

# Progetto Numerico Modulo 6: Spettro di una teoria di campo scalare libera tramite PIMC

Roberto Dionisio

June 8, 2023

## Abstract

Lo scopo di questo progetto numerico è lo studio dello spettro di una teoria di campo scalare libero massivo in due dimensioni (una spaziale e una temporale) tramite simulazioni Monte Carlo.

## 1 Campo scalare libero

### 1.1 Discretizzazione

Una teoria di campo scalare libero in  $1 + 1$  dimensioni ha come lagrangiana

$$\mathcal{L}[\phi, \partial_\mu \phi] = \frac{1}{2} \left( \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m^2 \phi^2 \right)$$

e la funzione di partizione nel formalismo del path integral sarà nell'eulideo

$$Z_E[\beta] = \int_{\phi(\mathbf{x},0)=\phi(\mathbf{x},\beta\hbar)} \mathcal{D}[\phi(x)] e^{-S_E[\phi]}$$

dove

$$S_E[\phi] = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int_V d\mathbf{x} \frac{1}{2} \left( \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi + m^2 \phi^2 \right)$$

Si procede allora con il discretizzare il path integral su un reticolo ipercubico isotropo  $L$  di spaziatura  $a$ , di dimensione  $N_t \times N_s$ , con condizioni al bordo periodiche e l'azione discretizzata sarà

$$S_{E,L} = \sum_{\mathbf{n} \in R} \frac{1}{2} \left( \sum_{\mu=1,2} \left( \phi(\mathbf{n} + \boldsymbol{\mu}) - \phi(\mathbf{n}) \right)^2 + \hat{m}^2 \phi^2 \right) \quad (1)$$

dove  $\hat{m} = ma$  e per  $\mathbf{n} + \boldsymbol{\mu}$  si intende che il vettore  $\mathbf{n}$  è incrementato di 1 nella direzione  $\boldsymbol{\mu}$ .

### 1.2 Misura di $\phi^2$

Come test preliminare è stato studiato il valor medio  $\phi^2$  che nella teoria continua il suo valore atteso sul vuoto è

$$\langle 0 | \phi^2(x) | 0 \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \frac{1}{2E_p} \quad (2)$$

che è chiaramente divergente.

Tuttavia, la discretizzazione fornisce un cut-off ultravioletto agli impulsi  $\Lambda \sim 1/a \propto 1/\hat{m}$ ; in particolare si può calcolare esattamente la (2) regolarizzando la teoria cioè inserendo un

cut-off negli estremi d'integrazione per poi infine considerarne il limite

$$\begin{aligned} \langle 0 | \phi^2(x) | 0 \rangle &= \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dp}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{m^2 + p^2}} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \log \left( \frac{\Lambda}{m} + \sqrt{1 + \frac{\Lambda^2}{m^2}} \right) \end{aligned}$$

Quindi essendo  $\Lambda = c/a = cm/\hat{m}$  se si considera il limite al continuo  $\hat{m} \rightarrow 0$  si ottiene un'espansione

$$\langle 0 | \phi^2(x) | 0 \rangle = -\frac{1}{2\pi} \log \hat{m} + \text{cost} + \mathcal{O}(\hat{m}^2) \quad (3)$$

### 1.3 Misura dello spettro

Dall'andamento asintotico dei correlatori temporali sul vuoto di appropriate osservabili si possono ricavare informazioni sullo spettro della teoria.

In particolare si considera

$$\begin{aligned} C(p, q, \tau) &= \langle 0 | \int dx \phi(x, \tau) e^{ipx} \int dy \phi(y, 0) e^{-iqy} | 0 \rangle = \\ &= 2\pi \frac{e^{-E_p \tau}}{2E_p} \delta(p - q) \quad ?? \end{aligned} \quad (4)$$

Questo correlatore ha il significativo vantaggio di selezionare un unico impulso e quindi un'unica energia, e la dipendenza asintotica è quindi data da un unico termine esponenziale.

Da un fit esponenziale in  $\tau$  si può allora ricavare una stima di  $E_k$ , e ripetendo la procedura estrarre quindi la relazione di dispersione.

