

**STUDIO DI UN CAMPO SCALARE NEUTRO LIBERO
IN 1+1 DIMENSIONI CON IL FORMALISMO DEL
PATH-INTEGRAL**

Dario Rossi, Margherita Sagina

Indice

1	Introduzione	2
2	Densità di energia in funzione della temperatura	3
2.1	Metodo senza integrale	3
2.2	Metodo con integrale dell'anomalia di traccia	5
3	Limite al continuo	7
4	Run senza over-relaxation	8

1 Introduzione

L'obiettivo di questo studio è analizzare numericamente alcune quantità termodinamiche di un campo scalare neutro libero $\varphi(t, x)$ in 1+1 dimensioni (una temporale e una spaziale), con il formalismo del path integral.

L'azione per il campo φ in spazio euclideo è

$$S_E = \int dx \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2} ((\partial_\tau \varphi)^2 + |\vec{\nabla} \varphi|^2 + m^2 \varphi^2), \quad (1)$$

usando unità naturali $\hbar = c = 1$.

Implementazione numerica Per affrontare numericamente il problema, è necessaria una discretizzazione e l'utilizzo di variabili adimensionali.

Si considerano le due dimensioni spaziale e temporale e si dividono rispettivamente in N_s e N_t intervalli di uguale passo reticolare a . La lunghezza totale della dimensione spaziale è quindi $L = N_s a$ e quella temporale $\beta = N_t a$. Pertanto un punto $\vec{x} = (x, t)$ sul reticolo è individuato da $(n_x a, n_t a) = a \vec{n}$ e le variabili campo sono $\varphi(\vec{x}) = \varphi(a \vec{n})$.

Avendo un volume spaziale finito, per limitare gli effetti sistematici di bordo, si impongono condizioni al contorno periodiche nello spazio e si eseguono simulazioni scegliendo $L \gg \lambda_{compton} = \frac{1}{m}$.

L'unica quantità da rendere adimensionale è la massa (in 2 dimensioni φ lo è già), che verrà sostituita da $\hat{m} \equiv ma$. Per ottenere i risultati della teoria nel caso continuo, è necessario eseguire il limite $\hat{m} \rightarrow 0$, mantenendo fissi estensione temporale euclidea $N_t \hat{m} = N_t a m = \left(\frac{T}{m}\right)^{-1}$ e lunghezza del reticolo $N_s \hat{m} = L m$.

Per procedere con la discretizzazione, è necessario sapere come scrivere derivate e integrali: si utilizza la "derivata in avanti" $\hat{\partial}_\mu^F \varphi = \frac{1}{a} (\varphi(n + \hat{\mu}) - \varphi(n))$ con $\hat{\mu}$ spostamento unitario dal sito n nella dimensione spaziale o temporale; mentre $\int dx d\tau \rightarrow \sum_n a^2$.

Si può quindi ricavare l'azione euclidea su reticolo:

$$S_{E,L} = \frac{1}{2} \sum_n \left[(\hat{m}^2 + 4) \varphi^2(n) - 2 \sum_\mu \varphi(n) \varphi(n + \hat{\mu}) \right] \quad (2)$$

Considerando solo la parte di azione relativa a un dato sito n e completando il quadrato, si ottiene

$$s(\varphi(n)) = \frac{1}{2} (\hat{m}^2 + 4) \left(\hat{\varphi}(n) - \frac{f(n)}{\hat{m}^2 + 4} \right)^2 + cost \quad (3)$$

ovvero una distribuzione gaussiana con varianza $\frac{1}{(\hat{m}^2 + 4)}$ e media $\frac{f(n)}{\hat{m}^2 + 4}$, con $f(n)$ la somma dei campi nei siti primi vicini di n .

Tramite il formalismo del path integral si calcola la funzione di partizione $\mathcal{Z} \equiv Tr(e^{-\beta H}) = \int \mathcal{D}\varphi e^{-S_E}$ che discretizzata, usando la 2, diventa

$$\mathcal{Z}_L \propto \int \prod_n d\hat{\varphi}(n) \exp \left(\frac{1}{2} \sum_n [(\hat{m}^2 + 4) \varphi^2(n) - 2 \sum_\mu \varphi(n) \varphi(n + \hat{\mu})] \right) \quad (4)$$

utile per il calcolo delle quantità termodinamiche analizzate nel seguito.

