

Progetto Numerico Modulo 3: Studio particella sul cerchio con PIMC

Roberto Dionisio

8 giugno 2023

Sommario

Lo scopo di questo progetto numerico è lo studio del problema di una particella sul cerchio cioè verificare la presenza di un topological slowing down/freezing topologico man mano che ci si avvicina al limite al continuo, implementare un algoritmo che possa risolvere questo problema e confrontarlo con quelli standard.

1 Introduzione Teorica

1.1 Il modello

Si consideri un sistema quantistico caratterizzato da una particella di massa m il cui moto è vincolato su una circonferenza di raggio R . Gli autostati dell'energia sono ben noti¹ e i livelli energetici sono discreti e doppiamente degeneri, dati da $E_n = \hbar^2 n^2 / 2mR^2$, per cui la funzione di partizione è calcolabile esattamente

$$Z(\beta) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}\right) \quad (1)$$

Nel formalismo del path integral la funzione di partizione è

$$Z(\beta) = \mathcal{N} \int \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-S_E[x]/\hbar} \quad S_E[x] = \int_0^{\beta\hbar} \frac{m}{2} (\dot{x}(\tau))^2 d\tau$$

l'azione euclidea S_E contiene solo il termine cinetico e quindi dal punto di vista del path integral è come se fosse particella libera però i cammini che contribuiranno saranno quelli con condizioni periodiche sia nel tempo euclideo che nello spazio con immagine nel cerchio \mathbb{S}_R^1 .

La condizione di periodicità sul cerchio può essere realizzata considerando una coordinata $x \in \mathbb{R}$ e identificando punti che differiscono di $2\pi R$. Ciò identifica naturalmente classi distinte di cammini che partono da $x(0) = x_0$ e terminano in $x(\beta\hbar) = x_0 + 2\pi RQ$ al variare di $Q \in \mathbb{Z}$ essendo quindi $x(\beta\hbar)$ identificato con x_0 su \mathbb{S}_R^1 . Q è detto *winding number*² essendo il numero di avvolgimenti con segno del cammino sul cerchio e quindi i cammini continui e rilevanti possono essere classificati in classi di omotopia cioè per ogni Q si avrà un distinto "settore topologico". La funzione di partizione si riscrive quindi come

$$Z(\beta) = \sum_{Q \in \mathbb{Z}} Z_Q(\beta) \quad Z_Q(\beta) = \mathcal{N} \int_{\text{P.B.C. su } \mathbb{S}_R^1} \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-S_E[x]/\hbar}$$

In ogni settore topologico il path integral è equivalente a quello di una particella libera che parte da un punto e dopo un

¹sarebbero quelli di momento angolare
²o anche Carica Topologica

tempo $\beta\hbar$ arriva in un punto distante $2\pi RQ$ ed è calcolabile esattamente e sarà proporzionale all'azione classica:

$$Z_Q(\beta) \propto e^{-S_E[x_{\text{cl}}]} = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \frac{(2\pi RQ)^2}{2\beta\hbar}\right) \quad (2)$$

Così infine

$$Z(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta\hbar\chi}} \sum_{Q \in \mathbb{Z}} \exp\left(-\frac{Q^2}{2\beta\hbar\chi}\right) \quad \text{con } \chi = \frac{\hbar}{4\pi^2 m R^2} \quad (3)$$

cioè è circa una distribuzione gaussiana con varianza pari a $\beta\hbar\chi$ e χ è una frequenza caratteristica del sistema³.

Confrontando le due espressioni della funzione di partizione i limiti di alta e bassa temperatura si "scambiano":

- a bassa temperatura $\beta\hbar\chi \gg 1$ contribuiscono solo i livelli energetici a n piccolo, mentre contribuiscono cammini con winding number arbitrariamente alto. Il tempo euclideo $\beta\hbar$ è infatti "lungo" e quindi i cammini riescono ad avvolgersi molte volte;
- a alta temperatura $\beta\hbar\chi \ll 1$ contribuiscono tutti i livelli energetici ma solo i cammini con winding number piccolo.

1.2 Discretizzazione

Per discretizzare l'azione

$$\frac{S_{E,L}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 d\tau \xrightarrow{\text{?}} \frac{1}{2\eta} \sum_{i=1}^N (y_{i+1} - y_i)^2 \quad \eta = a\chi$$

bisogna usare una distanza che tenga conto della particolare topologia⁴ del sistema e cioè considerare l'arco minimo con segno.

Quindi, date $y_i \in [0, 1]$ con $y_{N+1} = y_1$ la distanza $d(y_{i+1}, y_i)$ che si valuterà sarà:

$$d(y_{i+1}, y_i) = \begin{cases} y_{i+1} - y_i & \text{se } |y_{i+1} - y_i| \leq 1/2 \\ y_{i+1} - y_i - 1 & \text{se } y_{i+1} - y_i > 1/2 \\ y_{i+1} - y_i + 1 & \text{se } y_{i+1} - y_i < -1/2 \end{cases}$$

e $d(y_{i+1}, y_i) \in [-1/2, 1/2]$ e sarà utile anche per calcolare il numero di avvolgimenti che è semplicemente:

$$Q = \sum_i^N d(y_{i+1}, y_i)$$

³Notare che $Z(\beta)$ è *circa* una distribuzione gaussiana in Q perché $Q \in \mathbb{Z}$

⁴Nella realtà avendo cammini discreti il concetto di topologia viene a mancare e quindi definendo un particolare tipo di distanza (in principio arbitraria) si sta dando una prescrizione di quale debba essere la struttura topologica nel discreto

