

Modulo 3

Studio dell'oscillatore armonico

Sara Ardito, Edoardo Gabrielli

Novembre 2021

INTRODUZIONE

L'obiettivo di questo progetto è studiare il sistema costituito da una particella di massa m in un potenziale armonico di costante elastica k .

Il problema viene espresso tramite il formalismo del path integral e si implementa l'algoritmo Metropolis per realizzarne delle simulazioni numeriche.

1 CENNI TEORICI

Nella formulazione del path integral il valore medio termodinamico di una qualsiasi grandezza fisica si esprime come:

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \quad (1a)$$

$$= \frac{\int Dx(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) O[x(\tau)]}{\int Dx(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (1b)$$

Dove $O[x(\tau)]$ è un opportuno funzionale del cammino $x(\tau)$ mentre S_E è l'azione euclidea.

L'equazione 1b rappresenta il valore medio di una funzione del cammino valutata sulla distribuzione di probabilità:

$$P[x(\tau)] \mathcal{D}x(\tau) = \frac{\exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) \mathcal{D}x(\tau)}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (2)$$

Numericamente si estraggono dei cammini $x(\tau)$ distribuiti secondo l'equazione 2 in modo stocastico e su questi si valuta il valor medio $\langle O \rangle$.

Nel caso dell'oscillatore armonico possiamo esprimere l'azione come:

$$S_E[x(\tau)] = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + \frac{m\omega^2 x(\tau)^2}{2} \right] \quad (3)$$

con $\omega = \sqrt{k/m}$.

Il problema in analisi viene discretizzato e riscritto in termini di variabili adimensionali.

Si prende l'intervallo temporale $[0, \beta\hbar]$ e si suddivide in un insieme discreto di N punti con spaziatura $a = \beta\hbar/N$. Su tale intervallo si prendono le condizioni al bordo periodiche: il punto N -esimo coincide con il punto 0.

Si rende adimensionale la variabile x normalizzandola con la scala di lunghezza tipica del problema $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$, quindi:

$$y(n) = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) x(na) \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (4)$$

L'integrale sui cammini si trasforma in una sommatoria su n mentre la derivata discreta utilizzata è quella in avanti.

In conclusione l'azione discretizzata ed adimensionale si scrive come:

$$-\frac{1}{\hbar} S_E[x(\tau)] \rightarrow -S_D : \\ S_D = \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2\eta} [y(n+1) - y(n)]^2 + \frac{\eta}{2} y(n)^2 \right]$$

con $\eta = a\omega$ che corrisponde alla spaziatura del reticolo in unità di $1/\omega$.

1.1 Energia interna dell'oscillatore armonico

L'energia interna dell'oscillatore armonico è:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z) = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) \quad (5)$$

Nella formulazione del path integral su reticolo l'equazione 5 si riduce a:

$$U = \frac{1}{2\eta} - \frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle \quad (6)$$

In cui le medie sono effettuate sul reticolo:

$$\langle \Delta y^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_j (y_{j+1} - y_j)^2 \quad \langle y^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_j y_j^2$$

1.2 Gap energetici ΔE_1 , ΔE_2

I gap energetici dell'oscillatore possono essere ricavati a partire dalle funzioni a due punti di vari operatori.

$$\langle O(\tau)O(0) \rangle_c = \langle O(\tau)O(0) \rangle - \langle O \rangle^2 \quad (7)$$

Nel caso dei primi due livelli gli operatori sono \hat{q} ed \hat{q}^2 . In particolare si ha che, per $\tau \rightarrow \infty$:

$$\langle x(\tau)x(0) \rangle_c \simeq \exp\left(\frac{-\Delta E_1 \tau}{\hbar}\right) |\langle 1 | \hat{q} | 0 \rangle|^2 \quad (8a)$$

$$\langle x^2(\tau)x^2(0) \rangle_c \simeq \exp\left(\frac{-\Delta E_2 \tau}{\hbar}\right) |\langle 2 | \hat{q}^2 | 0 \rangle|^2 \quad (8b)$$

Dove $\Delta E_1 = E_1 - E_0$ e $\Delta E_2 = E_2 - E_0$.

1.3 Funzione d'onda

A partire dalla distribuzione di probabilità della coordinata x dei cammini si può risalire alla funzione d'onda dello stato fondamentale.

