

# Der harmonische Oszillator

Heinrich Campe

4. Mai 2021

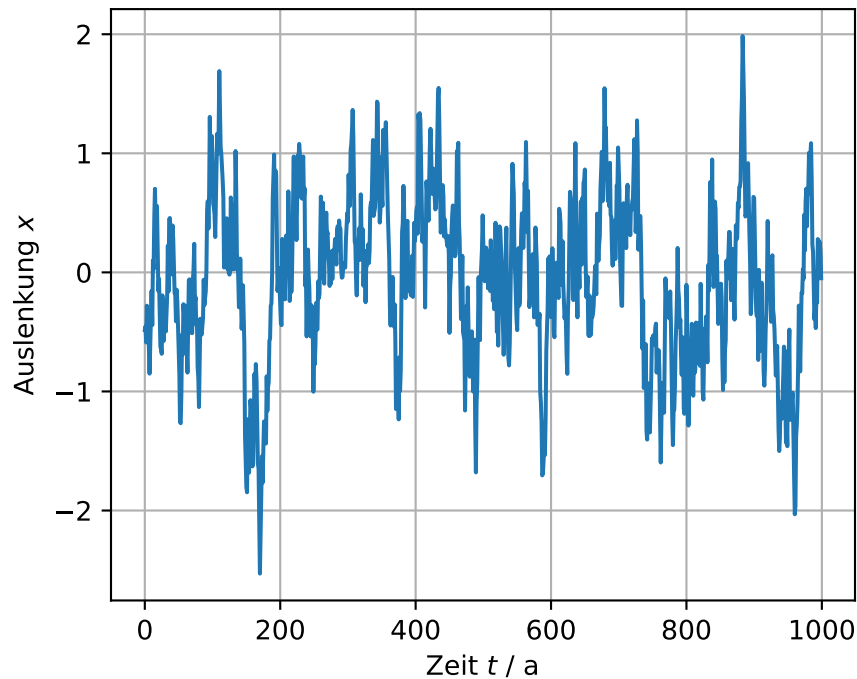
Gem. [1] wurde der harmonische Oszillator mit dem Metropolisalgorithmus verwendet. Orientiert an den dortigen Parametern, wurde durchgehend

$$\begin{aligned}m &= \omega = \hbar = 1, \\ \text{numberOfSights} &= N = 1000, \\ \text{deltaX} &= \Delta = 0.63, \\ \text{deltaT} &= 0.1, \\ \text{iterationsPerSight} &= \text{nhit} = \bar{n} = 10\end{aligned}$$

verwendet. Es wurde jeweils ein „kalter“ Start, also mit einem Pfad konstant bei Null gewählt.

## 1 Eine typische Trajektorie

Nach 10000 sweeps sieht eine Trajektorie des Systems z.B. so aus:



## 2 Erreichen des Equilibriums

Zunächst sollte die Konvergenz verschiedener Größen mit zunehmender Zeit betrachtet werden. Dazu wurden ihre Erwartungswerte jeweils in Abhängigkeit von der Zahl der sweeps dargestellt. Die Erwartungswerte einer Observablen  $f(x)$  werden je sweep nach folgendem Schätzer berechnet:

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_i f(x_i), \quad (1)$$

die Standardabweichung lässt sich aus folgendem Schätzer für die Varianz berechnen:

$$s_f = \frac{1}{N-1} \sum_i (f(x_i) - \bar{f})^2. \quad (2)$$

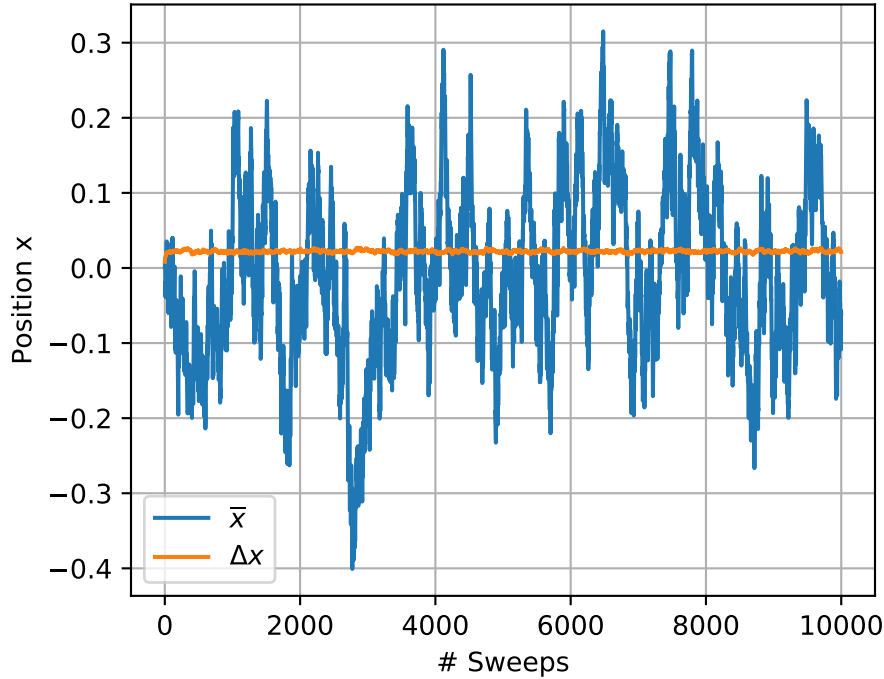
Der Standardfehler auf  $\bar{x}$  ist dann z.B.  $\Delta x = \sqrt{\frac{s_x}{N}}$ . Hier wurden als Größen die Auslenkung  $x$  selbst betrachtet, sowie die Grundzustandsenergie, für die sich mit dem Virialsatz nach [1]

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \langle x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$$

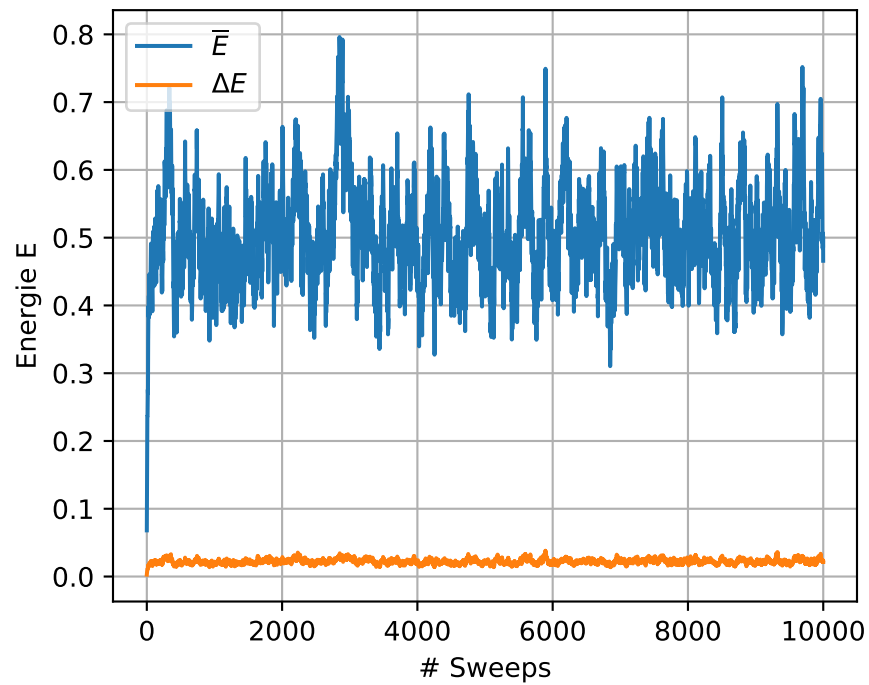
ergibt.

Für die Position  $x$  wird keine Konvergenz erwartet, sie sollte lediglich um 0 fluktuieren. Das war auch der Fall:

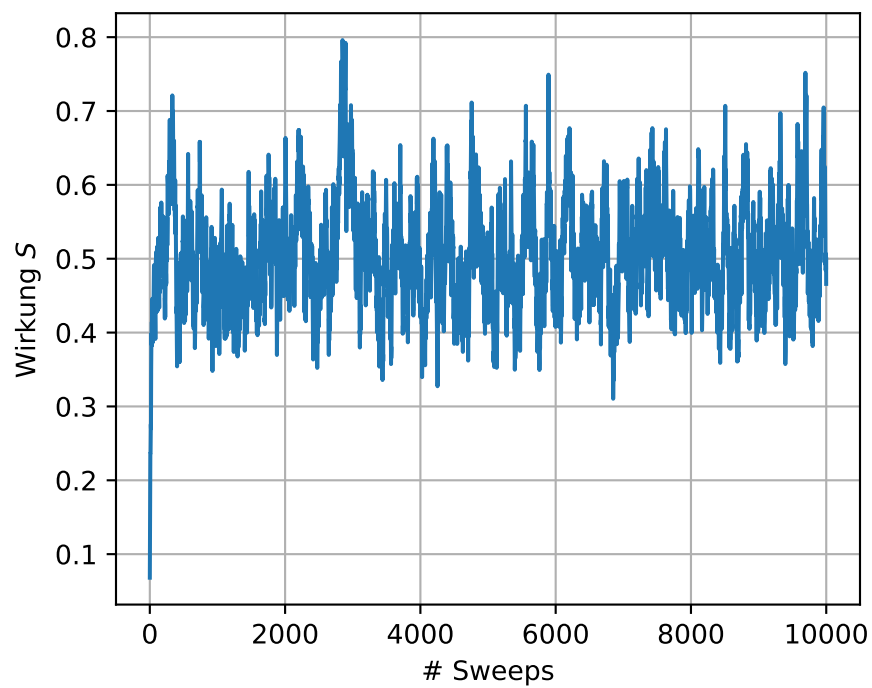
$$\bar{x} = -0.009648227167641094 \pm 0.0002191643509741649$$



Für die Energie erwarten wir eine Stabilisierung. Dies ist auch so zu erkennen, das Plateau wird bei  $\bar{E} \approx 0.5$  erreicht, was durchaus dem theoretischen Wert von  $E_0^{\text{theo}} = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{1}{2}$  entspricht.



Die (globale) Wirkung des Pfads  $S$  sollte ebenfalls konvergieren, wie auch gemessen wurde:



Insgesamt ist festzustellen, dass der Pfad zum Equilibrium nach ca. 100 sweeps konvergiert.

### 3 Autokorrelation

In [2] ist die Autokovarianz für den Schätzer einer Zufallsgröße  $X_i$ , der in einem iterativen Verfahren mehrfach bestimmt wird, wie folgt definiert:

$$C_X(t) = \langle (X_i - \mu)(X_{i+t} - \mu) \rangle.$$

Hierbei ist  $X_i$  der Schätzer nach dem  $i$ ten Schritt und  $X_{i+t}$  der Schätzer  $t$  Schritte später.  $\mu$  ist der Mittelwert aller  $X_i$ .

Die Autokovarianz wurde hier für den Schätzer für  $x^2$  bestimmt. Dazu wurden insgesamt 10000 sweeps durchgeführt und die Trajektorien nach jedem Sweep gespeichert. Die ersten 100 sweeps werden hier nicht berücksichtigt, da erst Messungen am equilibrierten System vorgenommen werden. Für jede Trajektorie wird danach der Schätzer für  $x^2$  bestimmt. Als Schätzwerte für die Kovarianz werden anschließend nach [2] folgende Werte berechnet:

$$C(t) = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (X_i - \bar{X}_N)(X_{i+t} - \bar{X}_N),$$

wobei

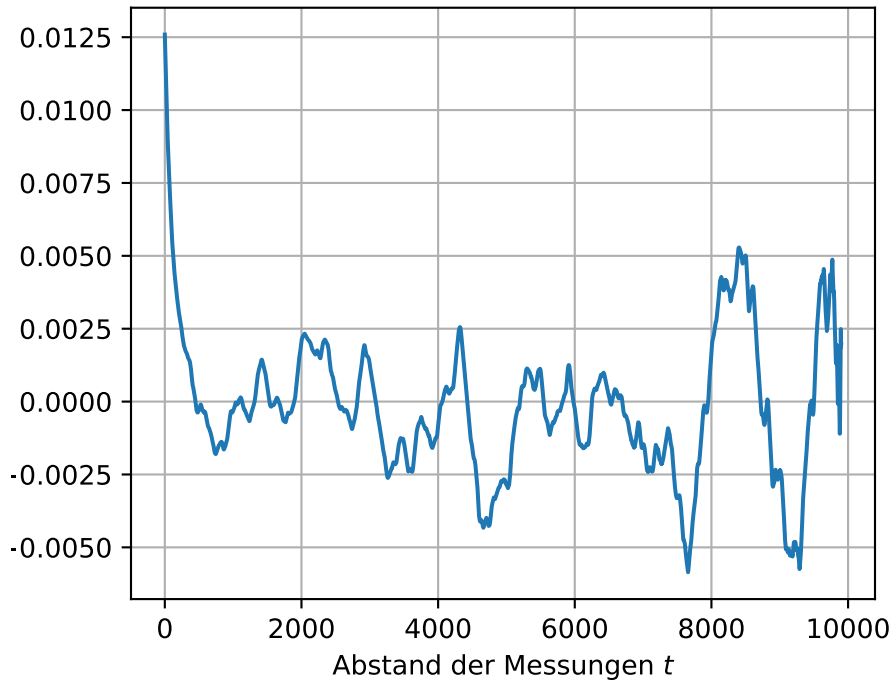
$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_i X_i$$

ist und die betrachtete Zufallsvariable hier

$$X = x$$

ist.

