Bachelorarbeit in Physik

Gitterfeldtheoretische Behandlung des harmonischen Oszillators in der Pfadintegralformulierung in Euklidischer Raum-Zeit

Martin Ueding
mu@martin-ueding.de

Juli 2014

Angefertigt im Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik,
vorgelegt der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Bonn

1. Gutachter: Prof. Dr. Carsten Urbach
2. Gutachter: PD Dr. Bernard Metsch

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung **5**

2. Pfadintegrale **7**
2.1. Einleitung 7
2.2. Integration über den Phasenraum 8
2.2.1. MARKOVketten 8
2.2.2. METROPOLISalgorithmus 10

3. Energiewerte **13**
3.1. Generalisiertes Eigenwertproblem 14
3.1.1. Interpolationsfelder 14
3.1.2. Korrelationsfunktionen 14
3.1.3. Lösung des GEVP durch CHOLESKYzerlegung 15
3.2. Eindimensionaler Oszillator mit δ-Störung 15
3.2.1. Virialsatz 17

4. Ergebnisse **19**
4.1. Harmonischer Oszillator 19
4.1.1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit 19
4.1.2. Korrelationen 20
4.2. Oszillator mit Störung 23
4.2.1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit 23
4.2.2. Energiewerte 24

5. Zusammenfassung **31**

A. Bootstrap Methode **33**

1. Einleitung

In der Physik gibt es zahlreiche Probleme, die nicht analytisch gelöst werden können. Bei einigen von ihnen lässt sich das Problem in einen analytisch lösbaren Teil und einen kleinen Störteil aufteilen. Die Störungstheorie versagt jedoch bei Theorien wie der Quantenchromodynamik (QCD), so dass vor allem numerische Methoden notwendig sind [Wit13].

Anhand des harmonischen Oszillators möchte ich in dieser Arbeit die Methoden von CREUTZ und FREEDMAN nachvollziehen und anwenden. Da dieses System analytisch gelöst werden kann, können auf diese Weise die numerischen Ergebnisse mit den analytischen verglichen werden. Danach betrachte ich einen harmonischen Oszillator mit δ-Störung, bei dem ich die numerischen Resultate ebenfalls mit den analytischen Erwartungen vergleichen kann.

Die Grundlagen der Quantenmechanik können zum Beispiel in [Sch07] oder [Nol09] nachgelesen werden. Diese werden als gegeben vorausgesetzt und nicht durchgängig explizit zitiert.

2. Pfadintegrale

2.1. Einleitung

FEYNMANs Pfadintegralformalismus erlaubt, ein quantenmechanisches System mit n Freiheitsgraden in ein klassisches System mit $n+1$ Freiheitsgraden zu überführen [Thi07, §12.4]. Dieses System kann dann mit Methoden ähnlich der statistischen Physik behandelt werden. Analog zur kanonischen Zustandssumme tritt hier eine Summe über alle Weltlinien, die zwischen festem Anfangs- und Endpunkt x_A bzw. x_E und einem Zeitinterval T liegen, auf [CF80, (2.7)]:[1]

$$Z(x_\mathrm{E}, x_\mathrm{A}) = \sum_{\text{Trajektorien } j} \exp(\mathrm{i}S_j).$$

Die Phase mit der Wirkung[2] S wird stark variieren, so dass es ab dieser Stelle hilfreich ist, imaginäre Zeit zu betrachten. Dazu wird $\tau := \mathrm{i}t$ eingeführt, entsprechend einer sogenannten WICKrotation. Diese hat die Eigenschaft, ein quantenmechanisches System in ein Thermodynamisches zu überführen [Ste06, S. 24].

Schreibt man $\int \mathscr{D}\boldsymbol{x}$ für eine Integration über alle Trajektorien $x(\tau)$, die $x(0) = x_\mathrm{A}$ und $x(T) = x_\mathrm{E}$ erfüllen, so kann die Summe umgeschrieben werden zu [CF80, (2.1)]:

$$\int \mathscr{D}\boldsymbol{x}\, \exp\big(-S(x)\big).$$

S ist hier ein Funktional der Trajektorie x. Der Integrand wird nur in der Nähe der minimalen Wirkung Beiträge liefern. Dies reduziert den Bereich des Phasenraums, über den integriert werden muss derart, dass die Integration mit Monte-Carlo-Methoden gut möglich ist.

Die Wirkung ist auch hier die Zeitintegration der LAGRANGEfunktion [CF80, (2.5)]:

$$S = \int_0^T \mathrm{d}\tau \left[\frac{1}{2} m \left[\frac{\partial x}{\partial \tau}(\tau) \right]^2 + V(x) \right].$$

Diskretisiert man die Weltlinien, so wird es möglich, die Integration über alle Weltlinien auszuführen. Das Integrationsmaß wird bei einer Unterteilung in $N+1$ (also $0, \ldots, N$) Zeitpunkte zu:

$$\int \mathscr{D}\boldsymbol{x} \quad \rightsquigarrow \quad \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_j.$$

[1] Ich wähle die Einheiten so, dass $\hbar = 1$ ist.
[2] Für die Grundlagen der klassischen Mechanik siehe zum Beispiel [Kuy10].

Der Abstand der diskreten Zeitpunkte ist der Einfachheit halber konstant und wird als a definiert. Somit gilt $T = Na$. Durch die Diskretisierung werden Weltlinien unterdrückt, die sich zwischen den Zeitpunkten stark ändern. Im Gegensatz zur reellen Zeit, in der Weltlinien mit beliebiger Wirkung in die Zustandssumme einfließen können, fließen mit imaginärer Zeit Weltlinien mit großer Geschwindigkeit (und daher großer Wirkung) exponentiell weniger stark ein. Daher ist die Benutzung eines Zeitgitters in Kombination mit imaginärer Zeit legitim. Im Grenzfall $a \to 0$ erhält man den kontinuierlichen Fall zurück.

Durch die diskrete Zeit wird in der Wirkung die Zeitableitung durch einen Differenzenquotienten ersetzt. Die LAGRANGEfunktion hängt nur noch von zwei aufeinanderfolgenden Koordinaten ab. Die Wirkung einer Weltlinie $\boldsymbol{x}^{(k)}$ wird dann gegeben durch [CF80, (3.2)]:

$$S\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) = a \sum_{j=1}^{N} L\left(x_j^{(k)}, x_{j+1}^{(k)}\right),$$

wobei periodische Randbedingungen mit $x_N = x_0$ festgesetzt wurden.

2.2. Integration über den Phasenraum

Der Raum der möglichen diskreten Weltlinien hat N Dimensionen und ist unbeschränkt. Aufgrund der hohen Dimension sind Monte-Carlo-Methoden zu bevorzugen. Der Bereich der Weltlinien, die einen nennenswerten Beitrag zum Integral liefern, ist jedoch durch die exponentielle Gewichtung recht klein. Der Algorithmus von METROPOLIS wählt die Weltlinien entsprechend dieser Gewichtung so aus, dass ein ungewichteter Mittelwert dieser Weltlinien einen Schätzwert für die gewünschte Größe gibt [CF80, S. 434]. Die Wahrscheinlichkeit, die Trajektorie $\boldsymbol{x}^{(k)}$ zu erhalten, wird durch

$$p\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) = \frac{\exp\left(-S\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right)\right)}{\int \mathscr{D}\boldsymbol{x}\, \exp\left(-S(\boldsymbol{x})\right)} \tag{2.1}$$

gegeben [CF80, (3.6)]. Werden M Weltlinien durch den METROPOLISalgorithmus generiert, so ist der Schätzwert $\overline{A}$ für eine Größe $\langle A \rangle$ [CF80, (3.7)]:

$$\overline{A} := \frac{1}{M} \sum_{k=1}^{M} A\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right).$$

2.2.1. Markovketten

Um die Weltlinien entsprechend gewichtet generieren zu können, kommt ein bestimmter MARKOVprozess zum Einsatz, der aus einer Weltlinie die Nächste generiert. Für $M \to \infty$ nähert sich die Verteilung Gleichung (2.1) an. [CF80, S. 434]

Die Weltlinien des einen Oszillators, die aus den N Koordinaten $\{x_j\}$ bestehen, können auch als Koordinaten für N Teilchen interpretiert werden. Somit ist eine Trajektorie ein Zustand dieses

Vielteilchensystems. Man kann nun eine Übergangsmatrix W_{ij} definieren, die die Wahrscheinlichkeit angibt, dass das System vom Zustand $\boldsymbol{x}^{(i)}$ in den Zustand $\boldsymbol{x}^{(j)}$ wechselt. Durch die diskrete Zeit entspricht ein Zeitschritt einem Übergangsschritt.

Die Matrixelemente müssen $W_{ij} \geq 0$ und $\sum_j W_{ij} = 1$ erfüllen, da jeder Zustand in einen nächsten (oder sich selbst) übergehen muss [CF80, (3.8)]. Da die x_j aus $\mathbb{R}$ stammen und somit die $\boldsymbol{x}^{(k)}$ aus $\mathbb{R}^N$, muss die Übergangsmatrix eine Wahrscheinlichkeitsdichte sein. Die analogen Bedingungen sind dann $W(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}) \geq 0$ und $\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{(j)} W(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}) = 1$ für alle $\boldsymbol{x}^{(i)}$ [CF80, (3.9)].

Die Übergangswahrscheinlichkeit mit Zwischenposition x_j wird durch Integration über diese ermittelt [CF80, (3.9)]:

$$W^{(2)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(k)}\right) = \int \mathrm{d}x^{(j)} W\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right) W\left(\boldsymbol{x}^{(j)}, \boldsymbol{x}^{(k)}\right).$$

Daraus kann die Rekursionsformel

$$W^{(n)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(k)}\right) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{(j)} W^{(n-1)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right) W\left(\boldsymbol{x}^{(j)}, \boldsymbol{x}^{(k)}\right)$$

konstruiert werden [CF80, (3.10)]. Anhand der Eigenschaften von W lässt sich zeigen[3], dass es eine Zustandsverteilungsdichte P gibt, so dass sie linker Eigenvektor von $W^{(\infty)}$ ist. Das W, das für die Pfadintegrale benötigt wird, soll gerade $p(\boldsymbol{x})$ aus (2.1) als Eigenvektor haben. Somit sind die Anforderungen an W die folgenden [CF80, (3.18)]:

- $W\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right) > 0$ falls $p\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right) > 0$ und $p\left(\boldsymbol{x}^{(j)}\right) > 0$,
- $\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{(j)} W\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right) = 1$,
- $p\left(\boldsymbol{x}^{(j)}\right) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{(i)} p\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right) W\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right)$.

