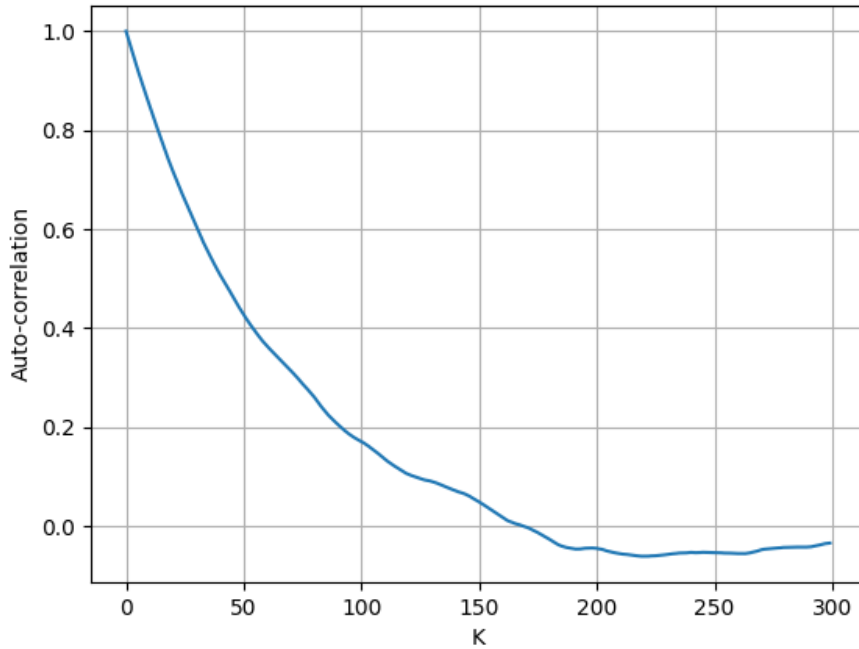
شكل 5.3: مقارنة بين نتائج محاكاة mc و hmc عند مئة ألف خطوة  $mcsteps = 100000$

#### 4 . الترابط الذاتي في الطريقتين

من خلال مقارنة دالة الترابط الذاتي للخوارزمتين، نلاحظ أن الترابط الذاتي في خوارزمية هايرد موني كارلو أنظر الشكل 6.3 يتناقص بسرعة أكبر مقارنة بخوارزمية موني كارلو التقليدية أنظر الشكل 7.3. وهذا يعني أن التهيئات المتتالية المولدة بواسطة خوارزمية هايرد موني كارلو تكون أقل اعتماداً على بعضها البعض، وبالتالي تكون العينات الناتجة أكثر استقلالية. ويرجع هذا السلوك إلى أن خوارزمية هايرد موني كارلو تستفيد من الديناميك الهاملتوني لتوليد انتقالات كبيرة نسبياً في فضاء التهيئات، مما يسمح باستكشاف أكثر فعالية لمختلف مناطق فضاء الحالات. أما في خوارزمية موني كارلو التقليدية فإن التعديلات المحلية الصغيرة تجعل التهيئات المتعاقبة متشابهة إلى حد كبير، وهو ما يؤدي إلى زيادة الترابط الذاتي بينها. ونتيجة لذلك يكون زمن الترابط الذاتي في خوارزمية هايرد موني كارلو أصغر من نظيره في خوارزمية موني كارلو التقليدية، مما يسمح بالحصول على عدد أكبر من العينات المستقلة فعلياً لنفس عدد خطوات المحاكاة. ويؤدي ذلك إلى تحسين الدقة الإحصائية للنتائج وتقليل الخطأ الإحصائي مع الحفاظ على كفاءة حسابية مرتفعة.



شكل 6.3: نتائج محاكاة دالة الترابط الذاتي في هايرد مونتي كارلو hmc



شكل 7.3: نتائج محاكاة دالة الترابط الذاتي في مونتي كارلو mc

من الشكل 6.3 أعطت النتيجة حين ينعدم الترابط تكون لما  $K$  تساوي حوالي 160 في مونتي كارلو و 2 في الهايرد يمكننا الان اثبات العلاقة التي ذكرناها سابقا في الترابط

