

# Stima dell'energia dello stato fondamentale e del gap di energia di sistemi quantistici con un metodo Monte Carlo ibrido

Francesco Zanni

February 28, 2024

## Obiettivo dell' esperienza

Questo lavoro presenta come scopo quello di realizzare un codice Monte Carlo ibrido che permetta di valutare numericamente l' energia del livello fondamentale e del primo gap di energia per sistemi quantistici. L'approccio tenuto è quello dell' integrale funzionale, che permette quindi di trattare il sistema quantistico in modo statistico e di conseguenza di misurare valori di aspettazione di variabili come medie statistiche. Per valutare l'efficacia e la validità di questa implementazione vengono inizialmente studiati due sistemi per i quali i risultati sono noti, analiticamente per quanto riguarda l'oscillatore armonico, e attraverso la teoria delle perturbazioni per quanto riguarda l'aggiunta di un termine quartico, i valori numerici cercati. Infine si applicherà il modello ottenuto all'oscillatore anarmonico a doppia buca.

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione teorica</b>	<b>3</b>
1.1	Funzione di Green . . . . .	3
1.2	Tempo immaginario . . . . .	3
1.3	Azione e meccanica statistica . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Applicazione ai sistemi considerati</b>	<b>6</b>
2.1	Oscillatore armonico . . . . .	6
2.1.1	Energia dello stato fondamentale . . . . .	6
2.1.2	Energy gap . . . . .	7
2.2	Oscillatore anarmonico . . . . .	7
2.2.1	Energia dello stato fondamentale . . . . .	8
2.2.2	Energy gap . . . . .	8
2.3	Densità di probabilità . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Implementazione numerica</b>	<b>9</b>
3.1	Monte Carlo ibrido . . . . .	9
3.1.1	Matrice Stocastica e Bilancio dettagliato . . . . .	9
3.1.2	Monte Carlo ibrido . . . . .	10
3.2	Leapfrog . . . . .	11
3.3	Bootstrap . . . . .	12
3.4	Parametri tecnici e note pratiche . . . . .	12
3.4.1	Parametri tecnici . . . . .	12
3.4.2	Notazione adimensionale . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Simulazioni e risultati</b>	<b>14</b>
4.1	Oscillatore Armonico . . . . .	14
4.1.1	Determinazione dei parametri leapfrog . . . . .	14
4.1.2	Energia del livello Fondamentale . . . . .	15
4.1.3	Primo gap di energia . . . . .	17
4.1.4	Densità di probabilità . . . . .	18
4.2	Oscillatore anarmonico . . . . .	18
4.2.1	Energia del livello fondamentale . . . . .	19
4.2.2	Primo gap di energia . . . . .	19
4.2.3	Densità di probabilità . . . . .	20
4.3	Potenziale a doppia buca . . . . .	21
4.3.1	Energia dello stato fondamentale . . . . .	21
4.3.2	Primo gap di energia . . . . .	22
4.3.3	Densità di probabilità . . . . .	23
<b>5</b>	<b>Commento dei codici</b>	<b>25</b>
5.1	Monte Carlo ibrido . . . . .	25
5.2	Verifica della reversibilità . . . . .	27
5.3	Autocorrelazione . . . . .	28
5.4	Correlazione . . . . .	28
5.5	Bootstrap . . . . .	29
5.6	Implementazioni dei diversi sistemi . . . . .	29
5.7	Densità di probabilità . . . . .	30

# 1 Introduzione teorica

## 1.1 Funzione di Green

In accordo con l'equazione di *Schrödinger*, l'evoluzione temporale di uno stato quantistico è data da  $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$  mentre la funzione d'onda si ottiene proiettando lo stato sulla base delle posizioni:  $\psi(q, t) = \langle q | \psi(t) \rangle$ . Di conseguenza, l'evoluzione temporale della funzione d'onda è descritta da:

$$\begin{aligned} \psi(q', t') &= \langle q' | \psi(t') \rangle = \langle q' | e^{-i\hat{H}(t-t')} |\psi(t)\rangle = \\ &= \int dq \langle q' | e^{-i\hat{H}(t-t')} | q \rangle \langle q | \psi(t) \rangle := \int dq G(q', t'; q, t) \psi(q, t) \end{aligned}$$

È stata definita la funzione di Green come il kernel integrale che restituisce la soluzione, è importante sottolineare inoltre che si inserisce una completezza per ogni grado di libertà  $\alpha$ , quindi è stato abbreviato  $dq = \prod_{\alpha} dq_{\alpha}$ .

Una proprietà importante per la funzione di Green è la regola di composizione, si può facilmente mostrare infatti che:

$$\begin{aligned} G(q', t'; q, t) &= \langle q' | e^{-i\hat{H}(t-t')} | q \rangle = \int dq'' \langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t'')} | q'' \rangle \langle q'' | e^{-i\hat{H}(t''-t)} | q \rangle = \\ &= \int dq'' G(q', t'; q'', t'') G(q'', t''; q, t) \end{aligned}$$

Osserviamo poi cosa succede in notazione di Heisenberg, dove gli operatori vengono pensati come dipendenti dal tempo

$$Q_{\alpha}(t) = e^{iHt} Q_{\alpha} e^{-iHt} \quad |q, t\rangle = e^{iHt} |q\rangle \quad Q_{\alpha}(t) |q, t\rangle = q_{\alpha}(t) |q, t\rangle$$

In questa notazione la funzione di Green risulta:

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \sum_n e^{-iE_n(t'-t)} \psi_n(q') \psi_n^*(q) \quad (1)$$

## 1.2 Tempo immaginario

Per proseguire la trattazione è utile considerare il tempo di evoluzione come immaginario, ovvero  $t = -i\tau$ ,  $t' = -i\tau'$  con  $\tau, \tau' \in \mathcal{R}$ .

Sostituendo in (1) si ottiene  $\langle q', t' | q, t \rangle = \sum_n e^{-E_n(\tau'-\tau)} \psi_n(q') \psi_n^*(q)$ , che ammette limite per  $(\tau' - \tau) \rightarrow +\infty$ .

Per valutarne il limite è conveniente suddividere l'intervallo  $[\tau, \tau']$  in  $N$  sottointervalli di ampiezza  $\varepsilon = \frac{\tau'-\tau}{N}$ . Si può ora riscrivere la funzione di Green inserendo  $N$  completezze, ottenendo:

$$\begin{aligned} \langle q' | e^{-H(\tau'-\tau)} | q \rangle &= \langle q' | \underbrace{e^{-H\varepsilon} \cdot e^{-H\varepsilon} \dots e^{-H\varepsilon}}_{n \text{ volte}} | q \rangle = \\ &= \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \langle q' | e^{-H\varepsilon} | q^{(N-1)} \rangle \langle q^{(N-1)} | e^{-H\varepsilon} | q^{(N-2)} \rangle \dots \langle q^{(1)} | e^{-H\varepsilon} | q \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

Se poi si inserisce esplicitamente  $H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N P_{\alpha}^2 + V(Q)$  si osserva che per la formula di Baker-Campbell-Hausdorff non è possibile separare l'esponente, ovvero in generale  $e^{-\varepsilon H} \neq e^{-\frac{\varepsilon}{2} \sum_{\alpha=1}^N P_{\alpha}^2} e^{-\varepsilon V}$ ,

questa relazione risulta vera soltanto nel caso in cui il commutatore tra il momento totale e il potenziale sia nullo, che non è vero in generale, oppure nel limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , che è il caso che andremo a valutare. Ogni termine in (2), sotto questo limite, risulta:

$$\begin{aligned} \langle q^{(l+1)} | e^{-\varepsilon H} | q^{(l)} \rangle &= \langle q^{(l+1)} | e^{-\frac{\varepsilon}{2} \sum_{\alpha=1}^n P_{\alpha}} | q^{(l)} \rangle e^{-\varepsilon V(q^{(l)})} = \\ &= e^{-\varepsilon V(q^{(l)})} \int \prod_{\beta=1}^n \frac{dp_{\beta}^{(l)}}{2\pi} \prod_{\alpha=1}^n e^{-\varepsilon(\frac{1}{2}(p_{\alpha}^{(l)})^2 - i p_{\alpha}^{(l)} (\frac{1}{\varepsilon} q_{\alpha}^{(l+1)} - q_{\alpha}^{(l)}))} \end{aligned}$$

Inserendo questo risultato in (2) si può notare che ogni termine in cui comparivano operatori è stato sostituito con il relativo autovalore, di conseguenza le integrazioni sui momenti e sulle coordinate possono essere svolte, essendo integrali gaussiani. Si ottiene il seguente risultato:

$$\langle q' | e^{-H(\tau' - \tau)} | q \rangle \simeq \int \prod_{l'=1}^{N-1} \prod_{\alpha=1}^n \frac{dq_{\alpha}^{l'}}{\sqrt{2\pi\varepsilon}} e^{-\sum_{l=0}^{N-1} \varepsilon L_E(q^{(l)}, \dot{q}^{(l)})} \quad (3)$$

È stata definita la lagrangiana *euclidea*  $L_E = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} (\dot{q}_{\alpha}^{(l)})^2 + V(q^{(l)})$  dove la derivata,  $\dot{q}$  è da intendersi discretizzata in  $\varepsilon$ .

Il termine *euclidea* si riferisce al segno relativo tra la parte cinetica e potenziale, che risulta essere positivo come conseguenza della trattazione in tempo immaginario scelta precedentemente. Ciò ha a che vedere con la metrica dello spazio tempo di Minkowski, che presenta una variazione di segno tra le coordinate spaziali e quella temporale, definendo il tempo come puramente immaginario il segno relativo viene scambiato e si torna ad una metrica euclidea.

### 1.3 Azione e meccanica statistica

A questo punto è immediato definire anche una *azione euclidea* discretizzata:

$$S_E[q] = \sum_{l=0}^{N-1} \varepsilon L_E$$

Questa azione risulta essere associata ad una traiettoria(discretizzata) nello spazio tempo, che connette i punti iniziali e finali, ovvero  $(q, \tau)$  e  $(q', \tau')$

È possibile introdurre, in modo completamente formale, la notazione

$$\langle q', \tau' | q, \tau \rangle = \int_q^{q'} Dq e^{-S_E[q]}$$

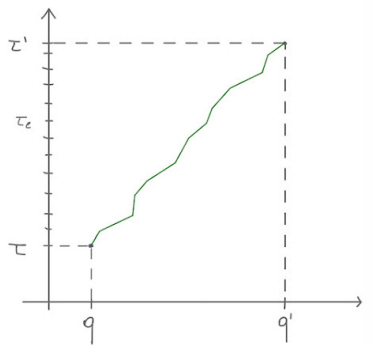


Figura 1:

Traiettoria discretizzata

l'integrale indica un'integrazione lungo tutti i cammini possibili che congiungono i due estremi, i quali sono fissati. Si può interpretare quindi la funzione integranda  $e^{-S_E[q]}$  come peso associato a ciascun cammino, in questo modo ci aspettiamo che tutti i cammini presentino un peso non nullo, ma i cammini con peso maggiore siano quelli che si discostano di poco da  $\delta S_E[q] = 0$ , ovvero dalla traiettoria classica.