Um die Bedingungen zu erfüllen, ist die Wahl von W so, dass

$$\frac{W\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right)}{W\left(\boldsymbol{x}^{(j)}, \boldsymbol{x}^{(i)}\right)} = \frac{p\left(\boldsymbol{x}^{(j)}\right)}{p\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)}$$

gilt, möglich [CF80, (3.23)]. In der Quelle wird die Relation „detailed balance condition“ genannt. Dieses *detaillierte Gleichgewicht* sagt aus, dass es sich bei p um einen Gleichgewichtszustand handelt, da Anzahl der Übergänge von $\boldsymbol{x}^{(i)}$ nach $\boldsymbol{x}^{(j)}$ genauso groß ist wie in der Rückrichtung [Sch05, S. 85].

Im Algorithmus geht nicht die ganze Trajektorie $\boldsymbol{x}$ in einem Schritt auf eine neue Trajektorie $\boldsymbol{x}'$ über. Vielmehr werden die x_j einzeln in ein x'_j überführt. Nach N dieser Einzelschritte ist eine neue Weltlinie $\boldsymbol{x}'$ erzeugt. Einer dieser Einzelschritte führt die Weltlinie $\boldsymbol{x}$ in eine Weltlinie $\tilde{\boldsymbol{x}}$ über. Dabei wird nur die Koordinate x_j zu x'_j geändert. Mit (2.1) kann man daher die Beziehung

[3] Siehe [CF80, S. 435] und [CF80, Anhang B].

[CF80, (3.25)]

$$\frac{W(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}})}{W(\tilde{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{x})} = \frac{\exp\Big(-S(x_1,\ldots,x_j',\ldots,x_N)\Big)}{\exp\Big(-S(x_1,\ldots,x_j,\ldots,x_N)\Big)},$$

herleiten, welche durch die Wahl $W(x_j,x_j') \propto \exp(-S(\ldots,x_j',\ldots))$ zu erfüllen ist [CF80, (3.27)]. Dieser Algorithmus wird „heat bath algorithm“ bezeichnet und hat den Nachteil, dass es kompliziert ist, x_j' entsprechend der Verteilung $\exp(-S(\ldots,x_j',\ldots))$ zu ziehen [CF80, S. 438].

2.2.2. Metropolisalgorithmus

Der Algorithmus von METROPOLIS et al. umgeht dieses Problem, indem er nach einer einfach zu implementierenden Vorschrift die x_j' generiert [CF80, S. 439], siehe Algorithmus 2.1.

for $j \leftarrow 1,\ldots,N$ **do**
  $x_j' \leftarrow$ ZUFALLSZAHL$(-\infty,\ \infty)$
  $\Delta S \leftarrow S(x_0,\ldots,x_{j-1},x_j',x_{j+1},\ldots,x_N) - S(\{x_i\})$
  if $\Delta S \leq 0$ **then**
    $x_j \leftarrow x_j'$
  else
    $r \leftarrow$ ZUFALLSZAHL$(0,\ 1)$
    if $r < \exp(-\Delta S)$ **then**
      $x_j \leftarrow x_j'$
    end if
  end if
end for

Algorithmus 2.1: METROPOLISalgorithmus. Die Funktion ZUFALLSZAHL(a,b) erzeugt eine Zufallszahl im Intervall (a,b).

Es werden also neue Werte für x_j, nämlich x_j', aus einer Verteilung gezogen. Ist die Änderung der Wirkung ΔS negativ, so wird der neue Wert übernommen. Andernfalls wird der Wert mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(-\Delta S)$ übernommen. Wenn der Abstand zwischen x_j' und x_j groß ist, ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Wert übernommen wird, sehr gering. Daher ist es effizienter, x_j' nicht aus dem Intervall $(-\infty,\infty)$ zu ziehen, sondern eine Breite Δ einzuführen [CF80, S. 439]. Die Autoren schlagen eine Einheitsverteilung im Bereich $[x_j-\Delta, x_j+\Delta]$ vor.

Ich benutze in meiner Implementierung eine Normalverteilung mit einer Standardabweichung Δ. Dies führt zu noch höheren Akzeptanzraten für neue Werte, die die Wirkung S erhöhen. Um den Übergang zu einer neuen Konfiguration noch weiter zu beschleunigen, kann man das Ziehen eines neuen x_j' mehrfach für das gleiche j wiederholen. Dadurch ist es möglich, dass x_j sich stärker verändert als in einem einzigen Schritt. Die Anzahl dieser Wiederholungen bezeichne ich mit $\bar{n}$.

CREUTZ und FREEDMAN geben

$$W(x_j,x_j') = \frac{1}{N_0}\left(\Theta(-\Delta S) + \exp(-\Delta S)\Theta(\Delta S) + \int \mathrm{d}x'\,\big(1-\exp(-\Delta S)\big)\,\Theta(\Delta S)\delta(x_j'-x_j)\right)$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte für diesen Algorithmus an [CF80, (3.28)], wobei ich $\Delta S := S(\ldots, x_j', \ldots) - S(\ldots, x_j, \ldots)$ definiert habe, Θ die Heaviside Stufenfunktion und N_0 das Volumen des Konfigurationsraumes ist. Mit dieser Gleichung kann nachvollzogen werden, dass W die geforderten Bedingungen erfüllt.

Die Wirkungsänderung ΔS beim Übergang von x_j zu x_j' wird effizient dadurch berechnet, dass nur die Wirkung der Schritte von $j-1$ zu j und von j zu $j+1$ berechnet wird. Dazu definiere ich die Wirkung für einen Gitterschritt:

$$S_{\text{Schritt}}(x_j, x_j') := \frac{a\mu}{2} \left[\frac{\left[x_j' - x_j\right]^2}{a^2} + V(x_j) \right].$$

Damit kann ich die Wirkungsänderung zwischen zwei Weltlinien, die sich in nur einer Koordinate unterscheiden, effizient berechnen:

$$\Delta S = \left[S_{\text{Schritt}}(x_{j-1}, x_j') + S_{\text{Schritt}}(x_j', x_{j+1}) \right] - \left[S_{\text{Schritt}}(x_{j-1}, x_j) + S_{\text{Schritt}}(x_j, x_{j+1}) \right].$$

3. Energiewerte

Beim harmonischen Oszillator kann die Grundzustandsenergie über den Virialsatz bestimmt werden. Dieser besagt allgemein $\langle \boldsymbol{F}\boldsymbol{r}\rangle + 2\langle T\rangle = 0$ [Kuy10, S. 551]. $\boldsymbol{F}$ kann auch als $-\boldsymbol{\nabla}V$ geschrieben werden. In einer Dimension reduziert sich dies auf

$$T = \frac{1}{2}m\langle v^2\rangle = \frac{1}{2}\langle xV'(x)\rangle$$

wie in [CF80, (2.29)]. Ist das Potential durch $V(x) = \mu^2 x^2/2$ wie beim harmonischen Oszillator gegeben, so gilt $2\langle T\rangle = \mu^2\langle x^2\rangle$. Da die komplette Energie $T + V$ ist, muss gelten:

$$\langle E\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \frac{1}{2}\mu^2\langle x^2\rangle + \frac{1}{2}\mu^2\langle x^2\rangle = \mu^2\langle x^2\rangle,$$

wie bereits in [CF80, (4.13)] benutzt.

Die Energie des ersten angeregten Zustands kann mit der Korrelation berechnet werden [CF80, (4.14)]:

$$E_1 = \lim_{\tau\to\infty} \frac{-1}{\Delta\tau} \ln\left(\frac{\big\langle x(0)\,x(\tau+\Delta\tau)\big\rangle}{\big\langle x(0)\,x(\tau)\big\rangle}\right) + E_0. \tag{3.1}$$

Dies ist äquivalent zu einer abfallenden Exponentialfunktion, die an die Korrelationsfunktion $C_{11}(\tau) = \langle x(0)\,x(\tau)\rangle$ angepasst wird. Sei die Anpassungsfunktion

$$f(\tau) := c_1 \exp\big(-\Delta E_1 \tau\big). \tag{3.2}$$

Die Korrelationen in (3.1) drücke ich durch f aus. Somit erhalte ich:

$$E_1 - E_0 = \lim_{\tau\to\infty} \frac{-1}{\Delta\tau} \ln\left(\frac{f(\tau+\Delta\tau)}{f(\tau)}\right) = \Delta E_1.$$

Die Anpassungsfunktion ist gültig und darf anstelle des Grenzwertes benutzt werden. Auf diese Weise kann ich viele Messdaten in die Berechnung von ΔE_1 einbeziehen.

Mit E_0 aus dem Virialsatz und ΔE_1 aus den Korrelationen lässt sich E_1 bestimmen. Energien für noch höhere Zustände können mit dem *generalisierten Eigenwertproblem* (GEVP) errechnet werden.

3.1. Generalisiertes Eigenwertproblem

3.1.1. Interpolationsfelder

Für das GEVP werden Interpolationsfelder O_i gewählt [Blo+09, S. 1]. In diesem Fall ist die Wahl $O_i(x) = x^i$ sinnvoll.

x lässt sich durch die Ab- und Aufsteigeoperatoren a bzw. $a^\dagger$ ausdrücken: $x \propto a + a^\dagger$ [Sch07, (3.5a)]. Die Potenzen von x enthalten demnach Potenzen von a, womit die Matrixelemente $\langle 0|a^i|n\rangle = 0$ sind, wenn $i < n$. Sie sind jedoch ebenfalls 0, wenn $i - n$ ungerade ist. Die größte Potenz von a in x^i ist a^i. Bei einer geraden Anzahl an Auf- und Absteigevorgängen kann es insgesamt keine ungerade Änderung der Quantenzahl n geben. Daher tragen zu einem Matrixelement mit einer geraden Potenz von x auch nur gerade Energieeigenzustände bei.

3.1.2. Korrelationsfunktionen

Mit den Interpolationsfeldern O_i lassen sich die Korrelationsfunktionen

$$C_{ij}(\tau) := \left\langle O_i(\tau)\, O_j^*(0)\right\rangle = \left\langle x(\tau)^i\, x(0)^j\right\rangle$$

definieren [Blo+09, (2.1)]. Darüber hinaus lassen sich die Korrelationsfunktionen durch die Matrixelemente der Interpolationsfelder darstellen:

$$\left\langle O_i(\tau)\, O_j^*(\tau)\right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-E_n \tau} \psi_{ni} \psi_{nj}^*, \quad i, j = 1, \ldots, N.$$

Die Matrixelemente sind definiert als $\psi_{ni} := (\psi_n)_i = \langle 0|\hat{O}_i|n\rangle$, wobei $E_n < E_{n+1}$ gelten muss [Blo+09, (2.1)]. Die Energiebeziehung ist beim harmonischen Oszillator erfüllt.

