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

Präsentation zur Bachelorarbeit

Martin Ueding – mu@martin-ueding.de

September 2014

Einleitung

Modelle in der Physik

- analytisch lösbar
- Störungstheorie
- andere Näherungsverfahren
- Numerik

Pfadintegrale

Einleitung

Integration über den Phasenraum

Energiewerte

Virialsatz, Korrelationen und GEVP

Oszillator mit δ-Störung

Ergebnisse

Harmonischer Oszillator

Oszillator mit Störung

Abschnitt 2

Pfadintegrale

Pfadintegral

Betrachte Trajektorien mit $x(0) = x_\mathrm{A}$ und $x(T) = x_\mathrm{E}$.

Zustandssumme:

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

Probleme:

- Summand oszilliert stark
- Trajektorien sind kontinuierlich

Imaginäre Zeit

Wickrotation: $\tau := \mathrm{i}t$

Wirkung des Oszillators:

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

Zustandssumme:

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

Diskretisierung

Summe muss Integral sein: $\int \mathscr{D}\boldsymbol{x} \exp\big(-S(x)\big)$.

Zeitgitter:

- diskrete Zeit: $\tau_j = aj$, $T = aN$
- $x(\tau) \to x_j$ mit $j = 0, \ldots, N$
- ersetze $\dot{x}$ durch Differenzenquotient
- $\int \mathscr{D}\boldsymbol{x} \to \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_j$.

Unterabschnitt 2

Integration über den Phasenraum

Monte Carlo

- Integral über $N \gg 100$ Dimensionen
- Monte-Carlo-Methoden effizient
- Gebiet mit Beiträgen klein

Ziel: Trajektorien entsprechend $\exp(-S)$ generieren

Markovprozess

Gewünschte Verteilung:

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

detailiertes Gleichgewicht:

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

Metropolisalgorithmus

for $j \leftarrow 1, \ldots, N$ **do**
  $x_j' \leftarrow$ Zufallszahl$(-\Delta, \Delta)$
  $\Delta S \leftarrow S(x_0, \ldots, x_{j-1}, x_j', x_{j+1}, \ldots, x_N) - S(\{x_i\})$
  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

Modifikationen

- Ziehen aus Normalverteilung um x_j
- wiederholtes Ziehen
- Auslassen von Trajektorien
- ΔS effizient berechnen

Abschnitt 3

Energiewerte

Unterabschnitt 1

Virialsatz, Korrelationen und GEVP

Virialsatz

- Allgemein: $\langle \boldsymbol{F}\boldsymbol{r} \rangle + 2\langle T \rangle = 0$
- Mit $\boldsymbol{F} = -\boldsymbol{\nabla} V$ folgt $2T = m\langle v^2 \rangle = \langle xV'(x) \rangle$
- Hier: $V(x) = \mu^2 x^2/2$
- E_0 aus verfügbaren Werten:

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

Korrelationen

E_1 durch Korrelationen und E_0:

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

Äquivalent zu

$$f(\tau) := c_1 \exp\left(-\Delta E_1 \tau\right).$$

Methode von Blossier u. a. 2009

Korrelationsfunktionen:

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

Bedingungen:

- $\langle 0|O_i|0\rangle$ liefert keinen Beitrag
- $E_n < E_{n+1}$

Generalisiertes Eigenwertproblem

GEVP mit $n = 1, \ldots, N$ und $\tau > \tau_0$:

$$C(\tau)\,\boldsymbol{v}_n(\tau,\tau_0) = \lambda_n(\tau,\tau_0)\,C(\tau_0)\,\boldsymbol{v}_n(\tau,\tau_0)$$

Effektive Energiewerte:

$$\Delta E_n^{\text{eff}}(\tau,\tau_0) = -\frac{1}{a}\Big[\ln\big(\lambda_n(\tau+a,\tau_0)\big) - \ln\big(\lambda_n(\tau,\tau_0)\big)\Big]$$

Energiewerte:

$$\lim_{\tau\to\infty} \Delta E_n^{\text{eff}}(\tau,\tau_0) = E_n - E_0$$

Choleskyzerlegung

- $A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}$
- Choleskyzerlegung $B = LL^\dagger$
- Umformungen

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

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

- normales Eigenwertproblem (gleiche Eigenwerte)

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

Unterabschnitt 2

Oszillator mit δ-Störung

Definition des System

Hamiltonoperator:

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

Schödingergleichung:

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

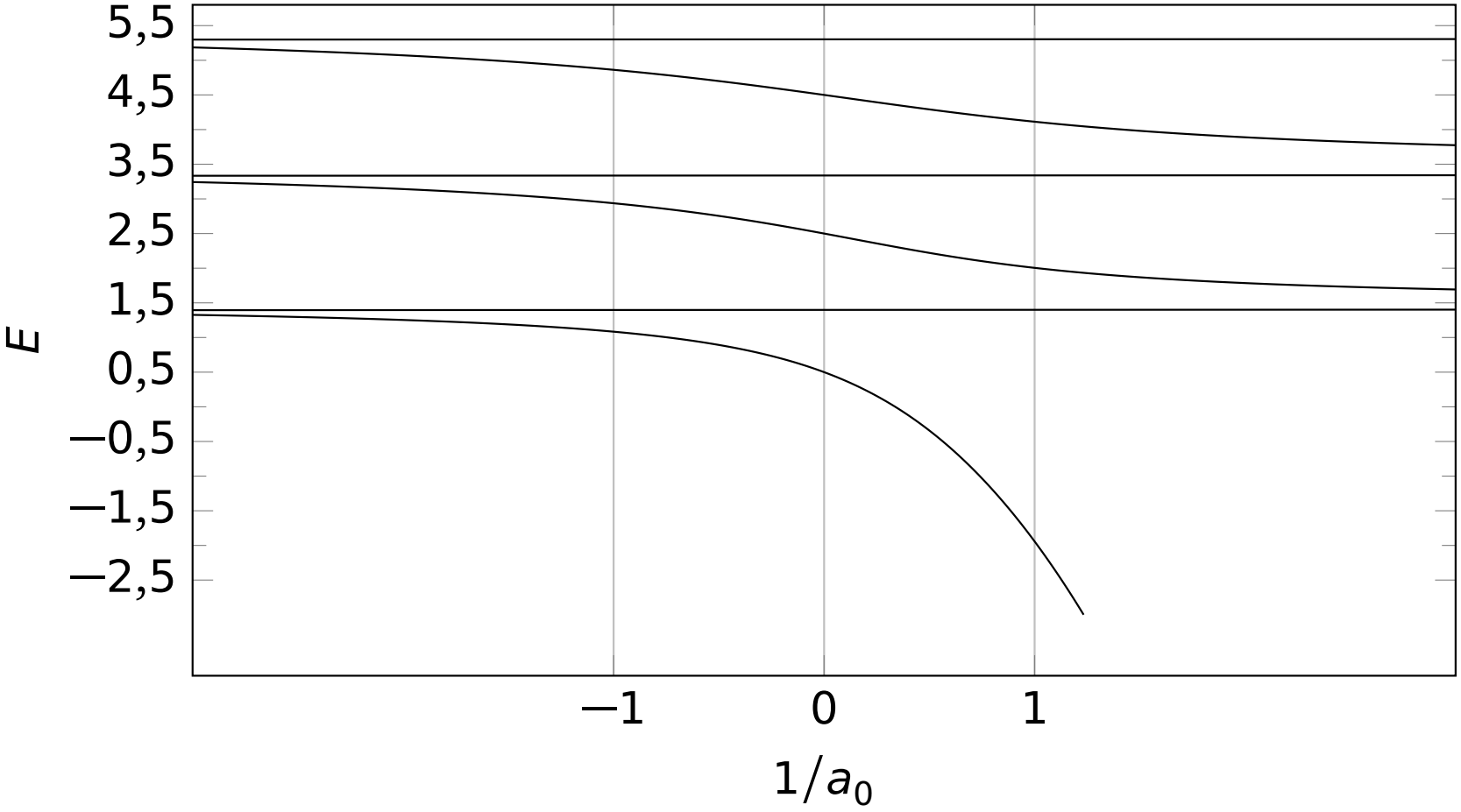
Analytische Lösung durch Busch u. a. 1997

Oszillator mit δ-Störung

- Entwicklung in Eigenfunktionen ϕ_n des harmonischen Oszillators
- Projektion auf ϕ_m^*
- Ausnutzen der Orthogonalitätsrelation und δ-Distribution
- Ansatz für Entwicklungskoeffizienten $c_n \propto \phi_m(0)/[E_m - E]$
- Eigenfunktionen bei $x = 0$ einsetzen
- Summe ausführen
- nach $1/a_0$ auflösen ergibt:

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

Energiewerte



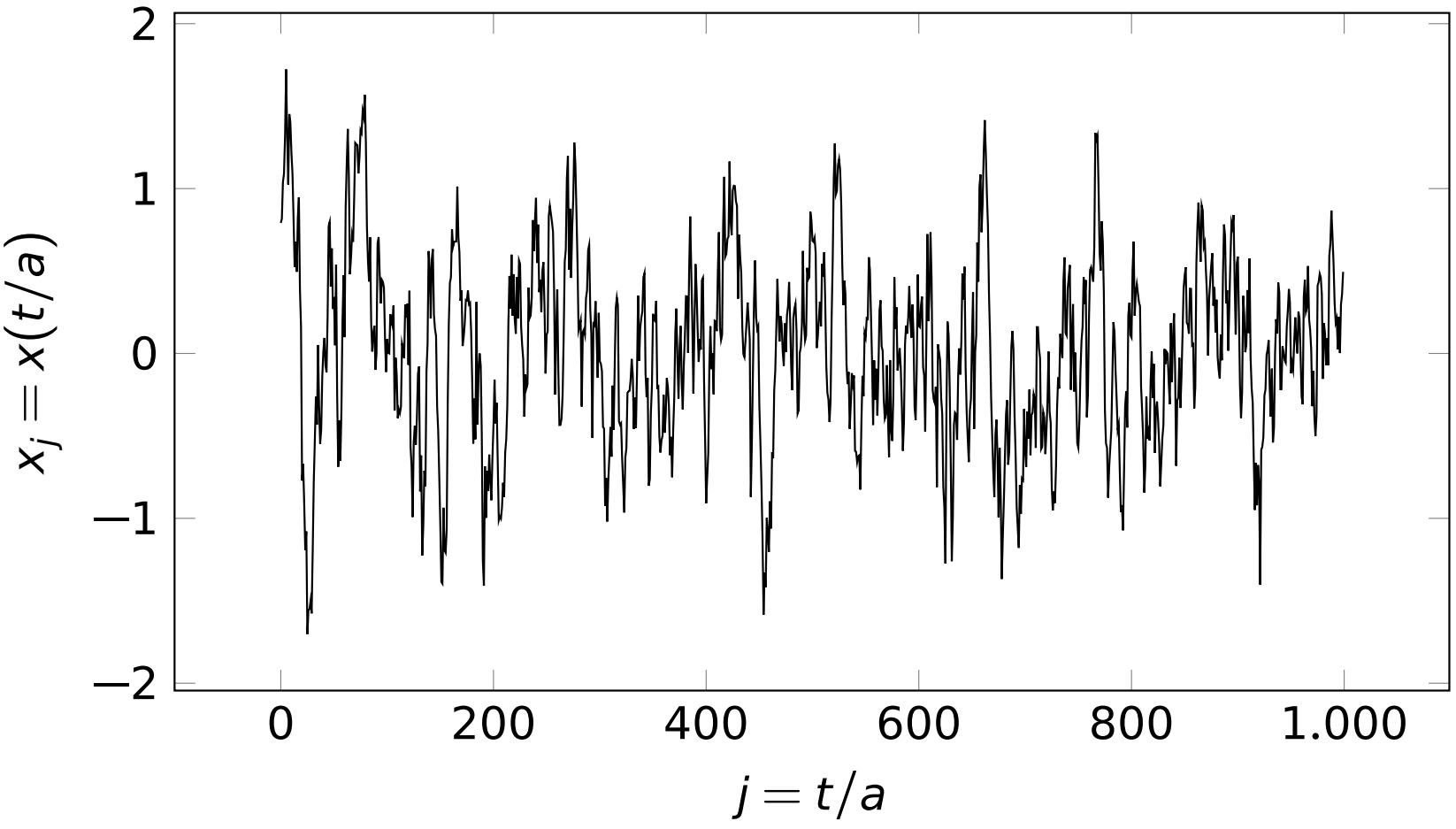
Abschnitt 4

Ergebnisse

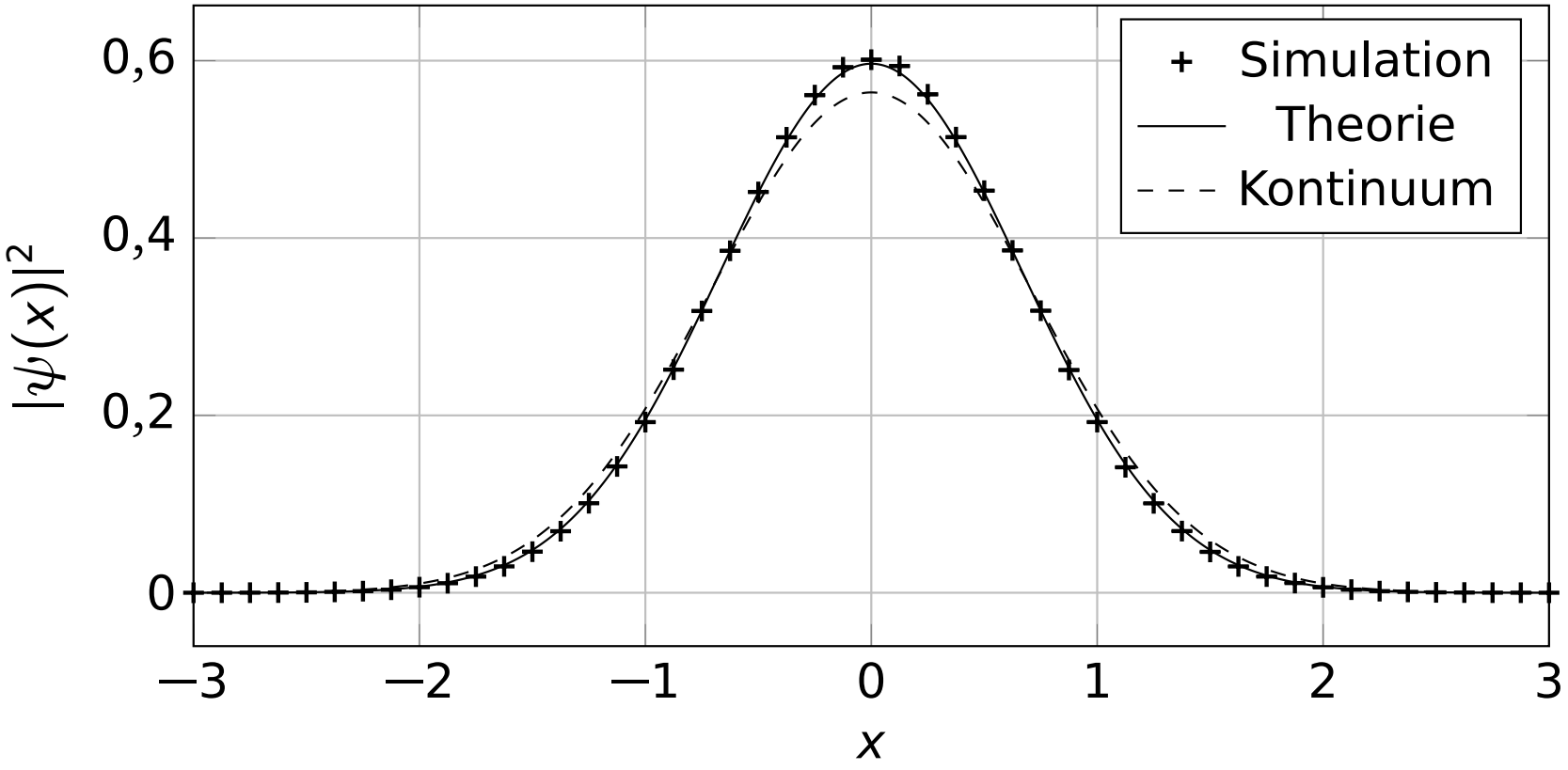
Unterabschnitt 1

Harmonischer Oszillator

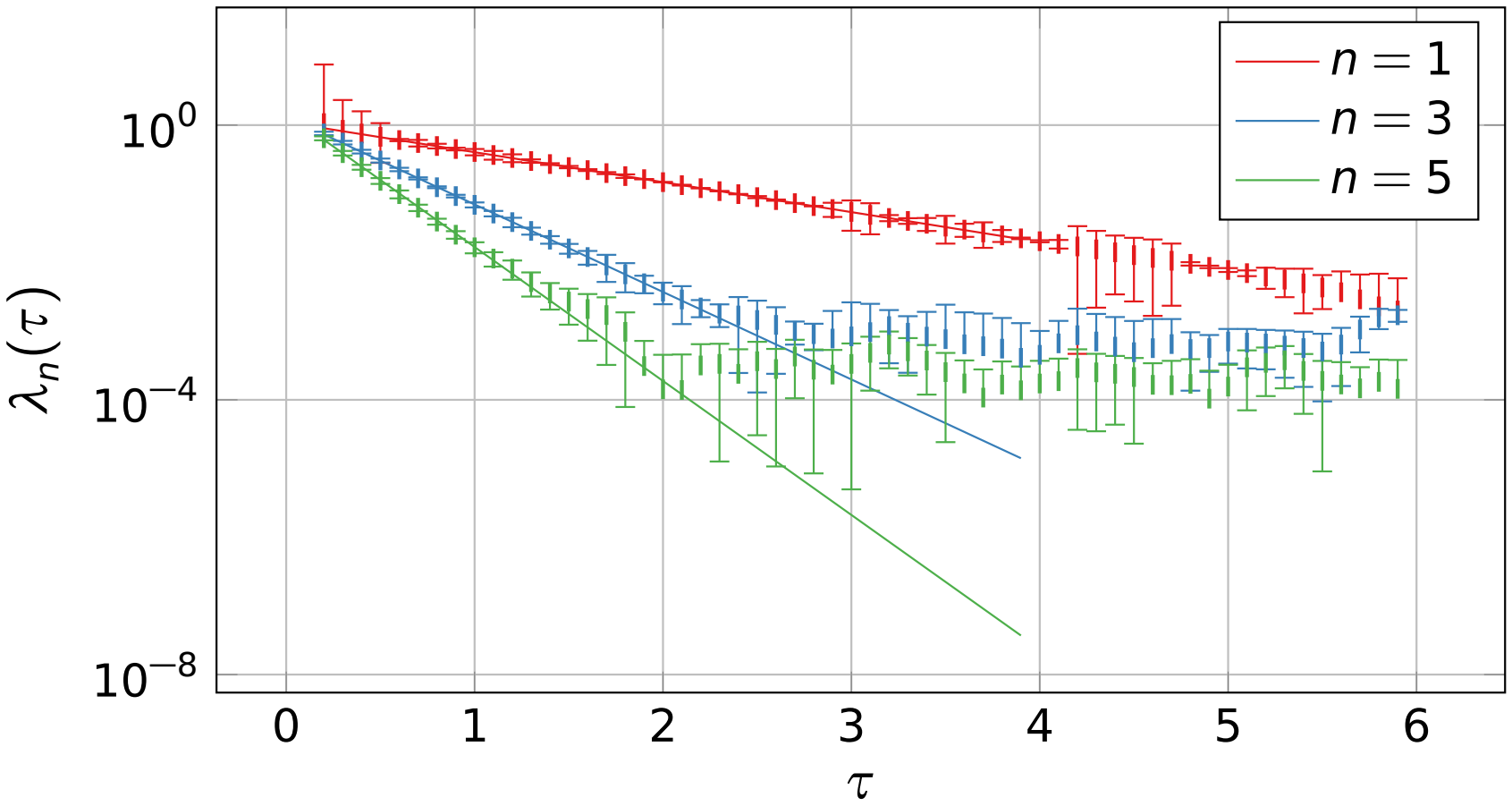
Trajektorie nach Relaxation