Per le simulazioni bisognerà chiaramente discretizzarlo. Per comodità si consideri un volume  $[-L, L]$  e i punti spaziali e temporali discretizzati saranno  $x = na$  con  $n = -M, \dots, 0, \dots, M-1$ , e  $\tau = \ell a$  con  $\ell = 0, \dots, N_t - 1$ .

Fatto questo si rende l'impulso adimensionale utilizzando il lattice spacing  $p = k/a$  e i possibili valori saranno  $k = \pi s/M$ , con  $s = 0, \dots, 2M-1$ .

Le trasformate di Fourier si discretizzano come

$$\begin{aligned} \int dx \phi(x, \tau) e^{ipx} &= \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^{+L} dx \phi(x, \tau) e^{ipx} = \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{a \rightarrow 0} a \sum_{n=-L}^{2M-1} \hat{\phi}(n, \ell) e^{2\pi i \frac{ns}{2M}} \end{aligned}$$

dove si è usata l'invarianza sotto traslazioni. Si ha allora che, posto  $p = k_p/a = \frac{\pi}{N_s} s_p$  e analogamente per  $q$ ,

$$C(p, q, \tau) = \lim_{V \rightarrow +\infty} \lim_{N_s a = V} \left\langle \sum_{n, n'=0}^{N_s-1} \hat{\phi}(n, \ell) \hat{\phi}(n', 0) e^{\frac{2\pi i}{N_s} (ns_p - n's_q)} \right\rangle \quad (5)$$

ove  $N_s = 2M$  per tornare alla discretizzazione usuale.

Viceversa per il lato destro della (??)

$$E_p = \sqrt{m^2 + p^2} = \frac{1}{a} \sqrt{\hat{m}^2 + k^2} \quad k = \frac{2\pi}{N_s} s$$

e la delta di Dirac si discretizza come

$$\begin{aligned} \delta(p - q) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^{+L} \frac{dx}{2\pi} e^{i(p-q)x} = \lim_{V \rightarrow +\infty} \lim_{M \rightarrow 0} = \\ &= \frac{a}{2\pi} \sum_{n=-M}^{M-1} e^{i\pi(s_p - s_q)n/M} = \lim_{V \rightarrow +\infty} \lim_{M \rightarrow 0} \frac{a}{2\pi} 2M \delta_{s_p, s_q} \end{aligned}$$

da cui

$$2\pi \frac{e^{-E_p \tau}}{2E_p} \delta(p - q) = \lim_{V \rightarrow +\infty} \lim_{N_s a = V} a^2 N_s \frac{e^{-\sqrt{\hat{m}^2 + k^2} \tau}}{2\sqrt{\hat{m}^2 + k^2}}$$

Uguagliando e semplificando la relazione discretizzata sarà allora

$$\begin{aligned} \bar{C}(s, \ell) &= \frac{1}{N_s} \left\langle \sum_{n, n'=0}^{N_s-1} \hat{\phi}(n, \ell) \hat{\phi}(n', 0) e^{i \frac{2\pi}{N_s} s(n-n')} \right\rangle = \\ &= \frac{e^{-\sqrt{\hat{m}^2 + k^2} \tau}}{2\sqrt{\hat{m}^2 + k^2}} \quad (\hat{m} \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (6)$$

Per ogni valore di  $\hat{m}$  si ricava quindi una dispersione  $E(k, \hat{m})$ , che si può fittare con legge relativistica

$$E(k, \hat{m}) = \sqrt{\hat{m}_{\text{fit}}^2 + k^2}$$

per ricavare il valore del gap della teoria. Tale procedura andrà chiaramente ripetuta a vari valori di  $\hat{m}$ , e si dovrà considerare il limite continuo  $\hat{m} \rightarrow 0$ .

