

0 - IL QUADRO DI RIFERIMENTO

Abbiamo dato una (agile) introduzione al formalismo dell'integrale funzionale. Avete a disposizione le note presentate a lezione e (non dimenticate!) un articolo di Creutz, cui faremo spesso riferimento: il nostro studio dell'oscillatore (armonico ed anarmonico) seguirà le tracce di quest'ultimo lavoro. In esso trovate anche una agile introduzione al formalismo del path integral e alla interpretazione della Meccanica Quantistica (in tempo immaginario!) come un problema di Meccanica Statistica. Trovate pure una introduzione al metodo Monte Carlo, in cui dovrete ritrovare quanto abbiamo visto a lezione. Una avvertenza: parecchi sviluppi algoritmici si sono consolidati dall'inizio degli anni 80 ad ora; il nostro approccio algoritmico è molto più moderno di quello di Creutz.

Prima di entrare nel merito delle consegne di esame, può essere utile richiamare un percorso concettuale che si può riassumere così:

- Definiamo, per un sistema di **Meccanica Quantistica** la cui dinamica è definita dalla **Hamiltoniana** H , la **funzione di Green in tempo immaginario** (T è un fissato intervallo nel tempo immaginario) come

$$\langle x_f, \tau + T | x_i, \tau \rangle = \langle x_f | e^{-HT/\hbar} | x_i \rangle$$

Una **funzione di partizione** può essere ora definita da

$$Z = \int dx \langle x | e^{-HT/\hbar} | x \rangle = \text{Tr} \left(e^{-HT/\hbar} \right)$$

A partire da questa funzione di partizione, può definirsi una **Meccanica Statistica** in cui una tipica quantità da calcolare è data da

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} \left(A e^{-HT/\hbar} \right)}{\text{Tr} \left(e^{-HT/\hbar} \right)}.$$

È a questo punto semplice (basta inserire completezze negli autostati dell'Hamiltoniano) mostrare che

$$\langle A \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \langle 0 | A | 0 \rangle$$

espressione in cui riconosciamo il **valore di attesa sul vuoto della teoria quantistica** (si parla a volte di *proiezione sul vuoto*).

- Abbiamo imparato come manipolare la definizione per la funzione di Green fino ad arrivare alla sua espressione come integrale sui cammini (**path integral**). Applicando tale espressione direttamente alla espressione per la Z definita sopra otteniamo

$$Z = \int [Dx] e^{-S_E[x]/\hbar}$$

che dobbiamo intendere come **integrale su tutti i possibili cammini** (attenzione: in questo contesto si tratta di **cammini chiusi**, che si chiudono in tempo euclideo T ; in più, i cammini assumono tutte le possibili configurazioni nello spazio, non essendo più fisso il punto di partenza/arrivo). Il funzionale $S_E[x]$ ¹ è la **azione euclidea** calcolata sul cammino x (ricordiamo che un cammino è una funzione $x(\tau)$, τ essendo il tempo immaginario); $S_E[x] = \int d\tau L_E(x, \dot{x})$, dove nella **Lagrangiana euclidea** il contributo cinetico e potenziale sono sommati (ovvero il segno relativo è +) $L_E = T(\dot{x}) + V(x)$. L'espressione del path integral come integrale sui cammini è (per quanto richiamato finora) essenzialmente *formale*: su questo torneremo a breve.