Aufenthaltswahrscheinlichkeit ($a = 1{,}0$)



Ungerade Eigenwerte



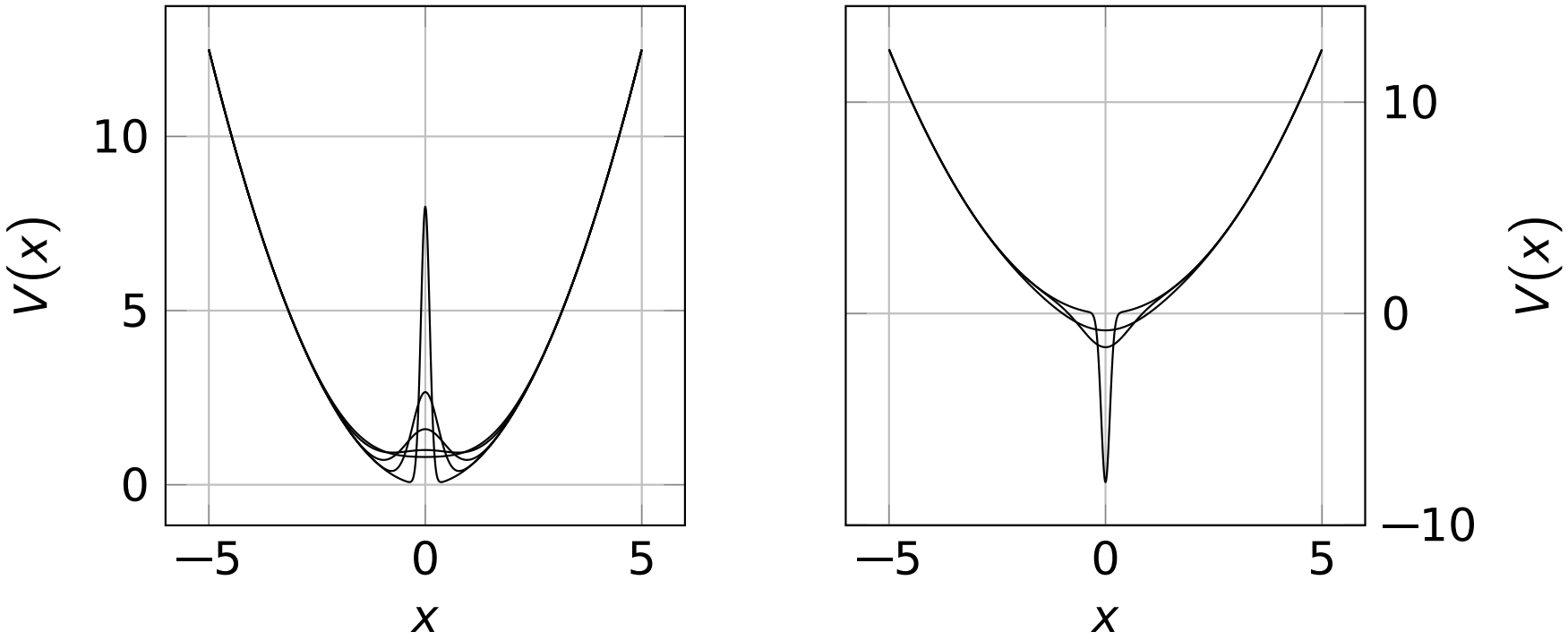
Errechnete Energiewerte aus Eigenwerten

n	E_n
1	1,503 31(75)
2	2,429(20)
3	3,433(27)
4	4,320(64)
5	4,990(95)
6	6,29(14)
7	6,869(100)
8	18,5(81)
9	12,4(15)
10	1,28(11)
11	1,186(60)