Nella pratica il lato sinistro dell'equazione (6) è stato valutato numericamente come

$$\bar{C}(s, \ell) = F(0, \ell) + \frac{2}{N_s} \sum_{\Delta n=1}^{N_s-1} \cos\left(\frac{2\pi}{N_s} s \Delta n\right) F(\Delta n, \ell) (N_s - \Delta n)$$

dove

$$F(n - n', \ell) = \langle \phi(n, \ell) \phi(n', 0) \rangle$$

è stata calcolata mediando su tutte le possibili coppie del reticolo, a tempo Monte Carlo fissato, per cui la distanza spaziale fosse  $|n - n'|$  e quella temporale fosse  $\ell$ , sfruttando l'invarianza sotto traslazioni e sotto parità spaziale.

## 2 Implementazione

Per simulare il sistema a temperatura finita si è utilizzato l'algoritmo locale dell' *Heat-Bath*, cioè un'estrazione di  $\phi(\mathbf{n})$  (per un  $\mathbf{n}$  scelto casualmente in modo uniforme) con distribuzione gaussiana

$$P(\phi(\mathbf{n})) \propto \exp \left[ -\frac{\hat{m}^2 + 4}{2} \left( \phi(\mathbf{n}) - \frac{f(\mathbf{n})}{\hat{m}^2 + 4} \right)^2 \right]$$

dove  $f(\mathbf{n}) = \sum_{\mu=1,2} (\phi(\mathbf{n} + \boldsymbol{\mu}) + \phi(\mathbf{n} - \boldsymbol{\mu}))$

quindi con media  $\frac{f(\mathbf{n})}{\hat{m}^2 + 4}$  e varianza  $\frac{1}{\hat{m}^2 + 4}$ . A questo algoritmo si sono alternate<sup>1</sup> quattro mosse di *over-relaxation* su altrettanti siti scelti casualmente, i.e.

$$\phi(\mathbf{n}) \rightarrow 2 \frac{f(\mathbf{n})}{\hat{m}^2 + 4} - \phi(\mathbf{n}). \quad (7)$$

quindi sfruttando la simmetria della gaussiana riflette i valori del campo in modo da non cambiare l'azione (ha quindi accettazione 1) e come si vedrà porterà a dei vantaggi, in quanto permette di esplorare meglio e in maniera più efficiente la distribuzione ad un costo computazionale ridotto.

In un singolo tempo Monte Carlo vengono ripetute queste mosse per un numero pari al numero di siti del reticolo  $N_s \cdot N_t$ .

Per le simulazioni si è fissato  $\beta m = N_t \hat{m} = 10$ , valore sufficientemente grande per ignorare effetti di temperatura finita, in quanto questi sono soppressi esponenzialmente in  $\beta m$ .

Il parametro che controlla il limite di volume infinito è invece  $\alpha = Lm = N_s \hat{m}$  che successivamente verrà scelto in modo opportuno.

## 3 Analisi

### 3.1 Analisi di $\langle \phi^2 \rangle$

Per verificare l'andamento previsto di  $\langle \phi^2 \rangle$  si è simulato inizialmente il comportamento del retico per 15 valori di  $\hat{m} \in [0.01, 0.1]$  e prendendo  $N_t \hat{m} = 10$  e con un  $\alpha$  inizialmente uguale a 10 per poi considerare anche il caso  $\alpha = 50$  facendo 30000 sweeps Monte Carlo che dai risultati non sembra portare nessun vantaggio mentre risulta dispendioso da un punto di vista computazionale.

Si sono allora simulati reticoli con 50 valori di  $\hat{m} \in [0.005, 0.2]$ <sup>2</sup> con  $N_s = N_t = 10/\hat{m}$  con  $10^5$  Monte Carlo sweeps prendendo misure ogni 10 steps.

Per ogni  $\hat{m}$  si sono condotte due simulazioni indipendenti, con stessi parametri, una standard con 4 mosse di *over-relaxation* alternate all'*Heat-Bath* e l'altra invece senza *over-relaxation* per quantificarne i vantaggi.

