

Applicazioni dell'equazione di Langevin in meccanica quantistica unidimensionale

Elio Farinella, Fabio Ori, Daniele Scalabrini

21 gennaio 2021

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

- 1 Aspetti teorici
 - Equazione di Langevin
 - Integrali di cammino e correlazione
- 2 Simulazioni con l'equazione di Langevin
 - Metodi di approssimazione
 - Aspetti importanti di codifica
 - Oscillatore anarmonico
 - Doppia buca
 - Analisi dei risultati
- 3 Metodi perturbativi
 - Oscillatore anarmonico

Definizione

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

L'equazione di Langevin appartiene alla più vasta classe delle *equazioni differenziali stocastiche* (EDS).

Equazione di Langevin

$$dx(t) = b[x(t)] dt + \sqrt{\sigma[x(t)]} dw(t)$$

dove $b[x(t)] : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ è detto *drift*, $\sigma[x(t)] > 0$ (in genere è costante), e $w(t)$ è il *moto browniano standard* in N dimensioni, che può essere definito assiomaticamente:

- per ogni set di tempi $t_1 < \dots < t_N$, $w(t_1), \dots, w(t_N)$ sono variabili aleatorie **mutualmente gaussiane**;
- $w(0) = 0_N$ e $\mathbb{E}[w(t)] = 0$;
- $\mathbb{E}[w_i(t)w_j(s)] = \delta_{ij} \min(t, s)$.

Un caso particolare

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di Langevin

Integrali di cammino e correlazione

Metodi di approssimazione

Aspetti importanti di codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi perturbativi

Oscillatore anarmonico

Si può dimostrare che, se un processo $x(t)$ soddisfa l'equazione di Langevin, la sua densità di probabilità $\rho(x, t)$ verifica:

Equazione di Kolmogorov o Fokker–Planck

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla^2 (\sigma \rho) - \nabla \cdot (b \rho)$$

In particolare, se $b(x)$ è **irrotazionale** e σ **costante** si può porre $b(x) = \nabla B(x)$, per cui

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{1}{2} \sigma \nabla \rho(x, t) - \rho(x, t) \nabla B(x) \right],$$

che si annulla quando

$$\rho(x) = e^{2\frac{B(x)}{\sigma}} \quad (\text{distribuzione stazionaria}).$$

Verso la meccanica quantistica

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Questo ci permette di costruire una EDS avente come soluzione una distribuzione stazionaria assegnata. In meccanica quantistica si pone usualmente

$$\rho(x) = e^{2\frac{B(x)}{\sigma}} = e^{-\beta H(x)} \quad \text{per cui} \quad b(x) = -\nabla H(x), \quad \sigma = \frac{2}{\beta}.$$

Parisi e Wu hanno introdotto il metodo di *quantizzazione stocastica*, che si fonda essenzialmente su due risultati:

- è possibile sfruttare le EDS con drift $b(x) = -\nabla H(x)$ per valutare medie statistiche rispetto alla misura di Gibbs, $e^{-\beta H(x)}$;
- la meccanica quantistica a tempo immaginario (*formulazione euclidea*) si riduce alla meccanica statistica classica.

Per giustificare il secondo punto occorre fare una breve digressione sulla formulazione a integrali di cammino della meccanica quantistica...

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

1 Aspetti teorici

- Equazione di Langevin
- Integrali di cammino e correlazione

2 Simulazioni con l'equazione di Langevin

- Metodi di approssimazione
- Aspetti importanti di codifica
- Oscillatore anarmonico
- Doppia buca
- Analisi dei risultati

3 Metodi perturbativi

- Oscillatore anarmonico

Un'altra forma per il propagatore

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

L'evoluzione di un sistema dallo stato $|x\rangle$ al tempo t allo stato $|x'\rangle$ al tempo t' viene rappresentata, attraverso l'operatore di evoluzione temporale $U(t, t')$, dal *propagatore*

$$G(x, x'; t, t') = \langle x' | U(t, t') | x \rangle = \left\langle x' \left| e^{-i\frac{H}{\hbar}(t'-t)} \right| x \right\rangle.$$

Integrali di cammino

Nell'interpretazione di Feynman il propagatore si può riscrivere nella forma

$$G(x, x'; t, t') = \int e^{\frac{i}{\hbar} S[x, t]} \mathcal{D}[x(t)] \Big|_{\substack{x(t)=x \\ x(t')=x'}}$$

dove $S[x, t]$ è l'azione classica e l'integrale s'intende esteso a tutti i possibili cammini compatibili con il vincolo agli estremi.

Proprietà di semigrupp

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Una proprietà notevole degli integrali di cammino è quella di *semigrupp*: se $t'' \in (t, t')$ e si impone la condizione aggiuntiva $x(t'') = x''$, si ha

$$\begin{aligned} G(x, x'; t, t') &= \int dx'' \int \delta(x(t'') - x'') e^{\frac{i}{\hbar} S[x, t]} \mathcal{D}[x(t)] \Big|_{\substack{x(t)=x \\ x(t')=x'}} \\ &= \int dx'' \int e^{\frac{i}{\hbar} S[x, t]} \mathcal{D}[x(t)] \Big|_{\substack{x(t)=x \\ x(t'')=x''}} \int e^{\frac{i}{\hbar} S[x, t]} \mathcal{D}[x(t)] \Big|_{\substack{x(t'')=x'' \\ x(t')=x'}}. \end{aligned}$$

Applicando ricorsivamente questa proprietà si può quindi suddividere l'intervallo (t, t') in sotto-intervalli (t_k, t_{k+1}) per $k = 1, \dots, N$ intero grande a piacere, fissando $x(t_k) = x_k$, $x(t_{k+1}) = x_{k+1}$.

Decomposizione di $U(t, t')$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di Langevin

Integrali di cammino e correlazione

Metodi di approssimazione

Aspetti importanti di codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Oscillatore
anarmonico

Formula di Lie–Trotter

$$A, B \in M_{n \times n}(\mathbb{C}) \implies e^{A+B} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right)^N$$

$$\begin{aligned}
 U(t, t') &= e^{-i\frac{T+V}{\hbar}(t'-t)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-i\frac{T}{N\hbar}(t'-t)} e^{-i\frac{V}{N\hbar}(t'-t)} \right)^N \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{-i\frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \int dx_N |x_N\rangle \langle x_N| e^{-i\frac{V}{N\hbar}(t'-t)} e^{-i\frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \\
 &\times \int dx_{N-1} |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}| e^{-i\frac{V}{N\hbar}(t'-t)} \dots \\
 &\dots e^{-i\frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \int dx_1 |x_1\rangle \langle x_1| e^{-i\frac{V}{N\hbar}(t'-t)}
 \end{aligned}$$

inserendo N completezze.