Infatti scrivendo la probabilità di trovare la particella in un intervallo generico $[x_A, x_B]$ ed utilizzando le autofunzioni dell'energia si ha:

$$\frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} f(\hat{q}, x_A, x_B))}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} |\psi_n|^2 \quad (9)$$

Che per $T \rightarrow 0$ diventa:

$$\frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} f(\hat{q}, x_A, x_B))}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \rightarrow \int_{x_A}^{x_B} dx |\psi_0|^2 \quad (10)$$

Dove ψ_0 è la funzione d'onda dello stato fondamentale mentre $f(\hat{q}, x_A, x_B)$ è definita in modo che:

$$f(\hat{q}, x_A, x_B) |x\rangle = \begin{cases} |x\rangle & \text{se } x \in [x_A, x_B] \\ 0 & \text{se } x \notin [x_A, x_B] \end{cases} \quad (11)$$

Quindi con l'equazione 10 si può concludere che la probabilità di avere $x(\tau = 0) \in [x_A, x_B]$ corrisponde alla probabilità che la particella (del sistema fisico di partenza) si trovi in tale intervallo.

2 IMPLEMENTAZIONE DELL'ALGORITMO

Per campionare le osservabili necessarie all'analisi si implementa un algoritmo Metropolis locale. Per

effettuare il test di accettazione/rigetto del cammino di prova si deve valutare la differenza tra la S_D di quest'ultimo e quella del cammino originale, la scelta di un algoritmo locale rende numericamente più semplice tale valutazione.

Il passo k dell'algoritmo è il seguente:

- Si sceglie un sito j_0 del cammino.
- Si estrae un numero random y^p (utilizzando un generatore PCG-64):

$$y^p \in [y_{j_0}^{(k)} - \delta, y_{j_0}^{(k)} + \delta]$$

dove δ è un parametro dell'algoritmo.

- Si accetta il cammino di prova ($y_{j_0}^{(k+1)} = y^p$) con probabilità r :

$$r = \frac{e^{-S_{E,L}^{fin}}}{e^{-S_{E,L}^{in}}} = e^{-\Delta S_{E,L}} \quad (12)$$

Dove $\Delta S_{E,L}$ coinvolge solo i siti $j_0, j_0 \pm 1$:

$$\begin{aligned} \Delta S_{E,L} = & (y^p)^2 \left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{y^p}{\eta} (y_{j_0+1} + y_{j_0-1}) + \\ & - (y_{j_0}^2)^2 \left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) + \frac{y_{j_0}}{\eta} (y_{j_0+1} + y_{j_0-1}) \end{aligned}$$

Nella pratica si estrae un numero random $x \in [0, 1]$ e si procede nel seguente modo:

$$\begin{cases} \text{se } x < r & \Rightarrow y_{j_0}^{(k+1)} = y^p \\ \text{se } x > r & \Rightarrow y_{j_0}^{(k+1)} = y_{j_0}^{(k)} \end{cases} \quad (13)$$

- Si iterano i tre punti precedenti sequenzialmente su tutti i siti del cammino.

Questi quattro passaggi definiscono una *spazzata metropolis* sul reticolo.

Si definisce inoltre i_d il numero di spazzate metropolis che intercorrono tra una misura e la successiva. Il parametro δ è stato scelto sulla base dell'ordine di grandezza tipico di Δy :

$$\Delta y \sim \sqrt{\eta}$$

quindi si è scelto $\delta = 2\sqrt{\eta}$.

3 TERMALIZZAZIONE

Si definisce il tempo di termalizzazione come il numero di spazzate Metropolis necessarie per il raggiungimento dell'equilibrio delle osservabili. Numericamente definiamo il parametro i_t come il numero

di spazzate Metropolis che vengono scartate all'inizio di ogni simulazione per escludere il tempo di termalizzazione.

Si analizza tale parametro effettuando delle simulazioni di prova in cui si campionano $\langle y^2 \rangle$, $\langle \Delta y^2 \rangle$.

In particolare si valuta la durata del transiente di termalizzazione al variare di N con $\eta = 0.001$ fisso. Il reticolo viene inizializzato "a freddo" ($y_i = 0 \forall y \in [0, N - 1]$) e si campionano le osservabili una volta ogni spazzata Metropolis del reticolo ($i_d = 1$). Si estraggono i primi $M = 10^6$ valori delle osservabili e se ne osserva l'andamento. In Figura 1 si riporta un ingrandimento sulle prime misure.

