

## Università di Pisa

## DIPARTIMENTO DI FISICA Corso di Laurea Magistrale in Fisica

# Path Integral Monte Carlo: Particella su Circonferenza

Autori: Calandriello Gennaro, Paradiso Raffaele

# Indice

1	Path Integral e termodinamica		<b>2</b>
	1.1	Particella su circonferenza	3
2	Simulazioni		
	2.1	Discretizzazione	6
	2.2	Critical Slowing Down e algoritmi di simulazione	7
	2.3	Algoritmo Tailor	8
3	Risultati Numerici		
	3.1	Parametri e dati raccolti	9
	3.2	Carica topologica e freezing	9
			10
	3.4	Risultati $\beta = 2$ e $\delta = \sqrt{\eta}$	13
		Tempi di autocorrelazione	15

## 1 Path Integral e termodinamica

Si consideri un sistema completo ortonormale di autostati (in 1D estensibile a più dimensioni):

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$
  $\sum_n |n\rangle \langle n| = Id$ 

Considerando il sistema all'equilibrio termico con un termostato esterno, esso passa stocasticamente da un autostato all'altro e la probabilità di essere in un certo autostato è dato dalla distribuzione di Gibbs:

$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \qquad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

il valor medio di una certa osservabile O sarà:

$$\langle O \rangle = \sum_{n} P_n O_n = \frac{1}{Z} \sum_{n} e^{-\beta E_n} O_n \qquad O_n = \langle n | O | n \rangle$$
 (1)

l'elemento nella somma è diagonale, per cui i valor medi sono riscrivibili come tracce prese sull'insieme di autostati  $|n\rangle$  del sistema:

$$\langle O \rangle = \frac{Tr(Oe^{-\beta H})}{Tr(e^{-\beta H})}$$

Poiché la traccia è invariante per trasformazioni del sistema di coordinate fra sistemi completi ortonormali, è utile riscrivere Z in termini degli autostati della posizione:

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \tag{2}$$

che corrisponde all'elemento di matrice di un propagatore  $G = \langle x_b | e^{-iH(t_b - t_a)/\hbar} | x_a \rangle$ . Identificando  $|x_a\rangle = |x_b\rangle = |x\rangle$  e  $\beta = i(t_b - t_a)/\hbar$  è possibile ottenere un'espressione per la funzione di partizione del sistema in termini di integrale sui cammini. Sostituendo  $t_b = 0$  e  $t_a = \beta\hbar$  ed effettuando una rotazione di Wick sull'azione S che manda  $t \to -i\tau$  si ottiene:

$$Z(\beta) = Tr(e^{-\beta H}) = \mathcal{N} \int_{x(0)=x(\beta \hbar)} \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-S_E[x]/\hbar}$$
(3)

dove l'integrale è calcolato su tutti i possibili cammini periodici in  $\tau$ , pesati con un fattore  $e^{-\frac{S_E}{\hbar}}$ .  $S_E$  è l'azione Euclidea e  $\tau \in [0, \frac{\hbar}{k_B T}]$  è il tempo Euclideo.

I cammini che si considerano sono quelli per cui si ritorna in uno stesso punto dopo un intervallo di tempo euclideo  $\tau = \beta \hbar$ . Sarebbe da notare che, essendo il sistema all'equilibrio termodinamico, è insensato parlare di evoluzione temporale, tuttavia si può considerare  $\tau$  come un tempo ruotato nel piano complesso e limitato ad un supporto compatto tra  $0 e \beta \hbar$ .

Dopo queste osservazioni è immediato esprimere il valor medio termico di una certa osservabile in termini di integrali sui cammini come:

$$\langle O \rangle_T = \frac{Tr(Oe^{-\beta H})}{Tr(e^{-\beta H})} = \frac{\int \mathcal{D}[x(\tau)]e^{-S_E[x]/\hbar}O[x(\tau)]}{\int \mathcal{D}[x(\tau)]e^{-S_E[x]/\hbar}} = \int \mathcal{D}[x(\tau)]P[x(\tau)]O[x(\tau)] \quad (4)$$

dove ogni cammino  $x(\tau)$  è un insieme non numerabile di variabili stocastiche. I valori di aspettazione delle osservabili sono dei funzionali calcolati su cammini che seguono una funzione densità di probabilità  $P[x(\tau)]$ .