Da $\langle x\rangle = 0$ aufgrund der Symmetrie des Potentials zu erwarten ist, werden die Mittelwerte über ungerade Größen, also mit $i + j$ ungerade, annähernd verschwinden. Die Berechnung dieser Größen vernachlässige ich demnach. Die Korrelationsmatrix kann in zwei kleinere Matrizen, die jeweils nur gerade bzw. ungerade Potenzen von x erhalten, aufgespalten werden. Auf diese Weise werden auch gerade und ungerade Energiezustände getrennt.

Das generalisierte Eigenwertproblem, aus dessen Eigenwerten die Energien extrahiert werden können, ist durch

$$\boldsymbol{C}(\tau)\, \boldsymbol{v}_n(\tau, \tau_0) = \lambda_n(\tau, \tau_0)\, \boldsymbol{C}(\tau_0)\, \boldsymbol{v}_n(\tau, \tau_0), \quad n = 1, \ldots, N, \quad \tau > \tau_0$$

gegeben [Blo+09, (2.1)]. Aus den Eigenwerten lassen sich die effektiven Energien

$$\Delta E_n^{\mathrm{eff}}(\tau, \tau_0) = -\partial_\tau \ln\left(\lambda_n(\tau, \tau_0)\right) \equiv -\frac{1}{a}\left[\ln\left(\lambda_n(\tau + a, \tau_0)\right) - \ln\left(\lambda_n(\tau, \tau_0)\right)\right]$$

bestimmen [Blo+09, (2.4)], die mit $\tau \to \infty$ gegen die Energiedifferenz $E_n - E_0$ konvergieren [Blo+09, (2.3)].

Auch hier kann ich die Anpassungsfunktion (3.2) mit $f(\tau) = \lambda_n(\tau, \tau_0)$ benutzen, um die entsprechende Energie aus den berechneten Eigenwerten zu erhalten. Es muss $\tau > \tau_0$ gelten.

Die Abweichungen vom Grenzwert werden besonders klein, wenn $\tau_0 \geq \tau/2$ gilt [Blo+09, S. 5]. In meiner Implementierung erreiche ich allerdings die besten Ergebnisse mit $t_0 = a$.

In jeder geraden Potenz von $x \propto a + a^\dagger$ steckt eine Kombination der Leiteroperatoren, so dass $\langle 0|x^{2i}|0\rangle \neq 0$ gilt. Die Korrelationsfunktionen waren jedoch ohne das Matrixelement mit $|0\rangle$ definiert. Daher wird der größte gerade Eigenwert λ_2 für $\tau \to \infty$ nicht verschwinden. Dieser Eigenwert muss verworfen werden, E_2 steckt somit in λ_4.

3.1.3. Lösung des GEVP durch Choleskyzerlegung

Das generalisierte Eigenwertproblem $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{B}\boldsymbol{v}$ kann durch Multiplikation mit $\boldsymbol{B}^{-1}$ von links in ein normales Eigenwertproblem überführt werden, wobei jedoch Symmetrien von $\boldsymbol{A}$ und $\boldsymbol{B}$ verloren gehen. Um dies zu vermeiden, kann man das Problem mit der CHOLESKYzerlegung lösen. Diese zerlegt $\boldsymbol{B}$ in eine untere Dreiecksmatrix $\boldsymbol{L}$, so dass $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^\dagger$ gilt. [Mac]

Damit kann das Problem umgeformt werden zu [Mac, (3.31)]

$$\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}[\boldsymbol{L}^\dagger]^{-1}\,\boldsymbol{L}^\dagger\boldsymbol{x} = \lambda[\boldsymbol{L}^\dagger\boldsymbol{x}].$$

Definiert man nun

$$\tilde{\boldsymbol{A}} := \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}[\boldsymbol{L}^\dagger]^{-1}, \quad \tilde{\boldsymbol{x}} := \boldsymbol{L}^\dagger\boldsymbol{x},$$

lässt sich dies als normales Eigenwertproblem mit gleichem Eigenwert schreiben [Mac, (3.32)]:

$$\tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{x}} = \lambda\tilde{\boldsymbol{x}}.$$

Für die Implementierung der CHOLESKYzerlegung benutze ich die Funktion `MatrixBase::llt()` [GJ+14b] aus der C++ Bibliothek Eigen. Das normale Eigenwertproblem löse ich anschließend mit der Klasse `EigenSolver` [GJ+14a].

3.2. Eindimensionaler Oszillator mit δ-Störung

In *Two Cold Atoms in a Harmonic Trap* leiten die Autoren eine analytische Lösung für einen Oszillator her, der durch eine Deltadistribution gestört ist. Damit berechnen die Autoren Wellenfunktionen und Energiewerte.

Die Herleitung für den eindimensionalen Fall wird als analog zum dreidimensionalen Fall beschrieben. Anstelle des dreidimensionalen Potentials $\sqrt{2}\pi a_0 \delta^{(3)}(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial r} r$ soll einfach nur $V(x_1 - x_2) = -2/a_0\,\delta(x_1 - x_2)$ benutzt werden [Bus+97, Fußnote 20].

Ich beginne meine Herleitung nach der Separation von Schwerpunkts- und Relativbewegung analog zu [Bus+97, (2)]. Der HAMILTONoperator für den gestörten Oszillator ist

$$H_{\text{rel}} = \underbrace{-\frac{1}{2}\nabla_x^2 + \frac{1}{2}x^2}_{H_{\text{Osz}}} - \frac{2}{a_0}\delta(x).$$

Dieser Operator muss (analog zu [Bus+97, (3)]) die zeitunabhängige SCHRÖDINGERgleichung

$$\left[H_{\text{Osz}} - \frac{2}{a_0}\delta(x)\right]\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{3.3}$$

lösen.

Die Autoren entwickeln die unbekannte Wellenfunktion Ψ nun nach den bekannten Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators [Bus+97, (4)]:

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x). \tag{3.4}$$

Im eindimensionalen Fall gibt es keinen Drehimpuls l. Aber ϕ_n mit ungeradem n tragen nicht bei, da diese bei $x = 0$ einen Nulldurchgang haben. Somit bleiben in der Summe nur die geraden n.

Gleichung (3.4) setze ich (analog zu [Bus+97, (5)]) in die SCHRÖDINGERgleichung (3.3) ein:

$$\left[H_{\text{osz}} - E - \frac{2}{a_0}\delta(x)\right]\sum_{n=0}^{\infty} c_n\phi_n(x) = 0 \iff \sum_{n=0}^{\infty}[E_n - E]c_n\phi_n(x) - \frac{2}{a_0}\delta(x)\sum_{n=0}^{\infty} c_n\phi_n(x) = 0.$$

Dies wird nun auf ϕ_m^* projiziert, i. e. Multiplikation von rechts und Integration über x:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \sum_{n=0}^{\infty}[E_n - E]c_n\phi_m^*(x)\phi_n(x) - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{2}{a_0}\phi_m^*(x)\delta(x)\sum_{n=0}^{\infty} c_n\phi_n(x) = 0.$$

Mit der Orthogonalitätsrelation für die Eigenfunktionen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \phi_m^*(x)\phi_n(x) = \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

folgt für die SCHRÖDINGERgleichung

$$(E_m - E)c_m - \frac{2}{a_0}\phi_m^*(0)\sum_{n=0}^{\infty} c_n\phi_n(0) = 0.$$

Über den Index n wird summiert, dieser ist außerdem für alle m gleich. Somit kann dieser Teil in eine Konstante A verschoben werden. Daraus folgt der Ansatz

$$c_m = A\frac{\phi_m^*(0)}{E_m - E}$$

analog zu [Bus+97, (7)]. Diesen Ansatz setze ich in die Gleichung ein und erhalte:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi_n^*(0)\phi_n(0)}{E_n - E} = \frac{a_0}{2}.$$

Als nächsten Schritt werden die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators ϕ_n eingesetzt.

An der Stelle $x = 0$ verschwindet der Exponentialterm:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \frac{H_n^*(0) H_n(0)}{E_n - E} = \frac{a_0}{2}.$$

Mit dem Wert der HERMITEpolynome am Ursprung,

$$H_n(0) = \frac{2^n \sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{1-n}{2}\right)},$$

folgt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n \sqrt{\pi}}{n!} \frac{1}{E_n - E} \Gamma\left(\frac{1-n}{2}\right)^{-2} = \frac{a_0}{2}.$$

In die obige Gleichung setze ich die bekannten Energiewerte $E_n = n + 1/2$ für den harmonischen Oszillator ein:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n \sqrt{\pi}}{n!} \frac{1}{\frac{1}{2} + n - E} \Gamma\left(\frac{1-n}{2}\right)^{-2} = \frac{a_0}{2}.$$

Mit Mathematica lässt sich diese Summe berechnen, wenn man nur über die geraden n summieren lässt:

$$-\frac{2\Gamma\left(\frac{1}{4}[5-2E]\right)}{[2E-1]\Gamma\left(\frac{1}{4}[3-2E]\right)} = \frac{a_0}{2}.$$

Ausgedrückt mit der Kopplungsstärke $1/a_0$ ist die Relation

$$-\frac{[2E-1]\Gamma\left(\frac{1}{4}[3-2E]\right)}{4\Gamma\left(\frac{1}{4}[5-2E]\right)} = \frac{1}{a_0}. \tag{3.5}$$

Dies ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

Mit (3.5) lassen sich die zu erwartenden Energiewerte für die geraden Zustände berechnen, indem die möglichen E, die die Gleichung bei einem bestimmten $1/a_0$ lösen, bestimmt werden. Diese sind E_n für $n = 0, 2, \ldots$. Bei $1/a_0 = 0$ tritt keine Störung auf, die ungestörten Energiewerte $E_n = n + 1/2$ sind als Schnittpunkte zu erkennen.