Si nota che l'osservabile $\langle \Delta y^2 \rangle$ termalizza in un

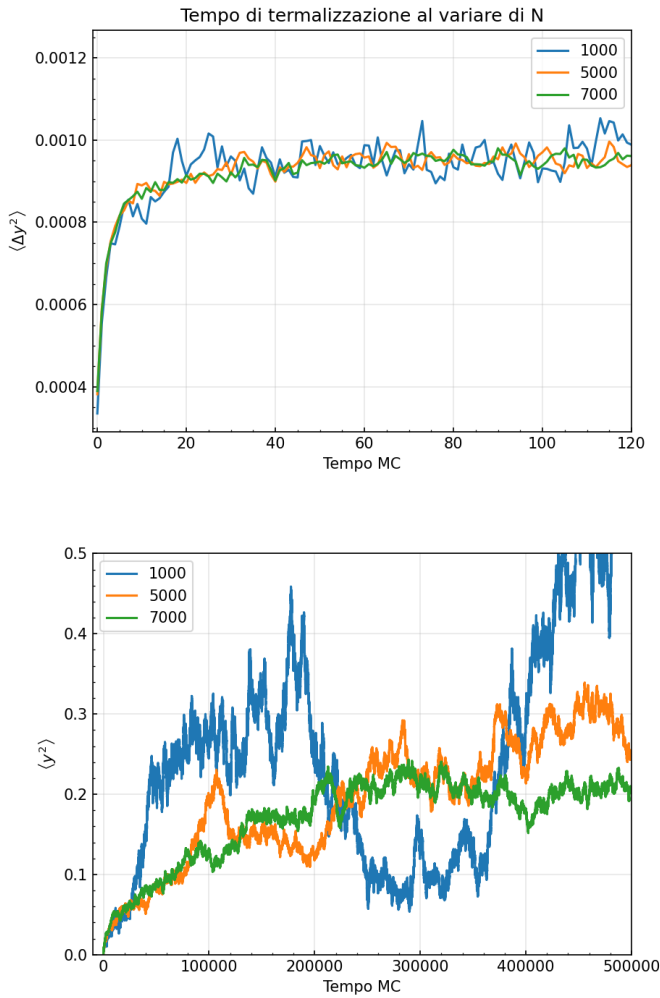


Figura 1: Andamento delle osservabili $\langle \Delta y^2 \rangle$ (alto) e $\langle y^2 \rangle$ (basso) al variare della dimensione del reticolo N .

tempo MC inferiore rispetto a $\langle y^2 \rangle$. Inoltre, nel caso dell'osservabile $\langle y^2 \rangle$ il tempo di termalizzazione aumenta all'aumentare di N , per $N = 7000$ è dell'ordine di 10^5 .

Si sceglie quindi un tempo di termalizzazione i_t in modo tale da garantire il raggiungimento del-

l'equilibrio per tutti i valori di N analizzati: $i_t = 10^6$.

4 EFFETTO DI T SUI CAMMINI

Si analizza l'effetto della variazione dei parametri N , η sulla forma dei cammini.

In particolare si fissa η e si aumenta N ovvero si diminuisce la temperatura del sistema ($N\eta = \beta\hbar\omega$). Si sceglie $\eta = 10^{-3}$ ed $N = [100, 200, 1000]$. Per ogni valore di N si realizzano delle simulazioni con tempo di termalizzazione $i_t = 10^6$ e si estrae l'intero cammino. Si riportano i risultati in Figura 2, sulle ordinate si riporta la coordinata y del cammino, sulle ascisse si rappresenta il tempo euclideo. Si

