

Lattice Quantum Field Theory

Simulazione Monte Carlo

di teoria di campo scalare in $2+1$ dimensioni

Antonio Evangelista
2022

Università di Roma Tor Vergata - Dipartimento di Fisica

1. Teoria di campo scalare

2. Hybrid Monte Carlo

3. Simulazione

1. Teoria di campo scalare

Campo scalare reale

Partiamo col definire una teoria di campo scalare in D dimensioni euclidee. Consideriamo un campo scalare reale autointeragente secondo l'azione

$$S = \int d^D x \left(\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial_\mu \phi + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4 \right) \quad (1)$$

Abbiamo quindi le dimensioni in energia:

$$[\phi] = \frac{D-2}{2} \quad [\lambda] = 4 - D \quad (2)$$

Dal calcolo funzionale possiamo scrivere il valore di aspettazione

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi A(\phi) e^{-S(\phi)} \quad (3)$$

Discretizzazione

La discretizzazione dello spazio-tempo è fatta con passo reticolare a costante nello spazio e nel tempo.

$$\begin{aligned}\phi(x) &\mapsto \phi(a\mathbf{n}) \\ \partial_\mu &\mapsto \begin{cases} \partial_\mu^+ \equiv \frac{\phi(a\mathbf{n}+a\hat{\mu})-\phi(a\mathbf{n})}{a} \\ \partial_\mu^- \equiv \frac{\phi(a\mathbf{n})-\phi(a\mathbf{n}-a\hat{\mu})}{a} \end{cases} \\ \square = \partial_\mu \partial_\mu &\mapsto \partial_\mu^+ \partial_\mu^- \end{aligned}$$

L'integrazione per parti è valida anche con le derivate discretizzate per volumi finiti con condizioni periodiche al contorno.

$$a^D \sum_{\mathbf{n}} \psi(\mathbf{n}) \partial_\mu^+ \phi(\mathbf{n}) = a^{D-1} \sum_{\mathbf{n}} (\psi(\mathbf{n} - \hat{\mu}) \phi(\mathbf{n}) - \psi(\mathbf{n}) \phi(\mathbf{n})) = -a^D \sum_{\mathbf{n}} \phi(\mathbf{n}) \partial_\mu^- \psi(\mathbf{n})$$

Teoria scalare su reticolo

L'azione discretizzata sarà quindi

$$S = a^D \sum_{\mathbf{n}} \left\{ -\frac{1}{2a^2} \phi(\mathbf{n}) (\phi(\mathbf{n} + \hat{\mu}) + \phi(\mathbf{n} - \hat{\mu})) + \frac{1}{2} \left(m^2 + \frac{2D}{a^2} \right) \phi^2(\mathbf{n}) + \frac{\lambda}{4!} \phi^4(\mathbf{n}) \right\}$$

Possiamo introdurre a questo punto dei campi e costanti adimensionali

$$\varphi = a^{\frac{D-2}{2}} \phi \quad k = m^2 a^2 + 2D \quad g = \lambda a^{4-D} \quad (4)$$

Teoria scalare su reticolo

$$S = \sum_{\mathbf{n}} \left\{ -\frac{1}{2} \varphi(\mathbf{n}) (\varphi(\mathbf{n} + \hat{\mu}) + \varphi(\mathbf{n} - \hat{\mu})) + \frac{1}{2} k \varphi^2(\mathbf{n}) + \frac{g}{4!} \varphi^4(\mathbf{n}) \right\} \quad (5)$$

Per il metodo Hybrid Monte Carlo che spiegherò subito dopo è necessario conoscere la derivata funzionale dell'azione rispetto al campo

$$\nabla_{\varphi} S = - \sum_{\mu} [\varphi(\mathbf{n} + \hat{\mu}) + \varphi(\mathbf{n} - \hat{\mu})] + k \varphi(\mathbf{n}) + \frac{g}{3!} \varphi^3(\mathbf{n}) \quad (6)$$

2. Hybrid Monte Carlo

Catene di Markov

Una catena di Markov è un processo stocastico che genera una sequenza di stati con probabilità che dipendono solo dallo stato del sistema.

