Campo scalare in 2D

Monica Cesario

29 marzo 2025

1 Introduzione

Si è effettuato uno studio numerico tramite tecniche Montecarlo della termodinamica di un campo scalare in due dimensioni.

2 Cenni teorici

L'azione di un campo scalare reale di massa m è $S = \int dtL$ con

$$L = \int dx\mathcal{L} = \int dx \left(\frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \frac{1}{2}m^2\phi^2 \right) \tag{1}$$

Il valor medio sull'ensamble canonico di una generica osservabile $\mathcal{O}$:

$$\langle\mathcal{O}\rangle_T = \frac{Tr(\mathcal{O}e^{-\beta\hat{H}})}{Z} \quad ; \quad Z = Tr(e^{-\beta\hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{2}$$

Esprimendo la traccia sulla base degli autostati del campo si può riformulare la teoria in termini di path integral; si ottiene:

$$Z(T) = \mathcal{N}\int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]} \tag{3}$$

Con $\mathcal{N}$ fattore di normalizzazione divergente. L'integrale è su tutte le configurazioni dello spazio Euclideo $\vec{x}, \tau$ con $\tau \in [0, \beta]$ ($\hbar = 1$) e condizioni periodiche $\phi(\vec{x}, \beta) = \phi(\vec{x}, 0)$. S_E è l'azione Euclidea ottenuta dopo una rotazione di Wick $t \to -i\tau$:

$$S_E = \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \int dx \left(\partial_\mu\phi\partial_\mu\phi + m^2\phi^2\right) \tag{4}$$

In questo modo si può scrivere il valor medio dell'osservabile $\mathcal{O}$ come:

$$\langle\mathcal{O}\rangle_T \equiv \int \mathcal{D}\phi\mathcal{P}[\phi]\mathcal{O}[\phi] \quad ; \quad \mathcal{P}[\phi] \equiv \frac{e^{-S_E[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]}} \tag{5}$$

Le medie termiche della teoria di campo quantistica in D-dimensioni si possono riscrivere quindi in termini di medie su un sistema statistico classico in $D+1$-dimensioni ed essendo $\mathcal{P}[\phi]$ definita positiva, la si può interpretare come una distribuzione di Boltzmann e si può dunque eseguire uno studio numerico del sistema statistico tramite tecniche Montecarlo. Bisogna però prima rendere finito il numero di variabili stocastiche e discretizzare il sistema.

2.a Discretizzazione

Si sceglie un reticolo cubico isotropo di passo reticolare a con $N_s \times N_t$ siti; in due dimensioni il campo è adimensionale mentre la massa adimensionale si definisce come $\hat{m} \equiv am$, l'azione Euclidea discretizzata si scrive come

$$S_{E,L} = \frac{1}{2}\sum_n a\left[\frac{1}{a}\hat{m}^2\hat{\phi}(n)^2 + \sum_\mu \frac{1}{a}(\hat{\phi}(n+\hat{\mu}) - \hat{\phi}(n))^2\right] \tag{6}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_n \left[(\hat{m}^2+4)\hat{\phi}(n)^2 - 2\sum_\mu \hat{\phi}(n)\hat{\phi}(n+\hat{\mu})\right] \tag{7}$$

I parametri liberi sono N_s, N_t e $\hat{m}$. Il limite al continuo si ottiene per $\hat{m} \to 0$ tenendo $N_t\hat{m} = (T/m)^{-1}$ fisso e tenendo costante anche il volume $N_s\hat{m}$.

3 Descrizione degli algoritmi

L'accoppiamento è locale a siti primi vicini, vengono quindi usati algoritmi locali, in particolare nel codice si usa un algoritmo di tipo heat-bath alternato ad un algoritmo di over-relaxation[1], che non essendo ergodico non può essere usato da solo.

3.a Algoritmo Heat-bath

Definendo f la somma del campo nei siti primi vicini in avanti di n_0, si trova, completando il quadrato dell'equazione (7),

$$p(\phi)d\phi \propto \exp\left(-\frac{\hat{m}^2+4}{2}\left(\phi-\frac{f}{\hat{m}^2+4}\right)^2\right)d\phi \tag{8}$$

Nell'algoritmo si sceglie un sito del reticolo n_0 e si riestrae il suo valore secondo la distribuzione (8), fissando il campo negli altri siti. Si è usato un algoritmo Box-Muller per estrarre il nuovo valore del campo nel sito n_0, poichè è necessario estrarre una variabile gaussiana con varianza $\sigma^2 \equiv 1/(\hat{m}^2+4)$ e media $f/(\hat{m}^2+4)$.

