

Monte-Carlo Pfadintegration

In (2.106) haben wir gesehen, daß wir den Propagator schreiben können als

$$G(x, T | y, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}[x_0]} \langle e^{\frac{i}{\hbar} S_{int}} \rangle_{FT}, \quad (2.129)$$

mit

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{FT} = \frac{\int \mathcal{D}x \mathcal{O}[x] e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}}{\int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}},$$

wobei "FT" die entsprechenden Größen für das freie Teilchen bezeichnet.

In dieser Form ist eine MC Integration nicht möglich, da $e^{\frac{i}{\hbar} S_{FT}}$ eine Phase ist, mit der man keine Verteilung konstruieren kann.

Wenn wir uns jedoch auf stationäre Größen beschränken, können wir in imaginärer Zeit arbeiten: (bzw. im "Euklidischen")

$$T_E = i T \quad \Leftrightarrow T = \frac{T_E}{i} \quad (2.130)$$

$$\Rightarrow \frac{i}{\hbar} S = \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left(\frac{m \dot{x}^2}{2} - V(x) \right) = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{i} \int_0^{T_E} d(it) \left(-\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d(it)} \right)^2 - V(x) \right)$$

$$\stackrel{\tau=it}{=} - \frac{1}{\hbar} \int_0^{T_E} d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) \right) \equiv -\frac{1}{\hbar} S_E \quad (2.131)$$

Der Euklidische Propagator ist demnach

$$G_E(x, T_E; y, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar T_E}} e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,FT}} \left\langle e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,int}} \right\rangle_{E,FT}$$

mit
$$\langle \mathcal{O} \rangle_{E,FT} = \frac{\int \tilde{\mathcal{D}}x \, \mathcal{O}[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,FT}}}{\int \tilde{\mathcal{D}}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,FT}}} \quad (2.132)$$

Bemerkung:

Eine Realzeit-Lagrangefunktion $L = T - U$ geht im Euklidischen über in $L_E = T_E + U$!

Eq. (2.132) kann nun direkt mit MC Methoden berechnet werden:

- ① Approximiere Integral über alle Pfade durch Summe über ein endliches Ensemble von Pfaden:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_{E,FT} &\simeq \frac{1}{n_L} \sum_{n=1}^{n_L} \mathcal{O}[x_n(\tau)] \\ &\equiv \langle \mathcal{O} \rangle_{\{x_n(\tau)\}_{n_L}} \end{aligned} \quad (2.133)$$

n_L : Zahl der Pfade ("Lines" oder "Loops")

- ② Approximiere stetigen Pfad $x(\tau)$ durch endlich viele "Koordinaten", z.B. Stützstellen (oder Fourierkoeffizienten etc.) :

$$x(\tau) \rightarrow x_i \equiv x(\tau_i) \quad , \quad \tau_i = \frac{i}{N_{\text{pt}}+1} T_E, \quad i=0,1,\dots,N_{\text{pt}}+1$$

N_{pt} : Zahl der Punkte pro Pfad ("Line" oder "Loop")

(2.134)

Fehler :

zu ① : Approximationsfehler wird beschrieben durch den statistischen Fehler der MC Prozedur (Standardabw.); verschwindet für $n_L \rightarrow \infty$, i. A. mit $\frac{1}{\sqrt{n_L}}$

zu ② : Approximationsfehler ist systematisch. Kontinuumslimites $N_{\text{pt}} \rightarrow \infty$ muß separat untersucht werden.

Ensembleerzeugung :

Betrachten wir als Beispiel die durch (2.132) vorgeschlagene Normierung auf die freie Theorie.

Das in ① eingeführte Ensemble muß dann einer Verteilung

$$P[x] = e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{T_E} d\tau \frac{m}{2} \dot{x}^2(\tau)}$$

gehören.

(2.135)

Durch Reskalierung

$$[0, T_E] \ni \tau \rightarrow T_E \tau, \tau \in [0, 1] \Rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_0^{T_E} d\tau \frac{m}{2} \dot{x}^2 \rightarrow \frac{1}{4} \frac{2m}{\hbar T_E} \int_0^1 d\tau \dot{x}^2(T_E \tau)$$

$$x(T_E \tau) \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar T_E}{2m}} x(\tau) \rightarrow \frac{1}{4} \int_0^1 d\tau \dot{x}^2(\tau) \quad (2.136)$$

kann die Verteilung immer auf "Standard"-Form gebracht werden:

$$P[x] = e^{-\frac{1}{4} \int_0^1 d\tau \dot{x}^2(\tau)} \quad (2.137)$$

(CAVE: die Operatoren $\hat{O}$ sowie die Endpunkte des Pfades müssen mit skaliert werden).