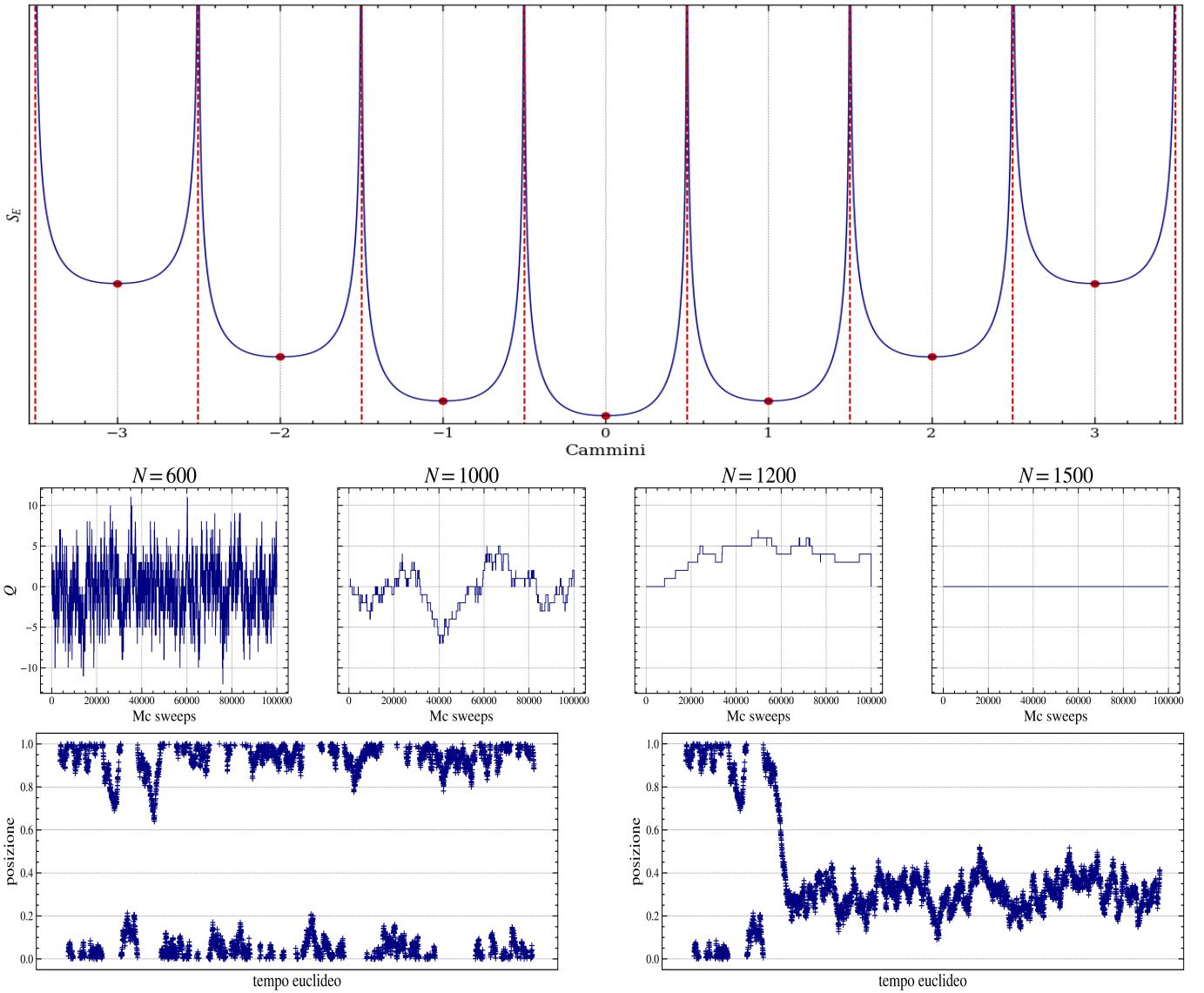


Figura 1: (**In alto**) Rappresentazione schematica, non quantitativa, per visualizzare i vari cammini per settore topologico, (**Al centro**) Storie Monte Carlo per la carica topologica di cammini a fisso $\beta = 10$ variando N , (**In basso**) come cambia il cammino in seguito alla mossa del sarto (destra) rispetto a prima (sinistra).

La relazione tra η , N e la temperatura (o tempo euclideo) è

$$N\eta = \beta\hbar\chi$$

L'energia del cammino, identificata dalla relazione $\beta E = S_{E,L}/\hbar$, è

$$E = \frac{1}{2\eta\hbar\beta} \sum_{i=1}^N d(y_{i+1}, y_i)^2 = \frac{\chi}{2N\eta^2} \sum_{i=1}^N d(y_{i+1}, y_i)^2 \quad (4)$$

1.3 Problema del Freezing Topologico

Un modo per simulare la termodinamica di un sistema quantistico tramite PIMC è quello di utilizzare l'algoritmo locale di Metropolis. Il “passo elementare” consiste nell'update del sito i -esimo, in cui si estrae un numero casuale Δy distribuito uniformemente nell'intervallo $[y_i - \delta, y_i + \delta]$ e si propone come nuovo valore⁵ $y'_i = \{y_i + \Delta y\}$, da accettare o rigettare con un test dell'accettanza come usuale.

Per mantenere un'accettanza costante al variare di η nel

limite al continuo $\eta \rightarrow 0$, ci si aspetta di dover scegliere $\delta = \sqrt{\eta}$, e il passo elementare verà ripetuto per N volte.

