

Univerzitet u Beogradu
Fizički fakultet

Antun Balaž

Formulacija kvantne mehanike pomoću funkcionalnog integrala

diplomski rad

Beograd, decembar 1997.

Sadržaj

1	Predgovor	ii
2	Uvod	1
3	Path integral formalizam	2
4	Analitičko rešenje za LHO u spoljašnjem polju	4
5	Osnovni pojmovi o Monte Carlo simulacijama	8
6	MC simulacija LHO u spoljašnjem polju	11
7	Zaključak	14
8	Literatura	15
9	Dodatak	16

1 Predgovor

Iskoristiću predgovor da se zahvalim svima koji su mi pomogli da napravim svoju prvu Monte Carlo simulaciju i uradim ovaj rad. Pre svega, zahvaljujem se svom mentoru, Aleksandru Bogojeviću, na velikom trudu oko obezbeđivanja potrebnog okruženja za pisanje simulacije kao i za njeno višednevno izvršavanje na računarima Instituta za fiziku u Zemunu. On mi je pomogao da shvatim suštinu path integral formalizma, kao i značaj kvaziklasične aproksimacije. Stalnim sugestijama mi je mnogo pomogao prilikom planiranja simulacije i optimizovanja algoritma. Takođe, želeo bih da se zahvalim i Aleksandru Beliću od koga sam naučio suštinu Monte Carlo metoda i najvažnije Monte Carlo tehnike. \LaTeX bi verovatno bio mnogo veći problem da me u njegove tajne veoma strpljivo nije uveo Kosta Ladavac. Svima se još jednom najlepše zahvaljujem na pomoći i strpljenju.

Autor

2 Uvod

Uobičajena formulacija kvantne mehanike počiva na operatorskom formalizmu, koji je i stvoren prilikom njenog zasnivanja. Međutim, mali broj analitički rešivih problema primorao je fizičare na razvijanje približnih metoda za računanje relevantnih veličina. Tako je nastala teorija perturbacija, različite varijacione metode itd. Veliki problemi koji nastaju prilikom praktične primene ovih metoda podstakli su, na sreću, razvoj moćnih simetrijskih metoda koje su, sasvim neočekivano, postale jedna od najvažnijih ideja vodilja u savremenoj fizici.

Jednu od formulacija kvantne mehanike dao je i Feynman. Ona počiva na funkcionalnim integralima. Zanimljivo je da ovakva formulacija kvantne mehanike mnogo više podseća na klasičnu mehaniku nego operatorska formulacija. Ona direktno može da se generalise i uspešno se koristi u kvantnoj teoriji polja, gde se dejstvo dobija integracijom po celom četvorodimenzionalnom prostoru, a ne samo po vremenu kao u kvantnoj mehanici ($d=1$). Vakuumska očekivana vrednost data je sa

$$\int [d\phi] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int \mathcal{L} d^4x \right\}$$

Jedan od razloga što smo razmatrali lagranžijan linearnog harmonijskog oscilatora *u spoljašnjem polju* je što se diferenciranjem vakuumske očekivane vrednosti po spoljašnjem polju mogu dobiti i druge (nevakuumske) očekivane vrednosti.

Sredinom ovog veka razvijen je Monte Carlo metod, numerički metod koji je sa razvojem računara postao skoro najvažniji. Najjednostavnije možemo da ga definišemo na sledeći način: to je metod za rešavanje određene klase matematičkih problema pomoću slučajnih brojeva. Ispostavlja se da formulacija teorije polja preko funkcionalnog integrala baš spada u klasu tipičnih problema koje veoma uspešno rešava Monte Carlo metod. Naš cilj je bio da na integrabilnom sistemu, kakav je LHO, razvijemo algoritam za Monte Carlo simulaciju koja će moći uspešno da se primenjuje i na druge sisteme. Prednost Monte Carlo metoda je u tome što sve probleme istog tipa tretira na isti način, pa nije ništa teže napisati simulaciju za LHO sa anharmonicitetom u spoljašnjem polju nego za običan LHO.

Što više znamo o sistemu koji želimo da simuliramo, to će većina numeričkih metoda davati preciznije rezultate. Tako je i sa Monte Carlo metodom. Parametri simulacije se pre izvršavanja

programa variraju tako da se dobiju najbolji rezultati, tj. najmanja greška za najkraće vreme. Zaključili smo da parametre sistema treba podesiti tako da budu vrlo blizu vrednostima koje bi imali u klasičnoj mehanici. Ovakav izbor parametara povećava efikasnost za više redova veličine i tako se na najlepší način dobija kvaziklasična aproksimacija. Dobili smo rezultate koji se odlično slažu sa analitičkim rezultatima pri vrlo malom broju iteracija, i to pokazuje svu moć Monte Carlo metoda.

3 Path integral formalizam

U klasičnoj mehanici, dinamika čestice koja se kreće po pravoj liniji određena je hamiltonijanom koji se u većini slučajeva od interesa može predstaviti kao $H(p, q) = f_{ab}p^a q^b$, uz sumiranje po ponovljenim indeksima. Prelazak na kvantnu mehaniku u operatorskom formalizmu definisan je sa $q \rightarrow \hat{q}$, $p \rightarrow \hat{p}$, ali tako da je $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Na ovaj način kvantni hamiltonijan \hat{H} nije jednoznačno definisan. Npr., možemo da definišemo $\hat{H}_L = f_{ab}\hat{p}^a\hat{q}^b$, kao i $\hat{H}_R = f_{ab}\hat{q}^b\hat{p}^a$, a koristi se i Weyl-ova simetrična preskripcija:

$$pq \rightarrow \frac{1}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}) = (\hat{p}\hat{q})_W,$$

$$p^2q \rightarrow \frac{1}{3}(\hat{p}^2\hat{q} + \hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{q}\hat{p}^2) = (\hat{p}^2\hat{q})_W \text{ itd.}$$