Quindi il propagatore diventa:

$$\begin{aligned}
G(x, x'; t, t') &= \langle x' | U(t, t') | x \rangle \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x' | e^{-i \frac{T}{N\hbar} (t' - t)} \int dx_N |x_N\rangle \langle x_N | e^{-i \frac{V}{N\hbar} (t' - t)} e^{-i \frac{T}{N\hbar} (t' - t)} \\
&\quad \int dx_{N-1} |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1} | e^{-i \frac{V}{N\hbar} (t' - t)} \dots \\
&\quad \dots e^{-i \frac{T}{N\hbar} (t' - t)} \int dx_1 |x_1\rangle \langle x_1 | e^{-i \frac{V}{N\hbar} (t' - t)} | x \rangle \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N \\
&\quad \left\langle x' \left| e^{-i \frac{T}{N\hbar} (t' - t)} \right| x_N \right\rangle \left\langle x_N \left| e^{-i \frac{V}{N\hbar} (t' - t)} e^{-i \frac{T}{N\hbar} (t' - t)} \right| x_{N-1} \right\rangle \\
&\quad \left\langle x_{N-1} \left| e^{-i \frac{V}{N\hbar} (t' - t)} \dots e^{-i \frac{T}{N\hbar} (t' - t)} \right| x_1 \right\rangle \left\langle x_1 \left| e^{-i \frac{V}{N\hbar} (t' - t)} \right| x \right\rangle.
\end{aligned}$$

Abbiamo quindi:

$$G(x, x'; t, t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N$$

$$\left\langle x' \left| e^{-i \frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \right| x_N \right\rangle \left\langle x_N \left| e^{-i \frac{V}{N\hbar}(t'-t)} e^{-i \frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \right| x_{N-1} \right\rangle$$

$$\left\langle x_{N-1} \left| e^{-i \frac{V}{N\hbar}(t'-t)} \dots e^{-i \frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \right| x_1 \right\rangle \left\langle x_1 \left| e^{-i \frac{V}{N\hbar}(t'-t)} \right| x \right\rangle.$$

Se $V = V(x)$, si ha $e^{-i \frac{V(x)}{N\hbar}(t'-t)} |x_k\rangle = e^{-i \frac{V(x_k)}{N\hbar}(t'-t)} |x_k\rangle$ e gli elementi di matrice rimanenti sono i propagatori della particella libera,

$$\left\langle x_{k+1} \left| e^{-i \frac{T}{N\hbar}(t'-t)} \right| x_k \right\rangle = \sqrt{\frac{Nm}{2\pi i\hbar(t'-t)}} \exp \left[\frac{im(x_{k+1} - x_k)^2}{2\hbar(t'-t)} \right].$$

$$G(x, x'; t, t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \sqrt{\frac{Nm}{2\pi i \hbar (t' - t)}}^N \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{k=0}^{N-1} \frac{mN(x_{k+1} - x_k)^2}{2(t' - t)} - \sum_{k=0}^N \frac{t' - t}{N} V(x_k) \right] \right\}$$

◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ≡ ▶ ◀ ≡ ▶ ≡ ↺ 🔍 ↻ 12/70

Formulazione euclidea

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Ponendo per brevità $t' - t \equiv t$, conviene scrivere il propagatore a *tempi immaginari*. In questo modo $S[x, t]$ è ottenuta dall'**hamiltoniana** del sistema, e si ha, posto $T = it/\hbar$,

$$\begin{aligned} G(x, x', T) &= \langle x' | e^{-TH} | x \rangle \\ &= \int \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right) d\tau \right] \mathcal{D}[x(t)] \Big|_{\substack{x(0)=x \\ x(T)=x'}} \end{aligned}$$

e ricordando il risultato precedente:

$$\begin{aligned} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \sqrt{\frac{Nm}{2\pi T}}^N \\ &\quad \times \exp \left[-\sum_{k=0}^{N-1} \frac{m(x_{k+1} - x_k)^2}{2T/N} - \sum_{k=0}^N \frac{T}{N} V(x_k) \right]. \end{aligned}$$

Correlazione

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Se $q(t) = e^{iHt} q e^{-iHt}$ è l'operatore posizione in descrizione di Heisenberg, ponendoci a tempo immaginario consideriamo la funzione

$$\begin{aligned} C(t, s) &\equiv \langle E_0 | q(it) q(is) | E_0 \rangle = \langle E_0 | e^{-Ht} q e^{Ht} e^{-Hs} q e^{Hs} | E_0 \rangle \\ &= \langle E_0 | q e^{-(s-t)H} q | E_0 \rangle e^{(s-t)E_0} \\ &= \sum_E \langle E_0 | q e^{-(s-t)H} | E \rangle \langle E | q | E_0 \rangle e^{(s-t)E_0} \\ &= \sum_E e^{-(E-E_0)(s-t)} |\langle E_0 | q | E \rangle|^2 \end{aligned}$$

Se $|s - t|$ è sufficientemente grande e V è **simmetrico** (quindi si annulla $\langle E_0 | q | E_0 \rangle = 0$), in questa espressione domina il contributo del primo stato eccitato E_1 .

Osserviamo che un qualsiasi $|\psi\rangle$ si può scomporre sugli autostati di H come $|\psi\rangle = \sum_E c_E |E\rangle$, quindi

$$\begin{aligned} e^{-(H-E_0)T} |\psi\rangle &= \sum_E c_E e^{-(H-E_0)T} |E\rangle \\ &= c_{E_0} |E_0\rangle + \sum_{E>E_0} c_E e^{-(H-E_0)T} |E\rangle \end{aligned}$$

Passando al limite per $T \rightarrow \infty$ in questa relazione, tutti i termini della somma tendono a zero, e rimane solamente

$$\lim_{T \rightarrow \infty} e^{-(H-E_0)T} |\psi\rangle = c_{E_0} |E_0\rangle = \langle E_0 | \psi \rangle |E_0\rangle,$$

che è non banale per ogni $|\psi\rangle$ non ortogonale a $|E_0\rangle$.

Possiamo quindi sostituire

$$|E_0\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{e^{-(H-E_0)T} |\psi\rangle}{\langle E_0 | \psi \rangle} \quad \text{in} \quad C(t, s) = \langle E_0 | q(it) q(is) | E_0 \rangle$$

ottenendo

$$\begin{aligned} C(t, s) &= \left\langle E_0 \left| e^{-Ht} q e^{-(s-t)H} q e^{-Hs} \right| E_0 \right\rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi | e^{(H-E_0)T} e^{-Ht} q e^{-(s-t)H} q e^{Hs} e^{-(H-E_0)T} | \psi \rangle}{\langle \psi | E_0 \rangle \langle E_0 | \psi \rangle} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi | e^{(T-t)H} q e^{-(s-t)H} q e^{(s-T)H} | \psi \rangle}{\langle \psi | E_0 \rangle \langle E_0 | \psi \rangle} \\ &= \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] x(t) x(s) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] d\tau \right\}}{\int \mathcal{D}[x(t)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] d\tau \right\}} \end{aligned}$$

Verso l'equazione di Langevin

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Quindi, se $|s - t|$ è grande,

$$e^{-(E_1 - E_0)(s - t)} |\langle E_0 | q | E_1 \rangle|^2 \\ \approx \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] x(t) x(s) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] d\tau \right\}}{\int \mathcal{D}[x(t)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] d\tau \right\}}$$

$\langle E_0 | q(it) q(is) | E_0 \rangle$ si presenta allora come una *funzione di correlazione* della meccanica statistica: questo permette di affrontare il problema con l'equazione di Langevin.