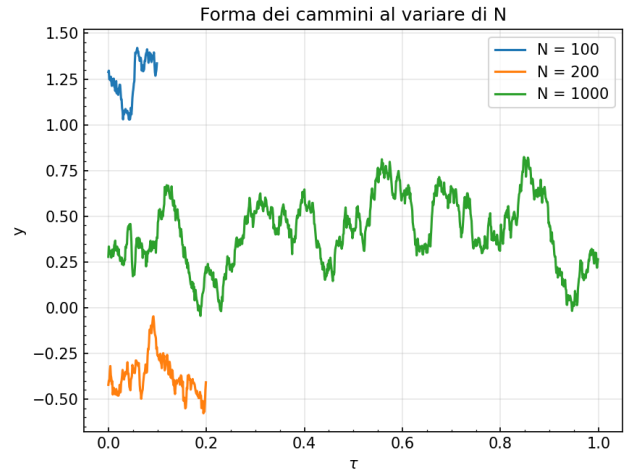


Figura 2: Forma dei cammini al variare della temperatura.

nota che all'aumentare di T il cammino torna su se stesso in un tempo inferiore, inoltre l'ampiezza media delle fluttuazioni diminuisce. Questo è in accordo con quanto atteso, ovvero che:

$$\langle \Delta y^2 \rangle \sim \eta - \frac{1}{N}.$$

5 STIMA DELL'ENERGIA INTERNA MEDIA

Le variabili da campionare per le successive analisi sono $\langle y^2 \rangle$, $\langle \Delta y^2 \rangle$.

5.1 Termine Potenziale

Per il Teorema del Viriale ci si aspetta che:

$$\langle y^2 \rangle_c = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{N\eta} - 1} \quad (14)$$

È possibile verificare l'equazione 14 campionando $\langle y^2 \rangle$ e realizzando un fit in cui si riporta $\langle y^2 \rangle$ in funzione di η .

Infatti ci aspettiamo che i valori campionati si discostino da $\langle y^2 \rangle_c$ secondo una legge di potenza in η :

$$\langle y^2 \rangle = \langle y^2 \rangle_c + O(\eta^2)$$

Quindi si utilizza come funzione di fit

$$f(x) = a + bx^2 \quad (15)$$

dove $f(x) = \langle y^2 \rangle$, $x = \eta$ mentre a è il valore al continuo da estrapolare.

Si fissa la temperatura del sistema $N\eta = 3$, quindi $\langle y^2 \rangle_c = 0.55239$ e si effettuano diverse simulazioni al variare di N ed η mantenendo costante il loro prodotto.

Nelle simulazioni si esplorano alcuni valori di N compresi tra 8 a 70 e si estraggono (ogni volta) $M = 10^6$ valori dell'osservabile, $i_t = 10^6$.

I reticoli sono stati inoltre inizializzati a freddo ($y = 0 \forall y \in [0, \dots, N-1]$).

Si mediano sul tempo Montecarlo i valori $\langle y^2 \rangle$ ottenuti dalle simulazioni, l'errore associato a tale quantità è stato ottenuto mediante il metodo di Blocking.

Le misure sono state effettuate dapprima con $i_d = 100$ costante, tuttavia si riscontra che l'errore sulla misura di $\langle y^2 \rangle$ aumenta al diminuire di η poiché, per $\eta \rightarrow 0$, il sistema presenta un punto critico con lunghezze di correlazione $\xi \sim \eta^{-1}$.

Si potrebbe allora utilizzare $i_d \sim 1/\eta$, tuttavia per ridurre il tempo di computazione si è scelto $i_d = 100/\sqrt{\eta}$.

In figura 3 si riportano i risultati delle simulazioni, la curva di fit secondo l'equazione modello 15 (curva verde) e il valore atteso di $\langle y^2 \rangle_c$ (croce rossa). Si riportano i risultati del fit:

$$\begin{aligned} \langle y^2 \rangle_c^{fit} &= 0.5525 \pm 0.0002 \\ \chi_{red}^2 &= 0.75 \end{aligned}$$

Il risultato ottenuto è compatibile con quello atteso.

5.2 Confronto tra termine cinetico e potenziale

Si utilizzano i dati di $\langle y^2 \rangle$ e $\langle \Delta y^2 \rangle$ ottenuti dalle simulazioni nella sezione 5.1 per ricostruire il termine cinetico

$$K = \frac{1}{2\eta} - \frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle$$

e lo si confronta con il termine potenziale $\langle y^2 \rangle / 2$. Si riportano le due quantità al variare di η ed N in