Das Ergebnis sieht dann wie folgt aus:



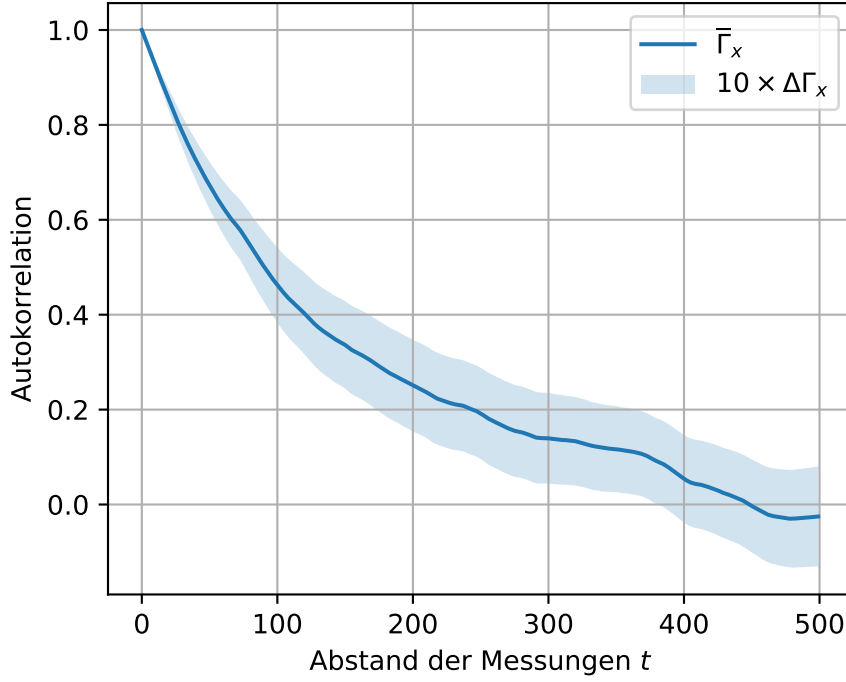
Die Autokorrelation ist die normalisierte Version der Autokovarianz:

$$\Gamma(t) = \frac{C(t)}{C(0)}.$$

Ihre Varianz kann man nach [2] wie folgt abschätzen:

$$\text{Var}(\bar{\Gamma}_X(t)) = \sum_{i=1}^{t+\Lambda} \{\bar{\Gamma}(i+t) + \bar{\Gamma}(i-t) - 2\Gamma(i)\Gamma(t)\}^2.$$

Hier sieht sie im „gutartigen“ Bereich (also der Bereich des exponentiellen Abfalls ganz zu Beginn) so aus:



Um die Autokorrelation bei der Berechnung der Fehler zu berücksichtigen, kann die sog. integrierte Autokorrelationszeit durch [2]

$$\tau_{\text{int},X} = \frac{1}{2} \sum_{t=-W}^W \Gamma_X(t)$$

abgeschätzt werden. Hierbei ist  $W$  der Wert für  $t$ , bei dem  $\Gamma$  erstmals innerhalb des Fehlers 0 wird.

Für den vorliegenden Fall wurde folgendes ermittelt:

$$W = 443, \tau_{\text{int},x} = 135,0359356 \pm 5,6875623.$$

Das Ergebnis für  $W$  entspricht durchaus dem, was man bei Betrachtung der Abb. erwarten würde und bei der integrierten Autokorrelationszeit ist zu bemerken, dass sie in etwa  $\tau_{\text{exp}}$  entsprechen sollte. Dies war hier auch der Fall: für  $t \approx 120$  ist  $\Gamma$  auf  $\frac{1}{e} \approx 0.4$  abgefallen.

Hiermit kann nun der Standardfehler auf  $x$  durch den Faktor  $\sqrt{2\tau_{\text{int},x}}$  [2] korrigiert werden, s.d.

$$\bar{x} = -0,0096482 \pm 0,0036017$$

ist.