Ako sa $|q, t\rangle$ označimo stanje kvantnog sistema u trenutku t , a sa $G(q_f, t_f; q_i, t_i)$ skalarni proizvod $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$, tada je verovatnoća za prelaz iz stanja $|q_i, t_i\rangle$ u stanje $|q_f, t_f\rangle$ data sa $|G(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2$. Naš cilj je da izračunamo sve verovatnoće prelaza za naš sistem, tj. da nađemo Green-ovu funkciju G . U Schrödinger-ovoj slici je

$$G(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \hat{U}(t_f - t_i, t_i) | q_i \rangle, \quad (1)$$

gde je $\hat{U}(t_f - t_i, t_i)$ evolucionni operator. Kako su konzervativni sistemi invarijantni na vremenske translacije, sledi $\hat{U}(t_f - t_i, t_i) = \hat{U}(t_f - t_i)$, a samim tim i $G(q_f, t_f; q_i, t_i) = G(q_f, q_i, t_f - t_i)$. Za takve sisteme (a mi razmatramo hamiltonijan baš takvog sistema) važi

$$\hat{U}(t_f - t_i) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (t_f - t_i) \hat{H} \right\}. \quad (2)$$

Da bismo naglasili sve argumente od kojih zavisi Green-ova funkcija, kada je to potrebno, pisaćemo $G(q_f, q_i, t_f - t_i; f_i)$, gde f_i označava skup parametara hamiltonijana. Ako vremenski interval evolucije sistema $t_f - t_i$ podelimo na N jednakih delova pomoću $N - 1$ tačaka $t_n = t_i + n\epsilon$, $\epsilon = \frac{t_f - t_i}{N}$, $n \in \{1, 2, \dots, N - 1\}$, definišemo $q_0 = q_i$ i $q_N = q_f$, i umetnemo $N - 1$ razlaganja jedinice u koordinatnoj reprezentaciji u definiciju Green-ove funkcije, dobijamo

$$G(q_f, q_i, t_f - t_i) = \int dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q_N | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_1 | \hat{U}(\epsilon) | q_0 \rangle. \quad (3)$$

U izrazu za G imamo članove tipa $\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle$, koje za dovoljno malo ϵ (tj. za dovoljno veliko N) možemo približno pisati kao $\langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H} | q_n \rangle$. Ako smo usvojili preskripciju koja daje \hat{H}_L , tada ćemo ovaj matični element izračunati umetanjem još jednog razlaganja jedinice, ali ovoga puta u impulsnoj reprezentaciji:

$$\begin{aligned} \langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L &\approx \langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \int dp_n \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \\ &= \int dp_n \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_n q_{n+1}\right\}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon f_{ab} \hat{p}^a \hat{q}^b | q_n \rangle = \int dp_n \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n)\right\}}{2\pi\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_n, q_n)\right) \approx \\ &\approx \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_n)\right]\right\}. \end{aligned}$$

Slično, ako smo usvojili preskripciju koja daje \hat{H}_R , dobićemo:

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_R \approx \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_{n+1})\right]\right\}.$$

Za Weyl-ovu simetričnu preskripciju, koju ćemo ubuduće isključivo koristiti, pa zbog toga i ne pišemo indeks W kod matičnog elementa, dobija se:

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle \approx \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H\left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right)\right]\right\}.$$

Kada ovaj rezultat unesemo u (3) i pustimo da N teži beskonačnosti, dobijamo funkcionalni integral u faznom prostoru koji definišemo sa

$$\begin{aligned} &\int [dqdp] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (pq - H) dt\right\} = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dq_1 \dots dq_{N-1} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H\left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right)\right]\right\}. \quad (4) \end{aligned}$$

Prema definiciji je

$$G(q_f, q_i, t_f - t_i) = \int [dqdp] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - H) dt \right\}. \quad (5)$$

Za klasu hamiltonijana $H = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$, tj. lagranžijana $L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - V(q)$, možemo da izračunamo integrale po impulsima u (4). Tako će se naš integral znatno pojednostaviti i postati funkcionalni integral u konfiguracionom prostoru, koji se obično zove *path integral*. Ako napišemo integrale po impulsima iz prethodne jednačine, vidimo da su to Gauss-ovi integrali:

$$\int \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - \frac{1}{2} p_n^2 - V \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}.$$

Kako je

$$\int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\hbar} p_n^2 + \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\hbar} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 \right\},$$

dobijamo

$$G(q_f, q_i, t_f - t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{N/2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\} = \int [dq] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L dt \right\}. \quad (6)$$

Ovo je konačan izraz za path integral u konfiguracionom prostoru za navedenu klasu hamiltonijana. Za hamiltonijane složenijeg oblika mera $[d\mu] = f[q][dq]$ postaje komplikovanija. Ovo može da se izbegne tako što se multiplikativni faktor napiše u obliku $f[q] = \exp\{\ln f[q]\}$. Sada je mera ista kao i ranije, ali se u eksponentu podintegralne funkcije pored dejstva na određenoj trajektoriji pojavljuje dodatni aditivni član.

4 Analitičko rešenje za LHO u spoljašnjem polju

Da bismo našli path integral za LHO u spoljašnjem polju, potrebno nam je nekoliko pomoćnih rezultata. Izračunaćemo prvo path integral za slobodnu česticu, $L_{FP} = \frac{1}{2}\dot{q}^2$. Ako ovaj lagranžijan uvrstimo u definiciju (6), dobićemo

$$G_{FP}(q_f, q_i, t_f - t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dq_1 \dots dq_{N-1} \frac{1}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{N/2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 \right\}. \quad (7)$$

Polazimo od identiteta

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{2/2}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar\epsilon} \left[(q_2 - q_1)^2 + (q_1 - q_0)^2 \right] \right\} = \frac{\exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \cdot (2\epsilon)} (q_2 - q_0)^2 \right\}}{\sqrt{2\pi\hbar i \cdot (2\epsilon)}}. \quad (8)$$