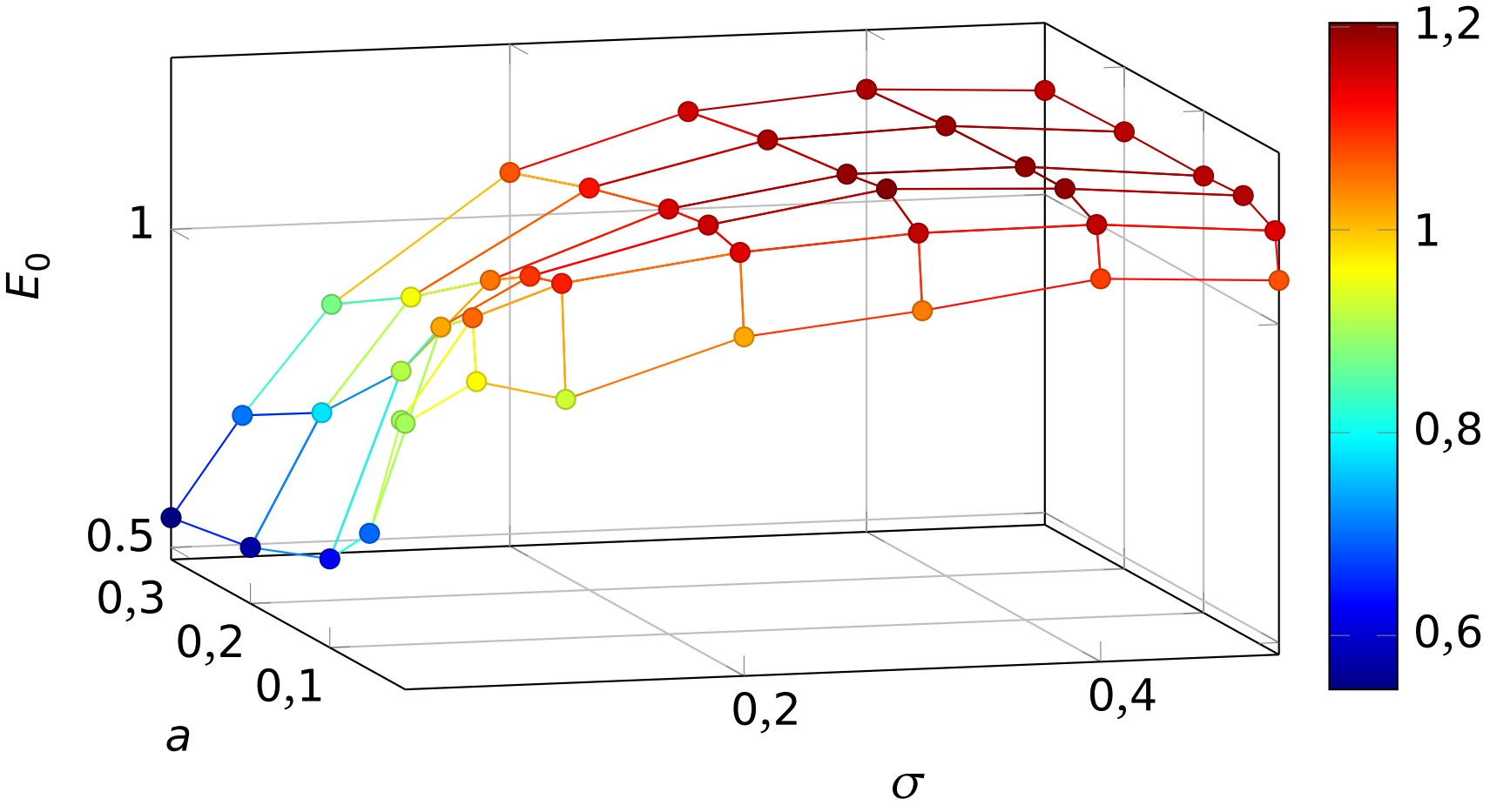
Unterabschnitt 2

Oszillator mit Störung

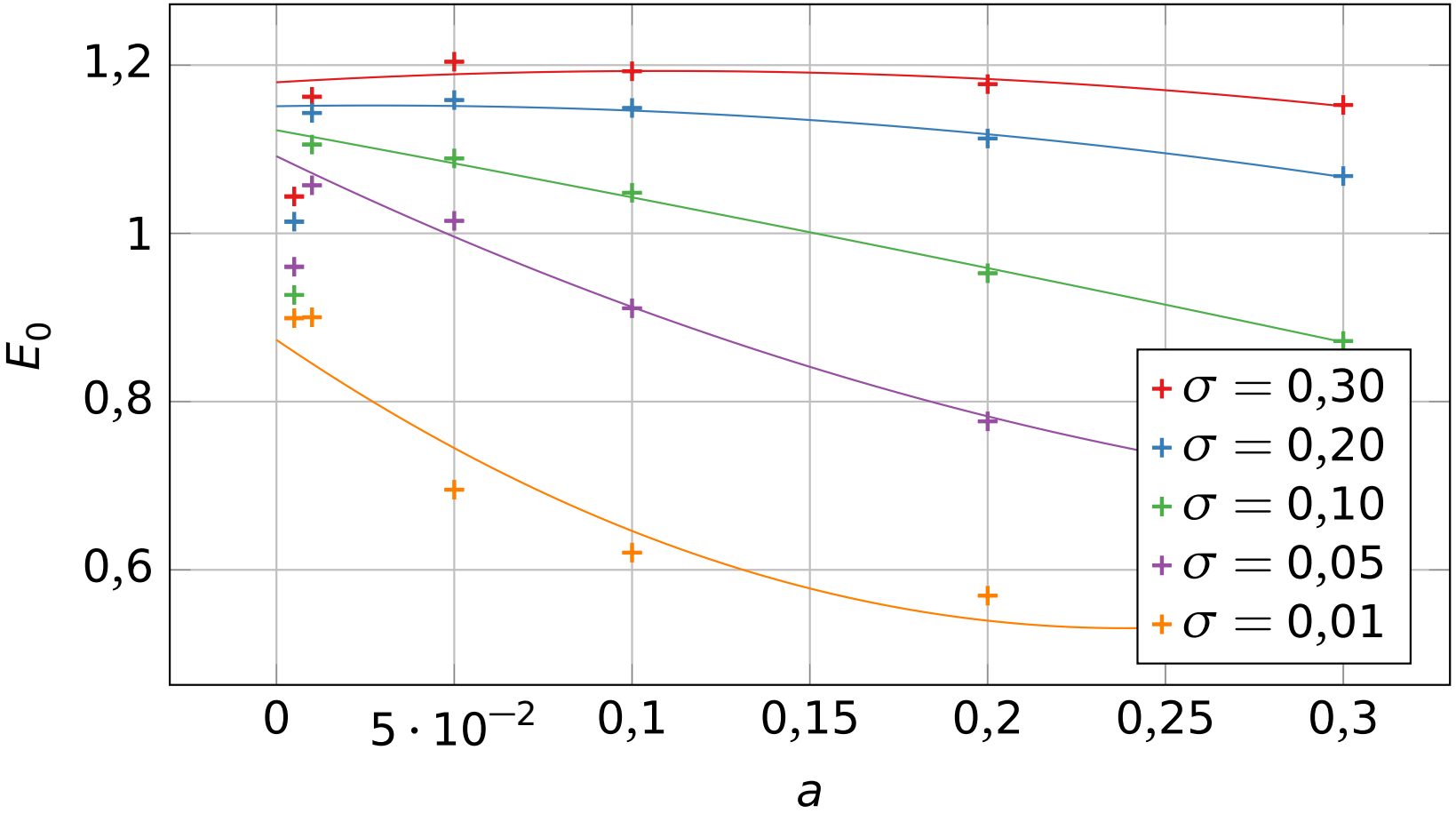