Al solito per stimare l'errore su  $\langle \phi^2 \rangle$ , essendo quantità autocorrelate, si è usata la tecnica del blocking, inizialmente lasciando libera la dimensione del blocco per guardare quando l'errore raggiungesse un plateau e poter determinare la dimensione dei blocchi ottimale da come si può vedere in Figure 1. Si è scelta allora come dimensione del blocco  $2^{10}$ .<sup>3</sup> Si sono effettuati dei fit lineari in scala semi-logaritmica ( $f(x) = a + bx$ ) di  $\langle \phi^2 \rangle$  in funzione di  $\hat{m}$  per le due varianti di simulazioni ottenendo:

$$(\text{ON}) \quad -2\pi b = 0.996(3) \quad \chi^2/\text{ndof} = 25.3/23$$

$$(\text{OFF}) \quad -2\pi b = 0.994(11) \quad \chi^2/\text{ndof} = 33.7/23$$

Seppur entrambi i risultati siano compatibili con il valore teorica previsto si noti come sia il  $\chi^2$  che l'errore relativo siano maggiori per il caso senza *over-relaxation*.

In Figura 1 si riportano i fit dell'andamento di  $\langle \phi^2 \rangle$ , escludendo valori di  $\hat{m} \geq 10^{-1}$  essendo l'andamento previsto valido nel limite al continuo.

<sup>1</sup>l'over-relaxation è non ergodico e quindi bisogna alternarlo all'usuale heat-bath per recuperare l'ergodicità.

<sup>2</sup>I valori sono equispaziati nell'intervallo

<sup>3</sup>Si sono scartate le prime 1808 misure per far sì che il dataset fosse divisibile in blocchi a potenza di 2.