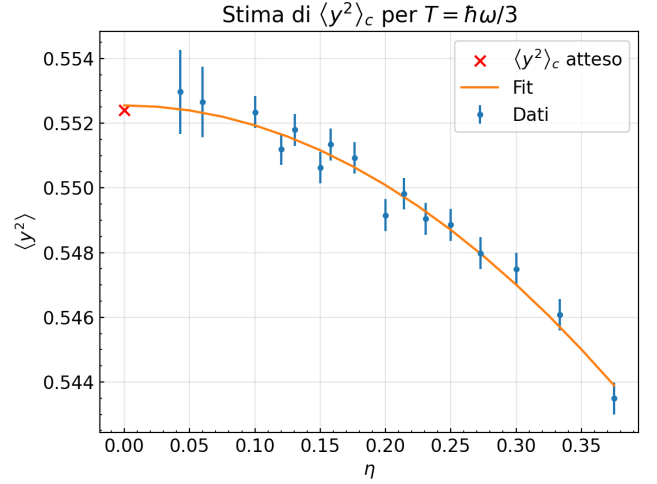


Figura 3: Andamento di $\langle y^2 \rangle$ al variare di η , fit quadratico in η ed estrapolazione di $\langle y^2 \rangle_c$.

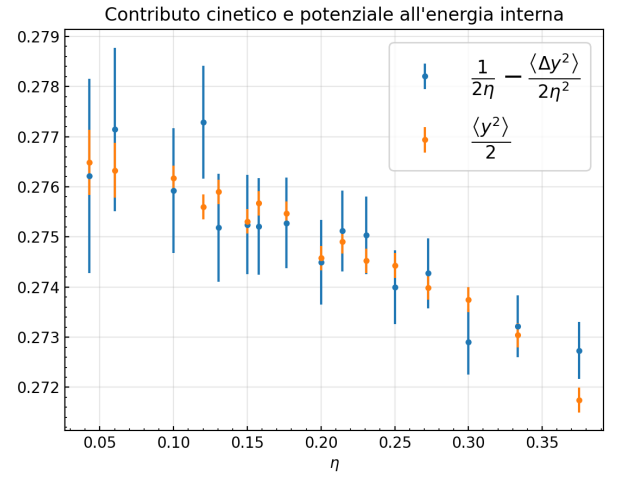


Figura 4: Confronto tra termine cinetico e termine potenziale. Gli errori sulle due quantità sono stati ricavati tramite il metodo di Blocking.

figura 4: Si osserva come i due termini siano compatibili per quasi tutti i valori di η , N analizzati. Questo conferma il fatto che il teorema del Viriale continua ad essere valido anche nel caso di un sistema discretizzato.

5.3 Energia interna al variare di T

Si osserva l'andamento dell'energia interna al variare della temperatura. In particolare si confronta l'andamento di tale energia ottenuta dal sistema simulato (eq. 6) con quella teorica (eq. 5).

A tal scopo si fissa $\eta = 0.01$, si varia N scegliendo alcuni valori nell'intervallo $[20, 800]$ e si campionano $\langle y^2 \rangle$ e $\langle \Delta y^2 \rangle$. Si sono campionati $M = 10^6$ valori delle osservabili, $i_t = 10^6$ e $i_d = 500$.

L'errore sull'energia interna, valutata tramite le osservabili $\langle y^2 \rangle$ e $\langle \Delta y^2 \rangle$, è stato ottenuto usando il

metodo Binned Bootstrap.

Si riportano in Figura 5 i risultati ottenuti.

Per confrontare i risultati delle simulazioni con

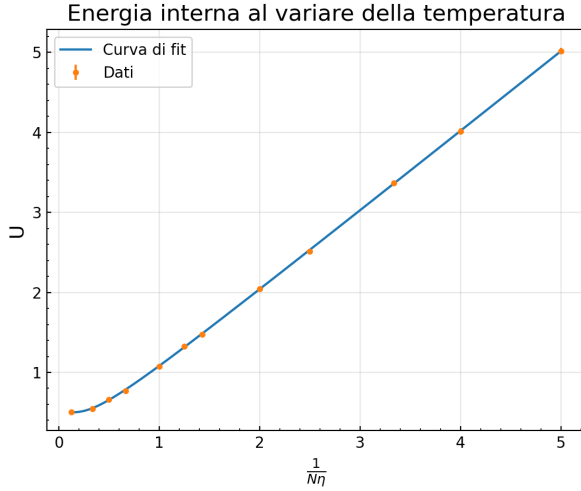


Figura 5: Andamento dell'energia interna al variare di T ($\eta = 0.01$) e verifica della compatibilità con il modello teorico.

l'andamento atteso si esegue un fit con la funzione modello:

$$f(x) = a + \frac{1}{e^x - 1}$$

In cui a rappresenta l'energia di punto zero ed $x = N\eta$.