A tal fine, sfruttiamo la discretizzazione svolta in precedenza per approssimare il valore della funzione di correlazione.

$$G(x, x', T) = \langle x' | e^{-TH} | x \rangle$$

$$\propto \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m(x_{k+1} - x_k)^2}{2T/N} - \sum_{k=0}^N \frac{T}{N} V(x_k) \right]$$
$$e^{-(E_1-E_0)(s-t)} |\langle E_0|q|E_1\rangle|^2$$

$$\approx \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m(x_{k+1} - x_k)^2}{2a} - \sum_{k=0}^N aV(x_k) \right] x_k x_{k+a}$$

◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ≡ ▶ ◀ ≡ ▶ ≡ ↺ 🔍 ↻ 18/70

Costruzione dell'equazione di Langevin

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Partendo dall'azione discretizzata

$$S[x_k] = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m(x_{k+1} - x_k)^2}{2a^2} + \sum_{k=0}^N V(x_k)$$

possiamo costruire il drift $b(x_i)$, con i fissato, come

$$b(x_i) = -\frac{\partial S}{\partial x_i} = m \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{a^2} - V'(x_i)$$

Osserviamo che, nel caso senza trascinamento $b(x_i) = 0$, troviamo una discretizzazione del secondo principio della dinamica, ma con un segno sbagliato, in quanto siamo a tempo immaginario.

Ponendo nell'equazione $dx(\tau) = b[x(\tau)] d\tau + \sqrt{\sigma[x(\tau)]} dw(\tau)$ il coefficiente di diffusione

$$D = \sqrt{\sigma} = \sqrt{\frac{2\hbar d\tau}{a}}$$

otteniamo:

Equazione di Langevin discretizzata e a tempo euclideo

$$dx_i(\tau) = -V'[x_i(\tau)]d\tau + m \frac{x_{i+1}(\tau) - 2x_i(\tau) + x_{i-1}(\tau)}{a^2} d\tau + \sqrt{\frac{2\hbar d\tau}{a}} dw_i(\tau)$$

Nell'equazione compaiono ora due tempi diversi: uno è il tempo τ di evoluzione dell'equazione, mentre l'altro è il tempo immaginario, che è stato discretizzato, con passo a , e nascosto nell'indice i di $x_i(\tau)$.

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

1 Aspetti teorici

- Equazione di Langevin
- Integrali di cammino e correlazione

2 Simulazioni con l'equazione di Langevin

- Metodi di approssimazione
- Aspetti importanti di codifica
- Oscillatore anarmonico
- Doppia buca
- Analisi dei risultati

3 Metodi perturbativi

- Oscillatore anarmonico

Il metodo di Eulero

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

L'algoritmo più semplice a cui possiamo appellarci per risolvere numericamente l'equazione di Langevin è quello di Eulero.

Metodo di Eulero

- 1 Fissiamo un valore ragionevolmente piccolo per l'intervallo $d\tau$. La scelta dovrà essere fatta empiricamente, a seconda del problema che ci si trova ad affrontare.
- 2 Costruiamo una successione, a partire da $x_i(0)$, seguendo la dinamica dettata dall'equazione

$$x_i(\tau + d\tau) = x_i(\tau) + b[x_i(\tau)] d\tau + D dw_i(\tau).$$

Si vede subito che la scelta del valore di $d\tau$ ha un impatto notevole sul valore finale: l'algoritmo di Eulero è molto rozzo ed è affetto da un errore $\mathcal{O}(d\tau)$.

Il metodo dei trapezi

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Un'alternativa più raffinata all'algoritmo di Eulero è il metodo dei trapezi.

Metodo dei trapezi

Integrando ambo i membri dell'equazione di Langevin sull'intervallo $[\tau, \tau + d\tau]$ si trova

$$x_i(\tau + d\tau) - x_i(\tau) = \int_{\tau}^{\tau+d\tau} b[x_i(\tau')] d\tau' + D [w_i(\tau + d\tau) - w_i(\tau)]$$

L'integrale può essere approssimato con l'area del trapezio di altezza $d\tau$ e basi $b[x_i(\tau + d\tau)]$ e $b[x_i(\tau)]$:

$$x(\tau + d\tau) = x(\tau) + \frac{b[x_i(\tau)] + b[x_i(\tau + d\tau)]}{2} d\tau + D [w_i(\tau + d\tau) - w_i(\tau)]$$

Torna quindi utile l'algoritmo di Eulero, che fornisce la stima

successivamente sfruttata per calcolare b attraverso il metodo dei trapezi. La combinazione dei due algoritmi, entrambi affetti da un errore $\mathcal{O}(d\tau)$, porta ad un algoritmo affetto da un errore $\mathcal{O}(d\tau^2)$, che quindi, a $d\tau$ piccoli, fornisce risultati piú precisi per le grandezze che si vogliono calcolare, rispetto a quello che si può ottenere applicando o uno, o l'altro.

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

- 1 Aspetti teorici
 - Equazione di Langevin
 - Integrali di cammino e correlazione
- 2 Simulazioni con l'equazione di Langevin
 - Metodi di approssimazione
 - Aspetti importanti di codifica
 - Oscillatore anarmonico
 - Doppia buca
 - Analisi dei risultati
- 3 Metodi perturbativi
 - Oscillatore anarmonico

Parametri

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

- ➊ N : numero di traiettorie indipendenti;
- ➋ T : tempo totale euclideo;
- ➌ T_{lang} : tempo totale di evoluzione di Langevin;
- ➍ steps : numero di suddivisioni del tempo di Langevin ($\tau = T_{\text{lang}}/\text{steps}$);
- ➎ g : costante di accoppiamento;
- ➏ skips : numero di evoluzioni tra una misura e l'altra, per evitare eccessiva correlazione tra le misure;
- ➐ therm : numero di passi di termalizzazione;
- ➑ N_{exp} : numero di esperimenti indipendenti.

Differenze discrete

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Ricordiamo che il drift si discretizza come:

$$b(x_i) = -\frac{\partial S}{\partial x_i} = m \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{a^2} - V'(x_i)$$

Per calcolare il termine che contiene la differenza seconda discreta si può fare uso di una matrice sparsa, lavorando in condizioni periodiche:

```
e = ones(N,1);  
D2 = spdiags([-e e],0:1,N,N);  
D2(1,N) = 1;  
D2 = D2+D2';  
D2 = D2/a^2;
```

Qui e nel seguito si pone sempre $m = \hbar = 1$.

Esempio

```
e = ones(N,1);
D2 = spdiags([-e e],0:1,N,N);
D2(1,N) = 1;
D2 = D2+D2';
D2 = D2/a^2;
```

$$\frac{1}{a^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

Autocorrelazione discretizzata

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Per calcolare

$$e^{-(E_1-E_0)(s-t)} |\langle E_0 | q | E_1 \rangle|^2 \\ \approx \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m(x_{k+1} - x_k)^2}{2a} - \sum_{k=0}^N a V(x_k) \right] x_k x_{k+a}$$

occorre determinare le correlazioni $\langle x_k x_{k+a} \rangle$, il che risulta molto più semplice passando nello spazio di Fourier:

```
function C = myxcorr(x)
    y = fft(x);
    C = ifft(y .* conj(y), 'symmetric');
end
```

Questo riduce il costo da $\mathcal{O}(N^2)$ a $\mathcal{O}(N \log N)$ e spiega l'importanza di porsi in condizioni periodiche.

Errori

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

L'impostazione del programma dà luogo a una serie di errori che non si può evitare di considerare:

- 1 **errori statistici**, dovuti al processo aleatorio di evoluzione Langevin e che scalano come $1/\sqrt{N}$, essendo N il numero degli esperimenti;
- 2 **errori di discretizzazione**, dovuti al passo $a = T/N$ del reticolo, mentre la teoria quantistica è continua, e alla finitezza di T e τ ;
- 3 **errori algoritmici**, legati alle procedure di approssimazione (Eulero e trapezi), che introducono un errore sistematico perché gli intervalli d'integrazione hanno ampiezza finita τ .