Gestörtes Potential



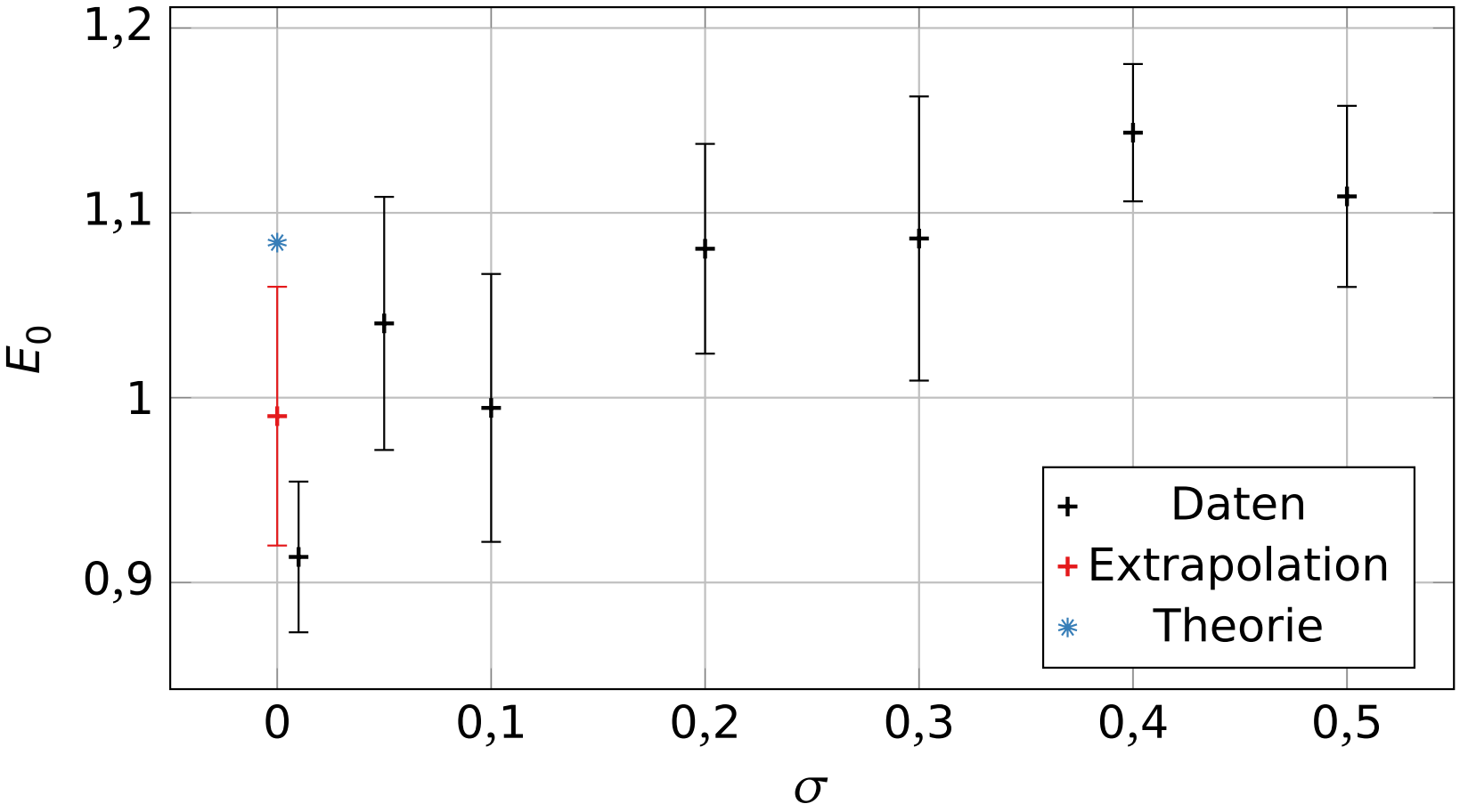
E_0 in Abhängigkeit von a und σ: $1/a_0 = -1$