- La cosa importante è ora notare come può essere espresso come un integrale sui cammini non solo il denominatore di $\langle A \rangle$ (la Z , come visto), ma anche il numeratore. Prendendo come esempio una quantità legata ad una **funzione di correlazione** che calcoleremo anche noi

$$\langle x_f, \tau + T | X(\tau_1) X(0) | x_i, \tau \rangle = \int [Dx] x(\tau_1) x(0) e^{-S_E[x]/\hbar}$$

espressione (questa) che non è ancora quella cui siamo interessati dal punto di vista della Meccanica Statistica: qui i cammini connettono punti distinti e fissi (x_i e x_f)². Passando a calcolare l'espressione che ci serve per il valore di attesa della Meccanica Statistica

$$\text{Tr} \left(X(\tau_1) X(0) e^{-HT/\hbar} \right) = \int [Dx] x(\tau_1) x(0) e^{-S_E[x]/\hbar}$$

in cui invece si intende che si somma su tutti i cammini chiusi che possono passare per ogni punto dello spazio. **Nelle espressioni sopra le X sono operatori, mentre le x c-numeri.** Stiamo attenti a distinguere (la notazione è scivolosa...) il cammino $x(\tau)$, in cui τ è corrente, dal valore del cammino valutato in τ_1 , che è appunto $x(\tau_1)$.

- Si è detto che l'espressione per il path integral è formale. Essa è da

¹Può essere utile ricordare che Creutz chiama semplicemente S il funzionale.

²Se volete, questa è la espressione collegata a quella per la funzione di Green originaria, quella per cui non abbiamo scritto in queste noticine una espressione esplicita, concentrandoci subito sulla espressione che ci serve per la funzione di partizione.

pensarsi ottenuta da una **procedura di limite**³ in cui i cammini sono da principio **discretizzati** $x(\tau) \rightarrow \{x_i | i = 1 \dots N\}$. **Le x_i sono le posizioni assunte a tempi discreti**, in numero di N , dove si intende che l'intervallo originario è stato diviso in intervalli in accordo a $T = N * a$. Assumendo la notazione di Creutz, utilizziamo a per indicare **l'intervallo di tempo (immaginario) infinitesimo**⁴. Integrare su tutti i cammini vuol dire integrare su tutte le configurazioni $\{x_i\}$ possibili. L'integrale che definisce l'azione è a sua volta discretizzato in una somma. Ad esempio, **per l'oscillatore armonico** abbiamo (cominciamo a scrivere come Creutz e cambiamo notazione $S_E \rightarrow S$)

$$S = \sum_{j=1}^N a \left(\frac{1}{2} m_0 \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{a^2} + \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 x_j^2 \right)$$

Vi ricordo che nelle simulazioni noi abbiamo per lo più usato una **notazione in cui scompare la dipendenza esplicita da a** e compaiono solo **quantità adimensionali**

$$S = \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{2} \hat{m}_0 (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2 + \frac{1}{2} \hat{m}_0 \hat{\omega}_0^2 \hat{x}_j^2 \right).$$

Per ottenere questa espressione basta assumere unità di misura $\hbar = c = 1$ e definire (ecco le quantità adimensionali)

$$\hat{m}_0 \equiv m_0 a \quad \hat{\omega}_0 \equiv a \omega_0 \quad \hat{x}_j \equiv \frac{x_j}{a}$$

- A questo punto (scriviamo una **funzione di correlazione** che ci servirà calcolare) **per valori di a finiti, ma piccoli** possiamo scrivere (di qui in avanti mettiamo, come sopra, $\hbar = 1$)

$$\frac{\text{Tr} (X(\tau_1) X(0) e^{-HT})}{\text{Tr} (e^{-HT})} = \frac{\sum_{\{x\}} x_k x_0 e^{-S[x]}}{\sum_{\{x\}} e^{-S[x]}}$$

in cui vale la discretizzazione $\tau_1 = a * k$. Siamo (anche nel linguaggio dell'integrale di cammino) arrivati ad un **problema di Meccanica Statistica** i cui **gradi di libertà** sono definiti dalle **configurazioni** $\{x_i\}$ e **l'azione $S[x]$ gioca il ruolo di una $\beta \mathcal{H}[x]$** . Vale la pena ricordare che la dipendenza da \hbar (che non compare perchè posto a 1) mima in

³Si faccia attenzione al fatto che la definizione del path integral è a tutti gli effetti costruttiva: la funzione di Green (ampiezza di transizione) è calcolata fattorizzando l'esponenziale e inserendo completezze in un numero finito, poi si procede al limite. Faccio questa banale osservazione perchè in queste noticine prima scriviamo l'integrale sui cammini in notazione continua, poi lo consideriamo nella sua forma discretizzata: ricordiamoci sempre che, facendo così, torniamo indietro rispetto al meccanismo di costruzione/definizione.

