

Gitter-Monte-Carlo-Simulation des quantenmechanischen Pfadintegrals

Joshua Berlin, Marc Wagner

`berlin@th.physik.uni-frankfurt.de`, `mwagner@th.physik.uni-frankfurt.de`

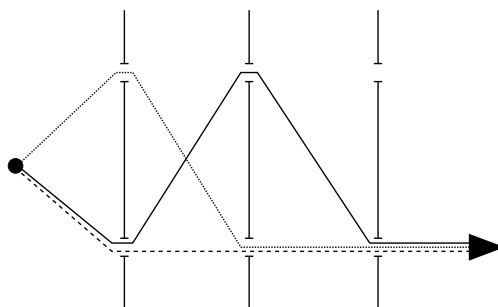
Goethe-Universität Frankfurt am Main

2. Oktober 2014

1 Pfadintegrale in der QM

1.1 Einführung und Motivation

- Pfadintegrale: Formalismus zur Quantisierung, alternativ zur kanonischen Quantisierung (Kommutatorrelationen, Schrödinger-Gleichung, etc.).
- Häufig einfachere und systematischere Gestaltung von analytischen Rechnungen insbesondere in der Quantenfeldtheorie (QFT).
- Eignet sich (im Gegensatz zum kanonischen Formalismus) zur numerischen Umsetzung (→ Gitterrechnungen bzw. Gitterfeldtheorie).
- Grundidee/physikalische Motivation: Doppelspaltexperiment.
 - Klassisches Teilchen geht entweder durch den einen oder den anderen Spalt.
 - Quantenmechanisches (QM) Teilchen “geht gleichzeitig durch beide Spalte”.
 - Iterieren ...



◇ n Doppelspalte $\rightarrow 2^n$ Wege

◇ bei unendlich vielen “Unendlichspalten” nimmt ein Teilchen gleichzeitig alle denkbaren Pfade

- Am Ende resultiert der Pfadintegralformalismus: Ein QM Teilchen bewegt sich gleichzeitig auf allen denkbaren Trajektorien.
- Originalarbeit: [1] (R. P. Feynman, 1948).

1.2 Pfadintegrale und Vakuumerwartungswerte

- $|\Omega\rangle$: Vakuumzustand (QFT) bzw. Grundzustand (QM).
- In der QM und der QFT sind Vakuumerwartungswerte (VEV) $\langle \Omega | \dots | \Omega \rangle$ von großem Interesse, da zahlreiche Observablen (z.B. Energiedifferenzen, Hadronmassen, Zerfallskonstanten, Formfaktoren) durch VEVs ausgedrückt werden können.
- VEVs wiederum können durch Pfadintegrale ausgedrückt werden:

– Man kann z.B.

$$\langle \Omega | x(\tau_2) x(\tau_1) | \Omega \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{Z} \int_{y(-\tau/2)=x_1}^{y(+\tau/2)=x_2} Dy y(\tau_2) y(\tau_1) e^{-S_E[y]} \quad (1)$$

$$Z = \int_{y(-\tau/2)=x_1}^{y(+\tau/2)=x_2} Dy e^{-S_E[y]}, \quad (2)$$

zeigen.

* Dabei muss $\tau_2 > \tau_1$ erfüllt sein.

* $x(\tau) \equiv e^{H\tau} x(0) e^{-H\tau}$ (τ wird als Euklidische Zeit bezeichnet; sie unterscheidet sich von der physikalischen Zeit t im Wesentlichen durch ein i , d.h. $x(t) \equiv e^{-iHt} x(0) e^{+iHt}$, wie aus der QM bekannt).

* Das eigentliche Pfadintegral ist

$$\int_{y(-\tau/2)=x_1}^{y(+\tau/2)=x_2} Dy \equiv \prod_{\tilde{\tau} \in (-\tau/2, +\tau/2)} dy(\tilde{\tau}). \quad (3)$$

$\int Dy$ bezeichnet eine Summe bzw. ein Integral über alle denkbaren Bahnkurven $x(\tilde{\tau})$ mit Anfangspunkt $y = x_1$ zum Zeitpunkt $\tilde{\tau} = -\tau/2$ und Endpunkt $y = x_2$ zum Zeitpunkt $\tilde{\tau} = +\tau/2$. Für jeden Zeitpunkt $\tilde{\tau} \in (-\tau/2, +\tau/2)$ muss über jede mögliche Position des durch $x(\tilde{\tau})$ beschriebenen Teilchens integriert werden, also ein ordinäres eindimensionales Integral $\int dx(\tilde{\tau})$ ausgeführt werden. Das Pfadintegral ist damit eine Hintereinanderausführung von unendlich vielen eindimensionalen Integralen, d.h. ein unendlich dimensionales Integral.

