Численный расчет функциональных интегралов

Выполнил - Иванов А. С.

Научный руководитель - Белокуров В. В.

Москва, 2014

Рассмотрим квантовую систему, имеющую гамильтониан H

$$|\psi(t=0)\rangle.$$

Эволюция

$$|\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi(0)\rangle,$$

где

$$U(t,0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H d\tau\right],$$

причем

$$U(0,0) = 1.$$

Если гамильтониан квадратичен по импульсу, то

$$\langle q'|U(t',t'')|q''\rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} [dq(t)] e^{\frac{i}{\hbar}S(t',t'')},$$

где

$$S(t',t'') = \int_{t'}^{t''} L d\tau.$$

L – лагранжин системы.

$$\langle A(q)\rangle = \frac{\int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''}[dq(t)]A(q)exp\left(-\frac{S[q]}{\hbar}\right)}{\int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''}[dq(t)]exp\left(-\frac{S[q]}{\hbar}\right)},$$

где

$$S[q] = \int_{t'}^{t''} H(q(s), s)ds - \textit{действие в мнимом времени.}$$

$$H(q(s), s) = \frac{m\dot{q}^2(s)}{2} + V(q(s), s) - \textit{евклидов гамильтониан.}$$

$$\langle q''|U(t'', t')|q'\rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''}[dq(t)]e^{-S(q)/\hbar}$$

- матричный элемент оператора эволюции, подчиняющийся уравнению Шредингера в мнимом времени

$$-\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle q'|U(t', t'')|q''\rangle = H(t)\langle q'|U(t', t'')|q''\rangle$$

$$\langle A(q)\rangle = \frac{\langle q'|A(q)e^{-\beta H(p,q)}|q''\rangle}{\langle q'|e^{-\beta H(p,q)}|q''\rangle}$$

где

$$H(p,q) - \textit{гамильтониан в евклидовом времени},$$

$$A(q) - \textit{усредняемый оператор},$$

$$\beta = 1/\theta - \textit{обратная температура}.$$

$|q'\rangle$, $|q''\rangle$ - базис в координатном пространстве.

$$Z = \langle q'|e^{-\beta H(p,q)}|q''\rangle - \textit{статистическая сумма системы}.$$

Если $H(t) = H$ - не зависит от времени, то решение для матричного элемента оператора эволюции имеет вид

$$\langle q'|U(t',t'')|q''\rangle \sim e^{-(t'-t'')H/\hbar} = e^{-\beta H}$$

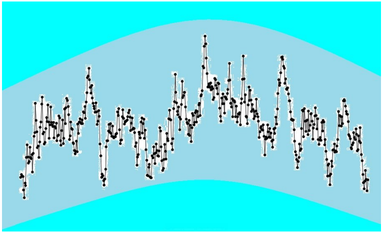
Необходимо вычислять

$$\langle A(q)\rangle = \frac{\int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''}[dq(t)]A(q)exp\left(-\frac{S[q]}{\hbar}\right)}{\int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''}[dq(t)]exp\left(-\frac{S[q]}{\hbar}\right)},$$

где

$$S[q] = \int_{t'}^{t''} H(q(s),s)ds - \textit{действие в мнимом времени.}$$

Метод существенной выборки



Создание траекторий с весом

$$P[\mathbf{q}(t)] = \frac{e^{-S[\mathbf{q}(t)]/\hbar}}{\int [dq(t)] e^{-S[\mathbf{q}(t)]/\hbar}}.$$

Марковская цепь
Дискретизация

$$\begin{cases} \tau = (t'' - t')/N_t, \\ t_k = t' + k\tau, \; 0 \le k \le N, \\ q_k = q(t_k). \end{cases}$$

Генерация траекторий за счет изменения в одном узле.

- Метод тепловой бани

$$W(q_k, q'_k) \sim e^{-\Delta S(q'_k)}$$

- Метод Метрополиса Функция перехода в марковской цепи

$$W(q, q') = T(q, q')A(q, q') - \delta(q - q')\Big(1 - \int dq'' A(q, q'')T(q, q'')\Big)$$

где

$$T(q, q') - \textit{вспомогательная вероятность пробного перехода},$$

$$A(q, q') - \textit{вероятность принять пробный переход.}$$

Дополнительное ставится условие детального баланса.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2.$$

Теорема вириала

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}.$$

Наблюдаемые

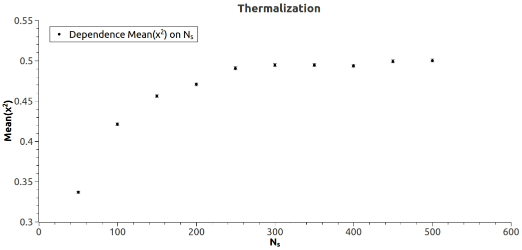
$$\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle T \rangle = \langle \frac{\hbar}{2\tau} - \frac{m(v_k - v_{k-1})^2}{2\tau^2} \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}$$