Si può sottolineare come, avendo scelto di proseguire con la trattazione in tempo reale, si sarebbe ottenuta una espressione analoga, a meno di un fattore  $1/i$  all'esponente, si sarebbe ottenuta quindi una sovrapposizione di fasi complesse, e non di quantità reali come invece accade in tempo immaginario. Una quantità fondamentale a questo punto si ottiene facendo coincidere  $q$  e  $q'$  e integrando su tutti i valori di  $q$ , ovvero su tutti i cammini chiusi:

$$Z = \int dq \langle q | e^{-HT} | q \rangle = \text{Tr}(e^{-HT}) = \int Dq e^{-S_E[q]}$$

Questa quantità viene identificata con  $Z$  in quanto presenta la struttura di una *Funzione di partizione*, che permette quindi di definire una meccanica statistica, nella quale i valori di aspettazione sono dati da:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(A e^{-HT})}{\text{Tr}(e^{-HT})} = \frac{\sum_n \langle n | A e^{-HT} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-HT} | n \rangle} \rightarrow \langle 0 | A | 0 \rangle \quad (4)$$

Questa uguaglianza può essere dimostrata, per esempio, in un caso particolarmente rilevante per la trattazione successiva, ovvero per la funzione di correlazione:

$$A = Q_{\alpha_1}(\tau^*) Q_{\alpha_2}(0) \rightarrow \text{Tr}(A e^{-HT}) = \int dq \langle q' | e^{-H\tau'} Q_{\alpha_1}(\tau^*) Q_{\alpha_2}(0) e^{H\tau} | q \rangle$$

Ripetendo conti del tutto simili ai precedenti è possibile, inserendo completezze, far agire gli operatori  $Q_{\alpha_i}$  sugli autostati  $|q\rangle$  per ottenere i relativi autovalori:

$$\text{Tr}(A e^{-HT}) = \int Dq q_{\alpha_1}(\tau^*) q_{\alpha_2}(0) e^{-S_E[q]}$$

Il valore di aspettazione risulta di conseguenza:

$$\langle A \rangle = \frac{\int Dq q_{\alpha_1}(\tau^*) q_{\alpha_2}(0) e^{-S_E[q]}}{\int Dq e^{-S_E[q]}}$$

Si mostra ora in che modo questo valore, nel limite  $T \rightarrow \infty$  rappresenta la proiezione sullo stato di vuoto dell'operatore  $A$ :

• **Al denominatore :**

$$\langle q, \tau' | q, \tau \rangle = \langle q | e^{-HT} | q \rangle = \sum_n e^{-E_n T} \langle q | q_n \rangle \langle q_n | q \rangle = \sum_n e^{-E_n T} \psi_n(q) \psi_n^*(q)$$

Se ne prende ora il limite per  $\tau' - \tau = T \rightarrow \infty$  e si osserva che

$$\langle q, \tau' | q, \tau \rangle = e^{-E_0 T} \psi_0(q) \psi_0^*(q)$$

• **Al numeratore** analogamente si osserva:

$$\begin{aligned} \langle q' | Q_{\alpha_1}(\tau^*) Q_{\alpha_2}(0) | q \rangle &= \sum_{n, n'} e^{-n\tau'} e^{-n'\tau} \psi_n(q) \psi_n^*(q) \langle n | Q_{\alpha_1}(\tau^*) Q_{\alpha_2}(0) | n' \rangle \\ &\xrightarrow{T \rightarrow \infty} e^{-E_0 T} \psi_0(q) \psi_0^*(q) \langle 0 | Q_{\alpha_1}(\tau^*) Q_{\alpha_2}(0) | 0 \rangle \end{aligned}$$

È ora immediata la tesi:

$$\langle A \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{e^{-E_0 T} \psi_0(q) \psi_0^*(q) \langle 0 | Q_{\alpha_1}(\tau^*) Q_{\alpha_2}(0) | 0 \rangle}{e^{-E_0 T} \psi_0(q) \psi_0^*(q)} = \langle 0 | A | 0 \rangle$$

Il risultato fondamentale che si ottiene è che, dato un sistema, ovvero la sua Hamiltoniana  $H$  è stato possibile associare ai valori di aspettazione sul vuoto di un operatore  $A$ (qualsiasi)  $\langle 0|A|0\rangle$  una media statistica intesa in termini di path integral:  $\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int Dq A(q) e^{-S[q]}$ . È importante sottolineare però

che ciò si verifica sotto due condizioni:

- **Limite continuo:**  $\varepsilon \rightarrow 0$ , ovvero il limite per cui il numero di sottointervalli di tempo che sono stati inseriti tra  $\tau$  e  $\tau'$ , ovvero  $N$  tende a infinito, ed è quindi esatta la formula di BCH senza dover considerare i commutatori.
- **Proiezione sul vuoto:**  $T \rightarrow \infty$ , ovvero il limite per il contributo dominante nella formula dei valori di aspettazione è lo stato di vuoto.

Sarà fondamentale quindi analizzare in dettaglio questi due limiti per implementare numericamente questo metodo.

## 2 Applicazione ai sistemi considerati

### 2.1 Oscillatore armonico

Il primo sistema sul quale è stato applicato questo modo di procedere è l'oscillatore armonico(quantistico), nel quale l'hamiltoniana è data da:

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Q^2$$

Si procede innanzitutto passando al tempo immaginario e discretizzandolo come visto nell'introduzione teorica. L'azione che si ricava è la seguente:

$$S_E = \sum_{j=1}^N \varepsilon \left( \frac{1}{2}m \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_j^2 \right) \quad (5)$$

Data la forma dell'azione euclidea, il problema di meccanica statistica con funzione di partizione  $Z = \int \prod_{j=1}^N dx_j e^{-S_E(\{x_j\})}$  ricorda un *reticolo di spin*, troviamo infatti diverse somiglianze:

- I cammini chiusi impongono condizioni periodiche al contorno:  $x_{N+1} = x_1$
- I gradi di libertà  $(\{x_j\})$  sono variabili reali.
- L'azione presenta un contributo proporzionale a  $x_j^2$  e un contributo che può essere interpretato come accoppiamento tra primi vicini:  $x_{j+1}x_j$

Sotto queste considerazioni possiamo interpretare il problema studiando un reticolo di spin, la cui Hamiltoniana è data dall'azione euclidea  $S_E$  dell'oscillatore armonico.

#### 2.1.1 Energia dello stato fondamentale

La prima quantità che si può valutare è l'energia del livello fondamentale, ovvero  $\langle 0|H|0\rangle$ , che verrà valutata, come visto nell'introduzione teorica, in termini del problema di meccanica statistica:

$$\langle 0|H|0\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \langle H \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \langle T + V \rangle$$

Per valutare questa quantità è utile applicare il Teorema del viriale, secondo il quale  $T = \frac{1}{2}xV'(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ , in questo modo l'espressione dell'hamiltoniana si semplifica, diventando  $H = m\omega^2 x^2$ . per valutare il livello fondamentale quindi, l'unico valore di aspettazione necessario sarà

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{j=1}^N dx_j x_i^2 e^{-S_E[\{x_j\}]}$$

### 2.1.2 Energy gap

Per valutare il gap di energia tra il livello fondamentale e il primo stato eccitato torna utile una quantità vista in precedenza, la funzione a due punti  $\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle$ , vediamo infatti che esplicitandola e inserendo una completezza si ottiene la seguente espressione:

$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = \langle 0|e^{HT}Qe^{-H\tau}Q|0\rangle = \sum_n \langle 0|e^{HT}Qe^{-HT}|n\rangle \langle n|Q|0\rangle = \sum_n e^{-(E_n-E_0)\tau} |\langle 0|Q|n\rangle|^2 \quad (6)$$

Ora siccome  $Q \propto a + a^\dagger$ , per ortogonalità tra gli stati si avrà un contributo non nullo solo per  $n = 1$ , che viene abbassato a  $|0\rangle$  dall'operatore  $a$ , quindi:

$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = e^{-(E_1-E_0)\tau} |\langle 0|Q|1\rangle|^2 \quad (7)$$

In questo caso la media statistica da valutare sarà:

$$\langle x_i x_0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{j=1}^N dx_j x_i x_0 e^{-S_E[\{x_j\}]}$$

Si sottolinea come il valore  $\langle x_i^2 \rangle$  sia invariante per traslazione ed indipendente da  $i$ , mentre  $\langle x_i x_0 \rangle$  è sempre invariante per traslazione ma dipende da  $i$ , intesa come la distanza, in termini di passi reticolari, per la quale si calcola la correlazione.

L'implementazione numerica avrà quindi l'obiettivo di riprodurre la meccanica statistica definita dalla funzione di partizione, e in particolare dall'azione euclidea, rappresentata dal peso di Gibbs  $e^{-\beta H} \rightarrow e^{-S_E}$ .

## 2.2 Oscillatore anarmonico

Verrà implementato successivamente l'oscillatore anarmonico, ovvero un oscillatore armonico perturbato con termini di ordine superiore. In questo caso l'Hamiltoniana può essere definita in due modi, che rappresentano due diversi sistemi:

$$H_{a1} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \lambda X^4 \quad H_{a2} = \frac{P^2}{2m} + \lambda(X^2 - x_0^2)^2$$

Il primo modo,  $H_{a1}$  è il più semplice, si tratta appunto dell'Hamiltoniana di un oscillatore armonico al quale è stata applicata la perturbazione anarmonica di quarto grado. Il punto a favore di questa scelta è che il risultato di questo approccio può essere confrontato con la teoria delle perturbazioni, per verificarne l'efficacia.

La seconda scelta invece rappresenta un potenziale a doppia buca, con due minimi in  $x = \pm x_0$ . Espandendo il quadrato si trova  $V_{a2} = \lambda x_0^4 - 2\lambda x_0^2 x^2 + \lambda x^4$ : un risultato simile al precedentemente che presenta un segno opposto davanti al termine che altrimenti potrebbe essere identificato come armonico. Questo accade perché l'origine presenta un massimo locale. Ciò che si può fare però è studiare questo potenziale attorno a una delle due buche, quindi per  $x = x_0 + \xi$ , con questa trasformazione si osserva che

$$x \rightarrow x_0 + \xi \quad \Rightarrow \quad V_{a2} = 4\lambda x_0 \xi^2 + 4\lambda x_0 \xi^3 + \lambda \xi^4 + \lambda x_0^4.$$

Si ritrova un potenziale armonico perturbato, come prima da un termine quartico e in più da un contributo cubico, che sottolinea l'asimmetria della buca.

Dal punto di vista operativo questo potenziale verrà trattato in termini di  $x$  e non di  $\xi$  e si vorrà mostrare, oltre a una stima del livello fondamentale e del primo gap, che la densità di probabilità dello stato fondamentale risulta più marcata in prossimità dei due minimi.

### 2.2.1 Energia dello stato fondamentale

Per quanto riguarda l'energia del livello fondamentale la trattazione è analoga a quella vista in precedenza per l'oscillatore armonico, applicando il teorema del viriale si ottiene:

$$T_{a1} = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + 2\lambda x^4 \quad H_{a1} = m\omega^2 x^2 + 3\lambda x^4$$

$$T_{a2} = 2\lambda x^4 - 2\lambda x_0^2 x^2 \quad H_{a2} = 3\lambda x^4 - 4\lambda x_0^2 x^2 + \lambda x_0^4$$

Per questi sistemi non è più sufficiente valutare il valore medio  $\langle x^2 \rangle$  (o analogamente  $\xi$ ), ma sarà necessario valutare anche  $\langle x^4 \rangle$ .

### 2.2.2 Energy gap

Anche per valutare il gap di energia tra i primi due livelli energetici si procede analogamente, ma questa volta non è più possibile esprimere l'Hamiltoniana in termini di operatori di creazione e distruzione, quindi a priori non è possibile escludere nessun contributo.

$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = \langle 0|e^{HT}Qe^{-Ht}Q|0\rangle = \sum_n \langle 0|e^{HT}Qe^{-HT}|n\rangle \langle n|Q|0\rangle = \sum_n e^{-(E_n-E_0)\tau} |\langle 0|Q|n\rangle|^2$$

Pensando però al calcolo esplicito de valori di aspettazione si possono fare alcune considerazioni, per ogni valore di  $n$  infatti è necessario calcolare un integrale di questo tipo:

$$\langle 0|Q|n\rangle = \int dq \psi_0^* q \psi_n$$

È possibile sfruttare la parità delle funzioni:  $\psi_0$  è una funzione pari, mentre  $q$  è dispari. Se la funzione integranda è complessivamente dispari l'integrale avrà risultato nullo, di conseguenza daranno contributo soltanto i termini in cui  $|n\rangle$  è dispari, rendendo la funzione integranda complessivamente pari:

$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = e^{-(E_1-E_0)\tau} |\langle 0|Q|1\rangle| + e^{-(E_3-E_0)\tau} |\langle 0|Q|3\rangle| + \dots + e^{-(E_{2k+1}-E_0)\tau} |\langle 0|Q|2k+1\rangle| + \dots$$

Per questi sistemi, di conseguenza, la funzione di correlazione non dipenderà più soltanto dal gap di energia tra il livello fondamentale ed il primo livello eccitato.