⁴Come abbiamo osservato, questa è la notazione standard per il **passo reticolare**.

un certo senso quello dalla temperatura. **Un tale problema di Meccanica Statistica può ora essere trattato mediante simulazioni Monte Carlo.** Noi abbiamo scelto in particolare **Hybrid Monte Carlo** (si vedano a riguardo le note presentate a lezione).

Tutto quanto sopra esposto ben giustifica il titolo del lavoro di Creutz che ci ripromettiamo di riprodurre: *Un approccio statistico alla Meccanica Quantistica*.

Ricordiamo ancora come per arrivare davvero al risultato della Meccanica Quantistica, **devono contemporaneamente essere soddisfatti i due limiti**

- $T \rightarrow \infty$, per realizzare la **proiezione sul vuoto**;
- $a \rightarrow 0$ (**limite continuo**), perchè la formula dell'integrale funzionale (somma sui cammini) sia corretta⁵.

È evidente che (strettamente parlando) i due limiti non sono realizzabili nel contesto dei nostri calcoli numerici: tutti questi conti sono precisi nella misura in cui si riescono ad estrapolare i risultati ai due limiti rilevanti.

Finita questa introduzione, passiamo a descrivere cosa c'è da fare. La nostra guida (come più volte detto) può essere il lavoro di Creutz, molto utile anche per ricapitolare (per quanto in notazioni differenti) l'inquadramento teorico al problema (occhio solo a qualche errore di stampa...).

1 - L'OSCILLATORE ARMONICO

Per prima cosa, **dovrete riprodurre e completare quanto fatto insieme (a lezione) per l'oscillatore armonico.**

Una domanda da porsi è **quali valori scegliere per i parametri di massa, frequenza e (i diversi valori del) passo reticolare.** In prima battuta potete assumere gli stessi **valori dei parametri scelti nel lavoro di Creutz** (cercate a cavallo di pagina 443 e 444 del lavoro in questione i valori per a , m_0 e ω_0 , con l'avvertenza che Creutz descrive l'oscillatore in termini di un parametro μ). Ricordate quanto visto a lezione: nella nostra notazione (cap-puccio...) si devono scegliere i valori per le quantità adimensionali \hat{m}_0 e $\hat{\omega}$ (alla scelta di questi si aggiunge quella del numero di punti nel nostro reticolo, che nella definizione della funzione di Matlab è denominata NT ⁶): **nel fissare i**

⁵Vale la pena ricordare come per valori finiti, anche se piccoli, del passo reticolare a la espressione da noi ricavata per l'integrale di cammino era approssimata: avevamo usato una approssimazione della formula di Baker-Campbell-Hausdorff.

⁶Negli esempi che troverete più avanti troverete la notazione N_T , per evitare equivoci con un prodotto $N \times T$...

valori delle quantità adimensionali ricordate che per estrarre il limite continuo dovreste variare il valore del passo reticolare tenendo fissi i valori di massa e frequenza e il valore di T .