Algoritmo Per questa simulazione si usa un algoritmo di tipo *heat-bath* locale, per cui si scorre il reticolo un sito n per volta, campionando il campo $\varphi(n)$ secondo la distribuzione $e^{-s(\varphi(n))}d\varphi(n)$, attraverso un algoritmo *Box - Müller*.

Per rendere più veloce ed efficiente il processo, si alterna l'algoritmo *heat-bath* con 4 successive chiamate all'algoritmo *over-relaxation*. Quest'ultimo preleva il campo $\varphi(n)$ e lo sostituisce con il campo (in un sito diverso) con stessa probabilità. È comunque necessario utilizzare l'algoritmo *heat-bath* per soddisfare il requisito di ergodicità.

Le incertezze sulle quantità analizzate sono calcolate tramite deviazione standard dei resampling ottenuti con un binned bootstrap.

Osservabili Si misurano le seguenti osservabili, ottenute dalla 2:

- $\mathcal{O}_1 = \frac{1}{N_t N_s} \sum_n \hat{m}^2 \varphi^2(n) \rightarrow$ contributo dell'energia potenziale;
- $\mathcal{O}_2 = \frac{1}{N_t N_s} \sum_n (-2\varphi(n + \hat{x})\varphi(n) + 2\varphi^2(n)) \rightarrow$ contributo spaziale dell'energia cinetica;
- $\mathcal{O}_3 = \frac{1}{N_t N_s} \sum_n (-2\varphi(n + \hat{\tau})\varphi(n) + 2\varphi^2(n)) \rightarrow$ contributo temporale dell'energia cinetica;

Le quantità termodinamiche che saranno analizzate si potranno scrivere come combinazione di queste osservabili, come mostrato in Sezione 2.

2 Densità di energia in funzione della temperatura

A partire dalla funzione di partizione si ricava l'energia interna $U = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}$, tramite alcuni calcoli si arriva all'espressione per la densità di energia interna ε

$$\frac{\varepsilon}{T^2} = \frac{1}{2} N_t^2 \langle \mathcal{O}_1 + \mathcal{O}_2 - \mathcal{O}_3 \rangle. \quad (5)$$

che per $T \rightarrow \infty$, nella trattazione bidimensionale analitica ha valore noto $\frac{\pi}{6}$.

2.1 Metodo senza integrale

Implementazione numerica La densità di energia scritta come nella 5 è una quantità divergente, pertanto deve essere rinormalizzata.

Per fare ciò si analizza la quantità $\mathcal{O} = \frac{1}{2} \langle \mathcal{O}_1 + \mathcal{O}_2 - \mathcal{O}_3 \rangle$ in funzione di N_t : variando N_t tra 2 e 160, mantenendo $\hat{m} = 0.05$ e $N_s = 160$ fissi, si ottiene il seguente plot in scala bilogarithmica.

