

Campo scalare: caso 2D

Angela Conaci, Francesco Zeno Costanzo

20 Aprile 2022

1 Introduzione

Lo scopo della simulazione è lo studio della termodinamica di un campo scalare nel caso bidimensionale con l'utilizzo di tecniche Monte Carlo.

1.1 Cenni teorici

L'azione di un campo scalare massivo può essere scritta come:

$$S = \int dt \mathcal{L} = \int d^4x \frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi - m^2 \varphi^2)$$

Nell'ambito della meccanica quantistica possiamo definire:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad \langle O \rangle = \frac{\text{Tr}(O e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}$$

La traccia tuttavia può essere presa su una base di stati qualsiasi, ad esempio su quella degli autostati del campo. Si arriva a riscrivere le espressioni precedenti in termini di path-integral Euclideo come:

$$Z = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\varphi \exp\left(\frac{-S_E[\varphi]}{\hbar}\right) \quad \langle O \rangle = \int \mathcal{D}\varphi P[\varphi] O[\varphi] \quad P[\varphi] = \frac{\exp\left(\frac{-S_E[\varphi]}{\hbar}\right)}{\int \mathcal{D}\varphi \exp\left(\frac{-S_E[\varphi]}{\hbar}\right)}$$

L'espressione del valore medio di O ha una interpretazione probabilistica che sarà alla base della simulazione tramite tecniche Monte Carlo, infatti così facendo le medie termiche della teoria di campo quantistica in D -dimensioni possono essere riscritte in termini di medie su un sistema statistico classico in $D + 1$ -dimensioni.

2 Simulazione

Discretizzando l'azione euclidea otteniamo:

$$\sum_n \left(\sum_{\mu=1}^2 (\varphi(n+\mu) - \varphi(n))^2 + \hat{m}^2 \varphi^2(n) \right) = \sum_n \left(\frac{1}{2} (\hat{m}^2 + 4) \varphi^2(n) - 2 \sum_{\mu=1}^2 \varphi(n) \varphi(n+\mu) \right)$$

preso il termine fra parentesi, quindi l'azione locale, è facile vedere completando il quadrato che possiamo alla fine ottenere una gaussiana:

$$\exp \left[-\frac{1}{2} (\hat{m}^2 + 4) \left(\varphi^2(n) - \frac{f(n)}{\hat{m}^2 + 4} \right)^2 \right]$$

dove con $f(n)$ si intende la somma sui primi vicini; si userà come algoritmo di simulazione un heat-bath locale campionando la distribuzione attraverso il box-muller, e secondo l'heat-bath la variabile campionata verrà poi sostituita a quella di partenza per far evolvere il sistema. Insieme all'heat-bath si può utilizzare l'algoritmo di over-relaxation, che però non essendo ergodico non può essere utilizzato da solo, il quale sfruttando la simmetria della gaussiana sposta i valori del campo in modo da non cambiare l'azione (ha quindi accettazione 1) e come si vedrà utilizzarlo porterà dei vantaggi, in quanto ci permette di muoverci su tutta la distribuzione, ad un costo

computazionale abbastanza ridotto.

Le variabili misurate saranno:

$$O_1 = \frac{1}{N_t N_s} \sum_n \hat{m}^2 \varphi^2(n) \quad O_2 = \frac{1}{N_t N_s} \sum_n (\varphi(n + \mu_s) - \varphi(n))^2 \quad O_3 = \frac{1}{N_t N_s} \sum_n (\varphi(n + \mu_t) - \varphi(n))^2$$

Data la funzione di partizione potremmo calcolare l'energia interna come:

$$U = - \left(\frac{\partial \log Z(\beta, V)}{\partial \beta} \right)_V$$

cioè derivata fatta a volume costante; potremmo fare il cambio di variabili: $\partial/\partial\beta = (m/N_t)\partial/\partial\hat{m}$ tuttavia così facendo non possiamo ottenere la derivata a volume costante perché: $\partial/\partial\hat{m} = (1/m)\partial/\partial a$ e sia $\beta = N_t a$ che $V = N_s a$ dipendono da a . Ciò che otteniamo invece è qualcosa proporzionale alla traccia del tensore energia impulso del campo:

$$-\frac{1}{N_t} \frac{\partial \log Z}{\partial \hat{m}} = \frac{V}{m} (\varepsilon - p) = \frac{N_s}{\hat{m}} \langle O_1 \rangle \quad (1)$$

per ottenere solo ε possiamo pensare ad un reticolo anisotropo, cioè $a_t = \xi a$ e dopo aver fatto il calcolo porre nuovamente $\xi = 1$ in quanto implementare effettivamente un reticolo anisotropo è più difficile rispetto al caso isotropo. Adesso $\partial/\partial\beta = (1/(N_t a))\partial/\partial\xi$ e si ottiene:

$$\frac{\varepsilon}{T^2} = \frac{N_t^2}{2} \langle O_1 + O_2 - O_3 \rangle \quad (2)$$