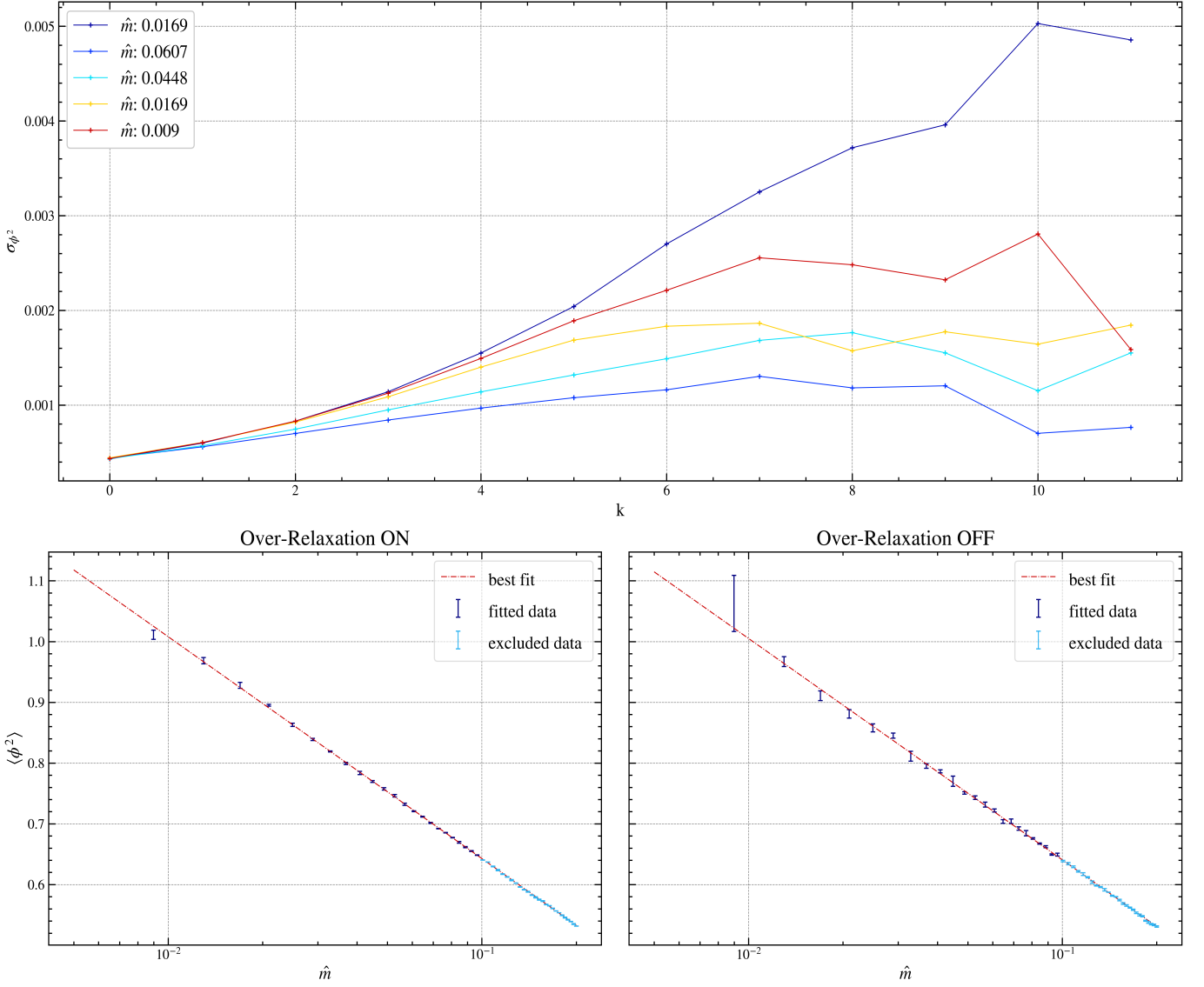


Figure 1: **(In alto)** Blocking per trovare la dimensione dei blocchi ottimale per la stima dell'errore su  $\langle \phi^2 \rangle$ . **(In basso)** Fit per l'andamento di  $\langle \phi^2 \rangle$  nel limite al continuo per le due varianti di simulazioni considerate.

### 3.2 Spettro Energetico

Per valutare la legge di dispersione numericamente bisognerà considerare impulsi  $k \ll 1$  in modo da riprodurre quella attesa nel limite al continuo.

Bisognerà allora considerare nei fit per i correlatori solo i punti con impulso minore di un certo cut-off  $k_0 = 1/3$ , per avere allora un numero di punti ragionevole nella regione del fit si sono condotte delle simulazioni con  $10^5$  Monte Carlo sweeps e per i seguenti valori di  $\hat{m}$ :

1.  $\hat{m} \in [0.21, 1]$  per un totale di 20 valori equispaziati
2.  $\hat{m} \in [0.05, 0.2]$  per un totale di 8 valori equispaziati

Per le simulazioni 1 per avere abbastanza punti prima del cut-off si sono scelti gli  $\alpha$  in modo tale da avere circa 10 punti a  $k < k_0$ :

$$\alpha = \frac{2\pi\hat{m}10}{k_0}$$

Mentre per le simulazioni di tipo 2 si è scelto  $\alpha = 20$ . Per quanto riguarda le incertezze sui correlatori  $\bar{C}(s, \ell)$  sono state stimate tramite blocking con dimensione del blocco pari a  $2^8$ .

Allora per ogni  $\hat{m}$  si è eseguito un fit esponenziale su  $\bar{C}(s, \ell)$  a fisso  $s$ , con modello

$$f(\ell) = \frac{e^{-c\ell}}{2c} \quad (8)$$

dove  $c$  risulterà essere funzione di  $\hat{m}$  ed  $s$ , e rappresenta la dispersione della teoria.

Osservando però i correlatori a fisso  $s$  si nota che anziché esserci un decadimento esponenziale nel tempo euclideo vi è una risalita a cause della periodicità nel tempo, si sono allora considerati solo i punti fino a  $\ell = N_t/3$

Inoltre, essendo i correlatori utilizzati per i fit prodotti dalla stessa storia Monte Carlo sono tra loro autocorrelati e dato che la routine di fit utilizzata (*curve\_fit* di *scipy*) presume che i dati siano scorrelati nel determinare l'incertezza sui parametri, per stimare quest'ultima si è allora eseguito un *bootstrap* (con *binning* a blocchi di  $2^8$ ), calcolando i correlatori da 100 resample della storia Monte Carlo, eseguendo i fit corrispondenti e prendendo come incertezza sul parametro di best-fit (il cui valore centrale è ottenuto dal sample originario) la deviazione standard dei risultati ottenuti dai resampling.

