Vediamo che succede per l' OSCILLATORE ARMONICO

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 Q^2 \qquad (Q, P \text{ OPERATORI... problema quantistico})$$

Nell' ordinario tempo reale, la AZIONE è data da $S = \int dt\, L(q, \dot{q})$

dove la LAGRANGIANA è $L(q,\dot{q}) = T - V = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$

(dove notate che già non trattiamo più operatori...)

Ora dobbiamo

1. Passare al TEMPO IMMAGINARIO e a LAGRANGIANA e AZIONE EUCLIDEE

$$S = \int dt\, L \longrightarrow S_E = \int d\tau\, L_E \qquad L_E = T + V = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$$

dove ora la derivata è $\dot{q} = \frac{d}{d\tau} q(\tau)$

2. Discretizzare il TEMPO, e di conseguenza le TRAIETTORIE (cammini, o paths...), l'AZIONE (da integrale a somma) e da DERIVATA $\frac{d}{d\tau}$ (emergerà il consueto schema alle differenze finite, ricordate?)

Passando ad una notazione a pedici (prima i tempi erano apici, ma ora abbiamo un singolo grado di libertà e ci si "libera" la notazione a pedice, più agile...)

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

dove $\{x_j | 1 \ldots N\}$ sono i nostri CAMMINI DISCRETIZZATI

NB CAMMINI CHIUSI $\longrightarrow x_{N+1} = x_1$ (ricordate? sono le nostre CONDIZ. al CONTORNO PERIODICHE)

$$Z = \int \prod_{j=1}^{N} dx_j\, e^{-S_E(\{x_j\})}$$

Che tipo di PROBLEMA di MECCANICA STATISTICA è saltato fuori?

I gradi di libertà sono VARIABILI REALI $\{x_i\}$. Ricordiamo che vogliamo interpretare $e^{-S_E[\{x_i\}]}$ come un $e^{-\beta \mathcal{H}[\{x_i\}]}$

In sostanza posso pensare alla $S_E[\{x_i\}]$ come alla HAMILTONIANA di un SISTEMA di SPIN, dove potete notare che c'è un contributo alla ENERGIA che viene dal modulo di x_i (cfr x_i^2; attenzione! lo trovo anche nella discretizzazione di $\dot{x}$) e un contributo che viene da un accoppiamento a PRIMI VICINI (cfr $x_{i+1}x_i$, nel termine cinetico)

Una prima cosa che posso calcolare è l'ENERGIA del LIVELLO FONDAMENTALE, ovvero $\langle 0|H|0\rangle$.

Questa verrà da $\lim_{T\to\infty} \langle H \rangle = \lim_{T\to\infty} \langle T+V \rangle$ dove $\langle \ldots \rangle$ sta per VALORE MEDIO del nostro PROBLEMA di MECC. STATIST.

NB Posso sfruttare il TEOREMA del VIRIALE

$$T = \frac{1}{2} x V'(x) \qquad \left(V' = \frac{d}{dx} V\right)$$

$$\text{con } V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad V' = m\omega^2 x \quad \frac{1}{2} x V' = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

e dunque riscrivere $\langle H \rangle = \langle T+V \rangle = \langle m\omega^2 x^2 \rangle$

Alla fine la MISURA da fare è proporzionale a

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

Non sarà la nostra unica misura, come vedremo...

Ora guardiamo a (NB torniamo al valore di attesa della MQ)

$$\langle 0 | Q(\tau) Q(0) | 0 \rangle$$ Riconosciuto? quello dell'esempio...

Vediamo perché ci interessa ... solito trucco (Completezze ENERGIA)

$$\langle 0 | Q(\tau) Q(0) | 0 \rangle = \langle 0 | e^{H\tau} Q e^{-H\tau} Q | 0 \rangle$$

$$= \sum_n \langle 0 | e^{H\tau} Q e^{-H\tau} | n \rangle \langle n | Q | 0 \rangle$$

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

Ma ora $Q \propto a + a^\dagger$

$a|n\rangle \propto |n-1\rangle$

$a^\dagger |n\rangle \propto |n+1\rangle$

$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$

da cui l'unico n a dare contributo è $n=1$, ovvero

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

dove $E_1 - E_0$ è l'ENERGY GAP.