Compatibilmente con il tempo di calcolo, occorre pertanto massimizzare N ed estrapolare i risultati per $a, \tau \rightarrow 0$. Tuttavia, se $a \rightarrow 0$, anche $T \rightarrow 0$...

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

1 Aspetti teorici

- Equazione di Langevin
- Integrali di cammino e correlazione

2 Simulazioni con l'equazione di Langevin

- Metodi di approssimazione
- Aspetti importanti di codifica
- Oscillatore anarmonico
- Doppia buca
- Analisi dei risultati

3 Metodi perturbativi

- Oscillatore anarmonico

Definizione dei parametri

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

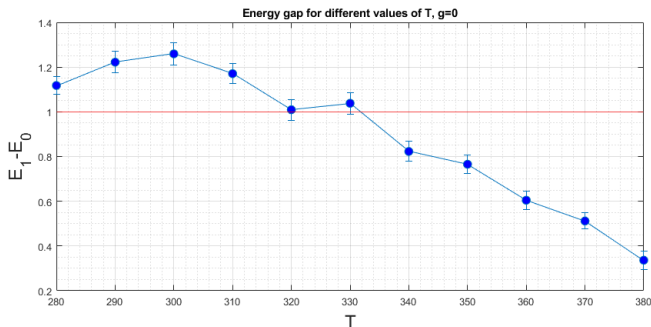
Simulazioni con l'equazione di Langevin

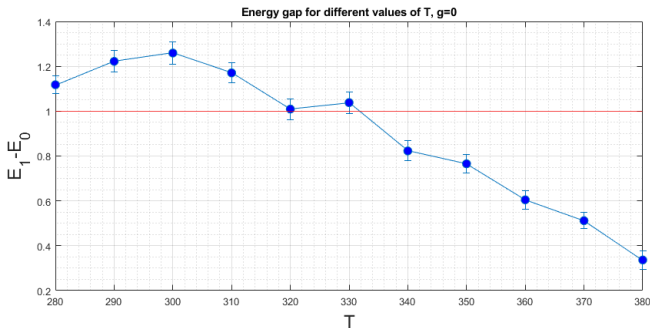
Metodi di
approssimazione
Aspetti importanti di
codifica
**Oscillatore
anarmonico**
Doppia buca
Analisi dei risultati

Metodi perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Il parametro tecnico che influenza maggiormente l'esito della simulazione è il tempo euclideo totale T . Per trovare un compromesso si può partire dal caso più semplice di $g = 0$, in cui l'oscillatore studiato è armonico e, nelle unità scelte, il gap energetico è $\Delta E = 1$.





Il grafico sopra è stato realizzato variando T , con τ sufficientemente ridotto da garantire un risultato prossimo a quello che si avrebbe realizzando un fitting tra esperimenti con τ diversi. Nonostante le fluttuazioni, si vede che per $T \approx 320 \div 330$ il gap viene stimato entro i margini d'errore.

Una stima piú accurata con $T = 325$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

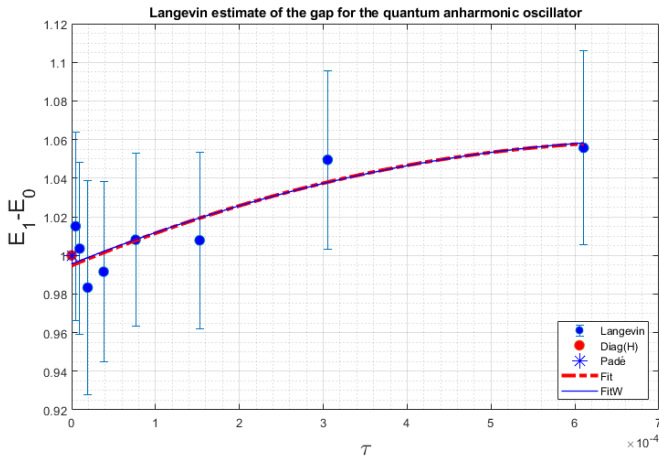
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



Fitting per l'autocorrelazione

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

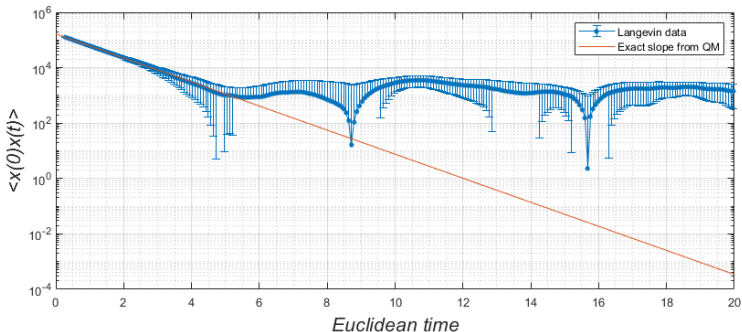
Doppia buca

Analisi dei risultati

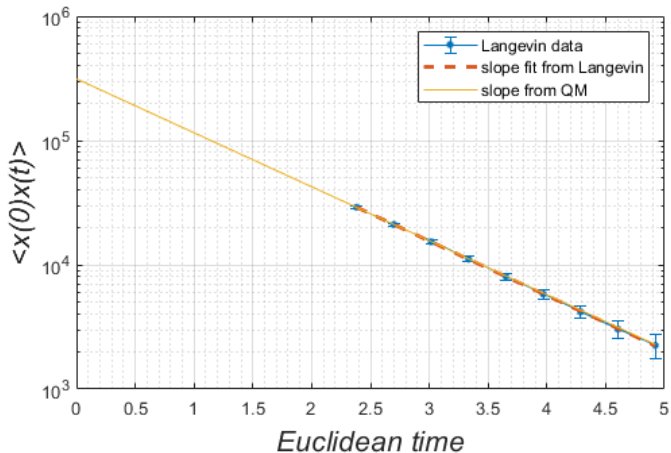
Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Un altro parametro da impostare è il range in cui eseguire un fitting per l'autocorrelazione (che in scala logaritmica ha dipendenza lineare da T): come mostra il grafico che segue ($g = 0$, $N_{exp} = 100$), il suo andamento è lineare solo in un piccolo intervallo di T .



Una scelta accettabile è ad esempio la seguente ($g = 0$, $N_{exp} = 100$):



Altri parametri significativi

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

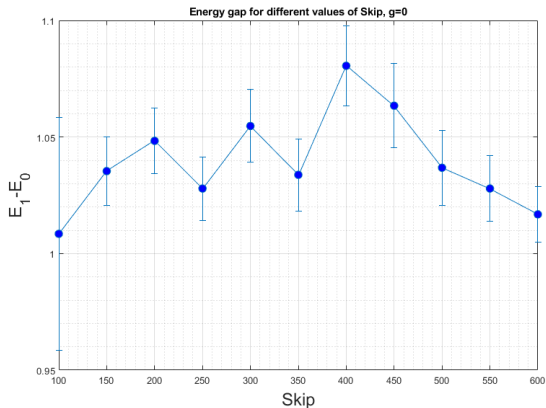
Oscillatore
anarmonico

Riguardo i parametri rimanenti:

- il numero di traiettorie scelto $N = 4096$ è il maggiore possibile (per comodità una potenza di 2) che non rallenta eccessivamente l'elaborazione;
- il tempo di evoluzione dell'equazione di Langevin è stato mantenuto costante;
- il numero di steps è stato aumentato in ogni esperimento di un fattore 2, partendo dal valore di 2^{14} o 2^{15} ;
- il numero di skips è stato mantenuto costante;
- la termalizzazione, apparendo sufficiente, è stata mantenuta costante.