$$M \geq 4\tau_{\text{int}} + 1$$

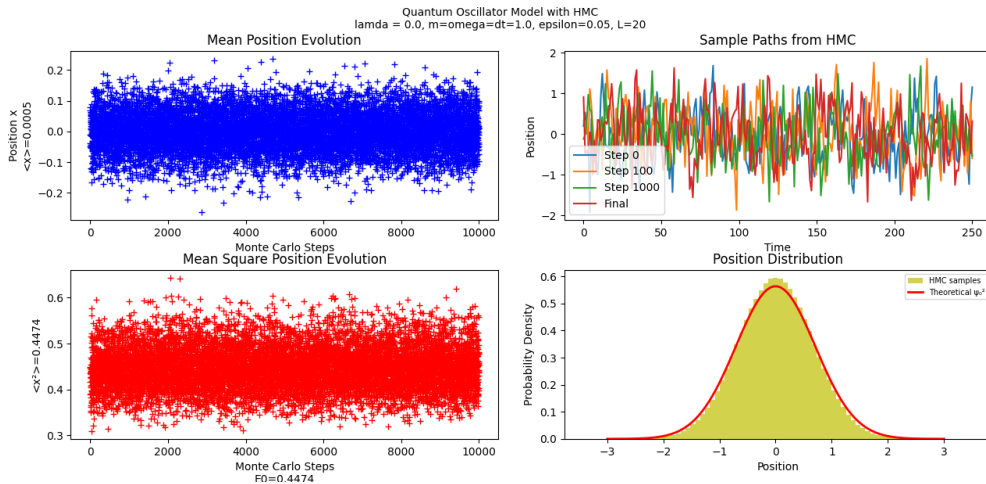
حيث أن

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{a=1}^M \rho_a$$

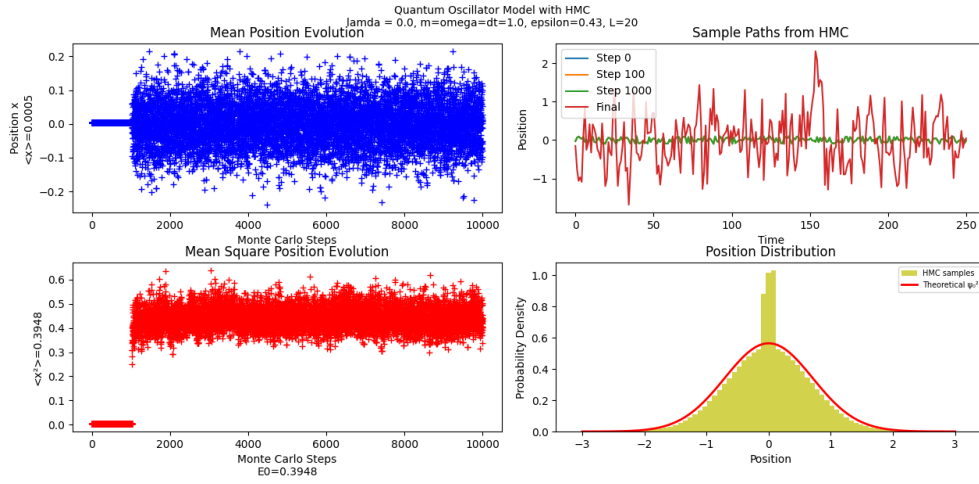
وجدت النتيجة في موني كارلو تساوي 42 و عند ضربها في 4 و نضيف 1 تعطي 169 و هذا ما يثبت العلاقة أعلاه . أما في الهايرد فتساوي 0.45 و تعطي 2.8