Per estrapolare comunque questo valore si può pensare di procedere in due modi:

- **Valutare la funzione di correlazione per  $\tau$  grandi:** in questo modo, siccome  $E_1 - E_0$  è il più piccolo dei gap che compaiono, si va ad analizzare la funzione di correlazione dove tutti gli altri contributi si sono sostanzialmente esauriti. I problemi legati a questo tipo di approccio sono due: il primo riguarda la scelta di  $\tau$ , il quale deve essere abbastanza grande per far sì che il segnale relativo ai contributi successivi sia estinto, ma sufficientemente piccolo per fare sì che non si sia ancora estinto il segnale relativo al primo energy gap; il secondo problema riguarda la rumorosità del segnale, andando ad analizzare soltanto le code degli esponenziali si potrebbe ottenere un rapporto segnale/rumore troppo elevato.
- **Modellare la funzione come sovrapposizione di due esponenziali:** in questo modo si conservano soltanto i primi due contributi trascurando i successivi in quanto meno rilevanti.



## 2.3 Densità di probabilità

Un ulteriore calcolo numerico che è possibile eseguire, e che anzi si ottiene automaticamente dall'applicazione dell'algoritmo Monte Carlo è quello della densità di probabilità di trovare una particella in una regione  $x + \delta x$ . Si ha infatti

$$|\psi_0(x)|^2 = \frac{1}{\delta x} \frac{\sum_{n=1}^N \delta x - |x_i - x|}{\sum_{n=1}^N 1} \quad (8)$$

Dalle configurazioni che si ottengono tramite il processo Montecarlo infatti è immediato costruire un istogramma che conta per ogni traiettoria, a passi di  $\delta x$ , quante volte si passa per una regione dello spazio. Questo istogramma, una volta normalizzato, deve di conseguenza rappresentare, al limite per un numero di configurazioni che tende a infinito, la densità di probabilità di trovare una particella in un determinato intervallo della regione unidimensionale che può occupare.

Questa densità di probabilità verrà valutata per i tre sistemi e, nel caso dell'oscillatore armonico, confrontata con la densità prevista in meccanica quantistica, ovvero una distribuzione normale.

## 3 Implementazione numerica

Si trattano ora le tecniche e gli algoritmi utilizzati per implementare questo problema attraverso il software *MATLAB*

### 3.1 Monte Carlo ibrido

#### 3.1.1 Matrice Stocastica e Bilancio dettagliato

Il primo passo per implementare un algoritmo Monte Carlo è definire una *Matrice Stocastica*, che codifichi le probabilità di transizione da una configurazione ad un'altra. Proprietà fondamentale che questa matrice deve rispettare è che essa soddisfi il *bilancio dettagliato*:

$$\text{Matrice stocastica: } W_{ij} = P(i \leftarrow j) \quad \text{t.c.} \quad W_{ij}\Pi_j = W_{ji}\Pi_i$$

Per ottenere questa regola operativa per le transizioni si procede definendo un sistema hamiltoniano nel quale compaiono le variabili del sistema  $\phi_i$ :

$$\mathcal{H}[\{\phi_i, \pi_i\}] = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2} + S[\phi_i]$$

il sistema hamiltoniano definito è fittizio, e presenta come potenziale l'azione euclidea(energia) del sistema reale.

Il passo successivo è quello di generare i momenti coniugati, che non si riferiscono a nessuna quantità del sistema reale. Essi devono essere generati in modo da garantire il bilancio dettagliato, si sceglie una distribuzione Gaussiana:

$$P(\{\pi_i\}) = \left( \prod_i \frac{1}{2\pi} \right) e^{-\sum_j \frac{\pi_j^2}{2}}$$

Una volta ottenuta la configurazione dei momenti è possibile fare evolvere il sistema partendo dalle configurazioni iniziali e interrompere l'evoluzione dopo un certo tempo  $T_0$ , che sarà un parametro tecnico della simulazione. La configurazione finale così ottenuta fornirà le  $\{\phi'_i\}$ .

Dimostriamo ora perchè, con questa scelta di generazione dei momenti coniugati, è soddisfatta la condizione del bilancio dettagliato. Ciò che si vuole dimostrare è:  $W_{ij}\Pi_j = W_{ji}\Pi_i$ , ricordando che le probabilità sono date dal peso di Gibbs, ovvero  $\Pi_i = e^{-S[\{\phi_i\}]}$ , mentre sarà necessario valutare le

probabilità di transizione, queste saranno ottenute integrando sulle probabilità(gaussiane) di ottenere un set di momenti e sulla probabilità marginale del set di momenti  $\{\pi'_i\}$ , in quanto questi valori non vengono davvero utilizzati.

$$P(\{\phi_i\} \rightarrow \{\phi'_i\}) = \int D\pi D\pi' P_G(\{\pi_i\}) P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\})$$

Dove si utilizza la notazione  $D\pi = \prod_j d\pi_j$  Ciò che si integra sarà infatti il prodotto tra la probabilità di estrarre i momenti( $P_G(\{\pi_i\})$ ) e la probabilità che i dati iniziali  $\{\phi_i, \pi_i\}$  evolvano fino alla configurazione finale( $P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\})$ ).

Attraverso alcune proprietà è possibile verificare il bilancio dettagliato, infatti:

$$P_G(\{\pi_i\}) = P_G(\{-\pi_i\})$$

$$e^{-S[\{\phi_i\}]} P_G(\{\pi_i\}) = \left( \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i, \pi_i\}]} = \left( \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\mathcal{H}[\{\phi'_i, \pi'_i\}]} = e^{-S[\{\phi'_i\}]} P_G(\{\pi'_i\}) \quad (9)$$

$$P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\}) = P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, -\pi'_i\} \rightarrow \{\phi'_i, -\pi_i\}) P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi'_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi_i\})$$

Grazie a queste 3 considerazioni è immediato concludere che:

$$e^{-S[\{\phi_i\}]} P(\{\phi_i\} \rightarrow \{\phi'_i\}) = e^{-S[\{\phi'_i\}]} P(\{\phi'_i\} \rightarrow \{\phi_i\})$$

Ovvero è dimostrato il *Bilancio dettagliato*.

### 3.1.2 Monte Carlo ibrido

Le 3 proprietà (7) utilizzate per dimostrare il bilancio dettagliato però sono vere sotto alcune ipotesi che non sono garantite all' interno di una simulazione numerica:

- **Conservazione dell'energia:** è ciò che permette di affermare che l'hamiltoniana si conserva tra la condizione iniziale e finale. L'algoritmo che verrà utilizzato, e che verrà descritto a breve, ovvero il *leapfrog* viola questa conservazione, quindi sarà necessario introdurre una correzione che permetta di mantenere la veridicità del bilancio dettagliato.
- **Reversibilità:** è ciò che garantisce il terzo punto in (7). A precisione infinita è garantita dall'algoritmo *leapfrog*, ma sarà necessario verificarla numericamente per evitare che sia violata a causa di roundoff inevitabili dal calcolatore.

Per rimediare alla non conservazione dell' energia si utilizza il metodo del Monte Carlo Ibrido: invece di accettare senza controlli la configurazione finale  $\{\phi'_i\}$ , si introduce un passaggio simile all' algoritmo *Metropolis*, ovvero si accetta la configurazione finale con probabilità:

$$P_A(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\}) = \min\{1, e^{-\delta\mathcal{H}}\}$$

Se l'energia del sistema fittizio aumenta durante l'evoluzione temporale quindi, la configurazione finale potrebbe essere scartata e si ripartirebbe dunque dalla configurazione precedente ripetendo il passaggio.

Questo permette di garantire il bilancio dettagliato anche nel caso di non conservazione dell' energia, infatti

$$P(\{\phi_i\} \rightarrow \{\phi'_i\}) = \int D\pi D\pi' P_G(\{\pi_i\}) P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\}) P_{\mathcal{A}}(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\})$$

In questo modo è garantito  $e^{-\mathcal{H}[\phi, \pi]} P_{\mathcal{A}}(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\}) = e^{-\mathcal{H}[\phi', \pi']} P_{\mathcal{A}}(\{\phi'_i, \pi'_i\} \rightarrow \{\phi_i, \pi_i\})$ , ovvero il bilancio dettagliato.

### 3.2 Leapfrog

Si descrive ora il modo in cui le equazioni del moto vengono integrate per ottenere il flusso Hamiltoniano

$$(\{\phi_i, \pi_i\} \rightarrow \{\phi'_i, \pi'_i\}).$$

Dato un sistema Hamiltoniano generico caratterizzato dalla seguente Hamiltoniana e equazioni del moto:

$$H(\{\phi_i\}\{\pi_i\}) = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2} + V(\{\phi_i\}) \quad , \quad \begin{cases} \dot{\phi}_i &= \frac{\partial H}{\partial \pi_i} \\ p\dot{\pi}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \phi_i} \end{cases}$$

L' algoritmo implementato per integrare queste equazioni, come introdotto in precedenza è il *leapfrog*. Esso permette di ottenere un errore di ordine  $\epsilon^3$  pur utilizzando il metodo di eulero per integrare, risultando quindi meno pesante a livello computazionale per esempio di un algoritmo *Runge Kutta* allo stesso ordine di precisione. Il primo passo è scrivere gli sviluppi in serie, fino al secondo ordine, di coordinate e momenti:

$$\begin{cases} \phi_i(\tau + \epsilon) = \phi_i(\tau) + \epsilon \dot{\phi}_i(\tau) + \frac{\epsilon^2}{2} \ddot{\phi}_i(\tau) + O(\epsilon^3) \\ \pi_i(\tau + \epsilon) = \pi_i(\tau) + \epsilon \dot{\pi}_i(\tau) + \frac{\epsilon^2}{2} \ddot{\pi}_i(\tau) + O(\epsilon^3) \end{cases}$$

Si procede ora col valutare le espressioni che compariono negli sviluppi, in particolare le derivate prime e seconde, in accordo con le equazioni di Hamilton

$$\begin{cases} \dot{\phi}_i &= \frac{\partial H}{\partial \pi_i} = \pi_i \\ \ddot{\phi}_i &= \dot{\pi}_i = -\frac{\partial H}{\partial \phi_i} \end{cases} \quad , \quad \begin{cases} \dot{\pi}_i &= \ddot{\phi}_i \\ \ddot{\pi}_i &= \frac{d}{dt} \left( -\frac{\partial H}{\partial \phi_i} \right) = -\sum_j \frac{\partial^2 H}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \dot{\phi}_j = -\sum_j \frac{\partial^2 H}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \pi_j \end{cases}$$

Risulta più efficace però scrivere lo sviluppo al primo ordine per  $\ddot{\pi}_i$ , in quanto presentando un fattore moltiplicativo  $\epsilon^2$  rimarrà corretto fino all' ordine fissato, ovvero  $\epsilon^3$ :  $\ddot{\pi}_i = -\frac{1}{\epsilon} \left( \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon) - \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau) \right) + O(\epsilon)$ .

Le espressioni così ottenute per le derivate prime e seconde possono essere sostituite all' interno degli sviluppi in serie, per ottenere:

$$\begin{cases} \phi_i(\tau + \epsilon) = \phi_i(\tau) + \epsilon \pi_i(\tau) + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau) + O(\epsilon^3) = \phi_i(\tau) + \epsilon \left( \pi_i(\tau) + \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau) \right) + O(\epsilon^3) \\ \pi_i(\tau + \epsilon) = \pi_i(\tau) + \epsilon \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau) - \frac{\epsilon}{2} \left( \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon) - \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau) \right) + O(\epsilon^3) \end{cases}$$

Il passaggio fondamentale a questo punto è riorganizzare l' espansione in serie per i momenti sommando un termine  $-\frac{\epsilon}{2} \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon)$ , in modo da riconoscere uno step di integrazione dello schema di Eulero:

$$\left( \pi_i(\tau + \epsilon) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon) \right) = \left( \pi_i(\tau) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau) \right) - \epsilon \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon) + O(\epsilon^3) = \tilde{\pi}_i(\tau + \frac{3}{2}\epsilon) = \tilde{\pi}_i(\tau + \frac{1}{2}\epsilon) - \epsilon \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon) + O(\epsilon^3)$$

È stato identificato lo step di integrazione di Eulero con  $\tilde{\pi}_i = \pi_i(\tau) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau)$ . Anche nell' espansione per le coordinate si trova uno step di integrazione di Eulero dei momenti  $\pi_i$ .