- Catena di Markov ergodica \Rightarrow Qualsiasi vettore di probabilità iniziale termalizza ad un equilibrio **unico**.
- Catena di Markov reversibile \Rightarrow Vale il **bilancio dettagliato**:

$$w_i p_{ij} = w_j p_{ji} \quad (7)$$



Una catena di Markov all'equilibrio è un **processo stocastico stazionario** che quindi è ottimale per integrazioni tramite simulazione Monte Carlo (MC)

Dinamica Molecolare

Al fine di ottenere incertezze puramente statistiche è necessario utilizzare un metodo di integrazione esatto, a questo proposito introduciamo un corrispettivo momento coniugato al campo scalare e definiamo

$$H(\phi, \pi) = S(\phi) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \pi_{\mathbf{n}}^2 \quad (8)$$

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \frac{\partial}{\partial \pi} H(\phi, \pi) \quad \frac{d\pi}{d\tau} = -\frac{\partial}{\partial \phi} H(\phi, \pi) \quad (9)$$

Tali equazioni conservano l'energia ed inoltre conservano il volume dello spazio delle fasi, quindi stiamo effettuando un vero e proprio aggiornamento micro-canonico.

Algoritmo Metropolis

L'algoritmo di aggiornamento viene ripetuto per un numero di step N_{step} tale che possa consentire di raggiungere l'equilibrio dopo il quale è possibile iniziare le misure dell'osservabile.

1. Si genera randomicamente un impulso π che sia distribuito secondo una gaussiana
2. Si evolve lo stato $(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')$ tramite 9
3. Il nuovo campo viene accettato con una probabilità $P = \min [1, e^{-\Delta H}]$

N.B Per la conservazione dell'energia, integrando esattamente avrei che la nuova proposta di campo viene sempre accettata. In questo modo

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_k^N A[\phi_k] + \mathcal{O}(1/N) \quad (10)$$

Integratore Simplettico

Algoritmo esatto \Rightarrow integratore simplettico: conservazione dell'energia e del volume dello spazio delle fasi.

$$\underline{u}(d\tau) = e^{d\tau H} \underline{u}(0) = \exp\left\{\left(\frac{d\tau}{2}T\right)\right\} \exp\{(d\tau V)\} \exp\left\{\left(\frac{d\tau}{2}T\right)\right\} \underline{u}(0) + \mathcal{O}(d\tau^2) \quad (11)$$

$$M_2(d\tau) \begin{pmatrix} \pi_k \\ \phi_k \end{pmatrix} = \begin{cases} \pi_{k+1} = \pi_k - d\tau V' \left(\phi_k + \frac{d\tau}{2} T'(\pi_k) \right) + \mathcal{O}(d\tau^2) \\ \phi_{k+1} = \phi_k + \frac{d\tau}{2} \left(T'(\pi_k) + T'(\pi_{k+1}) \right) + \mathcal{O}(d\tau^2) \end{cases} \quad (12)$$

Tale schema di integrazione conserva l'energia $\mathcal{O}(d\tau^2)$

3. Simulazione

Parametri

- Reticolo: lo spazio-tempo viene discretizzato con un punto finito di punti reticolare. Ho effettuato simulazioni con un reticolo **20^3** con passo reticolare **0.1**
- Massa e coupling: la simulazione è stata effettuata con $m^2 = \mathbf{100}$ e $\lambda = \mathbf{1.3}$
- La simulazione è stata effettuata con **960000** iterazioni dell'algoritmo Metropolis e le misure sono state effettuate ogni **800** iterazioni. In questo modo il numero di misure è di **1200**.
- La lunghezza della traiettoria di dinamica molecolare è stata variata per testare la validità dell'integratore symplettico in un range **0.01÷0.15**. Nel codice è possibile variare anche il numero di step in cui la traiettoria viene divisa.

Osservabili

Per testare la validità dell'algoritmo ho utilizzato come osservabile di prova la magnetizzazione:

$$M = \sum_{\mathbf{n}} \varphi(\mathbf{n}) \quad (13)$$

Il valore di aspettazione di tale osservabile teoricamente risulta essere nullo, infatti l'azione è simmetrica sotto parità intrinseca.

Se invece andiamo a considerare il correlatore a due punti e passiamo nello spazio tempo-impulso possiamo utilizzarlo per calcolare la massa vera del campo.

$$\begin{aligned} \langle 0 | \varphi(t) \varphi(0) | 0 \rangle &= \frac{|\langle 0 | \varphi | \mathbf{p} = 0 \rangle|^2}{2m} e^{-mt} + \mathcal{O}(e^{-\Delta t}) \\ m &= - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \{ \log \langle 0 | \varphi(t) \varphi(0) | 0 \rangle + \text{cost.} \} + \mathcal{O}(\Delta) \end{aligned} \quad (14)$$