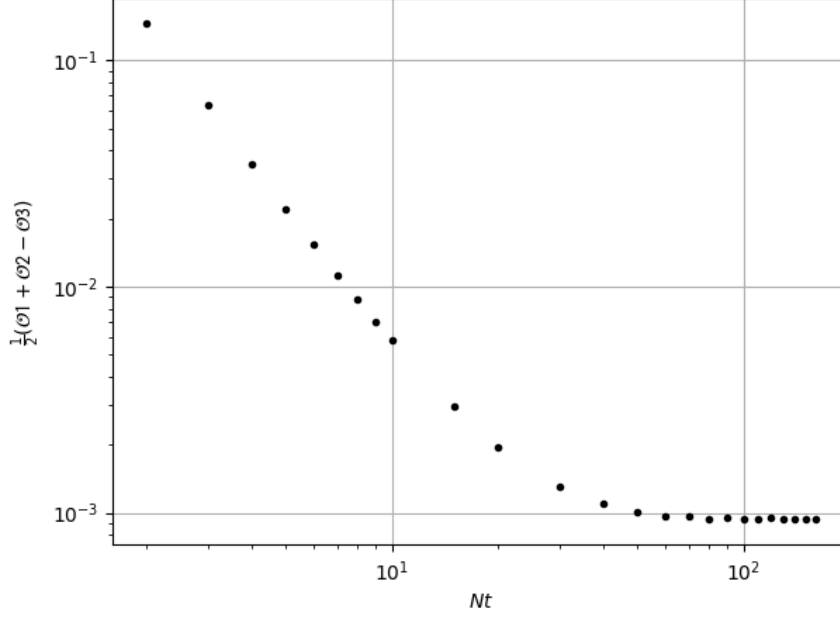


Figura 1: Combinazione divergente delle osservabili restituite dalla simulazione, in funzione di N_t .

Si osserva che i dati hanno un plateau, come atteso, a causa del gap di energia tra il livello fondamentale e lo stato di massa. Si sottrae quindi la quantità \mathcal{O} relativa a $N_t = 160$ (quello massimo del caso analizzato) ai valori di \mathcal{O} per gli altri N_t , in modo da eliminare il termine divergente. Dopodiché si moltiplica per N_t^2 , ottenendo ε/T^2 , di cui si osserva l'andamento in funzione di $\frac{1}{N_t \hat{m}} = \frac{T}{m}$ in Figura 2.

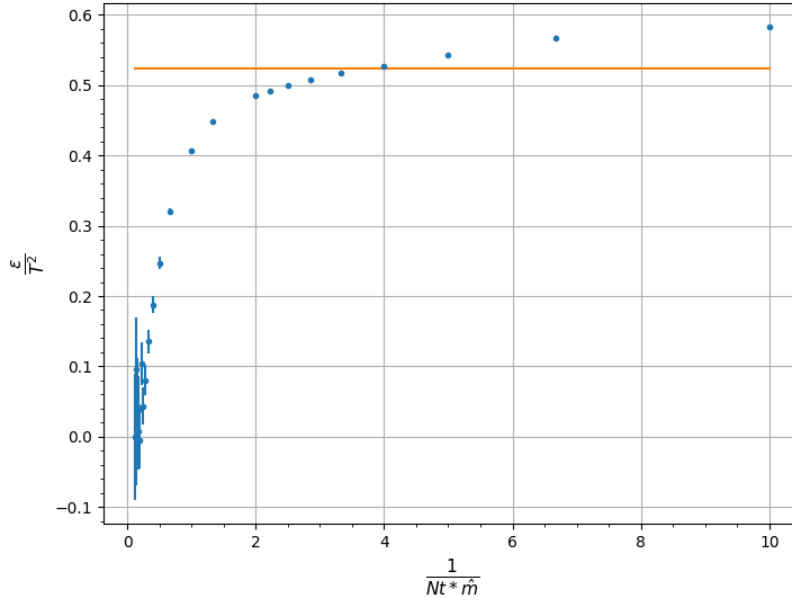


Figura 2: Densità di energia per unità di T^2 in funzione $\frac{1}{N_t \hat{m}} = \frac{T}{m}$. In arancione la retta $\varepsilon/T^2 = \pi/6$.

Si osserva come per $T \gg m$ i dati si discostano dal valore atteso $\frac{\pi}{6}$, fatto dovuto agli effetti di discretizzazione. Per $T \rightarrow 0$ l'energia è compatibile con 0, come aspettato.

2.2 Metodo con integrale dell'anomalia di traccia

In questa sezione si mostra una tecnica alternativa a quella del Paragrafo 2.1. Si riscrive, quindi, la quantità $\frac{\varepsilon}{T^2}$ in funzione delle osservabili prodotte dalla simulazione usando una combinazione diversa da quella in Equazione 5.