3.2.1. Virialsatz

Die Energie kann aus den Daten wieder mit dem Virialsatz bestimmt werden, jedoch ist jetzt das Potential:

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu^2 x^2 - \frac{2}{a_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right).$$

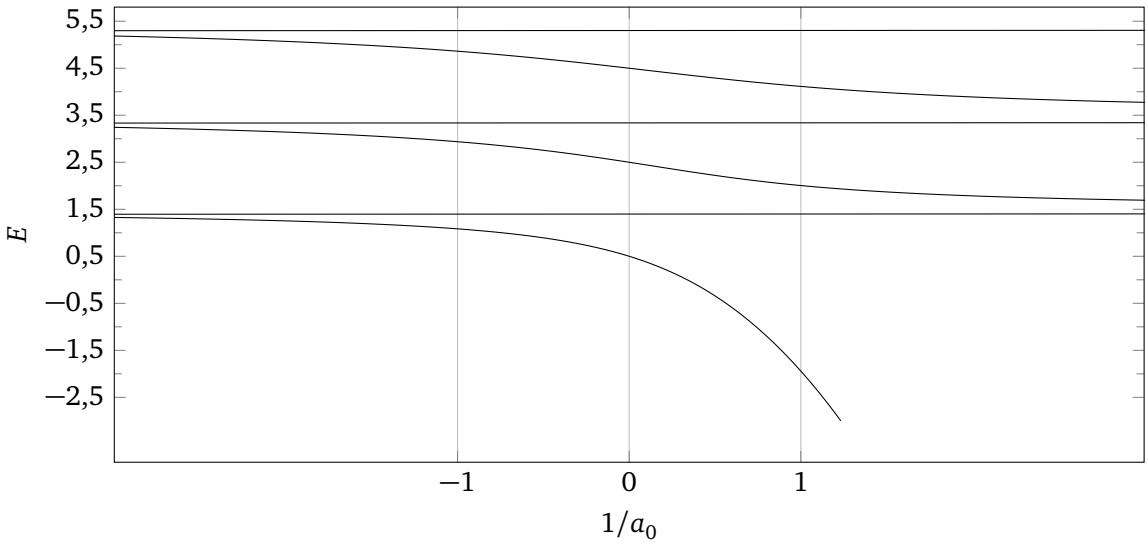

Abbildung 3.1.: Energie E in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke $1/a_0$.

Somit sagt der Virialsatz aus:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}\mu^2 \langle x^2 \rangle + \frac{2}{a_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^3} \left\langle \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) x^2 \right\rangle .$$

Zusammen mit dem zeitlichen Mittelwert der potentiellen Energie ergibt dies die Gesamtenergie:

$$\langle E \rangle = \mu^2 \langle x^2 \rangle + \frac{2}{a_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \left[\frac{1}{\sigma^2} \left\langle \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) x^2 \right\rangle - \left\langle \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) \right\rangle \right] .$$

4. Ergebnisse

Die in den vorhergehenden Kapiteln beschrieben Methoden habe ich in einem C++11 Programm umgesetzt. Mein Programm ist freie Software und kann auf meiner Webseite[1] heruntergeladen werden.

Die Weltlinie wird in der Regel anfangs mit zufälligen Werten für die x_j aus dem Intervall $(-\tilde{\Delta}, \tilde{\Delta})$ oder mit 0 initialisiert. Bevor Werte aufgenommen werden, durchläuft das System M' Monte-Carlo-Iterationen (50 bis 2000, je nach a) zur Relaxation. Eine typische Weltlinie ist in Abbildung 4.1 gezeigt. Für beide Arten der Initialisierung werden nach der Relaxation gleichartige Zustände erreicht. Zwischen den Messwerten werden M_{Zw} Iterationen verworfen, um die Autokorrelation klein zu halten.

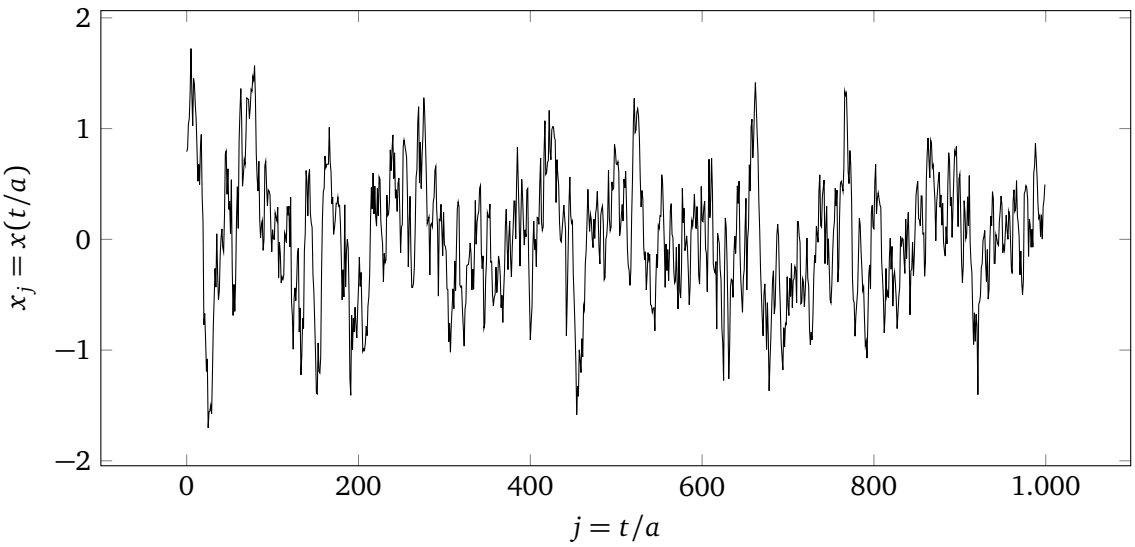

Abbildung 4.1.: Weltlinie nach $M' = 50$ Iterationen zur Relaxation. Dabei sind die Parameter $a = 0{,}1$, $\tilde{\Delta} = \Delta = 0{,}632\,456$, und $\mu^2 = 1$.

4.1. Harmonischer Oszillator

4.1.1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit

In Abbildung 4.2 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für eine Zeitauflösung von $a = 0{,}1$ dargestellt. Die erwartete Verteilung unterscheidet sich kaum von der Kontinuumslösung. Am

[1] `http://martin-ueding.de/de/university/physik590/`

Maximum der Kurve ist noch am ehesten zu erkennen, dass das Kontinuum ein Bruchteil der Liniendicke unterhalb der Gitterlösung liegt.

Beim größeren Zeitschritt a ist eine Normalverteilung mit geringerer Breite zu erwarten. Für $a = 1$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Abbildung 4.3 dargestellt. Die Datenpunkte aus der Simulation liegen überwiegend auf der erwarteten Kurve. Diese weicht merklich von der Kontinuumslösung ab.

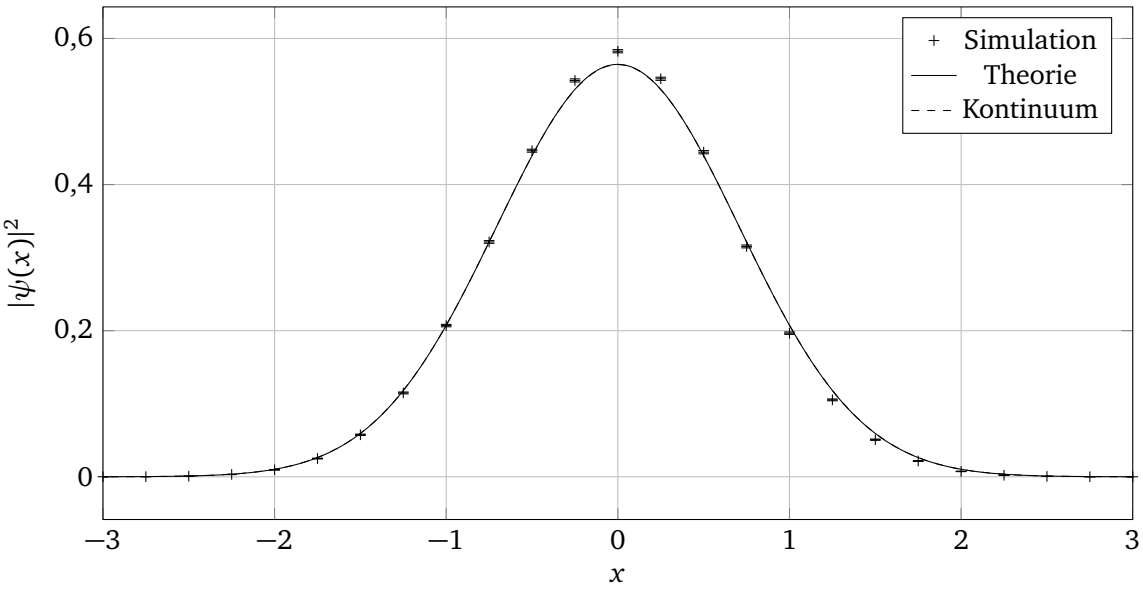

Abbildung 4.2.: Aufenthaltswahrscheinlichkeit. $a = 0{,}1$, $\Delta = 0{,}632\,456$, $\mu^2 = 1$, $N = 1000$, $M = 1000$, $N_\mathrm{P} = 10\,000$.

4.1.2. Korrelationen

In einem Simulationsdurchlauf mit $a = 0{,}1$, $N = 10\,000$ und $M = 10\,000$ erhalte ich gute Korrelationen bis $\tau \approx 7$, siehe Abbildung 4.4. Aus der Anpassung an diese Daten errechne ich $\Delta E_{0,1} = E_1 - E_0 = 0{,}995 \pm 0{,}002$. Dies passt mit der dem Kontinuumsfall von $\Delta E_{0,1} = 1$ zusammen.

In einem Simulationslauf mit $N = 1000$, $a = 0{,}1$, $\Delta = 0{,}632\,456$, $M = 100\,000$, $N_\mathrm{P} = 10\,000$, $\mu = 1$ und Korrelationen bis x^{12} errechne ich die Eigenwerte bis $\tau = 6$. Diese ungeraden und geraden Eigenwerte sind in den Abbildungen 4.5 bzw. 4.6 dargestellt. Mit dem Virialsatz bestimme ich $E_0 = 0{,}4989 \pm 0{,}0002$. Mit der einfachen Korrelation $C_{11}(t)$ errechne ich $E_1 = 1{,}503\,90 \pm 0{,}000\,69$. Die Energiewerte aus der Anpassung des GEVP sind in Tabelle 4.7 aufgelistet.

Für kleine n entsprechen die Werte der Erwartung, $E_n = n + 0{,}5$, die Abweichung nimmt jedoch nach $n = 7$ schnell zu. Um dort bessere Werte zu bekommen, bräuchte es noch mehr Iterationen.