#### 1.1 Particella su circonferenza

Si consideri il sistema quantistico di una particella di massa m libera su una circonferenza di raggio R. Il sistema in esame è in 1+1 dimensioni, ed entrambe le dimensioni sono chiuse, nel senso che le coordinate iniziali e finali sono coincidenti. Nel sistema in esame i cammini si dividono in classi topologiche, e ogni cammino che contribuisce alla funzione di partizione è un'applicazione continua dal cerchio temporale a quello spaziale. Essendo il sistema periodico si identificano classi di cammini che partono da  $x(0) = x_0$  e terminano in  $x(\beta\hbar) = x_0 + 2\pi RQ$  al variare di  $Q \in \mathbb{Z}$ . Il gruppo di omotopia è  $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$ . Chiaramente vale  $x(\beta\hbar) = x_0$  su  $\mathbb{S}^1_R$ . Q è detto winding number e conta il numero di volte in cui il cammino si avvolge sul cerchio (considerando il segno) e identifica il settore topologico o classe di omotopia, che non può essere cambiato senza tagliare il cammino. Inoltre i cammini discontinui hanno misura 0 nel Path Integral. I livelli energetici sono  $E_n = \hbar^2 n^2/2mR^2$  (doppiamente degeneri) e la funzione di partizione è esprimibile come la somma sugli autostati dell'energia come segue:

$$Z(\beta) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}\right)$$
 (5)

L'azione euclidea per una particella vincolata sul cerchio è:

$$S_E[x] = \int_0^{\beta\hbar} \frac{m}{2} \left( \dot{x}(\tau) \right)^2 d\tau \tag{6}$$

La funzione di partizione si riscrive quindi come:

$$Z(\beta) = \sum_{Q \in \mathbb{Z}} Z_Q(\beta)$$

$$Z_Q(\beta) = \mathcal{N} \int_{x(\beta\hbar) = x(0) + 2\pi RQ} \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-S_E[x]/\hbar}$$
(7)

Può dunque essere performato un Path Integral per ogni settore topologico integrando le soluzioni classiche ovvero minimizzando l'azione Euclidea per il singolo cammino. L'integrazione in questo caso è esatta e restituisce un risultato proporzionale ad  $e^{(-S_Q/\hbar)}$  con:

$$S_Q = \frac{1}{2} m \frac{(2\pi RQ)^2}{\beta \hbar} \tag{8}$$

La distribuzione di probabilità con cui vengono pesate le varie classi di omotopia è la seguente:

$$P(Q) = \exp\left(-\frac{Q^2}{2\beta\hbar\chi}\right) = \exp\left(-\frac{Q^2}{2N_t\eta}\right) \qquad \chi = \frac{\hbar}{4\pi^2 R^2 m} \tag{9}$$

La P(Q) determina il peso di ciascun settore topologico in integrali del tipo (4). In modo del tutto equivalente si possono scrivere due espressioni per la funzione di partizione del sistema, che sono tra loro duali:

$$Z = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\left(-\beta \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}\right)}$$

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta\hbar\chi}} \sum_{Q=-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{1}{\beta}\frac{Q^2}{2\hbar\chi}\right)}$$

Per alte e basse temperature si ha un comportamento differente:

- per basse T, ovvero per  $\beta \hbar^2/(mR^2) \sim \hbar \beta \chi \gg 1$ , contribuiscono solo i bassi livelli energetici e tutti i settori topologici. Inoltre tutte le Q sono distribuite circa gaussianamente con  $\sigma^2 = \hbar \beta \chi$ ;
- per alte T, ovvero per  $\beta\hbar^2/(mR^2) \sim \hbar\beta\chi \ll 1$ , contribuiscono tutti i livelli energetici, ma solo i cammini con Q piccolo. I livelli n sono distribuiti circa gaussianamente con  $\sigma^2 = 1/(4\pi^2\beta\hbar\chi)$ ;

Per temperature molto alte solo i bassi numeri di avvolgimento contribuiscono infatti essendo i tempi euclidei molto piccoli la particella non ha il tempo di esplorare tutti i settori topologici. Tramite le relazioni (9) e (4) si possono calcolare le grandezze osservabili, come il valor medio di  $Q^2$  corrispondente alla suscettività topologica, come segue:

$$\langle Q^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dQ Q^2 P(Q)}{\int_{-\infty}^{\infty} dQ P(Q)}$$
 (10)