Introduzione teorica Con alcune manipolazioni algebriche si ottiene la relazione $-\frac{\partial}{\partial \hat{m}} \ln \mathcal{Z} = \frac{\varepsilon - P}{T^2}$. È possibile esprimere tale quantità, detta "anomalia di traccia", in funzione dell'osservabile \mathcal{O}_1 , tramite l'Equazione 4.

Dopodiché si utilizza la relazione

$$\frac{P}{T^2} = \int_{T_0}^T dT' \frac{1}{T'} \left(\frac{\varepsilon - P}{T'^2} \right) \quad (6)$$

per esprimere $\frac{\varepsilon}{T^2}$ in funzione dell'anomalia di traccia, come

$$\frac{\varepsilon}{T^2} = \frac{\varepsilon - P}{T^2} + \frac{P}{T^2} \quad (7)$$

Implementazione numerica Si utilizzano i risultati della simulazione eseguita nel Paragrafo 2.1, con $\hat{m} = 0.05$ e $N_s = 160$ fissi e variando N_t tra 2 e 160. Dalla 4 si ricava

$$-\hat{m} \frac{\partial}{\partial \hat{m}} \ln \mathcal{Z} = N_t N_s \hat{m}^2 \langle \varphi^2 \rangle = N_s N_t \mathcal{O}_1 = \frac{L}{T} (\varepsilon - P) \quad (8)$$

Dividendo per il volume adimensionale $LT = \frac{N_s}{N_t}$ si ottiene l'anomalia di traccia in funzione delle osservabili restituite dalla simulazione

$$\frac{\varepsilon - P}{T^2} = N_t^2 \mathcal{O}_1. \quad (9)$$

Tale quantità è divergente e si può rinormalizzare analogamente a quanto fatto nel Paragrafo 2.1. Infatti, come si evince dalla Figura 3, l'andamento di \mathcal{O}_1 in funzione di N_t ha un plateau per $N_t \gtrsim 20$, proprio come l'osservabile \mathcal{O} .

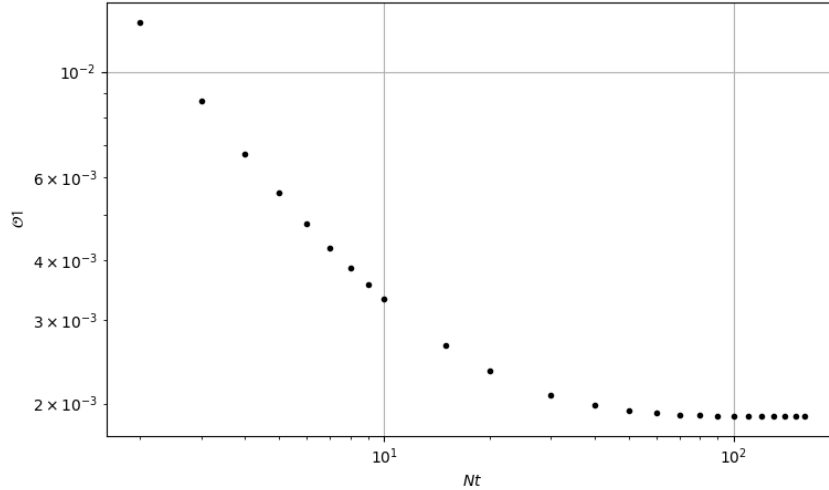


Figura 3: Osservabile \mathcal{O}_1 non rinormalizzata, in funzione di N_t

A questo punto si ricava $\frac{P}{T^2}$ tramite l'Equazione 6, che riscritta in funzione delle osservabili della simulazione diventa

$$\frac{P}{T^2} = \int_{\frac{1}{N_{tmax}}}^{\frac{1}{N_{tmin}}} d\left(\frac{1}{N_t}\right) N_t^3 \mathcal{O}_1 = \int_{x_{min}}^{x_{max}} dx \mathcal{O}_1 N_t^3 \hat{m} \quad (10)$$

dove $x = \frac{1}{N_t \hat{m}} = \frac{T}{m}$. Si riporta di seguito un grafico del termine integrando $\mathcal{O}_1 N_t^3 \hat{m}$ e dell'anomalia di traccia, in funzione di $\frac{T}{m}$.

