



Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Corso di Laurea in Fisica

Dissertazione di Laurea Triennale

Integrali di cammino: uno studio computazionale

24/9/2009

Relatore:
Prof. Vincenzo Marinari

Candidato:
Matteo Mori
(mat. 1178192)

Anno Accademico 2008/2009

Indice

1	Introduzione	1
2	Gli integrali di cammino nella MQ non relativistica	3
2.1	Il propagatore	3
2.2	L'integrale di cammino nello spazio delle fasi	3
2.3	L'integrale di cammino nello spazio delle configurazioni	6
2.4	Il principio di minima azione	7
2.5	L'equazione di Schrödinger	8
2.6	Integrali di cammino euclidei e meccanica statistica	9
3	Integrazioni Monte Carlo	14
3.1	Il problema generale	14
3.2	Processi stocastici e catene di Markov	14
3.3	Le catene di Markov	15
3.4	Ergodicità e convergenza alla distribuzione asintotica	16
3.5	Bilancio dettagliato e algoritmo di Metropolis	18
4	Introduzione allo studio numerico	20
4.1	Richiami sull'oscillatore armonico	20
4.2	Osservabili significative nella simulazione	20
4.3	Studio delle incertezze: il <i>data bunching</i>	23
4.4	Probabilità di accettazione	24
5	Studio numerico	26
5.1	Termalizzazione	26
5.2	Effetti di taglia finita ($N < \infty$)	28
5.3	Effetti di discretizzazione ($\epsilon \gtrsim 0$), autostato fondamentale	29
5.4	Stato fondamentale ed energie	30
A	Estensioni dell'integrale Gaussiano	II

1 Introduzione

Nel 1933 Paul A. Dirac osservò come l’Azione giocasse un ruolo centrale nella meccanica classica, mentre sembrava non avere nessun ruolo nella meccanica quantistica. Dirac formulò l’ipotesi che il propagatore in meccanica quantistica “corrispondesse” alla quantità $\exp(i\mathcal{S}/\hbar)$, dove \mathcal{S} è l’azione classica valutata sul cammino classico seguito dalla particella [1, 2]. Nel 1942 Richard Feynman nella sua tesi di dottorato [3], prendendo spunto dall’intuizione di Dirac, giunse a derivare una terza formulazione della meccanica quantistica, equivalente a quelle di Schrödinger ed Heisenberg, e pubblicò la sua teoria nel 1948 [4].

Il rapporto tra la formulazione della meccanica quantistica di Feynman e quella basata sull’equazione di Schrödinger è sostanzialmente analogo a quello tra i principi di Newton e il principio di minima azione. La seconda legge di Newton fornisce una descrizione del sistema in termini puntuali: conoscendo esattamente in un certo istante lo stato del sistema (posizione e velocità dei costituenti), una volta note le forze che agiscono su di esso, si ricava la traiettoria seguita dal corpo risolvendo un’equazione differenziale: la dinamica è univocamente fissata, ad un dato istante, dallo stato del sistema l’istante precedente. Il principio di minima azione seleziona invece le traiettorie seguite dal sistema tra tutte quelle possibili tramite un principio fisico globale, che interessa cioè la storia del sistema nella sua interezza.

Allo stesso modo dell’equazione di Newton, quella di Schrödinger fornisce un’evoluzione deterministica per il vettore di stato o per la funzione d’onda¹ attraverso un’equazione differenziale: una volta noto il vettore di stato ad un tempo iniziale e fissato l’operatore Hamiltoniano, la dinamica del sistema è completamente fissata. Gli integrali di Feynman ricostruiscono invece l’ampiezza di probabilità di un dato processo considerando tutte le possibili storie che collegano gli stati iniziali e finali, associando a ciascuna di esse un fattore di fase proporzionale all’azione stessa: questo significa che ogni traiettoria, trattata singolarmente, ha la stessa importanza di ogni altra e non può venire scartata come accade in meccanica classica per quelle traiettorie che non minimizzano l’azione. D’altra parte, al crescere dell’azione, il sistema quantistico deve necessariamente tendere al comportamento classico che ci si aspetta per sistemi macroscopici. Gli integrali di Feynman permettono in modo molto naturale di passare dalla teoria quantistica a quella classica proprio grazie ai pesi, numeri complessi di norma unitaria, che vengono associati ai cammini: al crescere dell’azione i cammini più distanti dalle traiettorie classiche tendono infatti a cancellarsi mentre si rinforzano a vicenda quelli che la rendono stazionaria, che contribuiranno quindi fortemente all’ampiezza totale.

Si presti attenzione al diverso significato dei termini “cammino” e “traiettoria” nella visione classica, in quella quantistica e nel contesto degli integrali di cammino. In meccanica classica quello di traiettoria è un concetto ben definito, legato alla possibilità (almeno teorica) di conoscere con infinita precisione le coordinate (e i momenti associati, nel caso di un cammino nello spazio delle fasi) del sistema in ogni istante e di predire posizione e velocità di ogni sua componente tramite le equazioni del moto. In meccanica quantistica, al contrario, il concetto di “traiettoria” deve essere abbandonato, per varie ragioni: la natura intrinsecamente aleatoria delle grandezze osservabili impedisce la predizione dei loro valori nel tempo, ma solo la probabilità associata ad una loro misura; l’atto stesso della misura perturba irreversibilmente il sistema, tramite il meccanismo del collasso della funzione d’onda; le relazioni di commutazione tra variabili coniugate impediscono di effettuare una misura contemporanea di posizione e impulso. Di conseguenza, anche nella formulazione di Feynman i cammini non possono essere considerati osservabili, piuttosto utili enti matematici. Tutto va come se ad ogni cammino fosse assegnata un’ampiezza di probabilità, ma non si può sapere, ad esempio, quale cammino una particella abbia seguito nel suo percorso tra due punti, per il semplice fatto che non è possibile misurare la posizione in ogni istante senza influire sullo stato della particella, e tantomeno conoscerne posizione e impulso.

Nei casi più semplici, come della dinamica di una singola particella, la formulazione con gli integrali di cammino non apporta alcun risultato che non sia possibile ottenere, il più delle volte anche più facilmente, con la formulazione standard della meccanica quantistica. Gli integrali di cammino si

¹ Fatta eccezione, ovviamente, per il problema di una misura operata su un sistema quantistico.

rendono molto più utili nella teoria quantistica dei campi per la diretta estendibilità al formalismo covariante, per la possibilità di quantizzare in modo semplice le teorie di campo, come pure per la possibilità di usare metodi di approssimazione diversi da quelli derivanti dall'approccio operatoriale, utili ad esempio per studiare le versioni su reticolo di alcune teorie di campo (una su tutte, la cromodinamica quantistica su reticolo, o *LQCD*). Gli integrali di cammino si sono poi rivelati utili anche in applicazioni molto diverse dalla meccanica quantistica quali, ad esempio, l'economia e lo studio dei polimeri.

Per introdurre la formulazione della meccanica quantistica non relativistica tramite la tecnica degli integrali di Feynman si partirà quindi dall'equazione di Schrödinger e dal propagatore. Vengono innanzitutto trattati gli integrali di cammino nello spazio delle fasi e in quello delle configurazioni, mostrando come si possano ricavare immediatamente il principio di minima azione e l'equazione di Schrödinger, per poi trattare gli integrali di cammino euclidei e le connessioni con la meccanica statistica. Nella seconda parte della dissertazione si introducono le catene di Markov e l'algoritmo di Metropolis, in modo da effettuare uno studio numerico sull'oscillatore armonico², sistema per il quale sono note le soluzioni esatte confrontabili con i risultati numerici. La versione Euclidea della somma sui cammini permette infatti di estrarre agevolmente la forma dell'autostato fondamentale e le energie dei primi stati stazionari, che saranno confrontati con i risultati teorici.

²Uno studio degli oscillatori armonico e anarmonico tramite la versione Euclidea degli integrali di cammino si trova nell'articolo di M. Creutz e B. Freedman [5].

2 Gli integrali di cammino nella MQ non relativistica

2.1 Il propagatore

Richiamiamo ora alcuni concetti fondamentali di meccanica quantistica, che serviranno da punto di partenza per lo sviluppo degli integrali di cammino. Tutta la trattazione verterà su un sistema unidimensionale (punto materiale su una retta), ma è immediatamente estendibile a più gradi di libertà (moti tridimensionali, sistemi a più particelle ecc.). L'Hamiltoniana del sistema sarà sempre considerata costante nel tempo e l'operatore corrispondente hermitiano e, pertanto, dotato di un set completo di autovettori ortonormali.

Lo stato del sistema è descritto in ogni istante t da un vettore di stato $|\psi_t\rangle$ nello spazio di Hilbert (sul campo \mathbb{C} dei numeri complessi) delle possibili configurazioni; proiettando il vettore nella base delle posizioni otteniamo la corrispondente funzione d'onda $\Psi(x, t) = \langle x|\psi_t\rangle$, il cui modulo quadro $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ fornisce la densità di probabilità che il punto si trovi nella posizione x . L'equazione che governa il sistema è l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_t\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi_t\rangle , \quad (1)$$

dove \hat{H} è l'operatore Hamiltoniano che determina l'energia del sistema. Ammettendo che l'operatore Hamiltoniano sia Hermitiano e possieda perciò una base completa di autovettori ortonormali, possiamo espandere lo stato $|\psi_t\rangle$ tramite una combinazione lineare, con coefficienti dipendenti dal tempo, degli autostati di \hat{H} . Sfruttando l'ortonomalità degli autovettori $|E_k\rangle$ si risolve l'equazione di Schrödinger separatamente per ogni coefficiente dello sviluppo e si può quindi esprimere il vettore di stato al tempo t come:

$$\begin{aligned} |\psi_t\rangle &= \sum_k c_k(t) |E_k\rangle = \sum_k c_k(t_0) \exp -\frac{iE_k(t-t_0)}{\hbar} |E_k\rangle = \\ &= \left[\exp -\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} \right] |\psi_0\rangle = \hat{U}(t; t_0) |\psi_0\rangle , \end{aligned}$$

dove abbiamo definito l'operatore di evoluzione temporale $\hat{U}(t; t_0)$, dipendente dall'intervallo di tempo nel quale si fa evolvere lo stato. A questo punto supponiamo che la particella al tempo t_i si trovi in una certa posizione, ben determinata, q_i e che il suo stato sia quindi descritto dal ket $|q_i\rangle$. L'ampiezza di probabilità A che la particella, inizialmente in q_i , si trovi al tempo t_f nella posizione q_f è data da:

$$A = K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \hat{U}(t_f; t_i) | q_i \rangle \quad (2)$$

dove la funzione K rappresenta il cosiddetto **propagatore**. Esso rappresenta la funzione d'onda risultante dall'evoluzione di un autostato della posizione o, in altri termini, la funzione di Green per l'equazione di Schrödinger.

2.2 L'integrale di cammino nello spazio delle fasi

Per poter calcolare il propagatore come integrale sui cammini cominciamo col suddividere l'evoluzione del sistema in due parti, da t_i ad un certo t^* e da t^* a t_f , con $t_i < t^* < t_f$. Gli operatori di evoluzione temporale e i propagatori corrispondenti saranno dati da:

$$\hat{U}(t; t_0) = \exp \left[-\frac{i\hat{H}(t_f - t_i)}{\hbar} \right] = \exp \left[-\frac{i\hat{H}(t_f - t^*)}{\hbar} \right] \exp \left[-\frac{i\hat{H}(t^* - t_i)}{\hbar} \right] = \hat{U}(t_f; t^*) \hat{U}(t^*; t_i)$$

$$\begin{aligned}
A &\equiv K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \hat{U}(t_f; t_i) | q_i \rangle = \langle q_f | \hat{U}(t_f; t^*) \hat{U}(t^*; t_i) | q_0 \rangle = \\
&= \int dq^* \langle q_f | \hat{U}(t_f; t^*) | q^* \rangle \langle q^* | \hat{U}(t^*; t_i) | q_i \rangle = \int dq^* K(q_f, t_f; q^*, t^*) K(q^*, t^*; q_i, t_i) .
\end{aligned}$$

Quindi l'ampiezza di probabilità per andare da q_i a q_f si può scrivere moltiplicando l'ampiezza per andare da q_i a q^* con l'ampiezza per andare da q^* a q_f e poi sommando su tutte le possibili posizioni intermedie q^* . A questo punto è chiara la strategia d'attacco: possiamo suddividere l'intervallo temporale di partenza $T = t_f - t_i$ in N sottointervalli di larghezza δ (*time slicing*), calcolare i propagatori per andare da $q_j = q(t_j)$ a $q_{j+1} = q(t_{j+1})$ e poi integrare su ogni posizione intermedia (e quindi non su $q_i = q_0$ e $q_f = q_N$). Assumiamo senza perdere di generalità $t_i = 0$ ed eslicitiamo il propagatore:

$$A = \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} K(q_N, N\delta; q_{N-1}, (N-1)\delta) \cdot \dots \cdot K(q_2, 2\delta; q_1, \delta) \cdot K(q_1, \delta; q_0, 0) .$$

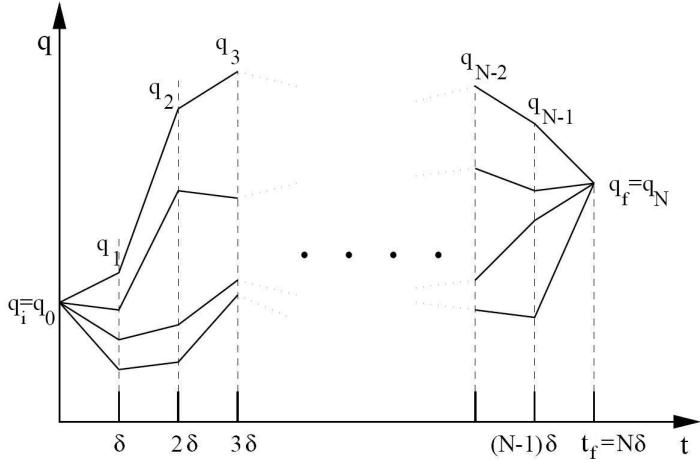


Fig. 1: Suddivisione dell'asse temporale in intervalli di lunghezza δ e somma sui cammini.