3 Limite al continuo

Fissando $N_s = 160$ e facendo variare N_t in un intervallo fra 2 e 14 tenendo costante il prodotto $N_t \hat{m} = 0.1$ (intervallo scelto in modo che $N_s \hat{m} \gg 1$) si ottiene:

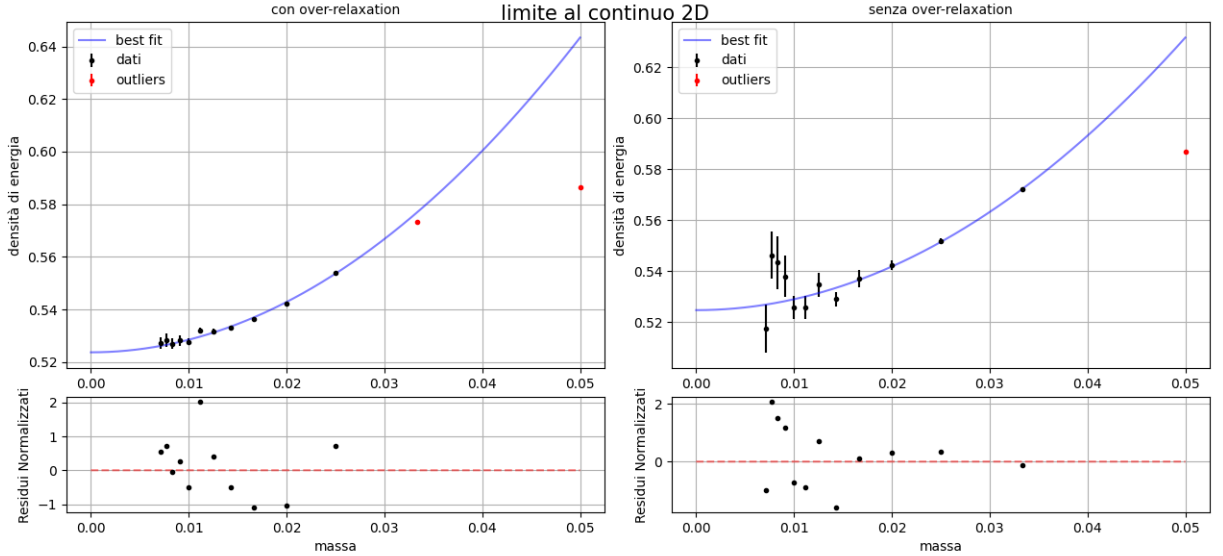


Figura 1: limite al continuo con e senza overrelax; modello: $a + bx^2$

con 4 chiamate di over-relaxation:

- $a = 0.5237 \pm 0.0005$
- $b = 47 \pm 1$
- $\chi^2 / (DOF) = 8 / 9$ (DOF)
- $corr(a, b) = -0.89$

senza overrelaxation:

- $a = 0.524 \pm 0.002$
- $b = 42 \pm 2$
- $\chi^2 / (DOF) = 14 / 10$ (DOF)
- $corr(a, b) = -0.91$

Nel limite di massa nulla l'equazione del moto è quella della corda elastica per cui il valore di teorico di ε/T^2 è $\pi/6 \simeq 0.5236$; si nota quindi che usare anche l'algoritmo di over-relaxation migliora l'accordo con la teoria e riduce l'errore di un ordine di grandezza; di seguito nelle simulazioni verrà quindi utilizzato.