Morale: possiamo misura E_0 e E_1 calcolando

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

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

Qualche osservazione

1. I risultati ottenuti (in particolare quello sull'energy gap) dipendono dal fatto che stiamo trattando il caso dello OSCILLATORE ARMONICO

2. $\langle x_i^2 \rangle$ è INVARIANTE per TRASLAZIONE e INDIP. da i

3. $\langle x_i x_0 \rangle$ è INVARIANTE per TRASLAZIONE e DIPEND. da $i = i - 0$, ovvero $\langle x_i x_0 \rangle = \langle x_{k+i}\, x_k \rangle$

   Come è chiaro da

$$\langle 0 | Q(\tau_1)\, Q(\tau_2) | 0 \rangle = \langle 0 | e^{H\tau_1} Q\, e^{-H(\tau_1-\tau_2)} Q\, e^{-H\tau_2} | 0 \rangle$$

$$= \sum_n \langle 0 | e^{H\tau_1} Q\, e^{-H(\tau_1-\tau_2)} | n \rangle \langle n | Q\, e^{-H\tau_2} | 0 \rangle$$

$$= \sum_n e^{-(E_n-E_0)(\tau_1-\tau_2)} |\langle 0 | Q | n \rangle|^2$$

$$= e^{-(E_1-E_0)(\tau_1-\tau_2)} |\langle 0 | Q | 1 \rangle|^2$$

4. Ricordiamoci che nel nostro PROBLEMA di Mecc. Stat. definito da $Z = \int \prod_{j=1}^{N} dx_j\, e^{-S_E[\{x_j\}]}$ valgono CONDIZ. al CONTORNO PERIODICHE $x_{N+1} = x_1$

Vogliamo ora SIMULARE e CALCOLARE: quale ALGORITMO scegliere? ...

HYBRID MONTE CARLO

Assumiamo di avere un problema di MECC. STATISTICA definito da $Z = \int \prod_i d\phi_i \, e^{-S[\{\phi_i\}]}$

<u>NB</u> Avrei potuto (dovuto?) utilizzare la NOTAZIONE STANDARD per il PESO di GIBBS, i.e. $e^{-\beta H[\{\phi_i\}]}$

Facciamo $\beta H[\{\phi_i\}] \longrightarrow S[\{\phi_i\}]$ perché

1. Nel nostro esempio è la notazione che ci ritroviamo...
2. Nel metodo emergerà un' ALTRA HAMILTONIANA (e alla fine così faremo meno confusione...)

Cerchiamo una MATRICE STOCASTICA, se parliamo formalmente. Nella pratica cerchiamo una REGOLA per DEFINIRE la (PROBABILITA' di) TRANSIZIONE da una CONFIGURAZIONE ad un' ALTRA $\{\phi_i\} \longrightarrow \{\phi_i'\}$ che

<u>SODDISFI IL BILANCIO DETTAGLIATO</u>

Definiamo la PROBAB. di TRANSIZIONE definendo direttamente la <u>PRESCRIZIONE</u> per passare

$$\{\phi_i\} \longrightarrow \{\phi_i'\}$$

La regola pare stranarella... vediamola

- DEFINISCO un SISTEMA HAMILTONIANO descritto da

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

ovvero
- ad ogni grado di libertà ϕ_i associo un MOMENTO CONIUGATO π_i
- tutte le masse sono unitarie
- il termine POTENZIALE in $\mathcal{H}[\{\phi_i, \pi_i\}]$ è dato da $S[\{\phi_i\}]$

- CHI MI FORNISCE le $\{\pi_i\}$, che NON fanno parte del PROBLEMA ORIGINARIO? Le ESTRAGGO con PROBAB. GAUSSIANA

