

L'equazione di Langevin e la sua applicazione al calcolo del primo gap energetico per l'equazione di Schrödinger

Leonardo Celada e Francesco Zanni
Corso di Laurea in Fisica di I livello
Università di Parma

14.01.2021

Introduzione all'equazione di Langevin

L'equazione di Langevin è un'equazione differenziale stocastica usata per descrivere il moto di una particella soggetta a perturbazioni casuali che costituisce un processo di Markov:

$$dx(\tau) = b(x(\tau), \tau)d\tau + \sqrt{\sigma}dw(\tau)$$

L'equazione di Langevin, a tempi grandi, raggiunge una situazione di equilibrio caratterizzata da una certa distribuzione di probabilità. Per poter essere applicata, è quindi necessario trovare un drift e un coefficiente di diffusione che rendano la condizione di equilibrio più vicina possibile ad una distribuzione preassegnata, che solitamente è la distribuzione di Gibbs.

$$b = -\nabla S(x)$$

$$\sigma = \frac{2}{\beta} = 2kT$$

Stima del primo gap energetico

La tecnica dell'equazione di Langevin si applica a sistemi con gradi di libertà continui. Partendo dal caso di un sistema con un solo grado di libertà continuo, si considera l'azione classica:

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} L(x, \dot{x}) dt = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(m \frac{\dot{x}^2}{2} + V(x) \right)$$

Questo integrale di cammino è detto *euclideo* perchè è a tempo immaginario. L'azione classica entra nella formulazione di Feynman della meccanica quantistica attraverso i *Path Integrals*:

$$G(x_i, x_f, t) = \langle x_i | e^{-H \frac{(t_f - t_i)}{\hbar}} | x_f \rangle = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} Dx(t) e^{-\frac{S[x]}{\hbar}}$$

Per poter simulare con successo su un computer il nostro *Path Integral* bisogna discretizzare l'asse temporale in N intervalli di uguale lunghezza a :

$$a = \frac{t}{N}$$

In questo modo possiamo così discretizzare la nostra azione andando a considerare:

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} L(x, \dot{x}) dt \simeq a \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2 + \frac{1}{2} (V(x_{i+1}) + V(x_i)) \right)$$

Da cui si ricava:

$$S[x] \simeq \sum_{i=0}^{N-1} \left(\left(\frac{m}{2a} (x_{i+1} - x_i)^2 \right) + aV(x_i) \right)$$

Introduciamo la funzione di correlazione:

$$f(t) = \frac{\langle \psi | e^{-t_1 H} q e^{-t H} q e^{-t_2 H} | \psi \rangle}{\langle \psi | e^{-(t_1+t+t_2)H} | \psi \rangle}$$

Dove mantenendo t fissato e mandando invece t_1 e t_2 all'infinito in modo che:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-tH} | \psi \rangle = e^{-tE_0} | E_0 \rangle$$

Da cui si ottiene:

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{\langle E_0 | q e^{-tH} q | E_0 \rangle}{\langle E_0 | e^{-tE_0} | E_0 \rangle} \\ &= \sum_{n=0} | \langle E_0 | q | E_n \rangle |^2 e^{-t(E_n - E_0)} \end{aligned}$$

Nel caso particolare di potenziali $V(q)$ simmetrici.

$$f(t) = \sum_{n=1} | \langle E_0 | q | E_n \rangle |^2 e^{-t(E_n - E_0)}$$

Si nota che per tempi grandi la formula è dominata dal primo termine, di conseguenza la funzione di correlazione è ben approssimata da

$$f(t) \approx e^{-t(E_1 - E_0)} | \langle E_0 | q | E_1 \rangle |^2$$

che permette di ricavare il primo gap di energia:

$$\delta E(t) = \frac{1}{a} \ln \left(\frac{f(t)}{f(t+a)} \right)$$

Per esprimere la correlazione come Path Integral si parte riscrivendo il propagatore:

$$\langle \psi | e^{-tH} | \psi \rangle = \langle \psi | (e^{-\frac{tH}{N}})^N | \psi \rangle = \langle \psi | (e^{-\frac{t}{N}(\frac{p^2}{2m} + V(q))})^N | \psi \rangle$$

Al quale si applica la formula di Lie-Trotter:

$$\langle \psi | (e^{-\frac{t}{N}(\frac{p^2}{2m} + V(q))})^N | \psi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \psi | (e^{(-\frac{t}{N} \frac{p^2}{2m})} e^{-\frac{t}{N} V(q)})^N | \psi \rangle$$