Procedendo in questo modo ci si imbatte tuttavia in un fenomeno di cosiddetto “freezing” della carica topologica, in cui la catena perde di ergodicità e non riproduce più fedelmente il limite continuo della teoria a tempo Montecarlo finito. Ciò accade in quanto nella versione discreta il valore di Q può cambiare solo quando la distanza tra due punti consecutivi y_i e y_{i+1} “superà” $1/2$, ovvero quando cambia l'arco per la distanza. Si ha però che la varianza di $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$ è approssimativamente η , e il limite continuo corrisponde proprio a $\eta \rightarrow 0$, rendendo quindi estremamente improbabile che Δy_j diventi comparabile con $1/2$.

Quindi l'algoritmo Metropolis non è in grado di tagliare il cammino (man mano che si approccia il limite al continuo) in quanto propone dei cambiamenti che deformano in modo continuo il cammino e cioè ne preservano la classe di omotopia.

In figura 1 si riporta una rappresentazione intuitiva di quello che accade, sulle ascisse ci sono tutti i cammini che idealmente contribuiscono al path integral, divisi per i vari settori

⁵Con $\{x\} = x - \lfloor x \rfloor$ dove $\lfloor x \rfloor$ è la parte intera di x e quindi $\{x\}$ è quella frazionaria

topologici e nelle ordinate l'azione euclidea che corrisponde ai vari cammini.

Per ogni settore si avrà un minimo che corrisponde al cammino classico (pallini rossi) e man mano che Q cresce l'azione corrispondente ai cammini classici cresce quadraticamente⁶. In ogni settore tutti gli altri cammini, diversi da quelli classici, hanno un'azione maggiore e al confine tra un settore topologico e l'altro ci sono dei cammini per cui l'azione è divergente. Per cui se in questo spazio dei cammini ci si prova a muoversi con continuità quando si arriva al bordo l'azione diventa così grande da non permettere il "tunneling" nel settore adiacente. Questi bordi sarebbero proprio i cammini discontinui che separano un settore dall'altro.

Il fenomeno del freezing sarà particolarmente evidente a bassa temperatura, quando alla funzione di partizione contribuiscono cammini con Q arbitrariamente elevato, mentre ad alta temperatura, quando è rilevante solo il settore $Q = 0$, il fenomeno sarà evidente solo se il cammino è inizializzato ad un valore di $Q \neq 0$ che rimarrà costante nell'arco della simulazione.

Al centro di Figura 1 si è riportato come varia la carica topologica in funzione del tempo Monte Carlo, a η finito (N piccoli) il sistema riesce a cambiare settore topologico agevolmente ma man mano che N aumenta (cioè ci si avvicina al limite al continuo $\eta \rightarrow 0$) l'algoritmo Metropolis non riesce più a esplorare settori diversi da $Q = 0$ ⁷.

Per studiare questo problema si sono implementate le seguenti varianti del Metropolis⁸:

- *algoritmo Metropolis con $\delta = 1/2$* : se come update Metropolis si considera un update in $[y_i - 1/2, y_i + 1/2]$ ci aspettiamo di riuscire a cambiare più facilmente settore topologico e in linea di principio a campionare bene la distribuzione di Q . Tuttavia così facendo ci si aspetta di avere un'accettanza della mossa Metropolis che tende a 0 al diminuire di η
- *algoritmo Metropolis con $\delta = \sqrt{\eta}$* combinato con la *mossa del sarto*: Si può combinare l'algoritmo Metropolis con $\delta = \sqrt{\eta}$ con una mossa, microcanonica nel limite continuo, in cui si trova il primo punto y_{i_0} che dista $1/2$ da y_1 e si riflette la sezione di cammino con $i \geq i_0$ attorno a $y_1 + 1/2$ stesso. Nel caso discreto, fissata una tolleranza ϵ e posto $y_r = \{y_1 + 1/2\}$ si cerca il minimo i_0 tale che

$$d(y_{i_0}, y_r) \leq \epsilon \quad (5)$$

e si propone come update

$$y'_i = \{2y_r - y_i\} \quad \forall i = i_0, \dots, N \quad (6)$$

Per visualizzare ciò che accade in basso di Figura 1 si è riportato un prima e dopo la mossa del sarto su un cammino (dove si passa da $Q = 0$ a $Q = -1$).

Lontani dal limite al continuo tale mossa non è microcanonica ma porta ad una variazione dell'azione locale

$$\Delta S_{E,L} = \frac{1}{2\eta} (d(y'_{i_0}, y_{i_0-1})^2 - d(y_{i_0}, y_{i_0-1})^2) \quad (7)$$

per cui l'update (non locale) andrà accettato o rifiutato con un usuale test dell'accettanza Metropolis. Quando

⁶i minimi corrispondenti alle soluzioni classiche con un dato avvolgimento vengono chiamati istantoni in QFT

⁷I cammini sono stati inizializzati con $Q=0$

⁸oltre al Metropolis standard.

la mossa del sarto viene accettata di fatto quello che accade è che la carica topologica varia di $\Delta Q = \pm 1$ in base alla posizione di y_{i_0} e questo permette di aggirare i problemi di non ergodicità.

La mossa del sarto viene proposta con probabilità fissata p_{tailor} ⁹ dopo la quale vengono eseguiti i soliti N update Metropolis su siti estratti casualmente in modo uniforme.

2 Simulazioni

Di seguito si riporta la scelta dei parametri utilizzati per le simulazioni in parte suggeriti in [1].