### 5 . نسبة القبول **rate acceptance**

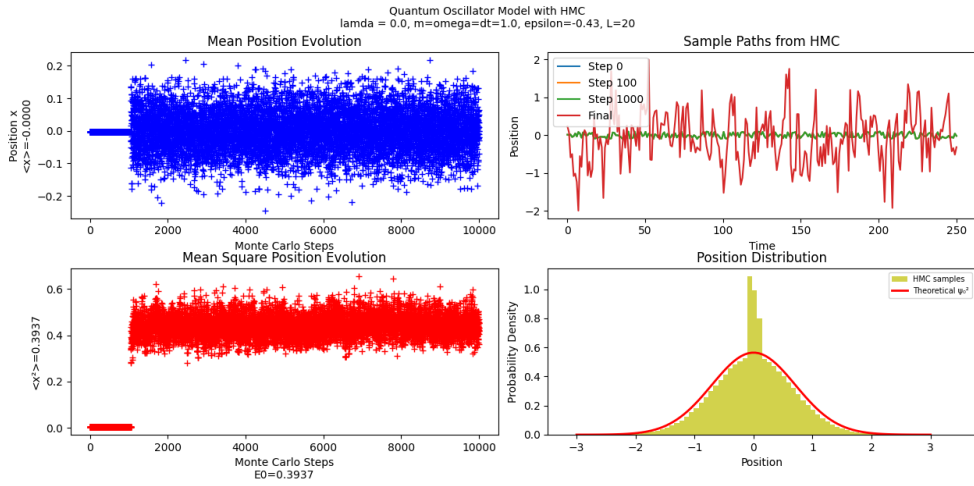
يُعد اختيار خطوة التكامل  $\epsilon$  من أهم المعلمات المؤثرة في أداء خوارزمية مونت كارلو الهجينة، إذ تتحكم هذه الكمية في دقة حل معادلات هاملتون بواسطة خوارزمية الوثب الضفدعي (Leapfrog). فمن الناحية النظرية تحافظ الديناميكا الهاملتونية على قيمة الهاملتوني، إلا أن عملية التكامل العددي تُدخل خطأً عددياً يعتمد بصورة مباشرة على قيمة  $\epsilon$ . فعندما تكون  $\epsilon$  كبيرة يزداد هذا الخطأ، مما يؤدي إلى تغير ملحوظ في الطاقة بين بداية المسار ونهايته وانخفاض احتمال قبول التهيئات الجديدة في خطوة ميتروبوليس. أما عند اختيار قيم صغيرة لـ  $\epsilon$ ، فإن مسارات التطور العددي تقترب أكثر من المسارات الهاملتونية الحقيقية، فتتحسن المحافظة على الطاقة ويزداد معدل القبول، إلا أن ذلك يكون على حساب زيادة الزمن الحسابي اللازم لإنجاز المحاكاة. لذلك فإن اختيار  $\epsilon$  يمثل عملية موازنة بين الدقة والكفاءة الحسابية. ومن أجل تحديد القيمة الأنسب، أُجريت عدة محاكاة باستعمال قيم مختلفة لهذا المعامل مع تثبيت باقي المعلمات، ثم تمت مقارنة النتائج المتحصل عليها. وتُظهر الأشكال الموضحة أسفله 8.3, 9.3, 10.3, و 11.3 أن تغيير  $\epsilon$  يؤثر بصورة واضحة على جودة النتائج واستقرارها، حيث تؤدي القيم غير المناسبة إلى انحرافات ملحوظة عن السلوك المتوقع، في حين تسمح قيمة وسطية مناسبة بالحصول على نتائج أكثر توافقاً مع القيم النظرية مع المحافظة على كفاءة حسابية جيدة.



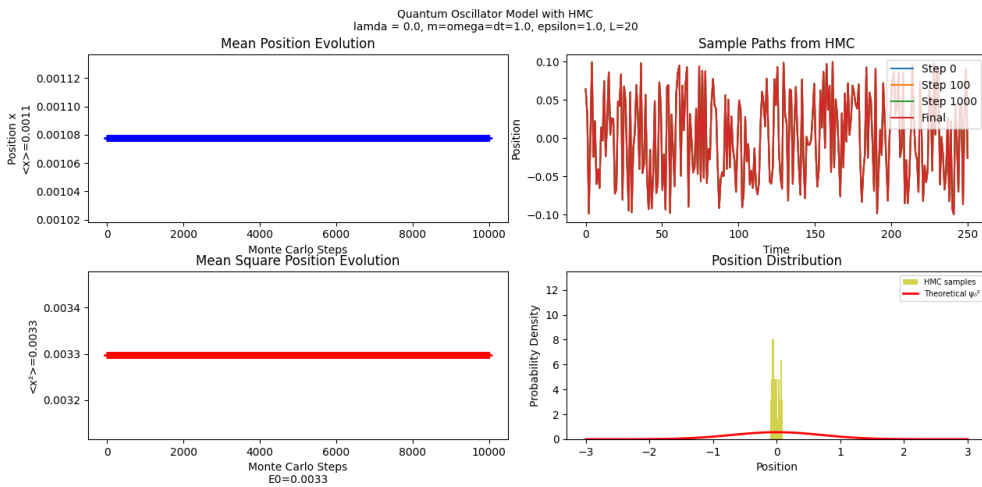
شكل 8.3: معدل القبول عند  $\epsilon = 0.05$