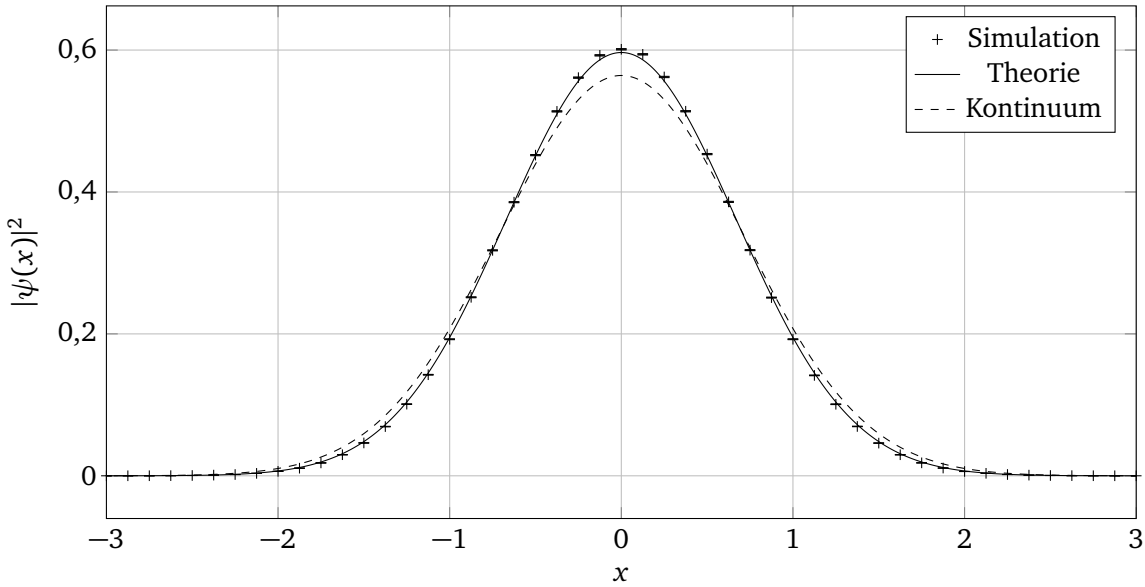

Abbildung 4.3.: Aufenthaltswahrscheinlichkeit. $a = 1$, $\Delta = 0{,}632\,456$, $\mu^2 = 1$, $N = 1000$, $M = 5000$, $N_\mathrm{P} = 1000$.

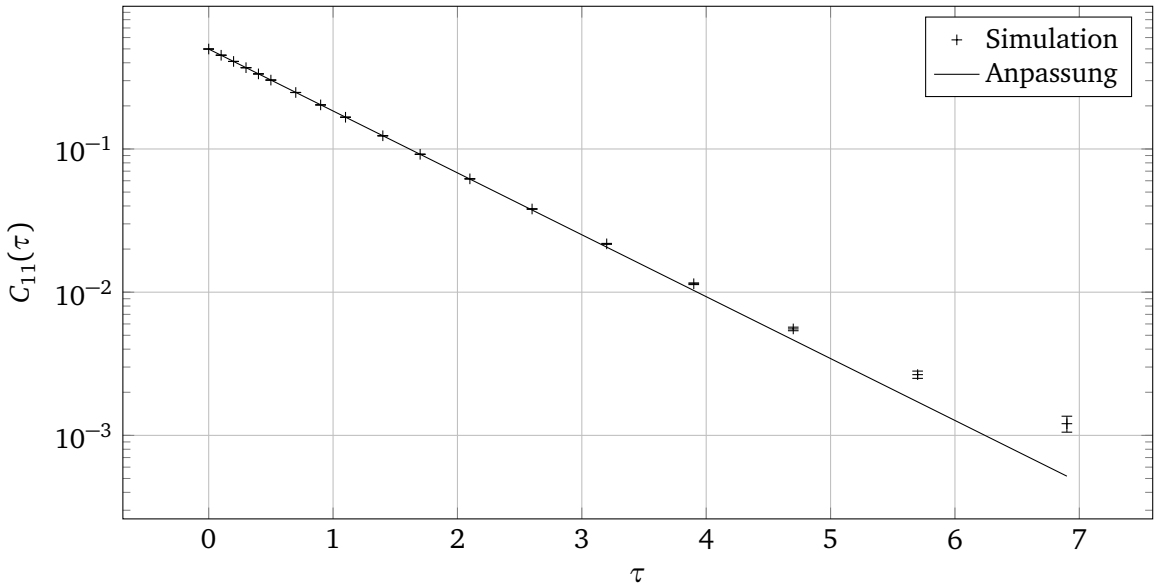

Abbildung 4.4.: Korrelationsfunktion $C_{11}(\tau) = \langle x(0)\,x(\tau)\rangle$ gegen imaginäre Zeit τ. An die Punkte wurde eine abfallende Exponentialfunktion angepasst. Die Daten stammen aus einer Simulation mit $a = 0{,}1$, $\tilde{\Delta} = \Delta = 0{,}632\,456$, $\mu^2 = 1$, $N = 10\,000$, $M = 10\,000$ und $N_\mathrm{P} = 1000$.

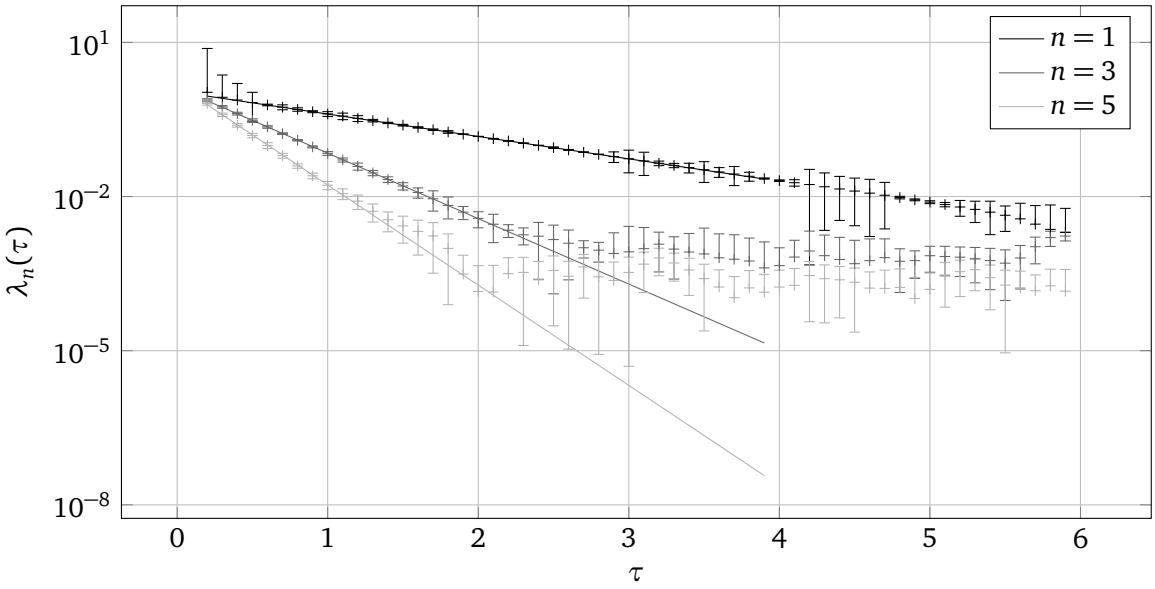

Abbildung 4.5.: Eigenwertfunktionen $\lambda_n(\tau)$ für die ersten ungeraden Eigenwerte. An die Daten wurde jeweils eine abfallende Exponentialfunktion angepasst. Die Daten stammen aus einem Durchlauf mit $M = 100\,000$, $N_\mathrm{P} = 10\,000$, $N = 1000$, $a = 0{,}1$, $\mu = 1$.

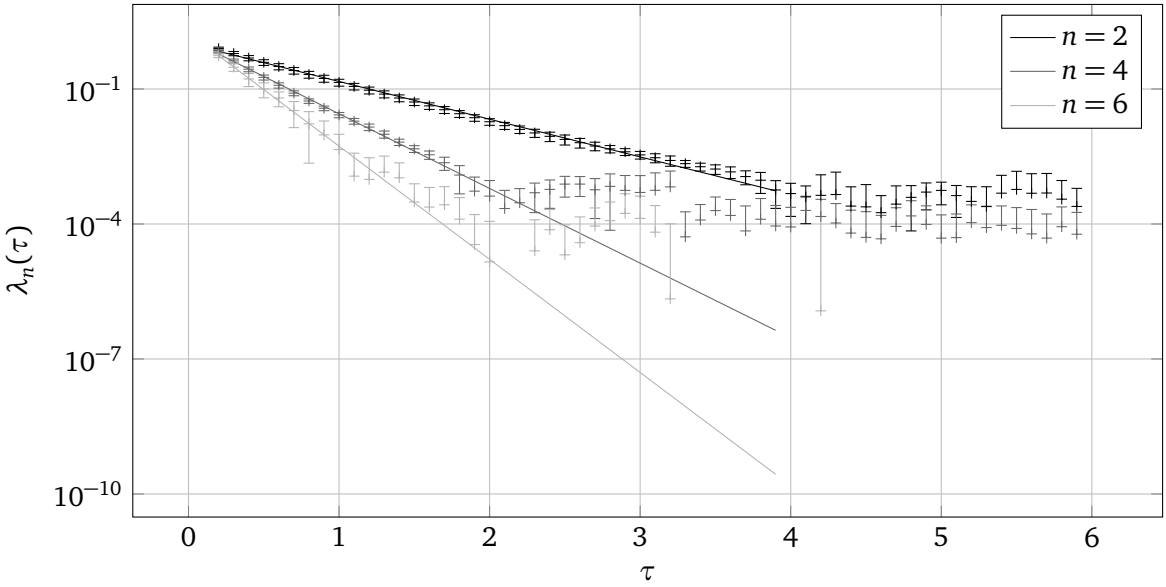

Abbildung 4.6.: Eigenwertfunktionen $\lambda_n(\tau)$ für die ersten geraden Eigenwerte. An die Daten wurde jeweils eine abfallende Exponentialfunktion angepasst. Die Daten stammen aus einem Durchlauf mit $M = 100\,000$, $N_\mathrm{P} = 10\,000$, $N = 1000$, $a = 0{,}1$, $\mu = 1$.

n	E_n
1	$1{,}503\,31 \pm 0{,}000\,75$
2	$2{,}429 \pm 0{,}020$
3	$3{,}433 \pm 0{,}027$
4	$4{,}320 \pm 0{,}064$
5	$4{,}990 \pm 0{,}095$
6	$6{,}29 \pm 0{,}14$
7	$6{,}869 \pm 0{,}100$
8	$18{,}5 \pm 8{,}1$
9	$12{,}4 \pm 1{,}5$
10	$1{,}28 \pm 0{,}11$
11	$1{,}186 \pm 0{,}060$

Tabelle 4.7.: Energiewerte aus dem GEVP.