Ako prethodno dobijeni izraz pomnožimo sa $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar\epsilon} (q_3 - q_2)^2 \right\}$ i prointegralimo po q_2 , dobijamo $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \cdot (3\epsilon)}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \cdot (3\epsilon)} (q_3 - q_0)^2 \right\}$. Očigledno, ako sličan postupak ponovimo $N - 1$ puta, dobićemo traženi path integral za slobodnu česticu:

$$G_{FP}(q_f, q_i, t_f - t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t_f - t_i)}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar(t_f - t_i)} (q_f - q_i)^2 \right\}. \quad (9)$$

Sada ćemo razmotriti lagranžijan linearnog harmonijskog oscilatora (LHO),

$$L_{LHO} = \frac{1}{2} \dot{Q}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 Q^2. \quad (10)$$

Euler-Lagrange-eva jednačina kretanja za ovaj sistem je

$$\ddot{Q} + \omega^2 Q = 0, \quad (11)$$

pa je klasična trajektorija data sa $Q_{cl}(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t$, uz granične uslove $Q(t_i) = Q_i$, $Q(t_f) = Q_f$. Ako uvedemo oznaku $T = t_f - t_i$, dejstvo lagranžijana (10) na klasičnoj trajektoriji može da se predstavi u obliku

$$S_{LHO}^{cl}(Q_f, Q_i, T, \omega) = \int_{t_i}^{t_f} L_{LHO} dt = \frac{\omega}{2 \sin \omega T} \left[(Q_i^2 + Q_f^2) \cos \omega T - 2Q_i Q_f \right]. \quad (12)$$

Da bismo izračunali path integral za LHO, napisaćemo proizvoljnu trajektoriju $Q(t)$ kao

$$Q(t) = Q_{cl}(t) + g(t), \quad (13)$$

tako da $g(t)$ predstavlja odstupanje razmatrane trajektorije od klasične. Granični uslovi su sada $g(t_i) = g(t_f) = 0$. U ovakvim oznakama lagranžijan postaje

$$\begin{aligned} L_{LHO} &= \frac{1}{2} (\dot{Q}_{cl} + \dot{g})^2 - \frac{1}{2} \omega^2 (Q_{cl} + g)^2 = \\ &= \frac{1}{2} \dot{Q}_{cl}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 Q_{cl}^2 + \frac{1}{2} \dot{g}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 g^2 + \dot{Q}_{cl} \dot{g} - \omega^2 Q_{cl} g. \end{aligned} \quad (14)$$

Kada se računa dejstvo lagranžijana (10) napisanog u obliku (14) na trajektoriji $Q(t)$ razloženoj kao u (13), prva dva sabirka daće dejstvo na klasičnoj trajektoriji S_{LHO}^{cl} , a poslednja dva ne

daju nikakav doprinos, što se lako vidi parcijalnom integracijom. Prema tome, ukupno dejstvo je $S_{LHO} = S_{LHO}^{cl} + S_{LHO}[g]$, pa je

$$G_{LHO}(Q_f, Q_i, T; \omega) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{LHO}^{cl}(Q_f, Q_i, T, \omega) \right\} F(T, \omega) , \quad (15)$$

gde je

$$F(T, \omega) = \int [dg] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{LHO}[g] \right\} \quad (16)$$

funkcija koja zavisi od vremenskog intervala $T = t_f - t_i$ i parametra ω . Razložićemo svaku od trajektorija $g(t)$ u Fourier-ov red (koji će imati samo sinusne članove zbog graničnih uslova):

$$g(t) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi t}{T} . \quad (17)$$

Dejstvo na ovakvoj trajektoriji izračunaćemo koristeći relacije ortogonalnosti trigonometrijskih funkcija. Dobija se

$$S_{LHO}[g] = \frac{T}{4} \sum_n \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 . \quad (18)$$

Ako vreme diskretizujemo kao što smo postupili prilikom definisanja path integrala, onda nam u sumama (17) i (18) ostaje samo konačan broj sabiraka, pa je

$$\int [dg] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{LHO}[g] \right\} = F(T, \omega) = \lim_{N \rightarrow \infty} F_N(T, \omega) ,$$

$$F_N(T, \omega) = J \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_1 \dots da_N}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{\frac{N}{2}}} \exp \left\{ \frac{iT}{4\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} . \quad (19)$$

Faktor J je jakobijan transformacije, i on ne zavisi od ω i \hbar (to je sasvim očigledno), a može da zavisi od T . Svi integrali koje imamo u (19) su Gauss-ovi, i lako dobijamo

$$F_N(T, \omega) = J \prod_{n=1}^N \left(\frac{n\pi}{T} \right)^{-1} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} . \quad (20)$$

Prva dva faktora zajedno ne zavise od ω , već samo od T , pa ćemo ih označiti sa $C(T)$. Poslednji faktor u (20) ima limes

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}} ,$$

tako da je

$$F(T, \omega) = C(T) \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}} . \quad (21)$$

$C(T)$ ćemo odrediti iz limesa $\omega \rightarrow 0$, jer tada lagranžijan LHO prelazi u lagranžijan slobodne čestice za koji smo eksplicitno izračunali path integral G_{FP} . Za $\omega \rightarrow 0$, pri konstantnom T , imamo $F(T, \omega) \rightarrow C(T)$, i poređenjem sa (9), vidimo da je

$$C(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar iT}}, \quad (22)$$

zato što je eksponencijalni član u (9), u stvari, $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_{FP}^{cl}\right\}$. Kada uzmemo u obzir (15), (21) i (22), za LHO dobijamo

$$G_{LHO}(Q_f, Q_i, T; \omega) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_{LHO}^{cl}(Q_f, Q_i, T, \omega)\right\} \sqrt{\frac{\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega T}}. \quad (23)$$

Pošto smo našli path integral za LHO, možemo da razmotrimo i lagranžijan linearnog harmonijskog oscilatora u spoljašnjem polju za koji je i programirana naša Monte Carlo simulacija. Dakle,