Elenchiamo ora più in dettaglio i punti rilevanti

1. **Generazione di configurazioni del sistema** in un numero adeguato. Tre commenti. (1) Cosa vuol dire numero adeguato? Dovreste verificare che i risultati che calcolate siano stabili e gli errori sotto controllo. (2) Salvare tutte le configurazioni non è quello che si fa normalmente (si prendono spesso misure *on the fly*). Noi lo facciamo per manipolare tutto a posteriori e tenere sotto controllo ogni passaggio delle misure. (3) È importante fare prima **termalizzare il sistema** e poi **avviare la generazione partendo da una configurazione termalizzata**. Guardate ad esempio le espressioni Matlab [M1] dell'appendice che raccoglie una collezione di comandi rilevanti.
2. **Calcolo della energia dello stato fondamentale** E_0 ; come ricorderete, c'è un **semplice operatore** (quadratico) da misurare, la cui forma è dettata dal **teorema del Viriale**. Segnatamente, la procedura per calcolare E_0 comporta un certo numero di passaggi, che ancora una volta dettagliamo nel seguito.
 - **Calcolo di E_0 a T ed a fissati** (ricordiamo che vale quanto detto sopra per i valori di \hat{m}_0 e $\hat{\omega}$). A meno di costanti moltiplicative, dobbiamo calcolare $\langle x_i^2 \rangle$; sfruttando l'invarianza per traslazione (che vale sul valore di attesa, anche se non vale configurazione per configurazione), possiamo calcolare la media su tutti i punti $\frac{1}{N_T} \langle \sum_{i=1}^{N_T} x_i^2 \rangle$. Di tale media faremo la media su tutte le configurazioni, come in [M2]⁷. Attenzione: in espressioni come la [M2] **non** è scritta la potenza del passo reticolare che potrebbe essere necessaria per avere la quantità correttamente dimensionata!
 - **Stima dell'errore per la stessa quantità**. Come sappiamo, questo comporta il calcolo della **funzione di autocorrelazione** per l'energia e la conseguente valutazione del **tempo di autocorrelazione integrato**. La funzione di correlazione è calcolabile (e ispezionabile... volete verificare che vada a zero in modo liscio) come in [M3]; potete stimare il tempo di autocorrelazione τ_{int} integrato cercando un plateau da ciò che ottenete generando una figura come in [M4]. La stima dell'errore (cfr [M5]) dovrebbe darvi una idea precisa del fatto che nel risultato sono riconoscibili deviazioni sistematiche rispetto al valore previsto dalla Meccanica Quantistica (per a piccolo, ma finito e T grande, ma finito, il risultato *non può* essere esatto entro l'errore).

⁷Attenzione: dovete capire nel dettaglio cosa vi ritornino le due medie! Verificate le dimensioni di quanto vi viene ritornato...

- **Calcolo di E_0 e del suo errore al variare di a** e precisamente per $a \rightarrow 0$ (a T fissato). ATTENZIONE! (Ri)scoprirete che le autocorrelazioni diventano sempre più importanti per a sempre più piccolo: dovrete fermarvi ad un valore di a a cui la stima del tempo di autocorrelazione sia sicura e i tempi di calcolo non eccessivi. Scoprirete che (anche stando lontani da valori del passo reticolare troppo piccoli) é possibile procedere comunque alla estrapolazione di cui al punto seguente.
- Avendo apprezzato una dipendenza dal valore di a non trascurabile, potete pensare ad un **fit dei valori di E_0 in funzione dei valori di a** . Abbiamo visto che l'andamento *leading* è **quadratico** e **le correzioni sono comunque pari in a** . Il fit più semplice è dunque del tipo [M6]⁸. Vi invito a convincervi dell'argomento fornito a lezione: le equazioni del moto di Hybrid Monte Carlo comportano (nella nostra discretizzazione) la valutazione di una derivata seconda, che risulta precisa ad ordine $\mathcal{O}(a^2)$. Se vi limitate ad un fit puramente quadratico, dovrete conoscere il modo di calcolare l'**errore sulla determinazione dell'energia nel limite $a \rightarrow 0$** (*i.e.* l'errore risultante sul termine costante del polinomio). Ricorderete però che abbiamo anche imparato un **metodo di bootstrap**, grazie al quale potete anche provare un fit con un polinomio di ordine superiore (comunque pari): questo comporta l'utilizzo della funzione *tau_estrapp.m*, ad esempio (se volete studiare effetti sottodominanti) come in [M7].
- **Verifica dell'effetto della finitezza di T** . Provate ad aumentare il valore di T (in prima battuta ad a fissato; i più volenterosi potranno provare a stimare l'effetto complessivo, ripetendo la procedura di estrapolazione per $a \rightarrow 0$ ad un diverso valore di T). Come mostrato a lezione, troverete effetti nettamente minori di quelli legati ad a finito. Attenzione, però: per la funzione di correlazione le richieste possono essere più stringenti.