- $\beta = 10$ in quanto siamo interessati a studiare il freezing topologico dovuto ai problemi del Metropolis nel limite continuo, quindi a bassa temperatura in modo che esso sia evidente rispetto al valore fisico $\sigma_Q \simeq \sqrt{\beta} \simeq 3$;
- $p_{tailor} = 0.1$ e avendo preso delle misure ogni *save measure* = 10 si avrà statisticamente almeno 1 misura ogni volta che si esegue la mossa del sarto;
- $\epsilon = 0.02 \eta$ come usato in [1];
- $10^{-3} \leq \eta \leq 1$ per un totale di 217 valori così da studiare il limite al continuo;
- Ogni simulazione per un dato η consiste in 10^6 Monte Carlo sweeps per un totale di 10^5 misure.

Per ogni algoritmo implementato si è studiata

1. la dipendenza da η del tempo di autocorrelazione dell'energia e della carica topologica
2. la distribuzione della carica topologica per alcuni valori di η che mostrino i limiti dell'algoritmo di Metropolis
3. il limite al continuo della varianza di Q confrontato con il valore atteso β

3 Analisi

3.1 Storie MC

Per ogni algoritmo implementato si sono misurate la carica topologica e l'energia e in Figura 2 si riportano alcune storie Monte Carlo per valori esemplificativi di η .

In particolare si noti come per $\eta \sim 0.001$ entrambi gli algoritmi Metropolis con $\delta \in \{\sqrt{\eta}, 1/2\}$ vanno incontro al problema del freezing topologico e infatti il numero di avvolgimenti rimane bloccato al valore che aveva al momento dell'inizializzazione (random), per l'energia ovviamente non ci sono problemi essendo questa indipendente dal settore topologico in cui si trova il cammino.

Nell'ultima riga sempre di Figura 2 si sono riportate le storie Monte Carlo per un valore di $\eta = 0.007$ tale per cui con l'algoritmo $\delta = \sqrt{\eta}$ si inizia ad osservare il topological slowing-down, cosa che è, invece, meno evidente nell'algoritmo con $\delta = 1/2$ proprio come ci si aspetta.

⁹Chiaramente la mossa del sarto è da alternare agli usuali update metropolis che modificano i cammini altrimenti si avrebbe un'oscillazione tra due valori della carica topologica

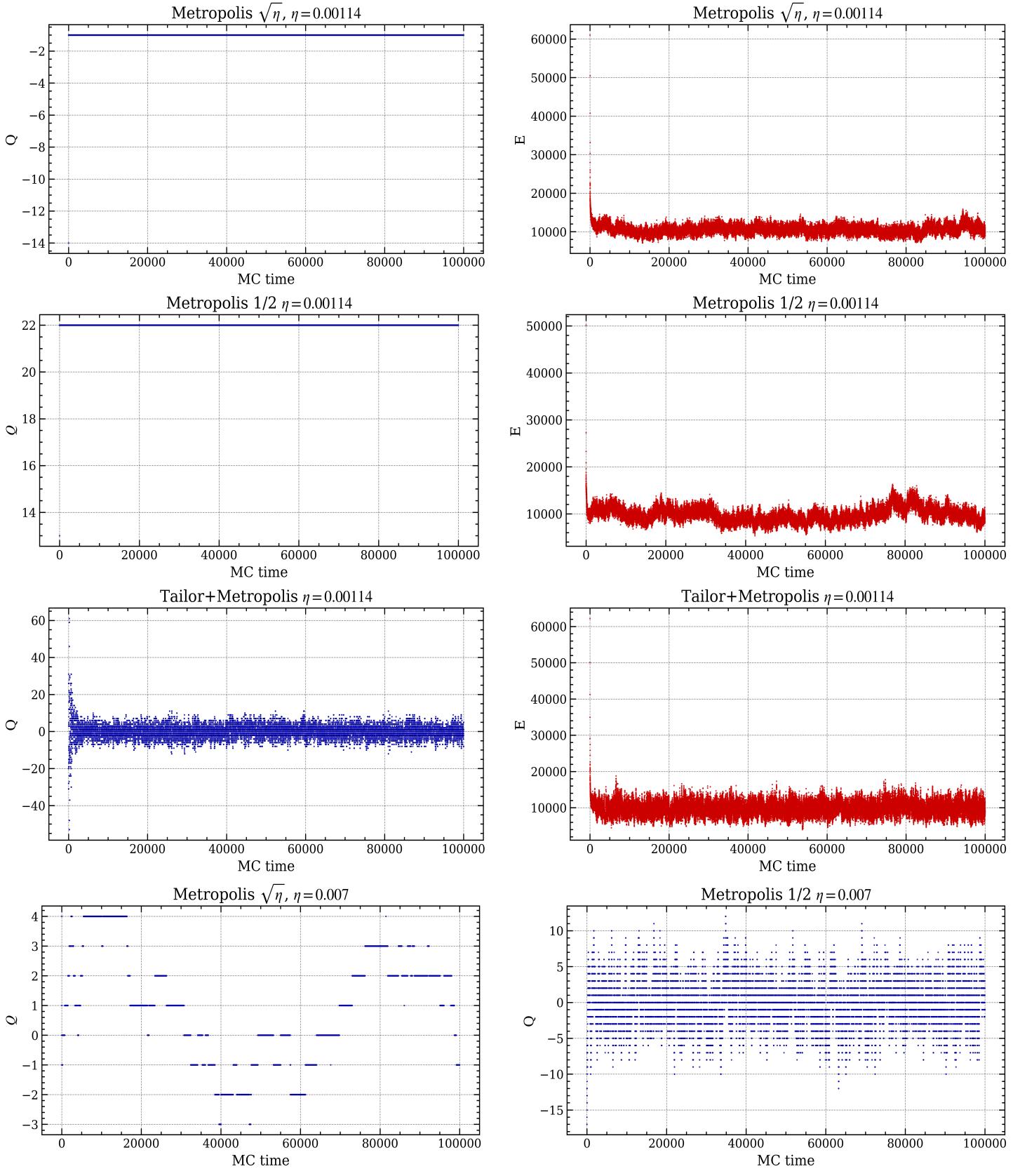


Figura 2: Varie storie Montecarlo dei vari algoritmi per le osservabili Q ed E per alcuni valori di η .