Accantoniamo per un secondo tutti gli integrali sugli $N - 1$ propagatori tranne il j -esimo sul quale ci concentriamo. Supponiamo che l'Hamiltoniana sia scomponibile in una parte dipendente dall'impulso (energia cinetica) e una dalla posizione (energia potenziale):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) = \hat{T} + \hat{V} .$$

La formula di *Baker-Campbell-Hausdorff* permette di scrivere l'esponenziale della somma di due operatori limitati tramite uno sviluppo in serie nei loro commutatori:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\hat{X}} ,$$

dove

$$\hat{X} = \frac{1}{2}[\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{12} ([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]) + \frac{1}{24}[\hat{A}, [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}]] + \dots .$$

È immediato vedere come da essa discenda la *formula di Trotter-Lie*, data dal seguente limite:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[e^{(\hat{A} + \hat{B})/N} \right]^N = e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} .$$

Questa formula discende semplicemente dal fatto che se gli operatori \hat{A} e \hat{B} sono di ordine $1/N$ allora i commutatori vanno almeno come $1/N^2$ e sono perciò trascurabili nel limite. Il fatto che gli operatori debbano essere limitati porta a delle limitazioni sulla forma del potenziale: per esempio non è possibile scrivere immediatamente l'integrale di cammino dell'atomo di idrogeno perché i commutatori tra energia cinetica e potenziale diventano sempre più singolari tanto più si procede con la partizione dell'intervallo temporale. La soluzione per l'atomo di idrogeno è stata trovata da Ismail H. Duru e Hagen Kleinert solo nel 1979 tramite una serie di cambiamenti di variabile (*trasformazioni di Duru-Kleinert*), riscrivendo un'Hamiltoniana limitata inferiormente in uno spazio ausiliario[7].

In virtù della formula di Trotter si può quindi scrivere, per δ sufficientemente piccoli:

$$\exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} (T(\hat{p}) + V(\hat{q})) \right] \approx \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} \hat{T} \right] \cdot \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} \hat{V} \right] .$$

Il propagatore diventa, inserendo una somma di completezza nella variabile p_j :

$$\begin{aligned} K(q_{j+1}, (j+1)\delta; q_j, j\delta) &= \langle q_{j+1} | \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} (\hat{T} + \hat{V}) \right] | q_j \rangle \approx \\ &\approx \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \langle q_{j+1} | \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} \hat{T} \right] | p_j \rangle \langle p_j | \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} \hat{V} \right] | q_j \rangle = \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \langle q_{j+1} | p_j \rangle \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} T(p_j) \right] \langle p_j | q_j \rangle \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} V(q_j) \right] = \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{ip_j(q_{j+1} - q_j)}{\hbar} \right] \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} (T(p_j) + V(q_j)) \right] \end{aligned}$$

L'espressione ottenuta è asimmetrica rispetto allo scambio di q_j e q_{j+1} . Questo perché abbiamo scelto di fattorizzare l'Hamiltoniana tenendo a sinistra l'energia cinetica e a destra l'energia potenziale: invertendole avremmo ottenuto un'espressione analoga, ma con $V(q_{j+1})$ al posto di $V(q_j)$, cosa che lascia una certa libertà di scelta nella scelta dell'Hamiltoniana: calcoleremo quindi il potenziale nel valor medio $\bar{q}_j = (q_{j+1} + q_j)/2$ ³. Dato che $q_{j+1} - q_j \approx \dot{q}_j \delta$:

$$K(q_{j+1}, (j+1)\delta; q_j, j\delta) = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} (p_j \dot{q}_j - H(\bar{q}_j, p_j)) \right] .$$

Andando a sostituire:

$$A = \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \int \prod_{k=0}^{N-1} \left(\frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right) \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} (p_j \dot{q}_j - H(\bar{q}_j, p_j)) \right] \quad (3)$$

³ Il motivo di questa scelta risiede nel fatto che tale prescrizione per il potenziale rende invariante per trasformazioni di gauge l'equazione di Schrödinger negli spazi Euclidei; queste ambiguità di quantizzazione discendono dalla struttura frattale dei cammini. I cammini rilevanti (che minimizzano l'energia cinetica così definita sul reticolato) sono quelli per cui $\Delta x = \mathcal{O}(\sqrt{\Delta t})$, come è possibile vedere dalla forma discretizzata dell'Azione nella forma Lagrangiana; se i cammini fossero funzioni differenziabili la scelta della posizione in cui calcolare il potenziale sarebbe stata ininfluente.

I cammini di Feynman hanno quindi un caratteristico carattere *fluttuante*: queste *fluttuazioni quantistiche* portano direttamente al principio di indeterminazione e alla non commutatività delle variabili coniugate e sono quindi fondamentali per riprodurre gli effetti quantistici dell'evoluzione temporale descritta dall'integrale di Feynman. Si veda in proposito [10].

e possiamo finalmente passare al limite al continuo: la sommatoria all'esponente tende ad un integrale tra $0 = t_i$ e $T = t_f$ e possiamo riconoscere in esso l'azione del cammino caratterizzato da $q(t)$ e $p(t)$:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} (p_j \dot{q}_j - H(\bar{q}_j, p_j)) \right] = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t))) dt = \frac{i\mathcal{S}[q, p]}{\hbar},$$

mentre per la misura degli integrali scriveremo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \int \prod_{k=0}^{N-1} \left(\frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right) \equiv \int \mathcal{D}'q \int \mathcal{D}p.$$

Le quantità $\int \mathcal{D}x$ prendono il nome di *integrali di cammino* (eventuali normalizzazioni sono racchiuse all'interno del simbolo). Per costruzione nell'espressione c'è un integrale nelle posizioni in meno di quelli negli impulsi, e la differenza viene indicata con l'apice, come in $\int \mathcal{D}'x$. La seguente espressione rappresenta quindi l'**integrale di cammino nello spazio delle fasi**:

$$A = \int \mathcal{D}'q(t) \mathcal{D}p(t) \exp \left[\frac{i\mathcal{S}}{\hbar} \right]. \quad (4)$$

Sebbene il formalismo degli integrali di cammino sia ben più complicato di quello degli integrali di Riemann, loro significato è analogo: gli integrali su tutte le posizioni e gli impulsi coniugati intermedi assumono il significato di somma su tutti i possibili cammini che la particella può aver percorso nell'andare dalla posizione iniziale a quella finale:

$$A = \sum_{\substack{\text{tutti i} \\ \text{cammini}}} A(q(t), p(t))$$

2.3 L'integrale di cammino nello spazio delle configurazioni

Per un'Hamiltoniana composta dall'usuale parte cinetica $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ più un potenziale dipendente unicamente da q_j è possibile svolgere gli integrali negli impulsi p_j , essendo questi N integrali gaussiani disaccoppiati. Ritorniamo all'espressione (3) e mettiamo in evidenza le dipendenze degli impulsi:

$$\begin{aligned} A &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} -\frac{i\delta}{\hbar} V(\bar{q}_j) \right] \int \frac{dp_0 dp_1 \dots dp_{N-1}}{(2\pi\hbar)^N} \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} \left(-\frac{p_j^2}{2m} + \dot{q}_j p_j \right) \right] \\ A &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} -\frac{i\delta}{\hbar} V(\bar{q}_j) \right] \cdot \prod_{j=0}^{N-1} \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} \left(-\frac{p_j^2}{2m} + \dot{q}_j p_j \right) \right] \\ A &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} V(\bar{q}_j) \right] \prod_{j=0}^{N-1} I_j \end{aligned}$$

Gli integrali si calcolano estendendo analiticamente l'integrale gaussiano ad argomenti complessi⁴. Si ottiene:

⁴Vedi Appendice A.

$$I_j = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp \left[i(-\frac{\delta}{2m\hbar})p_j^2 + i(\frac{\delta\dot{q}_j}{\hbar})p_j \right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\delta}} \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} \cdot \frac{m\dot{q}_j^2}{2} \right],$$

e sostituendo all'interno dell'espressione precedente:

$$\begin{aligned} A &= \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\delta} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} \left(\frac{m\dot{q}_j^2}{2} - V(\bar{q}_j) \right) \right] = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\delta}} \int \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{dq_i}{\sqrt{2\pi\hbar i\delta/m}} \right) \exp \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\delta}{\hbar} \left(\frac{m\dot{q}_j^2}{2} - V(\bar{q}_j) \right) \right] \end{aligned} \quad (5)$$

Siamo quindi giunti ad esprimere il propagatore in funzione di un *integrale di cammino nello spazio delle configurazioni*, cioè l'*integrale sui cammini di Feynman* propriamente detto:

$$A = K(q_i, t_i; q_f, t_f) = \int \mathcal{D}' q \exp \left[\frac{i\mathcal{S}[q]}{\hbar} \right] \quad (6)$$

dove \mathcal{S} è l'integrale d'azione nella forma lagrangiana $\mathcal{S} = \mathcal{S}[q] = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), t) dt$ e

$$\int \mathcal{D}' q = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\delta}} \int \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{dq_i}{\sqrt{2\pi\hbar i\delta/m}} \right).$$

I postulati di Feynman della meccanica quantistica si basano proprio sull'equazione (6) e sono così riassumibili:

- Tutte le alternative indipendenti mutualmente esclusive con cui può verificarsi un evento sono descritte da cammini $q(t) \in \mathcal{C}[t_i, t_f]$, con le condizioni al bordo $q(t_i) = q_i$ e $q(t_f) = q_f$;
- Esiste un'ampiezza di probabilità relativa ad ogni cammino $q(t)$ proporzionale ad $A[q(t)] = \exp \left[\frac{i\mathcal{S}[q(t)]}{\hbar} \right]$;
- Il propagatore del sistema dallo stato iniziale (q_i, t_i) allo stato finale (q_f, t_f) si ottiene sommando le ampiezze relative ad ogni cammino, come nella (6) (principio di sovrapposizione generalizzato).

Da questi postulati discende anche il fatto che i cammini non possono essere pensati separatamente come possibili traiettorie per una particella secondo il senso comune, in quanto non è possibile sommare le probabilità relative ai singoli cammini (si otterrebbe un risultato in palese contrasto con la (6)).

2.4 Il principio di minima azione

Come abbiamo mostrato, l'integrale sui cammini associa ad ogni traiettoria del sistema un numero complesso di norma unitaria la cui fase è direttamente proporzionale all'Azione: per essere precisi, questa fase è proprio il rapporto tra l'azione della traiettoria e \hbar , la costante di Planck ridotta. Ciò significa che per sistemi classici, dato che l'Azione è per definizione molto maggiore di \hbar , la fase associata al cammino è un numero che varia fortemente anche tra cammini molto simili tra di loro: possiamo sfruttare questo fatto per mostrare un modo molto diretto ed intuitivo per ricavare il limite classico della meccanica quantistica nella forma del principio di minima azione.

Consideriamo un punto materiale che si trovi nel punto A all'istante t_A e nel punto B nell'istante t_B ; siano $q(t)$ e $q'(t) = q(t) + \eta(t)$ due traiettorie tra loro vicine, con $\eta(t_A) = \eta(t_B) = 0$. Possiamo scrivere, tramite uno sviluppo di Taylor funzionale:

$$\mathcal{S}[q'] = \mathcal{S}[q] + \delta\mathcal{S}[q; \eta] + \epsilon_1[q, \eta] \|\eta\| =$$

$$= \mathcal{S}[q] + \delta\mathcal{S}[q; \eta] + \frac{1}{2}\delta^2\mathcal{S}[q; \eta, \eta] + \epsilon_2[q, \eta] \|\eta\|^2 = \dots,$$

dove $\|\cdot\|$ indica la norma dello spazio metrico sul quale agisce il funzionale $\mathcal{S}[q]$ (es. lo spazio delle funzioni continue $C_{[a,b]}$ con la norma $\|f\|_\infty = \max_{x \in [a,b]} |f(x)|$) ed i resti $\epsilon[q, \eta] \rightarrow 0$ se $\|\eta\| \rightarrow 0$.

