

2.6 Kontinuums Formalismus

Bislang haben wir in allen Rechnungen explizit in der diskretisierten Formulierung (mit endlichem N) gearbeitet, und am Ende den Kontinuums-Limes $N \rightarrow \infty$, $\varepsilon \rightarrow 0$ betrachtet.

Unter der Voraussetzung, daß dieser Limes existiert, läßt sich natürlich auch direkt ein Formalismus benutzen, der direkt im Kontinuum arbeitet.

Betrachten wir zunächst die Normierung des Pfadintegrals:

$$G(x, T; y, 0) = \int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (2.102a)$$

mit

$$\mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N \int dx_n \quad (2.102b)$$

Einen Kontinuumsformalismus erhält man hierfür, wenn man eine "absolute" Normierung aufgibt und stattdessen das Pfadintegral "relativ" zu einem bekannten Fall normiert.

Angenommen, wir verfügen über ein Maß $\tilde{\mathcal{D}}_x$ mit unbekannter Normierung $\mathcal{N}$, also

$$G(x, T; y, 0) = \mathcal{N} \int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \tilde{\mathcal{D}}_x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (2.103)$$

Da die Normierung unabhängig von möglichen Wechselwirkungen ist, können wir $\mathcal{N}$ z.B. mit Hilfe des freien Teilchens bestimmen, also

$$G_{\text{Freies Teilchen}}(x, T; y, 0) = \mathcal{N} \int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \tilde{\mathcal{D}}_x e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{FT}}[x]} \quad (2.21)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{+\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{T}} \equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{FT}}[x_0]}$$

x_0 : klass. Pfad
des Fr. Teilchen
= gerade Linie

$$\Rightarrow \mathcal{N} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{FT}}[x_0]} \left\{ \int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \tilde{\mathcal{D}}_x e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{FT}}[x]} \right\}^{-1} \quad (2.104)$$

D.h. der Propagator eines Systems mit Wirkung

$$S = S_{\text{FT}} + S_{\text{int}} \quad (2.105)$$

$\uparrow$ freies Teilchen $\int dt \frac{m}{2} \dot{x}^2$
 $\uparrow$ "interaction"

läßt sich schreiben als

$$G(x, T; y, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}[x_0]} \frac{\int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \tilde{\mathcal{D}}x e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{int}}}{\int_{x(0)=y}^{x(T)=x} \tilde{\mathcal{D}}x e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}} \quad (2.106)$$

$$\equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}[x_0]} \left\langle e^{\frac{i}{\hbar} S_{int}} \right\rangle_{FT},$$

wobei wir in Analogie zur statistischen Mechanik den Erwartungswert einer Observablen $\mathcal{O}$ bezüglich des "Ensembles" von allen Pfaden $y \rightarrow x$, die mit $e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}$ gewichtet sind, eingeführt haben:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{FT} = \frac{\int \tilde{\mathcal{D}}x \mathcal{O}[x] e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}}{\int \tilde{\mathcal{D}}x e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}} \quad (2.107)$$

(NB: dies ist ein Startpunkt für numerische Realisierungen des Pfadintegrals, siehe unten).

Betrachten wir als Beispiel das Pfadintegral für quadratische Wirkungen; nach Variablentransformation $y(t) = x(t) - x_0(t)$ erhalten wir in (2.38):

$$G(x, \mathbf{T}; y, 0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_0; x, y]} \cdot \underbrace{\tilde{G}(0, \mathbf{T}, 0, 0)}_{\equiv \langle 0, \mathbf{T}; 0, 0 \rangle} \quad (2.108)$$

mit

$$\tilde{G}(\mathbf{T}) = \int_{y(0)=0}^{y(\mathbf{T})=0} \mathcal{D}y \, e^{\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \int y S^{(2)} y} \quad (2.109)$$

und

$$S^{(2)} = \underbrace{-m \frac{d^2}{dt^2}}_{\equiv S_{\text{FT}}^{(2)}} - \underbrace{c(t)}_{\equiv S_{\text{int}}^{(2)}}$$

Verwenden wir nun obigen Formalismus mit relativer Normierung bezüglich des freien Teilchens (2.106), so gilt:

$$\tilde{G}(\mathbf{T}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \mathbf{T}}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{FT}}[y_0]} \frac{\int_{y(0)=0}^{y(\mathbf{T})=0} \tilde{\mathcal{D}}y \, e^{\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \int y S^{(2)} y}}{\int_{y(0)=0}^{y(\mathbf{T})=0} \tilde{\mathcal{D}}y \, e^{\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \int y S_{\text{FT}}^{(2)} y}} \quad (2.110)$$

$= 0, \text{ da } y(0)=0, y(\mathbf{T})=0$

Hierbei ist $\tilde{\mathcal{D}}y$ (irgend-) ein geeignetes Maß im Pfadraum. Die Pfadintegrale sind vom Fresnel-Typ, so daß gilt:

$$\tilde{G}(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \cdot \left(\frac{\det \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} S^{(2)}}{\det \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} S_{FT}^{(2)}} \right)^{-1/2} \quad (2.111)$$

$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\equiv \frac{\det S^{(2)}}{\det S_{FT}^{(2)}}}$

(Was sich durch Darstellung der Pfade $y(t)$ bezüglich der Eigenbasis von $S^{(2)}$ bzw. $S_{FT}^{(2)}$ zeigen läßt, wie im diskreten Fall.)