3.2 Tempi di correlazione

Per ogni simulazione si sono calcolate le correlazioni delle osservabili Q e E definite da:

$$C_O(k) = \frac{1}{N-k} \sum_{i=0}^{N-k} O(i)O(i+k) - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=0}^N O(i) \right)^2 \quad (8)$$

dove O è una generica osservabile.

Dalle correlazioni di Q ed E si sono estratti i tempi di autocorrelazione per ogni η tramite un fit esponenziale

$$C_O(k) = A_O e^{-k/\tau_O}$$

Si sono allora riportati i risultati di questi fit in Figura 3, dai grafici del tempo di correlazione della carica topologica è

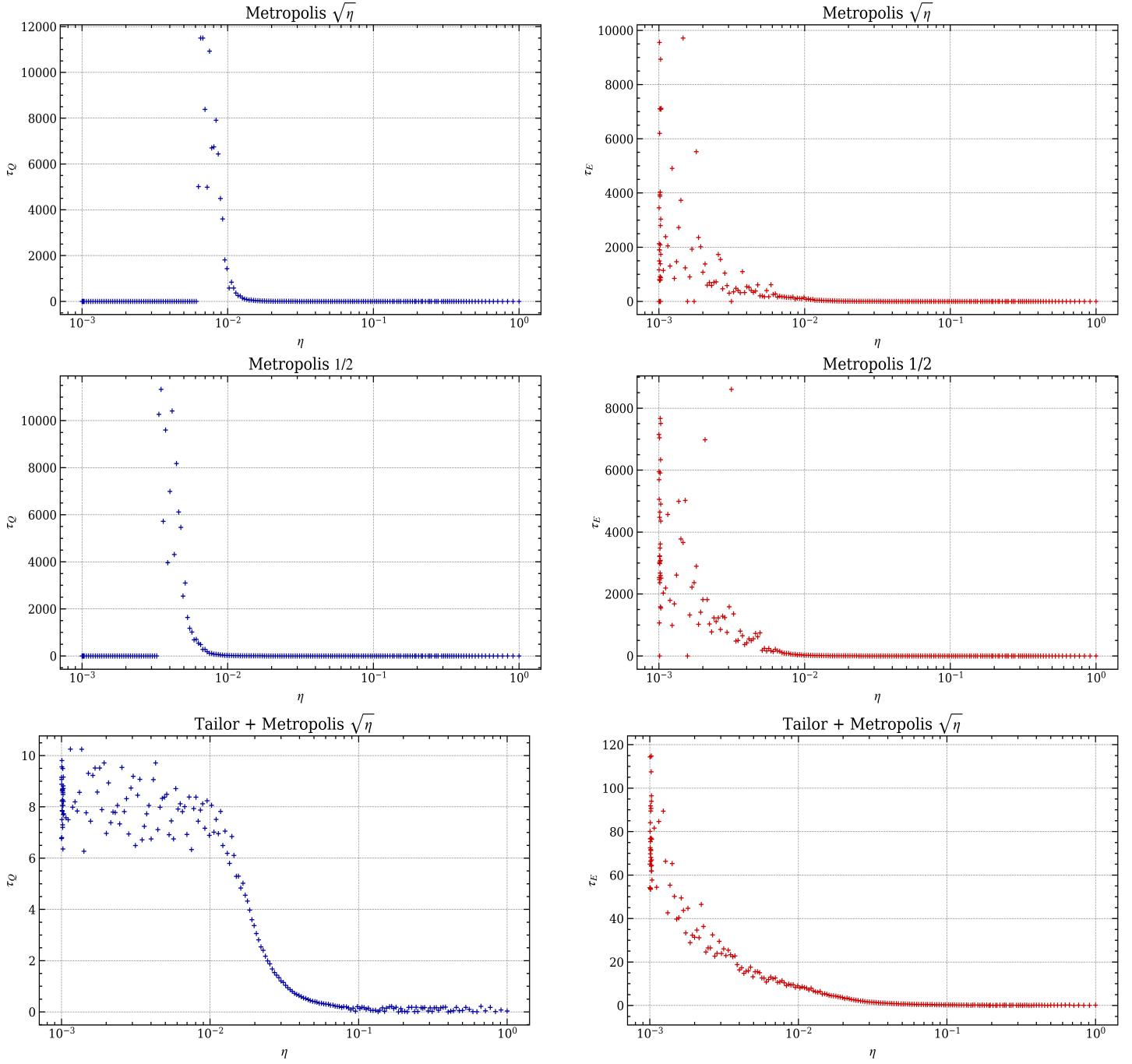


Figura 3: Tempi di autocorrelazione per Q ed E in funzione di η per i vari algoritmi stimati tramite fit esponenziale delle correlazioni.

evidente il fenomeno del freezing: per gli algoritmi Metropolis standard con $\delta \in \{\sqrt{\eta}, 1/2\}$ il tempo di correlazione diverge rapidamente andando verso η piccoli, fino a diventare comparabile con il tempo di simulazione.