A questo punto andando ad inserire *completezze* $\int dx |x\rangle\langle x|$ si ottiene:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \psi | \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_N |x_1\rangle\langle x_1| e^{(-\frac{t}{N} \frac{p^2}{2m})} e^{-\frac{t}{N}(V(q))} |x_2\rangle\langle x_2| \dots |x_{n-1}\rangle\langle x_{n-1}| e^{(-\frac{t}{N} \frac{p^2}{2m})} e^{-\frac{t}{N}(V(q))} |x_N\rangle\langle x_N| \psi \rangle$$

Ora gli operatori esponenziali si possono rappresentare con i rispettivi elementi di matrice:

$$e^{-\frac{t}{N}(V(q))} |x\rangle = e^{-\frac{t}{N}(V(x))} |x\rangle$$

$$e^{-\frac{t}{N} \frac{p^2}{2m}} |x\rangle = n \int dx' |x'\rangle e^{-m \frac{(x-x')^2}{2\frac{t}{N}}}$$

Adesso andando a sostituire le due formule appena viste nella relazione dove sono state inserite le completezza si ottiene:

$$\langle \psi | e^{-tH} | \psi \rangle \simeq n \prod_{i=0}^N \int dx_i e^{\left(-m \frac{(x-x')^2}{2a} - aV(x) \right)}$$

Da cui si vede che all'esponenziale c'è esattamente l'azione discretizzata, dunque si ricava:

$$\langle \psi | e^{-tH} | \psi \rangle \simeq n \prod_{i=0}^N \int dx_i e^{-S[x_i, a]}$$

La formula precedente è scrivibile proprio come Path Integral, senza la costante di normalizzazione:

$$Z = \int Dx e^{-S(x)}$$

A questo punto si può esprimere la correlazione in termini di Path Integral:

$$f(t) = \langle x(t_1)x(t_2) \rangle = \frac{\int Dx(t)x(t_1)x(t_2)e^{-S(x)}}{\int Dx(t)e^{-S(x)}}$$

Implementazione

A questo punto vediamo come la formula per la correlazione è trasformata in una media sulla distribuzione di Gibbs e si può studiare con una tecnica MonteCarlo, in questo caso quella di Langevin-Parisi-Wu. Si parte dal calcolo del drift:

$$b_i = -\frac{\partial}{\partial x_i} S[x_i] = a \left(\frac{1}{a^2} (x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) - V'(x_i) \right)$$

Sostituendo il drift nell'equazione di Langevin e riscalandolo il tempo di Langevin τ di un fattore $1/a$, si ottiene:

$$dx(\tau) = \left(\frac{1}{a^2}(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) - V'(x_i) \right) d\tau + \sqrt{\frac{2d\tau}{a}} dw(\tau)$$

Si parte ora da una traiettoria arbitraria $x_i(0) = 0$ e dopo un periodo di termalizzazione la traiettoria fluttuerà in equilibrio rispetto alla distribuzione di Gibbs.

Integrando l'equazione stocastica si ottiene:

$$x(\tau + \tau') - x(\tau) = \int_{\tau}^{\tau + \tau'} b(x(t')) dt' + \sqrt{\sigma}(w(\tau + \tau') - w(\tau))$$

Utilizzando il metodo dei trapezi possiamo stimare l'area elementare come:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

Integrando l'equazione di Langevin e sostituendo l'integrale del drift si ottiene:

$$x(\tau + \tau') = x(\tau) + \frac{1}{2}(b(x(\tau)) + b(x(\tau + \tau')))\tau + \sqrt{\sigma}(w(\tau + \tau') - w(\tau))$$

Dove $b(x(\tau + \tau'))$ è calcolata attraverso l'algoritmo di Eulero. Questo algoritmo scala come $O(\tau^2)$.

Studiamo l'integrale di $f(x)$ nell'intervallo $[x_{i-1}; x_{i+1}]$ ed espandiamo l'integranda attorno al punto x_i , ottenendo:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx = h \left(\frac{1}{3} f_{i-1} + \frac{4}{3} f_i + \frac{1}{3} f_{i+1} \right) + O(h^5)$$

Nel nostro caso dopo aver integrato l'equazione di Langevin abbiamo sostituito all'integrale del drift il seguente per poter poi usare la regola di Simpson:

$$\int_{\tau}^{\tau+\tau'} b(x(t')) dt' \rightarrow \int_{\tau-\tau'}^{\tau+\tau'} b(x(t')) dt'$$

In questo modo sull'intero percorso di integrazione avremo che tutti gli integrali saranno contati due volte eccetto il primo e l'ultimo, ma per un numero di intervallini molto grande e quindi per τ molto piccolo avremo che i contributi del primo e dell'ultimo integrale saranno trascurabili ed allora basterà dividere il risultato ottenuto per 2 per ottenere il valore voluto:

$$x(\tau+\tau') = x(\tau) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{3} b(x(\tau-\tau')) + \frac{4}{3} b(x(\tau)) + \frac{1}{3} b(x(\tau+\tau')) \right) \tau + \sqrt{\sigma} (w(\tau+\tau') - w(\tau))$$

Anche in questo caso l'algoritmo scala come $O(\tau^2)$.