* S_E ist die Euklidische Wirkung ist, die sich von der aus der klassischen Mechanik bekannten Wirkung um ein Vorzeichen in der potentiellen Energie unterscheidet,

$$S_E[y] \equiv \int_{-\tau/2}^{+\tau/2} d\tilde{\tau} \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right). \quad (4)$$

I.d.R. wählt man die RBS $x_1 = x_2 = 0$ und verwendet dafür und für den Limes $\tau \rightarrow \infty$ die abkürzende Schreibweise

$$\langle \Omega | x(\tau_2) x(\tau_1) | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int Dy y(\tau_2) y(\tau_1) e^{-S_E[y]}. \quad (5)$$

– Der Ausdruck (1) gilt nicht nur für $x(\tau_2)x(\tau_1)$, sondern auch für Operatoren $O_2(x(\tau_2))$ und $O_1(x(\tau_1))$, die Funktionen von x sind. Z.B.

$$\langle \Omega | (x(\tau_2))^2 (x(\tau_1))^2 | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int Dy (y(\tau_2))^2 (y(\tau_1))^2 e^{-S_E[y]} \quad (6)$$

bzw. allgemein

$$\langle \Omega | O_2(x(\tau_2)) O_1(x(\tau_1)) | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int Dy O_2(y(\tau_2)) O_1(y(\tau_1)) e^{-S_E[y]}. \quad (7)$$

- Weitere Details und entsprechende Herleitungen können bei Interesse z.B. in [2, 3, 4] nachgelesen werden.

1.3 Physikalische Anwendung: Berechnung der Energiedifferenz von Grundzustand und erstem angeregten Zustand beim harmonischen Oszillator mit Hilfe von Pfadintegralen

- Parität ist Symmetrie des harmonischen Oszillators (HO; und anderer spiegelsymmetrischer Potentiale, d.h. Potentiale, die $V(+x) = V(-x)$ erfüllen), da $[H, P] = 0$; Energieeigenzustände können damit nach ihrer Parität ($P = +$ oder $P = -$) klassifiziert werden.
- $|j\rangle$ und $|k\rangle$ bezeichnen in der folgenden Gleichung Energieeigenzustände des HOs mit identischer Parität; dann gilt

$$\langle j|x|k\rangle = -\langle j|P^\dagger x P|k\rangle = -P^2 \langle j|x|k\rangle = -\langle j|x|k\rangle, \quad (8)$$

woraus $\langle j|x|k\rangle = 0$ folgt.

- Korrelationsfunktion von x :

$$\langle \Omega|x(\tau)x(0)|\Omega\rangle = \langle \Omega|e^{+H\tau}x(0)e^{-H\tau}x(0)|\Omega\rangle = \sum_j \left| \langle \Omega|x|j\rangle \right|^2 e^{-(E_j - E_\Omega)\tau}; \quad (9)$$

da $\langle \Omega|x|j\rangle = 0$, falls $|j\rangle$ die gleiche Parität wie $|\Omega\rangle$ ($P = +$) hat, kann \sum_j auf Energieeigenzustände beschränkt werden, die umgekehrte Parität ($P = -$) haben; $|0\rangle$ bezeichnet damit den niedrigsten Energieeigenzustand mit $P = -$ (den ersten angeregten Zustand des HOs); es gilt

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle \Omega|x(\tau)x(0)|\Omega\rangle = \left| \langle \Omega|x|0\rangle \right|^2 e^{-(E_0 - E_\Omega)\tau}. \quad (10)$$

- Die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem niedrigsten Energieeigenzustand umgekehrter Parität $\Delta E \equiv E_0 - E_\Omega$ (die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand) kann aus dem exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion von x für große Zeiten τ bestimmt werden. Hierzu kann man wie folgt vorgehen:
 - Bestimme $\langle \Omega|x(\tau)x(0)|\Omega\rangle$ durch Berechnung des Pfadintegrals (1). Dies geschieht i.d.R. numerisch, in dem durch sogenannte Monte-Carlo-Simulation (siehe Kapitel 2) einige Werte von $\langle \Omega|x(\tau)x(0)|\Omega\rangle$ für große τ ermittelt werden.
 - Fitte $Ae^{-\Delta E\tau}$ an die erhaltenen numerischen Ergebnisse (Fitparameter A und ΔE) und extrahiere so die Energiedifferenz ΔE .
- Dieses Vorgehen entspricht der Berechnung von Hadron-Massen in der QFT/QCD: Berechne die Zweipunktfunktion eines geeigneten Operators (zusammengesetzt aus Quark- und Gluon-Feldoperatoren), der analog zu $x|\Omega\rangle$ Energieeigenzustände aus einem durch Quantenzahlen ausgezeichneten Sektor anregt (für das Proton z.B. $I = 1/2$, $J = 1/2$, $P = +$); die gesuchte Hadron-Masse kann dann aus dem exponentiellen Abfall für große Zeitseparationen τ abgelesen werden.