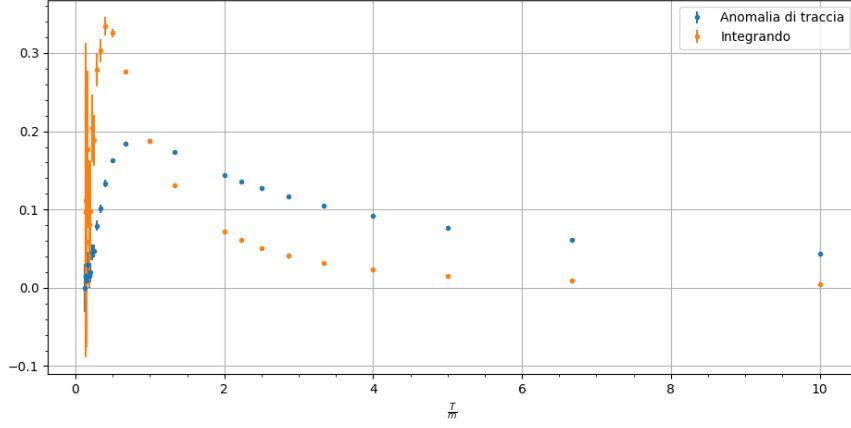


Figura 4: Anomalia di traccia ($\frac{\varepsilon-P}{T^2} = N_t^2 \mathcal{O}_1$) e termine integrando dell'Equazione 10 ($\mathcal{O}_1 N_t^3 \hat{m}$) in funzione di $\frac{T}{m}$.

L'integrale si calcola numericamente con il metodo dei trapezi. In Figura 5 si presenta il grafico del risultato ottenuto dall'integrazione ($\frac{P}{T^2}$), in funzione della variabile di integrazione $\frac{T}{m}$. Le incertezze sono propagate con la somma in quadratura.

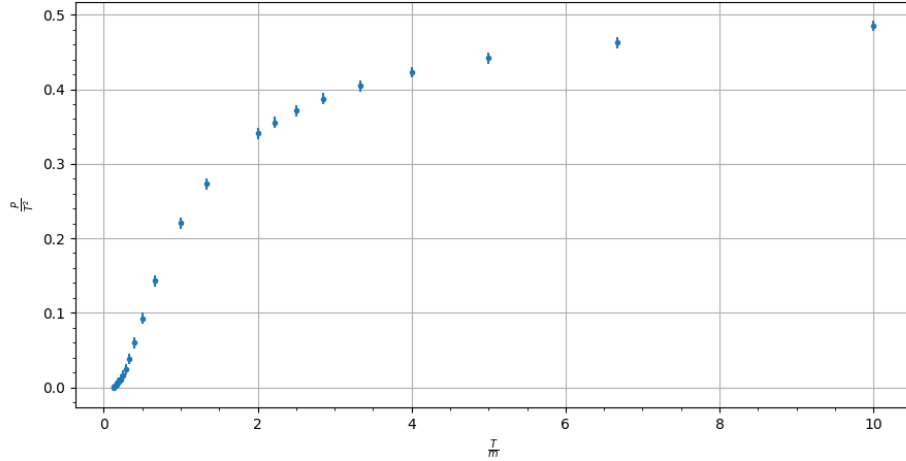


Figura 5: Pressione per unità di T^2 in funzione di $\frac{T}{m}$, calcolata numericamente dall'integrale 10 col metodo dei trapezi.

Confronto tra i due metodi Di seguito si riporta il confronto tra i due procedimenti per ottenere $\frac{\varepsilon}{T^2}$. Si nota come l'andamento trovato col metodo dell'anomalia di traccia sia in accordo con quello atteso (compatibile con $\frac{\pi}{6}$ per $T \gg m$), al contrario del metodo senza integrale, come evidente dallo zoom sui dati con $T/m > 4$.