4.2. Oszillator mit Störung

Im Folgenden wird dem harmonischen Potential ein δ-Potential überlagert. In der Simulation wird dies durch schmale Normalverteilungen angenähert. Deren Integral ist auf eins normiert und die Verteilungen haben eine Breite σ. Je nach Breite ergibt sich ein anderes Potential. Abbildung 4.8 enthält das Potential für eine negative und eine positive Kopplungsstärke $1/a_0$.

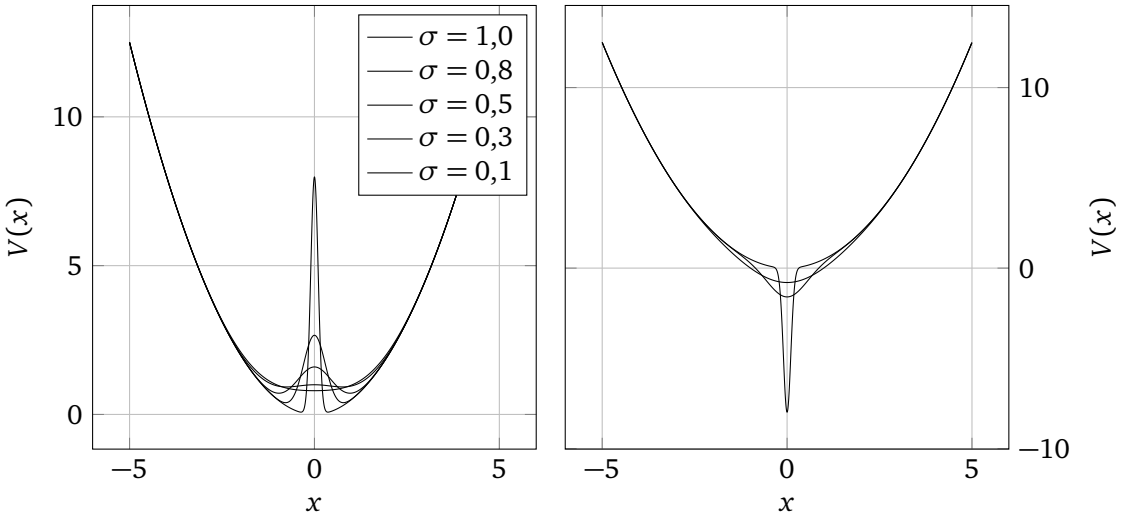

Abbildung 4.8.: Überlagerung von harmonischem Potential mit Gaußpotential für verschiedene Breiten der Gaußfunktion σ. $\mu^2 = 1$. Links: $1/a_0 = -1$, rechts: $1/a_0 = 1$.

4.2.1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Mit dem veränderten Potential können alle vorherigen Rechnungen wiederholt werden. Abbildung 4.9 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Potential.

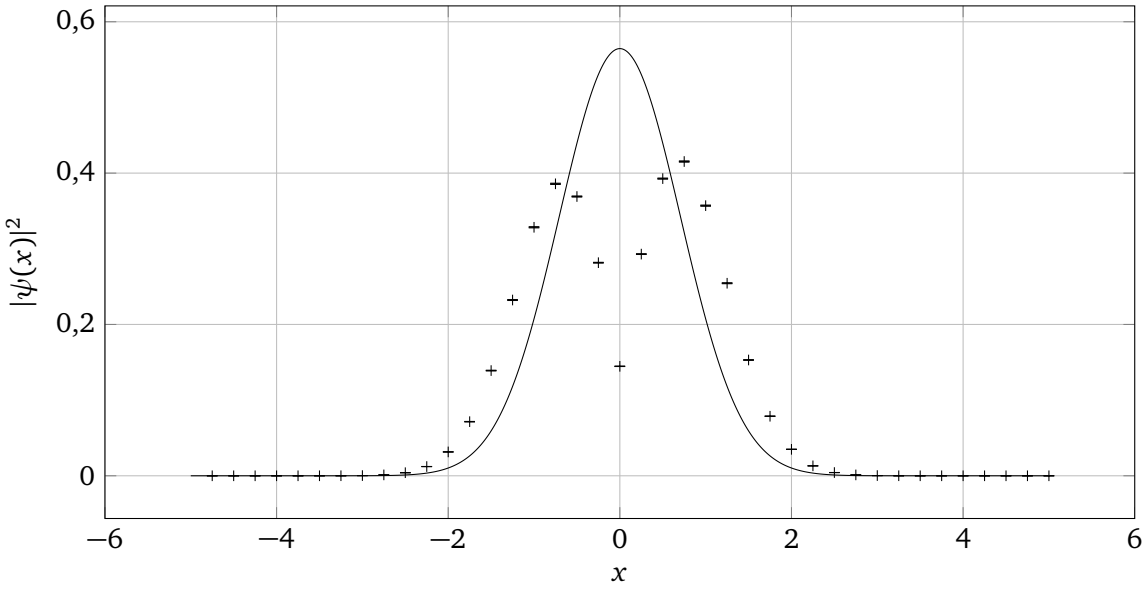

Abbildung 4.9.: Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den gestörten Oszillator. Zum Vergleich die Erwartung für den harmonischen Oszillator mit ansonsten gleichen Parametern. $a = 0{,}1$, $\tilde{\Delta} = \Delta = 0{,}632$, $\mu^2 = 1$, $N = 1500$, $M = 10\,000$, $N_\mathrm{P} = 1000$, $1/1_0 = -1$, $\sigma = 0{,}1$.

Das gestörte Potential, das in der Mitte etwas höher ist (Abbildung 4.8, links), senkt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Vergleich zum harmonischen Oszillator.

4.2.2. Energiewerte

Die Grundzustandsenergie verschiebt sich durch die Störung. Die zu erwartenden Energiewerte lassen sich durch Lösung der Gleichung (3.5) berechnen oder aus Abbildung 3.1 ablesen. Für die hier betrachteten Kopplungsstärken habe ich die ersten geraden Energiewerte in Tabelle 4.10 zusammengestellt.

n	$1/a_0 = -1$	$1/a_0 = 1$
0	1,083 89	−1,941 07
2	2,937 22	2,004 91
4	4,862 74	4,113 54
6	6,815 76	6,171 01
8	8,783 34	8,208 37

Tabelle 4.10.: Theoretische Energiewerte für den gestörten Oszillator im Kontinuum, abgelesen aus Abbildung 3.1.

Die Werte in der Tabelle 4.10 sind für das Kontinuum gültig, daher muss $a \to 0$ und $\sigma \to 0$ vollzogen werden. Im Grenzfall $a \to 0$ muss jedoch $N \to \infty$ gehen, so dass $aN = T$ konstant

bleibt. Andernfalls kommt es zu unerwünschten Korrelationen durch die periodischen Randbedingungen, die die Energiewerte verfälschen. Durch $N \to \infty$ steigt die benötigte Rechenleistung an, es kann nur bis zu einem gewissen a gerechnet werden. Beim Grenzwert $\sigma \to 0$ wird die überlagerte Normalverteilung beliebig schmal. Ist sie zu schmal, ist die Wahrscheinlichkeit, dass Zufallszahlen in ihrer Breite gezogen werden, zu klein. Daher erwarte ich, dass für extrem kleine σ der Grundzustand wieder erreicht wird.

Negative Kopplungsstärke

Für verschiedene Werte von a und σ habe ich Simulationen durchgeführt. Die gemeinsamen Parameter sind dabei $M = 10\,000$, $1/a_0 = -1$, $aN = T = 150$, $M' = 2000$, $M_{\text{Zw}} = 10$, $\tilde{\Delta} = 0$. Ebenfalls wurde immer $\Delta = 2\sqrt{a}$ gesetzt. Die Daten aus den Simulationsdurchläufen sind in Abbildung 4.11 für einen Überblick zusammengefasst.

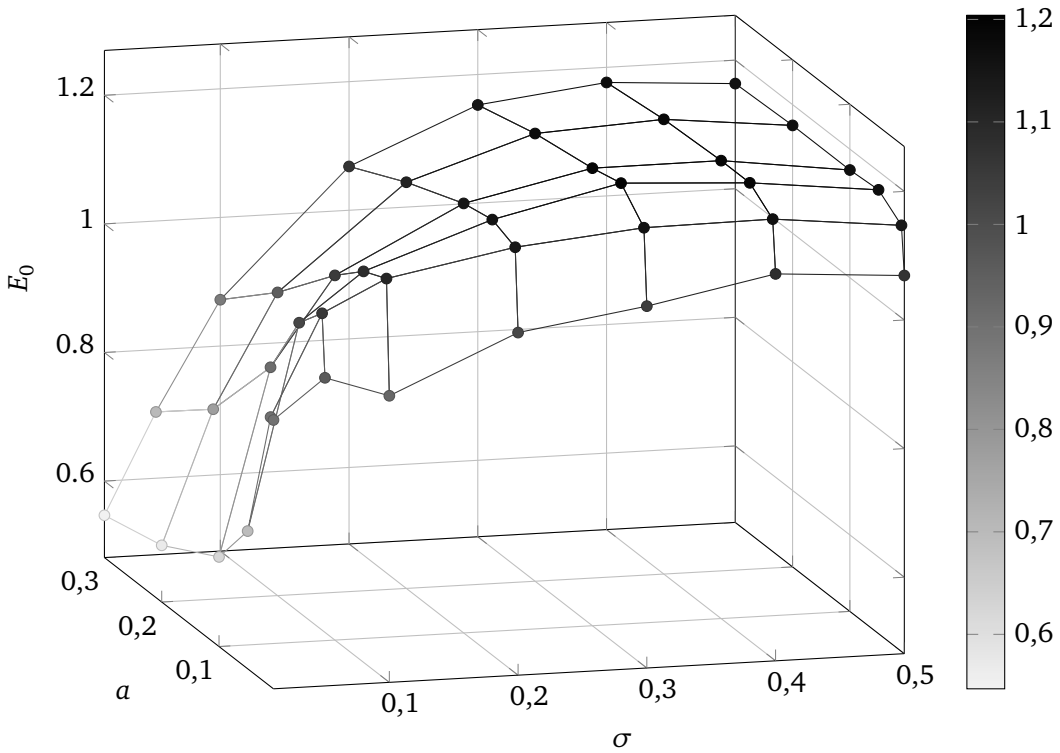

Abbildung 4.11.: Energie des Grundzustands in Abhängigkeit von der Zeitauflösung a und der Breite σ der Normalverteilung.

Für große und mittlere a ist zu erkennen, dass für $\sigma \to 0$ die Grundzustandsenergie E_0 gegen die 0,5 des harmonischen Oszillators geht. Bei kleinen a ist die Grundzustandsenergie generell höher. Bei kleineren a steigt die Gitterauflösung und eine schmalere Normalverteilung kann aufgelöst werden.