Come è evidente il denominatore è un integrale Gaussiano pari a  $\sqrt{2\pi N_t \eta}$ , mentre il numeratore lo si calcola agevolmente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dQ Q^2 \exp\left(-\xi Q^2\right) = -\frac{\partial}{\partial \xi} \int_{-\infty}^{\infty} dQ \exp\left(-\xi Q^2\right) = -\frac{\partial}{\partial \xi} \sqrt{\frac{\pi}{\xi}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (2N_t \eta)^{3/2}$$

da cui si ottiene il valore teorico  $\langle Q^2 \rangle = N_t \eta$ .

#### 2 Simulazioni

Lo scopo del seguente lavoro è studiare il sistema di una particella confinata su una circonferenza unitaria misurando il numero di avvolgimenti Q che compie al variare della spaziatura temporale indagando le difficoltà che si incontrano nel limite al continuo della teoria. Le grandezze che caratterizzano le varie fasi del sistema e che quindi sono rilevanti da un punto di vista algoritmico sono la suscettività topologica  $\langle Q^2 \rangle$  e il tempo di autocorrelazione  $\tau$ .

#### 2.1 Discretizzazione

Nell'azione di equazione (6), è sufficiente utilizzare un metodo alle differenze finite tenendo conto del fatto che la particella è vincolata su una circonferenza, per cui occorre ridefinire opportunamente il concetto di distanza.

La discretizzazione prevede:

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{x_{j+1} - x_j}{a}$$

La condizione di periodicità del cammino si esprime come:  $x(N_t + 1) = x(1)$ . L'azione discretizzata è:

$$\frac{S_{E,L}}{\hbar} = \frac{1}{2\eta} \sum_{i=1}^{N_t} d(y_{i+1}, y_i)^2 \qquad \eta = a\chi$$
 (11)

dove  $y_i \in [0,1)$ ,  $y_{N+1} = y_1$  e d è la distanza sul cerchio, ridefinibile come:

$$d(y,x) = (x-y) \mod \frac{1}{2}$$

da cui:

$$d(y,x) = \begin{cases} y - x & \text{se } |y - x| \le 1/2 \\ y - x - 1 & \text{se } y - x > 1/2 \\ y - x + 1 & \text{se } y - x < -1/2 \end{cases}$$
(12)

La relazione tra  $\eta$ ,  $N_t$  e la temperatura (o tempo euclideo) è

$$N_t \eta = \beta \hbar \chi \tag{13}$$

dove nelle simulazioni è stato assunto  $\hbar = \chi = 1$ . L'energia del cammino, identificata dalla relazione  $\beta E = S_{E,L}/\hbar$ , è

$$E = \frac{1}{2\eta\hbar\beta} \sum_{i=1}^{N} d(y_{i+1}, y_i)^2 = \frac{\chi}{2N\eta^2} \sum_{i=1}^{N} d(y_{i+1}, y_i)^2$$
 (14)

La ridefinizione di distanza assicura che due punti siano sempre connessi con l'arco di lunghezza minima sulla circonferenza, per cui la carica topologica Q è definibile come segue:

$$Q = \sum_{i=1}^{N} d(y_{i+1}, y_i)$$
(15)

#### 2.2 Critical Slowing Down e algoritmi di simulazione

Il primo algoritmo investigato per la misura della carica topologica è un algoritmo Metropolis. Si considera come passo elementare l'update sul sito *i*-esimo su cui viene estratto un numero random  $\Delta y$  distribuito uniformemente nell'intervallo  $[y_i + \delta, y_i - \delta]$  e si propone un cambio del tipo  $y_i \to y_i + \Delta y$ , per poi accettarlo o rigettarlo.

Aumentare il valore del parametro  $\delta$  può ridurre i tempi di autocorrelazione (l'algoritmo in principio impiega più tempo per campionare la distribuzione), ma valori troppo grandi porterebbero ad un rate di accettanza troppo basso.