Näherung ② verlangt nun eine Diskretisierung der Ableitung, z.B. durch asymmetrische Nächste-Nachbar-Form:

$$\dot{x} \approx \frac{1}{\Delta\tau} (x_i - x_{i-1}), \quad \Delta\tau \equiv \varepsilon = \frac{1}{N_{\text{PEL}} + 1}$$

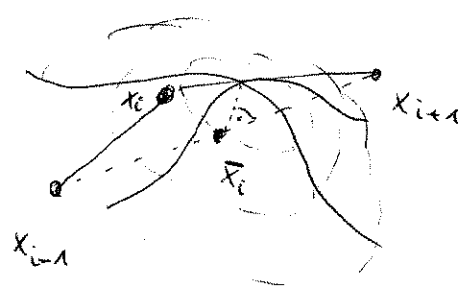
$$\Rightarrow P[x] \rightarrow e^{-\frac{N_{\text{PEL}} + 1}{4} \sum_{i=1}^{N_{\text{PEL}} + 1} (x_i - x_{i-1})^2} \quad (2.138)$$

Betrachten wir die Verteilung eines Punktes x_i :

$$\begin{aligned} P_i &\sim e^{-\frac{N_{\text{PEL}} + 1}{4} [(x_i - x_{i-1})^2 + (x_{i+1} - x_i)^2 + \dots]} \\ &= e^{-\frac{N_{\text{PEL}} + 1}{4} 2 \left(x_i - \frac{1}{2}(x_{i+1} + x_{i-1})\right)^2 + \dots} \end{aligned} \quad (2.139)$$

$\Rightarrow x_i$ gehorcht einer Gaußschen Verteilung um das algebraische Mittel seiner Nachbarn:

$$\bar{x}_i := \frac{1}{2} (x_{i+1} + x_{i-1}) \quad (2.140)$$



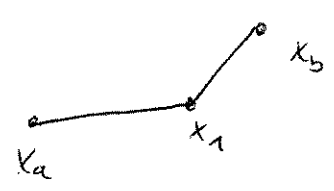
Beispiel eines Algorithmus
"d lines"

(HG, Sanchez-Guillen, Vazquez
JHEP 08, 067 (2005))

- a) Betrachte Pfad von $x_a \rightarrow x_b$
- b) Erzeuge einen Pfad mit $N_{\text{ppf}}=1$ durch Einfügen einer Stützstelle mit Verteilung:

$$P_1 = e^{-\frac{1+\epsilon}{4} \cdot 2 \left(x_1 - \frac{1}{2} (x_a + x_b) \right)^2 + \dots}$$

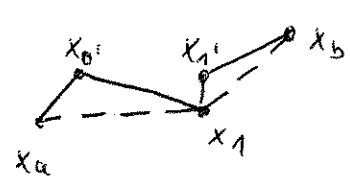
↖ unabh. von x_1



(2.141)

- c) Füge 2 Zwischenstützstellen x_0', x_1' ein mit Verteilung:

$$P_{0,1'} = e^{-\frac{2(1+\epsilon)}{4} \left[2 \left(x_0' - \frac{1}{2} (x_1 + x_a) \right)^2 + 2 \left(x_1' - \frac{1}{2} (x_b + x_1) \right)^2 + \dots \right]}$$



↖ unabh. von x_1, x_0', x_1'

(2.142)

Die Verteilung für x_1 lautet dann

$$P_1 \rightarrow P_0' P_1 P_1' = e^{-\underbrace{\frac{2 \cdot (1+1)}{4}}_{= \frac{(3+1)}{4}}} \cdot 2 \left(x_1 - \frac{1}{2} (x_0 + x_1') \right)^2 + \dots$$

↑
unabh. von x_1
(2.143)

Was eines Gaußschen Verteilung von x_1 um das Mittel seiner neuen Nachbarn entspricht; wichtig: die neue Gaußsche Breite entspricht genau einem Pfad mit $N_{\text{ppz}} = 3$!

d) Erzeuge einen Pfad mit $N_{\text{ppz}} = 2^j - 1$ durch j -faches Wiederholen des Prozedurs.