3. Calcolo dell'energy gap $E_1 - E_0$ (dove E_1 è l'energia del primo stato eccitato). Notate che

- Dovrete **misurare $\langle x_i x_{i+j} \rangle$ per diversi valori di j** , ad esempio come in M[8].
- Dovrete **riconoscere nelle misure l'andamento**

$$\langle x_i x_{i+j} \rangle = \text{cost.} * e^{-(E_1 - E_0) * j}$$

Si noti come anche in questa formula dovrete chiedervi in che unità di misura siano scritte le varie quantità. Si noti anche che non ci interessa il valore della costante (anche se sapremmo dire chi essa sia). Infine, appare evidente la **invarianza per traslazione** (dipendenza dalla sola j).

⁸Dovrebbe esservi ovvio cosa contengano i vettori *aa* e *ee*.

- Giova ricordare che **la forma di sopra è determinata dal nostro sistema, ovvero l'oscillatore armonico!** Riguardate in proposito la (2.24) (e seguenti) del lavoro di Creutz: questa è la formula generale, valida per ogni sistema! Per l'oscillatore armonico, però, solo $\langle 0|X|1 \rangle$ è nonnullo! (cfr pag 444 del lavoro, se non riuscite a ricostruire l'argomento...). Il fit rilevante è questa volta del tipo $M[9]^9$, in cui dovrete trovare un intervallo conveniente in cui effettuare il fit.
 - Non lo abbiamo detto esplicitamente, ma ovviamente anche quanto abbozzato prima è una procedura da pensare a fissati a e T . **Potrete anche in questo caso pensare ad una estrapolazione per $a \rightarrow 0$ (come abbiamo abbozzato a lezione).** Se voleste anche valutare gli errori e il loro effetto sulla estrapolazione, il carico di lavoro si farebbe più importante. Diciamo che lasciamo quest'ultima cosa (errori e loro effetto sull'extrapolazione) a quelli davvero volenterosi...
4. **Stima della densità di distribuzione di probabilità di localizzare la particella entro un (piccolo) intervallo di valori della posizione.**
 - Dovrete chiedervi: **quello che trovate** (alla fine, ricostruite una densità di distribuzione di probabilità, per quanto discetizzata; ricordate come fatto a lezione?) **ha a che fare con il modulo quadro di una funzione d'onda?** La risposta è sì, precisamente **per lo stato di vuoto**; l'appendice A del lavoro di Creutz vi spiega i dettagli.
 5. **Verifica che nella nostra implementazione di Hybrid Monte Carlo la integrazione delle equazioni di Hamilton** (mediante *leap-frog*) **soddisfa la condizione di reversibilità**; ricordate che questo è cruciale per mostrare (tramite il bilancio dettagliato) la correttezza dell'algoritmo. Ovviamente, la reversibilità **non potrà essere provata a precisione infinita**; dovrete chiedervi se la precisione entro cui la verificate sia sufficiente.

2 - L'OSCILLATORE ANARMONICO

Passerete poi a studiare l'oscillatore anarmonico. Di fatto, il percorso sarà lo stesso:

1. **Calcolo di E_0 .**
2. **Calcolo di $(E_1 - E_0)$.**
3. **Stima della densità di distribuzione di probabilità di localizzare la particella entro un (piccolo) intervallo di valori della posizione.**

⁹Questo è l'ultimo caso in cui viene fornito un esplicito esempio di quanto si debba scrivere in Matlab.