Due scelte possibili sono  $\delta = 0.5$  oppure  $\delta = \sqrt{\eta}$  e in quest'ultimo caso il rate di accettanza sarà costante nel limite al continuo, mandando  $\eta \to 0$ . Tuttavia questa sembrerebbe non essere la scelta ottimale se lo scopo è ridurre i tempi di autocorrelazione tra le misure di  $Q^2$ . Dalle simulazioni di seguito descritte, infatti, è chiaro come ciò induce il sistema ad un freezing per valori più bassi dell'estensione temporale del sistema rispetto ad un valore costante del tipo  $\delta = 0.5$ . La strategia adottata è mantenere costante il prodotto  $N_t \eta = 2$  e far variare di volta in volta  $N_t$ .

Il problema del congelamento della carica topologica affligge simulazioni di teorie di gauge abeliane e non, emergendo nell'approccio al limite al continuo. Nel fenomeno del freezing la catena perde di ergodicità e non riproduce più fedelmente il limite al continuo della teoria. Ciò accade in quanto nella versione discreta il valore di Q può cambiare solo quando la distanza tra due punti consecutivi  $y_i$  e  $y_{i+1}$  supera 1/2, ovvero quando cambia l'arco associato alla distanza sulla circonferenza. Ciò è molto improbabile dato che il valore dell'azione è grande.

#### 2.3 Algoritmo Tailor

Il critical slowing down, dunque, si presenta poiché negli update locali, per switchare settore topologico del cammino, si passa attraverso delle discontinuità. Un algoritmo non locale consentirebbe di passare da un settore topologico all'altro attraverso un singolo update, attraversando la barriera di potenziale in una sorta di "effetto tunnel". Tale mossa consente di connettere cammini in diversi settori topologici le cui azioni differiscono poco tra loro o sono uguali (1).

L'algoritmo è il seguente:

- 1. si sceglie randomicamente un valore  $i_0 \in [0, ..., N_t 1]$ ; date le condizioni al bordo periodiche si può scegliere anche  $i_0 = 0$  e il corrispettivo valore  $y_0$  associato.
- 2. si trova il primo valore  $i_{end} \in 1, ..., N_t 1$  tale che:

$$[y_{iend} - (y_0 + 0.5)] \mod 1/2 \le \varepsilon$$

 $con \varepsilon = cost. = 0.2 \cdot a$ 

3. si propone un update del tipo:

$$y_i \to y_p = [2y_0 - y_i] \mod 1/2$$

che corrisponderebbe a riflettere l'intero cammino dal punto  $i_{end}$  al punto  $N_t-1$ 

4. si accetta o rigetta il cambiamento con un usuale test di accettanza Metropolis

Nel caso discreto tale mossa non è microcanonica ma porta ad una variazione dell'azione locale pari a:

$$\Delta S_{E,L} = \frac{1}{2\eta} \left( d(y_p, y_{i_{end}-1})^2 - d(y_{i_{end}}, y_{i_{end}-1})^2 \right)$$
 (16)

Riflettere il cammino significa cambiare la carica topologica di  $\Delta Q=\pm 1$  in base alla posizione di  $y_0$  e questo permette di aggirare i problemi di non ergodicità. La mossa del sarto viene proposta con probabilità fissata  $p_{\text{Tailor}}$  dopo la quale vengono eseguiti N update Metropolis su siti estratti casualmente in modo uniforme.

### 3 Risultati Numerici

#### 3.1 Parametri e dati raccolti

Nelle simulazioni si è assunto  $\chi = \hbar = 1$ . I parametri di controllo sono:

 $N_t$ ,  $\eta$ ,  $\varepsilon$ ,  $p_{Tailor}$ , cammini, frequenza

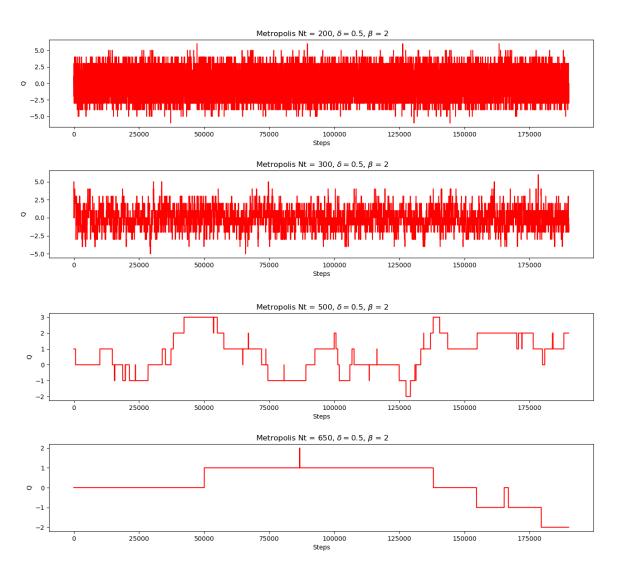
regolati in base alla potenza di calcolo a disposizione e ai valori utilizzati in (1)