Durante questa routine si sono stampati i  $\chi^2/\text{ndof}$  man mano che si eseguivano i vari fit e si è notata una notevole

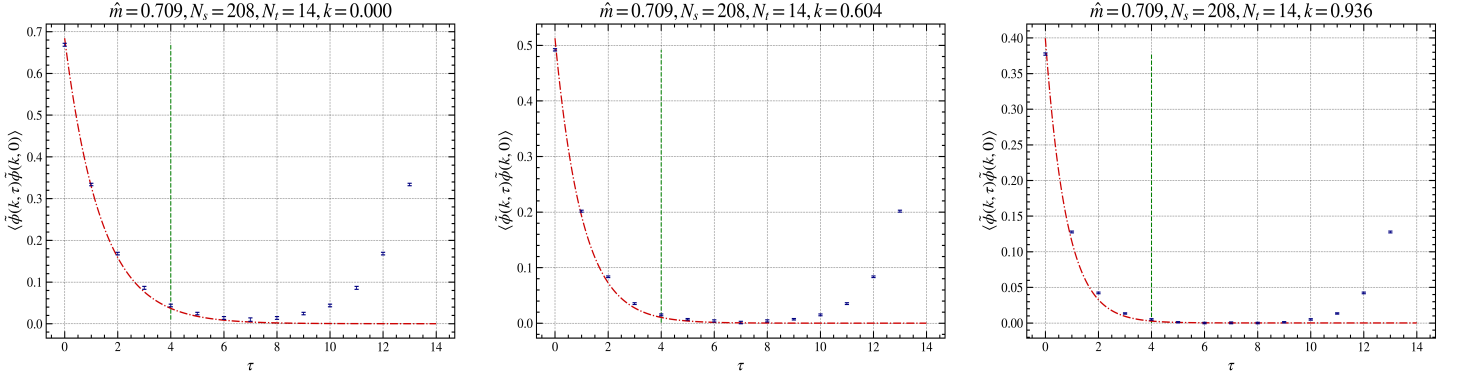


Figure 2:  $\chi^2/\text{ndof}$  in successione : 12.7, 67.3, 127.7

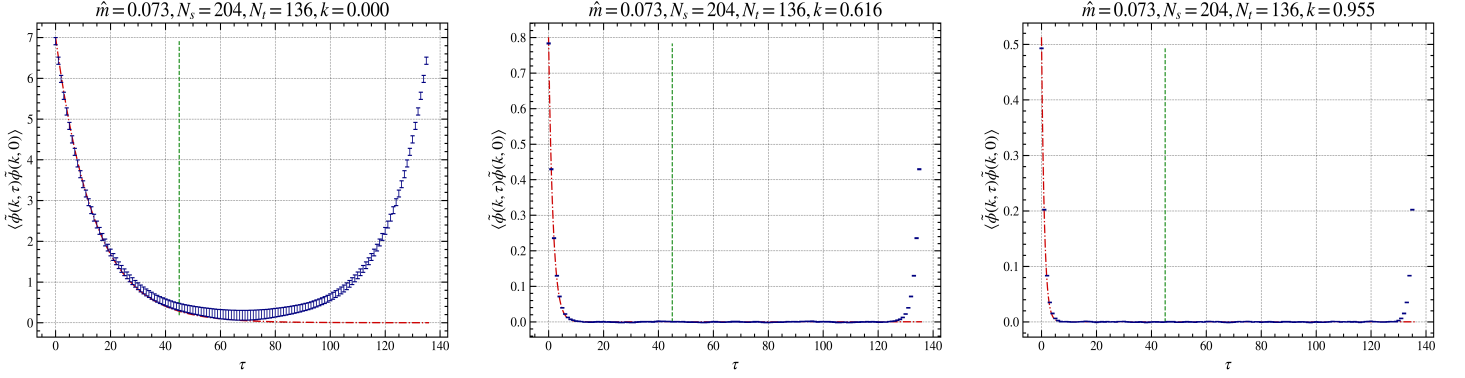


Figure 3:  $\chi^2/\text{ndof}$  in successione : 0.9, 10.4, 48.9

variabilità al variare di  $m$  e  $k$  questo probabilmente per due motivi:

1. Nonostante la procedura di *bootstrap*, i singoli fit sono comunque eseguiti su dati correlati e quindi, dato che i  $\chi^2$  tengono conto solo delle varianze dei  $\bar{C}(s, \ell)$ , questi risultano più piccoli di quanto ci si attenderebbe da un buon fit.