Analisi statistica

Per fare un'analisi statistica supponiamo di aver già raggiunto l'equilibrio e di aver effettuato un numero di misure N dell'osservabile A^α . Per costruzione ho una autocorrelazione tra punti della catena che dipende dall'osservabile:

$$\bar{\Gamma}_{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (A_i^\alpha - \bar{A}^\alpha) (A_{i+t}^\beta - \bar{A}^\beta) + \mathcal{O}(1/N) \quad (15)$$

$$F = F(A^1, \dots, A^n) \quad \sigma_F^2 = \frac{2\tau_{int}}{N} v_F \quad (16)$$

$$v_F = \sum_{\alpha\beta} f_\alpha f_\beta \Gamma_{\alpha\beta}(0) \quad (17)$$

Analisi statistica 2

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} + \frac{1}{v_F} \sum_{t=1}^W \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^W \rho_F(t) \quad (18)$$

$$(\delta\tau_{int})^2 = \frac{4W+2}{N} \tau_{int}^2 \quad (19)$$

Dove non si somma su infiniti punti della catena poiché per grandi t ho piccoli contributi a τ_{int} . La scelta del W tale che il rumore non copra il segnale.

All'atto pratico è più comodo definire

$$\Gamma_F(t) = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (B_i B_{i+t}) + \mathcal{O}(1/N) \quad \text{con} \quad B_i = \sum_{\alpha} f_{\alpha} (A_i^{\alpha} - \bar{A}^{\alpha}) \quad (20)$$

Codice

```
subroutine metropolis(u,v,delta_H,k,g,tau,n)
  real(dp), intent(inout) :: u(0:,0:,0:)
  real(dp), intent(inout) :: v(0:,0:,0:)
  real(dp), intent(inout) :: delta_H
  real(dp), intent(in) :: k, g, tau
  integer, intent(in) :: n
  real(dp), allocatable :: phi_f(:, :, :)
  real(dp), allocatable :: pi_f(:, :, :)
  real(dp) :: H_i, H_f
  real(dp) :: prob
  real(dp) :: r
  integer :: L

  L=size(u,1)
  allocate(phi_f(0:L-1,0:L-1,0:L-1))
  allocate(pi_f(0:L-1,0:L-1,0:L-1))
  phi_f=u
  pi_f=v

  call leapfrog(phi_f,pi_f,k,g,tau,n)
```

```
    H_i = H(u,v, k, g)
    H_f = H(phi_f,pi_f, k, g)
    delta_H = H_f - H_i

    prob=min(1.0_dp, exp(-delta_H))

    if (prob==1) then
      u=phi_f
    else
      call random_number(r)
      if (r < prob) then
        u=phi_f
      end if
    end if

    deallocate(phi_f)
    deallocate(pi_f)

end subroutine metropolis
```

Codeice

```
subroutine leapfrog(u, v, k, g, tau, n)
  real(dp), intent(inout) :: u(0:,0:,0:)
  real(dp), intent(inout) :: v(0:,0:,0:)
  real(dp), intent(in) :: k, g, tau
  integer, intent(in) :: n
  real(dp), allocatable :: v1(:, :, :) , grad_s1(:, :, :)
  real(dp) :: dt
  integer :: i, L

  dt=tau/real(n,8)
  L=size(v,dim=1)
  allocate(v1(0:L-1, 0:L-1, 0:L-1)) allocate(grad_s1(0:L-1,0:L-1,0:L-1))

  do i=1, n
    v1=v
    call grad_s(u+0.5_dp*molt*dt*v, grad_s1, k, g)
    v=v - molt*dt*grad_s1
    u=u + 0.5_dp*molt*dt*(v1+v)
  end do

  deallocate(v1) deallocate(grad_s1)
end subroutine leapfrog
```

Test preliminari

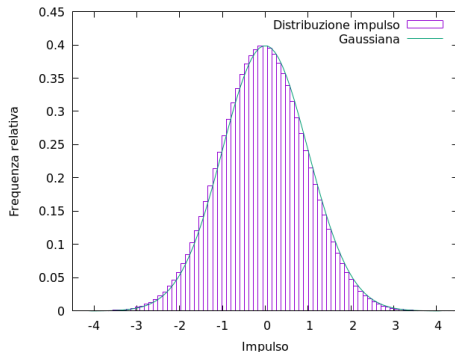


Figura: Distribuzione gaussiana impulso generata tramite algoritmo Box-Muller

```
subroutine init_pi(L,v)
  integer, intent(in) :: L
  real(dp), intent(inout) :: v
  (0:,0:,0:)
  real(dp), allocatable :: x1(:,:,:)
  real(dp), allocatable :: x2(:,:,:)

  allocate(x1(0:L-1,0:L-1,0:L-1))
  allocate(x2(0:L-1,0:L-1,0:L-1))
  call random_number(x1)
  call random_number(x2)

  v = sqrt(-2.0_dp*log(1.0_dp-x1))*cos
    (2.0_dp*pigreco*(1.0_dp-x2))

  deallocate(x1)
  deallocate(x2)
end subroutine init_pi
```

Test preliminari

- Andamento non quadratico e che esplode velocemente all'aumentare del passo;
- Effettuare più step dovrebbe ridurre l'autocorrelazioni tra elementi della catena di Markov, ma l'errore aumenta con il numero di step.