Si riportano i risultati di fit: $a = 0.498 \pm 0.002$, $\chi_{red}^2 = 1.07$. Si nota che il valore di a ottenuto dal fit è compatibile con quello atteso ($a = 1/2$).

6 FUNZIONE D'ONDA DELLO STATO FONDAMENTALE

Si procede con la stima della funzione d'onda dello stato fondamentale secondo quanto espresso nella sezione 1.3.

Si effettua una simulazione con $\eta = 0.1$ e $N = 1000$ che corrisponde ad una temperatura $\hat{T} = 10^{-2}$ (in unità di $\hbar\omega$). Il reticolo viene inizializzato a caldo e termalizzato con $i_t = 10^6$.

Per $M = 500$ volte si estrae l'intero reticolo separando i campionamenti con $i_d = 10^5$.

Si realizza un istogramma con tutte le posizioni dei reticoli campionati e si riporta il risultato in Figura 6. Si osserva che c'è accordo tra $|\psi_0|^2$ e l'istogramma ottenuto tramite le simulazioni.

Si realizza adesso l'istogramma delle posizioni rilassando l'ipotesi $T \rightarrow 0$ poiché si vuole analizzare il comportamento del sistema al variare di T .

A tal scopo si fissa $\eta = 0.1$ e si scelgono tre valori

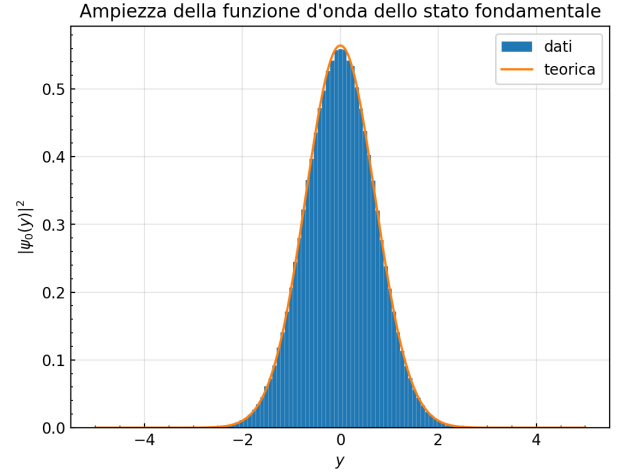


Figura 6: Istogramma della distribuzione della coordinata y di tutte le simulazioni e sovrapposto il modulo quadro della funzione d'onda dello stato fondamentale.

di N : 5, 10, 1000. Per ciascun valore di N si ripete il campionamento del reticolo con $i_t = 10^6$ e

$$\begin{aligned} M_5 &= 2 \times 10^5, & i_d &= 100 \\ M_{10} &= 10^5, & i_d &= 100 \\ M_{1000} &= 10^3 & i_d &= 10000. \end{aligned}$$

I valori di M sono stati scelti in modo tale da avere, su ogni istogramma 10^6 valori di y .

Gli istogrammi ottenuti vengono confrontati con la combinazione delle ampiezze delle funzioni d'onda di equazione 9 opportunamente normalizzata:

$$P(y) = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} |\psi_n|^2$$

La sommatoria viene troncata osservando che, fissata una temperatura \hat{T} , i termini successivi ad un certo \bar{n} diventano trascurabili rispetto ai precedenti a causa del termine di smorzamento $e^{-\beta E_n}$.

Nel caso di $N = 1000, \eta = 0.1$ si ha che $\hat{T} = 0.01$ e, come si osserva in Figura 6 lo stato con $n = 0$ è sufficiente a riprodurre l'istogramma.

Nel caso di $N = 5, \eta = 0.1$ (quindi $\hat{T} = 2$) si ha:

$$\begin{aligned} e^{-\beta E_{n=0}} &\simeq 0.8 \\ e^{-\beta E_{n=4}} &\simeq 0.1 \\ e^{-\beta E_{n=9}} &\simeq 0.01 \end{aligned}$$

Quindi i primi 10 livelli sono sufficienti a rappresentare l'istogramma, per cui la sommatoria è stata troncata ad $n = 10$.