4 Termodinamica del sistema

Si è visto che per calcolare U si può usare la (2) che fornisce $\varepsilon = U/V$; il problema è che per quel calcolo si è trascurata la costante \mathcal{N} presente nella funzione di partizione che sappiamo divergere nel limite continuo. Per sottrarre la parte divergente possiamo sottrarre al termine alla temperatura di interesse lo stesso termine calcolato ad una temperatura prossima allo zero, poiché ε/T^2 è una quantità mediata su tutto il reticolo cioè intensiva quindi è ragionevole aspettarsi che la sua parte divergente non dipenda dalla temperatura. Fissato \hat{m} si prende un \overline{N}_t tale che $\overline{N}_t \hat{m} = m/T \gg 1$:

$$\left. \frac{\varepsilon}{T^2} \right|_R = \left. \frac{\varepsilon}{T^2} \right|_T - \left. \frac{\varepsilon}{T^2} \right|_{T=0} = \frac{N_t^2}{2} (\langle O_1 + O_2 - O_3 \rangle_{N_t} - \langle O_1 + O_2 - O_3 \rangle_{\overline{N}_t})$$

Di seguito il risultato della simulazione avendo scelto $\hat{m} = 0.05$, $N_s = 160$ ed $\overline{N}_t = N_s$:

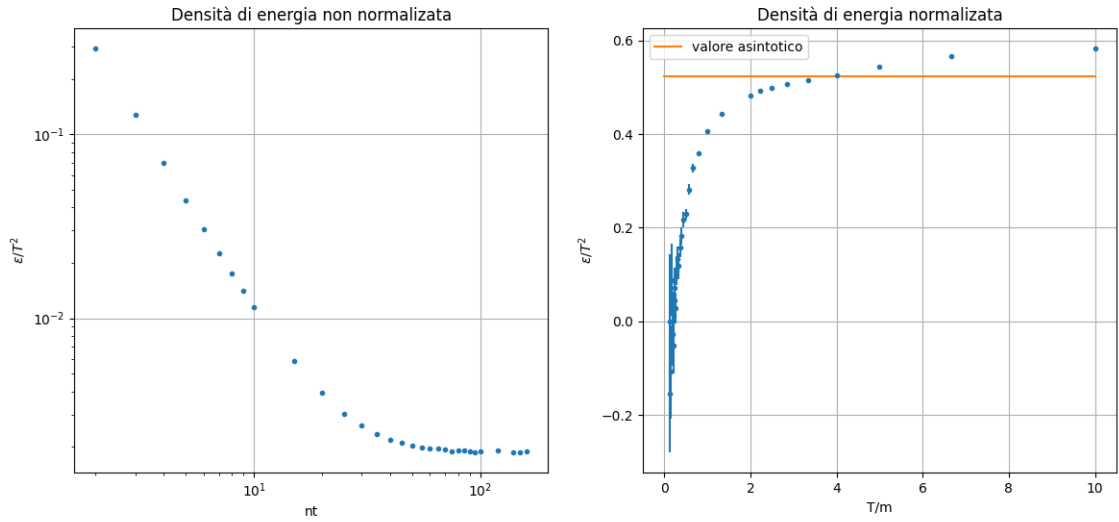


Figura 2: andamento della densità di energia

Si nota che la densità di energia rinormalizzata supera il valore limite a cui dovrebbe tendere ($\pi/6$) e ciò può essere dovuto probabilmente a effetti che la discretizzazione porta con sé.

5 Anomalia di traccia

Riprendiamo l'equazione (1) e moltiplichiamo per: N_t^2/N_s , ricordando che essendo in due dimensioni N_s è il "volume", e che $N_t = T^{-1}$

$$-\hat{m} \frac{N_t}{N_s} \frac{\partial \log Z}{\partial \hat{m}} = -\hat{m} \frac{\partial}{\partial \hat{m}} \frac{N_t}{N_s} \log Z = \frac{(\varepsilon - p)}{T^2} = N_t^2 \langle O_1 \rangle$$

e ricordando che, $\hat{m} \partial / \partial \hat{m} = a \partial / \partial a$ possiamo scrivere:

$$-\hat{m} \frac{\partial}{\partial \hat{m}} \frac{N_t}{N_s} \log Z = -a \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{1}{VT} \frac{-F}{T} \right) = -a \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{1}{VT} \frac{-fV}{T} \right) = -a \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{1}{T} \frac{p}{T} \right)$$

dove si è usato che: $p = -\partial F / \partial V = -\partial fV / \partial V = f$ dove F è l'energia libera di Helmholtz; il termine p/T^2 è intensivo quindi benché la derivata rispetto ad a porti anche una derivata rispetto al volume in questo caso esso si annulla. si arriva perciò ad ottenere:

$$-a \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{p}{T^2} \right) = T \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{p}{T^2} \right) \xrightarrow{\text{integrando}} \frac{p(T)}{T^2} - \frac{p(T_0)}{T_0^2} = \int_{T_0}^T \frac{1}{T} \frac{\varepsilon - p}{T^2}$$