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - \frac{1}{2}\omega^2 q^2 - jq. \quad (24)$$

Ako uvedemo smenu $Q = q + \frac{j}{\omega^2}$, lagranžijan postaje

$$L = \frac{1}{2}\dot{Q}^2 - \frac{1}{2}\omega^2 Q^2 + \frac{j^2}{2\omega^2}, \quad (25)$$

jednačina kretanja je ista kao (11), a u dejstvu će se pojaviti aditivni član $\frac{j^2 T}{2\omega^2}$. Dakle, tražena funkcija $G(q_f, q_i, T; \omega, j)$ za lagranžijan (24) može da se napiše kao

$$G(q_f, q_i, T; \omega, j) = G_{LHO}(Q_f, Q_i, T; \omega) \exp\left\{\frac{ij^2 T}{2\hbar\omega^2}\right\},$$

pri čemu je $Q(t_i) = Q_i = q_i + \frac{j}{\omega^2}$, i $Q(t_f) = Q_f = q_f + \frac{j}{\omega^2}$. Kada se uzmu u obzir (23) i (12), definitivno se za Green-ovu funkciju lagranžijana (24) dobija

$$G(q_f, q_i, T; \omega, j) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega T}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_f(q_f, q_i, T, \omega, j)\right\}, \quad (26)$$

gde je uvedena funkcija S_f ,

$$S_f(q_f, q_i, T, \omega, j) = \frac{Tj^2}{2\omega^2} + \frac{\omega}{2\sin \omega T} \left\{ \left[\left(q_i + \frac{j}{\omega^2} \right)^2 + \left(q_f + \frac{j}{\omega^2} \right)^2 \right] \cos \omega T - 2 \left(q_i + \frac{j}{\omega^2} \right) \left(q_f + \frac{j}{\omega^2} \right) \right\}, \quad (27)$$

dejstvo na klasičnoj trajektoriji lagranžijana (24).

U simulaciji smo koristili sistem jedinica u kome je $\hbar = \omega = 1$. Takođe, razmatrali smo samo slučaj $q_i = 0$, $q_f = a$, jer se, prema (15), za razmatrani lagranžijan može izračunati $G(q_f, q_i, T; \omega, j)$ ako se zna $G(a, 0, T; \omega, j)$. Wick-rotacijom prešli smo na imaginarno vreme, $it \rightarrow \tau$, jer bismo inače morali da radimo sa kompleksnim funkcijama, a svaki numerički metod bi konstatovao da integrali funkcija tipa $x \mapsto e^{ix^2}$ na intervalu $(-\infty, \infty)$ ne konvergiraju. U svim dosad izračunatim Gauss-ovim integralima mi smo podrazumevali Wick-rotaciju (zapravo dve: jednu pre integracije, i jednu posle). Najlakše je to videti na primeru integrala $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-cx^2}$, koji konvergira za $Re(c) > 0$. Ako je $Re(c) = 0$, možemo da postupimo na dva načina: ili da dodamo mali realni deo r broju c dok računamo i na kraju pustimo $r \rightarrow 0$, ili da izvršimo Wick-rotaciju, tj. da pređemo sa realne ose na osu određenu preslikavanjem $x^2 \mapsto -iy^2$ za $Im(c) > 0$, odnosno $x^2 \mapsto iy^2$ za $Im(c) < 0$, i na kraju se vratimo na realnu osu. Ova dva postupka su ekvivalentna, ali moramo jedan od njih eksplicitno da ugradimo u simulaciju. Mi smo se odlučili za imaginarno vreme kao standardan postupak. Kada se Green-ova funkcija (26) transformiše u skladu sa ovim, dobija se

$$\tilde{G}(a, T, j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \operatorname{sh} T}} \exp \left\{ Tj^2 - \frac{1}{2 \operatorname{sh} T} \left[(a^2 + 2aj + 2j^2) \operatorname{ch} T - 2aj - 2j^2 \right] \right\}. \quad (28)$$

Uveli smo oznaku \tilde{G} umesto G da bismo naglasili prelazak na imaginarno vreme. Takođe, iskoristili smo $i \sin T \rightarrow \operatorname{sh} T$, $\cos T \rightarrow \operatorname{ch} T$.

5 Osnovni pojmovi o Monte Carlo simulacijama

Kao što je rečeno u uvodu, Monte Carlo simulacija (ubuduće MC simulacija) predstavlja numerički metod za rešavanje određenog matematičkog problema *pomoću (pseudo) slučajnih brojeva*. Iz definicije path integrala je očigledno da je njegovo rešavanje tipičan zadatak jedne MC simulacije: treba rešiti puno integrala, a MC metod dominira nad svim drugim metodima baš u tom slučaju. Biće nam potrebno nekoliko termina iz teorije verovatnoće i matematičke statistike, pa ćemo ih ukratko definisati.

Diskretna slučajna promenljiva ξ je veličina koja uzima diskretne vrednosti iz nekog skupa $\{x_i\}$ sa određenom verovatnoćom. Verovatnoća da diskretna promenljiva ξ uzme neku vrednost

iz skupa je $p_i = P(\xi = x_i)$. *Neprekidna slučajna promenljiva* ξ je veličina koja uzima vrednosti iz nekog intervala $[a, b] \in \mathbf{R}$. *Gustina verovatnoće (ili raspodela)* p neprekidne slučajne promenljive ξ je funkcija definisana sa $P\{\xi \in (x, x + dx)\} = p(x)dx$, gde je sa $P\{\xi \in (x, x + dx)\}$ označena verovatnoća da slučajna promenljiva uzme vrednost iz intervala $(x, x + dx)$. Gustina verovatnoće može da se definiše i za diskretene slučajne promenljive kao $p(x) = \sum_i p_i \delta(x - x_i)$. Mi ćemo koristiti samo neprekidne slučajne promenljive. *Kumulativna raspodela* F slučajne promenljive ξ je funkcija definisana sa $F(x) = P(\xi < x) = \int_a^x p(x')dx'$, $\forall x \in [a, b]$. *Srednja vrednost* funkcije g u odnosu na raspodelu p definiše se kao $\langle g \rangle = \int_a^b g(x)p(x)dx$. Raspodela svake slučajne promenljive ima dve očigledne osobine: $(\forall x) p(x) > 0$ i $\int_a^b p(x)dx = 1$. Prva od ovih osobina je vezana za definiciju verovatnoće, a druga je posledica činjenice da slučajna promenljiva mora da uzme neku vrednost. Navešćemo dva primera za raspodele, jer ćemo ih kasnije koristiti. *Uniformna raspodela* na intervalu $[a, b]$ data je sa $p(x) = 1/(b - a)$. *Gauss-ova (ili normalna) raspodela* je dvoparametarska:

$$\mathcal{N}(\langle x \rangle, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (29)$$