Si riportano i risultati in Figura 7.

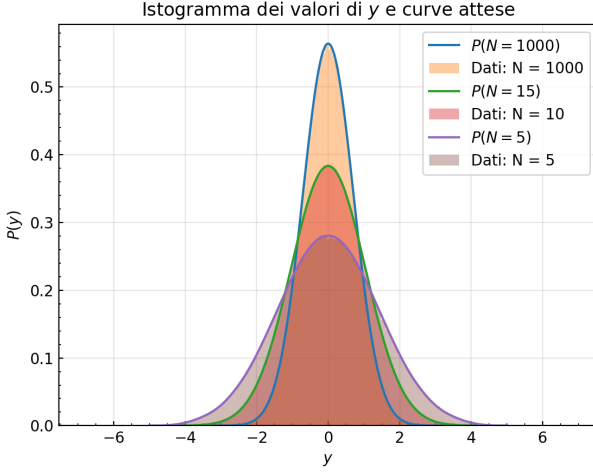


Figura 7: Istogrammi delle y al variare di N e andamento della curva attesa per $\eta = 0.1$.

Si conclude che c'è accordo tra le $P(y)$ e gli istogrammi ottenuti dalle simulazioni.

7 STIMA DI ΔE_1 , ΔE_2

Si utilizzano le equazioni 8a, 8b per stimare i gap energetici tra il fondamentale ed i primi due livelli eccitati.

Si realizzano diverse simulazioni con $N \in [20, 100]$ ed $\eta \in [0.2, 0.9]$ in modo tale da mantenere costante il prodotto $N\eta = \beta\omega = 20$.

In ciascuna di esse, fissati N ed η , si campionano $n_k = \text{int}(5/\eta)$ coppie di correlatori $\langle y_{j+k} y_j \rangle$ e $\langle y_{j+k}^2 y_j^2 \rangle$ con $k \in [0, n_k]$. In questo modo si esplora $0 \leq \omega\tau \equiv k\eta \leq 5$, tale intervallo permette di osservare tutti i decadimenti esponenziali in analisi.

I parametri scelti per tutte le simulazioni sono i seguenti: numero di misure $M = 10^6$, $i_d = 2000$ e $i_t = 10^6$. I reticoli sono stati inizializzati a caldo e gli errori sulle osservabili campionate si sono ottenuti tramite le tecniche di Blocking.

7.1 Gap $E_1 - E_0$

Per ciascuna simulazione si effettua un fit con la funzione modello:

$$y = f(x, a, b) = a + e^{-bx} \quad (16)$$

dove $x = k$, $y = \langle y_{j+k} y_j \rangle$ e $b = \eta\Delta E_1$.

Si riporta il risultato di tali analisi in Figura 8.

Si estraggono da tali fit i valori di ΔE_1 al variare di η e si riportano alcuni di questi in Tabella 1.

η	ΔE_1	χ_{rid}
0.100	0.9991 ± 0.0001	0.052
0.571	0.9862 ± 0.0004	0.298
0.667	0.9828 ± 0.0003	0.182
0.714	0.9807 ± 0.0007	0.632
0.769	0.9780 ± 0.0004	0.214
0.833	0.9735 ± 0.0003	0.144

Tabella 1: Risultati dei fit della funzione $C(k)$ per il primo gap energetico.