### 3.1 Grundzustandswellenfunktion und -energie

Unter Berücksichtigung der zuvor gewonnenen Erkenntnisse wurden nun 1000 Simulationen mit je 100 sweeps durchgeführt und Pfadkonfiguration jeweils vollständig gespeichert. Zunächst kann nun die Grundzustandsenergie  $E$  bestimmt werden. Wir finden:

$$E = 0,5156116 \pm 0,0052976.$$

Im Fehlerbereich ist der theoretische Wert

$$E_{\text{theo}} = 0,4993762$$

leider noch nicht eingeschlossen.

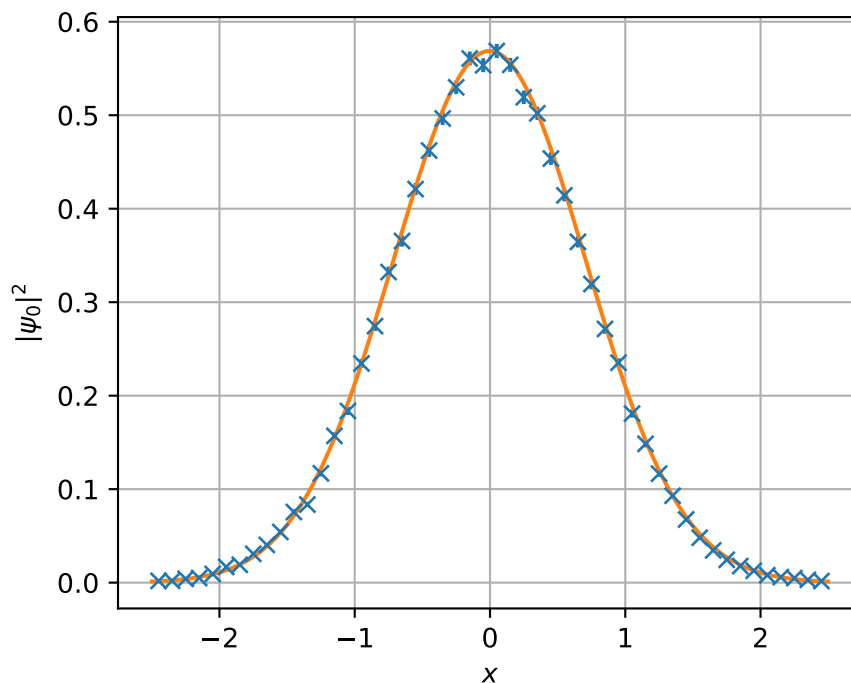
Für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes wurden eine große Anzahl an sweeps durchgeführt. Zunächst wurde das System mit 100 sweeps equilibriert, dann wurde die Trajektorie alle 500 sweeps gespeichert, um Autokorrelation zu vermeiden. Die Positionen der einzelnen Punkte wurde dann in einem Histogramm aufgetragen, wie von [1] verwendete. An diese Daten wurde dann eine Gauß-Glocke

$$|\psi_0(x)|^2 = A \cdot \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

angepasst. Hierbei wurde der Fehler auf die Bin-Einträge  $n_i$  durch  $\sqrt{n_i}$  abgeschätzt, was sich mit der Zählexperiment-artigen Natur dieser Methode motivieren lässt. Qualitativ ist das Ergebnis durchaus in Ordnung:

```
## 5683
```

```
## <ErrorbarContainer object of 3 artists>
```



```
## (array([0.56418958, 0.          , 0.5          ]), array([ 0.56897236, -0.00298465,  0.50232071]), array(
```

Aber bei Betrachtung der Ergebnisse der Anpassung:

	Theorie	Messwert	Fehler
$A$	0,5641896	0,568972361	0,0008874824
$\mu$	0,0000000	-0,002984645	0,0046000770
$\sigma$	0,5000000	0,502320707	0,0016041871

Auch wenn die gemessenen Werte *nah* an den theoretischen Parametern liegen, sind diese in keinem Fall in den Fehlerbereich eingeschlossen. Hier bedarf es einer besseren Fehlerbetrachtung für die Bins.

## Literatur

- [1] M Creutz und B Freedman. „A statistical approach to quantum mechanics“. In: *Annals of Physics* 132.2 (1981), S. 427–462.
- [2] M Petschlies und C Urbach. *Computational Physics*. 2020.