- $\beta = 2$  per cui la distribuzione di probabilità, nel seguito visualizzata con degli istogrammi sulla densità campionaria di Q, avrà nel limite al continuo:  $\sigma_Q \simeq \sqrt{\beta} \simeq 1.41$ ;
- $p_{Tailor} = 6\%$  e frequenza di misura  $T_{\text{sample}} = 5$ ;
- $\varepsilon = 0.2 \eta$ ;
- $5 \cdot 10^{-4} \le \eta \le 10^{-2}$ ;
- Numero di cammini =  $10^6 \ \forall N_t$  con una termalizzazione dell'ordine di  $10^5$ ;

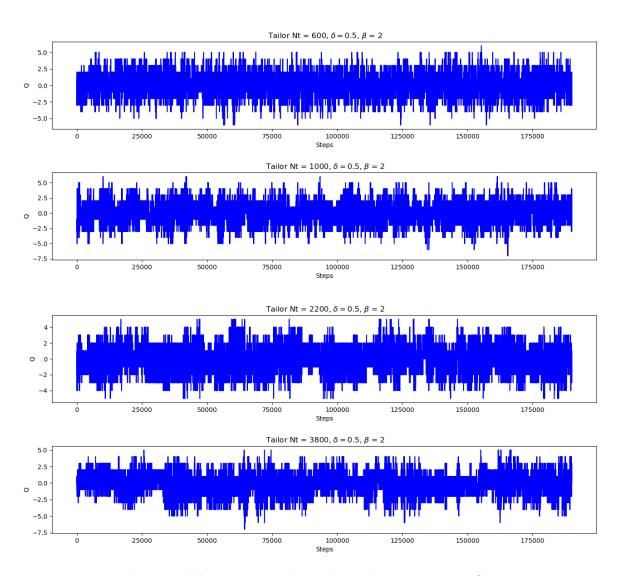
## 3.2 Carica topologica e freezing

Come già detto, le simulazioni Monte Carlo possono essere affette dal fenomeno del freezing, ovvero l'impossibilità del campo di cambiare settore topologico man mano che ci si avvicina al limite al continuo. Ciò si traduce in una divergenza dei tempi di autocorrelazione che, con  $\eta$  che diventa piccolo, tendono a saturare ad un valore comparabile con i tempi caratteristici delle simulazioni MC. Alla mossa del Sarto fa seguito un algoritmo Metropolis locale che esegue in totale  $N_t$  spazzate randomicamente sui siti del reticolo. Di seguito si riportano i grafici dei valori della carica topologica sia nel caso di Metropolis locale, sia utilizzando la mossa del sarto. Il numero di step Monte Carlo è dell'ordine di 10<sup>6</sup> con una termalizzazione dell'ordine di 10<sup>5</sup>. In Figura (1) sono riportati i grafici della carica topologica per varie estensioni temporali del sistema nel caso di algoritmo Metropolis. Si nota che il freezing per  $\delta = 0.5$  comincia verso  $N_t = 700$ . In Figura (2) vengono riportati i plot della carica topologica misurata con l'algoritmo di Tailor; si nota che il problema del freezing non è più presente. In Figura (3) viene confrontata la distribuzione dei valori della carica topologica e quella attesa al continuo, nel caso di entrambi gli algoritmi. La partenza è a freddo, ovvero con l'array inizializzato a zero. Nelle Figure (4,5 - metropolis) e (6,7 - tailor) vengono riportati invece i plot con  $\delta = \sqrt{\eta}$  per entrambi gli algoritmi.