Le misure sono indipendenti?

Per assicurarci che il numero di skips sia sufficiente a evitare correlazione tra misure successive, si può variare il parametro e vedere se c'è una dipendenza significativa del risultato della simulazione, mantenendo fissato il valore di T sopra determinato.

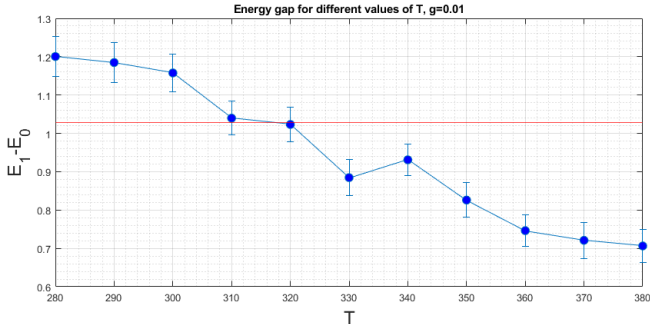


Oscillatore anarmonico con $g = 0.01$

Consideriamo adesso il potenziale anarmonico

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + gx^4,$$

con $g = 0.01$. L'intervallo di T piú adatto può essere determinato come in precedenza; come si vede dal grafico, $T \approx 310 \div 320$.



$$g = 0.01, T = 315, N_{exp} = 1000$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

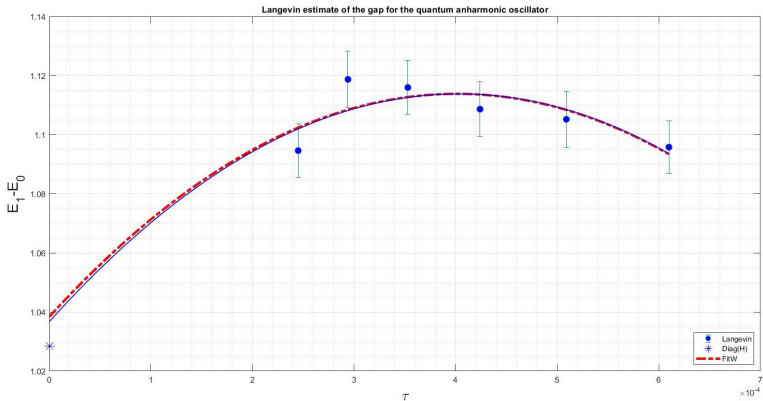
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$\Delta E = 1.04 \pm 0.06$, valore esatto: 1.028

$$g = 0.1, T = 270, N_{exp} = 100$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

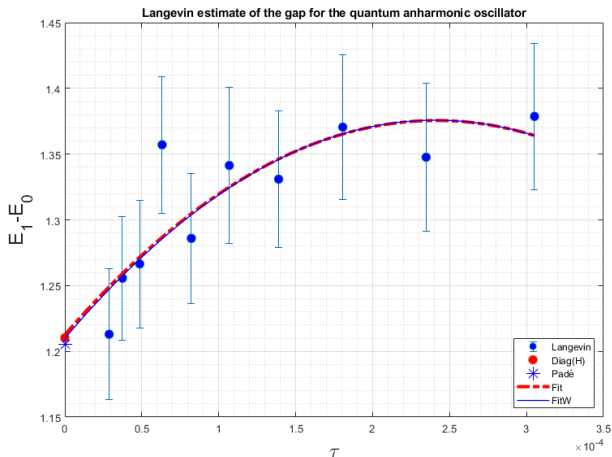
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$$\Delta E = 1.21 \pm 0.07, \text{ valore esatto: } 1.210$$

$$g = 1, T = 190, N_{exp} = 100$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

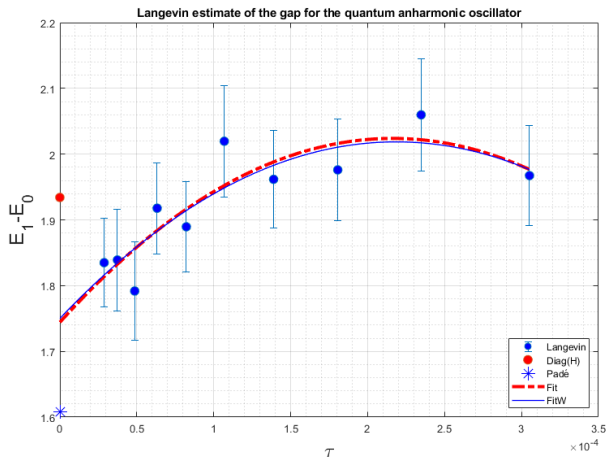
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$$\Delta E = 1.74 \pm 0.09, \text{ valore esatto: } 1.934$$

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

1 Aspetti teorici

- Equazione di Langevin
- Integrali di cammino e correlazione

2 Simulazioni con l'equazione di Langevin

- Metodi di approssimazione
- Aspetti importanti di codifica
- Oscillatore anarmonico
- Doppia buca
- Analisi dei risultati

3 Metodi perturbativi

- Oscillatore anarmonico

Doppia buca

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

La stessa tecnica di simulazione può essere applicata allo studio di un potenziale di tipo “doppia buca”:

$$V(x) = \frac{1}{4} (x^2 - g^2)^2.$$

Aspetti teorici

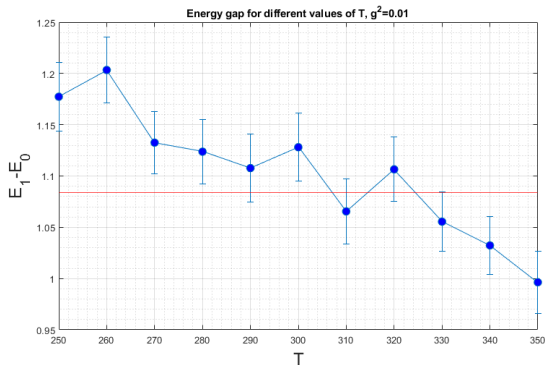
Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con l'equazione di Langevin

Metodi di
approssimazione
Aspetti importanti di
codifica
Oscillatore
anarmonico
Doppia buca
Analisi dei risultati

Metodi perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$$g = 0.1, T = 310, N_{exp} = 100$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

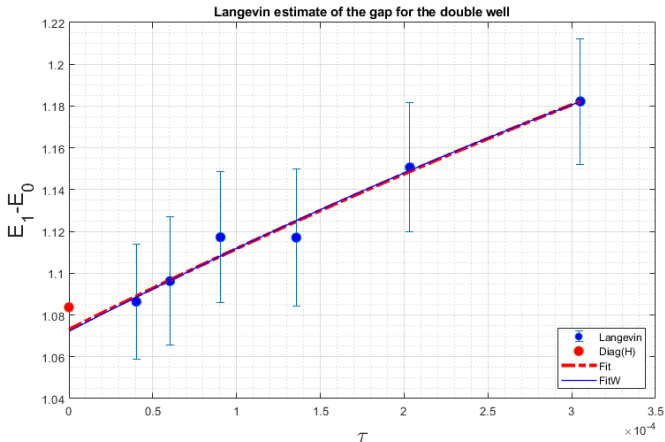
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