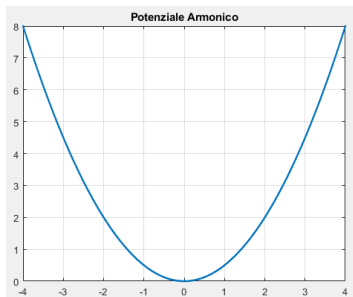
La parte centrale dello script (esempio con il potenziale anarmonico):

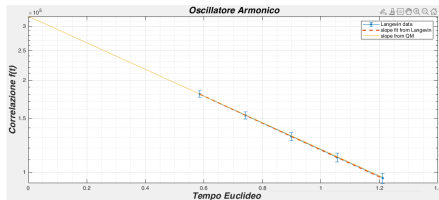
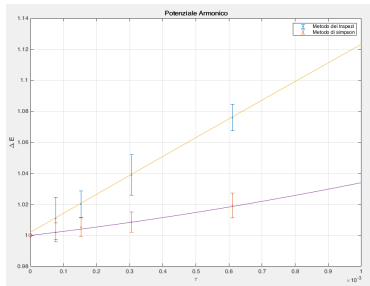
[illegible]

Potenziali analizzati e risultati

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2$$

Questo potenziale si può usare come banco di prova per valutare l'efficacia del metodo in quanto si conosce la soluzione esatta del gap energetico.



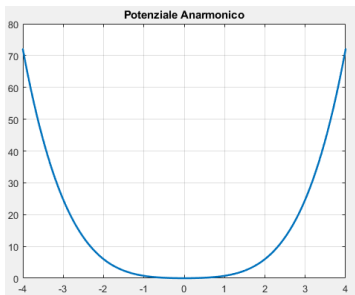


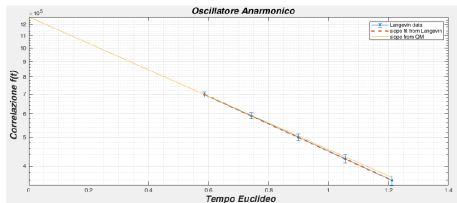
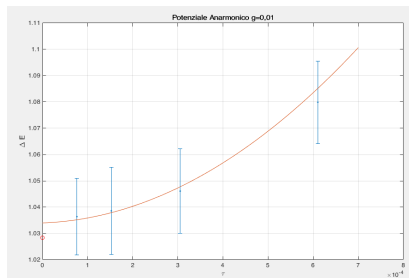
Valore ottenuto con i trapezi: $E_1 - E_0 = 1,002 \pm 0,003$

Valore ottenuto con Simpson: $E_1 - E_0 = 1,000 \pm 0,002$

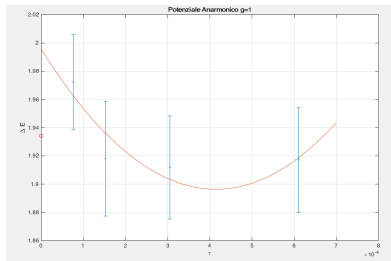
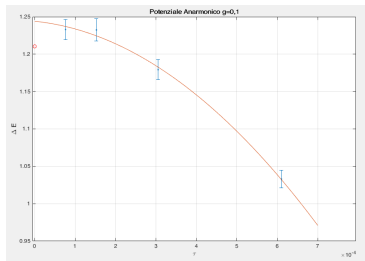
$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2 + gx^4$$

Dove si pone: $m = \hbar = \omega = 1$ e g è chiamata "costante di accoppiamento".