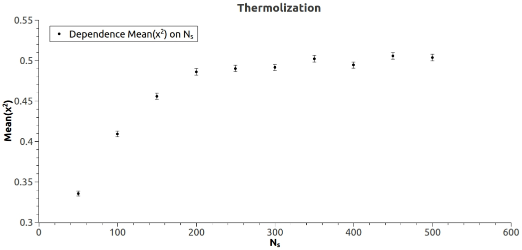
$$|\psi_0(q)|^2 \Delta q = \frac{1}{N_p N_t} \sum_i \theta(\Delta q - |q_i - q|) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}}.$$

Далее, для гармонического осциллятора $\hbar = 1, m = 1$.

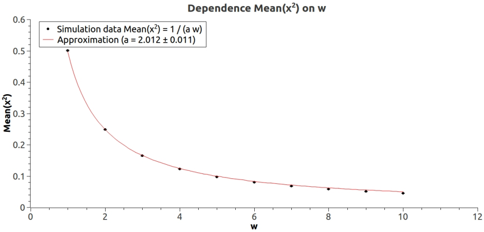
Метод тепловой бани



Метод Метрополиса

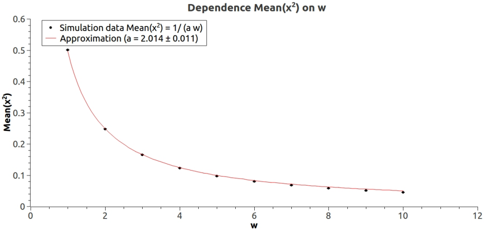


Метод тепловой бани



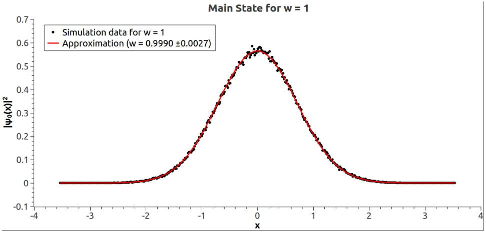
$$a = 2.012 \pm 0.011.$$

Метод Метрополиса



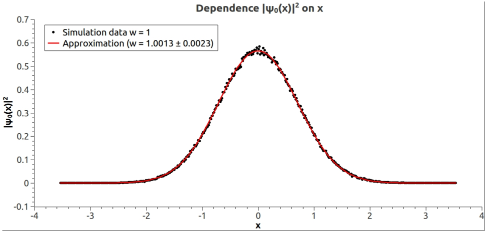
$$a = 2.014 \pm 0.011.$$

Метод тепловой бани



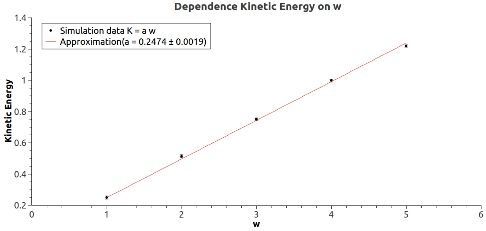
$$\omega = 0.9990 \pm 0.0027.$$

Метод Метрополиса



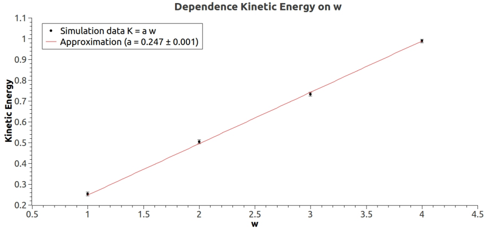
$$\omega = 1.0013 \pm 0.0023.$$

Метод тепловой бани



$$a = 0.2474 \pm 0.0019.$$

Метод Метрополиса



$$a = 0.247 \pm 0.001.$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 + \lambda q^4.$$

Далее считаем

$$\hbar = 1, m = 1, \omega = 1.$$

Два предельных случая

- Предел малых λ

$$\lambda \ll 1;$$

$$E_0 = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\lambda + \dots .$$

- Предел больших λ

$$\lambda \gg 1;$$

$$E_0 = \lambda^{1/3}(0.668 + 0.144\lambda^{-2/3} + \dots).$$

Результаты численного расчета

- Предел малых λ

$$E_0 = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\lambda + \dots$$

$$0.5 : 0.4973 \pm 0.0016$$

$$0.75 : 0.59 \pm 0.17$$

- Предел больших λ

$$E_0 = \lambda^{1/3}(0.668 + 0.144\lambda^{-2/3} + \dots)$$

$$0.668 : 0.638 \pm 0.007$$

$$0.144 : 0.195 \pm 0.028$$

$$H = \sqrt{p^2 + m^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2.$$

Выражение для статсуммы

$$Z = \langle q' | e^{-\beta H} | q'' \rangle$$

можно записать в виде

$$Z = \int dq_1 \dots dq_{N_t - 1} \langle q' | e^{-\tau H} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-\tau H} | q_2 \rangle \dots \langle q_{N_t - 1} | e^{-\tau H} | q'' \rangle$$