Al primo ordine:

$$A + A' \approx \exp \left[\frac{i\mathcal{S}[q, \dot{q}]}{\hbar} \right] \left(1 + \exp \left[\frac{i\delta\mathcal{S}[q; \eta]}{\hbar} \right] \right) = \exp \left[\frac{i\mathcal{S}[q]}{\hbar} \right] (1 + e^{i\phi}).$$

Il fattore di fase $\phi[q; \eta]$ è approssimativamente proporzionale a $\|\eta\|/\hbar$ ed è quindi significativamente diverso da zero per due cammini anche molto vicini (\hbar è piccolo, ma finito): ciò impedisce in generale a due cammini di interferire costruttivamente. Una eccezione sono però i cammini $q'_C(t)$ vicini a quello classico $q_C(t)$, per il quale $\delta\mathcal{S}[q; \eta] = 0$ per qualunque $\eta(t)$ in virtù delle equazioni di Eulero-Lagrange. Per questi cammini lo sviluppo di Taylor si dovrà spingere fino alla variazione seconda e la somma delle ampiezze sarà quindi:

$$A + A' \approx \exp \left[\frac{i\mathcal{S}[q_C]}{\hbar} \right] \left(1 + \exp \left[\frac{i\delta^2\mathcal{S}[q; \eta, \eta]}{2\hbar} \right] \right),$$

La differenza di fase è notevolmente ridotta dal momento che va come $\|\eta\|^2/\hbar$ e per cammini sufficientemente vicini (α sufficientemente piccoli) otterremo per l'ampiezza totale:

$$A + A' \approx \exp \left[\frac{i\mathcal{S}[q_C]}{\hbar} \right] \left(2 + \frac{i\delta^2\mathcal{S}[q; \eta, \eta]}{2\hbar} \right).$$

Si può quindi concludere che, sebbene ogni cammino dia un contributo di uguale magnitudine, solo i cammini prossimi a quello classico contribuiscono costruttivamente all'ampiezza di probabilità totale e che al crescere di \mathcal{S}/\hbar le fluttuazioni quantistiche intorno al cammino classico si riducano progressivamente.⁵

2.5 L'equazione di Schrödinger

Mostriamo ora come sia possibile ricavare l'equazione di Schrödinger dall'integrale sui cammini nello spazio configurazionale. Riprendiamo l'equazione (5) e, con un leggero cambio di notazione, mettiamo in evidenza l'ultimo termine:

$$K(q_f, t_f; q_f - \Delta q, t_f - \delta) = \int d\Delta q K(q_f, t_f; q_f - \Delta q, t_f - \delta) K(q_f - \Delta q, t_f - \delta, q_i, t_i).$$

Consideriamo separatamente di due propagatori. Il primo si può approssimare con:

$$K(q_f, t_f; q_f - \Delta q, t_f - \delta) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\delta/m}} \exp \left[\frac{i\delta}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta q}{\delta} \right)^2 - V(q_f) \right) \right],$$

⁵ Si può pensare che i cammini rilevanti siano quelli contenuti in un “tubo” di diametro \hbar (nello spazio delle fasi) intorno al cammino classico (approssimazione semiclassica). Uno studio dettagliato delle fluttuazioni quantistiche si può trovare, per esempio, nel testo di H. Kleinert citato in bibliografia [9].

mentre possiamo sviluppare il secondo in serie di Taylor intorno a $x = x_f$. Per evitare di appesantire la notazione si mostrerà solo la dipendenza nella coordinata finale:

$$K(q_f - \Delta q) = K(q_f) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} \partial_q^j K(q)|_{q=q_f} (-\Delta q)^j .$$

Reinserendo nella prima espressione otteniamo:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\delta/m}} \exp \left[-\frac{i\delta}{\hbar} V(q_f) \right] \\ \cdot \left\{ K(q_f) \int d\Delta q \exp \left[-\frac{1}{2\hbar i\delta/m} (\Delta q)^2 \right] + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} \partial_q^j K(q)|_{q=q_f} \int d\Delta q (\Delta q)^j \exp \left[-\frac{1}{2\hbar i\delta/m} (\Delta q)^2 \right] \right\} .$$

Gli integrali nella parentesi graffa sono integrali di Fresnel⁶. Notiamo che solo le potenze pari di (Δq) portano un contributo non nullo. Procediamo con l'integrazione:

$$K(q_f, t_f; q_f - \Delta q, t_f - \delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\delta/m}} \exp \left[-\frac{i\delta}{\hbar} V(q_f) \right] \\ \cdot \left\{ \sqrt{2\pi\hbar i\delta/m} K(q_f) + \sqrt{2\pi\hbar i\delta/m} \sum_k \partial_q^{2k} K(q)|_{q=q_f} \frac{(-1)^{2k}}{2k!} \frac{(2k-1)!!}{2^k} \left(\frac{2i\hbar\delta}{m} \right)^k \right\} \\ = \left[1 + \frac{V(q_f)}{i\hbar} \delta + \mathcal{O}(\delta^2) \right] \left\{ K(q_f) + \frac{i\hbar}{2m} \partial_q^2 K(q)|_{q=q_f} \delta + \mathcal{O}(\delta^2) \right\}$$

da cui, reinserendo le dipendenze dalle condizioni iniziali e finali e facendo il limite per $\delta \rightarrow 0$:

$$K(q_f, t_f - \delta; q_i, t_i) = K(q_f, t_f - \delta; q_i, t_i) + \frac{\delta}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{q_f}^2 + V(q_f) \right) K(q_f, t_f - \delta; q_i, t_i) + \mathcal{O}(\delta^2) ,$$

$$i\hbar \partial_t K(q_f, t_f - \delta; q_i, t_i) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{q_f}^2 + V(q_f) \right) K(q_f, t_f - \delta; q_i, t_i) ,$$

che riproduce, passando al limite $\delta \rightarrow 0$, l'equazione di Schrödinger, proiettata sulla base $\langle q_f |$; è infatti ovvio che il propagatore la soddisfi, dato che il vettore $\hat{U}(t_f, t_i) |q_i\rangle$ è a tutti gli effetti un vettore di stato e deve esserne soluzione per ogni t_f .

2.6 Integrali di cammino euclidei e meccanica statistica

Una importante applicazione degli integrali di cammino è legata alla meccanica statistica, nella quale possono essere usati nel calcolo delle funzioni di partizione. La funzione di partizione canonica per un sistema quantistico (con Hamiltoniana indipendente dal tempo) in equilibrio a contatto con un serbatoio termico a temperatura $T = 1/(\beta k_B)$ è data da:

$$Z_C(\beta) = \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}} = \sum_j \langle j | e^{-\beta \hat{H}} | j \rangle = \sum_j e^{-\beta E_j} . \quad (7)$$

⁶Vedi appendice A.

Possiamo definire una analoga “funzione di partizione quantistica” prendendo la traccia dell’operatore di evoluzione temporale \hat{U} :

$$\begin{aligned} Z_{QM}(t) &= \text{Tr } \hat{U}(t) = \text{Tr } e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} = \\ &= \sum_j e^{-\frac{it}{\hbar} E_j} = \int dq \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q \rangle = \int dq K(q, t; q, 0). \end{aligned} \quad (8)$$

La somiglianza formale tra le due espressioni è notevole. Le espressioni della funzione di partizione e l’integrale del propagatore sono formalmente identiche a patto di identificare β con it/\hbar , cioè $t = -i\beta\hbar$:

$$Z_C(\beta) \equiv Z_{QM}(-i\beta\hbar) = \int K(q, -i\beta\hbar; q, 0) dq.$$

È evidente quindi che è possibile calcolare la funzione di partizione classica tramite il formalismo degli integrali sui cammini, a patto di passare ad una coordinata temporale immaginaria. Prima di proseguire vediamo come sia possibile esprimere la funzione di partizione quantistica tramite gli integrali di cammino. Sostituendo l’espressione del propagatore (3) vediamo che l’ulteriore integrazione rende simmetrici gli integrali nelle posizioni e nei cammini: ad ogni cammino è quindi di associato un “elemento di volume” $\mathcal{D}q\mathcal{D}p/\hbar$ nello spazio dei cammini, pesato con un fattore $\exp(i\mathcal{S}/\hbar)$.

$$\begin{aligned} Z_{QM} &= \int dq K(q, t; q, 0) = \oint \mathcal{D}q(t)\mathcal{D}p(t) \exp\left[\frac{i\mathcal{S}(q, p)}{\hbar}\right] = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=0}^{N-1} \int \frac{dq_j dp_j}{h} \exp\left[\frac{i\delta}{\hbar} \sum_{j=1}^{N-1} (p_j \dot{q}_j - H(q_j, p_j))\right], \end{aligned} \quad (9)$$

dove il simbolo \oint indica la condizione periodica al bordo $q(0) = q(t)$. Esplicitando gli integrali negli impulsi, si arriva ad un risultato simile per l’integrale nello spazio delle configurazioni:

$$Z_{QM} = \oint \mathcal{D}q(t) \exp\left[\frac{i\mathcal{S}(q)}{\hbar}\right].$$

Procediamo ora con il calcolo della funzione di partizione canonica: il procedimento seguito si chiama *rotazione di Wick*, ed è un prolungamento analitico del tempo (reale) al piano complesso, rendendo il tempo immaginario puro tramite la sostituzione $t = -i\tau$, cioè $\tau = it$. Proviamo adesso a vedere come si trasforma l’integrale di cammino nello spazio delle configurazioni sotto l’azione della rotazione di Wick. Sostituendo nell’azione otteniamo:

$$dt \rightsquigarrow -id\tau; \quad \partial_t \rightsquigarrow i\partial_\tau$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[q] &= \int_0^{-i\beta\hbar} \frac{1}{2} m(\partial_t q)^2 - V(q) dt' = \int_0^{\beta\hbar} \left(-\frac{1}{2} m(\partial_\tau q)^2 - V(q)\right) (-id\tau') = \\ &= i \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{1}{2} m(\partial_\tau q)^2 + V(q)\right) d\tau' \equiv i\mathcal{S}_E[q], \end{aligned}$$

dove è stata introdotta l'azione Euclidea \mathcal{S}_E ⁷, integrale della Lagrangiana euclidea $L_E[q, \dot{q}]$, ottenuta cambiando segno al potenziale. Il sistema evolve dal tempo $\tau_0 = 0$ a $\tau_f = \beta\hbar$. Sostituendo nell'integrale sui cammini, tenendo conto di $\epsilon \equiv i\delta$, otteniamo:

$$\begin{aligned} K(q, -i\beta\hbar; q, 0) &\equiv K_E(q, \beta\hbar; q, 0) = \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}} \int \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{dq_i}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right) \exp \left[-\frac{\mathcal{S}_E[q]}{\hbar} \right]. \end{aligned}$$

Integrando rispetto a $q_0 = q_N = q$ possiamo assorbire il fattore davanti all'integrale:

$$\begin{aligned} Z_C &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int \frac{dq}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \int \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{dq_i}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right) \exp \left[-\frac{\mathcal{S}_E[q]}{\hbar} \right] = \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \oint \prod_{i=0}^{N-1} \left(\frac{dq_i}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right) \exp \left[-\frac{\mathcal{S}_E[q]}{\hbar} \right] = \oint \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{\mathcal{S}_E[q]}{\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Analogamente, per l'integrale di cammino nello spazio delle fasi:

$$\begin{aligned} Z_C &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \oint \prod_{i=0}^{N-1} dq_i \int \prod_{k=0}^{N-1} \left(\frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right) \exp \left[-\sum_{j=0}^{N-1} \frac{\epsilon}{\hbar} (ip_j \dot{q}_j - H(\bar{q}_j, p_j)) \right] = \\ &= \oint \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \exp \left[-\frac{\mathcal{S}_E[q, p]}{\hbar} \right], \end{aligned} \quad (11)$$

dove $\mathcal{S}_E(q, p)$ è ottenuta integrando la trasformata di Legendre Euclidea della Lagrangiana Euclidea:

$$L_E(q, p) = ip\dot{q} - H(q, p).$$

Confrontando la (7) con le (9) e (11) è immediato osservare come, mentre il fattore di Boltzmann $e^{-\beta\hat{H}}$ fornisce la probabilità che il volume infinitesimo nello spazio delle fasi $dqdp/h$ sia occupato dal sistema, ad ogni elemento $\mathcal{D}q\mathcal{D}p/h$ nello “spazio dei cammini” è associato un fattore $e^{i\mathcal{S}/\hbar}$ nella formulazione Minkowskiana oppure $e^{-\mathcal{S}_E/\hbar}$ in quella Euclidea [8].

Resta da chiarire il significato fisico di Z_{QM} e come gli integrali sui cammini Euclidei possano aiutare la comprensione dei sistemi quantistici. Quando è disponibile una soluzione analitica per il propagatore del sistema la formulazione Minkowskiana è del tutto analoga a quella euclidea: ad esempio l'integrale di cammino dell'oscillatore armonico è perfettamente risolubile e si ottiene il medesimo risultato (a meno della sostituzione $\tau = it$) sia col tempo reale che con quello immaginario. Quando invece non è disponibile una soluzione esatta, la formulazione euclidea si presta maggiormente ad uno studio numerico, come ora vedremo. In meccanica statistica il valor medio di un osservabile, nel limite di bassa temperatura ($T \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow \infty$) è dato da:

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv Z_C^{-1} \text{Tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} \hat{A} \right), \quad (12)$$

⁷L'aggettivo “Euclidea” è riferito alla metrica spaziotemporale utilizzata. Per questo a volte si indica l'azione \mathcal{S} “classica” con l'aggettivo *Minkowskiana*.