Concludendo la forma finale per le equazioni del moto che si ottiene con questo metodo risulta essere:

$$\begin{cases} \phi_i(\tau + \epsilon) = \phi_i(\tau) + \epsilon \pi_i(\tau + \frac{\epsilon}{2}) \\ \pi_i(\tau + \frac{3}{2}\epsilon) = \pi_i(\tau + \frac{\epsilon}{2}) - \epsilon \frac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau + \epsilon) \end{cases}$$

Questo schema integrativo presenta alcune proprietà:

- Risulta esatto a meno di ordini  $O(\varepsilon^3)$  e garantisce la reversibilità, almeno in precisione infinita.
- Presenta la stessa complessità computazionale di uno schema di Eulero pur essendo esatto a un ordine in più;

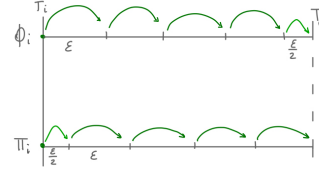


Figura 2: Rappresentazione dello schema *leapfrog*

- Le coordinate e i momenti procedono sfalsati di  $\frac{\varepsilon}{2}$  inseguendosi tra loro. Sarà quindi necessario compiere un primo passo di ampiezza  $\varepsilon/2$  per i momenti, dopo di che si procederà valutando in modo alternato coordinate e momenti, per poi concludere con un ultimo "mezzo passo" per le coordinate in modo da terminare l'integrazione dopo un tempo uguale per le due quantità.

È importante sottolineare che questo metodo di integrazione è reso possibile unicamente dalla struttura delle equazioni di Hamilton.

### 3.3 Bootstrap

Siccome ci si aspetta che i risultati numerici ottenuti scalino insieme al passo reticolare  $a$ , per ottenere una stima migliore si valuta l'energia del livello fondamentale e il primo gap per diversi valori del passo reticolare per poi procedere con un'extrapolazione per  $a = 0$ .

In particolare si osserva che i risultati presentano un andamento lineare con  $a^2$ , rendendo sufficiente un fit di secondo grado.

Si vuole tenere conto però sia dei valori ottenuti che delle relative incertezze, si potrebbe procedere canonicamente con il metodo dei minimi quadrati, nel nostro caso però si è proceduto in modo numerico attraverso un metodo *Bootstrap*.

Questo metodo tiene conto di un set di dati  $\{d_i\}$ , dei relativi errori  $\{\delta_i\}$  e dei valori del passo reticolare ad essi associati:  $\{a_i\}$  e permette di valutare i coefficienti di un polinomio di grado arbitrario, con i relativi errori, che meglio interpola i dati.

L'idea di questo metodo è quella di ripetere il fit polinomiale built-in di Matlab (*polyfit*) più volte, ogni volta con dati che sono distribuiti attorno ai dati  $\{d_i\}$  con una distribuzione normale la quale varianza è data dalle incertezze  $\{\delta_i\}$ . I risultati di questi fit sono tutti plausibili sulla base dei dati ottenuti in precedenza, di conseguenza la migliore stima del fit che si vuole eseguire sarà ottenuta mediando i risultati dei singoli fit e l'incertezza sarà rappresentata dalla loro deviazione standard.

All'interno del codice questo algoritmo viene applicato nella funzione *tau\_estrapp.m*.

### 3.4 Parametri tecnici e note pratiche

#### 3.4.1 Parametri tecnici

Si elencano ora i parametri tecnici delle simulazioni numeriche, mettendo in luce la loro natura e i criteri che portano a determinate scelte di certi valori.

L'algoritmo *Leapfrog* presenta due parametri tecnici:

- **Parametro di integrazione**  $\delta t$ , ovvero di quanto si procede ad ogni step dell'integrazione numerica;
- **Durata di integrazione**  $T_0$ , ovvero per quanto tempo si procede (in unità di step di integrazione) prima di osservare la configurazione finale.

Valori efficaci per questi due parametri devono essere scelti garantendo la reversibilità del processo e ottimizzando il tempo di esecuzione.

Per quanto riguarda il Monte Carlo ibrido invece i parametri tecnici presenti sono:

- **Passo reticolare  $a$** , nella trattazione teorica è stato identificato con  $\varepsilon$ , rappresenta il valore col quale si discretizzano i tempi, l'obiettivo è quello di renderlo il più piccolo possibile compatibilmente con tempi di calcolo non troppo elevati;
- **T**: distanza temporale(espressa in passi reticolari) tra i due tempi  $\tau'$  e  $\tau$ , il valore di questo parametro deve essere sufficientemente grande da garantire la proiezione sul vuoto dei valori di aspettazione.
- **N**: numero di "spin" all' interno del reticolo, ovvero numero di intervalli temporali con i quali si è discretizzato. Siccome  $N = T/a$ , una volta scelto  $T$  sufficientemente grande, sarà necessario aumentare  $N$  ogni volta che viene ridotto il valore di  $a$ , ciò contribuisce ad appesantire il carico di lavoro sostenuto al ridursi del passo reticolare.

### 3.4.2 Notazione adimensionale

Al fine di alleggerire la notazione è conveniente porre  $\hbar = c = 1$  e introdurre una notazione che permette di riscrivere tutti i parametri che compaiono nell'Hamiltoniana dei sistemi considerati come adimensionali. Si tratta di riscrivere i parametri con il passo reticolare, siccome le dimensioni di tempo, spazio e inverso della massa sono le stesse è possibile riscrivere in questo modo:

$$\hat{m} = m \cdot a \quad \hat{x}_j = \frac{x_j}{a} \quad \hat{\omega} = \omega \cdot a \quad \hat{\lambda} = \lambda \cdot a^5$$

Per fare sì che tutti i parametri siano adimensionali.

L'azione dei sistemi, in termini dei parametri adimensionali risulta di conseguenza:

$$S_{Eho} = \sum_n \frac{1}{2} \hat{m} (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2 + \frac{1}{2} \hat{m} \hat{\omega}^2 \hat{x}_j^2$$

$$S_{Ea1} = \sum_n \frac{1}{2} \hat{m} (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2 + \frac{1}{2} \hat{m} \hat{\omega}^2 \hat{x}_j^2 + \hat{\lambda} \hat{x}_j^4$$

$$S_{Ea2} = \sum_n \frac{1}{2} \hat{m} (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2 + \hat{\lambda} (\hat{x}_j^2 - \hat{x}_0^2)^2$$

## 4 Simulazioni e risultati

### 4.1 Oscillatore Armonico

Il primo sistema preso in considerazione è l'oscillatore armonico, la cui soluzione analitica è nota e di conseguenza risulta un ottimo sistema per verificare l'efficacia del metodo seguito.

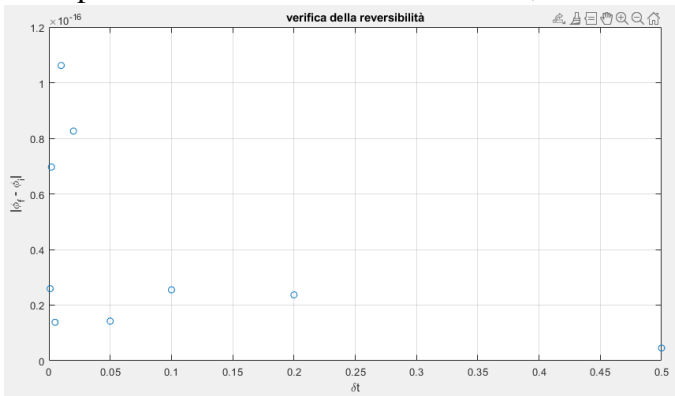
Per comodità i valori di massa e frequenza sono stati posti a 1, di conseguenza nell'azione adimensionale si avranno:

$$\hat{m} = \hat{\omega} = \frac{1}{a}$$

#### 4.1.1 Determinazione dei parametri leapfrog

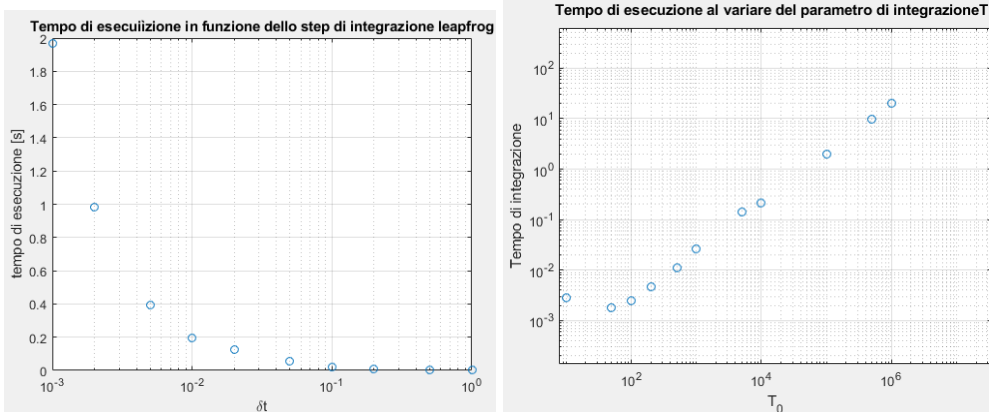
Inizialmente, come anticipato, si è fissata l'attenzione sulla determinazione dei parametri tecnici riguardanti l'integrazione leapfrog, con lo scopo di garantire la reversibilità mantenendo un tempo di esecuzione ragionevole e un'evoluzione temporale soddisfacente.

Come prima cosa si mostra la reversibilità, valutata al variare del passo di integrazione  $\delta t$ :



Si osserva che, come richiesto, la reversibilità è garantita a meno di ordini di grandezza paragonabili alla precisione di macchina per ogni valore di  $\delta t$  considerato. Tuttavia si nota un aumento della differenza tra configurazione iniziale e finale per i valori di  $\delta t$  più piccoli, dovuto probabilmente a roundoff inevitabili. Si è scelto come step di integrazione  $\delta t = 0.01$

Si mostra successivamente l'andamento del tempo di integrazione al variare dei due parametri tecnici (mantenendo costante l'altro) dell'algoritmo leapfrog. Per mantenere un tempo di esecuzione ragionevole, in vista di dover applicare il metodo leapfrog per ogni iterazione Monte Carlo, si è scelto un numero di passi  $T_0 = 100$ , che sembra conciliare bene un tempo di esecuzione contenuto con una buona evoluzione del sistema.

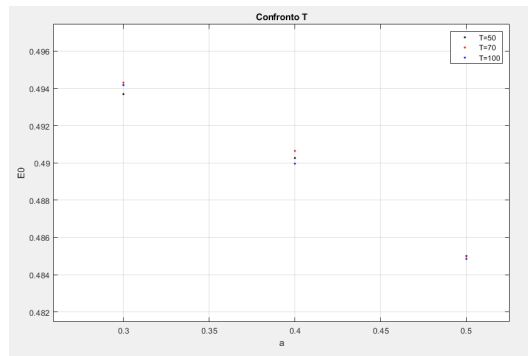


### 4.1.2 Energia del livello Fondamentale

Si è passati quindi all'applicazione del Monte Carlo ibrido: per ogni valore del passo reticolare si esegue dapprima una termalizzazione del sistema, ovvero 1000 passi per permettere al sistema di esplorare in modo efficace lo spazio delle fasi. La termalizzazione infatti ha lo scopo di portare il sistema in uno stato in cui si cominciano a campionare efficacemente le configurazioni. Dopo di che si procede con la misura vera e propria, che consiste in  $10^6$  passi Monte Carlo. Al termine della simulazione si valutano le medie statistiche necessarie per ricavare i valori desiderati.