È viceversa evidente che l'algoritmo con la mossa del sarto risolve tale problema, in quanto il tempo di correlazione satura ad un valore ben minore del tempo di simulazione e rimane costante andando verso il limite continuo.

Da notare, come detto anche precedentemente, come l'algoritmo con $\delta = 1/2$ venga afflitto dal topological slowing down per dei valori di η minori rispetto al Metropolis standard.

Nei grafici i punti con $\tau = 1$ corrispondono a quelle simulazioni per cui il fit esponenziale non converge, in quanto il tempo di correlazione diventa comparabile o supera il tempo di simulazione e la carica topologica è costante, e il fit era inizializzato con $\tau = 1$.

3.3 Distribuzione della Carica Topologica

In Figura 4 si sono costruiti degli istogrammi per la carica topologica per i tre algoritmi e per valori di η decrescenti.

Indipendentemente dall'algoritmo la distribuzione a $\eta \simeq 0.125$ risulta piuttosto distante da quella attesa nel limite continuo, compatibilmente con il fatto che tale valore di η non è sufficientemente piccolo da evitare errori di discretizzazione. Per gli algoritmi Metropolis semplici osserviamo che andando verso η piccoli la distribuzione inizialmente migliora, come previsto, per poi peggiorare notevolmente quando si incontra la regione di freezing. In particolare ad $\eta = 0.001$ per questi due algoritmi il valore di Q risulta costante e pari al valore a cui viene inizializzato, coerentemente con un freezing completo. Per l'algoritmo con la mossa del sarto, viceversa, la distribuzione si stabilizza su quella attesa ad η arbitraria-

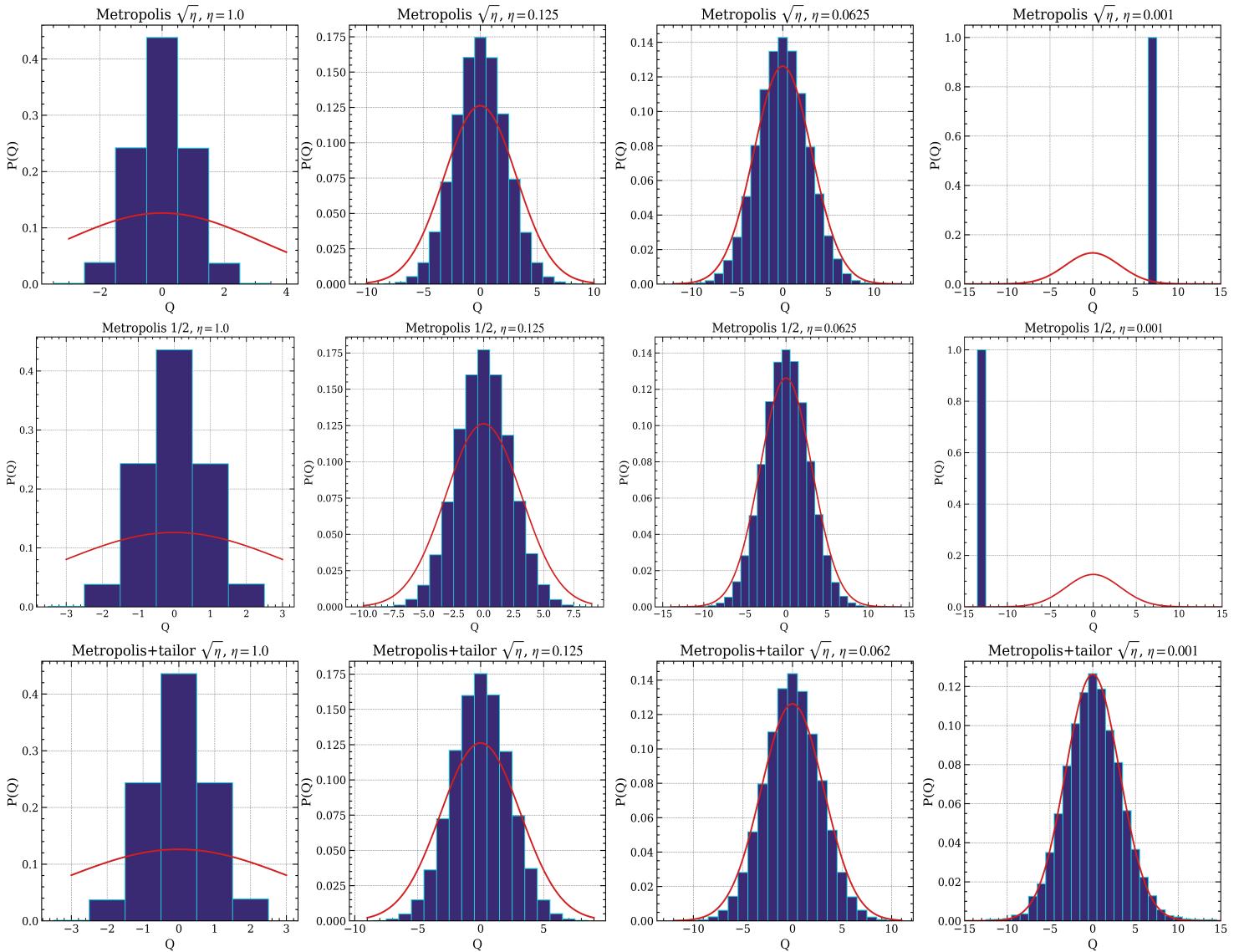


Figura 4: Distribuzione della carica topologica Q dei tre algoritmi per alcuni valori di η e in rosso è riportato la distribuzione teorica gaussiana per $\beta = 10$.

mente piccoli, confermando che il problema del freezing viene completamente rimosso da tale algoritmo.