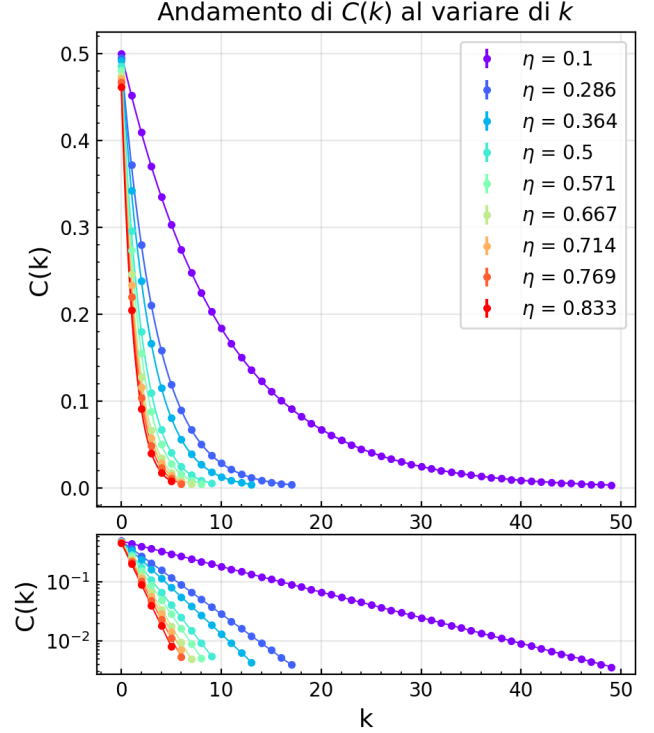


Figura 8: Andamento della funzione a due punti connessa di y al variare di k per diversi valori di η . I punti rappresentano i dati raccolti, le curve rappresentano i risultati dei fit. Il grafico in basso mostra gli stessi dati e risultati di fit ma presenta la scala logaritmica sull'asse delle y , in questo modo si mette in evidenza l'andamento esponenziale di tali curve.

Si utilizzano i valori di ΔE_1 ricavati dai fit al variare di η^2 per eseguire un fit lineare ed estrapolare il valore del gap al continuo.

Si utilizza quindi la funzione di fit:

$$f(x) = mx + q$$

in cui $q = \Delta E_{1,\text{cont}}$, $x = \eta^2$.

Si riporta in Figura 9 la curva di fit con i dati, i risultati di tale fit sono:

$$\Delta E_{1,\text{cont}} = 0.9998 \pm 0.0002$$

$$\chi_{\text{red}} = 11$$

Il risultato ottenuto è compatibile con quello teorico $\Delta E_1 = 1$.

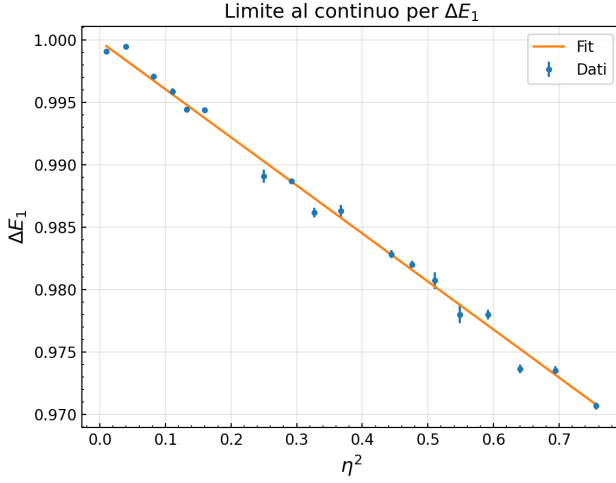


Figura 9: Curva di fit per l'estrapolazione di ΔE_1 al continuo e dati ottenuti dai precedenti fit esponenziali.

7.2 Gap $E_2 - E_0$

Si procede in modo analogo a quanto fatto nella sezione precedente eseguendo dei fit con la equazione 16 in cui adesso $y = \langle y_{j+k}^2 y_j^2 \rangle_c$, $x = k$ e $b = \eta \Delta E_2$. Si riportano alcuni dei risultati ottenuti in Tabella 2

η	ΔE_1	χ_{rid}
0.200	1.996 ± 0.001	0.8
0.364	1.987 ± 0.002	1.6
0.400	1.986 ± 0.001	0.6
0.571	1.972 ± 0.003	2.1
0.606	1.972 ± 0.002	0.9
0.769	1.949 ± 0.003	1.6
0.800	1.948 ± 0.002	0.8
0.870	1.939 ± 0.003	1.4

Tabella 2: Risultati dei fit della funzione $C(k)$ per il secondo gap energetico.

Sempre eseguendo un fit lineare (in cui $q = \Delta E_{2,\text{cont}}$) con i risultati in Tabella 2 si stima il limite al continuo del secondo gap energetico:

$$\Delta E_{2,\text{cont}} = 2.0004 \pm 0.0004$$

$$\chi_{\text{red}} = 3$$

Anche il secondo gap energetico risulta compatibile con il valore atteso $\Delta E_2 = 2$.