3.b Algoritmo Over-relaxation

Si effettua una mossa che sposta il campo nel punto simmetrico rispetto al massimo della gaussiana

$$\phi(n_0) \to \phi = 2\frac{f}{\hat{m}^2+4} - \phi(n_0) \tag{9}$$

la mossa non cambia l'azione, quindi viene sempre accettata.

Le osservabili campionate nel codice sono:

$$O_1 = \frac{1}{N_t N_s}\sum_n \hat{m}^2\phi(n)^2 \quad O_2 = \frac{1}{N_t N_s}\sum_n\sum_{\mu_s}(\phi(n+\mu_s)-\phi(n))^2 \quad O_3 = \frac{1}{N_t N_s}\sum_n(\phi(n+\mu_t)-\phi(n))^2$$

4 Termodinamica

L'energia interna

$$U = -\left(\frac{\partial \log Z(\beta, V)}{\partial\beta}\right)_V \tag{10}$$

cambiando variabile $\partial/\partial\beta = (m/N_t)\partial/\partial\hat{m}$ ma $\partial/\partial\hat{m} = (1/m)\partial/\partial a$ e sia $\beta = N_t a$ che $V = N_s a$, dipendono da a, quello che si ottiene è qualcosa di proporzionale alla traccia del tensore energia impulso del campo

$$-\frac{1}{N_t}\frac{\partial \log Z}{\partial \hat{m}} = \frac{V}{\hat{m}}(\epsilon - p) = \frac{N_s}{\hat{m}}\langle O_1\rangle \tag{11}$$

con $\epsilon = U/V$ densità di energia interna e $p = T\frac{\partial \log Z}{\partial V}$ pressione. Per ottenere separatamente ϵ si può considerare un reticolo anisotropo; $a_s = a$ e $a_t = \xi a$ e porre alla fine $\xi = 1$, ora $\partial/\partial\beta = (1/N_t a)\partial/\partial\xi$ e si ottiene

$$\frac{\epsilon}{T^2} = \frac{{N_t}^2}{2}\langle O_1 + O_2 - O_3\rangle \tag{12}$$

4.a Limite al continuo

Si è scelto un intervallo per N_t tra 2 e 13 e fissati i prodotti $N_t\hat{m} = 0.1$ e $N_s\hat{m} = 10$. Nel limite al continuo l'equazione del moto è quella della corda elastica per cui il valore di riferimento per ϵ/T^2 è $\pi/6 \simeq 0.5236$, si osserva (Figura 1) che benchè i due risultati siano entrambi compatibili entro gli errori con il valore teorico, l'aggiunta dell'algoritmo di over-relaxation porta ad una diminuzione dell'errore relativo e per questo motivo è stato usato nelle simulazioni successive[2].

[1] una chiamata di heat-bath ogni quattro chiamate di over-relaxation.
[2] l'over-relaxation permette di fare un cambio sostanziale del campo a basso costo computazionale.