2 Numerische Berechnung von Pfadintegralen (“Gitterrechnungen”)

2.1 Gitterregularisierung QM Pfadintegrale

- Pfadintegrale in der QM bzw. QFT können als Grenzwerte endlich dimensionaler bzw. abzählbar unendlich dimensionaler Integrale definiert werden, z.B.

$$\int Dy \equiv \lim_{a \rightarrow 0} \int \prod_{\tau \in a\mathbb{Z}} dy(\tau). \quad (11)$$

Dies ist äquivalent zu (3), jedoch mathematisch sauberer definiert. Die Zeit wird dabei mit einem regelmäßigen Gitter diskretisiert, d.h. $\tau \in a\mathbb{Z}$ an Stelle von $\tau \in \mathbb{R}$, wobei a der Gitterabstand ist.

- Numerische Gitterrechnungen:
 - Führe sämtliche Rechnungen mit endlichem (aber feinem) Gitterabstand a aus (a hinreichend klein, aber nicht $a \rightarrow 0$).
 - Führe sämtliche Rechnungen mit endlich ausgedehnter periodischer Zeitrichtung aus (Ausdehnung T hinreichend groß, aber nicht $T \rightarrow \infty$). T wird als Vielfaches von a gewählt. Damit ist die Anzahl der Gitterpunkte $N \equiv T/a$. Periodizität impliziert $y(\tau) = y(\tau + T)$.
 - Bilde erst am Ende durch geeignete Extrapolationen die Limes $a \rightarrow 0$ (“Kontinuumslimes”) und $T \rightarrow \infty$ (“Infinite Volume Limes”).
- Mögliche Gitterdiskretisierungen von Integration und Differentiation:

- Integration:

$$\int d\tau F(\tau) \rightarrow \sum_{\tau} aF(\tau). \quad (12)$$

- Differentiation:

- * Vorwärts-Gitterableitung:

$$\frac{d}{d\tau} F(\tau) \rightarrow \frac{F(\tau + a) - F(\tau)}{a}. \quad (13)$$

- * Rückwärts-Gitterableitung:

$$\frac{d}{d\tau} F(\tau) \rightarrow \frac{F(\tau) - F(\tau - a)}{a}; \quad (14)$$

im Limes $a \rightarrow 0$ sind Vorwärts- und Rückwärts-Gitterableitung identisch; dieses Beispiel zeigt, dass Gitterdiskretisierungen nicht eindeutig sind.

- Euklidische Wirkung:

$$S_E[y] = \int d\tau \left(\frac{m}{2} (\dot{y}(\tau))^2 + V(y(\tau)) \right) \rightarrow \sum_{\tau} a \left(\frac{m}{2} \left(\frac{y(\tau + a) - y(\tau)}{a} \right)^2 + V(y(\tau)) \right). \quad (15)$$

- Pfadintegral:

$$\int Dy \equiv \int \prod_{n=0}^{N-1} dy(na). \quad (16)$$

dies ist ein endlich dimensionales Integral, das sich zur numerischen Umsetzung eignet.

2.2 Monte-Carlo-Simulation von Pfadintegralen

- Betrachte im Folgenden das gitterregularisierte eindimensionale QM Pfadintegral, wie im vorherigen Unterkapitel beschrieben (Anzahl der Gitterpunkte N , Gitterabstand a , $T = Na$ periodische Randbedingungen $x(\tau + T) \equiv x(\tau)$):

$$S_E[y] = \sum_{\tau} a \left(\frac{m}{2} \left(\frac{y(\tau + a) - y(\tau)}{a} \right)^2 + V(y(\tau)) \right) \quad (17)$$

$$\langle \Omega | O_2(x(\tau_2)) O_1(x(\tau_1)) | \Omega \rangle \approx C(\tau_2, \tau_1) \equiv \frac{1}{Z} \prod_{n=0}^{N-1} dy(na) O_2(y(\tau_2)) O_1(y(\tau_1)) e^{-S_E[y]} \quad (18)$$

wobei $\tau = na$ und $\tau_1, \tau_2 \in \{0, a, 2a, \dots, (N-1)a\}$.