3.4 Varianza di $P(Q)$

Come detto nell'introduzione teorica, $P(Q)$ risulta essere una distribuzione gaussiana con varianza pari $\beta\hbar\chi$ e dunque nelle unità in cui si sta lavorando

$$\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 = \beta = 10$$

Per ognuno degli algoritmi si è allora calcolata la varianza della carica topologica e si è stimato l'errore su tale quantità al solito con il binned bootstrap essendo un estimatore dipendente da variabili autocorrelate. In Figura 5 si riportano delle stime per l'errore sulla varianza per alcuni valori di η e per i vari algoritmi al variare della dimensione dei blocchi che è stata scelta guardando i valori per cui le curve raggiungessero qualitativamente un plateau.

Si è scelta allora come dimensione del blocco 2^{12} e come numero di ricampionamenti $R = 100$. Si procede quindi ad un'extrapolazione al continuo usando come modello

$$f(\eta) = a + b\eta^2$$

considerando a come una stima di $\text{Var}(Q)$.

L'estremo superiore del range di valori su cui effettuare il fit è stato scelto guardando i punti in cui cambiava la concavità della curva mentre per l'estremo inferiore si sono presi i punti dove la varianza inizia a decrescere ed è diversa da zero (freezing).

Si sono ottenuti i seguenti risultati:

- *Metropolis* $\delta = \sqrt{\eta}$: Si è effettuato un fit quadratico sugli $\eta \in [0.009, 0.094]$ ottenendo

$$a = 0.979(6) \quad b = -47(1) \quad \chi^2/\text{ndof} = 0.8$$

In Figura 5 si riportano le stime della varianza e la curva di best fit. Anche da questo grafico si osserva il freezing della carica topologica $\text{Var}(Q) = 0$ per $\eta \lesssim 0.008$

- *Metropolis* $\delta = 1/2$: Si è effettuato un fit quadratico sugli $\eta \in [0.006, 0.1]$ ottenendo

$$a = 0.988(4) \quad b = -46(1) \quad \chi^2/\text{ndof} = 1.26$$

In Figura 5 si riportano le stime della varianza e la curva di best fit. Anche qui si osserva il freezing della carica topologica $\text{Var}(Q) = 0$ per $\eta \lesssim 0.005$.