где

$$\beta = \tau N_t.$$

$$\langle q_i | e^{-\tau H} | q_{i+1} \rangle \approx \int dq \langle q_i | e^{-\tau T} | q \rangle \langle q | e^{-\tau V} | q_{i+1} \rangle =$$

$$= \int dq dp \langle q_i | e^{-\tau T} | p \rangle \langle p | q \rangle \langle q | e^{-\tau V} | q_{i+1} \rangle$$

Необходимо вычислять интеграл

$$\rho = \int \frac{dp}{2\pi} e^{-T(p)\tau - ip(q_{i+1} - q_i)}$$

В d - мерном случае (d = 1, 2, 3)

$$\rho = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{-T(\mathbf{p})\tau - i\mathbf{p}(\mathbf{q_{i+1}} - \mathbf{q_i})}$$

$$\rho = \left(\frac{m\tau}{\pi\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q_{i+1}} - \mathbf{q_i})^2}}\right)^{(d+1)/2} \frac{K_{(d+1)/2}(m\sqrt{\tau^2 + (\mathbf{q_{i+1}} - \mathbf{q_i})^2})}{(2\tau)^{(d-1)/2}}.$$

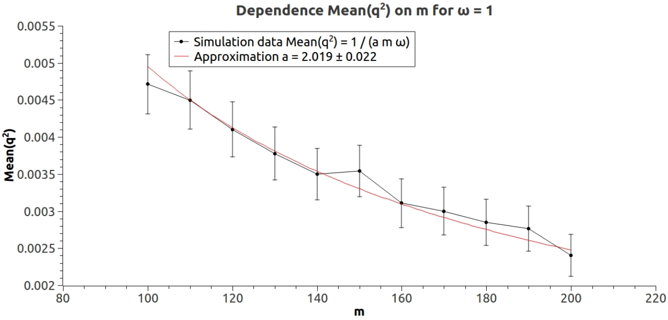
Нерелятивистский предел

$$m \gg \omega$$

$$\rho = \rightarrow \left(\frac{1}{2\pi\tau/m}\right)^{d/2} e^{-\frac{m(\mathbf{q_{i+1}} - \mathbf{q_i})^2}{2\tau^2}\tau - m\tau}$$

$$m \gg \omega$$

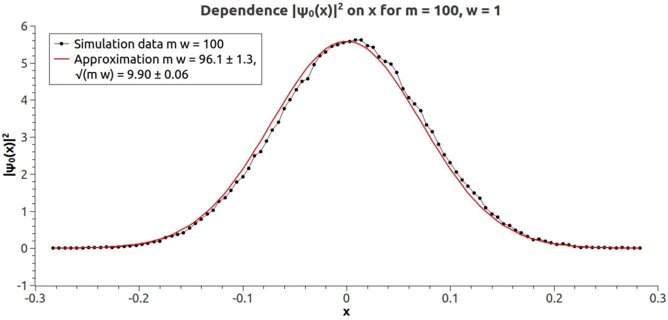
$$\langle q^2 \rangle \to \frac{1}{2m\omega}$$



$$2 : 2.019 \pm 0.022$$

$$m = 100 \gg \omega = 1,$$

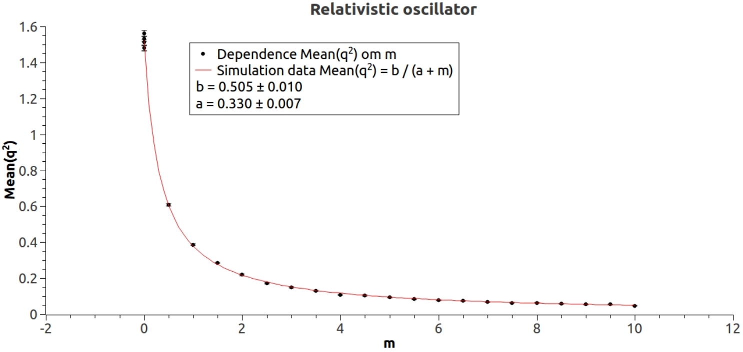
$$|\psi_0(q)|^2 \Delta q \to \frac{1}{N_p N_t} \sum_i \theta(\Delta q - |q_i - q|) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}}.$$



$$100 : 96.1 \pm 1.3$$

$$10 : 9.90 \pm 0.06$$

$$\hbar = 1, \omega = 1.$$



$$\langle q^2 \rangle \approx \frac{1}{2m + 2/3}$$