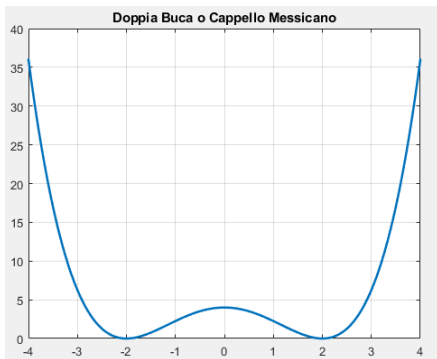
Valore ottenuto con i trapezi: $E_1 - E_0 = 1,034 \pm 0,007$

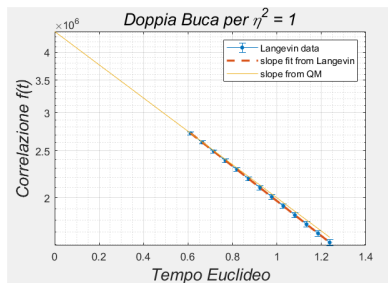
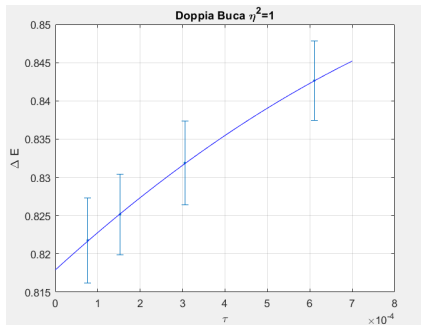


Valore ottenuto per $g = 0.1$: $E_1 - E_0 = 1,244 \pm 0,1$

Valore ottenuto per $g = 1$: $E_1 - E_0 = 1,996 \pm 0,2$

$$V(x) = \lambda(x^2 - \eta^2)^2$$





Valore ottenuto con i trapezi: $E_1 - E_0 = 0,818 \pm 0,014$

Osservazioni e conclusioni

Gli errori che caratterizzano questo approccio sono:

- ▶ Errori sistematici: dimensione finita di a e di τ
- ▶ Errori statistici: dovuti al numero finito di esperimenti simulati

Siccome le traiettorie sono in generale correlate, la deviazione standard è una sottostima dell'errore:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N X_i^2 - \langle X \rangle^2$$

Si calcola la correlazione, e di conseguenza l'errore, su una traiettoria ogni *skips*:

$$\sigma_{cor}^2 = \frac{1}{N_{skips}^2} \sum_{i=1}^{N_{skips}} X_i^2 - \langle X \rangle^2 \qquad N_{skips} = \frac{N}{skips}$$

	$\Delta E_{teorico}$	$\Delta E_{langevin}$
Potenziale Armonico - Metodo dei Trapezi	1.0000	1.002 ± 0.003
Potenziale Armonico - Regola di Simpson	1.0000	1.000 ± 0.002
Potenziale Anarmonico $g = 0.01$	1.0284	1.034 ± 0.007
Potenziale Anarmonico $g = 0.1$	1.2104	1.244 ± 0.100
Potenziale Anarmonico $g = 1$	1.9341	1.996 ± 0.200
Doppia Buca $\eta = 1$	0.7918	0.818 ± 0.014

- ▶ La regola di Simpson non è sufficientemente migliore rispetto al metodo dei trapezi per giustificare la pesantezza di calcolo
- ▶ La precisione dei risultati decresce velocemente al crescere della costante di accoppiamento
- ▶ La precisione dei risultati decresce velocemente al crescere del parametro η

- ▶ Il tempo di calcolo gioca un ruolo fondamentale nella ricerca di risultati soddisfacenti
- ▶ L'estrapolazione in $\tau = 0$ dovrebbe essere accompagnata da un'ulteriore estrapolazione anche in $a = 0$
- ▶ Rendere a troppo piccolo può introdurre discontinuità nella derivata seconda e di conseguenza generare casi di *overflow* nel drift, generando dei NaN

- [1] **G. Parisi, Wu Yongshi**, *Perturbative theory without gauge fixing*, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare
- [2] **N. Macellari, G. Meneghelli**, *Path Integral Monte carlo applicati a problemi di MQ*, Dipartimento di Fisica, Università di Parma
- [3] **M. Dall'Arno**, *Implementazione efficiente del metodo Path Integrals Monte Carlo per la valutazione del primo gap energetico di potenziali quantistici*, Dipartimento di Fisica, Università di Parma
- [4] **L. Caniparoli**, *Path Integrals e dinamica Langevin*, Dipartimento di Fisica, Università di Parma.
- [5] **M. Hjorth-Jensen, M.P. Lombardo, U. van Kolck**, *An Advanced Course in Computational Nuclear Physics*, Springer.
- [6] **B.A. Stickler, E. Schachinger**, *Basic concepts in Computational Physics*, Springer.

Fine