شكل 9.3: معدل القبول عند  $\epsilon = 0.43$



شكل 10.3: معدل القبول عند  $\epsilon = -0.43$



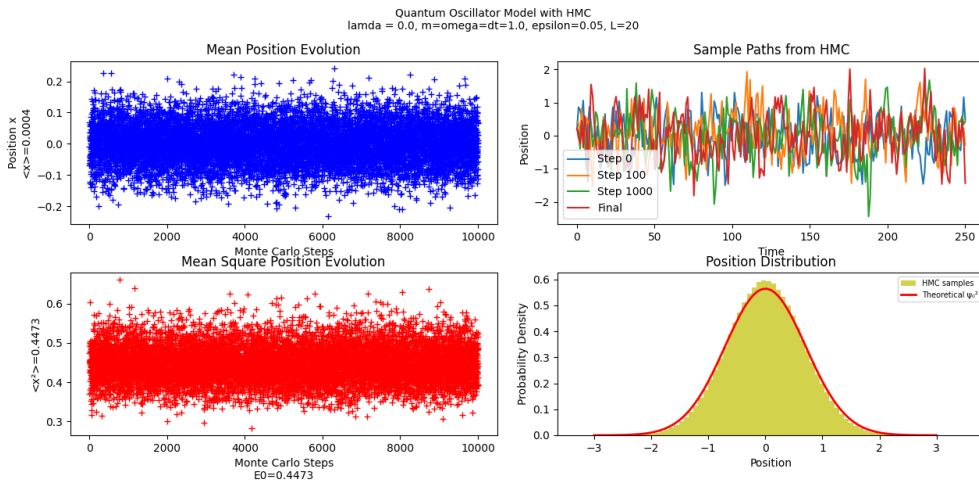
شكل 11.3: معدل القبول عند  $\epsilon = 1$

6. الاختلاف بين الهزاز التوافقي الكمي الخطي و الغير خطي باختلاف  $\lambda$

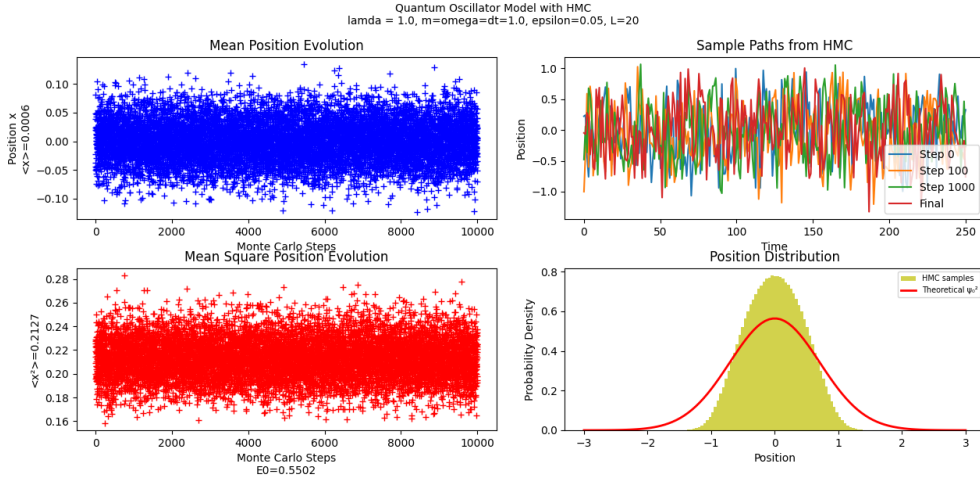
عند القيمة  $\lambda = 0$  يكون الجهد توافقياً صرفاً، وبالتالي تتبع الجسيمات توزيعاً قريباً من التوزيع الغاوسي المتمركز حول موضع التوازن. أما عند جعل  $\lambda \neq 0$ ، فإن الحد غير الخطي في الجهد يبدأ بالتأثير على ديناميكيات النظام، مما يؤدي إلى تغير واضح في الخصائص الإحصائية للمسارات المولدة بواسطة خوارزمية موني كارلو.

يظهر هذا التأثير أولاً في الهستوغرام، حيث يتغير شكل توزيع المواضع مقارنة بالحالة التوافقية. كما تتغير قيمة متوسط الموضع  $\langle x \rangle$  ومتوسط مربع الموضع  $\langle x^2 \rangle$ ، وهو ما يدل على تغير طبيعة التقلبات الكمية حول موضع التوازن.