U tački $\langle x \rangle$ Gauss-ova raspodela ima maksimum i simetrična je u odnosu na ovu tačku, pa se ona obično zove centar raspodele, dok se σ^2 zove varijansa, a σ standardna devijacija.

Ako definišemo novu slučajnu promenljivu X_N kao aritmetičku sredinu

$$X_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (30)$$

nezavisnih vrednosti slučajne promenljive x , tada nam zakon velikih brojeva garantuje da je

$$\lim_{N \rightarrow \infty} X_N = \langle x \rangle, \quad (31)$$

dok centralna granična teorema tvrdi da je raspodela veličine X_N data sa

$$p(X_N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\sigma_x^2}{N}}} \exp\left\{-\frac{N(X_N - \langle x \rangle)^2}{2\sigma_x^2}\right\} \equiv \mathcal{N}\left(\langle x \rangle, \frac{\sigma_x^2}{N}\right),$$

gde je $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$. Ono što mi hoćemo da izračunamo su upravo parametri raspodele, tj. iz niza brojeva za koje znamo da imaju neku raspodelu treba oceniti parametre te raspodele. Matematička statistika definiše pojam *ocene* srednje vrednosti veličine koja zavisi od slučajne promenljive. Npr., veličina definisana sa (30) je ocena srednje vrednosti $\langle x \rangle$. Ocena je *stabilna* ako u limesu daje veličinu koju ocenjuje, a *nepristrasna* ako je srednja vrednost ocene

jednaka veličini koja se ocenjuje. Na osnovu ovih definicija zaključujemo da je veličina X_N stabilna i nepristrasna ocena za $\langle x \rangle$. Štaviše, ako znamo varijansu σ^2 Gauss-ove raspodele za veličinu X_N , možemo da kažemo sa kolikom verovatnoćom se prava srednja vrednost nalazi u intervalu određene širine oko naše ocene. Verovatnoća da se prava srednja vrednost $\langle x \rangle$ nalazi u intervalu $(X_N - \sigma, X_N + \sigma)$ je 68.3%, za interval $(X_N - 2\sigma, X_N + 2\sigma)$ verovatnoća je 95.4%, a za interval poluširine 3σ verovatnoća je 99.7%. Ovi brojevi se dobijaju integracijom Gauss-ove funkcije raspodele po odgovarajućem intervalu. Monte Carlo metod računa integrale tipa $I = \int dx f(x) p(x)$, gde je $p(x)$ neka funkcija raspodele. Vidimo da je taj integral zapravo srednja vrednost funkcije f u odnosu na raspodelu p , pa je suština MC metoda u sledećem:

- a) generiše se N slučajnih brojeva (x_1, \dots, x_N) iz raspodele p ,
- b) izračunaju se vrednosti funkcije $f_i = f(x_i)$ za $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ i
- c) *oceni* se vrednost integrala I i varijansa ocene. Ocena je data sa

$$I_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i . \quad (32)$$

Centralna granična teorema garantuje nam da je raspodela veličine f_i Gauss-ova (za dovoljno veliko N), a I_{MC} je ocena centra te raspodele. Sada nam je potrebna samo ocena veličine σ_f^2 , koja igra ulogu σ_x^2 iz centralne granične teoreme. Nameće se

$$\tilde{\sigma}_f^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 ,$$

ali se može pokazati da ova ocena nije nepristrasna. Detaljnija analiza pokazuje da je ova ocena skoro uvek dobra, jer je prava nepristrasna ocena za σ_f^2 data sa

$$\sigma_f^2 = \frac{N}{N-1} \tilde{\sigma}_f^2 , \quad (33)$$

a svaka dobra MC simulacija ima dovoljan broj iteracija da se ova popravka može zanemariti. Kako varijansu za ocenu našeg integrala dobijamo kao $\frac{1}{N} \sigma_f^2$, vidimo da rezultat treba citirati na sledeći način:

$$I = I_{MC} \pm \Delta I_{MC} , \quad (34)$$

gde je I_{MC} dato sa (32), a standardna varijacija je

$$\Delta I_{MC} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right]} , \quad (35)$$

uz interpretaciju kao kod Gauss-ove raspodele. Sada smo objasnili suštinu MC metoda, ali to je još nedovoljno da bi napravili MC simulaciju. Nismo objasnili kako faktorisati funkciju F , čiji integral želimo da izračunamo, na proizvod funkcija f i p , a takođe ni kako generisati slučajne brojeve iz neke unapred zadate raspodele. Odgovor na prvo pitanje daje nam jednačina (35). Naime, da bismo minimizirali grešku, moramo da minimiziramo varijansu. Kada bi funkcija f bila konstanta, onda bi varijansa bila $\sigma_f^2 = 0$. Međutim, to bi značilo da slučajne brojeve generišemo iz raspodele $p(x) = F(x) / \int F(x') dx'$, tj. za normiranje takve raspodele veñoramo da znamo ono što pokušavamo da izračunamo. Neophodno je zadovoljiti dva (obično) protivrečna uslova: obezbediti da se funkcija f što manje menja na domenu integracije i istovremeno za funkciju p odabrati neku raspodelu iz koje znamo da generišemo brojeve. Postoji opšti metod za generisanje slučajnih brojeva iz proizvoljne raspodele, ako imamo generator uniformno raspodeljenih slučajnih brojeva (METROPOLIS algoritam). Međutim, treba optimizovati varijansu zajedno sa kompjutacionim vremenom po jednom koraku u simulaciji, jer u izrazu za grešku imamo i faktor $\frac{1}{\sqrt{N-1}}$. Pogodno je uvesti *efikasnost* simulacije kao

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\sigma_f^2 t_1}, \quad (36)$$

gde je t_1 vreme potrebno da se generiše jedan broj iz raspodele p i izračuna vrednost funkcije f za dobijeni broj. Tek se maksimiziranjem efikasnosti dobija optimalan algoritam.