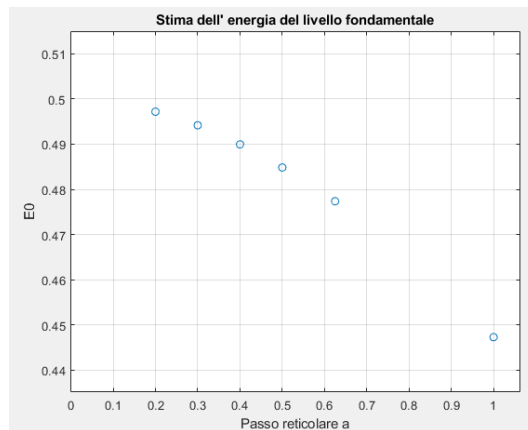
Come visto nell'introduzione teorica il livello fondamentale è dato da  $\langle E_0 \rangle = m\omega^2 \langle x^2 \rangle$ . Ricordando che i valori ottenuti sono espressi in termini di  $\hat{x}$ , si valuta la media e successivamente si divide per  $a^2$  per ottenere, per ogni valore del passo reticolare, la stima dell'energia del livello fondamentale.

È importante decidere ponderatamente la scelta del parametro tecnico  $T$ , ovvero il tempo totale della simulazione, si mostrano tre risultati ottenuti per valori differenti del passo reticolare e diverse scelte di  $T$ :



Si osserva che la differenza tra i risultati ottenuti è dell'ordine di  $\approx 5 \cdot 10^{-4}$ , si ha quindi un guadagno troppo piccolo in accuratezza all'aumentare di  $T$  per giustificare il maggiore tempo di calcolo. Per questo è stato scelto di non andare oltre a  $T = 100$  e di mantenere questo valore per tutte le simulazioni successive.

Si mostrano ora i risultati ottenuti:



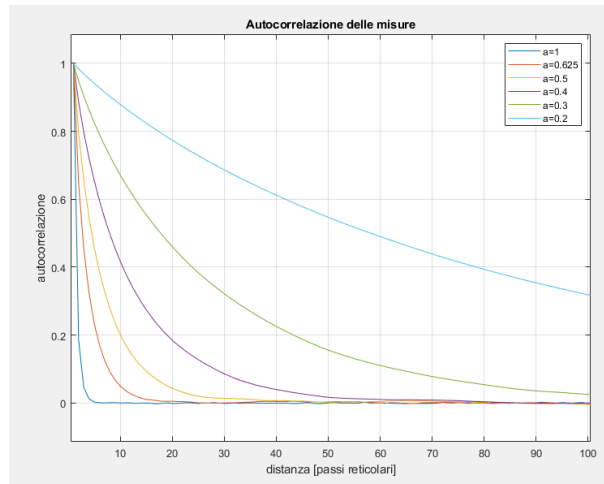
Per questa, e per le altre simulazioni si è scelto di prendere in esame i seguenti valori di  $a$ :  $a = [1, 0.625, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2]$ .

Non si eseguono misure per passi reticolari minori di  $a = 0.2$  poichè, per problemi di correlazione tra le misure i risultati ottenuti non sarebbero significativi.

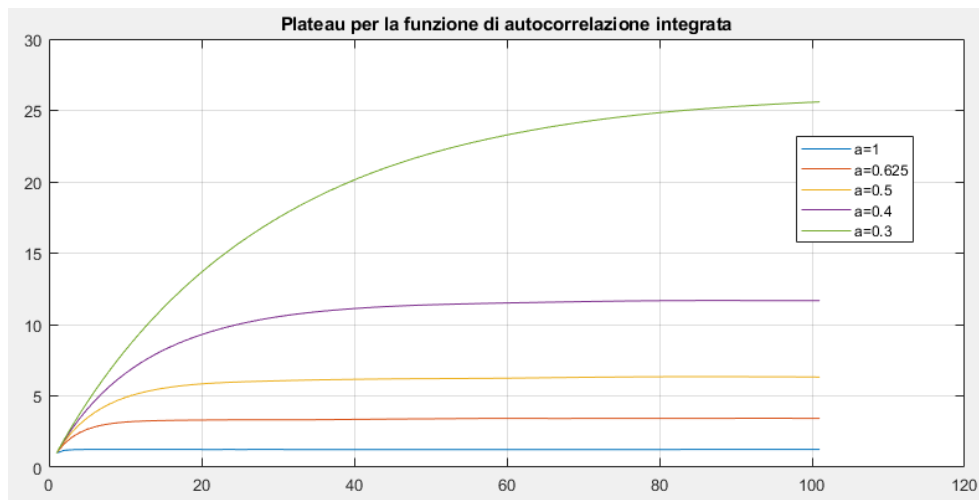
Gli errori sulle misure infatti vengono valutati tenendo in considerazione il tempo di autocorrelazione integrato:

$$\sigma_m = \frac{\text{sigma}}{\sqrt{N_{eff}}} \quad \text{con} \quad N_{eff} = \frac{N}{\tau_c} \quad (10)$$

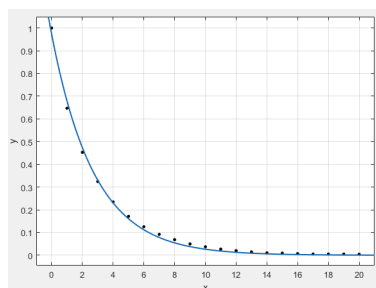
È quindi fondamentale stimare l'autocorrelazione tra le misure, valutando la media del prodotto tra valori ad ogni distanza. Si osserva che la distanza di autocorrelazione aumenta velocemente riducendo il passo reticolare:



Si osserva come, già per valori del passo reticolare pari a 0.2 le misure rimangono correlate molto a lungo, per questo si è deciso di non procedere con passi reticolari minori. La teoria prevede di integrare la funzione di autocorrelazione ed individuare il plateau che corrisponde al punto in cui le misure smettono di essere correlate:



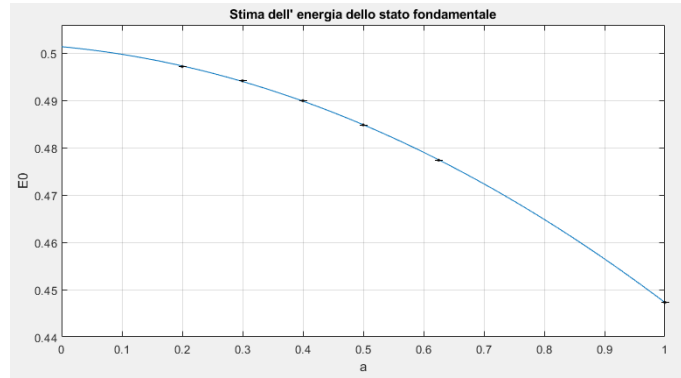
È stato poi osservato che la funzione di autocorrelazione è ben interpolata da un esponenziale, e risulta quindi seguire un andamento di tipo  $f = a \cdot e^{-x/\tau}$ . Si può interpretare quindi  $\tau$  come tempo di rilassamento, che rimane inalterato anche nella funzione integrata, in quanto si tratta di un esponenziale. Con un fit esponenziale si estrapola questo valore, che è stato utilizzato come stima migliore del tempo di autocorrelazione integrato:  $\tau_c = 2\tau$ .



Esempio per a=0.625



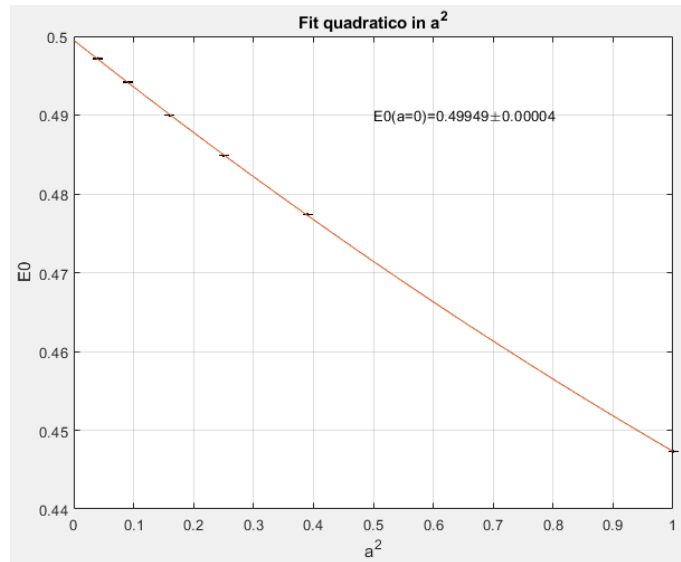
Una volta ricavati gli errori si è proceduto con il fit quadratico utilizzando il metodo *bootstrap* esposto in precedenza per ottenere:



$$E_0 = 0.5014 \pm 0.0001$$

La stima che si ottiene risulta molto accurata ma non si sovrappone, anche se di poco, al valore atteso, che per la scelta di  $m$  e  $\omega$  è 0.5.

Una correzione che è possibile eseguire è quella di interpolare al grado di precisione successivo, ovvero a ordine  $a^4$ . A questo proposito è efficace mostrare l'andamento di  $E_0$  in funzione di  $a^2$ , per poi eseguire un fit quadratico in quest'ultimo:



La miglior stima dell'energia del livello fondamentale è, di conseguenza:  $E_0 = 0.49949 \pm 0.00004$ . Per lo stato fondamentale di tutti i sistemi analizzati in seguito si utilizzerà questo tipo di interpolazione.

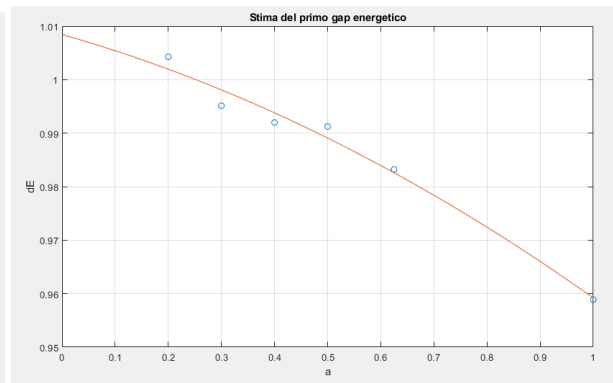
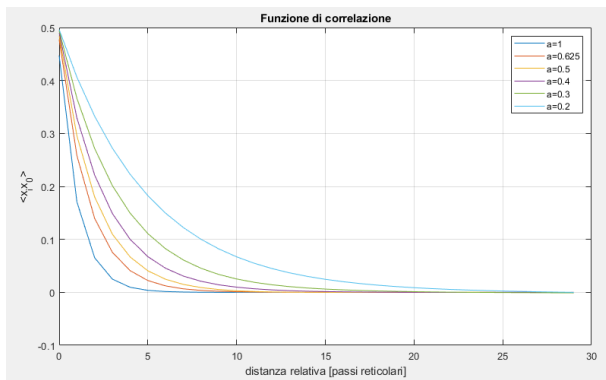
#### 4.1.3 Primo gap di energia

Si procede ora con la stima del primo gap di energia, che si ricava da:

$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = e^{-(E_1-E_0)\tau} |\langle 0|Q|1\rangle|^2 \quad (11)$$

La media statistica da calcolare è in questo caso  $\langle x_i x_0 \rangle$ .

Per ogni valore del passo reticolare si calcola la funzione di correlazione e, in un intervallo efficace (in modo da escludere la parte di misura rumorosa relativa a valori per i quali il segnale si è già estinto) si interpolano i punti con un esponenziale, dal quale si ricava il gap.