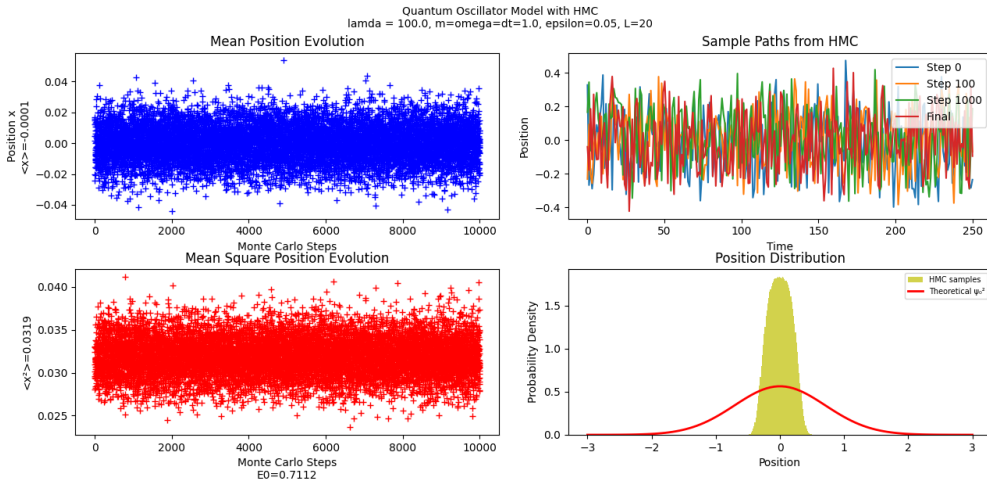
كلما ازدادت قيمة  $\lambda$ ، ازدادت مساهمة الحد غير الخطي في الجهد، وأصبح توزيع المواضع أبعد عن الشكل الغاوسي المثالي. ويعكس هذا التغير انتقال النظام تدريجياً من سلوك توافقي خطي إلى سلوك غير خطي، حيث تتأثر المسارات المسموح بها طاقياً بشكل أكبر بالحد التفاعلي المضاف إلى الجهد.



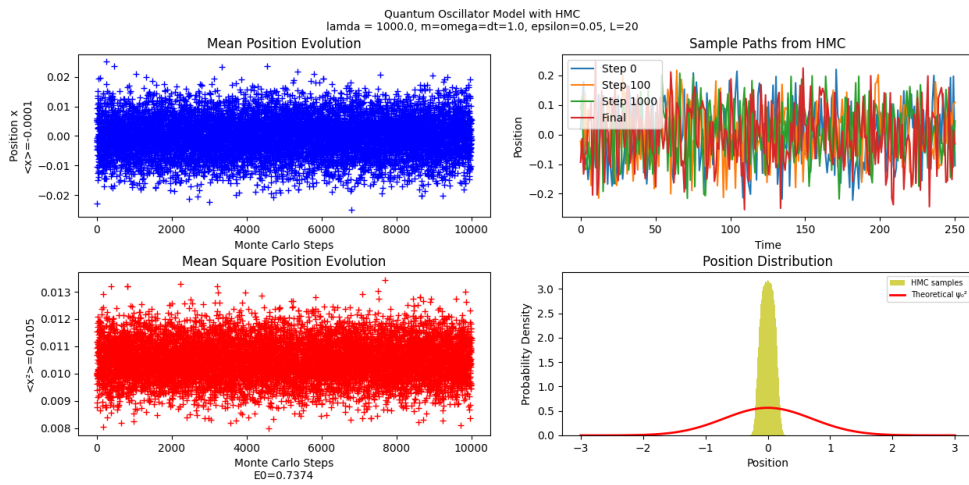
شكل 12.3: نتائج محاكاة الهزازات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة  $\lambda = 0$ .



شكل 13.3: نتائج محاكاة الهزات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة  $\lambda = 1$ .



شكل 14.3: نتائج محاكاة الهزات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة  $\lambda = 100$ .



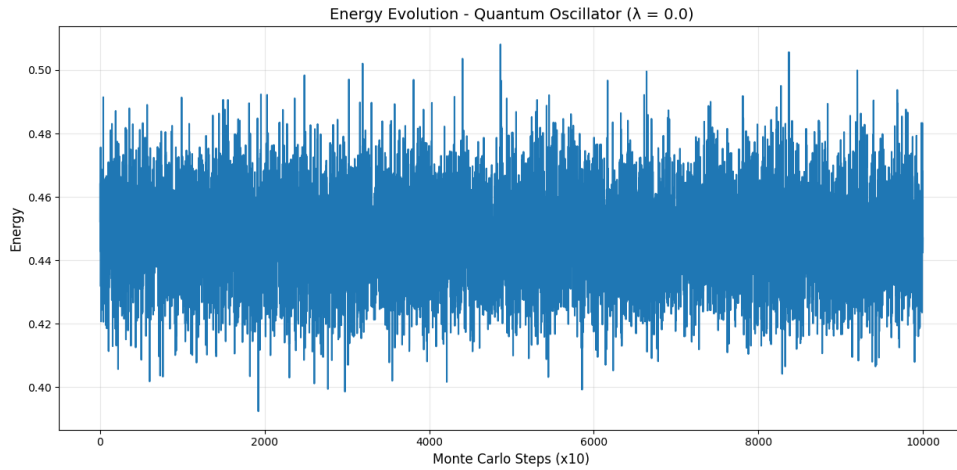
شكل 15.3: نتائج محاكاة الهزات الكمية بواسطة خوارزمية HMC للحالة  $\lambda = 1000$ .