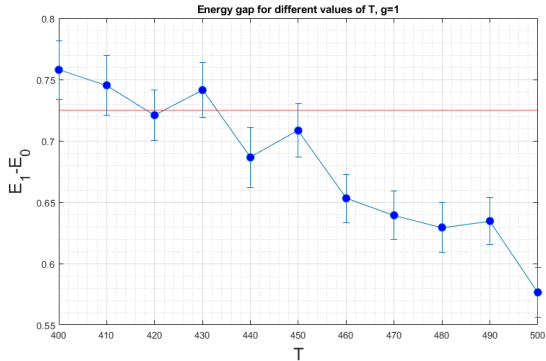
Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$$\Delta E = 1.07 \pm 0.03, \text{ valore esatto: } 1.0837$$

Per queste misure è stato modificato l'intervallo di fitting dell'autocorrelazione, perché la risposta è lineare in un intervallo più ridotto. Aumentando ancora g :



$$g = 1, T = 410, N_{exp} = 100$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

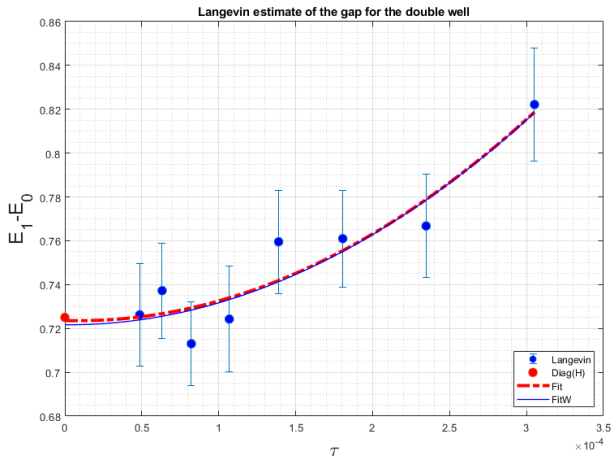
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$$\Delta E = 0.72 \pm 0.05, \text{ valore esatto: } 0.725$$

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

1 Aspetti teorici

- Equazione di Langevin
- Integrali di cammino e correlazione

2 Simulazioni con l'equazione di Langevin

- Metodi di approssimazione
- Aspetti importanti di codifica
- Oscillatore anarmonico
- Doppia buca
- Analisi dei risultati

3 Metodi perturbativi

- Oscillatore anarmonico

Verifica dei risultati

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

I valori precedentemente ricavati possono essere confrontati con il gap energetico ricavato dalla diagonalizzazione dell'hamiltoniana, che in una dimensione è assai più conveniente. Il processo è ovviamente discretizzato, con passo L/N , essendo N il numero di nodi del reticolo e L l'ampiezza della "scatola" $|x| < L$ di normalizzazione.

Anche in questo caso occorre passare nello spazio di Fourier per costruire la griglia dei momenti, da cui determinare il termine cinetico di $H\psi$, per poi tornare nello spazio delle posizioni e aggiungere il termine dovuto al potenziale:

```
kx = fftshift(pi * (-N/2 : N/2-1) / L)';  
K2 = kx .^ 2;  
V = x .^2 / 2 + g * x .^ 4;  
psixx = real(ifft(K2 .* fft(psi)));  
Hpsi = 0.5 * psixx + V .* psi;
```

La routine `eigs` di MATLAB permette di ricavare in maniera automatica gli autovalori di H .

g	T	ΔE_{Lang}	$\Delta E_{Lang, W}$	ΔE_{Diag}	ΔE_{Pert}
0	100	0.996 ± 0.015	0.997 ± 0.018	1	1
0.01	1000	1.04 ± 0.06	1.04 ± 0.06	1.028	1.028
0.1	100	1.21 ± 0.07	1.21 ± 0.08	1.210	1.205
1	100	1.74 ± 0.09	1.74 ± 0.09	1.934	1.608

Tabella: Risultati per l'oscillatore anarmonico.

g	N_{exp}	T	ΔE_{Lang}	$\Delta E_{Lang, W}$	ΔE_{Diag}
0.1	100	310	1.07 ± 0.03	1.07 ± 0.03	1.0837
1	100	410	0.72 ± 0.05	0.72 ± 0.06	0.7250

Tabella: Risultati per la "doppia buca".

$$g = 0.01, N_{exp} = 500$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

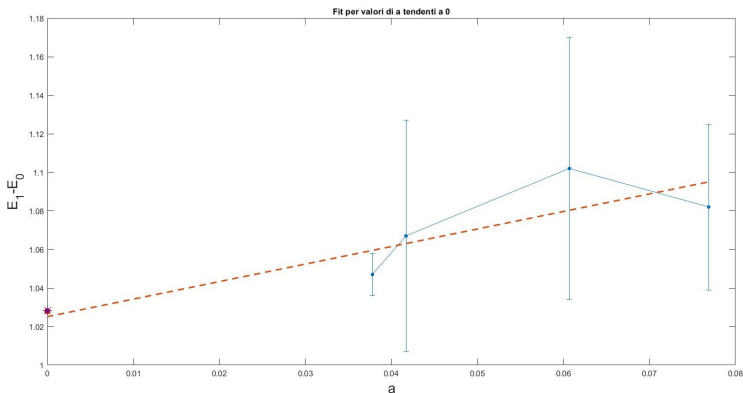
Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione
Aspetti importanti di
codifica
Oscillatore
anarmonico
Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$$\Delta E = 1.025 \pm 0.014, \text{ valore esatto: } 1.028$$

Un'altra possibilità...

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Si può seguire un approccio piú raffinato alla stima di $x^*(t + \tau)$, sostituendo l'algoritmo di Eulero con un'espansione di Itô-Taylor di ordine 1.5:

$$x_{n+1} = x_n + b \Delta + D \Delta W + b' D \Delta Z + \frac{1}{2} \left(bb' + \frac{1}{2} D^2 b'' \right) \Delta^2$$

dove

$$\Delta = d\tau$$

$$\Delta W = U_1 \sqrt{\Delta}$$

$$\Delta Z = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\Delta^2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{3}} U_2 \right)$$

e U_1, U_2 sono variabili aleatorie distribuite gaussianamente e normalizzate.

$$g = 0.1, N_{exp} = 100, \tau = 10/2^{16}$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

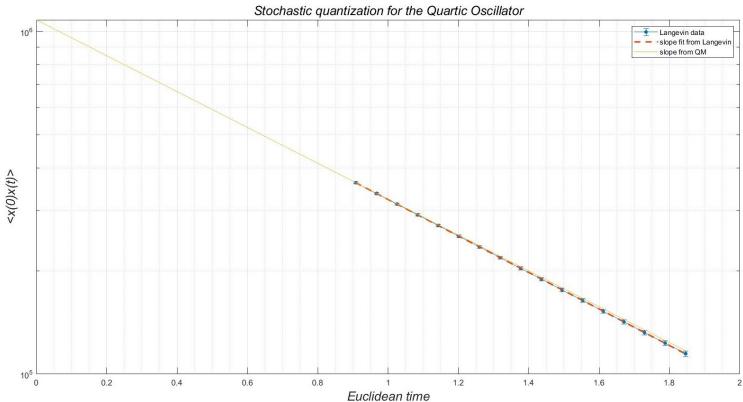
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