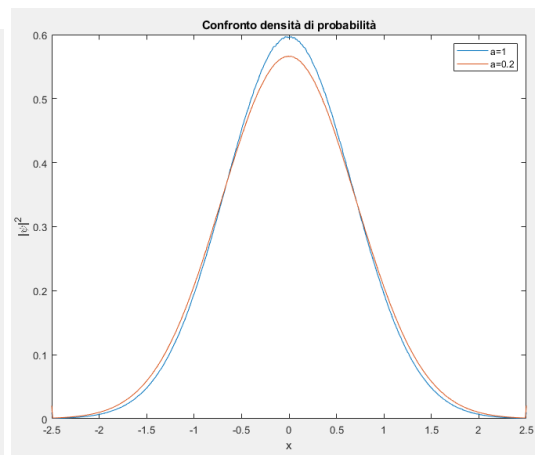
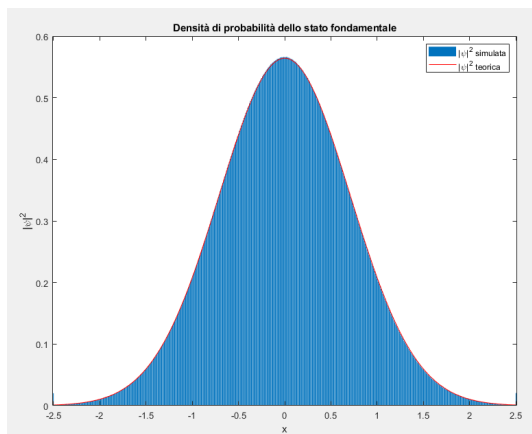
Si osserva che, come atteso la correlazione aumenta al diminuire del passo reticolare, in quanto espressa in termini di  $\hat{x}$ , di conseguenza l'intervallo di valori efficaci per eseguire il fit diventa più grande scendendo in  $a$ .

Dai risultati ottenuti, attraverso un fit polinomiale di secondo grado si ricava una stima del gap energetico per  $a = 0$ :

$$dE = 1.0084$$

#### 4.1.4 Densità di probabilità

In seguito si valuta la densità di probabilità di trovare una particella nell'intervallo  $[x, x + \delta x]$ , scegliendo  $\delta x = 0.01$  si mostra l'istogramma ottenuto dai dati simulati sovrapposto al modulo quadro della funzione d'onda nota analiticamente, mostrando l'ottimo accordo:



Si nota come diminuendo il passo reticolare si vada a raffinare il risultato ottenuto per la densità di probabilità, avvicinandosi a quella teorica.

## 4.2 Oscillatore anarmonico

Ci si sofferma ora sull'oscillatore armonico perturbato con il contributo quartico, ponendo, come in precedenza, massa e frequenza a 1:

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

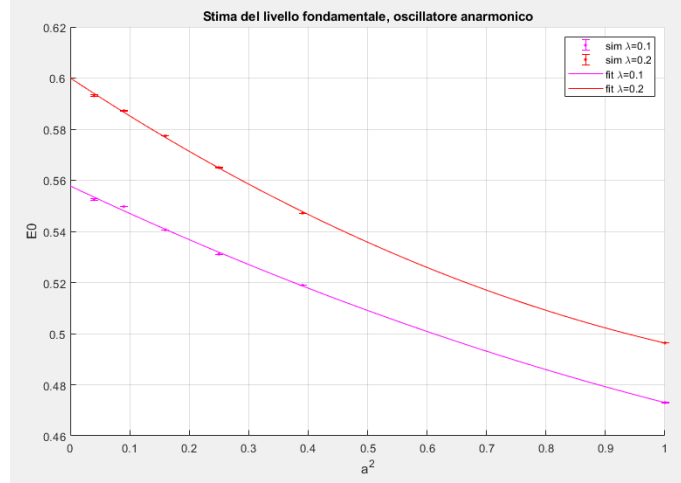
Si procede in modo del tutto analogo, dapprima verificando la reversibilità dell'integrazione leapfrog: si osserva che la reversibilità è verificata per ogni valore di  $\lambda$  preso in considerazione. I valori che verranno studiati sono  $\lambda = 0.2$  e  $\lambda = 0.1$ .

### 4.2.1 Energia del livello fondamentale

Si calcola l'energia del livello fondamentale per ogni valore del passo reticolare, l'unica differenza rispetto allo studio dell'oscillatore armonico consiste nel calcolo delle medie statistiche necessarie, visto che in questo caso

$$\langle H \rangle = \langle x^2 \rangle + 3\lambda \langle x^4 \rangle$$

Per il resto il procedimento è del tutto analogo. Si ottiene:



- $\lambda = 0.1$ :  $E_0 = 0.5578 \pm 0.0002$ , confrontato al valore teorico  $E_{0T} = 0.565$ .
- $\lambda = 0.2$ :  $E_0 = 0.6105 \pm 0.0005$ , confrontato al valore teorico  $E_{0T} = 0.602$

I valori teorici sono ottenuti tramite la teoria delle perturbazioni applicata all'oscillatore armonico.

### 4.2.2 Primo gap di energia

Si valuta ora il primo gap energetico analogamente a quanto fatto in precedenza.

Si sottolinea però che come visto nella sezione introduttiva per l'oscillatore anarmonico non è più valida l'equazione (7), ma la proiezione sul vuoto della funzione di correlazione presenta più contributi. Si procede di conseguenza andando ad interpolare i dati in un intervallo nel quale i contributi successivi al primo si sono già estinti.

Sappiamo valere la seguente relazione

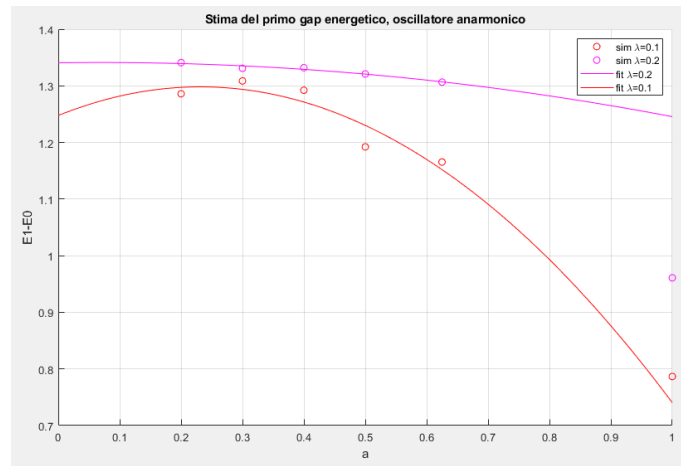
$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = e^{-(E_1-E_0)\tau} |\langle 0|Q|1\rangle| + e^{-(E_3-E_0)\tau} |\langle 0|Q|3\rangle| + \dots + e^{-(E_{2k+1}-E_0)\tau} |\langle 0|Q|2k+1\rangle| + \dots$$

e ci si aspettano valori del gap energetico leggermente maggiori rispetto all'oscillatore armonico imperturbato, ovvero  $E_1 - E_0 \simeq 1$  e  $E_3 - E_0 \simeq 3$ . Di conseguenza ci si aspetta che il secondo contributo si annulli circa 3 volte più velocemente del primo, lasciando a disposizione un intervallo in cui poter interpolare in modo soddisfacente la funzione di correlazione con una funzione del tipo

$$\langle 0|Q(\tau)Q(0)|0\rangle = a e^{-bx} + c$$

Nella quale  $a$  tiene conto dell'ampiezza, che non è interessante ai fini di questo studio e  $c$  di eventuali offset dovuti ai contributi successivi, che nell'intervallo desiderato risultano pressochè costanti.

I risultati che si ottengono sono i seguenti:

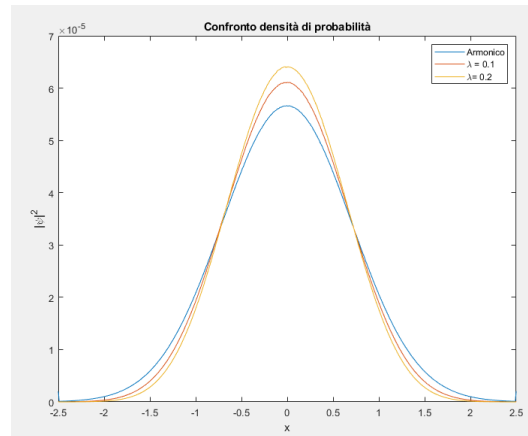


- $\lambda = 0.1$ :  $dE = 1.2476$ , confrontato al valore teorico  $dE_T = 1.2104$ .
- $\lambda = 0.2$ :  $dE = 1.34075 \pm 0.0005$ , confrontato al valore teorico  $dE_T = 1.3481$

È stato scelto di scartare i punti che corrispondono ad  $a = 1$ , in questo caso il segnale, sempre in termini di  $\hat{x}$ , si estingue molto velocemente ed è di conseguenza difficile trovare un intervallo significativo di punti nel quale i contributi successivi al primo si siano già estinti ma il segnale sia ancora sufficientemente intenso per poter eseguire un fit. Dai grafici si nota infatti come questi punti siano molto al di fuori della linea di fit.

### 4.2.3 Densità di probabilità

È ora interessante mostrare la densità di probabilità simulate per i due valori di  $\lambda$  e confrontarle con quella dell'oscillatore armonico imperturbato:



Ciò che si ottiene è in realtà un istogramma, che visto il grande numero di dati viene per comodità visualizzato direttamente come una linea continua. Per generare l'istogramma si conta cumulativamente quante volte una delle traiettorie simulate è passata nella regione  $[x, x + 0.01]$

### 4.3 Potenziale a doppia buca

Ci si concentra ora sul secondo tipo di oscillatore anarmonico, ovvero quello a doppia buca:

$$H = \frac{p^2}{2} + \lambda(x^2 - x_0^2)^2$$

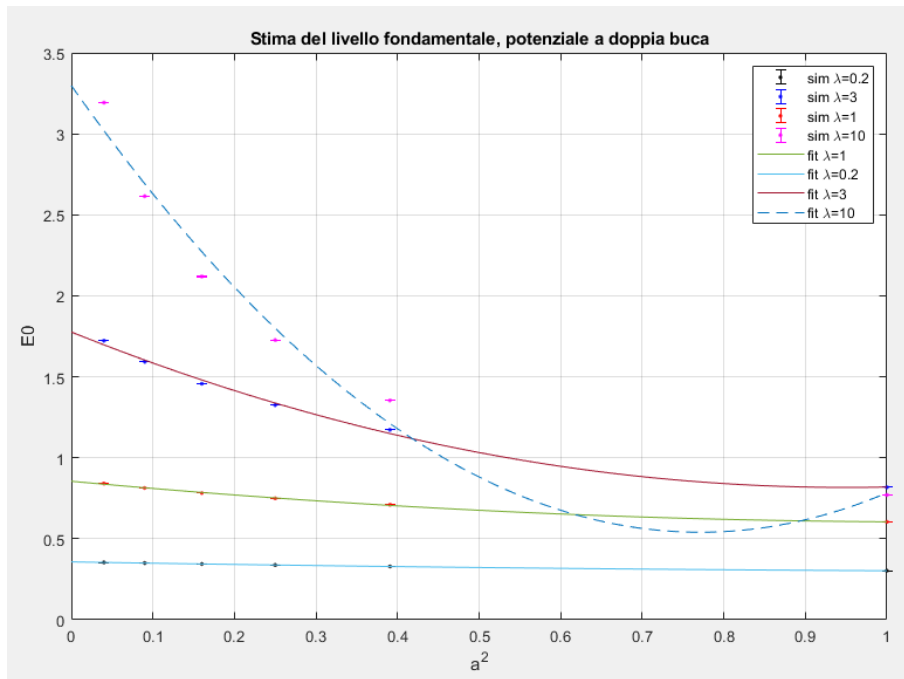
Osservando il grafico del potenziale si nota, come già detto che presenta due minimi per  $x = \pm x_0$ , nei quali il potenziale si annulla, e un massimo centrale di altezza  $\lambda x_0^4$ . Si è deciso quindi di non variare  $x_0$  tra le simulazioni ma soltanto  $\lambda$ , mantenendo le due buche centrate in  $\pm 1$  e variando quindi solamente la profondità di esse. I valori di  $\lambda$  presi in esame sono stati:  $\lambda = [0.2, 1, 3, 10]$ . Come nei casi precedenti si verifica la reversibilità, che per i valori scelti dei parametri tecnici del *leapfrog* è rispettata anche in questo caso.