## 7. نتائج الطاقة

في الحالة التوافقية ( $\lambda = 0$ ) ومع اختيار خطوة تكامل  $\epsilon = 0.05$ ، أعطت المحاكاة قيمة للطاقة الأرضية قدرها  $E \approx 0.447$  أنظر الشكل 16.3، وهي قيمة قريبة من القيمة التحليلية المتوقعة للهزاز التوافقي الكمي. ويشير هذا التقارب إلى أن الخوارزمية قادرة على إعادة إنتاج النتائج النظرية بدقة جيدة عند اختيار معلبات مناسبة للمحاكاة.

عند الانتقال إلى الحالة غير الخطية ( $\lambda \neq 0$ ) أنظر الشكل ?? ومقارنة النتائج لقيم مختلفة من  $\lambda$ ، لوحظ أن الطاقة لم تعد ثابتة، بل ازدادت تدريجياً مع زيادة معامل اللاتوافقية  $\lambda$ . ويعود ذلك إلى أن الحد غير الخطي المضاف إلى الجهد يزيد من مساهمة طاقة الوضع، مما يؤدي إلى ارتفاع مستويات الطاقة مقارنة بالحالة التوافقية البحتة. لذلك فإن تغير قيم الطاقة مع تغير  $\lambda$  يعد مؤشراً مباشراً على تأثير التآثر غير الخطي في النظام.

ومن جهة أخرى، عند تثبيت  $\lambda = 0$  وتغيير خطوة التكامل  $\epsilon$  أنظر الشكل ??، لوحظ أن قيم الطاقة المحسوبة بدأت تبتعد عن القيمة التحليلية المعروفة. ويمكن تفسير ذلك بأن زيادة  $\epsilon$  تؤدي إلى زيادة أخطاء التقطيع الناتجة عن تقريب التكامل الزمني، مما ينعكس على دقة القياسات الفيزيائية المستخرجة من المحاكاة. لذلك فإن اختيار قيمة مناسبة لـ  $\epsilon$  يعد أمراً ضرورياً للحصول على نتائج عددية دقيقة ومتوافقة مع التنبؤات التحليلية.



شكل 16.3: الطاقة

## 11.3 الخاتمة

في هذا الفصل قمنا بتطبيق خوارزمية مونتي كارلو الهجينة (HMC) على نموذج الهزاز الكمي، مع دراسة تأثير مختلف المعلمات العددية على دقة النتائج وكفاءة المحاكاة. وقد أظهرت المقارنات مع النتائج التحليلية توافقاً جيداً، خاصة عند اختيار قيم مناسبة لخطوة التكامل ( $\epsilon$ )، مما يؤكد موثوقية الخوارزمية وقدرتها على إعادة إنتاج الخصائص الفيزيائية للنظام المدروس. كما تمت مقارنة أداء الخوارزمية مع خوارزمية مونتي كارلو التقليدية، حيث بينت النتائج تفوق الخوارزمية الهجينة من حيث تقليل الارتباط الذاتي وتحسين جودة العينات المولدة. كذلك تمت دراسة تأثير المعامل غير الخطي ( $\lambda$ )، حيث لوحظ تغير واضح في التوزيعات الإحصائية والطاقات المحسوبة مع الانتقال من الحالة التوافقية إلى الحالة غير التوافقية. وتؤكد هذه النتائج فعالية خوارزمية HMC كأداة عددية قوية لدراسة الأنظمة الكمية المعقدة واستخراج خواصها الفيزيائية بدقة عالية.

المخلص العام

## الخلاصة العامة

كما هو معروف، فإن معظم مسائل ميكانيك الكم لا تمتلك حلولاً تحليلية مغلقة، مما يجعل اللجوء إلى الطرق العددية ضرورة أساسية للحصول على معلومات دقيقة حول سلوك الأنظمة الفيزيائية. وفي هذا السياق، تناولنا في هذه المذكرة دراسة طرق مونت كارلو، وبالأخص خوارزمية مونت كارلو بسلاسل ماركوف، بالإضافة إلى امتدادها المتقدم المتمثل في خوارزمية مونت كارلو الهايرد (HMC)، وذلك من أجل فهم فعاليتها ودقة نتائجها عند تطبيقها على أنظمة كمومية مختلفة. من أجل تطبيق هذه الطرق في ميكانيك الكم، تم اعتماد صياغة التكامل على المسار باعتبارها الإطار الأنسب لوصف تطور الأنظمة الكمية، حيث تسمح بإعادة صياغة المسألة الكمومية على شكل مجموع على المسارات مع وزن إحصائي من الشكل  $\exp(-S/\hbar)$ ، مما يتيح تطبيق أساليب إحصائية فعالة مثل مونت كارلو. وقد شكل هذا الأسلوب الجسر الأساسي بين ميكانيك الكم والطرق العددية الحديثة.