6 MC simulacija LHO u spoljašnjem polju

Lagranžijan LHO u spoljašnjem polju dat je sa (24). Posle prelaska na imaginarno vreme, ako uzmemo u obzir granične uslove $q_i = 0$, $q_f = a$, path integral se svodi na

$$\begin{aligned} & \tilde{G}(a, T, j) = \\ & = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi\epsilon)^{N/2}} \exp \left\{ -\epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 + V \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (37)$$

gde je

$$V \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right)^2 + j \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right).$$

Kako je domen integracije za svaku od promenljivih ceo skup \mathbf{R} , a to ne može da obezbedi ni jedan generator slučajnih brojeva, prirodno je odabrati Gauss-ovu raspodelu za funkciju p iz dva razloga: ona se pojavljuje kao multiplikativni faktor u samoj funkciji čiji integral želimo da izračunamo, a takođe, ona veoma efikasno ograničava interval iz koga će se generisati slučajni brojevi. Koristili smo Box-Muller-ov metod za generisanje slučajnih brojeva iz Gauss-ove raspodele. Ovaj metod je detaljnije opisan u [2]. Naravno, bio nam je potreban i generator slučajnih brojeva uniformne raspodele. Koristili smo generator RAN3 opisan u [4]. Prvo smo ga testirali da bismo bili sigurni u njegove osobine koje su naveli autori [4]. Uradili smo test ekvidistribucije, serijski test, kao i runs-up test. Kod svih ovih testova zajedničko je da se od generisanih brojeva računa veličina koja bi trebalo da bude raspodeljena po χ^2 raspodeli, a rezultat testa je verovatnoća da se kod idealnog generatora slučajnih brojeva pojave one vrednosti testiranih veličina koje su se pojavile kod testiranog generatora. Na svim testovima RAN3 se pokazao kao vrlo dobar generator. Zatim smo testirali Box-Muller-ov metod istim testovima. Posebno smo proveravali serijske korelacije koje kod MC simulacija predstavljaju jedan od većih problema. Na sreću, ovde su bile vrlo slabe, tj. nije ih bilo potrebno otklanjati. Standardni test je pokazao da su zanemarljive autokorelacije čak i prvih suseda.

Posle ovih testova, napravljena je simulacija koja, posle smene u integralima (37) izvedene tako da koeficijenti uz članove $(-q_n^2)$ budu jednaki jedinici, kao funkciju raspodele koristi $p(q_n) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-q_n^2}$. Treba primetiti da se, zbog normiranja, dobijeni rezultat mora pomnožiti sa integralima svih funkcija raspodele, a ovde je to $(\sqrt{\pi})^{N-1}$. Ova prva simulacija nije davala preterano dobre rezultate: bila je spora i nije bilo moguće postići veliku tačnost zbog vremenskog ograničenja. Zatim smo linearne članove iz eksponenta iskoristili tako da je nova funkcija raspodele bila $p(q_n) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-(q_n+const)^2}$. To je ekvivalentno smeni kojom se sa lagranžijana LHO u spoljašnjem polju prelazi na lagranžijan LHO van spoljašnjeg polja. Ova simulacija je davala mnogo bolje rezultate, ali u veoma ograničenim intervalima parametara a, T, j . Naknadno smo shvatili da nam je simulacija ukazivala na značaj klasične trajektorije ovakvim ponašanjem. Naime, u prvom slučaju smo sve gausijane centrirali na koordinatni početak, a u drugom oko negativnog broja (jer je $const > 0$), dok je klasična trajektorija oblika $q(t) = A e^t + B e^{-t}$ gde su $A, B > 0$. Tako je konačno napravljen optimalan algoritam: za svaku promenljivu q_n gausijan je centriran na vrednost koju bi dala klasična trajektorija u trenutku t_n .

Simulacija je testirana za različite vrednosti parametara. Primećeno je da je slaganje najbolje za vrednosti oko koordinatnog početka. Očekivali smo da dobijemo δ funkciju (prema definiciji (1)), i zaista smo dobili vrlo velike vrednosti, koje se odlično slažu sa analitičkim rezultatima. U odnosu na prethodna dva pokušaja, intervali parametara su drastično povećani, a efikasnost je veća za nekoliko redova veličine. Dok je sa neefikasnom verzijom sve urađeno sa 10^6 iteracija i jedva su postignute (u vrlo uskim intervalima parametara) dve značajne cifre, usavršena verzija je sa 10^5 iteracija davala rezultate sa puno tačnih cifara (5-6). Nije u pitanju slučajnost, sve te cifre bile su reproducibilne, tj. nisu zavisile od početnog broja koji mora da se zada generatoru slučajnih brojeva (seed).