Effettivamente questo si riscontra almeno per gli  $\hat{m}$  e i  $k$  più piccoli.

2. Il  $\chi^2$  cresce all'aumentare di  $k$  e di  $\hat{m}$ . Una possibilità, avvalorata da quanto si vede ad esempio dalla Figura ?? è che il modello (8) non sia più valido per grandi  $k$  e/o  $\hat{m}$ . In effetti, l'andamento esponenziale del correlatore rimane valido anche per la teoria di Klein-Gordon con spazio discretizzato, ma il tempo deve essere continuo. Questa ultima condizione si può così imporre

$$a_t \ll \frac{1}{\omega_s} \quad \forall s \quad (9)$$

dove  $\omega_s = \sqrt{m^2 + \frac{4}{a_s^2} \sin^2\left(\frac{\pi s}{N_s}\right)}$  sono le frequenze di Klein-Gordon discreto. Otteniamo quindi

$$\hat{m}^2 + 4 \sin^2\left(\frac{\pi s}{N_s}\right) \ll 1 \quad (10)$$

quindi non solo  $\hat{m}$  deve essere piccolo, ma se  $s$  è troppo grande questa condizione non può essere soddisfatta, da cui il discostamento dall'andamento esponenziale previsto dalla teoria a tempo continuo. Per il primo fit di Figura 3 il  $\chi^2 \sim 1$  essendo verificate entrambe le richieste sia su  $s$  che su  $\hat{m}$

Fatto questo si procede ora al valutare la legge di dispersione.

Sui parametri ottenuti dai fit esponenziali  $c(s, \hat{m})$  sono stati eseguiti ulteriori fit a fisso  $\hat{m}$  in funzione dell'impulso  $k = \frac{2\pi}{N_s} s$  con modello

$$f(k) = \sqrt{\hat{m}_{\text{fit}}^2 + k^2}$$

limitati ai punti, come detto precedentemente ad impulso minore del cut-off  $k_0$ . In Figura 4 sono riportati dei fit per alcuni valori di  $\hat{m}$  dove si può notare come la legge di dispersione prevista venga ben riprodotta per impulsi  $k < k_0$ . Dopodiché si è effettuata un'estrapolazione al continuo dei valori dei mass gap ottenuti dai singoli fit  $\hat{m}_{\text{fit}}$  (in unità del parametro di simulazione) assumendo correzioni quadratiche al valore asintotico che ci si aspetta nel limite  $\hat{m} \rightarrow 0$ :

$$f(\hat{m}) = a + b\hat{m}^2$$

e come  $f(\hat{m})$  si sono considerati gli  $\hat{m}_{\text{fit}}$  in unità dei parametri di simulazione.

I risultati di questo fit, riportati in Figura 4 sono

$$a = 1.0006(6) \quad b = 0.072(1) \\ \chi^2/\text{ndof} = 38/26$$

e il valore di  $a$  che corrisponde al limite asintotico è in ottimo accordo con quello atteso cioè  $\hat{m}_{\text{fit}}/\hat{m} = 1$ .