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

Ora posso definire la REGOLA $\{\phi_i\} \longrightarrow \{\phi_i'\}$

1. Estraggo le $\{\pi_i\}$ da $(\cdot)$
2. Faccio evolvere il sistema $\{\phi_i, \pi_i\}$ in accordo alle EQUAZIONI di HAMILTON, ovvero realizzo il FLUSSO HAMILTONIANO

$$\{\phi_i, \pi_i\} \longrightarrow \{\phi_i', \pi_i'\}$$

cioè INTEGRO

$$\begin{cases} \dot{\phi}_K = \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_K} = \pi_K \\ \dot{\pi}_K = -\dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_K} = -\dfrac{\partial S}{\partial \phi_K} \end{cases} \qquad (\cdot\cdot)$$

facendo evolvere il sistema per un tempo T_0, a partire dalle CONDIZIONI INIZIALI $\{\phi_i, \pi_i\}$

3. Tengo come $\{\phi_i'\}$ le $\{\phi_i'\}$ così ottenute (notate che "mi dimentico" delle $\{\pi_i'\}$ ...)

Osservazioni

(a) la notazione è infelice perché $\{\phi_i, \pi_i\}$ sono le condiz. iniziali del flusso, ma compaiono nelle equaz. del moto come variabili... Infelice, ma spero non equivoca...

(b) Notate che T_0 è un PARAMETRO TECNICO, ad ora non meglio specificato (dovrò chiedermi: come lo scelgo?)

(c) A tutti gli effetti pratici, avrò bisogno di uno SCHEMA NUMERICO per integrare le equaz. di Hamilton. Qui penso indoviniate la risposta

SCELGO di integrare le (••)
con LEAP-FROG

(d) Notare che questo introduce un secondo PARAMETRO TECNICO, il δt (passo temporale nella integrazione LEAP FROG)

Perché funziona?

Ricordate il BILANCIO DETTAGLIATO?

$$W_{ij}\,\pi_j = W_{ji}\,\pi_i$$

La nostra π è il PESO di GIBBS $e^{-S[\{\phi_i\}]}$

(Ricordate che in W_{ij} vale $W_{ij} = P(i \leftarrow j)$)

Devo mostrare che

$$e^{-S[\{\phi_i\}]}\, P(\{\phi_i\} \to \{\phi_i'\}) = e^{-S[\{\phi_i'\}]}\, P(\{\phi_i'\} \to \{\phi_i\})$$

Ora $\quad P(\{\phi_i\} \to \{\phi_i'\}) = \int D\pi\, D\pi'\, P_G(\{\pi_i\})\, P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \to \{\phi_i', \pi_i'\})$

dove
- devo integrare sulla prob. di estrarre i momenti $\{\pi_i\}$ in accordo a $P_G(\{\pi_i\})$
- devo SOMMARE sulle $\{\pi_i'\}$ perché "NON LE GUARDO" (probabilità marginale)
- $P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \to \{\phi_i', \pi_i'\})$ è la PROB. che si realizzi il FLUSSO HAMILTONIANO
$$\{\phi_i, \pi_i\} \to \{\phi_i', \pi_i'\}$$

(NB $D\pi = \prod_j d\pi_j$)

<u>ATTENZIONE!</u> Dalle proprietà delle equazioni di HAMILTON

$$P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i, \pi_i\} \to \{\phi_i', \pi_i'\}) = P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i', -\pi_i'\} \to \{\phi_i, -\pi_i\})$$

Dal fatto che $P_G(\{\pi_i\}) = P_G(\{-\pi_i\})$

e dal fatto che $e^{-S[\{\phi_i\}]} P_G(\{\pi_i\}) = \left(\prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i,\pi_i\}]} =$

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

discende ora (c'è in mezzo un cambio di variabili $\pi \to -\pi$ ...)

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

che è il BILANCIO DETTAGLIATO!

Tutto bene, allora, salvo che ABBIAMO USATO la CONSERVAZIONE di $\mathcal{H}(\{\phi_i,\pi_i\}) = \mathcal{H}(\{\phi_i',\pi_i'\})$. Ma abbiamo già visto che LEAP FROG la VIOLA! Che fare?