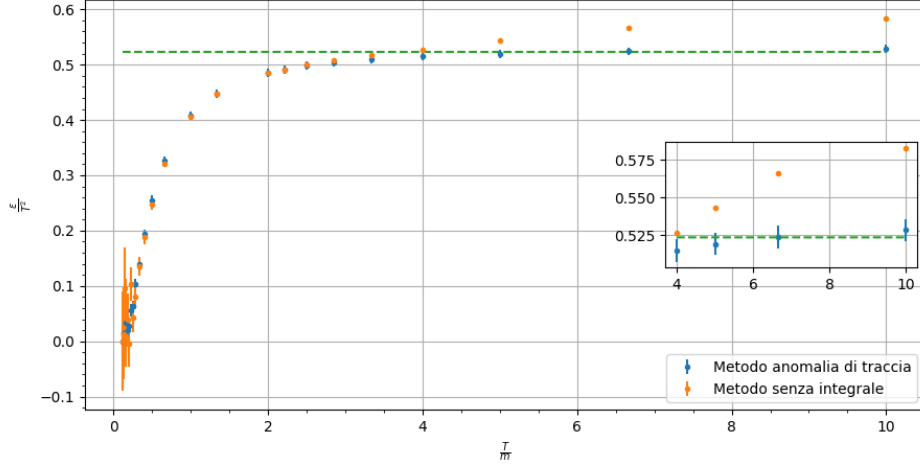


Figura 6: Confronto tra le densità di energia per unità di T^2 calcolate nei due metodi esposti in funzione di $\frac{T}{m}$. Tratteggiata la retta costante a $\frac{\pi}{6}$.

3 Limite al continuo

Implementazione numerica Si esegue la simulazione con $N_t \hat{m} = 0.1$ e $N_x \hat{m} = 10$ fissi, scegliendo il valore di N_t tra 2 e 12. I valori ottenuti di $\frac{\varepsilon}{T^2}$, calcolata come nella 5, sono stati rappresentati in funzione di \hat{m} ed è stato fatto un fit con funzione modello $ax^2 + b$.

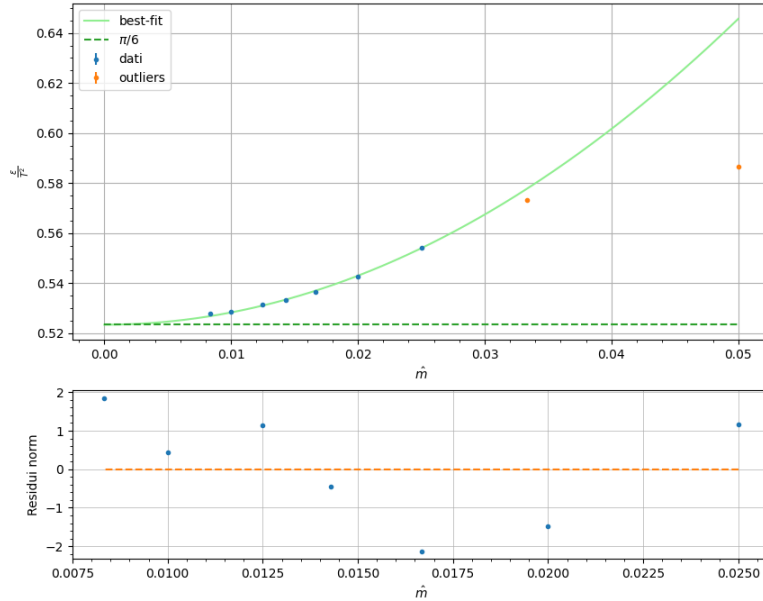


Figura 7: Densità di energia in unità di T^2 in funzione della massa adimensionale. In arancione i punti esclusi dalla procedura di best fit.

Risultati della procedura di best fit:

$$a = 48.9 \pm 0.9 \quad b = 0.5234 \pm 0.0004 \quad \chi^2/ndof = 13/5$$

Si osserva che il termine noto è compatibile con il valore atteso di $\frac{\pi}{6}$ entro due σ .