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle \hat{A} \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\sum_j e^{-\beta E_j} \langle j | \hat{A} | j \rangle}{\sum_j e^{-\beta E_j}} = \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle .$$

Non è però chiaro come si possano ottenere i valori di aspettazione degli operatori tramite gli integrali di cammino. A tale scopo, in analogia con la (12), studiamo la seguente quantità:

$$\langle \hat{A}_H(s) \rangle_{MQ} \equiv Z_{MC}^{-1} \text{Tr} \left(\hat{U}(0, t) \hat{A}_H(s) \right) ,$$

dove $\hat{A}_H(s) = e^{i\hat{H}s/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}s/\hbar}$ è un operatore nella rappresentazione di Heisenberg che descrive un osservabile al tempo s^8 . Passando al tempo immaginario si ottiene immediatamente il valore di aspettazione della stessa grandezza in meccanica statistica. Se questo operatore è funzione *unicamente* dell'operatore posizione possiamo invece espandere la traccia negli autostati della posizione per ottenere:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_H(s) \rangle_{QM} &= Z_{QM}^{-1} \int dq \langle q | e^{-\frac{i\hat{H}(t-s)}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}s}{\hbar}} | q \rangle = \\ &= Z_{QM}^{-1} \int dq \int dq' \langle q | e^{-\frac{i\hat{H}(t-s)}{\hbar}} | q' \rangle A(q') \langle q' | e^{-\frac{i\hat{H}s}{\hbar}} | q \rangle = \\ &= Z_{QM}^{-1} \int dq \int dq' A(q') \int_{q,0}^{q',s} \mathcal{D}'x' \exp \frac{i\mathcal{S}[x']}{\hbar} \int_{q',s}^{q,t} \mathcal{D}'x'' \exp \frac{i\mathcal{S}[x'']}{\hbar} = \\ &= Z_{QM}^{-1} \int dq \int_{q,0}^{q,t} \mathcal{D}'x A(s) \exp \frac{i\mathcal{S}[x]}{\hbar} = Z_{QM}^{-1} \oint \mathcal{D}'x A(s) \exp \frac{i\mathcal{S}[x]}{\hbar} . \end{aligned}$$

come è possibile verificare passando attraverso la discretizzazione del cammino. Si dimostra facilmente, sfruttando il fatto che l'operazione di traccia su un prodotto di operatori soddisfa l'identità ciclica $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$ e che $[\hat{U}(t_A; t_B), \hat{U}(t_C, t_D)] = 0$, che il valore di aspettazione di un operatore $\hat{A}_H(s)$ non dipende dall'istante s nel quale è calcolato⁹. Adesso è possibile calcolare il valore di aspettazione di \hat{A} sull'autostato fondamentale passando al tempo immaginario ($t = i\tau$, $s = i\sigma$, $\hat{A}_H(s) \rightarrow \hat{A}_H(\sigma)$):

$$\langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} Z_C^{-1} \oint \mathcal{D}'x A(\sigma) \exp -\frac{\mathcal{S}[x]}{\hbar} , \quad \sigma \in [0, \beta\hbar] . \quad (13)$$

Possiamo calcolare i valori di aspettazione su $|0\rangle$ anche di prodotti di operatori posizione a tempi diversi, come le funzioni di correlazione, definite come:

$$\Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) = \frac{1}{Z_{QM}} \text{Tr} \left(e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{q}_H(t_1) \hat{q}_H(t_2) \dots \hat{q}_H(t_n) \right) , \quad t \geq t_1 > t_2 > \dots > t_n \geq 0 .$$

Anch'esse si possono scrivere in termini di integrali di cammino, come si vede in maniera molto simile al caso appena discusso:

$$\Gamma^{(n)}(t_1, t_2, \dots, t_n) = Z_{QM}^{-1} \oint \mathcal{D}x q(t_1)q(t_2) \dots q(t_n) \exp \frac{i\mathcal{S}[x]}{\hbar} ,$$

⁸Col simbolo $\langle \bullet \rangle_{MQ}$ non si intende in questo caso il valore di aspettazione di un operatore \bullet su uno stato $|\psi\rangle$. Si usa questo simbolo solo per l'analogia con la meccanica statistica, ma la grandezza in questione non ha alcun significato fisico diretto.

⁹ $\text{Tr}(\hat{U}(t; s)\hat{A}\hat{U}(s; 0)) = \text{Tr}(\hat{U}(s; 0)\hat{U}(t; s)\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{U}(t; s)\hat{U}(s; 0)\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{U}(t; 0)\hat{A}) , \forall s \in [0, t]$.

$$\langle 0 | \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \dots \hat{q}(t_n) | 0 \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} Z_C^{-1} \oint \mathcal{D}x q(t_1) q(t_2) \dots q(t_n) \exp -\frac{\mathcal{S}_E[x]}{\hbar}. \quad (14)$$

I risultati (13) e (14) sono fondamentali per lo studio numerico della seconda parte, in quanto permettono di studiare le proprietà dello stato fondamentale tramite i momenti della distribuzione spaziale dell'autostato, come sarà descritto più avanti.

3 Integrazioni Monte Carlo

3.1 Il problema generale

In termini generali, il metodo Monte Carlo è un approccio statistico al calcolo di integrali la cui caratteristica fondamentale è l'uso di punti, appartenenti al dominio della funzione integranda, estratti casualmente con una distribuzione di probabilità nota. Nel caso più semplice la distribuzione di probabilità è quella uniforme, ma il metodo funziona con distribuzioni qualsiasi. Naturalmente una scelta oculata della funzione di distribuzione permette all'algoritmo di convergere prima, fattore spesso cruciale nelle simulazioni numeriche.

Supponiamo di voler calcolare il seguente integrale multidimensionale:

$$I \equiv \int_V f(\vec{x}) d\vec{x}, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^D.$$

Moltiplichiamo e dividiamo per una funzione $\rho(\vec{x})$, non negativa, tale che $\int_V \rho(\vec{x}) d\vec{x} = 1$ ¹⁰:

$$I = \int_V \frac{f(\vec{x})}{\rho(\vec{x})} \cdot \rho(\vec{x}) d\vec{x} = \int_V g(\vec{x}) \rho(\vec{x}) d\vec{x}.$$

Se interpretiamo $\rho(\vec{x})$ come una densità di probabilità, l'integrale è pari per definizione al valore atteso $E(g)$ di una variabile casuale continua $g(\vec{x})$, con una densità $\rho(\vec{x})$. La media aritmetica $\langle g \rangle$ di N valori estratti casualmente (media campionaria) fornisce una buona stima del valore atteso, infatti:

$$E(\langle g \rangle) = E(g), \quad \text{Var}(\langle g \rangle) = \frac{1}{N} \text{Var}(g)$$

$$I = E(\langle g \rangle) \approx \frac{\sum_{i=1}^N g_i}{N} = \frac{\sum_{i=1}^N g(\vec{x}_i)}{N}, \quad (15)$$

grazie al fatto che la varianza sulla media scende come $1/N$, a prescindere dalla dimensionalità della variabile campionaria e dalla funzione di distribuzione delle \vec{x}_i . La varianza dipende però fortemente dalla scelta della funzione $g(\vec{x})$ e quindi della funzione di distribuzione $\rho(\vec{x})$, perciò una buona scelta di quest'ultima permette di ottenere, a parità di campioni, un risultato più vicino al valore esatto dell'integrale. L'algoritmo di Metropolis fornisce un modo per trovare questa funzione di distribuzione, ma prima di procedere con la definizione sono necessari alcuni semplici risultati sui processi stocastici, dei quali fanno parte le catene di Markov.

3.2 Processi stocastici e catene di Markov

Un processo stocastico è la naturale generalizzazione dell'idea di variabile casuale: essi sono definiti come famiglie ad un parametro (discreto o continuo) di variabili casuali (discrete o continue). Esistono perciò quattro classi di processi stocastici:

- Processo stocastico discreto a parametro discreto;
- Processo stocastico discreto a parametro continuo;
- Processo stocastico continuo a parametro discreto;
- Processo stocastico continuo a parametro continuo.

¹⁰Si assume che tutti gli integrali seguenti convergano.

Consideriamo i processi stocastici discreti: fissato t posso organizzare le probabilità di ogni evento in un vettore riga:

$$\vec{p}(t) = (p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t)) .$$

Per ogni valore del parametro deve ovviamente valere la condizione di normalizzazione a 1 delle probabilità, cioè:

$$\sum_{i=1}^N p_i(t) = 1 \text{ per ogni } t \in \mathbb{N}, \mathbb{Z}, \mathbb{R}, \dots$$

Nel caso continuo, del tutto similmente, ad ogni valore x della variabile casuale continua è associata una densità di probabilità $\rho(x, t)$ dipendente dal parametro, sempre tale che il cui integrale nello spazio campionario sia 1, come ad esempio:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2\sigma^2}} = \mathcal{N}(x - vt, \sigma) .$$

3.3 Le catene di Markov

Focalizzeremo la nostra attenzione sui processi stocastici discreti a parametro discreto in quanto sono facilmente modellizzabili e sono quelli utili nelle simulazioni numeriche. In generale il parametro può assumere valori $t_0, t_1 = t_0 + \Delta t, t_2 = t_0 + 2\Delta t, \dots, t_0 + n\Delta t$, ma porremo senza perdere di generalità $\Delta t = 1$, salvo ove indicato esplicitamente.

Un processo stocastico è detto processo Markoviano (catena di Markov) se le probabilità $\vec{p}(t+1)$ dipendono unicamente dal vettore $\vec{p}(t)$ e che quindi le probabilità di transizione da uno stato x_i all'istante¹¹ t ad uno stato x_j all'istante $t+1$ siano costanti e non dipendano dal particolare valore di t . Nel modo più generale possiamo scrivere per le probabilità di transizione:

$$\text{prob}(x_i \rightarrow x_j) \equiv \omega_{ij} ,$$

$$p_j(t+1) = \sum_i p_i(t) \cdot \omega_{ij} ; \quad \vec{p}(t+1) = \vec{p}(t) \cdot \hat{\omega} . \quad (16)$$

che prende il nome di *equazione maestra*. La matrice $\hat{\omega}$ di componenti ω_{ij} prende il nome di *matrice stocastica*. Una importante proprietà della matrice stocastica è che la somma degli elementi di ogni colonna della matrice vale 1. Infatti:

$$1 = \sum_j p_j(t+1) = \sum_{i,j} p_i(t) \omega_{ij} = \sum_i p_i(t) \sum_j \omega_{ij}$$

D'altra parte vale anche $\sum_i p_i(t) = 1$, perciò:

$$\sum_i p_i(t) \sum_j \omega_{ij} - \sum_i p_i(t) = \sum_i p_i(t) \left(\sum_j \omega_{ij} - 1 \right) = 0$$

Dato che deve valere per ogni $\vec{p}_i(t)$ si arriva alla conclusione:

¹¹Qui, e in seguito, “tempo” è da intendersi sinonimo di “parametro” e “istante” come “valore del parametro”, in analogia con un sistema fisico. Di fatto una catena di Markov è un sistema dinamico per le probabilità di transizione.

$$\sum_j \omega_{ij} = 1 \quad (17)$$

Si può riscrivere l'equazione maestra (16) in un modo alternativo, sottraendo ad ambo i membri $p_j(t)$:

$$\begin{aligned} p_j(t + \Delta t) - p_j(t) &= \sum_i p_i(t) \omega_{ij} - p_j(t) = \\ &= \sum_i p_i(t) \omega_{ij} - \sum_i p_j(t) \omega_{ji} . \end{aligned}$$

Dividendo per Δt e passando al limite per $\Delta t \rightarrow 0$ si ottiene l'equazione maestra per sistemi stocastici a parametro continuo:

$$\frac{dp_j(t)}{dt} = \sum_i p_i(t) \dot{\omega}_{ij} - \sum_i p_j(t) \dot{\omega}_{ji} ,$$

dove $\dot{\omega}_{ij}$ e $\dot{\omega}_{ji}$ sono da considerarsi probabilità di transizione per unità di tempo.

3.4 Ergodicità e convergenza alla distribuzione asintotica

Ritornando alle catene di Markov a parametro discreto, è immediato vedere come l'evoluzione del vettore $\vec{p}(t)$ sia unicamente fissata dalle ampiezze di transizione e dal "dato iniziale", cioè dal vettore $\vec{p}(0) = \vec{p}_0$ all'istante $t = 0$. Infatti:

$$\vec{p}(t) = \vec{p}(t-1) \cdot \hat{\omega} = \vec{p}(t-2) \cdot \hat{\omega}^2 = \dots$$

$$\vec{p}(t) = \vec{p}(0) \cdot \hat{\omega}^t$$

Conoscendo quindi la matrice $\hat{\omega}^t$ otteniamo esplicitamente l'evoluzione del sistema. Per esempio, prendiamo uno spazio campionario formato da due eventi caratterizzati dalle probabilità $p_1(t)$ e $p_2(t)$ e sia $\hat{\omega}$ la matrice di transizione:

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & c \end{pmatrix} .$$

Dall'equazione (17) sappiamo che $a + b = 1$ e $c = 1$. È facile vedere che:

$$(\hat{\omega})^\infty = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Ciò significa che, nel lungo periodo, la probabilità sarà tutta concentrata sul secondo stato, mentre sarà nulla $p_1(\infty)$. In questo caso lo stato 1 è detto *transiente*, mentre lo stato 2 è detto *assorbente*. Se invece le probabilità di transizione tra gli stati 1 e 2 fossero diverse da zero anche nel limite di tempi lunghi, la catena sarebbe detta *ergodica*. Simili considerazioni sono valide anche nel caso di spazi campionari più vasti: se la matrice di transizione è triangolare superiore a blocchi la catena di Markov si dice essere decomponibile in due catene distinte: gli stati transienti formano una catena di Markov *riducibile* quella formata dagli stati assorbenti, che è infatti detta *irriducibile*.

In una catena di Markov irriducibile ed ergodica le probabilità di transizione tra uno stato all'altro sono sempre diverse da zero, perciò un eventuale camminatore casuale che percorresse la catena

visiterebbe, avendo sufficiente tempo, tutti i siti. Si può dimostrare che, per una catena così fatta, esiste ed è unica la distribuzione asintotica¹², tale che:

$$\pi_j = \sum_i \pi_i \omega_{ij} \quad (18)$$

Se lo spazio campionario è molto grande è impossibile far evolvere il vettore delle probabilità tramite l'equazione maestra. Quello che si può fare è, invece, studiare il moto di un camminatore casuale lungo la catena di Markov ed osservare il suo comportamento per tempi lunghi, in modo da ricavare la distribuzione asintotica: infatti, nel limite di tempi lunghi, la frequenza con cui si troverà nei siti sarà proprio pari alla distribuzione asintotica. È necessario quindi saper stimare correttamente il tempo di convergenza in modo da evitare di mediare sulle posizioni del camminatore quando la distribuzione di probabilità non è ancora quella giusta. Per fare ciò studiamo gli autovalori della matrice stocastica.