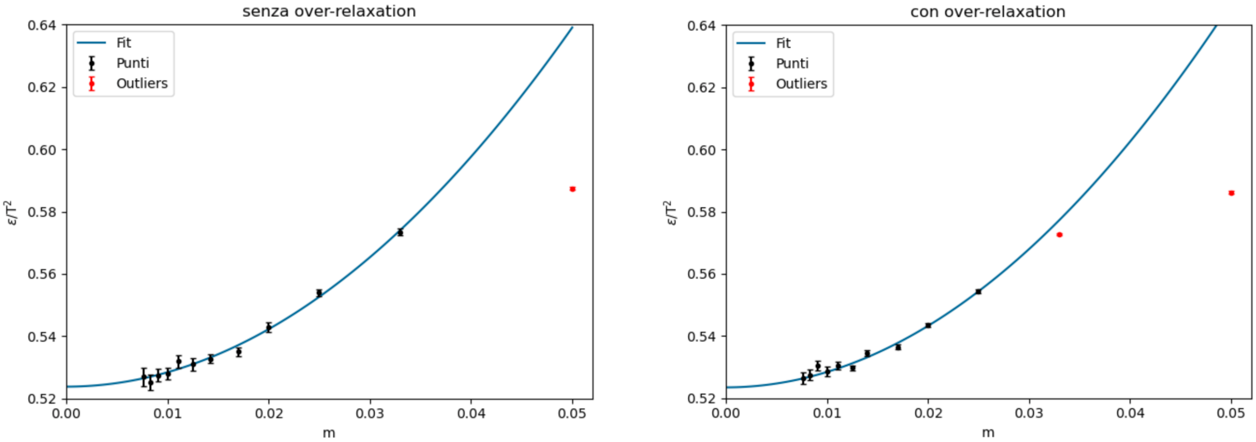

Figura 1: Funzione di fit: $a + bx^2$

senza over-relaxation	con over-relaxation
$a = 0.524 \pm 0.001$ $b = 47 \pm 1$ $\chi^2/\text{dof} = 1$	$a = 0.5235 \pm 0.0005$ $b = 49 \pm 1$ $\chi^2/\text{dof} = 1.8$

4.b Rinormalizzazione e confronto con il limite atteso per alta T

Fino a questo momento si è trascurata la costante di normalizzazione divergente davanti alla funzione di partizione. Per rinormalizzare si deve sottrarre al termine alla temperatura di interesse, lo stesso termine calcolato ad una T vicina a 0, poichè ϵ/T^2 è una quantità intensiva, la sua parte divergente non dipende dalla temperatura. Fissato $\hat{m}$ si prende un $\bar{N}_t$ tale che $\bar{N}_t\hat{m} = m/T \gg 1$.

$$\left.\frac{\epsilon}{T^2}\right|_R = \left.\frac{\epsilon}{T^2}\right|_T - \left.\frac{\epsilon}{T^2}\right|_{T=0} = \frac{N_t^2}{2}\left(\langle\langle O_1 + O_2 - O_3\rangle\rangle_{N_t} - \langle\langle O_1 + O_2 - O_3\rangle\rangle_{\bar{N}_t}\right) \tag{13}$$

Ci aspettiamo che, avendo sottratto l'energia di vuoto, questa quantità tenda a zero per $T \to 0$ e a $\pi/6$ per $T/m \to \infty$. In Figura 2 i risultati delle simulazioni con $\hat{m} = 0.05$ e $N_s = 160 = \bar{N}_t$.

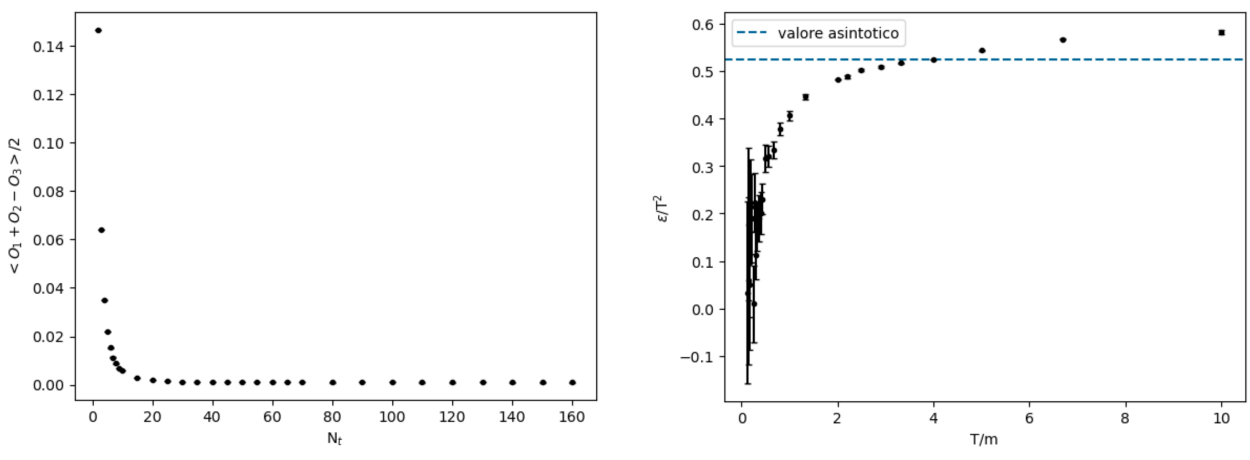

Figura 2: Si vede come il valore asintotico venga raggiunto "dall'alto" e non "dal basso" come ci aspetteremmo, questo è dovuto probabilmente a effetti di discretizzazione; $\hat{m} \neq 0$, e i punti più a destra sono a temperatura più alta e vicini al cut-off UV.