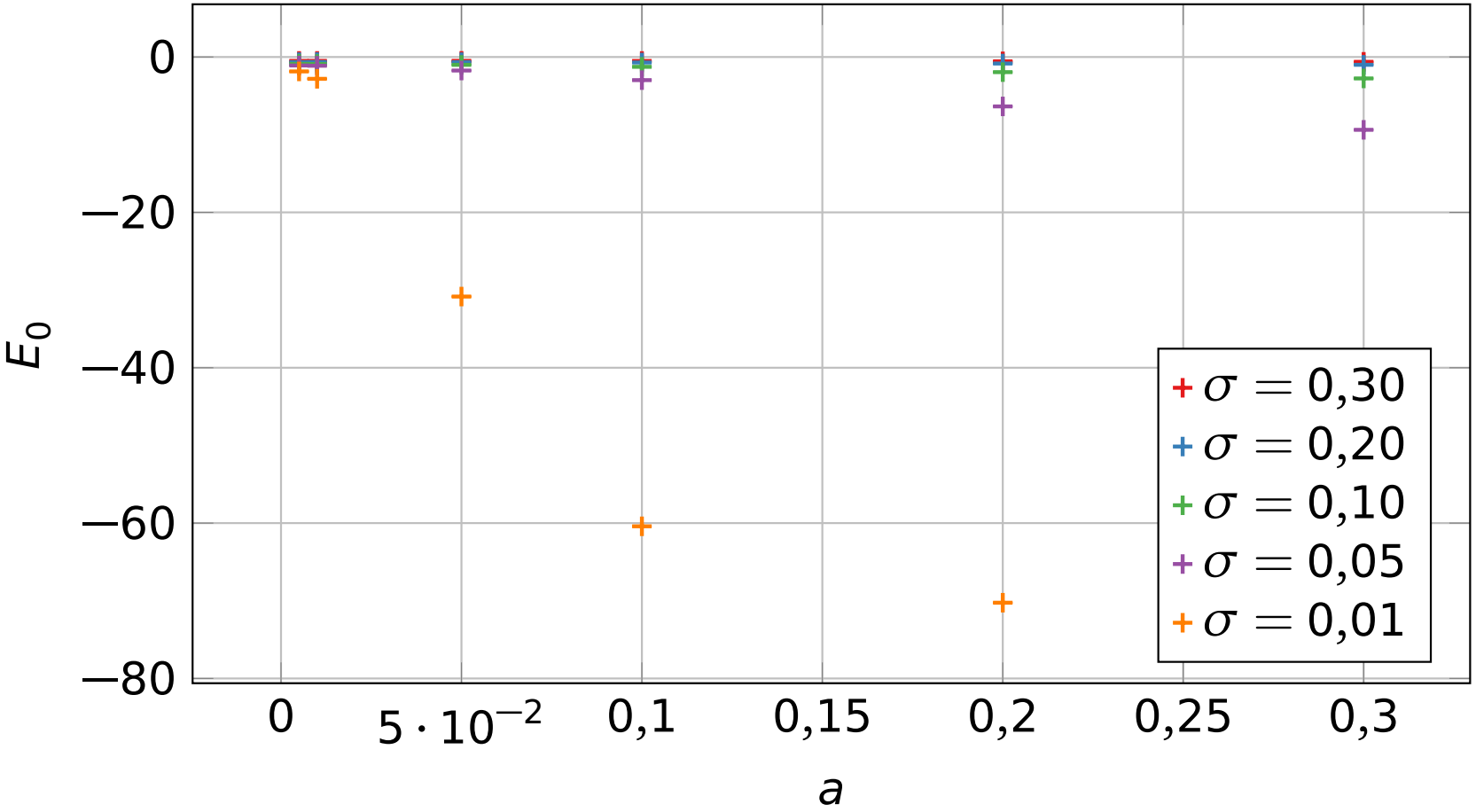
E_0 in Abhängigkeit von a: $1/a_0 = -1$



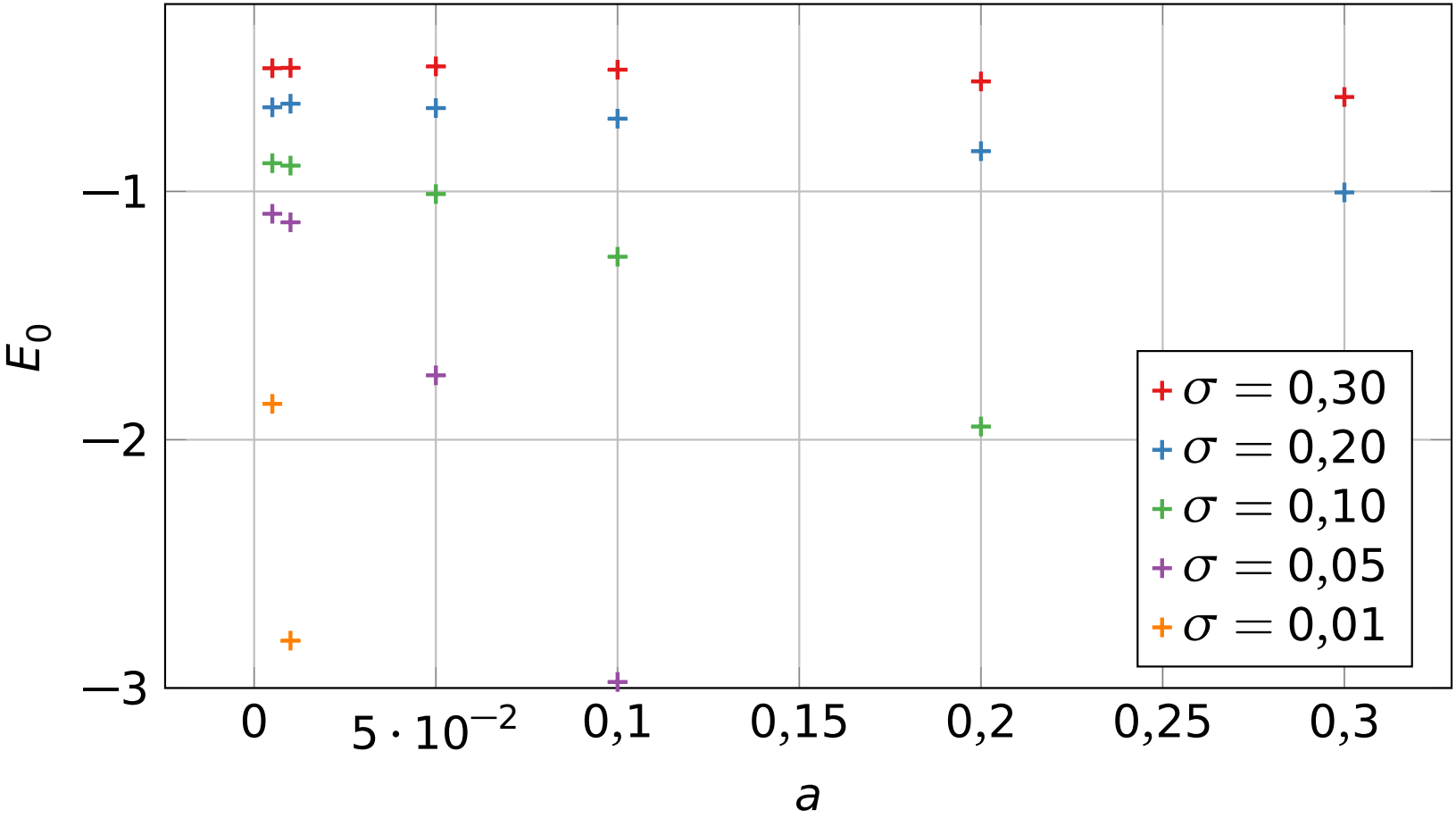
$\lim_{a\to 0} E_0$ in Abhängigkeit von σ