Es ist also das Verhältnis von zwei 1-dim.

Funktionaldeterminanten auszuwerten:

$$\frac{\det \left(-m \frac{d^2}{dt^2} - c(t) \right)}{\det \left(-m \frac{d^2}{dt^2} \right)} = ?$$

Nach Gelfand-Yaglom wissen wir, daß

$$\frac{\det \left(-m \frac{d^2}{dt^2} - c(t) \right)}{\det \left(-m \frac{d^2}{dt^2} \right)} \equiv \frac{1}{T} D(T, 0), \quad (2.112)$$

Läßt sich das Determinantenverhältnis auch direkt auswerten?

Dazu müssen wir das Eigenwertproblem

$$\left(-m \frac{d^2}{dt^2} - c(t)\right) y_n(t) = \lambda_n y_n(t) \quad \text{mit } y(0) = 0 = y(T) \quad (2.113)$$

lösen, was für allgemeine $c(t)$ schwierig ist.

Beschränken wir uns auf den harmonischen Oszillator mit $c = m\omega^2 = \text{const}$, so gilt

$$\left(-m \frac{d^2}{dt^2} - m\omega^2\right) y_n(t) = \lambda_n y_n(t)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{dt^2} + \left(\omega^2 + \frac{\lambda_n}{m}\right)\right) y_n(t) = 0$$

allgemeine Lsg: $y_n(t) = \alpha \cos\left(\left(\omega^2 + \frac{\lambda_n}{m}\right)^{1/2} t\right) + \beta \sin\left(\left(\omega^2 + \frac{\lambda_n}{m}\right)^{1/2} t\right)$

$$y(0) = 0 \Rightarrow \alpha = 0$$

$$y(T) = 0 \Rightarrow \left(\omega^2 + \frac{\lambda_n}{m}\right)^{1/2} T = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow \lambda_n = m \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 \right]$$

$$\Rightarrow \frac{\det\left(-m \frac{d^2}{dt^2} - c\right)}{\det\left(m \frac{d^2}{dt^2}\right)} = \prod_{n \in \mathbb{N}} \frac{m \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 \right]}{m \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2}$$

$$= \prod_{n \in \mathbb{N}} \left[1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2 \right] = \frac{\sin \omega T}{\omega T} \quad (2.114)$$

Dies entspricht unserer bisherigen Lösung für $\frac{1}{T} D(T, 0)$,
und mit (2.111) und (2.108) folgt

$$G_{\text{HO}}^{\text{HO}}(x, T; y, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{HO}}[x_0; x, y]} \quad (2.115)$$

vgl. (2.61).

Bemerkungen:

- ein Vorteil der "relativen" Normierung des Pfadintegrals (d.h. relativ zu einem bekannten Fall, z.B. freies Teilchen) ist, daß nicht alle Vorfaktoren bei der Definition des Maßes spezifiziert werden müssen: konstante Jacobi-Determinanten von residuellen linearen Variablentransformationen kürzen sich in (2.106).
- dies wird explizit deutlich beim resultierenden Verhältnis von Determinanten im Falle quadratischer Wirkungen: Normierungs-Faktoren wie z.B. $\frac{i}{\hbar}$, m , etc. kürzen sich.
- Auch bei der expliziten diskretisierten Rechnung in Abschnitt 2.3 mit der "absoluten" Normierung handelt es sich um die Berechnung eines

Verhältnisses von Determinanten, denn wir können das zentrale Ergebnis des Gelfand-Yaglom Formalismus (2.56) schreiben als

$$\mathcal{D}(T, 0) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \varepsilon \det \tilde{M} \quad \leftarrow = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 2 \end{pmatrix} + \dots$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\frac{1}{T} \mathcal{D}(T, 0)}} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \stackrel{T=(N+1)\varepsilon}{(N+1)^{-1}} \det \tilde{M}$$

$$= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \underline{\underline{\frac{\det \tilde{M}}{\det \tilde{M}_{FT}}}} \quad (2.116)$$

$$\text{mit } \tilde{M}_{FT} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 2 \end{pmatrix} \text{ und } \det \tilde{M}_{FT} = N+1.$$

Letzteres folgt aus der Rekursionsformel (2.50)
(für $c_j = 0$)

2.7 Numerische Berechnung von Pfadintegralen

Ein Pfadintegral entspricht einem N -dimensionalen gewöhnlichen Integral mit $N \rightarrow \infty$. Hochdimensionale Numerische Integration ist mit Hilfe von Monte-Carlo-Verfahren möglich.