NB: Erzeugung von Gauß'sch verteilten Zufallszahlen

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad \text{nach der Box-Müller Methode:}$$

Gegeben zwei gleich verteilte Zufallszahlen $y_1, y_2 \in [0, 1)$,

berechne:

$$r = \sqrt{-2\sigma^2 \ln(1-y_1)}$$

$$\theta = 2\pi y_2$$

(2.144)

Dann ist $x_1 = r \cos \theta$, $x_2 = r \sin \theta$ ein Paar von Gauß'sch verteilten Zufallszahlen.

Beweis: vgl. Standardbeweis des Gauß-Integrals, oder

siehe W. Janke, "Pseudo Random Numbers: Generation and Quality Checks", NIC Series, Vol. 10

Für Beispiel-Programm & Pfad-Visualisierung,
siehe Vorlesungshomepage

Anwendungsbeispiel: Harmonischer Oszillator

Der HO ist in der Tat eine "schlechte" Anwendung,
aber ein "gutes" Beispiel, da er Stärken und
Schwächen des MC Verfahrens demonstriert.

Nach (2.132) ist der Euklidische Propagator gegeben
mit

$$G_E(x_b, T_E; x_a, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar T_E}} e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{m(x_b - x_a)^2}{2 T_E}} \left\langle e^{-\int_0^{T_E} \frac{m}{2\hbar} \omega^2 x^2 d\tau} \right\rangle_{EFT, x_a}^{x_b} \quad (2.145)$$

Reskalierung auf Standardform: (2.136)

$$G_E\left(\underbrace{\sqrt{\frac{\hbar T_E}{2m}}}_{\equiv x_a} \tilde{x}_b, T_E, \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar T_E}{2m}}}_{\equiv x_b} \tilde{x}_a, 0\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar T_E}} e^{-\frac{1}{4} (\tilde{x}_b - \tilde{x}_a)^2} \left\langle e^{-\frac{(T_E \omega)^2}{4} \int_0^{T_E} d\tau \tilde{x}^2} \right\rangle_{\sqrt{\frac{\hbar T_E}{2m}} \tilde{x}_a}^{\sqrt{\frac{\hbar T_E}{2m}} \tilde{x}_b} \quad (2.146)$$

Betrachten wir als Beispiel den Propagator im
Koinzidenzlimit $x_a \rightarrow x_b = 0$

$$\Rightarrow G_E(T_E) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega T_E}}; \quad (2.147)$$

Wir wissen also, daß in diesem Limit

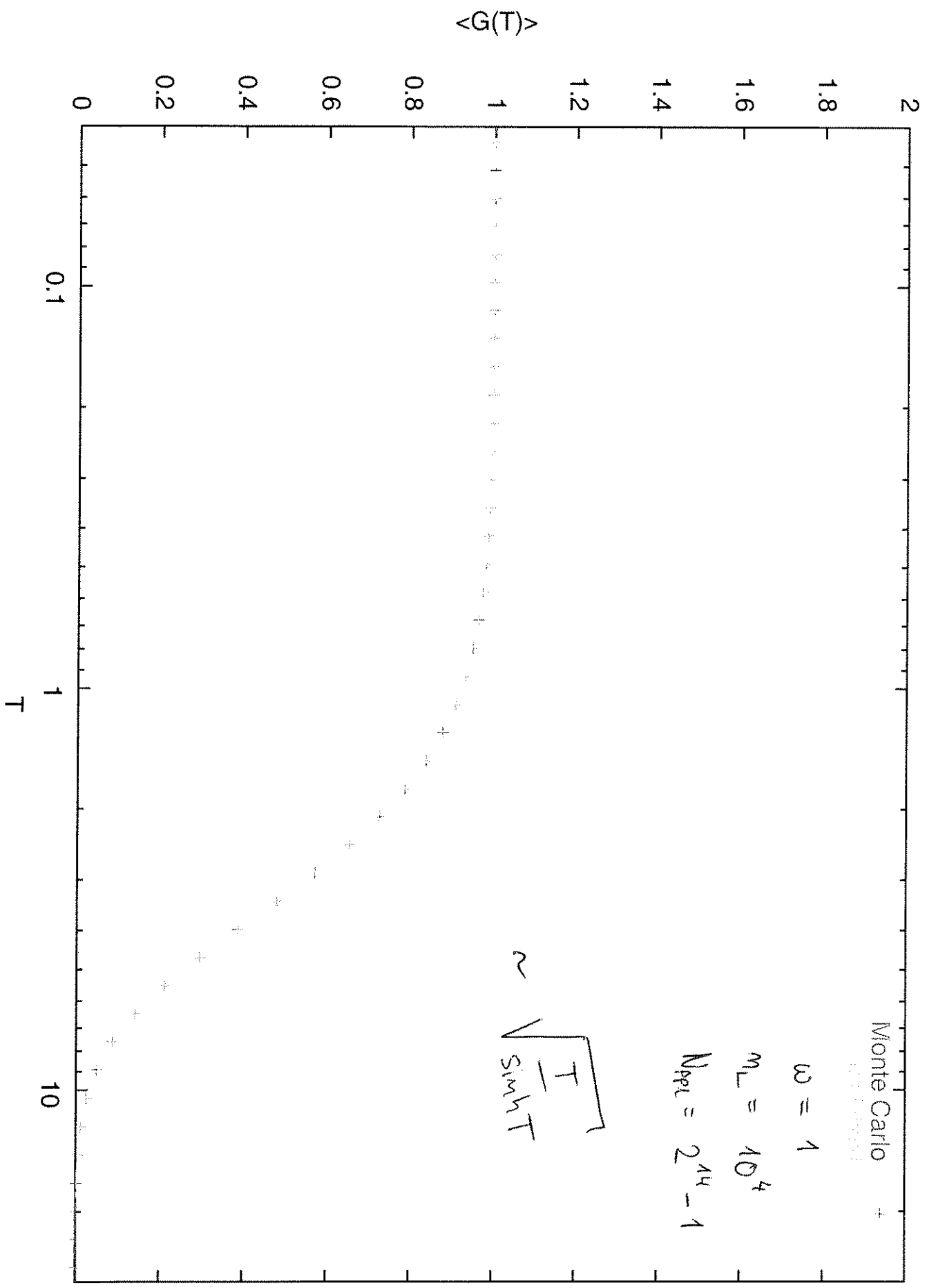
$$\left\langle e^{-\frac{(T_E \omega)^2}{4} \int_0^1 d\tau \tilde{x}^2} \right\rangle_{E, FT} = \sqrt{\frac{\omega T_E}{\sinh \omega T_E}}. \quad (2.148)$$