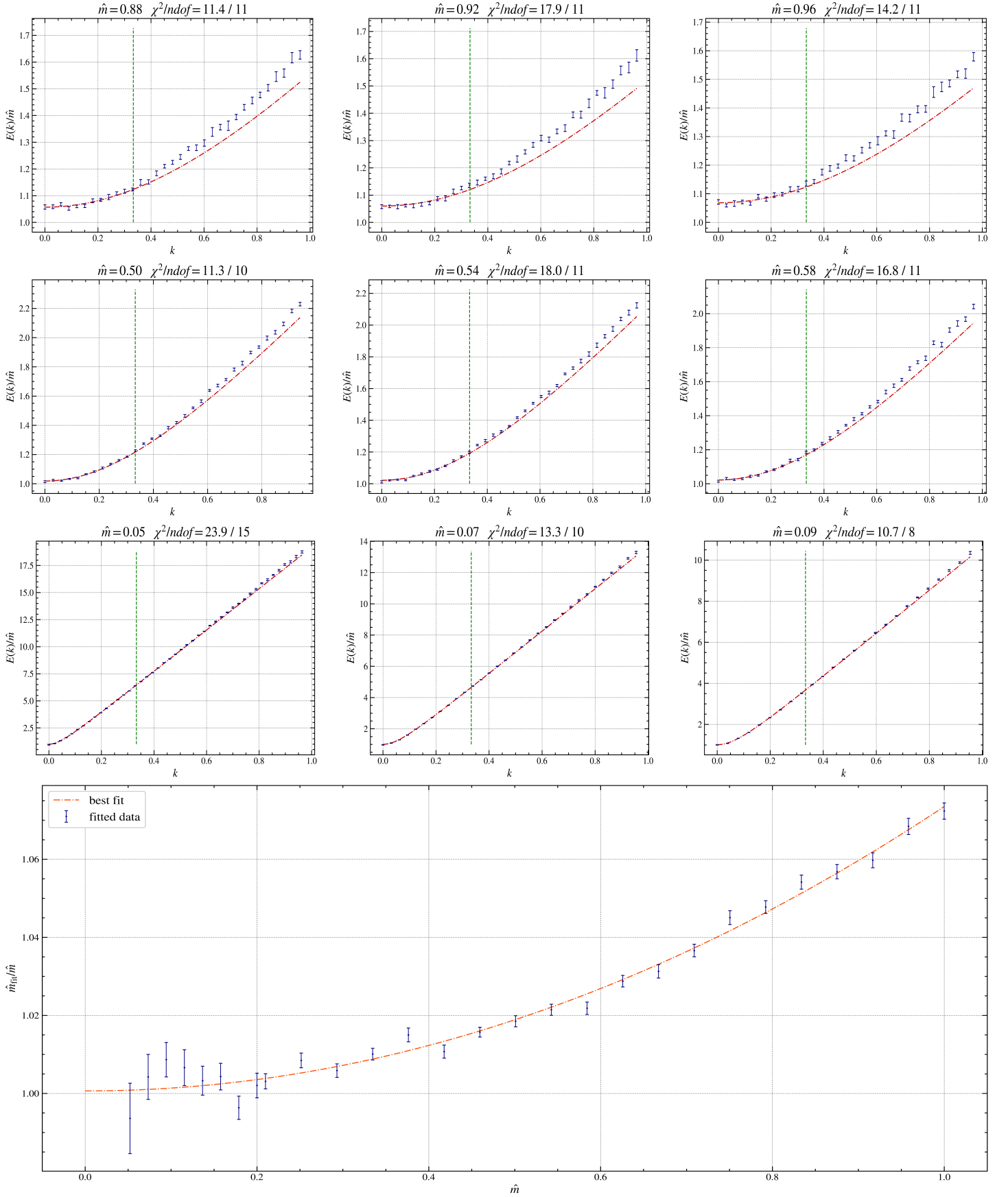


Figure 4: **(In alto)** Nelle prime tre righe ci sono i fit delle relazioni di dispersioni per alcuni valori di  $\hat{m}$  (linea verticale verde sta ad indicare il cut-off  $k_0$  entro cui si sono considerati i dati su cui effettuare i fit). **(In basso)** fit per l'estrapolazione al continuo dei valori di  $\hat{m}_{\text{fit}}$  ottenuti precedentemente in unità dei parametri  $\hat{m}$  usati per le simulazioni.

# A Appendice

## A.1 Implementazioni

Il codice implementato per le simulazioni e per l'analisi si trova nella repository `scalar_field` in particolare per la simulazione si veda `scalarfield_sim.ipynb` e per l'analisi `analysis_sf.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.