Risultato del fitting: $\Delta E = 1.241 \pm 0.014$, valore esatto: 1.2104

$$g = 1, N_{exp} = 100, \tau = 10/2^{16}$$

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

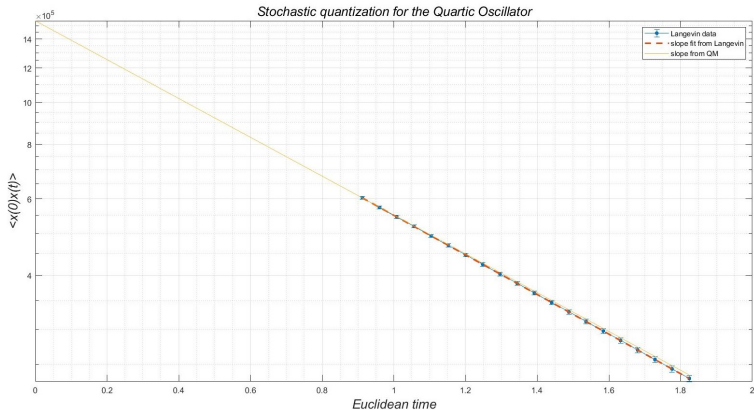
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



Risultato del fitting: $\Delta E = 1.929 \pm 0.014$, valore esatto: 1.9341

Indice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

- 1 Aspetti teorici
 - Equazione di Langevin
 - Integrali di cammino e correlazione
- 2 Simulazioni con l'equazione di Langevin
 - Metodi di approssimazione
 - Aspetti importanti di codifica
 - Oscillatore anarmonico
 - Doppia buca
 - Analisi dei risultati
- 3 Metodi perturbativi
 - Oscillatore anarmonico

Un approccio perturbativo

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin
Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione
Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico
Doppia buca
Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Possiamo applicare l'equazione di Langevin anche seguendo un approccio perturbativo: consideriamo il solito integrale euclideo

$$\int dx e^{-\beta S[x,g]}$$

dove viene messa in evidenza la dipendenza dell'azione euclidea $S[x, g]$ da un parametro g , detto *costante di accoppiamento*.

Nell'equazione di Langevin con drift $b = -S'(x, g)$,

$$dx(t) = -S'(x, g) dt + dw(t)$$

si espande la soluzione come $x(t, g) = \sum_{n=0}^{\infty} x_n(t) g^n$, ovvero in serie di potenze di g .

Oscillatore anarmonico

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Se consideriamo un potenziale

$$V(x, g) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{4}x^4 \quad \text{si ha} \quad S'(x, g) = x + gx^3$$

e l'equazione di Langevin $dx(t) = -S'(x, g)dt + dw(t)$ diventa:

$$\sum g^n dx_n(t) = \underbrace{-\sum g^n x_n(t) dt - g \left[\sum g^n x_n(t) \right]^3 dt}_{-S'(x, g) dt} + dw(t)$$

È ora possibile sviluppare il cubo e uguagliare i coefficienti della stessa potenza di g .

$$\sum g^n dx_n(t) = -\sum g^n x_n(t) dt - g \left[\sum g^n x_n(t) \right]^3 dt + dw(t)$$

$$dx_0 = -x_0 + dw(t)$$

$$dx_1 = -(x_1 + x_0^3) dt$$

$$dx_2 = -(x_2 + 3x_0^2 x_1) dt$$

$$dx_3 = -(x_3 + 3x_0x_1^2 + 3x_0^2x_2) dt$$

$$dx_4 = -(x_4 + x_1^3 + 6x_0x_1x_2 + 3x_0^2x_3) dt$$

• • • • •

Si vede che i termini a destra contengono sempre il valore x_n e un polinomio di indice $n - 1$. Poiché inoltre nell' n -esima riga non compaiono termini di ordine più elevato, un troncamento a un dato ordine non costringe ad altre approssimazioni.

Le equazioni precedenti possono essere integrate numericamente sfruttando il metodo dei trapezi. Ad esempio, $dx_1 = -(x_1 + x_0^3) dt$ diventa

$$x_1(t + \tau) - x_1(t) = -\frac{\tau}{2}[x_1(t) + x_1(t + \tau)] - \frac{\tau}{2}[x_0^3(t) + x_0^3(t + \tau)]$$

$$x_1(t + \tau) = \underbrace{\frac{1 - \tau/2}{1 + \tau/2}}_{\equiv C_1} x_1(t) - \underbrace{\frac{\tau/2}{1 + \tau/2}}_{\equiv C_2} [x_0^3(t) + x_0^3(t + \tau)]$$

dove:

- i valori a destra dell'uguaglianza sono già noti perché calcolati nell'iterazione precedente;
- le costanti moltiplicative C_1 e C_2 sono uguali in tutte le iterazioni.

Rimane da determinare $x_0(t)$, che si ricava dall'equazione iniziale $dx_0 = -x_0 + dw(t)$: questa è risolubile analiticamente.

Processo di Ornstein–Uhlenbeck, parte 1

La soluzione dell'equazione omogenea associata è $\bar{x}_0(t) = Ce^{-t}$, e variando le costanti $x(t) = C(t)e^{-t}$ si trova

$$C'(t)e^{-t} dt - x(t) dt = -x(t) dt + dw(t)$$

da cui, integrando e ponendo $C(0) = 0$,

$$C(t) = \int_0^t e^{t'} dw(t') \quad \longrightarrow \quad x(t) = Ce^{-t} + \int_0^t e^{t'-t} dw(t').$$

Qui $C = x(0)$, e possiamo supporre senza perdita di generalità che $x(0) = 0$ fissando gli assi cartesiani nell'origine del processo diffusivo.

In questo modo si ha

$$\mathbb{E}[x(t)] = \int_0^t e^{t'-t} \mathbb{E}[dw(t')] = 0$$

$$\begin{aligned}\mathbb{D}[x(t)] &= \mathbb{E}[x^2(t)] - \mathbb{E}[x(t)]^2 = \int_0^t e^{t'-t} \int_0^t e^{t''-t} \underbrace{\mathbb{E}[dw(t') dw(t'')]}_{=\delta(t'-t'') dt'} \\ &= \int_0^t e^{2(t'-t)} dt' = \frac{1 - e^{-2t}}{2}\end{aligned}$$

ovvero la variabile aleatoria $x(t)$ segue una distribuzione gaussiana con media nulla e varianza $\mathbb{D}[x]$, come una particella browniana legata all'origine da un potenziale armonico (caso non perturbato).

Una volta determinati i termini necessari, quindi, è possibile stimare un'osservabile come $\langle x^2 \rangle$ calcolando

$$\langle x^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_{n=0}^{\infty} g^n x_n \right)^2 \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} g^n \sum_{k=0}^n \langle x_k x_{n-k} \rangle$$

e i coefficienti trovati per lo sviluppo di $\langle x^2 \rangle$ possono essere confrontati con quelli esatti:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle = & 1 - 3g + 24g^2 - 297g^3 + 4896g^4 - 100278g^5 \\ & + 2450304g^6 - 69533397g^7 + 2247492096g^8 \\ & - 81528066378g^9 + \dots \end{aligned}$$

Codice

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

I parametri più significativi da regolare sono:

- il tempo di evoluzione T del processo Langevin;
- il numero di volte (`ticks`) che la misura viene eseguita;
- il numero di traiettorie (`paths`);
- la distanza (`skip`) tra misure differenti.