Beispiel: Monte-Carlo Integration von gewöhnlichen Integralen

① zu berechnen sei ein Integral der Form

$$I[f] = \int_0^1 dx f(x) \quad (2.118)$$

Numerisch läßt sich dies z.B. durch eine Riemann-Summe auswerten (für numerische Präzision nicht empfehlenswert):

$$I[f] = \lim_{N \rightarrow \infty} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N}_{\triangleq dx} f(x_n) \quad , \quad x_n = \frac{n}{N} \quad (2.119)$$

Die Riemann-Summe läßt sich auch lesen als "Erwartungswert" von f bezüglich eines "Ensembles" $\{x\}_N$ mit $\{x\}_N \equiv \{x_n \mid x_n = \frac{n}{N}, n=1, \dots, N\}$:

$$I[f] = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f(x) \rangle_{\{x\}_N} \quad (2.120)$$

In der Tat ist die Tatsache, daß die x_n im $\{x\}_N$ äquidistant verteilt sind, ohne Bedeutung für den Limes $N \rightarrow \infty$. Wichtig ist lediglich eine Gleichverteilung

da x_n im Limes $N \rightarrow \infty$, d.h. für jedes Teilintervall $V = [a, b]$ mit $0 \leq a \leq b \leq 1$ gilt:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{(\# x_n \in V)}{(\# x_n \in [0, 1])} = b - a \quad (2.121)$$

↑ d.h., Zahl aller x_n im Intervall $[0, 1]$, bzw. V

Eq. (2.120) gilt also allgemein für gleichverteilte $\{x\}_N$.

Gegeben eine endliche Zahl gleichverteilter Zufallszahlen $\{x\}_N \in [0, 1]$ (oder $[0, 1)$ (oder $(0, 1]$), so erhalten wir eine Approximation des Integrals

$$I[f] \simeq I_N[f] := \langle f(x) \rangle_{\{x\}_N} \quad (2.122)$$

Eine Fehlerabschätzung ist gegeben durch die Standardabweichung

$$\Delta I_N = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sqrt{\left[\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f^2(x_n) \right] - I_N^2} \quad (2.123)$$

(NB: Da der Fehler nur mit $\sim 1/\sqrt{N}$ verschwindet, ist MC Integration für Präzisionsrechnungen nicht sehr effizient.)

② Beispiel:

$$I[f] = \alpha \int_0^\infty dx e^{-\alpha x} f(x), \quad \alpha > 0 \quad (2.124)$$

Mit $y = e^{-\alpha x}$, $dy = -\alpha e^{-\alpha x} dx$, läßt sich ② natürlich auf ① zurückführen:

$$I[F] = \int_0^1 dy \, f(\underbrace{x(y)}_{= -\frac{1}{\alpha} \ln y}) \quad (2.125)$$

Wegen $\alpha = \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{-1} = \left(\int_0^\infty dx \, e^{-\alpha x}\right)^{-1}$ läßt sich (2.124) auch schreiben als

$$I[F] = \frac{\int_0^\infty dx \, e^{-\alpha x} f(x)}{\int_0^\infty dx \, e^{-\alpha x}} \quad (2.126)$$

(2.125) & (2.126) zeigen, daß eine MC Approximation gegeben ist durch

$$\begin{aligned} I[F] &\simeq I_N[F] = \langle f(-\tfrac{1}{\alpha} \ln y) \rangle_{\{y\}_N} \\ &\equiv \langle f(x) \rangle_{\{x | e^{-\alpha x}\}_N} \end{aligned} \quad (2.127)$$

Hierbei bedeutet $\{x | e^{-\alpha x}\}_N$ ein Ensemble mit N Elementen x , die gemäß $e^{-\alpha x}$ verteilt sind.

Eine Verteilung nach $e^{-\alpha x}$ läßt sich offensichtlich

Erzeugen aus einem gleichverteilten Ensemble $\{y\}_N$ mit

$$\{x | e^{-\alpha x}\}_N := \{x_n \mid x_n = -\tfrac{1}{\alpha} \ln y_n, y_n \in \{y\}_N\}.$$

(2.128)

Das Verfahren läßt sich Verallgemeinern auf Integrale vom Typ

$$I[F] = \int_a^b dx \, p(x) f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f(x) \rangle_{\{x | p(x)\}_N}.$$

(2.128b)

Offensichtlich muß dafür

$$\begin{aligned} [a, b] \ni x &\rightarrow p(x) \in [0, 1] \\ \text{oder } (a, b] \dots &\quad \text{oder } [0, 1) \dots \end{aligned}$$

bijektiv sein (bzw. $[a, b]$ muß in Teilintervalle unterteilbar sein, für die man jeweils eine bijektive Abb. konstruieren kann.),

denn

$$\{x | p(x)\}_N = \{x_m | x_m = P^{-1}(y_m), y_m \in \{y\}_N\}.$$

$\uparrow$ (Stamfunktion von $p(x)$)⁻¹