La matrice stocastica ha un unico autovettore riga $\vec{\pi} = \vec{v}_1$ con autovalore 1, mentre gli altri sono tutti di valore inferiore¹³. In virtù della (17) all'autovalore 1 è associato anche l'autovettore colonna

$\tilde{\sigma} = \tilde{w}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ ¹⁴. È possibile esprimere un'applicazione lineare in funzione dei proiettori sui suoi autovalori nel seguente modo:

$$\hat{A} = \sum_k \tilde{w}_k \vec{v}_k \lambda_k .$$

La verifica della decomposizione è immediata nella base in cui l'operatore è diagonale. Nel caso delle potenze della matrice stocastica otteniamo:

$$\begin{aligned} \hat{\omega}^t &= \tilde{w}_1 \vec{v}_1 \lambda_1^t + \tilde{w}_2 \vec{v}_2 \lambda_2^t + \mathcal{O}(\lambda_3^t) = \\ &= \tilde{\sigma} \vec{\pi} + \tilde{w}_2 \vec{v}_2 \lambda_2^t + \mathcal{O}(\lambda_3^t) . \end{aligned}$$

D'altra parte $\vec{p}(t) = \vec{p}_0 \cdot \hat{\omega}$ e, sostituendo in essa:

$$\begin{aligned} \vec{p}(t) &= (\vec{p}_0 \tilde{\sigma}) \vec{\pi} + (\vec{p}_0 \tilde{w}_2) \cdot \vec{v}_2 \lambda_2^t + \mathcal{O}(\lambda_3^t) = \\ &= \vec{\pi} + (\vec{p}_0 \tilde{w}_2) \cdot \vec{v}_2 \lambda_2^t + \mathcal{O}(\lambda_3^t) , \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} \vec{p}(t) - \vec{\pi} &= (\vec{p}_0 \tilde{w}_2) \cdot \vec{v}_2 \lambda_2^t + \mathcal{O}(\lambda_3^t) \approx \\ &= (\vec{p}_0 \tilde{w}_2) e^{t \ln \lambda_2} \vec{v}_2 + \mathcal{O}(\lambda_3^t) \approx \vec{C} e^{-\frac{t}{\tau}} , \end{aligned}$$

dove abbiamo definito $\vec{C} = (\vec{p}_0 \tilde{w}_2) \vec{v}_2$ e $\tau = |\ln \lambda_2|^{-1}$. Vediamo come il vettore \vec{p} converga alla distribuzione asintotica esponenzialmente (perlomeno per tempi sufficientemente elevati), con una costante di tempo τ dipendente dal secondo autovalore¹⁵; in particolare, più esso è vicino ad 1 e

¹² A meno di eventuali stati periodici.

¹³ *Teorema di Perron-Frobenius*, vedi [12].

¹⁴ Il fatto che le matrici stocastiche operino su vettori riga da destra obbliga a rovesciare le convenzioni per quanto riguarda vettori e 1-forme. In particolare anche i proiettori operano “al contrario”.

¹⁵ L'autovalore λ_2 è supposto positivo. Nel caso fosse negativo, va sostituito al suo posto $|\lambda_2|$.

maggior sarà il tempo necessario alla convergenza. τ fornisce un tempo di riferimento rispetto al quale è possibile distinguere tra “corte” e “lunghe” catene di Markov. Possiamo scrivere anche:

$$\Delta(t) \equiv \sup_i |p_i(t) - \pi_i| = \sup_i |C_i| e^{-\frac{t}{\tau}} = K e^{-\frac{t}{\tau}}.$$

Possiamo assumere Δ come distanza tra le due distribuzioni di probabilità¹⁶; fissato un (piccolo) valore Δ_{eq} , possiamo definire il tempo di equilibrio t_{eq} tale che $\Delta(t_{eq}) = \Delta_{eq}$. Ovviamente, minore sarà Δ_{eq} , maggiore sarà t_{eq} , ma migliore sarà l'approssimazione di distribuzione asintotica $\tilde{p}(t) \approx \vec{\pi}$.

3.5 Bilancio dettagliato e algoritmo di Metropolis

Ritornando al problema iniziale, possiamo calcolare l'integrale (15) mediante l'uso di un camminatore aleatorio che “esplori” il dominio d'integrazione con la giusta frequenza in ogni punto, legata alla densità di probabilità $g(\vec{x})$. L'importante è cominciare a mediare sulle posizioni solo dopo essere certi del raggiungimento della probabilità asintotica.

Ora non rimane che trovare una $\hat{\omega}$ che porti alla giusta probabilità asintotica. Dall'equazione (18) otteniamo la cosiddetta equazione di bilancio:

$$0 = \pi_i - \sum_j \pi_j \omega_{ji} = \pi_i \left(\sum_j \omega_{ij} \right) - \sum_j \pi_j \omega_{ji} = \sum_j (\pi_i \omega_{ij} - \pi_j \omega_{ji})$$

$$\sum_j (\pi_i \omega_{ij} - \pi_j \omega_{ji}) = 0, \quad \forall i. \quad (19)$$

Il modo più semplice di risolverla è imporre che siano nulli tutti i termini nella sommatoria separatamente, ottenendo così l'equazione di bilancio dettagliato:

$$\pi_i \omega_{ij} = \pi_j \omega_{ji}, \quad \forall i, j. \quad (20)$$

Una delle probabilità di transizione che soddisfa l'equazione di bilancio dettagliato è quello che definisce l'*algoritmo di Metropolis*, dato da:

$$\omega_{ij} = \text{prob}(i \rightarrow j) = \min \left[1, \frac{\pi_j}{\pi_i} \right]. \quad (21)$$

Tale scelta della distribuzione di probabilità è molto vantaggiosa nel caso in cui la distribuzione di probabilità sia significativamente diversa da zero solo in una ristretta regione del dominio. È facile verificare che il camminatore non si allontana mai molto da questa regione perché, se la probabilità π_j di arrivo è minore di quella di partenza π_i , la probabilità di transizione è generalmente piccola, mentre in caso contrario è pari ad 1. Il risultato appena ottenuto sarà lo strumento principale con cui verrà condotta l'analisi numerica nella seconda parte della tesi, nella quale verrà studiato un semplice sistema quantistico (un oscillatore armonico unidimensionale): per fare ciò è necessario eseguire integrali su spazi con elevata dimensionalità (il numero di dimensioni nelle simulazioni è tipicamente $N \approx 10^3 \div 10^4$), nei quali la funzione integranda è significativamente diversa da zero solo in una ristretta regione del dominio, cioè per i cammini vicini a quello classico.

Possiamo finalmente tornare all'inizio della sezione, cioè al calcolo dell'integrale:

$$I = \int_V f(\vec{x}) d\vec{x} = \int_V g(\vec{x}) \rho(\vec{x}) d\vec{x}$$

¹⁶Naturalmente sono possibili anche altre definizioni, come la distanza Euclidea. Per i nostri scopi sono equivalenti.

$$I \equiv \int_V g(\vec{x}) \rho(\vec{x}) d\vec{x} \quad I \approx \langle g \rangle$$

Possiamo ottenere la media campionaria di g mediando sui valori $g_i = g(\vec{x}^{(i)})$ assunti dal camminatore casuale, con una (densità di) probabilità asintotica $\rho_\infty(\vec{x})$. Supponiamo che il camminatore sia nella posizione \vec{x} al tempo t ed estraiamo una nuova posizione \vec{y} ¹⁷. Se $\rho(\vec{y}) > \rho(\vec{x})$ allora il camminatore si sposterà sicuramente nella nuova posizione, altrimenti lo farà solo con una probabilità $\rho(\vec{x})/\rho(\vec{y})$. In definitiva l'integrale si stima come segue:

$$I \approx \frac{\sum_{t=t_{eq}}^T g(\vec{x}(t))}{T - t_{eq}}$$

dove t_{eq} è l'istante al quale la distribuzione di probabilità è sufficientemente vicina a quella asintotica.

¹⁷ Ad esempio si può scegliere $y_i = x_i + \xi_i$, dove ξ_i è un numero casuale appartenente all'intervallo $[-\delta, \delta]$. Questa scelta assicura il corretto funzionamento dell'algoritmo. La generalizzazione all'algoritmo di *Metropolis-Hastings* permette la più ampia scelta di probabilità *a priori*.

4 Introduzione allo studio numerico

4.1 Richiami sull'oscillatore armonico

Studieremo ora un semplice sistema quantistico, l'oscillatore armonico unidimensionale, tramite gli integrali di cammino Euclidei. Ricordiamo in breve le proprietà fondamentali dell'oscillatore armonico:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega ,$$

dove abbiamo introdotto l'operatore numero $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, prodotto dell'operatore di costruzione \hat{a}^\dagger e distruzione \hat{a} :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) , \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) .$$

Introducendo la grandezza $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ abbiamo l'autostato fondamentale:

$$\langle x|0\rangle = \psi_0(x) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}x_0)^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} ,$$

$$\rho_0(x) = |\psi_0(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}x_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} .$$

Confrontando quest'ultima espressione con la gaussiana normalizzata

$$\mathcal{N}(\mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

si ottiene immediatamente $\mu(\rho_0) = 0$, $\text{Var}(\rho_0) = \frac{1}{2}x_0^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$. I valori di aspettazione di \hat{x} e \hat{p} sull'autostato fondamentale sono nulli, come è facile verificare, mentre si ottiene:

$$\langle 0|\frac{\hat{p}^2}{2m}|0\rangle = \langle 0|\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2|0\rangle = \frac{\langle 0|\hat{H}|0\rangle}{2} \tag{22}$$

come ci si aspetta dal teorema del viriale¹⁸.

4.2 Osservabili significative nella simulazione

Le medie sull'autostato fondamentale sono calcolate numericamente tramite la (13) nel limite di N molto grande:

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \beta \rightarrow \infty}} \oint \prod_{i=0}^{N-1} \left(\frac{dx_i}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right) A(\vec{x}) \frac{\exp\left[-\mathcal{S}_E^{(N)}(\vec{x})/\hbar\right]}{Z^{(N)}} ,$$

dove $\vec{x} = (x_0, x_1, \dots, x_{N-1})$ è l'insieme delle coordinate che approssimano il cammino, e

¹⁸Se $|E\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniana, si ha che $\langle E|p_i \frac{\partial \hat{T}}{\partial p_i}|E\rangle = 2\langle E|\hat{T}|E\rangle = \langle E|q_i \frac{\partial \hat{V}}{\partial q_i}|E\rangle$. Nel caso dell'oscillatore armonico $\langle T\rangle = \langle V\rangle$.

$$\mathcal{S}_E^{(N)}(\vec{x}) = \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\epsilon^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_j^2 \right] .$$

Il volume d'integrazione totale è pari a \mathbb{R}^N , e come se non bastasse anche il calcolo dell'esponenziale dell'azione Euclidea è molto costoso in termini di tempo-macchina. L'unica soluzione è adottare l'algoritmo di Metropolis, utilizzando un camminatore caratterizzato proprio dalle possibili configurazioni \vec{x} e identificando in $\rho(\vec{x}) = \exp[-\mathcal{S}_E^{(N)}/\hbar]/Z^{(N)}$ la densità di probabilità che governa il moto del camminatore. Per un qualunque osservabile varrà quindi:

$$\langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} A(\vec{x}_i)}{N_{MC}} .$$

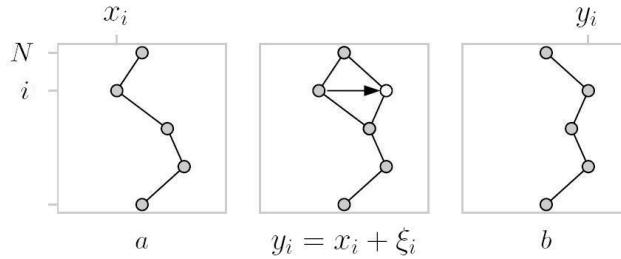


Fig. 2: al camminatore, inizialmente nella configurazione a viene proposta una nuova configurazione b, ottenuta variando casualmente la i -esima posizione.

Ad ogni passo dell'algoritmo si sceglie casualmente una coordinata x_i e si propone una nuova posizione $y_i = x_i + \xi_i$, dove ξ_i è un numero casuale con distribuzione uniforme nell'intervallo $[-\delta, \delta]$. Chiamata \vec{y} la nuova configurazione così ottenuta, si calcola il rapporto:

$$P = \frac{\rho(\vec{y})}{\rho(\vec{x})} = \exp \left[\frac{1}{\hbar} (\mathcal{S}_E(\vec{x}) - \mathcal{S}_E(\vec{y})) \right] .$$

In accordo con l'algoritmo di Metropolis, se $P > 1$, cioè se $\mathcal{S}_E(\vec{y}) < \mathcal{S}_E(\vec{x})$, la nuova configurazione del cammino è accettata; se al contrario $\mathcal{S}_E(\vec{y}) > \mathcal{S}_E(\vec{x})$ il camminatore si sposta in \vec{y} con una probabilità P , rimanendo quindi nella stessa configurazione con probabilità $1 - P$. Una volta definito l'algoritmo si possono misurare agevolmente i valori medi delle grandezze derivate dall'operatore posizione, come potenze $(\hat{x})^n$ o le funzioni di correlazione.