ركزنا في دراستنا على نموذج الهزاز الكمي التوافقي وغير التوافقي، باعتباره نموذجاً معيارياً لدراسة أداء الخوارزميات العددية. ولتسهيل الفهم ومقارنة النتائج، تم كذلك الاعتماد على نموذج أبسط مثل نموذج أيزينغ كمرحلة تمهيدية لاختبار صحة البرمجة والتحقق من السلوك الإحصائي للخوارزمية. تم تطوير برامج محاكاة بلغة Python لكل من خوارزمية مونت كارلو التقليدية وخوارزمية HMC، ومن خلال النتائج العددية تم التأكد من فعالية هذه الطرق في إعادة إنتاج الكميات الفيزيائية المتوقعة نظرياً. كما أظهرت المحاكاة أن خوارزمية HMC تتميز بتحسين ملحوظ في تقليل الارتباط الذاتي بين العينات مقارنة بالمونت كارلو التقليدي، مما ينعكس على سرعة التقارب وجودة الإحصائيات المستخرجة.

ومن خلال تحليل النتائج، تبين أن أداء الخوارزميات يعتمد بشكل حساس على عدة معاملات عددية، من بينها: - قيمة خطوة التكامل  $\epsilon$  ودورها في استقرار التكامل العددي. - معامل الضبط  $\lambda$  وتأثيره على خطية/لاخطية التحديثات وسلوك السلاسل. - عدد خطوات التوازن اللازمة للوصول إلى التوزيع المستقر. - معدل القبول في خوارزمية ميتروبوليس وتأثيره على كفاءة الاستكشاف في فضاء الحالات.

كما أظهرت النتائج العددية للهزاز الكمي التوافقي توافقاً جيداً مع النتائج التحليلية، حيث لوحظ

أن متوسط القيم الفيزيائية يتقارب بشكل كبير مع الحلول النظرية، مع اختلافات طفيفة تزداد في حالة الأنظمة غير التوافقية نتيجة تعقيد كمن النظام.

كذلك بينت دراسة الارتباط الذاتي (Autocorrelation) أن تقليل الترابط بين التكوينات المولدة عددياً يعد عاملاً أساسياً لتحسين جودة الإحصائيات، إلا أن تحسين هذا الترابط لا يؤدي دائماً إلى تحسين مباشر في المتوسطات الفيزيائية، بل يؤثر أساساً على كفاءة أخذ العينات واستقلاليتها.

وفي الختام، يتضح أن خوارزميات مونتي كارلو، وخاصة النسخة الهايرد منها، تمثل أداة قوية وفعالة لدراسة الأنظمة الكمومية، إلا أن دقتها وأدائها يعتمدان بشكل كبير على اختيار المعاملات العددية المناسبة وطبيعة النظام المدروس. لذلك، يبقى من المفيد إجراء دراسات إضافية لتحسين ضبط هذه المعاملات وتطوير أداء الخوارزميات لمختلف التطبيقات الأكثر تعقيداً في ميكانيك الكم.

المرجع

# المراجع

- [1] B. L. van der Waerden, Sources of Quantum Mechanics (Dover, New York, 1968).
- [2] S. G. Brush, "Resource letter HP-1: History of physics," Am. J. Phys. 55, 683–690 (1987).
- [3] Greiner, Walter, and Joachim Reinhardt. Field quantization. Springer Science & Business Media, 2013.
- [4] P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics (Oxford U. P., London, 1947).
- [5] Feynman, Richard P., Albert R. Hibbs, and Daniel F. Styer. Quantum mechanics and path integrals. Courier Corporation, 2010.
- [6] B. Yadri, "Computational physics: an introduction to Monte Carlo simulations of matrix field theory", World Scientific, 2017.
- [7] C. Morningstar, "The Monte Carlo method in quantum field theory," eprint arXiv:hep-lat/0702020.
- [8] A. Joseph, "Markov Chain Monte Carlo Methods in Quantum Field Theories: A Modern Primer," IISER Mohali, 2019.
- [9] Marise J. E. Westbroek, Peter R. King, Dimitri D. Vvedensky, and Stephan Dürr. User's guide to Monte Carlo methods for evaluating path integrals. American Journal of Physics 86, 293 (2018)
- [10] Johann Ostmeyer, Pavel Buividovich, *Minimal Autocorrelation in Hybrid Monte Carlo Simulations Using Exact Fourier Acceleration*, Computer Physics Communications, Vol. 313, Article 109624, 2025. Published by Elsevier B.V.
- [11] David J. Griffiths and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics, 3rd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2018.
- [12] Sapik, Aleksandra, and Willian M. Serenone. "Lattice Monte Carlo Study of the Harmonic Oscillator in the Path Integral Formulation.
- [13] Mittal, Shikhar, Marise JE Westbroek, Peter R. King, and Dimitri D. Vvedensky. "Path integral Monte Carlo method for the quantum anharmonic oscillator." European Journal of Physics 41, no. 5 (2020): 055401.