4. Anche in questo caso, **verifica della reversibilità del leap-frog in HMC**.

Qualche commento/suggerimento:

- **Non c'è un modo solo di scrivere la hamiltoniana dell'oscillatore anarmonico** (cfr in proposito le note presenti su ELLY).
 - Potete scrivere la hamiltoniana nella forma (4.18) (attenzione! vi accorgete facilmente che manca un elevamento a quadrato!). Questa scrittura vi farà confrontare con la presenza di *due possibili stati ad energia minima per il sistema classico*. Sarà interessante vedere che conseguenza questo abbia nel calcolo della probabilità di localizzare la particella in una data posizione.
 - Potete anche (invece) scrivere la perturbazione quartica *sommata al contributo dell'hamiltoniana imperturbata*. Questo è il caso che vi consente il confronto con la teoria delle perturbazioni! Guardate ad esempio i termini della serie che trovate calcolati (per una data scelta di parametri a cui potete adeguarvi) sul libro *Onofri-Destri*. I più curiosi potranno venirmi a chiedere del pacchetto di *Mathematica* che abbiamo potuto commentare solo per sommi capi...
- Dovrete (ovviamente) **cambiare le equazioni del moto per la evoluzione hamiltoniana in HMC** (leap-frog)! Dovrete anche chiedervi **quale operatore il teorema del Viriale vi chiede di misurare per determinare E_0** .
- **La forma funzionale attesa per la funzione a due punti non è la stessa che per l'oscillatore armonico**. In altri termini, dovete ora confrontarvi con la forma generale fissata dalla (2.24). Se è così, dovete prendere un limite di tempi $\rightarrow \infty$. Piuttosto che imbarcarvi in un fit, nel caso dell'oscillatore anarmonico le formule (2.25a) e (2.25b) vi danno un utile consiglio su come procedere.
- A proposito del punto precedente, **ricordate le considerazioni di parità richiamate a lezione!** Solo i **contributi dispari** $n = 2k + 1$ danno contributo alla somma una volta che sia stata inserita la completezza negli autostati dell'energia!

3 - LA RELAZIONE

Su quanto avrete fatto, presenterete una breve relazione

- discutendo lo scopo del lavoro;
- presentando i vostri risultati (seguite la traccia delle richieste di sopra);
- commentando le modifiche ai codici che avrete avuto bisogno di implementare.

UN COMMENTO (ed un incoraggiamento)

Il lavoro è abbastanza strutturato. È un percorso concettualmente (per i fondamenti) e praticamente (per i risultati calcolabili) coerente e abbastanza completo, quindi spero possa darvi soddisfazione. **NON ABBIATE TIMORE (NÈ RITEGNO) A VENIRE A CHIEDERE SPIEGAZIONI**, se ne avete bisogno! Piuttosto che incagliarvi, venitemi a trovare e riguardiamo qualcosa insieme, se serve.

Ricordate anche: sono possibili aggiustamenti di data per sostenere l'esame! Basta concordarlo (e ovviamente non uscire dalla sessione di esame).

BUON LAVORO!

APPENDICE (qualche espressione in Matlab)

[M1]

```
[ret,acc] = HMCqmho(m0,omg0,Nt,eps,Nhmc,Nterm);  
[ret,acc] = HMCqmho(m0,omg0,Nt,eps,Nhmc,Ncfg,ret(end,:));
```

[M2]

```
myE0 = mean(mean(ret.^2,2));
```

[M3]

```
cc = MYautocorr(mean(ret.^2,2),tt);  
plot(cc)
```

[M4]

```
plot(cumsum(cc))
```

[M5]

```
dE0 = std(mean(ret.^2,2))/sqrt(Ncfg/(2*t_int));
```

[M6]

```
aux = polyfit(aa.^2,ee,1);
```

[M7]

```
res = tau_estrap(aa.^2,ee,dee,2);
```

[M8]

```
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
```

[M9]

```
MYres = polyfit(0:l0,log(CC(1:(l0+1))),1);
```