Energie E_0 ed E_1

L'energia dello stato fondamentale è facile da trovare, grazie alla relazione (22):

$$E_0 = m \omega^2 \langle x^2 \rangle . \quad (23)$$

Dato che il fattore esponenziale sopprime i contributi degli stati eccitati, trovare le loro energie è meno banale. Ciò può essere fatto grazie alle funzioni di correlazione: in particolare la funzione di correlazione a due punti $\Gamma_c^{(2)}(\tau, 0)$ è utile per calcolare l'energia del primo stato eccitato E_1 , tramite la cosiddetta funzione di correlazione connessa $\Gamma_c^{(2)}$:

$$\Gamma_c^{(2)}(\tau, 0) = \langle \hat{x}(\tau) \hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(\tau) \rangle \langle \hat{x}(0) \rangle ,$$

dove

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \frac{1}{Z_{QM}} \text{Tr} \left(e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} \right) .$$

Andando a svolgere le medie:

$$\begin{aligned} \Gamma_c^{(2)}(\tau) &= \frac{1}{Z_{QM}} \sum_j \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t} \hat{x}(\tau) \hat{x}(0) | j \rangle - \frac{1}{Z_{QM}^2} \left(\sum_j \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t} \hat{x}(\tau) | j \rangle \right) \left(\sum_j \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t} \hat{x}(0) | j \rangle \right) = \\ &= \frac{1}{Z_{QM}} \sum_j \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-\tau)} \hat{x} e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\tau} \hat{x} | j \rangle - \frac{1}{Z_{QM}^2} \left(\sum_j \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t} \hat{x} | j \rangle \right)^2 = \\ &= \frac{1}{Z_{QM}} \sum_{j,k} \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-\tau)} \hat{x} | k \rangle \langle k | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\tau} \hat{x} | j \rangle - \frac{1}{Z_{QM}^2} \left(\sum_j \langle j | e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t} \hat{x} | j \rangle \right)^2 = \\ &= \sum_{j,k} \frac{e^{-\frac{it}{\hbar}E_j}}{Z_{QM}} e^{\frac{i\tau}{\hbar}(E_j - E_k)} |\langle j | \hat{x} | k \rangle|^2 - \left(\sum_j \frac{e^{-\frac{it}{\hbar}E_j}}{Z_{QM}} \langle j | \hat{x} | j \rangle \right)^2 . \end{aligned}$$

Effettuando la rotazione di Wick ($\beta = it/\hbar$, $\gamma = i\tau/\hbar$) ed effettuando il limite $\beta \rightarrow \infty$ si ottiene:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \Gamma_c^{(2)}(\gamma) = \sum_{k \neq 0} e^{\gamma(E_k - E_0)} |\langle 0 | \hat{x} | k \rangle|^2 .$$

L'energia del primo stato eccitato si trova prendendo il rapporto dei limiti di bassa temperatura di due funzioni di correlazione $\Gamma_c^{(2)}(\gamma)$ e $\Gamma_c^{(2)}(\gamma + \Delta\gamma)$ con $\Delta\gamma > 0$ e γ grande:

$$\lim_{\substack{\beta \rightarrow \infty \\ \gamma \gg E_0^{-1}}} \frac{\Gamma_c^{(2)}(\gamma + \Delta\gamma)}{\Gamma_c^{(2)}(\gamma)} = e^{-(E_1 - E_0)\Delta\gamma} = e^{-\Delta E \Delta\gamma} .$$

L'unico termine che sopravvive è quello con $\Delta E = E_1 - E_0$, in quanto è la differenza di energia minore: le altre vengono sopprese esponenzialmente. Da quest'ultima relazione si ricava:

$$\Delta E = -\frac{1}{\Delta\gamma} \cdot \left[\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left(\ln \frac{\Gamma_c^{(2)}(\gamma + \Delta\gamma)}{\Gamma_c^{(2)}(\gamma)} \right) \right] . \quad (24)$$

Densità di probabilità dell'autostato fondamentale

Altra grandezza di interesse è la distribuzione di probabilità $\rho_0(x)$ dell'autostato fondamentale. Essa si ottiene semplicemente studiando la distribuzione sperimentale ρ_{exp} delle x_j , costruendo un istogramma di frequenza, e mediando le frequenze con cui x_j è incluso nell'i-esimo bin su tutta la durata della simulazione. La larghezza deibins deve essere scelta né troppo piccola, per evitare fluttuazioni troppo grandi, né troppo grande, in modo da non perdere troppi dettagli della distribuzione.

Conoscendo la distribuzione teorica (distribuzione normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma) = \mathcal{N}(0, \frac{x_0}{\sqrt{2}})$), è possibile anche confrontare i momenti della distribuzione sperimentale con quelli della gaussiana attesa:

$$\langle f \rangle_\rho \equiv \int dx f(x) \rho(x) ,$$

$$\mu(\rho) = \langle x \rangle_\rho , \quad \text{Var}(\rho) = \langle (x - \mu)^2 \rangle_\rho ,$$

$$\text{Sk}(\rho) = \frac{\langle (x - \mu)^3 \rangle_\rho}{(\langle (x - \mu)^2 \rangle_\rho)^{3/2}} , \quad \text{Kur}(\rho) = \frac{\langle (x - \mu)^4 \rangle_\rho}{(\langle (x - \mu)^2 \rangle_\rho)^2} - 3$$

Per una gaussiana $\mathcal{N}(x_0, \sigma)$ si ottiene $\mu(\mathcal{N}) = x_0$, $\text{Var}(\mathcal{N}) = \sigma^2$, $\text{Sk}(\mathcal{N}) = 0$ e $\text{Kur}(\mathcal{N}) = 0$. Le medie si effettuano più facilmente se calcolate in funzione dei valori attesi delle potenze della posizione x , usando poi la consueta propagazione degli errori¹⁹ per avere le incertezze sulle grandezze derivate:

$$\langle (x - \mu)^2 \rangle_\rho = \langle x^2 \rangle_\rho - \langle x \rangle_\rho^2 , \quad \langle (x - \mu)^3 \rangle_\rho = \langle x^3 \rangle_\rho - 3\langle x^2 \rangle_\rho \langle x \rangle_\rho + 2\langle x \rangle_\rho^3 ,$$

$$\langle (x - \mu)^4 \rangle_\rho = \langle x^4 \rangle_\rho - 4\langle x^3 \rangle_\rho \langle x \rangle_\rho + 6\langle x^2 \rangle_\rho \langle x \rangle_\rho^2 - 3\langle x \rangle_\rho^4 .$$

Tempo di decorrelazione

Come descritto in precedenza, il tempo necessario alla convergenza della distribuzione di probabilità a quella asintotica dipende strettamente dagli autovalori della matrice stocastica e può essere anche molto elevato se i due autovalori maggiori (dei quali il più grande è sempre pari a 1) sono molto vicini tra loro. È pertanto essenziale uno studio dei tempi di decorrelazione delle distribuzioni di probabilità, in modo da sapere quando è possibile iniziare a mediare le grandezze volute. Possiamo dire di essere giunti alla distribuzione asintotica quando le grandezze studiate raggiungono tutte un valore stazionario: un buon indicatore dell'avvenuta termalizzazione è l'Azione del cammino sebbene, come sarà descritto più avanti, non possiede senso fisico in quanto il suo valore di aspettazione dipende strettamente dal passo temporale scelto per il reticolo.

Considerato che l'andamento dei tempi di decorrelazione va almeno come il numero N di variabili del sistema, è conveniente misurare il tempo della simulazione raggruppando i dati N a N nei cosiddetti *sweeps*. Uno sweep corrisponde, in media, al tempo necessario per aggiornare una singola variabile. Come vedremo immediatamente, l'utilità degli sweeps risiede anche, e soprattutto, nel fatto che dati ottenuti in sequenza sono fortemente correlati: è inutile conservarli tutti, considerando soprattutto che il tempo-macchina a disposizione è finito.

4.3 Studio delle incertezze: il *data bunching*

Un problema che affligge le integrazioni tramite l'algoritmo di Metropolis è l'intrinseca difficoltà dello studio delle incertezze sui valori degli integrali, studio d'altra parte necessario per avere indicazioni sulla bontà dei valori ottenuti. Come già detto, avendo a disposizione dei dati completamente indipendenti relativi ad una distribuzione di probabilità ρ , la sua varianza è stimata come:

$$\text{Var}(\rho) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 .$$

I dati ottenuti durante l'esecuzione dell'algoritmo di Metropolis sono invece fortemente correlati tra di loro, in quanto ogni nuovo dato è ottenuto mediando su un cammino leggermente diverso

¹⁹Se $y = y(x_1, x_2, \dots)$ allora, linearizzando la dipendenza funzionale si ha $\text{Var}(y) = \sum_i \text{Var}(x_i) \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \Big|_{x_i=\bar{x}_i} \right)$.

da quello precedente, e non è quindi possibile usare quest'ultima formula per stimare la varianza. Calcolare le grandezze, anziché ad ogni passo dell'algoritmo, solo tra uno sweep e l'altro porta a ridurre la correlazione, ma non ad eliminarla, poiché i tempi di correlazione tra i vari dati sono generalmente molto maggiori di uno sweep. Un metodo capace di mostrare quando sia lecito trattare i dati come indipendenti è il raggruppamento progressivo dei dati, o *data bunching*.

Supponiamo per esempio di avere un insieme di 2^m dati correlati appartenenti ad una distribuzione della quale si voglia stimare valore atteso e varianza. Il valore atteso sarà dato semplicemente dalla media dei dati x_i , ma la varianza è sottostimata, perché i dati consecutivi tendono ad essere raggruppati. Allora si raggruppano a due a due i dati producendo un set di 2^{m-1} dati, meno correlati, dotati naturalmente della stessa media, ma caratterizzati da una varianza campionaria maggiore. Iterando il procedimento la varianza tende a quella vera della simulazione, rimanendo circa costante dal momento in cui la taglia del *bunch*, cioè del raggruppamento, supera il tempo di correlazione dei dati. Quando i raggruppamenti diventano molto grossi la varianza può invece fluttuare molto, a seconda della "storia" della simulazione.

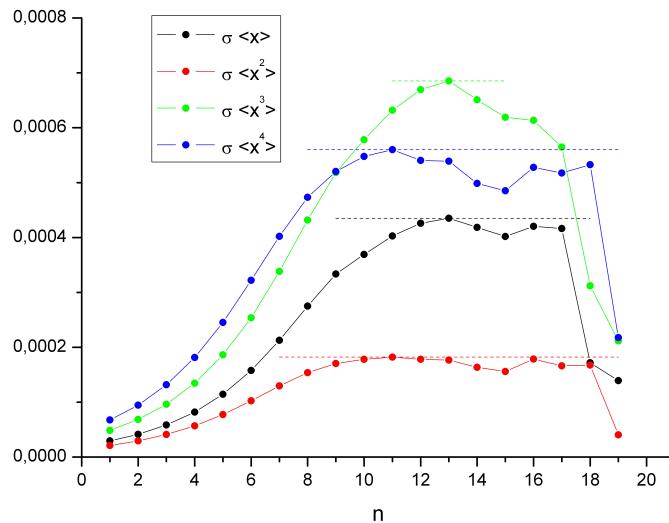


Fig. 3: tipico andamento delle incertezze sulle medie durante il data bunching. La taglia del bunch è 2^{n-1} . Le linee tratteggiate indicano la sigma effettivamente utilizzata per le successive elaborazioni. Si noti come il plateau della sigma su $\langle x^3 \rangle$ sia molto meno evidente: in questo caso tutto quello che si può fare è prendere il massimo valore raggiunto durante il bunching. Grafico ottenuto da una simulazione con $N = 10000$ e 600000 sweeps totali (le medie sono calcolate solo sugli ultimi $2^{19} = 524288$ sweeps).

4.4 Probabilità di accettazione

Ad ogni passo dell'algoritmo di Metropolis si propone al camminatore, inizialmente nella configurazione $\vec{x} = (x_0, x_1, \dots, \xi_j, \dots, x_{N-1})$, una nuova configurazione $\vec{y} = (x_0, x_1, \dots, \xi_i, \dots, x_{N-1})$ dove:

- i è un numero intero estratto casualmente con distribuzione uniforme tra 0 e $N - 1$;
- ξ_i è un numero reale estratto casualmente, sempre con distribuzione uniforme, nell'intervallo $[x_i - \delta, x_i + \delta]$.

Il valore di δ è scelto in modo da aversi tassi di reiezione né troppo elevati né troppo ridotti: con probabilità di accettazione P_{acc} molto piccole il camminatore starebbe fermo la maggior parte del

tempo, mentre con probabilità troppo elevate il camminatore si sposterebbe solo in configurazioni molto vicine tra di loro, aumentando il tempo necessario per l'esplorazione di una vasta area nello spazio delle configurazioni del cammino: una buona norma è quella di tenere $P_{acc} \sim 0.5$, scegliendo opportunamente δ . Valori tipici usati nelle simulazioni vanno da $\delta = 0.5$ a $\delta = 2$, a seconda degli altri parametri, ottenendo probabilità P_{acc} comprese tra 0.3 e 0.7.