- [14] Paolo Brandimarte, *Handbook in Monte Carlo Simulation: Applications in Financial Engineering, Risk Management, and Economics*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 2014.
- [15] Malvin H. Kalos and Paula A. Whitlock, *Monte Carlo Methods*, 2nd Revised and Enlarged Edition, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2008.
- [16] Sukanta Deb." Variational Monte Carlo Technique" (Delhi). Resonance 2014
- [17] Jos Thijssen, "Computational Physics", Cambridge University Press, 2007
- [18] La perrière, Vanessa Bergeron. "L'Algorithme Metropolis-Hastings Projet de recherche CRSNG." (2010).
- [19] Khanoufa Nouredine, Ghouma Hanan, *Monte Carlo and Path Integral for Quantum Oscillators*, Master's thesis, University of elchahid Hamma Lakhdar, El Oued, 2024.
- [20] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.*, 21 1087-1092 (1953). doi: 10.1063/1.1699114
- [21] B. J. Alder, T. E. Wainwright, *J. Chem. Phys.*, 31 (1959) 459-466. doi: 10.1063/1.1730376
- [22] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, D. Roweth, *Phys. Lett.*, B195 (1987) 216-222. doi: 10.1016/0370-2693(87)91197-X
- [23] Anosh Joseph, *Markov Chain Monte Carlo Methods in Quantum Field Theories: A Modern Primer*, SpringerBriefs in Physics, Springer Nature, 2020.

## المخلص

تعتمد طرق مونتي كارلو على المعاينة العشوائية لدراسة المسائل الفيزيائية والرياضية المعقدة، وتتميز بقدرتها على حساب التكاملات متعددة الأبعاد ومحاكاة الأنظمة المختلفة. تتناول هذه المذكرة دراسة صياغة التكامل على المسار في ميكانيك الكم وتطبيقها على الهزاز التوافقي الكمومي، مع عرض أسسها النظرية والانتقال إلى الزمن الإقليدي لجعلها قابلة للمعالجة العددية. كما تم تطبيق طريقة مونتي كارلو التقليدية ثم طريقة مونتي كارلو الهجينة (HMC) المعتمدة على الديناميكا الهاملتونية وخوارزمية ميتروبوليس. وقد أُجريت مقارنة بين الطريقتين من حيث الدقة والكفاءة الإحصائية وسلوك الارتباط الذاتي. وأظهرت النتائج توافقاً جيداً مع الحلول التحليلية، مع تفوق طريقة HMC في تقليل الارتباط الذاتي وتحسين جودة النتائج العددية. كما أكدت الدراسة فعالية صياغة التكامل على المسار كأداة قوية لمحاكاة الأنظمة الكمومية واستخراج خواصها الفيزيائية. وتفتح هذه النتائج آفاقاً لتطبيق هذه الطرق على أنظمة كمومية أكثر تعقيداً.

الكلمات المفتاحية: ميكانيك الكم، التكامل على المسار، طريقة مونتي كارلو، طريقة هايردز مونتي كارلو، (HMC) الهزاز التوافقي الكمومي، الارتباط الذاتي، .

## Abstract

Monte Carlo methods rely on random sampling to study complex physical and mathematical problems and are particularly effective for evaluating multidimensional integrals and simulating various systems. This dissertation investigates the path integral formulation of quantum mechanics and its application to the quantum harmonic oscillator, presenting its theoretical foundations and the transition to Euclidean time, which makes numerical treatment possible. The conventional Monte Carlo method and the Hybrid Monte Carlo (HMC) method, based on Hamiltonian dynamics and the Metropolis algorithm, are implemented and compared. A comparison between the two methods is carried out in terms of accuracy, statistical efficiency, and autocorrelation behavior. The results show good agreement with the analytical solutions, while the HMC method demonstrates superior performance by reducing autocorrelation and improving the quality of numerical results. The study also confirms the effectiveness of the path integral formulation as a powerful tool for simulating quantum systems and extracting their physical properties. These findings open the way for applying such methods to more complex quantum systems.

**Keywords:** Quantum Mechanics, Path Integral, Quantum Harmonic Oscillator, Monte Carlo Method, Hybrid Monte Carlo (HMC), Hamiltonian Dynamics, Autocorrelation.