Razmotrićemo još jedno važno pitanje. Naša MC simulacija uvek računa konačan broj integrala, a analitička vrednost je limes $N \rightarrow \infty$, koji mi ne možemo da postignemo. Najviše što možemo da postignemo je 10-20 integrala. Na sreću, i ovo smo izbegli na vrlo efikasan način. Ako se prosledi račun sličan onome pri računanju path integrala za slobodnu česticu, može se uočiti da se pruža mogućnost za dobru korekciju na broj integrala. Kod slobodne čestice pošli smo od identiteta (8), a ovde polazimo od

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{(2\pi\epsilon)^{2/2}} \exp \left\{ -\frac{\epsilon}{2} \left[\left(\frac{q_2 - q_1}{\epsilon} \right)^2 + \left(\frac{q_1 - q_0}{\epsilon} \right)^2 + \left(\frac{q_2 + q_1}{2} \right)^2 + \left(\frac{q_1 + q_0}{2} \right)^2 \right] \right\} =$$

$$= \frac{\exp \left\{ \frac{\epsilon}{2} \left[\frac{\left(\frac{2}{\epsilon^2} - \frac{1}{2} \right)^2 (q_2 + q_0)^2}{\frac{2}{\epsilon^2} + \frac{1}{2}} - \left(\frac{1}{\epsilon^2} + \frac{1}{4} \right) (q_2^2 + q_0^2) \right] \right\}}{\sqrt{2\pi \left(2\epsilon + \frac{1}{2}\epsilon^3 \right)}}$$

Kao što se kod slobodne čestice pojavljuje faktor $n\epsilon$ koji u limesu daje T , ovde se pojavljuje faktor $n\epsilon + \frac{1}{2}\epsilon^3$, koji teži T , ali na različit način nego kod slobodne čestice. Ako se *koriguje* vreme zbog ovoga, onda smo obezbedili da i simulacije sa malim brojem integrala daju dobre rezultate. Štaviše, zaključili smo da je sasvim dovoljno uzeti $N = 2$, tj. računati samo jedan integral, za veoma širok interval parametara. I kad se računa više integrala, korekcija vremena T daje bolje rezultate, tj. manje integrala je potrebno uzeti u korigovanom algoritmu. U dodatku su dati grafici koji su dobijeni iz simulacije, kao i listing programa.

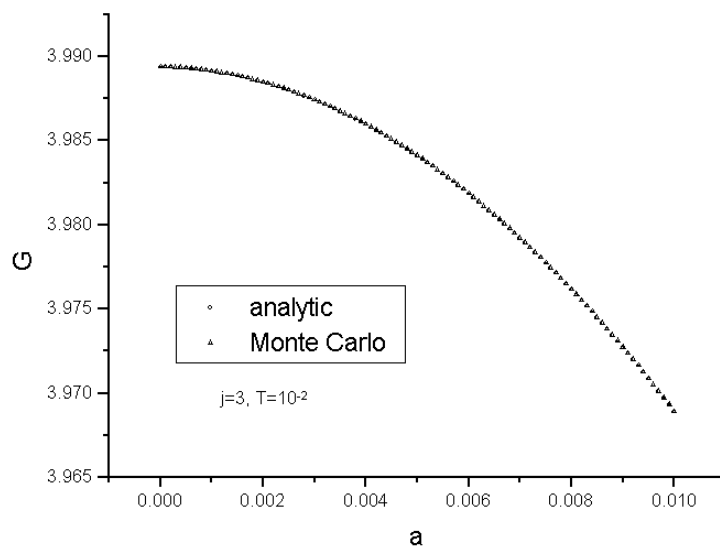
7 Zaključak

Razmotrili smo primenu Monte Carlo metoda u kvantnoj teoriji polja u $d=1$ dimenzija (kvantna mehanika) na primeru linearnog harmonijskog oscilatora u spoljašnjem polju. Odabrali smo integrabilni model zbog poređenja dobijenih rezultata sa analitičkim. Pokazali smo da formalizam koji koristi funkcionalne integrale odmah daje izraze koji su tipični za Monte Carlo metode. Dobili smo odlično slaganje sa analitičkim rezultatima za mali broj iteracija ($\sim 10^5 - 10^6$) kada smo funkciju raspodele odabrali tako da ima maksimum na klasičnoj trajektoriji. Algoritam koji smo koristili nije ni na koji način ograničen na linearni harmonijski oscilator, već se može sa jednakim uspehom primeniti na proizvoljne objekte kvantne teorije polja.

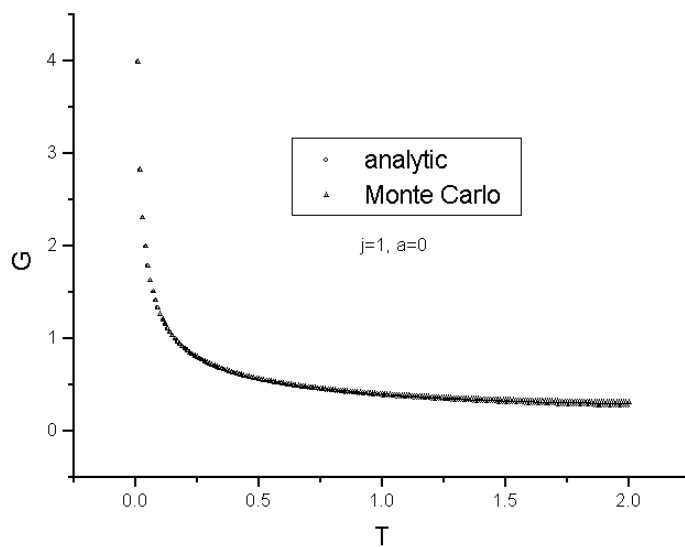
8 Literatura

- [1] Feynman R. P., Hibbs A. R., *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [2] Kalos M. H., Whitlock P. A., *Monte Carlo methods*, Vol. 1: Basics, John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [3] Herbut F., *Kvantna mehanika za istraživače*, PMF, Beograd, 1983.
- [4] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P., *Numerical Recipes in Fortran, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1995.
- [5] Koonin S. E., Meredith D. C., *Computational Physics*, Benjamin-Cummings, New York, 1986. (Fortran version, Addison-Wesley, 1990.)