Ci basta sostituire la prescrizione 3. con la NUOVA

3. Accetto la $\{\phi_i',\pi_i'\}$ con PROB. di ACCETTAZIONE

$$P_A(\{\phi_i,\pi_i\} \to \{\phi_i',\pi_i'\}) = \min\left\{1, e^{-\delta\mathcal{H}}\right\}$$

$$\text{con } \delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{\phi_i',\pi_i'\}) - \mathcal{H}(\{\phi_i,\pi_i\})$$

Quindi, in caso di accettazione, tengo $\{\phi_i'\}$ come nuova configurazione. Se non passo questo TEST di METROPOLIS, la mossa diventa $\{\phi_i\} \to \{\phi_i\}$

Ora vale

$$P(\{\phi_i\} \to \{\phi_i'\}) = \int \mathcal{D}\pi \mathcal{D}\pi' P_G(\pi)\, P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\} \to \{\phi_i',\pi_i'\})\, P_A(\{\phi_i,\pi_i\} \to \{\phi_i',\pi_i'\})$$

che ci consente di provare il BIL. DETT. a motivo del fatto che

$$e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i,\pi_i\}]} P_A(\{\phi_i,\pi_i\} \to \{\phi_i',\pi_i'\}) = e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i',\pi_i'\}]} P_A(\{\phi_i',\pi_i'\} \to \{\phi_i,\pi_i\})$$

NB Mentre posso CORREGGERE per NON-CONSERVAZIONE dell'ENERGIA, devo invece VERIFICARE che valga ancora la REVERSIBILITA'

$$(*) \quad P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\} \to \{\phi_i',\pi_i'\}) = P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i',-\pi_i'\} \to \{\phi_i,-\pi_i\})$$

NB 2 La $(*)$ sulla carta (ovvero in PRECISIONE NUMERICA INFINITA) vale. Dobbiamo però verificare esplicitamente che non fallisca per ERRORI di ROUN-OFF

$\downarrow$

- Questo è uno dei CRITERI che ci deve guidare nella SCELTA dei PARAMETRI TECNICI T_0 e δt
- L'altro criterio che ci deve guidare in questa scelta di T_0 e δt è la OTTIMIZZAZIONE del (dei) TEMPO (TEMPI) di AUTOCORRELAZIONE INTEGRATO (I)

RISCRIVIAMO ora

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

dove - a ha preso il posto di ε, in accordo alla NOTAZIONE STANDARD per il PASSO RETICOLARE (che in questo caso è una "grana" temporale)

- denotiamo con m_0 e ω_0 la scelta di particolari valori per il nostro problema

DIMENSIONALMENTE notiamo come abbiamo

- una MASSA m_0
- una $[\omega_0] = t^{-1}$
- delle $[x_j] = \ell$
- il PASSO RETICOLARE $[a] = t$

LAVORIAMO ora con la CONVENZIONE $\hbar = c = 1$

Uno potrebbe dire che $\hbar$ è già stato messo a 1. Vero, ma quello che vogliamo dire è che S è ADIMENSIONALE.

$c=1$ comporta poi (velocità della luce...) $[t]=[\ell]$

Notiamo anche che S adimensionale vuol anche dire Et adimensionale. Ma $E \sim mc^2 \underset{(c=1)}{\sim} m$ e dunque

mt adimensionale $\longleftrightarrow$ $[m] = [t^{-1}]$

Posso ora riscrivere

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

dove $\hat{m}_0 = m_0 a$

$$\hat{x}_j = \frac{x_j}{a}$$

$$\hat{\omega}_0 = \omega_0 a$$

sono tutti <u>ADIMENSIONALI</u> e <u>non c'è più dipendenza da a</u>

<u>ATTENZIONE!</u> Siccome noi dovremo fare

$a \to 0$ (LIMITE CONTINUO)

<u>Cambiare a a m_0 FISSO vuol dire CAMBIARE $\hat{m}_0$ e $\hat{\omega}_0$!</u>

Ricordiamoci anche che $T = Na$ e allora quando cambio a devo cambiare N in accordo, per tenere T FISSO.
In realtà, devo anche (formalmente) fare $T \to \infty$.
Scopriremo però che fare <u>T "abbastanza grande"</u> è più facile che fare <u>a "abbastanza piccolo"</u> ...