4.c Anomalia di traccia

Un metodo alternativo per studiare la termodinamica del sistema è quello di considerare l'anomalia di traccia; moltiplicando la (11) per N_t^2/N_s si ottiene

$$-\hat{m}\frac{\partial}{\partial\hat{m}}\left(\frac{N_t}{N_s}\right)\log Z = \frac{(\epsilon - p)}{T^2} = N_t^2\langle O_1\rangle \tag{14}$$

ora

$$\left(\frac{N_t}{N_s}\right) = \frac{1}{VT} \quad ; \quad \log Z = -\frac{F}{T} = -\frac{fV}{T} = \frac{Vp}{T} \quad \Rightarrow \quad \frac{N_t}{N_s}\log Z = \frac{p}{T^2} \tag{15}$$

essendo $\hat{m} \equiv am$ con m costante si può scrivere

$$\hat{m}\frac{\partial}{\partial\hat{m}} = a\frac{\partial}{\partial a}$$

la derivata rispetto ad a comporta sia una derivata rispetto alla temperatura che una derivata rispetto al volume, tuttavia p/T^2 è una quantità intensiva che non dipende quindi dal volume, perciò alla fine si può scrivere

$$T\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{p}{T^2}\right) = \frac{\epsilon - p}{T^2} \quad \xrightarrow{\text{integrando}} \quad \frac{p(T)}{T^2} - \frac{p(T_0)}{T_0^2} = \int_{T_0}^{T}\frac{dT'}{T'}\frac{\epsilon - p}{T'^2} \tag{16}$$

come nel metodo precedente anche in questo caso si considera la quantità rinormalizzata sottraendo i valori di vuoto, $T_0 = 0$, (si assume che il vuoto abbia densità di energia e pressione nulle)

$$T\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{p}{T^2}\right)_R = \left(\frac{\epsilon - p}{T^2}\right)_R \equiv N_t^2(\langle O_1\rangle_{N_t} - \langle O_1\rangle_{\bar{N}_t}) \tag{17}$$

Nella simulazione la quantità precedente è stata calcolata in funzione della variabile adimensionale T/m; l'integrale diventa

$$\frac{p}{T^2} = \int_0^T d\left(\frac{T'}{m}\right)(N_t\hat{m})\left(\frac{\epsilon - p}{T'^2}\right)_R \tag{18}$$

Dopo aver effettuato numericamente l'integrale[3] è stata infine ricostruita l'energia interna usando la relazione

$$\left(\frac{\epsilon}{T^2}\right)_R = \left(\frac{\epsilon - p}{T^2}\right)_R + \left(\frac{p}{T^2}\right)_R \tag{19}$$

e sono stati confrontati i risultati ottenuti con i due metodi (Figura 4). Come nel caso precedente i valori dei parametri delle simulazioni sono stati fissati a: $\hat{m} = 0.05$ e $N_s = 160 = \bar{N}_t$.

[3]Per il calcolo numerico dell'integrale è stata usata `InterpolatedUnivariateSpline`, i dati sono stati interpolati con polinomi di grado due e per stimare l'errore si sono effettuati ricampionamenti della curva estraendo, con un Box-Muller, per ogni punto un nuovo valore con media il valore originale e varianza l'errore del punto; come errore associato al punto della curva integrale è stata presa la deviazione standard del campione.