Die Übereinstimmung von (2.148) für $(T_E \omega) \lesssim 100$
mit dem MC Estimate ist sehr gut, siehe plot [1].

Betrachten wir nun die Grundzustandsenergie
nach der Feynman - Kac Formel,

$$E_0 = -\lim_{T_E \rightarrow \infty} \frac{1}{T_E} \ln G_E(T_E). \quad (2.149)$$

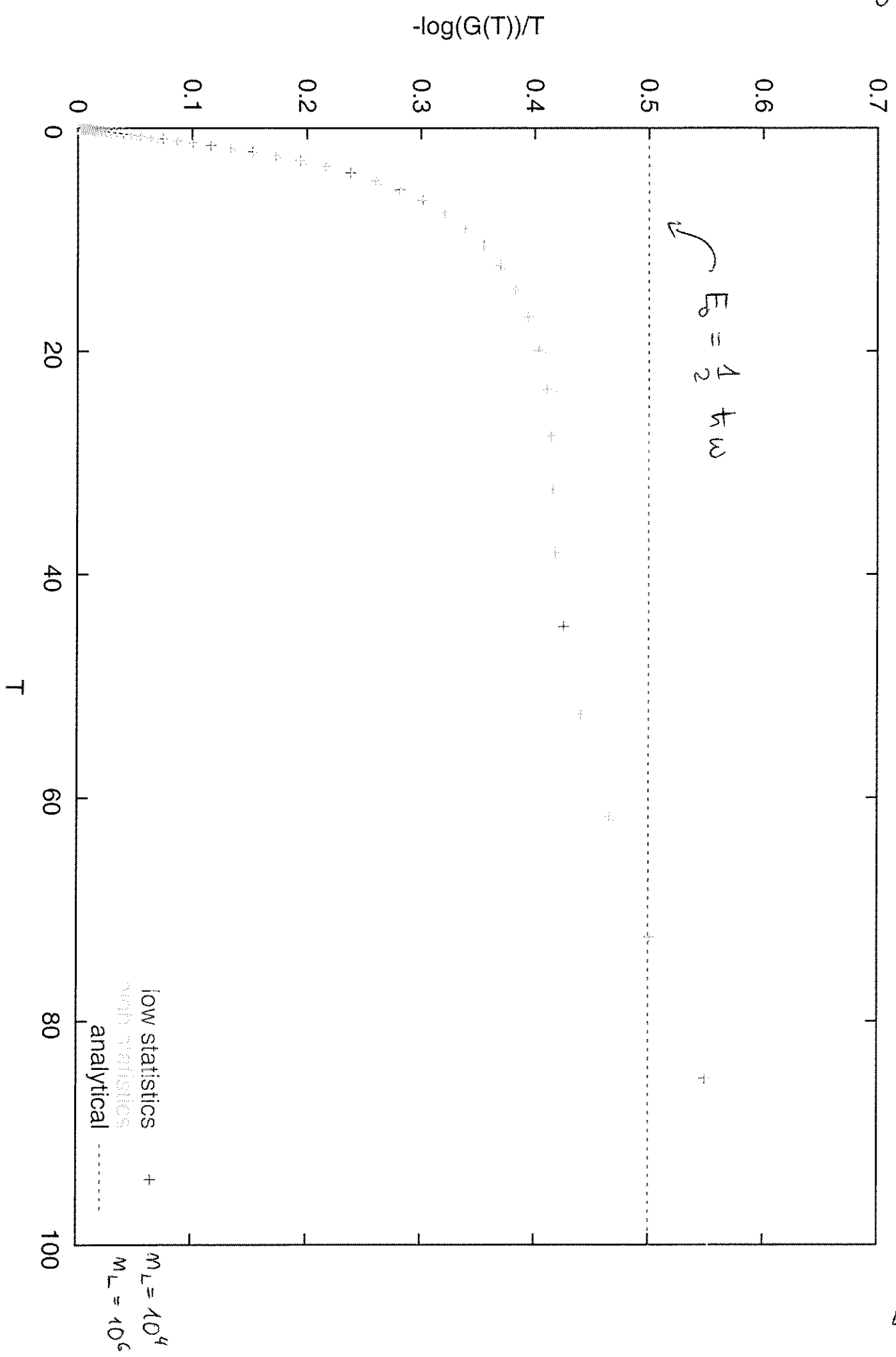
z.B. für ein Ensemble mit $N_{ppe} = 2^{10}-1$ finden
wir ein Verhalten der rechten Seite an
 $\sim \frac{1}{2} \hbar \omega$ für $T_E \lesssim 100$. Bei $T_E \sim 100$ jedoch
weicht die numerische Approximation vom
analytischen Ergebnis ab, siehe Plot [2].



E_0

$$k = 1, \omega = 1$$

$$E_0 = \frac{1}{2} k \omega$$



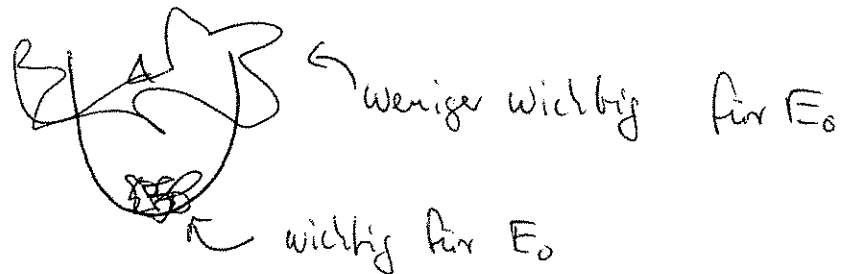
Insbesondere wächst der statistische Fehler
(zu erkennen an den großen Variationen mit n_L).

Dieses Problem nennt man auch „klassischen Kollaps“:

Für $T_E \omega \rightarrow \infty$ wird

$$\left\langle e^{-\frac{(T_E \omega)^2}{4} \int_0^1 dt \tilde{x}^2} \right\rangle$$

dominiert durch Pfade mit kleinem $\int_0^1 dt \tilde{x}^2$, d.h.
mit kleinem mittleren quadratischen Abstand vom
Potentialminimum



Da das Ensemble die freie-Teilchen Verteilung
erfüllt, und da das Ensemble endlich ist, $n_L < \infty$,
gibt es nur sehr wenige Pfade mit kleinem $\int_0^1 dt \tilde{x}^2$.

Diese wenigen Pfade aber dominieren der Erwartungswert;
d.h. es gibt eine effektive Zahl von Pfaden $n_{L\text{eff}} \ll n_L$,
was einen großen statistischen Fehler zur
Folge hat.

Anders ausgedrückt hat das freie-Teilchen
Ensemble einen kleinen Überlapp mit den
für E_0 wichtigen Konfigurationen $\Rightarrow$ "Overlap problem".