Ora per ottenere p/T^2 ci basta ridefinire tutte le quantità sottraendo un termine a temperatura fissata che scegliamo $T_0 = 0$ come fatto sopra, quindi ora il vuoto ha densità di energia e pressione nulla, e se ci fossero divergenze come nel caso precedente queste verrebbero curate comunque dalla sottrazione fatta.

$$\frac{p(T)}{T^2} = \int_0^T \frac{1}{T} \left(\frac{\varepsilon - p}{T^2} \right)_R \left(\frac{\varepsilon - p}{T^2} \right)_R = N_t^2 (\langle O_1 \rangle_{N_t} - \langle O_1 \rangle_{\overline{N_t}})$$

alla fine si ottiene quindi:

$$\left(\frac{\varepsilon}{T^2} \right)_R = \left(\frac{\varepsilon - p}{T^2} \right)_R + \frac{p}{T^2}$$

Dal punto di vista del codice, l'integrale è stato eseguito interpolando la curva con polinomi di grado due usando una spline e poi ne è stato calcolato l'integrale. Per stimare l'errore si è operato come nel bootstrap: si sono effettuati ricampionamenti della curva, estraendo tramite box-muller, per ogni punto, un nuovo valore con media il valore originale e con varianza l'errore del punto, per poi usare la deviazione standard dal campione come errore associato al punto della curva integrale.

Anche in questo caso è stata presa $\hat{m} = 0.05$, $N_s = 160$ ed $\overline{N_t} = N_s$

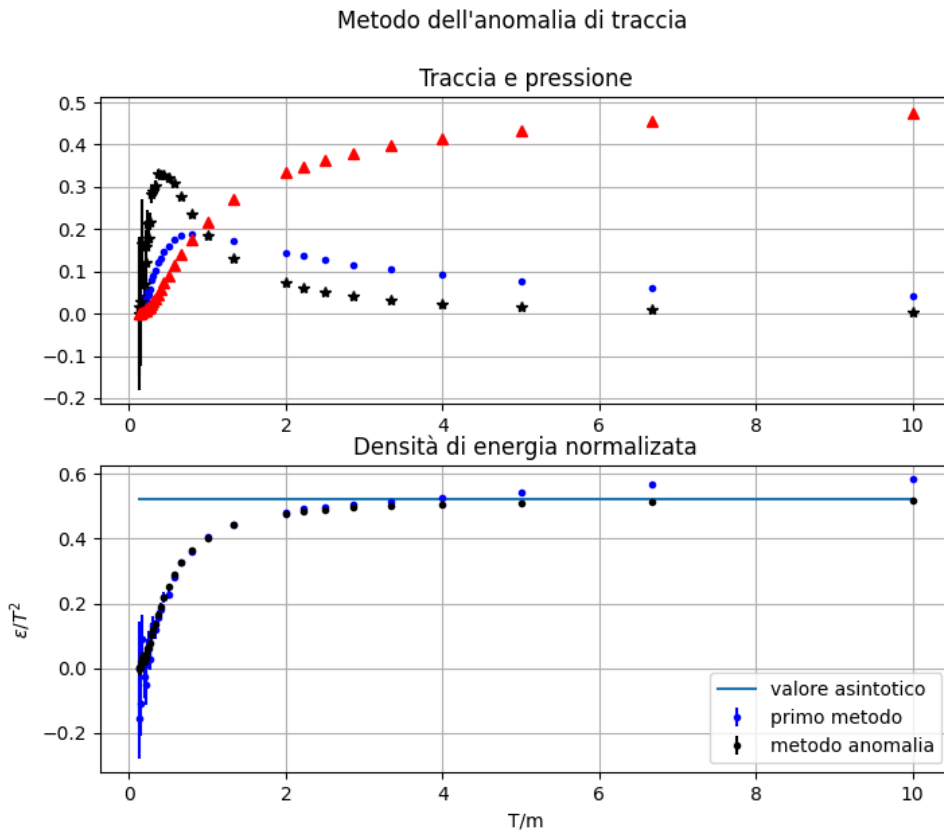


Figura 3: calcolo dell'anomalia e confronto

La curva blu nel pannello superiore della figura (3) rappresenta l'anomalia di traccia, la curva nera è la funzione integranda e la curva rossa il relativo integrale, quindi la pressione. Nel pannello inferiore vediamo in confronto delle curve per la densità di energia calcolate con il metodo precedente e con l'anomalia.