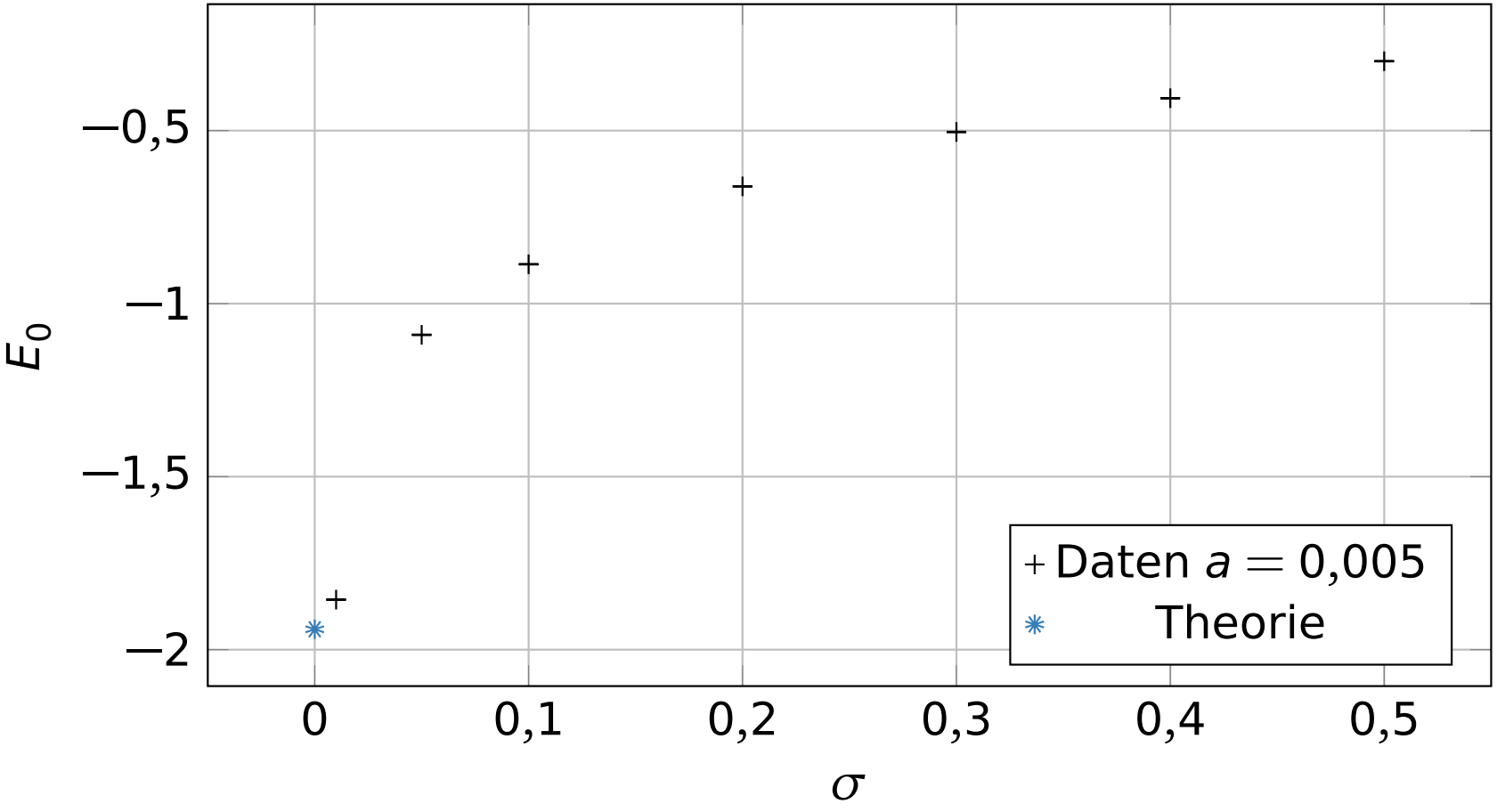
E_0 in Abhängigkeit von a: $1/a_0 = 1$



E_0 in Abhängigkeit von a: $1/a_0 = 1$



E_0 gegen σ: $1/a_0 = 1$



Zusammenfassung

Methoden:

- harmonischer Oszillator und Oszillator mit δ-Störung
- Pfadintegrale
- Metropolisalgorithmus
- Korrelationen und generalisiertes Eigenwertproblem

Ergebnisse:

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit
- Energiewerte (harmonisch und mit Störung)

Fragen

Haben Sie Fragen?

Literatur

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

Busch, Th. u. a. (1997). *Two Cold Atoms in a Harmonic Trap*. URL: http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.54.9047.

Zur Übersicht sind nicht alle Quellen angegeben, bitte schauen Sie in der Bachelorarbeit selbst ins Quellenverzeichnis.