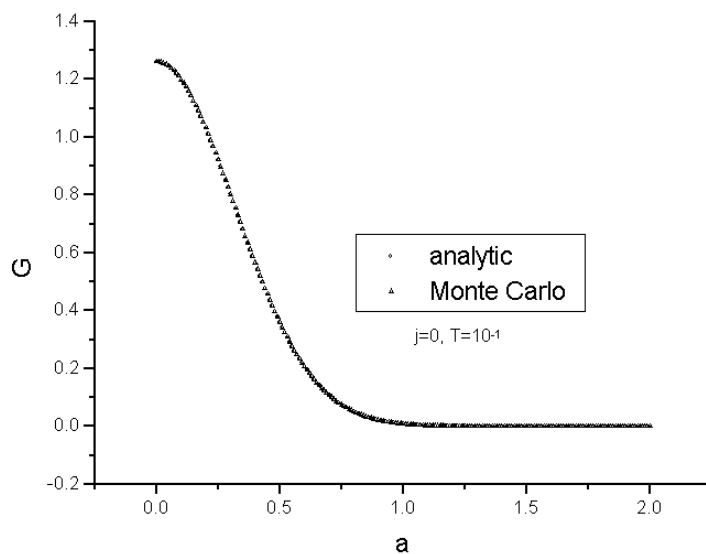
9 Dodatak



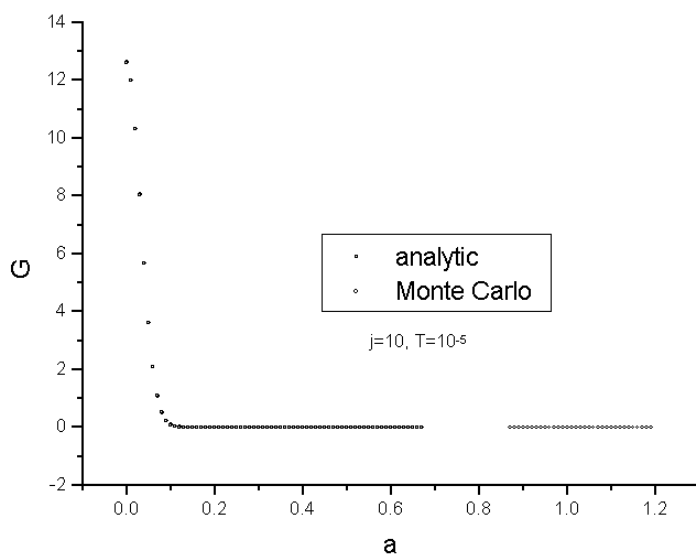
Slika 1: Green-ova funkcija u zavisnosti od koordinate krajnje tačke za $j = 3$, $T = 10^{-2}$, $N = 2$



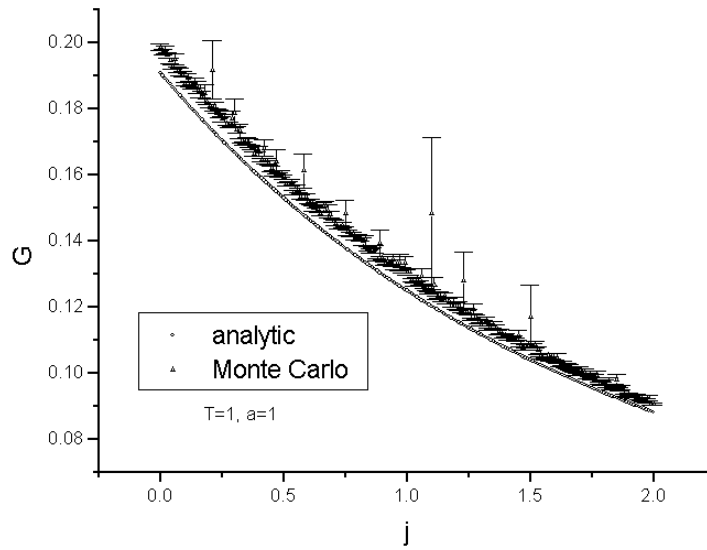
Slika 2: Green-ova funkcija u zavisnosti od vremena propagacije za $j = 1$, $a = 0$, $N = 2$



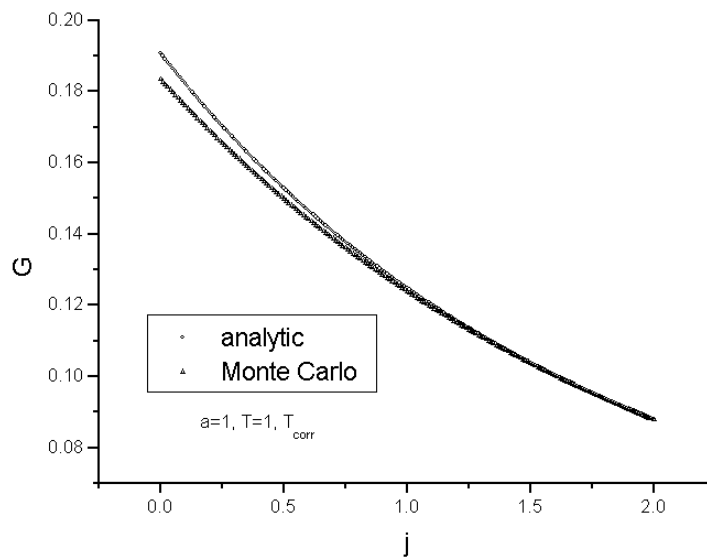
Slika 3: Green-ova funkcija u zavisnosti od koordinate krajnje tačke za $j = 0, T = 10^{-1}, N = 2$



Slika 4: Green-ova funkcija u zavisnosti od koordinate krajnje tačke za $j = 10, T = 10^{-5}, N = 2$



Slika 5: Green-ova funkcija u zavisnosti od spoljašnje struje za $T = 1$, $a = 1$, $N = 2$



Slika 6: Green-ova funkcija u zavisnosti od spoljašnje struje dobijena korigovanjem vremena za $T = 1$, $a = 1$, $N = 2$