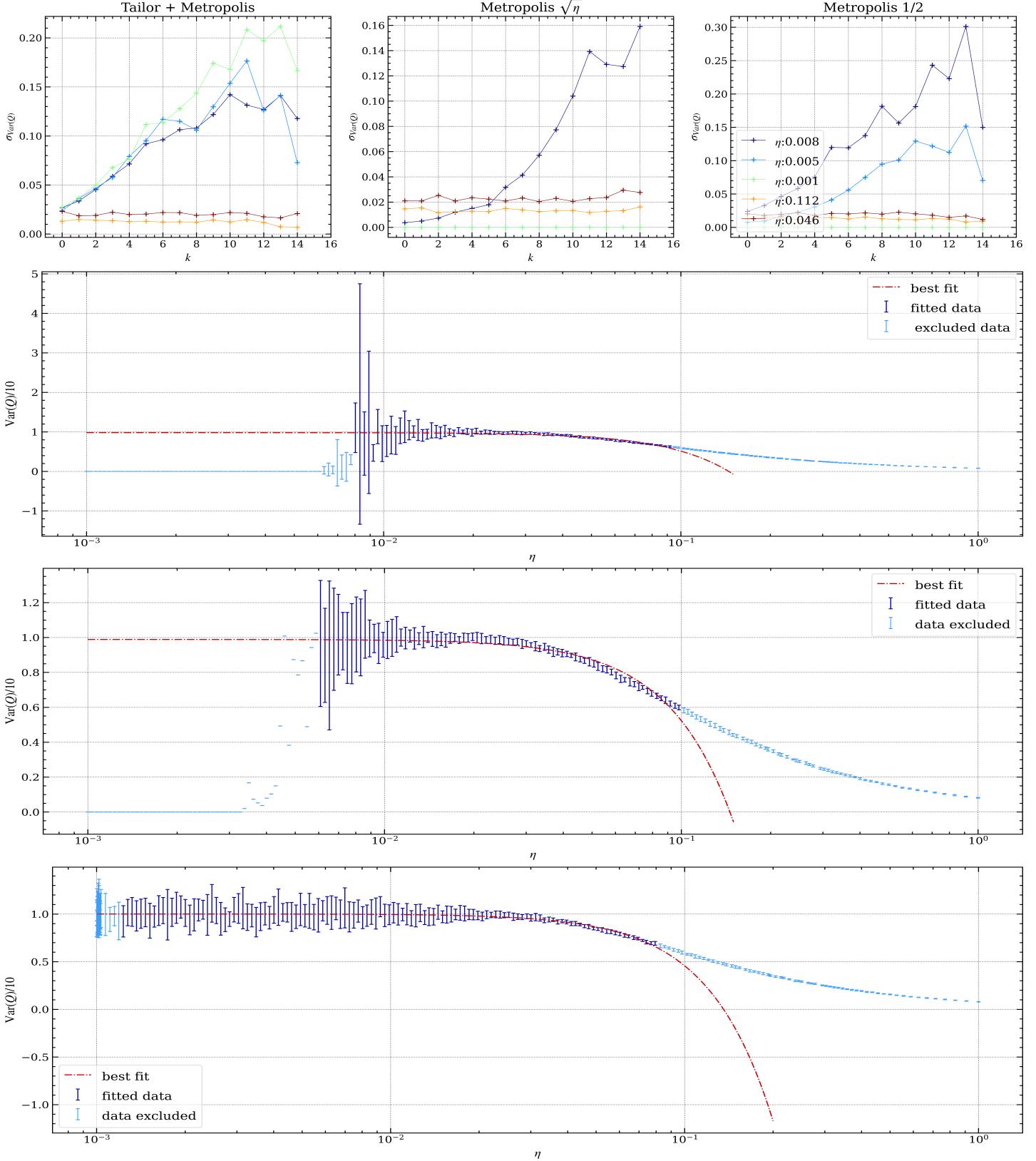


Figura 5: In alto: errore sulla varianza di Q stimato con binned bootstrap al variare della dimensione dei blocchi 2^k e con numero di ricampionamenti $R = 100$ e a seguire estrapolazioni al continuo per la $\text{Var}(Q)$ in unità di β in successione per Metropolis con $\delta = \sqrt{\eta}$, Metropolis con $\delta = 1/2$ e Metropolis + Tailor.

- *Metropolis + Tailor*: Si è effettuato un fit quadratico nel range $\eta \in [0.0012, 0.08]$ ottenendo

$$a = 1.001(4) \quad b = -54(1) \quad \chi^2/\text{ndof} = 0.25 \quad (9)$$

In Figura 5 si riportano le stime della varianza e la curva di best fit. Come atteso, in questo caso non si osserva il

fenomeno del freezing ma si osserva il raggiungimento di un plateau in scala semi-logaritmica in corrispondenza di $\text{Var}(Q) = \beta$.

Non c'è dubbio che la stima migliore della varianza di Q (entro circa 0.25 deviazioni standard dal valore atteso) si ottiene dal fit fatto sui dati ottenuti tramite l'algoritmo con

mossa del sarto che, come atteso, permette di aggirare i problemi dovuti al freezing della carica topologica nel limite al continuo.

3.5 Accettanza

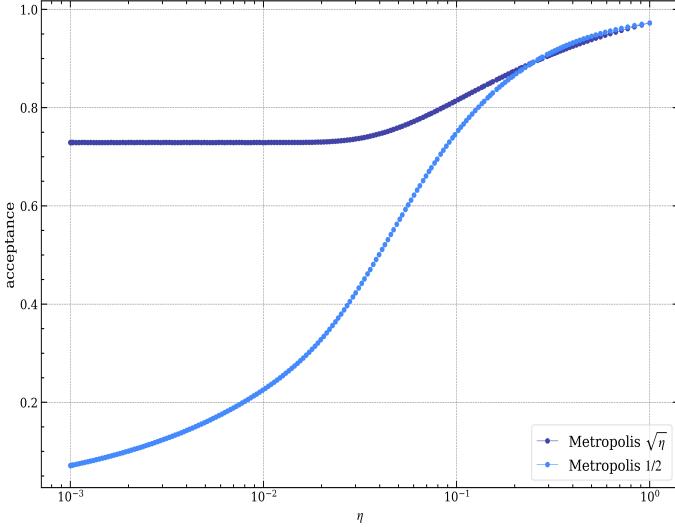


Figura 6: Accettanza media per gli algoritmi Metropolis con $\delta \in \{\sqrt{\eta}, 1/2\}$

Durante le simulazioni si è calcolata l'accettanza media delle mosse Metropolis nel caso $\delta = \sqrt{\eta}$ e nel caso $\delta = 1/2$ al variare di η . Le simulazioni usate sono le stesse simulazioni preliminari usate per la stima dei tempi di correlazione e i grafici relativi sono riportati in Figura 6. Come atteso nel primo caso si raggiunge un plateau, mentre nel secondo caso l'accettanza va a zero (con un andamento che sembra essere una legge di potenza per $\eta \leq 0.05$). Ciò spiega perché l'algoritmo con $\delta = 1/2$ non presenta un miglioramento significativo rispetto a quello con $\delta = \sqrt{\eta}$: per quanto sia possibile proporre una singola mossa che porta a una variazione della carica topologica, l'accettanza di tale mossa tende a 0 nel limite al continuo e quindi viene affetto dal topological slowing down ugualmente (seppur per valori di η minori).

A Appendice

A.1 Implementazioni

Il codice implementato per le simulazioni e per l'analisi si trova nella repository [circle_pimc](#) in particolare per la simulazione si veda `particle_ring.ipynb` e per l'analisi `analysis_circle.ipynb`.

Si è tradotto il codice in iPython in modo da poter visualizzarlo agevolmente come una sorta di presentazione , avendo anche salvati gli output generati da ogni cella di codice all'ultima esecuzione.

I parametri o risultati presenti possono essere diversi perché magari durante la stesura della relazioni si sono modificati i valori per effettuare test o variazioni quindi sono da prendere a titolo di esempio. Anche per questo progetto come anche gli altri è stato utilizzato `Numba` ove possibile.

Riferimenti bibliografici

- [1] Claudio Bonati e Massimo D'Elia. "Topological critical slowing down: Variations on a toy model". In: *Phys. Rev. E* 98 (1 lug. 2018), p. 013308. doi: [10.1103/PhysRevE.98.013308](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.013308).