#### 4.3.1 Energia dello stato fondamentale

Per questo sistema la proiezione sul vuoto dell'hamiltoniana è data da:

$$\langle H \rangle = 3\lambda \langle x^4 \rangle - 4\lambda x_0^2 \langle x^2 \rangle + \lambda x_0^4$$

Procedendo analogamente ai sistemi precedenti si ottengono i seguenti risultati:



Attraverso l'estrapolazione *bootstrap* si ottiene l'energia dello stato fondamentale:

- $\lambda = 0.2 : E_0 = 0.3572 \pm 0.0001$
- $\lambda = 1 : E_0 = 0.8551 \pm 0.0001$
- $\lambda = 3 : E_0 = 1.7763 \pm 0.0002$
- $\lambda = 10 : E_0 = 2.6566 \pm 0.0004$

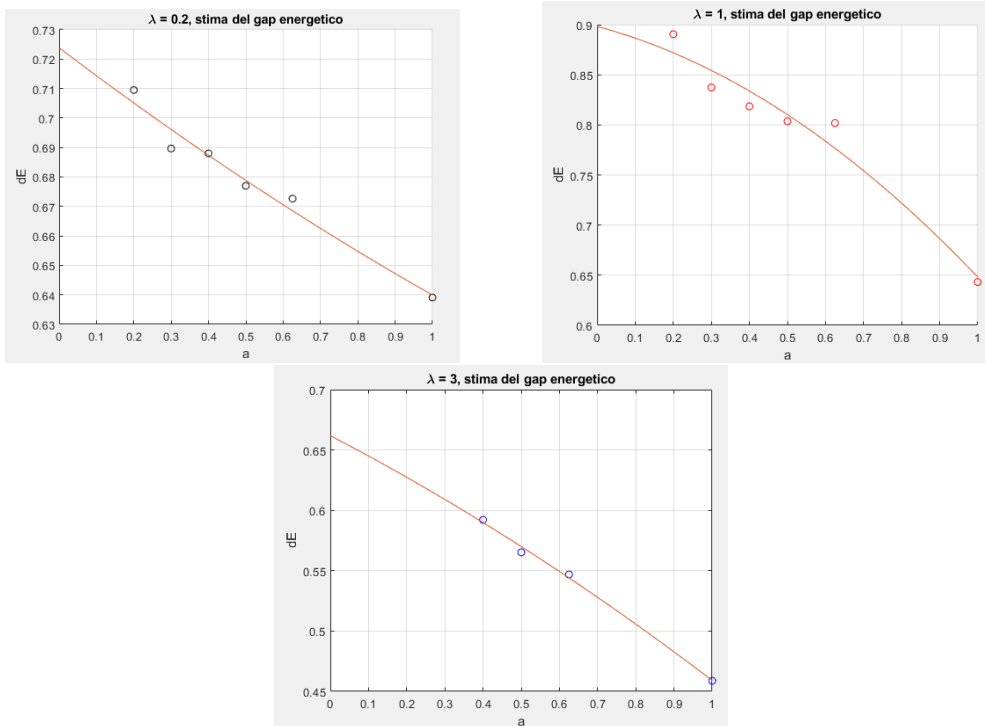
Per quanto riguarda il caso con  $\lambda = 10$  si osserva un andamento anomalo, differente da quello degli altri sistemi. Questo è indice di una probabile bassa accuratezza dovuta probabilmente a più fattori:

- $T$  non abbastanza elevato: nonostante per questa simulazione, al contrario di tutte le altre sia stato scelto  $T = 200$  è probabile che questo valore non sia soddisfacente per questo sistema, visto che, come vedremo, la particella non passa liberamente tra una buca e l'altra ma rimane a lungo intrappolata nella stessa buca;
- $N_{iter}$  non abbastanza elevato: si osserva una correlazione molto maggiore rispetto alle altre misure, e per problemi di memoria non è stato possibile effettuare un numero maggiore di  $8 \cdot 10^5$  iterazioni Monte Carlo, potendo aumentare il numero di iterazioni sicuramente si otterrebbero risultati più accurati.
- Termalizzazione insufficiente: è probabile che in questo caso il ciclo iniziale di termalizzazione non sia sufficiente, data la correlazione elevata.

### 4.3.2 Primo gap di energia

In questo caso, come introdotto alla sezione (2.2.2) è stato usato un metodo differente rispetto a quello utilizzato per l'oscillatore anarmonico: i valori sono stati ottenuti prendendo in considerazione la funzione di correlazione fin dall'inizio, quando ancora il secondo contributo non è estinto e procedendo con un fit della somma di due esponenziali:

$$y = a e^{-bx} + c e^{-dx} + e$$



Anche in questo caso si riscontrano problemi di memoria: non è stato possibile valutare la funzione di correlazione per l'intero set  $\lambda = 10$  e per i due punti di  $\lambda = 3$  con passo reticolare minore.

Il risultato è particolarmente rumoroso, di conseguenza ciò che si ottiene è soltanto una stima, probabilmente poco accurata, del primo gap di energia:

- $\lambda = 0.2$ :  $dE = 0.7238$
- $\lambda = 1$ :  $dE = 0.8982$
- $\lambda = 3$ :  $dE = 0.7970$

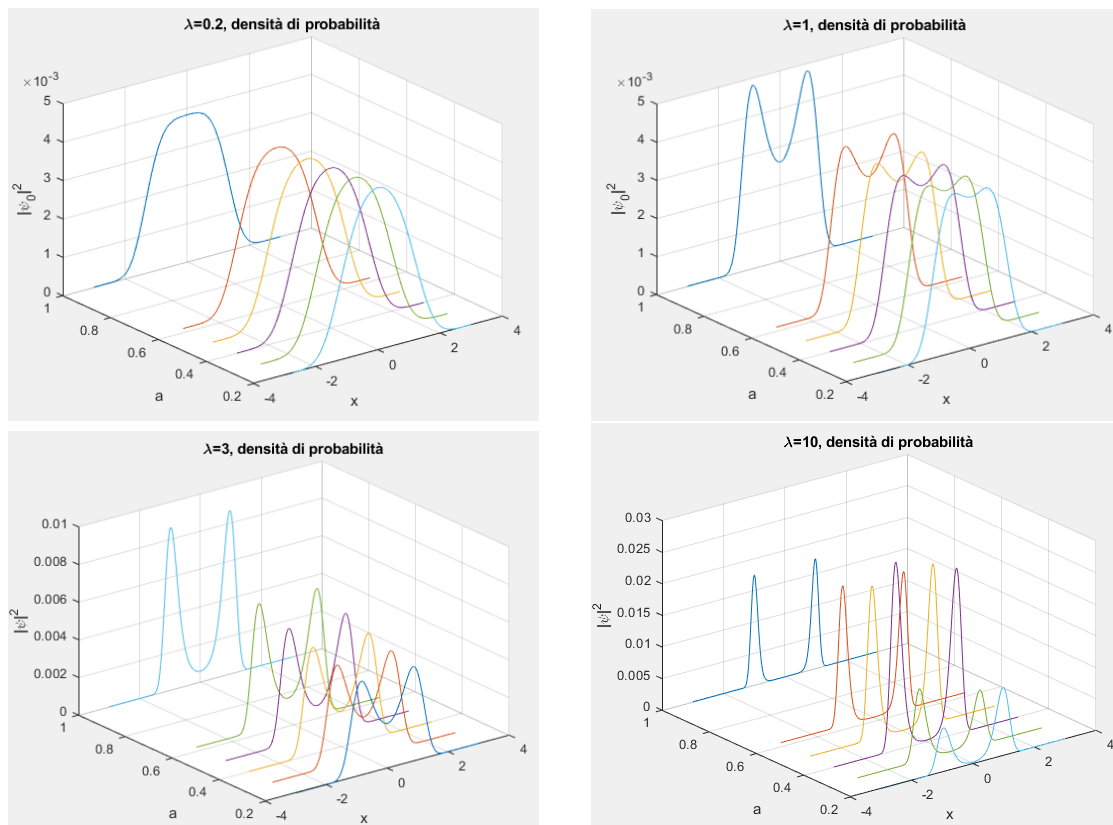
Questo metodo in linea di principio fornisce in aggiunta una stima per il gap energetico  $E_3 - E_1$ , estrapolato dal secondo contributo esponenziale, questi valori risultavano però molto inconsistenti e non sono stati quindi considerati.

Infine ci si aspetta che il gap energetico sia crescente al crescere di  $\lambda$ , infatti si ha che per  $\lambda = 0$  il potenziale risulta nullo e la particella risulta avere lo spettro energetico continuo di una particella libera, mentre aumentando  $\lambda$  la particella risulta sempre più legata.

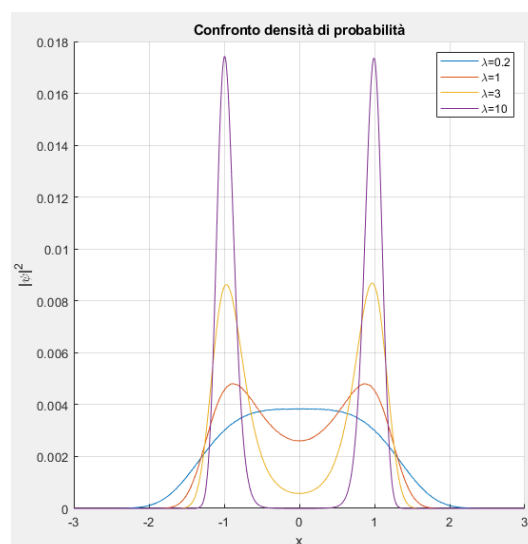
Di conseguenza si suppone che il risultato ottenuto per  $\lambda = 3$  non sia affidabile.

### 4.3.3 Densità di probabilità

Si mostra dapprima l'andamento della densità di probabilità ottenuta al variare del parametro  $a$  per i vari valori di  $\lambda$ :

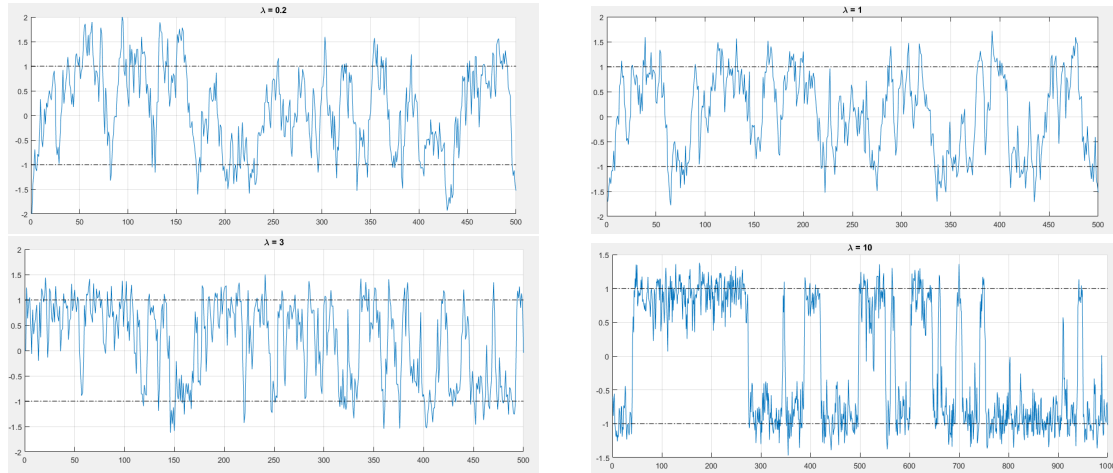


Si osserva come, al diminuire del passo reticolare le due buche risultino meno marcate. Successivamente si mostra come varia la densità di probabilità al variare di  $\lambda$ :



Come ci si può aspettare, al crescere di  $\lambda$ , e quindi della profondità delle due buche di potenziale, la densità di probabilità risulta sempre più marcata in prossimità del fondo delle due buche, ovvero di  $x = \pm 1$ .

Come spiegazione intuitiva all'aumento dei tempi di correlazione al crescere di  $\lambda$  si mostra la traiettoria finale relativa alle varie simulazioni:



È evidente come, nel caso di  $\lambda$  piccoli la particella si muova molto più liberamente, al contrario del caso  $\lambda = 10$  dove rimane intrappolata a lungo fino a quando non accade un "salto" che le permette di cambiare buca e rimanere poi intrappolata in quella adiacente. Ciò è mostrato anche dalla leggera asimmetria che si ottiene nella densità di probabilità soprattutto per  $\lambda = 10$ : la particella non riesce a esplorare in modo efficace entrambe le buche.