L'andamento quadratico è atteso per valori di $\hat{m} \rightarrow 0$; per valori di \hat{m} maggiori ci si aspettano deviazioni di ordine successivo al secondo in $a = \frac{\hat{m}}{m}$. Per capire quali dati considerare come outliers è stato scelto il caso con χ^2 minimo.

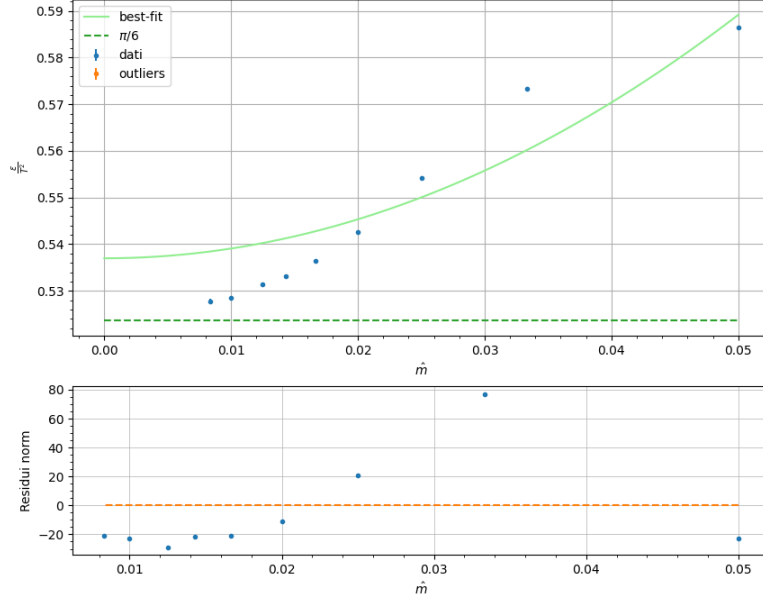


Figura 8: Densità di energia in unità di T^2 in funzione della massa adimensionale. Sono stati considerati in questo fit quadratico anche gli outliers di Figura 7.

Risultati della procedura di best fit:

$$a = 21 \pm 3 \quad b = 0.537 \pm 0.005 \quad \chi^2/ndof = 9694/7$$

4 Run senza over-relaxation

Un'ulteriore analisi che si può fare è osservare la differenza tra un algoritmo solo di tipo *heat bath* e uno che alterna *heat bath* a *over-relaxation*.

Si studia l'osservabile \mathcal{O}_1 campionata con 2 simulazioni diverse a $N_t \cdot \hat{m} = 0.1$ e $N_x \cdot \hat{m} = 10$ costanti: una con update di un solo ciclo di *heat bath*; l'altra con un ciclo di *heat bath* e a seguire 4 di *over-relaxation*. Si osserva che l'incertezza sulla quantità analizzata si riduce di circa un ordine di grandezza nel caso di run *con O-R*, come evidente in Tabella 1, mantenendo un tempo di esecuzione inferiore a una volta e mezzo rispetto al caso senza *O-R*.

\hat{m}	Con O-R		Senza O-R	
	\mathcal{O}_1	$\sigma_{\mathcal{O}_1}$	\mathcal{O}_1	$\sigma_{\mathcal{O}_1}$
0.05	0.012733	5×10^{-6}	0.01272	5×10^{-5}
0.033333	0.005714	3×10^{-6}	0.00572	2×10^{-5}
0.025	0.0032401	1×10^{-6}	0.00322	1×10^{-5}
0.02	0.002087	1×10^{-6}	0.00211	1×10^{-5}
0.016667	0.0014584	7×10^{-7}	0.001464	8×10^{-6}
0.014286	0.0010773	6×10^{-7}	0.001070	6×10^{-6}
0.0125	0.0008278	4×10^{-7}	0.000818	5×10^{-6}
0.01	0.0005327	3×10^{-7}	0.000531	4×10^{-6}
0.008333	0.0003720	2×10^{-7}	0.000374	4×10^{-6}

Tabella 1: Osservabile \mathcal{O}_1 al variare di \hat{m} : confronto tra run con e senza over-relaxation.