Vengono inizializzati i vettori x_n con zeri o numeri casuali, quindi si introducono, con $\tau = T/\text{ticks}$,

```
C = exp(-tau);  
C1 = (1-tau/2)/(1+tau/2);  
C2 = tau/(2+tau);  
DX = sqrt((1-exp(-2*tau)));
```

e dopo i cicli di termalizzazione si fanno evolvere gli x_n come visto prima, tenendo in memoria i valori ogni `skip`.

Terminata l'evoluzione Langevin, si effettua la stima dell'osservabile $\langle x^2 \rangle$ determinando manualmente i contributi ai vari ordini, e calcolando per ciascuno media e deviazione standard sui diversi paths. Ad esempio, per i primi quattro ordini:

$$O1 = 2*x0.*x1;$$

$$O2 = 2*x0.*x2 + x1.^2;$$

$$O3 = 2*x0.*x3 + 2*x1.*x2;$$

$$O4 = 2*x0.*x4 + 2*x1.*x3 + x2.^2;$$

Indicando il numero di campioni come

$$N_{\text{smp}} = \text{ticks/skip} * \text{paths}$$

l'errore è stimato da $1/\sqrt{N_{\text{smp}}}$.

$T = 10^3$, steps = 10^4 , paths = 10^4 , skips = 50 (≈ 30 s).

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

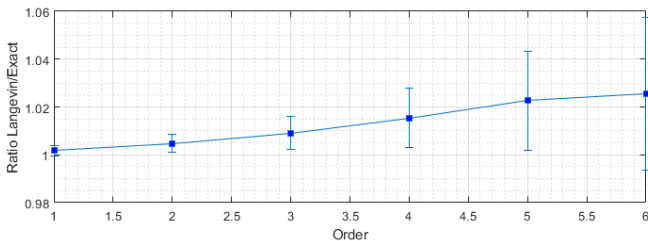
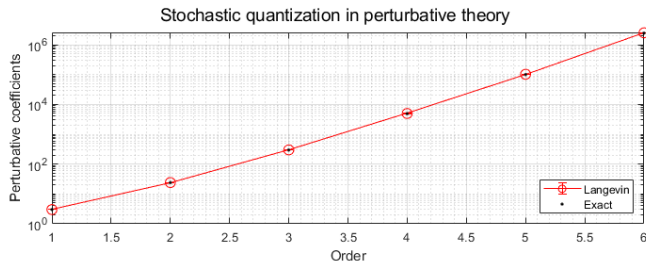
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



$T = 5 \cdot 10^3$, steps = $5 \cdot 10^4$, paths = $2 \cdot 10^4$, skips = 50 (≈ 14 min).

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

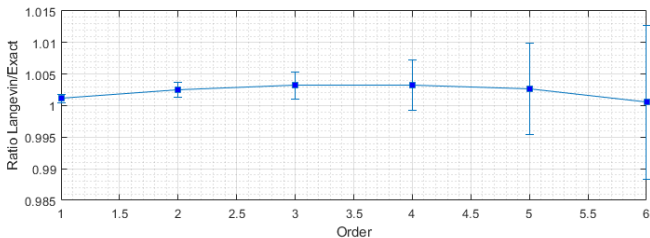
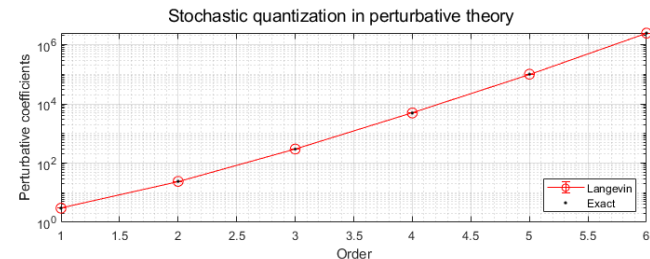
Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico



Un'altra misura

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

È anche possibile misurare

$$\langle x^4 \rangle = \left\langle \left(\sum_{n=0}^{\infty} g^n x_n \right)^4 \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} g^n \sum_{i: \sum k_i = n} \langle x_{k_1} x_{k_2} x_{k_3} x_{k_4} \rangle$$

per verificare che $\langle x^2 \rangle = 1 - g \langle x^4 \rangle$.

$$\begin{aligned} \int \left(x \frac{d}{dx} \right) e^{-S[x,g]} dx &= - \int (x^2 + gx^4) e^{-S[x,g]} dx \\ &= \left[x e^{-S[x,g]} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int e^{-S[x,g]} dx = -Z[g] \end{aligned}$$

$$\frac{\int (x^2 + gx^4) e^{-S[x,g]} dx}{\int e^{-S[x,g]} dx} = \langle x^2 \rangle + g \langle x^4 \rangle = 1.$$

$T = 5 \cdot 10^3$, steps = $5 \cdot 10^4$, paths = $2 \cdot 10^4$, skips = 50 (≈ 33 min).

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

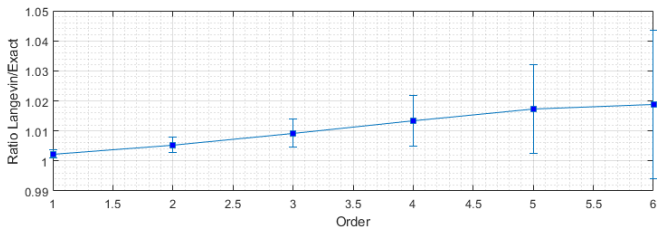
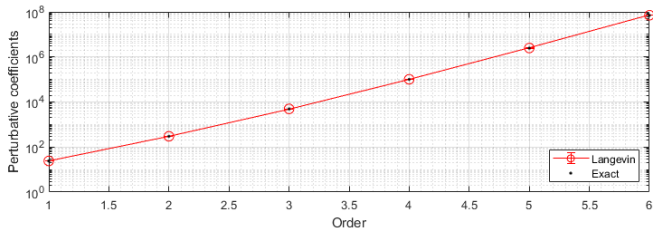
Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

Stochastic quantization in perturbative theory



Commento

Applicazioni
dell'equazione di
Langevin in
meccanica
quantistica
unidimensionale

Elio Farinella,
Fabio Ori,
Daniele
Scalabrini

Aspetti teorici

Equazione di
Langevin

Integrali di cammino
e correlazione

Simulazioni con
l'equazione di
Langevin

Metodi di
approssimazione

Aspetti importanti di
codifica

Oscillatore
anarmonico

Doppia buca

Analisi dei risultati

Metodi
perturbativi

Oscillatore
anarmonico

- 1 Come è evidente dall'andamento del rapporto tra i coefficienti ottenuti dalla simulazione e quelli esatti, raffinando il processo di calcolo è possibile passare da una precisione del 5 % a una dello 0.5 %, ma l'elaborazione è circa 30 volte più costosa. Il calcolo di $\langle x^4 \rangle$, come si poteva immaginare, è più oneroso.
- 2 Questo algoritmo è chiaramente di scarsa utilità in un contesto come quello dell'oscillatore anarmonico, ma può essere implementato anche per contesti in cui non è nota una soluzione analitica per i coefficienti perturbativi.
- 3 Occorre tuttavia saper risolvere, in maniera esatta o approssimata, la prima equazione stocastica: ad esempio, nel caso del potenziale “doppia buca” questo non è ugualmente semplice...