## 5 Commento dei codici

Si mostrano in questa sezione i codici utilizzati e se ne commentano i dettagli mettendo in luce il modo in cui sono stati ottenuti i risultati precedenti.

### 5.1 Monte Carlo ibrido

```
function [PhiOUT,acc] = HMCqmho2(m0,omg0,NT,epsilon,Nhmc,Niter,Phi0)

    if (nargin==6)
        Phi = zeros(1,round(NT));
    else
        Phi = Phi0;
    end

    omg2 = omg0*omg0;
    PhiOUT = zeros(Niter,round(NT));
    acc = 0;

    for i = 1:Niter

        Pi = randn(size(Phi));
        Phi_p = [Phi(2:end) Phi(1)];
        Phi_m = [Phi(end) Phi(1:end-1)];

        S = 0.5*m0 * sum((Phi_p-Phi).^2+omg2*Phi.^2);
        T = 0.5*sum(Pi.^2);

        Pi = Pi + 0.5*epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phi);
        Phil = Phi;

        for t = 1:Nhmc
            Phil = Phil + epsilon*Pi;
            Phi_p = [Phil(2:end) Phil(1)];
            Phi_m = [Phil(end) Phil(1:end-1)];
            Pi = Pi + epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);
        end
        Phil = Phil + epsilon*Pi;
        Phi_p = [Phil(2:end) Phil(1)];
        Phi_m = [Phil(end) Phil(1:end-1)];
        Pi = Pi + 0.5*epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);

        S1 = 0.5*m0 * sum((Phi_p-Phil).^2+omg2*Phil.^2);
        T1 = 0.5*sum(Pi.^2);

        dH = T1 - T + S1 - S;
        if (dH > 0)
            if ( rand()<exp(-dH) )
                Phi = Phil;
                acc = acc+1;
            end
        else
            Phi = Phil;
            acc = acc+1;
        end

        PhiOUT(i,:) = Phi;

    end

    acc = acc/Niter;

end
```

La funzione ha i seguenti input:

- $m0$  rappresenta  $\hat{m}0$ , e viene di conseguenza riscalato al variare di  $a$
- $\omega0$  rappresenta  $\hat{\omega}0$ , e viene di conseguenza riscalato al variare di  $a$
- $NT$  rappresenta il numero di celle nel reticolo, ovvero  $T/a$
- $\varepsilon$  e  $Nhmc$  sono i due parametri tecnici del *leapfrog*
- $Niter$  indica il numero di iterazioni Monte Carlo
- $Phi0$  rappresenta una eventuale configurazione iniziale, è in questo modo che si fornisce all'algoritmo il sistema termalizzato.
- Per l'oscillatore anarmonico e per il potenziale a doppia buca sono stati aggiunti in input i necessari parametri:  $\lambda_0$  e  $x_0$ , che come per  $m$  e  $\omega$  si riferiscono alle quantità adimensionate, ovvero  $\hat{\lambda} = \lambda a^5$  e  $\hat{x}_0 = x_0/a$

La funzione fornisce due output:

- $PhiOUT$  rappresenta l'insieme di tutte le configurazioni e quindi ha dimensione  $NT$
- $acc$  è l'accettanza delle mosse, ovvero in numero di mosse accettate diviso per il totale delle iterazioni

All'interno della funzione si osservano più sezioni: inizialmente si procede con la definizione di  $\omega^2$  e con la preallocazione in memoria delle variabili necessarie. In seguito si entra nel ciclo che viene ripetuto  $Niter$  volte: si definiscono i momenti secondo una distribuzione normale e si valuta l'energia iniziale del sistema, si integrano le equazioni del moto con il metodo *leapfrog* e in seguito si esegue il controllo in stile Metropolis confrontando energia finale e iniziale. Si tiene inoltre traccia di tutte le configurazioni.

Una tipica chiamata di questa funzione può, per esempio, essere:

```
[H0_T50_a02, accH0_T50_a02] = HMCqmho2(0.2, 0.2, 50/0.2, 0.01, 100, 1000000, term(end, :));
```

## 5.2 Verifica della reversibilità

In seguito il codice utilizzato per verificare la reversibilità dell'integrazione *leapfrog*:

```
function [ diff] = leapfrog_testHO(epsilon,Nhmc,term)
m0=1;
omg2=1;
Phi0=zeros(1,100);
if nargin==3
Phi0=term;
end
Phi=Phi0;
Pi = randn(size(Phi));
Phi_p = [Phi(2:end) Phi(1)];
Phi_m = [Phi(end) Phi(1:end-1)];

Pi = Pi + 0.5*epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phi);
Phil = Phi;

for t = 1:Nhmc
    Phil = Phil + epsilon*Pi;
    Phi_p = [Phil(2:end) Phil(1)];
    Phi_m = [Phil(end) Phil(1:end-1)];
    Pi = Pi + epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);
end
Phil = Phil + epsilon*Pi;
Phi_p = [Phil(2:end) Phil(1)];
Phi_m = [Phil(end) Phil(1:end-1)];
Pi = Pi + 0.5*epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);

%inversione
Pi=-Pi;
phimiddle=Phil;
Pi = Pi + 0.5*epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);
for t = 1:Nhmc
    Phil = Phil + epsilon*Pi;
    Phi_p = [Phil(2:end) Phil(1)];
    Phi_m = [Phil(end) Phil(1:end-1)];
    Pi = Pi + epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);
end
Phil = Phil + epsilon*Pi;
Phi_p = [Phil(2:end) Phil(1)];
Phi_m = [Phil(end) Phil(1:end-1)];
Pi = Pi + 0.5*epsilon * m0*(Phi_p + Phi_m - (2+omg2)*Phil);
diff= Phil-Phi0;
end
```

La funzione prende in ingresso i parametri tecnici e una configurazione iniziale e restituisce un vettore contenente le differenze tra configurazione iniziale e finale.

Il codice è lo stesso dell'integrazione *leapfrog* mostrata in precedenza, però eseguito due volte, invertendo i momenti nel tempo intermedio.

Per confermare la reversibilità è stata valutata la media del valore assoluto del vettore "*diff*":

$$test = mean(abs(leapfrog\_testHO(epsilon, Nhmc, term)))$$

### 5.3 Autocorrelazione

Per valutare l'autocorrelazione, al fine di stimare l'errore sulle misure dell'energia dello stato fondamentale, si utilizza il seguente codice:

```
function CC = MYautocorr(d,tt)
    T = length(d);
    for t = 0:tt
        CC(t+1) = mean(d(1:(T-t)).*d((1+t):T));
    end
    CC = CC - (mean(d))^2;
    CC = CC/CC(1);
end
```

Questa semplice funzione calcola esplicitamente la media del prodotto delle entrate di un vettore  $d$  a distanza crescente, fino ad un massimo di  $tt$ .

### 5.4 Correlazione

La funzione di correlazione, necessaria per valutare il primo gap energetico è stata implementata in questo modo:

```
function CC = gap(ret,ll)
    CC(1) = mean(mean(ret.*ret,2));
    RR = [ret(:,2:end) ret(:,1)];
    CC(2) = mean(mean(ret.*RR,2));
    for i=3:ll
        RR = [RR(:,2:end) RR(:,1)]; CC(end+1) = mean(mean(ret.*RR,2));
    end
end
```

In questo modo si calcola la media tra il prodotto termine a termine tra una configurazione  $ret$  e la stessa traslata, fino ad una distanza che si passa alla funzione tramite  $ll$ .

## 5.5 Bootstrap

Il fit polinomiale tramite il metodo bootstrap illustrato in precedenza è stato implementato in questo modo:

```
function res = tau_estrap(tau,d,dd,N)

    if (nargin<4 || isempty(N))
        N = 1000;
    end

    aa = [];
    bb = [];
    cc = [];

    for i = 1:N
        ad = d + dd.*randn(size(dd));
        aux = polyfit(tau,ad,2);
        aa = [aa aux(end)];
        bb = [bb aux(2)];
        cc = [cc aux(1)];
    end

    res(3,1) = mean(aa);
    res(3,2) = std(aa);

    res(2,1) = mean(bb);
    res(2,2) = std(bb);

    res(1,1) = mean(cc);
    res(1,2) = std(cc);
```

È stato implementato l'algoritmo solo per polinomi di ordine 2 in quanto sono quelli utilizzati per l'analisi.

La funzione prende in ingresso il set di dati *tau* e *d*, gli errori *dd* e il numero di configurazioni da generare.

Si generano *N* configurazioni distribuite in modo normale attorno ai dati e per ogniuna di esegue un fit polinomiale tramite *polyfit*.

La funzione restituisce la media di ciascun coefficiente sul totale dei fit polinomiali eseguiti e la relativa deviazione standard.

## 5.6 Implementazioni dei diversi sistemi

Quanto visto fino a ora era relativo all'oscillatore armonico, per implementare gli altri due sistemi esaminati è sufficiente, all'interno della funzione *HMCqmho* modificare l'azione e il passo di integrazione di eulero per i momenti del *leapfrog* (sia nel passo di  $\varepsilon/2$  iniziale e finale, che all'interno del ciclo).

Per quanto riguarda l'azione:

- Oscillatore armonico:  

$$S = 0.5 * m0 * \text{sum}((\text{Phi}_p - \text{Phi}).^2 + \text{omg2} * \text{Phi}.^2);$$
- Oscillatore anarmonico:  

$$S = \text{sum}(0.5 * m0 * ((\text{Phi}_p - \text{Phi}).^2 + \text{omg2} * (\text{Phi}.^2)) + \text{lambda0} * (\text{Phi}.^4));$$
- Doppia buca:  

$$S = \text{sum}(0.5 * m0 * ((\text{Phi}_p - \text{Phi}).^2) + \text{lambda0} * ((\text{Phi}.^2 - x0^2).^2));$$

Per l'integrazione dei momenti invece:

- Oscillatore armonico:  

$$Pi = Pi + \text{epsilon} * m0 * (\text{Phi}_p + \text{Phi}_m - (2 + \text{omg2}) * \text{Phi1});$$
- Oscillatore anarmonico:  

$$Pi = Pi + \text{epsilon} * (m0 * ((\text{Phi}_p + \text{Phi}_m) - (2 + \text{omg2}) * \text{Phi1}.^2) - 4 * \text{lambda0} * (\text{Phi1}.^3));$$
- Doppia buca:  

$$Pi = Pi + \text{epsilon} * (m0 * (-2 * \text{Phi1} + \text{Phi}_p + \text{Phi}_m) - 4 * \text{lambda0} * (\text{Phi1}.^2 - x0^2) * \text{Phi1});$$

Infine è differente, come visto anche nella sezione 2.2.1, il calcolo dell'energia dello stato fondamentale:

- Oscillatore armonico:  $E0HO = \text{mean}(\text{mean}(\text{simHO}.^2)) * a(1)^2$
- Oscillatore anarmonico:  $E0A0(5) = \text{mean}(\text{mean}(\text{simAO}.^2)) * a(1)^2 + 3 * \text{lambda} * \text{mean}(\text{mean}(\text{simAO}.^4)) * a(1)^4$ ;
- Doppia buca:  $E0DW(5) = 3 * \text{lambda} * (\text{mean}(\text{mean}(\text{simDW}.^4)) * a(1)^4) - 4 * \text{lambda} * (\text{mean}(\text{mean}(\text{simDW}.^2)) * a(1)^2) + \text{lambda}$

## 5.7 Densità di probabilità

È sufficiente costruire l'istogramma considerando tutte le configurazioni generate, per esempio:

```
dist = hist(simHO(1 : end) * a(1), xx) / length(simHO(1 : end));
```

Questa linea di codice fornisce la distribuzione di probabilità moltiplicata però per la grandezza dei singoli bin dell'istogramma, ovvero  $|\psi^2(x)|\delta x$ .