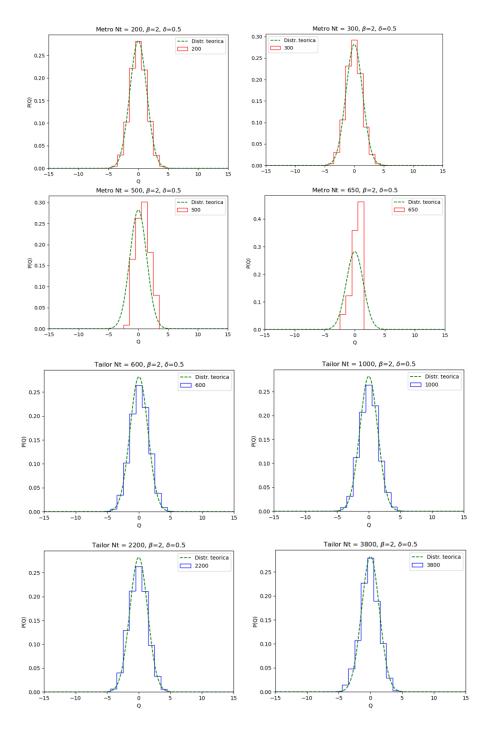
## 3.3 Risultati $\beta = 2$ e $\delta = 0.5$



**Figura 1:** Evoluzione della carica topologica lungo la storia Monte Carlo per update locali Metropolis; è evidente il freezing della carica topologica per valori di  $N_t$  che approcciano al limite al continuo.



**Figura 2:** Evoluzione della carica topologica lungo la storia Monte Carlo per algoritmo Tailor. L'update non locale è stato effettuato con una probabilità del 6%. Come è evidente dalle figure il problema del freezing è stato completamente risolto.



**Figura 3:** Confronto tra le distribuzioni ottenute e quelle teoriche per i 2 algoritmi: Metropolis e tailor.

## 3.4 Risultati $\beta = 2$ e $\delta = \sqrt{\eta}$

Per completezza si riportano alcuni plot per lo stesso valore di temperatura ma differente accettanza del test Metropolis. Il rate di accettanza rimane costante man mano che ci si avvicina al limite al continuo  $\eta \to 0$ . Tuttavia essa non costituisce la scelta ottimale se lo scopo è ridurre i tempi di autocorrelazione della suscettività topologica. Maggiore sarà  $\delta$ , minore saranno i tempi di autocorrelazione e dunque il sistema andrà incontro allo slowing down per valori di  $N_t$  più elevati. Dalle seguenti figure è possibile osservare il congelamento per valori di  $N_t$  minori rispetto ad un'accettanza di 0.5.

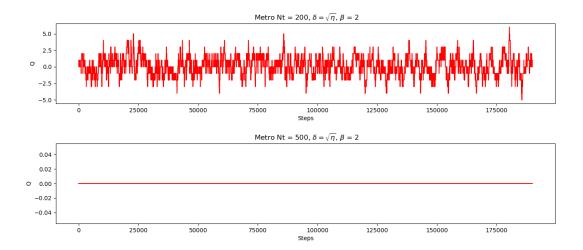
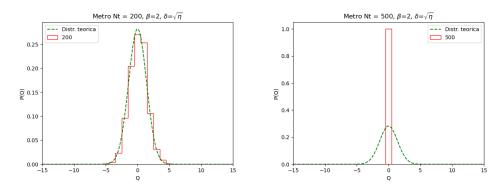


Figura 4: Carica topologica in funzione della storia Monte Carlo algoritmo Metropolis.



**Figura 5:** Istogrammi a confronto con la distribuzione teorica con  $\sigma \propto \sqrt{\beta}$ .

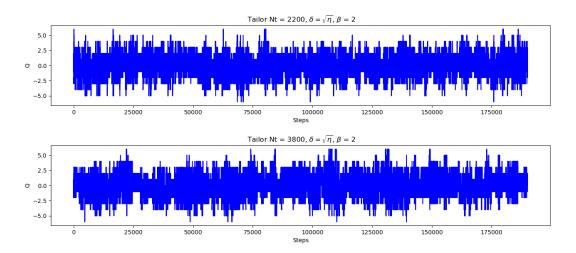


Figura 6: Carica topologica in funzione della storia Monte Carlo algoritmo del sarto.

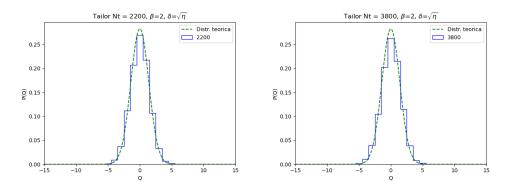


Figura 7: Istogrammi a confronto con la distribuzione teorica con  $\sigma \propto \sqrt{\beta}$ .