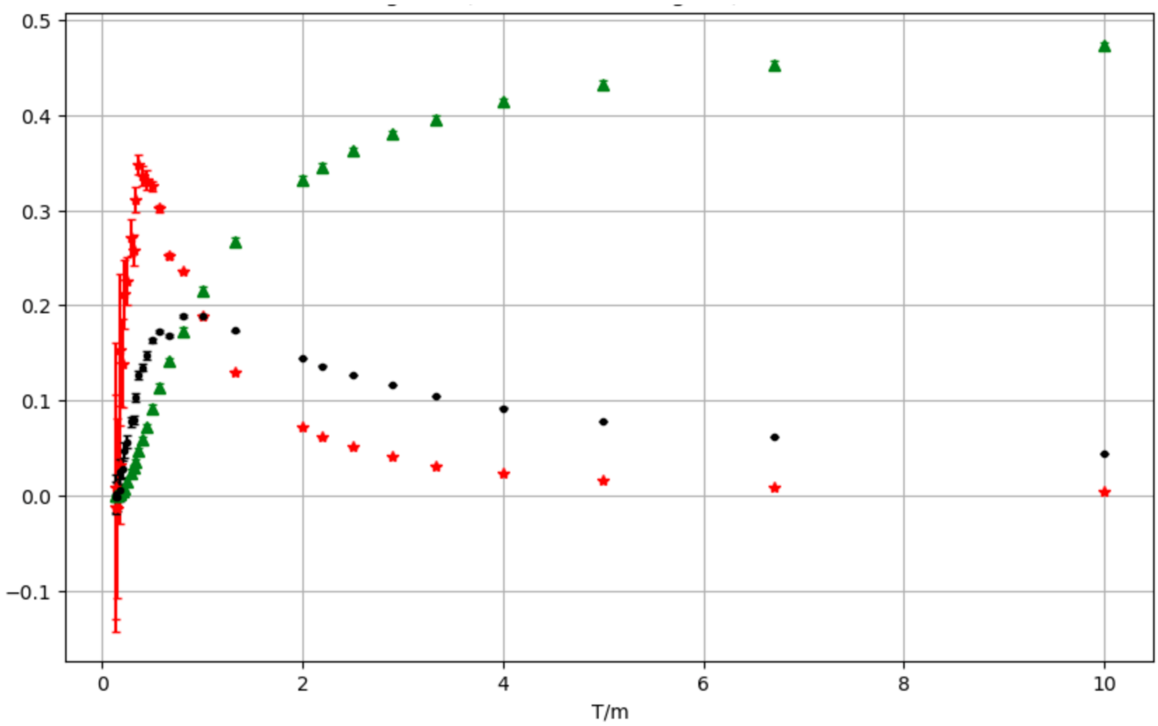

Figura 3: In rosso la funzione integranda, Eq. 18, in verde il suo integrale (la pressione) e in nero l'anomalia di traccia.

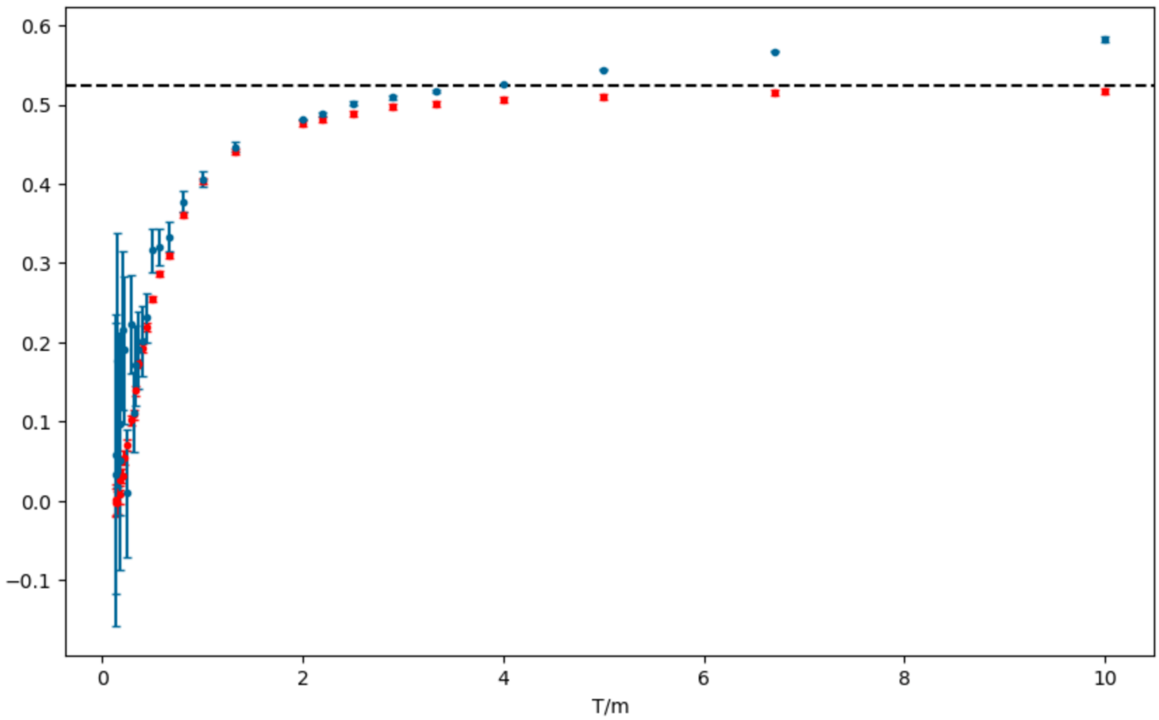

Figura 4: In blu la densità di energia ottenuta passando per il reticolo anisotropo, in rosso quella con il metodo dell'anomalia di traccia.