Il fatto che la miglior scelta di P_{acc} sia intorno a 0.5 è vero, come è facilmente intuibile, supponendo che lo spazio delle configurazioni sia metrico e che $P_{acc}(\vec{x}, \vec{y})$ sia una funzione sufficientemente regolare decrescente in $|\vec{y} - \vec{x}|$. Per esempio possiamo definire come distanza tra due configurazioni la norma euclidea del vettore $\vec{y} - \vec{x}$, che si riduce a $|\xi_i - x_i|$: la regolarità di P_{acc} è assicurata dalla regolarità del potenziale armonico e dal termine cinetico, che lega strettamente (in particolare nel limite $\epsilon \rightarrow 0$) la j -esima posizione ai suoi primi vicini. La situazione sarebbe diversa, ad esempio, nel caso di una doppia buca di potenziale, dove la dinamica della simulazione è fortemente rallentata.

5 Studio numerico

Riassumiamo rapidamente le convenzioni che saranno utilizzate nell'esposizione dei risultati delle simulazioni numeriche. L'intervallo di tempo che contiene il cammino è discretizzato in N istanti separati di ϵ l'uno dall'altro. Ogni configurazione (cammino) assunta dal camminatore è identificata da N posizioni corrispondenti ad altrettanti istanti di tempo: ad esempio si ha per le posizioni iniziali e finali $x_0 \equiv x(0)$ e $x_{N-1} = x((N-1)\epsilon)$.

Grandezza	Simbolo
Cammino	$\vec{x} = (x_0, x_1, \dots, x_{N-1})$
Posizione al tempo i -esimo	$x(t_i) \equiv x_i$
Numero di suddivisioni dell'intervallo temporale	N
Passo temporale	$\epsilon = t_{i+1} - t_i$
Lunghezza (temporale) del cammino	$N \cdot \epsilon$
Numero di sweeps totali della simulazione	T_{MC}
Numero di sweeps sui quali vengono calcolate le medie	T_{avg}
Posizione proposta al camminatore	$\xi_i = \text{rand}(x_i - \delta, x_i + \delta)$
Rapporto accettazioni / passi dell'algoritmo	R

Tab. 1: *convenzioni impiegate nel seguito.*

I parametri relativi all'Hamiltoniana e all'Azione del sistema (\hbar , la massa dell'oscillatore m e la pulsazione dell'oscillatore ω) vengono mantenuti di ordine 1, in modo da minimizzare problemi di arrotondamento. I risultati sono riportati per comodità in unità arbitrarie.

5.1 Termalizzazione

La prima operazione da compiere è senz'altro quella di misurare il tempo necessario affinché la distribuzione di probabilità raggiunga quella asintotica, anche detto tempo di termalizzazione, con termine mutuato dalla termodinamica. È stata effettuata un'analisi dei tempi (misurati come sempre in sweeps) di termalizzazione per varie taglie del reticolo N e per diversi valori del passo temporale ϵ . Il cammino iniziale di ogni simulazione è costruito a partire da N numeri casuali nell'intervallo $[-2, 2]^{20}$; si mantiene inoltre $\hbar = \omega = m = 1$ e $\delta = 0,5$.

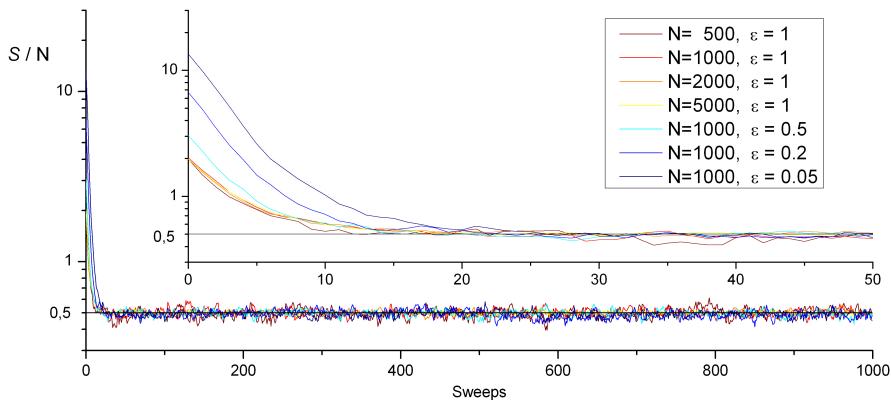


Fig. 4: *andamento dell'Azione Euclidea S , normalizzata dividendo per N , durante lo svolgimento della simulazione. Nel grafico più grande sono mostrati 1000 sweeps, mentre in quello più piccolo i primi 50 delle stesse serie. La retta nera corrisponde all'asintoto $S_\infty/N = 0.5$.*

²⁰ La scelta dell'intervallo è motivata dalla larghezza della distribuzione $\rho_0(x)$ aspettata, ma è relativamente poco influente ai fini della termalizzazione.

Uno degli indicatori che permettono di verificare la termalizzazione è l’Azione Euclidea del sistema. Sfortunatamente si vede che l’Azione, calcolata numericamente come

$$\mathcal{S} \approx \sum_i \epsilon \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\epsilon^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right] = N \epsilon \left[\frac{m}{2} \frac{\langle (x_{i+1} - x_i)^2 \rangle}{\epsilon^2} + \frac{m \omega^2}{2} \langle x_i^2 \rangle \right],$$

diverge nel limite $\epsilon \rightarrow 0$. La parte cinetica si comporta infatti come[5]:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle (x_{i+1} - x_i)^2 \rangle}{\epsilon^2} = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{\epsilon} + \mathcal{O}(1).$$

Abbiamo quindi, che per piccoli ϵ , $\Delta x \approx \sqrt{\epsilon}$. Questo comportamento è legato alla struttura frattale del cammino: esso non riproduce infatti nel limite al continuo una curva differenziabile, ma piuttosto una varietà frattale di dimensione di Hausdorff pari a 2[10]. Anche se esiste una velocità media, non esiste nessuna velocità quadratica media in nessun punto del cammino. Un possibile rimedio è ridefinire l’energia cinetica nel seguente modo, dovuto a Feynman e Hibbs[6]:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} m \left\langle \frac{(x_{i+1} - x_i)}{\epsilon} \cdot \frac{(x_i - x_{i-1})}{\epsilon} \right\rangle.$$

In questo modo la velocità quadratica media si comporta nel modo atteso mandando a zero ϵ . In realtà non è necessario compiere questa operazione, in quanto la prima definizione dell’Azione rimane ugualmente un buon indicatore per la termalizzazione, anche se perde il significato fisico a causa della cattiva dipendenza dai parametri della discretizzazione. L’energia dello stato fondamentale si può infatti calcolare tramite il teorema del viriale, come detto precedentemente, sfruttando il fatto che gli operatori dipendenti localmente dal tempo²¹ non soffrono di questi problemi.

Tutti i sistemi raggiungono rapidamente la termalizzazione, tipicamente entro una cinquantina di sweeps; i sistemi con ϵ minore partono da un’azione maggiore²² e termalizzano leggermente più lentamente. Si possono fissare i dati con funzioni esponenziali $f(t) = 0,5 + Ae^{-Bt}$ per verificare quantitativamente a quanto corrispondano i tempi di termalizzazione, decidendo un valore di soglia dell’Azione (per esempio $\bar{\mathcal{S}}_{term} = 0.501$) per il quale l’andamento esponenziale sia indistinguibile dal rumore “termico”.

Nel caso peggiore, cioè $N = 1000$ ed $\epsilon = 0,05$, si ottiene $A = 22,652(62)$ e $B = 0,22517(97)$, da cui, imponendo $Ae^{-Bt_{term}} = 0,01$ si ottiene $t_{term} \approx 34$ sweeps.

Tutto ciò è valido sempre nell’ipotesi che il valore di δ sia tale da garantire un rapporto accettazioni / passi dell’algoritmo prossimo a 0.5, altrimenti la simulazione risulterebbe fortemente rallentata. Ad esempio, con $N = 1000$, $\epsilon = 1$ e $\delta = 1$ si ottiene $R = 0.6750$ ed un tempo di termalizzazione pari a circa 16 sweeps, mentre con $\delta = 0.05$, si ha $R = 0.9743$ ed un tempo di termalizzazione superiore a 1500 sweeps.

²¹Essenzialmente le funzioni di x_i .

²²Questo perché il cammino iniziale, essendo formato da numeri estratti casualmente, è molto discontinuo e l’energia cinetica, di conseguenza, molto elevata. Diminuendo ϵ si aumenta l’importanza del termine cinetico e quindi la simulazione tenderà a rendere più “liscio” il cammino. Si dimostra facilmente che $\langle \mathcal{S}_0 \rangle = N\epsilon^{\frac{2}{3}} \left(\frac{2}{\epsilon^2} + 1 \right)$.

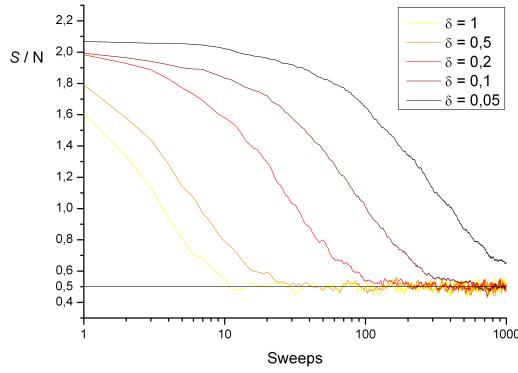


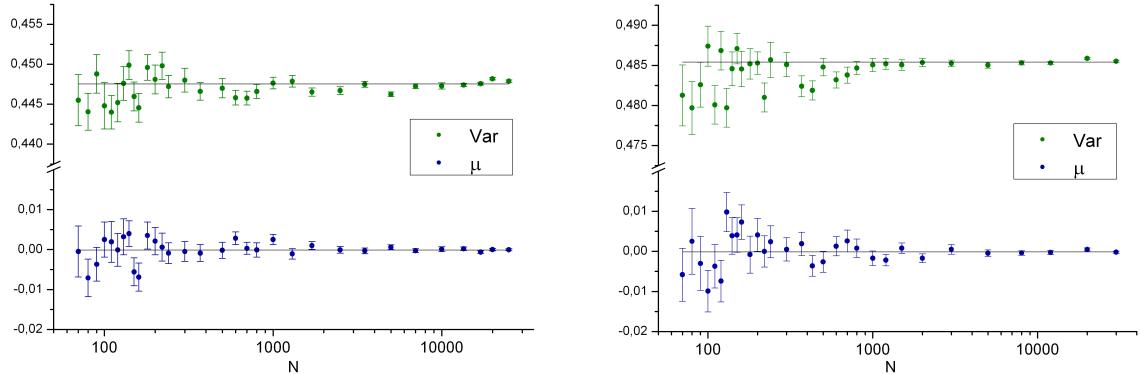
Fig. 5: andamento dell’Azione Euclidea \mathcal{S} , normalizzata dividendo per N , per vari valori di δ , con $N = 1000$ ed $\epsilon = 1$.

5.2 Effetti di taglia finita ($N < \infty$)

Avendo ora una stima dei tempi di termalizzazione possiamo ora studiare i valori delle osservabili al variare dei parametri della discretizzazione, N ed ϵ . Dato che l’autostato fondamentale dell’oscillatore è una gaussiana, possiamo calcolare i primi momenti delle distribuzioni ottenute dalle simulazioni con quelli della gaussiana relativa all’autostato fondamentale, in modo da poter verificare in che modo i parametri influenzino i risultati.

Per ottenere i risultati corretti ci si aspetta che sia necessario usare ϵ sufficientemente piccoli rispetto a $T_E = 2\pi\hbar/E_0$ da approssimare bene il limite al continuo, mantenendo nel frattempo $N\epsilon$ sufficientemente grande da ridurre le fluttuazioni “termiche” delle medie ottenute sul singolo sweep.

Per prima cosa variamo N a valori di ϵ fissati.



Figg. 6, 7: $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ in funzione della taglia del reticolo. A sinistra $\epsilon = 1$, $T_{avg} = 2^{13}$; a destra $\epsilon = 0.5$, $T_{avg} = 2^{15}$. Sono evidenziati i valori delle medie su tutti gli N (vedi testo).

I dati mostrano come all’aumentare di N non cambi il valor medio delle grandezze (sono mostrati nelle figure 5 e 6 solo $\mu(x) = \langle x \rangle$ e $\text{Var}(x) \approx \langle x^2 \rangle$) bensì si riducano le fluttuazioni sulle stesse. Utilizzare cammini più lunghi porta infatti a mediare su un numero maggiore di posizioni, riducendo l’incertezza sulle medie che, come ricordiamo, va come $1/\sqrt{N}$. La media pesata dei dati nei due casi esaminati porta ai risultati esposti nella seguente tabella:

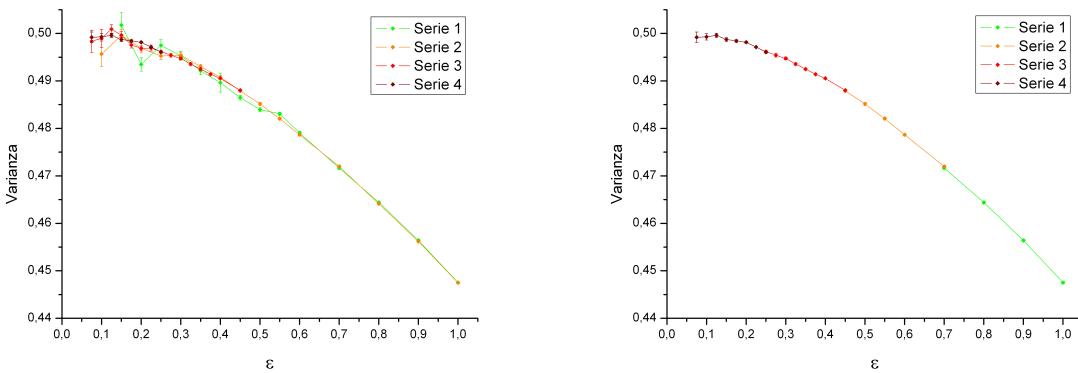
	$\epsilon = 1, T_{avg} = 2^{13}$	$\epsilon = 0.5, T_{avg} = 2^{15}$
$\langle x \rangle = \mu$	-0.00009 (13)	-0.00012 (17)
$\langle x^2 \rangle$	0.447543 (72)	0.485417 (77)
$\langle x^3 \rangle$	-0.00013 (18)	0.00004 (25)
$\langle x^4 \rangle$	0.60106 (21)	0.70692 (24)
Var	0.447542 (72)	0.485416 (77)
Sk	0.00003 (85)	0.0006 (11)
Kurt	0.0005 (14)	0.0002 (14)

Dai valori dei momenti della distribuzione si vede immediatamente come l'autostato abbia le caratteristiche di una gaussiana centrata in 0, come predetto dalla teoria, ma abbia una varianza inferiore a quanto atteso, cioè $\text{Var}(\rho_0) = \frac{\hbar}{2m\omega} = 0.5$ con $\hbar = m = \omega = 1$. L'effetto però non dipende da N , bensì da ϵ , come vedremo immediatamente.