Bei großen σ führt $a \to 0$ jedoch dazu, dass der Energiewert wieder sinkt. Dieser Effekt ist auch beim harmonischen Oszillator zu beobachten und erklärt sich dadurch, dass Änderungen in den x_j weniger wahrscheinlich werden und so eine Autokorrelation eintritt, die den Energiewert und vor allem dessen Fehler zu klein erscheinen lässt.

Der Grenzwert $a \to 0$ soll zuerst gebildet werden, daher betrachte ich die Daten als Scharen von σ, also $E_0(a;\sigma)$. In Abbildung 4.12 sind die Scharen dargestellt.

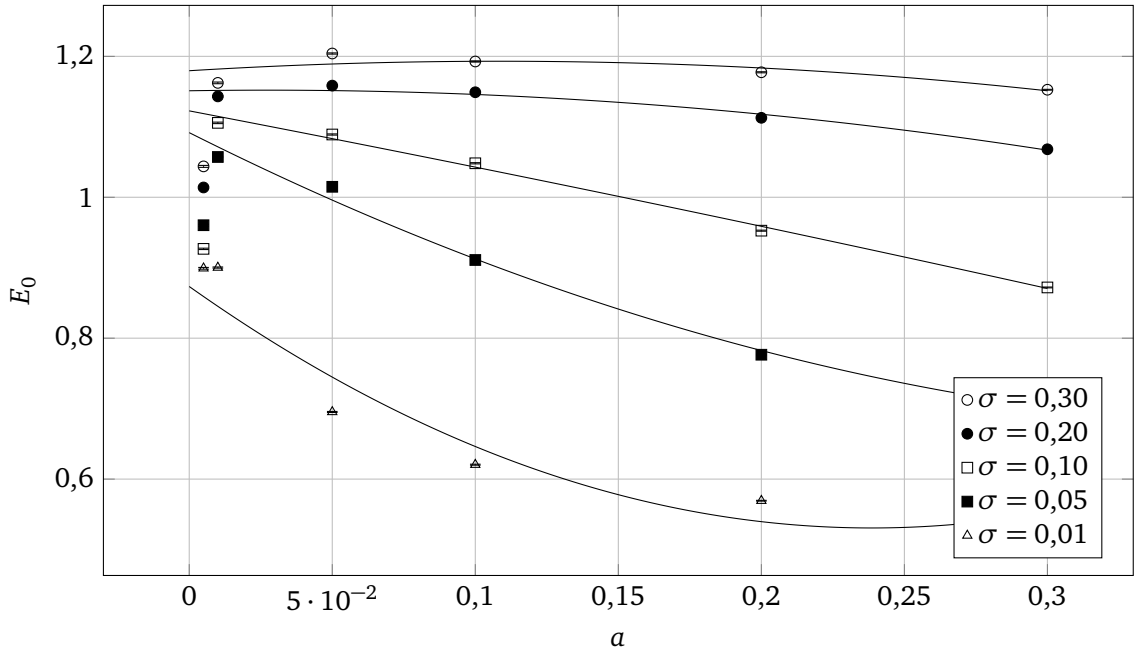

Abbildung 4.12.: Projektion der Daten aus Abbildung 4.11 mit Anpassungsfunktionen. Es sind zur Übersicht nur die kleinen Werte von σ dargestellt.

Für alle Werte von σ ist der Abfall bei kleinen a zu erkennen. Bei den mittleren Breiten ist bei $a = 0{,}05$ die Energie am höchsten, bei den kleineren Breiten auch bei kleineren Zeitschritten a.

An die Werte mit $a \geq 0{,}01$ habe ich eine Funktion zweiten Grades angepasst, um bis $a = 0$ extrapolieren zu können. Zur Fehlerabschätzung habe ich aus den vorhandenen Datenpunkten mit der Bootstrapmethode (Anhang A) Punkte ausgewählt und Anpassung und Extrapolation wiederholt. Die für $a = 0$ extrapolierten Werte sollten den Grenzwert $\sigma \to 0$ ermöglichen. Die Punkte sind in Abbildung 4.13 zusammengestellt.

Im Grenzwert $\sigma \to 0$ sollte sich der Wert $E_0 = 1{,}08$ einstellen, dieser ist im Diagramm (Abbildung 4.13) bei $\sigma = 0$ eingezeichnet. An diese Daten habe ich wieder mit der Bootstrapmethode quadratische Funktionen angepasst, um extrapolieren zu können. Der errechnete Wert ist mit $0{,}99 \pm 0{,}07$ zu klein, ist aber mit dem erwarteten Wert vereinbar. Lässt man den Wert zum kleinsten σ aus der Anpassung heraus, sind die restlichen Daten mit einem Wert von 1,08 vereinbar.

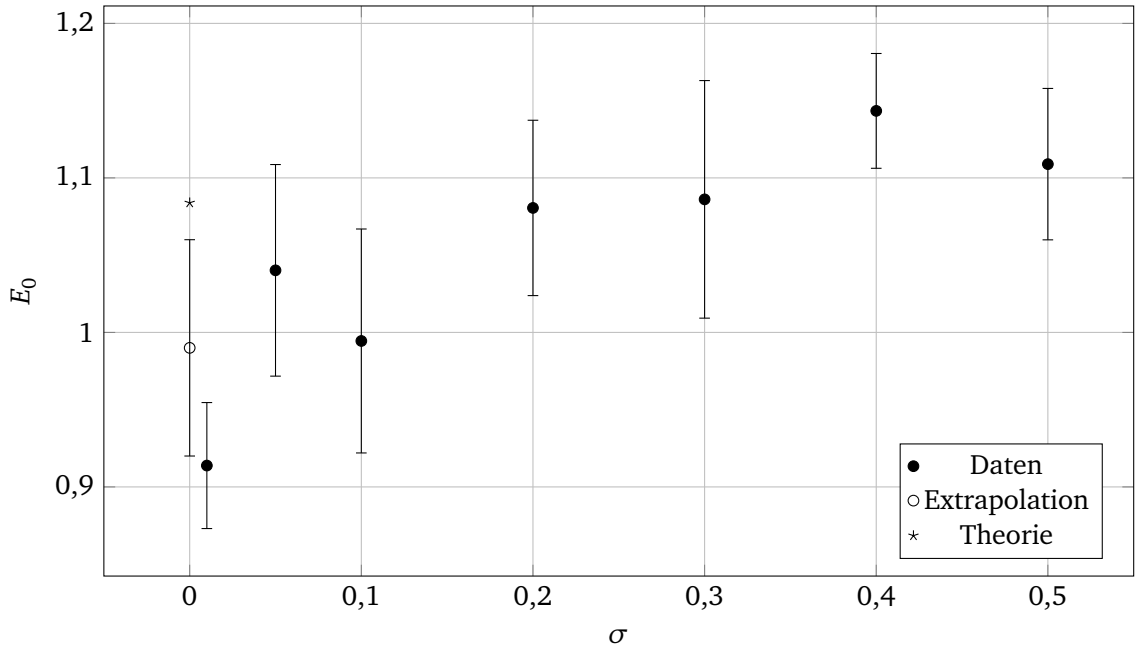

Abbildung 4.13.: Für $a = 0$ extrapolierte Daten aus Abbildung 4.12.

Positive Kopplungsstärke

Mit $1/a_0 = +1$ und ansonsten gleichen Parametern lasse ich Simulationen für verschiedene a und σ durchlaufen. Im Gegensatz zu den vorherigen Daten zur negativen Kopplungsstärke nähert sich hier bei $a \to 0$ der Energiewert an den theoretischen Wert an. Alle Datenpunkte sind in Abbildung 4.14 auf der linken Seite gezeigt. Rechts ist eine Vergrößerung des interessanten Energiebereichs um $E_0 = -1{,}941$ dargestellt. Für $\sigma = 0{,}01$ und $a = 0{,}005$ ist dieser Kontinuumswert fast erreicht.

Die Daten aus den Durchläufen mit $a = 0{,}005$ liegen sehr nahe am Kontinuum. Daher kann aus diesen Daten bereits der Kontinuumswert für E_0 gut extrapoliert werden. Diese Daten sind zusammen mit dem Theoriewert in Abbildung 4.15 gezeigt.

Je nach dem, wie man $\sigma \to 0$ extrapoliert, kommt man nahe an den Kontinuumswert. Die Extrapolation funktioniert hier deutlich besser als mit der negativen Kopplungsstärke.

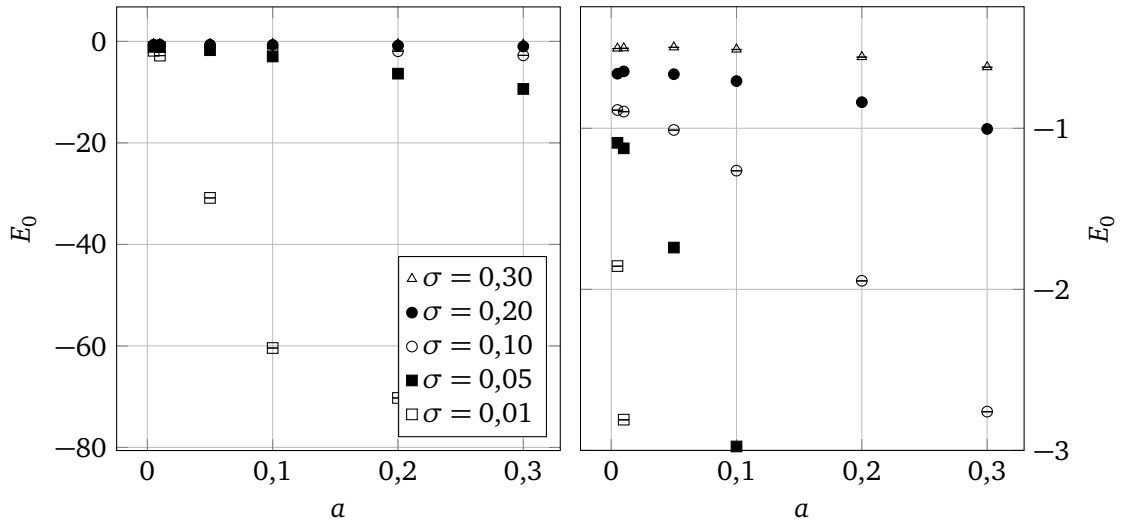

Abbildung 4.14.: Daten aus den Simulationsdurchläufen für $1/a_0 = +1$ für verschiedene a und σ. Links sind alle Daten dargestellt, rechts nur der interessante Energiebereich.