#### 3.5 Tempi di autocorrelazione

Esistono due modi per stimare i tempi di autocorrelazione del sistema:

- 1. calcolo dell'integrale della funzione di autocorrelazione;
- 2. tramite stima degli errori sull'osservabile  $Q^2$ ;

Nel primo caso è possibile ottenere il  $\tau$  per ciascun array di Q integrando direttamente la funzione di autocorrelazione:

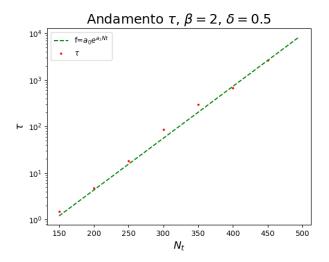
$$\tau_O = \frac{1}{2} + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\langle O_k O_{k+i} \rangle - \langle O \rangle^2}{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}$$
(17)

dove i è lo step durante la storia Monte Carlo e  $O_k$  e  $O_{k+i}$  denotano due generici valori dell'osservabile da calcolare. Dato che non è banale stimare un integrale della forma (17), ciò che si può fare è utilizzare una strategia alternativa, che preveda l'uso della seguente relazione:

$$\delta_{\langle O \rangle}^2 = \frac{2\tau_O}{N_{sample}} (\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2) = 2\tau_O [\delta_{\langle O \rangle}]_{naive}^2$$
 (18)

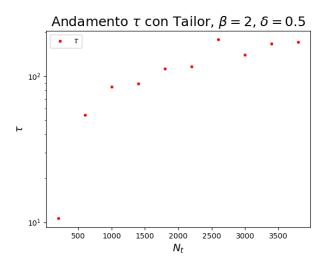
dove  $\delta_{\langle O \rangle}$  rappresenta l'errore standard sugli array di Q calcolato tramite procedure di ricampionamento (nel caso in esame tramite procedura di blocking),  $N_{sample}$  è il numero di misure nell'array dei valori della carica topologica, e  $\delta_{\langle O \rangle naive}$  rappresenta l'errore standard naive calcolato senza tener conto delle autocorrelazioni.

L'osservabile di interesse sarà la suscettività topologica  $\chi = \langle Q^2 \rangle$ . Di seguito si riporta, nel caso di algoritmo Metropolis, l'andamento dei tempi di autocorrelazione stimati attraverso l'equazione (18), utilizzando la tecnica del blocking per il calcolo di  $\delta^2_{\langle Q^2 \rangle}$ . La dimensione massima del blocco è stata assunta a circa 8000, contro una lunghezza dell'array osservabile di circa 200000. La dimensione stimata del blocco massimo è stata assunta dopo aver graficato l'andamento dell'errore per i vari  $N_t$  e aver osservato che la saturazione avveniva intorno agli 8000 steps per la massima estensione temporale che si è considerata.



**Figura 8:** Andamento di  $\tau$  per updates locali Metropolis. Si osserva come, al variare della dimensione  $N_t$ , i tempi di autocorrelazione divergano. Il confronto è con un fit di una funzione del tipo  $a_0e^{a_1N_t}$ , con  $a_0 = 0.024(2)$  e  $a_1 = 0.029(2)$ .

Il grafico di Figura (8) è lo stesso che si ottiene attraverso il ricampionamento con bootstrap con binning. Si riporta per completezza il grafico relativo ai tempi di autocorrelazione nel caso venga usato un algoritmo Metropolis con tailor, notando chiaramente che i  $\tau$  raggiungono un plateau.



**Figura 9:** Andamento  $\tau$  nel caso di algoritmo di tailor, per  $\delta=0.5,\ \beta=2.$ 

## Riferimenti bibliografici

- [1] C. Bonati M. D'Elia: Topological critical slowing down: Variations on a toy model. **Phys. Rev. E 98**, 013308, (2018)
- [2] M. D'Elia: Appunti del Corso di Metodi Numerici della Fisica Teorica Applicazioni al calcolo del path-integral in meccanica quantistica, (2016-2017)
- [3] M. D'Elia: Note sul Path Integral della particella sul cerchio