Entrambi tali comportamenti sono sintomatici di problemi nell'integratore, quasi sicuramente nell'implementazione

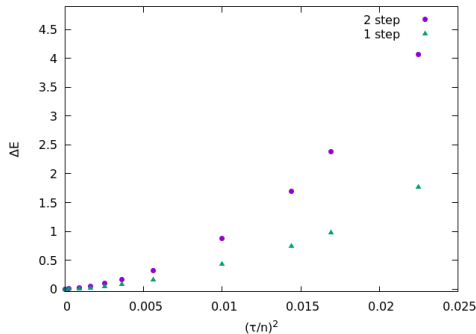


Figura: Andamento della variazione media di energia rispetto al passo di integrazione

Autocorrelazione

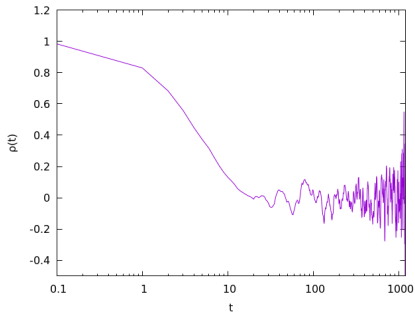


Figura: Autocorrelazione $\rho(t)$ definita come in Eq. 18

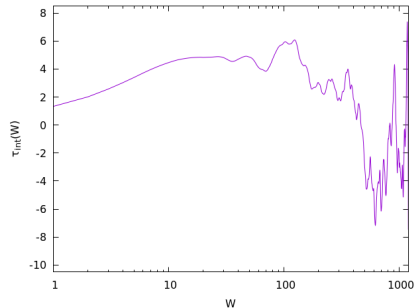
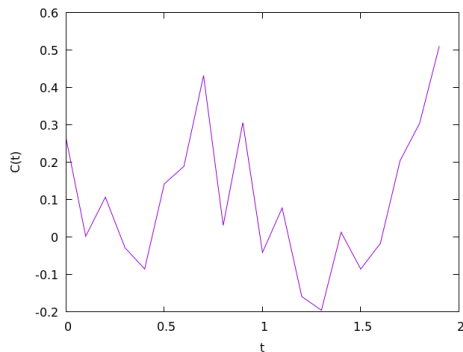


Figura: Autocorrelazione integrata $\tau_{int}(W)$ definita come in Eq. 18

L'andamento dell'autocorrelazione non risulta essere quella aspettata.
L'autocorrelazione integrata non satura, a causa delle oscillazioni intorno a 0, non permettendo di stimare l'incertezza dell'osservabile.

Correlatore a 2 punti

Il valore misurato della magnetizzazione risulta essere distante dal valore nullo.



L'andamento della funzione di correlazione a due punti è evidentemente non esponenziale come ci si poteva aspettare dalle considerazioni fatte precedentemente. Un possibile errore di implementazione del codice è da ricercare nell'integratore.

Figura: Correlatore a due punti nello spazio tempo-impulso a $p = 0$ in scala semilogaritmica

Conclusioni

- La teoria di campo scalare reale è risolvibile analiticamente nel caso di teoria libera.

La teoria è simmetrica sotto $\varphi \rightarrow -\varphi$ quindi il valore di aspettazione per la magnetizzazione M è nullo ed è una buona variabile di test.

Per teorie altamente interagenti ($\lambda = 1.3$) la soluzione reticolare è l'unica che permette il calcolo di osservabili.

Il correlatore a due punti $C(t) = \langle 0 | \phi(t) \phi(0) | 0 \rangle$ permette di estrarre la massa del campo scalare.

- L'algoritmo Hybrid Monte Carlo combina l'algoritmo Metropolis con la Dinamica Molecolare. Ho quindi utilizzato un integratore simplettico del secondo ordine.

Conclusioni

1. Nella simulazione l'integratore non si comporta adeguatamente impedendo la catena di Markov di arrivare effettivamente all'equilibrio e di ottenere risultati che aderiscano alla predizione teorica.
2. L'andamento casuale dell'autocorrelazione, inoltre, impedisce di stimare l'incertezza delle osservabili.
3. Il correlatore a due punti di conseguenza non segue l'andamento di esponenziale decrescente.