5.3 Effetti di discretizzazione ($\epsilon \gtrsim 0$), autostato fondamentale

Studiamo adesso il sistema nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, per diversi valori di N . Quello che ci si aspetta è che la varianza della distribuzione si avvicini ad 1/2 al diminuire di ϵ , ma riducendo ϵ si riduce anche la lunghezza temporale del cammino, cosa che porta ad un aumento delle fluttuazioni. Naturalmente è impossibile aumentare indefinitivamente la lunghezza del cammino a causa del crescente peso computazionale. Nei prossimi grafici è mostrata la varianza della distribuzione sperimentale per vari valori di ϵ , raggruppati in quattro serie caratterizzati da diversi N e da diverse durate della simulazione.

Serie	N	T_{MC}	T_{avg}
1	5000	20000	$16384 = 2^{14}$
2	7000	40000	$32768 = 2^{15}$
3	7000	140000	$131072 = 2^{17}$
4	10000	600000	$524288 = 2^{19}$



Figg. 8, 9: la varianza della distribuzione sperimentale in funzione di ϵ per vari valori di N e T_{avg} . Per rendere più chiaro l'andamento la figura di destra mostra solo i dati poco influenzati dalle fluttuazioni.

La varianza raggiunge (entro l'incertezza) il valore atteso per valori $\epsilon \sim 0.1$. Per migliorare ulteriormente la precisione, per esempio usando $\epsilon = 0.05$, sarebbe necessario aumentare di almeno un ordine di grandezza N , rendendo troppo elevato il tempo-macchina necessario.

5.4 Stato fondamentale ed energie

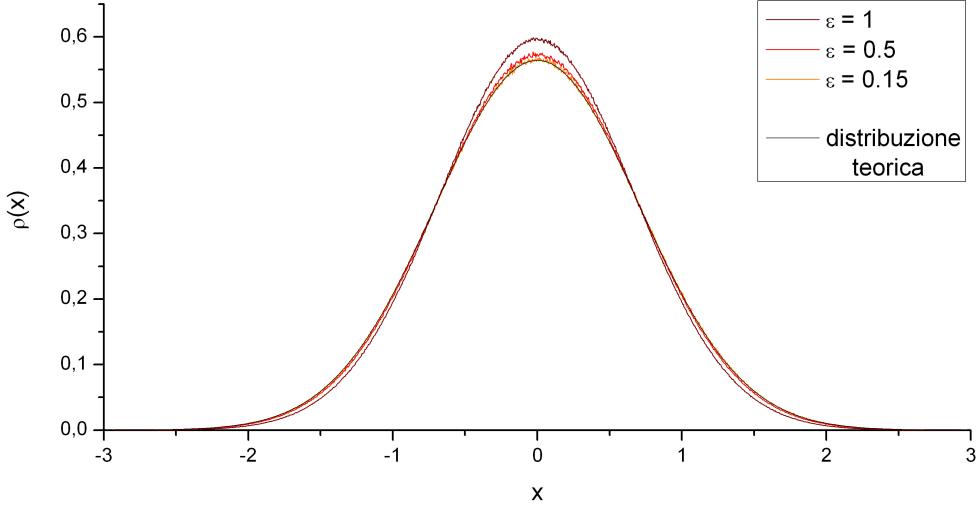


Fig. 10: $\rho_{exp}(x)$ per tre diversi valori di ϵ . $N = 10000$, $T_{MC} = 50000$. Media sugli ultimi 30000 sweeps, 1500 bins.

Nella figura 10 è riportata la distribuzione di probabilità dell'autostato fondamentale $\rho_{exp}(x)$ confrontata con quella teorica $\rho_0(x) = 1/\sqrt{\pi} \exp(-x^2/2)$, con $1/\sqrt{\pi} = 0.564189\dots$. Possiamo vedere come per $\epsilon = 0.15$ la distribuzione sperimentale sia praticamente sovrapposta a quella teorica. Un fit gaussiano eseguito su questi dati porta naturalmente una varianza leggermente inferiore $\text{Var}(\rho_{exp}) = 0.49863(15)$, proprio per il fatto che non è possibile usare valori di ϵ troppo piccoli senza sacrificare la precisione del risultato.

Sfruttando i risultati ottenuti nel paragrafo 4.2 possiamo ora calcolare le energie dello stato fondamentale e la differenza in energia tra questa e il primo stato eccitato. Possiamo usare uno dei dati ottenuti durante lo studio della varianza, per l'esattezza quello relativo a $\epsilon = 0.075$. La media su 2^{19} sweeps porta a $\langle x^2 \rangle = 0.4992(11)$. Avendo posto $m = \hbar = \omega = 1$, per il teorema del viriale

$$E_0^{exp} = m\omega^2 \langle x^2 \rangle = 0.4992(11) ,$$

valore in pieno accordo con la predizione teorica

$$E_0^{theo} = \frac{\hbar\omega}{2} = 0.5 .$$

Per calcolare l'energia del primo stato eccitato è necessario studiare l'andamento della correlazione media tra due posizioni $\langle x(t)x(t+\tau) \rangle$ in funzione della loro distanza temporale τ : lo studio è mostrato in figura 11.

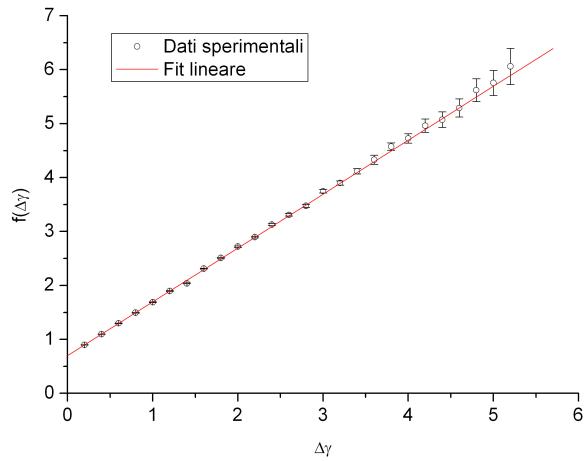


Fig. 11: $f(\Delta\gamma) = -\ln \left\langle \Gamma_c^{(2)}(\gamma + \Delta\gamma) \right\rangle$ in funzione di $\Delta\gamma$. $N = 5000$, $T_{MC} = 35000$, $T_{avg} = 2^{15} = 32768$, $\epsilon = 0.2$, $\hbar = \omega = m = 1$.

Un fit lineare fornisce per la pendenza della retta $m = 0.9992(27)$ e per il termine noto $q = -\ln \left\langle \Gamma_c^{(2)}(\gamma) \right\rangle = 0.6963(26)$. Dalla formula (24) sappiamo che la differenza di energia tra lo stato fondamentale ed il primo stato eccitato è data proprio dal coefficiente angolare della retta²³, quindi otteniamo:

$$\Delta E^{exp} = E_1 - E_0 = 0.9992(27) ,$$

pienamente d'accordo con quanto aspettato

$$\Delta E^{theo} = \hbar\omega = 1 .$$

²³Dividere l'argomento del logaritmo per $\left\langle \Gamma_c^{(2)}(\gamma) \right\rangle$ equivale a sottrarre il termine noto.

Riferimenti bibliografici

- [1] Paul Adrien M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sovjetunion* **3**, 64 (1933).
- [2] Paul Adrien M. Dirac, I principi della Meccanica Quantistica, Bollati Boringhieri, seconda edizione, 1976.
- [3] Richard P. Feynman, *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*, Ph. D. thesis, Princeton University, 1942.
- [4] Richard P. Feynman, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*. Rev. Mod. Phys. 20, 367 - 387 (1948)
- [5] M. Creutz, B. Freedman, *A Statistical Approach to Quantum Mechanics*. Ann. Phys. vol 132, pagg. 427-462 (1981).
- [6] Richard P. Feynman, Albert R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, 1965.
- [7] I. H. Duru, H. Kleinert, *Solution of the Path Integral for the H-Atom*, Physic Letters, volume 84B, 2, 18 giugno 1979.
- [8] Richard MacKenzie, *Path Integrals Method and Applications*. 24 aprile 2001, ArXiv: quant-ph/0004090v1
- [9] Hagen Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. World Scientific Publishing Co., Singapore, quarta edizione (giugno 2006). Disponibile online: <http://users.physik.fu-berlin.de/~kleinert/re.html#B8>
- [10] Marco Roncadelli, Antonio Defendi, *I Cammini di Feynman*. Quaderni di Fisica Teorica, Università degli Studi di Pavia, Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica.
- [11] Werner Krauth, *Statistical Mechanics - Algorithms and Computations*. Oxford University Press (2006).
- [12] Luciano M. Barone, Enzo Marinari, Giovanni Organtini, Federico Ricci-Tersenghi, *Programmazione Scientifica*, Pearson Education (2006).
- [13] Bernd A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*. Singapore, World Scientific (2004).
- [14] Jean Zinn-Justin, *Path Integrals in Quantum Mechanics*. Oxford, Oxford University Press (2005).

A Estensioni dell'integrale Gaussiano

In questa appendice si descrivono alcune utili formule riguardanti, sostanzialmente, generalizzazioni dell'integrale della Gaussiana. I seguenti integrali sono tutti integrali impropri eseguiti sull'intero asse reale: gli estremi d'integrazione saranno omessi ove non ci sia pericolo di confusione.

Gaussiana e prime generalizzazioni

$$\int \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$$

Dim.: chiamando I l'integrale da calcolare:

$$\begin{aligned} I^2 &= I \times I = \int \exp(-x^2) dx \times \int \exp(-y^2) dy = \iint \exp(-x^2 - y^2) dx dy = \\ &= \int_0^{+\infty} d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \rho \exp(-\rho^2) = \pi \Rightarrow I = \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

In realtà la dimostrazione richiederebbe di trattare gli integrali impropri più cautamente, integrando prima $I^2(a) = (\int_{-a}^a dx \exp(-x^2))^2$ e poi passando al limite per $a \rightarrow +\infty$ sfruttando il teorema dei carabinieri (l'area del quadrato di lato $2a$ è compresa entro quella dei cerchi di raggio a e $\sqrt{2}a$).

Con dei semplici cambi di variabile si arriva a:

$$\int \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \text{con } a \in \mathbb{R}^+$$

$$\int \exp(-ax^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \quad \text{con } a \in \mathbb{R}^+, b \in \mathbb{R}$$

Argomenti complessi

Se b è un numero complesso non si presentano particolari problemi di convergenza, dato che la funzione integranda è data dal prodotto di una gaussiana traslata $e^{-ax^2 + \Re(b)x}$ e di una funzione oscillante $e^{i\Im(b)}$, avendo chiamato $b = \Re(b) + i\Im(b)$. L'integrale sarà quindi:

$$\int \exp(-ax^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \quad \text{con } a \in \mathbb{R}^+, b \in \mathbb{C}$$

Se b è immaginario puro, il risultato è proporzionale alla trasformata di Fourier della gaussiana, anch'essa una gaussiana nella variabile $\Im(b)$.

Se $a = i\alpha$ è immaginario puro è necessario scegliere una delle due determinazioni possibili nel secondo membro delle uguaglianze precedenti:

$$\int \exp(-i\alpha x^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} - \frac{i\pi}{4}\right) \quad \text{con } \alpha \in \mathbb{R}^+, b \in \mathbb{C}$$

Prefattore polinomiale

Una interessante generalizzazione, legata agli integrali di Fresnel, consiste nel calcolo di integrali del tipo:

$$I_n = \int x^n \exp(-ax^2) dx$$

Notiamo immediatamente che per n dispari l'integrale è nullo per simmetria. Nel caso $n = 0$ otteniamo:

$$I_0 \equiv \int \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \text{con } a \in \mathbb{R}^+$$

Deriviamo ora ambo i membri rispetto ad a . Al primo membro otteniamo:

$$\frac{\partial I_0(a)}{\partial a} = \int -x^2 \exp(-ax^2) dx \equiv -I_2(a)$$

ed in generale:

$$I_n = -\frac{\partial I_{n-2}}{\partial a}$$

Svolgendo le derivate al secondo membro:

$$I_2 = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{a}} \right) = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$I_4 = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{1}{a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \right) = \frac{3}{2} \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

...

Ricorsivamente si dimostra la formula generale:

$$I_n = \begin{cases} \frac{(2n-1)!!}{2^{n/2}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} & n \text{ pari} \\ 0 & n \text{ dispari} \end{cases}$$