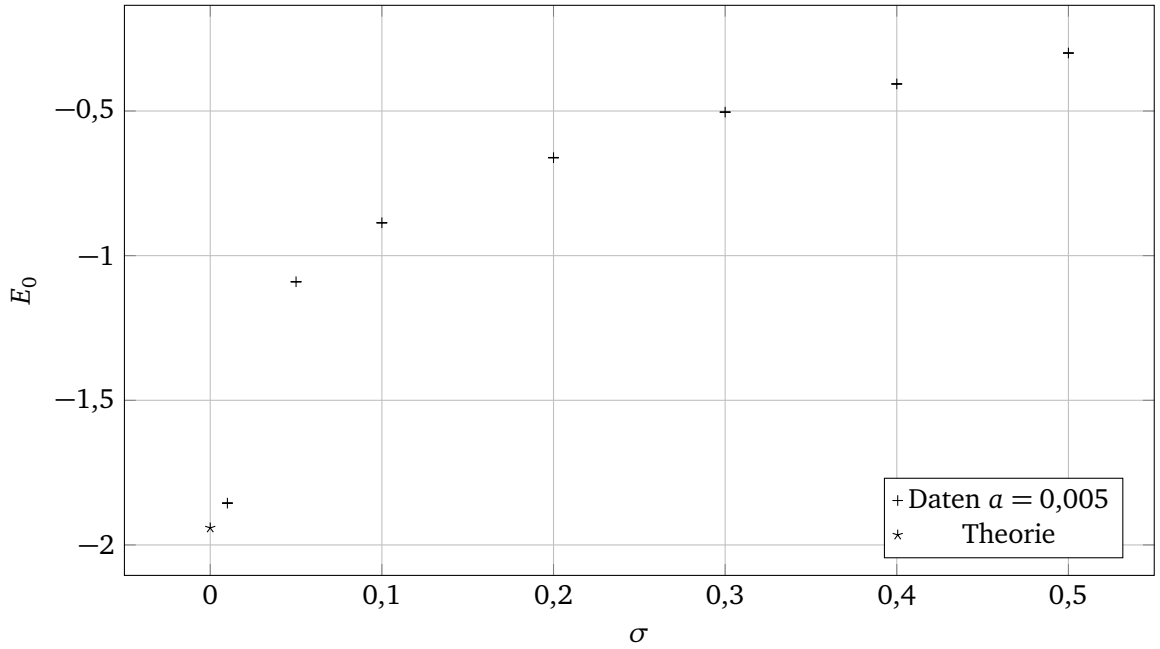

Abbildung 4.15.: Grundzustandsenergie für $1/a_0 = +1$ für Simulationen mit $a = 0{,}005$. Der Stern markiert den Kontinuumswert von $-1{,}941$.

In Abbildung 4.16 ist die Differenz $\Delta E_{2,0}$ für kleine a dargestellt. Es ist wohl schwer möglich, aus diesen Daten den Theoriewert zu extrapolieren, jedoch ist dieser vereinbar mit den Daten. Der Unterschied zum harmonischen Oszillator mit $\Delta E_{2,0} = 2$ ist deutlich zu erkennen.

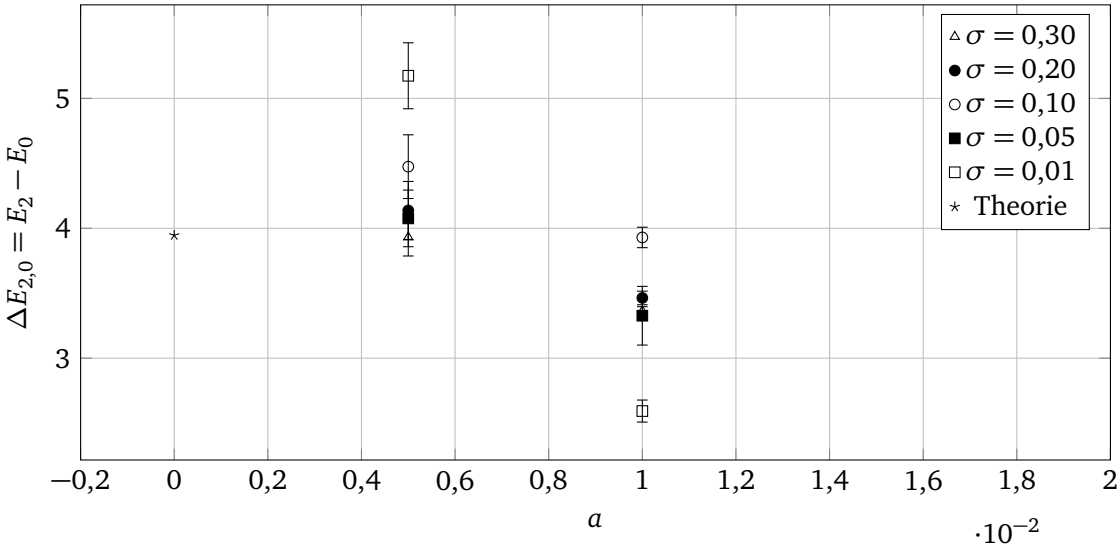

Abbildung 4.16.: Differenz von E_2 und E_0, die mittels GEVP bestimmt worden sind. Der Stern markiert den Kontinuumswert.

5. Zusammenfassung

In dieser Arbeit habe ich die harmonischen Oszillator, sowie einen Oszillator mit δ-Störung, in der Pfadintegralformulierung untersucht. Dazu habe ich imaginäre und diskrete Zeit benutzt. Aus den mit dem METROPOLISalgorithmus generierten Daten bestimmte ich mit Virialsatz und Korrelationen die Energiewerte.

Die Energiewerte des harmonischen Oszillators ließen sich gut bestimmen. Die ersten angeregten Zustände sind noch recht genau, die Höheren zeigten recht große Fehler. Beim gestörten Oszillator ließ sich der Grundzustand für zwei Kopplungsstärken sinnvoll bestimmen. Der erste (gerade) angeregte Zustand konnte nicht mehr extrapoliert werden, die Daten waren nur mit dem Theoriewert vereinbar. Höhere Zustände konnten nicht aussagekräftig analysiert werden.

Mit mehr Iterationen zwischen den Messungen zur Minimierung der Autokorrelationen könnten vielleicht bessere Abschätzungen für die angeregten Zustände erreicht werden. Darüber hinaus könnte sich gerade bei kleinen a eine Fehlerabschätzung durch Bootstrap mit Blöcken als hilfreich herausstellen.

Insgesamt betrachtet ist dies eine gute Demonstration der Gitterfeldmethoden aus dem Paper von CREUTZ und FREEDMAN sowie des METROPOLISalgorithmus. Hiervon ausgehend können weitere quantenmechanische Systeme, insbesondere analytisch nicht lösbare, betrachtet werden.

A. Bootstrap Methode

Der Fehler zu einem statistischen Schätzwert ist in der Regel nicht einfach anzugeben. Für Größen wie den Mittelwert ist es unter Annahme einer zugrundeliegenden Verteilung möglich, nicht jedoch für komplexere Größen. Eine Möglichkeit, eine Fehlerabschätzung zu beliebigen Schätzwerten zu erhalten, ist die *Bootstrap Methode*. Bei dieser werden aus der gegebenen Probe neue Proben erstellt und eine Metaanalyse durchgeführt.

Sei X eine Zufallsgröße, $\langle X \rangle$ der Erwartungs- und $\overline{X}$ der Schätzwert. Aus einer Stichprobenmenge $\mathbb{M}$ kann nun die Zufallsgröße berechnet werden: $\overline{X} = X(\mathbb{M})$. Im Grenzwert erhält man den Erwartungswert, also $\lim_{|\mathbb{M}|\to\infty} \overline{X} = \langle X \rangle$.

Aus der wirklich erhobenen Stichprobenmenge erzeugt man nun N_P weitere Mengen $\mathbb{M}_i$ durch Ziehen mit Zurücklegen. Für jede dieser Mengen errechnet man die Zufallsgröße und erhält die Menge der Schätzwerte

$$\mathbb{X} = \{X(\mathbb{M}_i) \colon 1 \leq i \leq N_\mathrm{P}\}.$$

Diese Schätzwerte sind annähernd normalverteilt. Somit ist der so errechnete Erwartungswert $\overline{X}$ durch den Mittelwert von $\mathbb{X}$ gegeben. Der Fehler $\Delta\overline{X}$ ist durch die Standardabweichung von $\mathbb{X}$ gegeben.

Literatur

[Blo+09] Benoit Blossier u. a. *On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory*. Feb. 2009. arXiv: 0902.1265 [hep-lat].

[Bus+97] Th. Busch u. a. *Two Cold Atoms in a Harmonic Trap*. 1997. URL: http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.54.9047.

[CF80] M. Creutz und B. Freedman. „A Statistical Approach to Quantum Mechanics“. In: *Annals of Physics* 132.1981 (1980), S. 427–462. URL: http://www.itkp.uni-bonn.de/~urbach/bnd/cf.pdf.

[GJ+14a] Gaël Guennebaud, Benoît Jacob u. a. *EigenSolver< _MatrixType > Class Template Reference*. 2014. URL: http://eigen.tuxfamily.org/dox/classEigen_1_1EigenSolver.html.

[GJ+14b] Gaël Guennebaud, Benoît Jacob u. a. *LLT< _MatrixType, _UpLo > Class Template Reference*. 2014. URL: http://eigen.tuxfamily.org/dox/classEigen_1_1LLT.html.

[Kuy10] Friedhelm Kuypers. *Klassische Mechanik*. 9. Aufl. Wileyy-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. ISBN: 978-3-527-40989-1.

[Mac] Angus MacKinnon. *The Generalised Eigenvalue Problem*. URL: http://www.cmth.ph.ic.ac.uk/people/a.mackinnon/Lectures/cp3/node72.html.

[Nol09] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5*. 7. Berlin: Springer-Verlag, 2009. ISBN: 978-3-540-68868-6.

[Sch05] Franz Schwabl. *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*. 4. Berlin: Springer, 2005. ISBN: 978-3-540-25904-6.

[Sch07] Franz Schwabl. *Quantenmechanik*. 7. Berlin: Springer-Verlag, 2007. ISBN: 978-3-540-73674-5.

[Ste06] A. W. Stetz. *Advanced Quantum Mechanics*. Jan. 2006. URL: http://www.physics.oregonstate.edu/~stetza/Book.pdf.

[Thi07] Jos Thijssen. *Computational Physics*. 2. Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-83346-2.

[Wit13] Hartmut Wittig. „Farbdynamik auf dem Gitter“. In: *Physik Journal* 2013.12 (Dez. 2013), S. 41–47.

Erklärung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, 2014-07-21 Unterschrift _____.