- Ist eine naive numerischen Auswertung des endlich-dimensionalen Integrals (18) möglich?
 - Z.B. $N = 100$ Gitterpunkte.
 - Diskretisierung der $y(0)$ -, $y(a)$ -, $y(2a)$ -, ... $y((N-1)a)$ -Achsen mit jeweils 100 Abtastpunkten (numerische Auswertung des Integrals mit Hilfe von "Treppenstufen" oder ähnlicher Verfahren).
 - Damit 100^{100} Auswertungen des Integranden erforderlich ... von keinem Computer zu schaffen.
- Ausweg: Numerische Auswertung bzw. Abschätzung von (18) mit stochastischen Methoden, sogenannten Monte-Carlo-Simulationen; Ergebnis kommt mit statistischem Fehler, ist aber unbiased.
- Monte-Carlo-Algorithmus: Verfahren, das Pfade $y_j(t)$ (in der QM) gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung e^{-S_E}/Z generiert; für Erwartungswerte, z.B. für Gitter-2-Punkt-Funktionen, gilt dann

$$C(\tau_2, \tau_1) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M O_2(y_j(t_2)) O_1(y_j(t_1)) \quad (19)$$

bzw. für tatsächliche numerische Rechnungen mit einer endlichen Menge von N Pfaden

$$C(\tau_2, \tau_1) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M O_2(y_j(t_2)) O_1(y_j(t_1)) \pm \text{statistischer Fehler}, \quad (20)$$

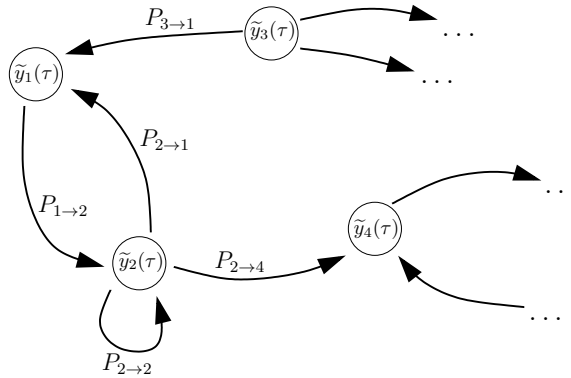
wobei der statistische Fehler mit aus der Experimentalphysik bekannten Standardtechniken bestimmt werden kann; i.d.R. genügt eine kleine Menge ($M \approx 100 \dots 1\,000\,000$) von Pfaden, die eine repräsentative Menge bilden.

- Monte-Carlo-Simulationen basieren auf Markov-Ketten:

- Eine Markov-Kette besteht aus sogenannten Zuständen, die den möglichen Pfaden entsprechen, also mit $\tilde{y}_1(\tau)$, $\tilde{y}_2(\tau)$, $\tilde{y}_3(\tau)$, etc. indiziert werden, sowie Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{j \rightarrow k}$ für einen Übergang von Zustand $\tilde{y}_j(\tau)$ zu Zustand $\tilde{y}_k(\tau)$, für die

$$\sum_k p_{j \rightarrow k} = 1 \quad (21)$$

gelten muss.



- Sprünge von Zustand zu Zustand gemäß der Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{j \rightarrow k}$.
- Konstruiere $p_{j \rightarrow k}$ so, dass nach hinreichend langer Laufzeit unabhängig vom Anfangszustand

$$p(\tilde{y}_j(\tau)) = \frac{e^{-S[\tilde{y}_j(\tau)]}}{Z} \quad (22)$$

gilt, wobei $p(\tilde{y}_j(\tau))$ die Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass sich die Markov-Kette im Zustand $\tilde{y}_j(\tau)$ befindet; dafür muss für $p_{j \rightarrow k}$

$$\sum_j p(\tilde{y}_j(\tau)) p_{j \rightarrow k} = p(\tilde{y}_k(\tau)) \quad (23)$$

bzw. nach Einsetzen von (22)

$$\sum_j e^{-S[\tilde{y}_j(\tau)]} p_{j \rightarrow k} = e^{-S[\tilde{y}_k(\tau)]} \quad (24)$$

gelten.

- Häufig ist es einfacher, Monte-Carlo-Algorithmen zu konstruieren, die an Stelle von (23) die stärkere Forderung der “Detailed Balance” erfüllen:

$$p(\tilde{y}_j(\tau)) p_{j \rightarrow k} = p(\tilde{y}_k(\tau)) p_{k \rightarrow j}; \quad (25)$$

Beweis, dass (25) Gleichung (23) bedingt: Summiere (25) über j ,

$$\sum_j p(\tilde{y}_j(\tau)) p_{j \rightarrow k} = \sum_j p(\tilde{y}_k(\tau)) p_{k \rightarrow j} = p(\tilde{y}_k(\tau)) \underbrace{\sum_j p_{k \rightarrow j}}_{=1} = p(\tilde{y}_k(\tau)). \quad (26)$$

- Metropolis-Algorithmus:

- Ein einfacher vielseitig einsetzbarer Monte-Carlo-Algorithmus; häufig jedoch sehr langsam, d.h. eine repräsentative Menge von Pfaden $y_j(\tau)$ mit dem Metropolis-Algorithmus zu generieren benötigt deutlich mehr Rechenzeit, als mit anderen spezielleren Monte-Carlo-Algorithmen.
- n -ter Metropolis Schritt:

- * Schlage zufällig vom aktuellen Pfad $y_m(\tau) \equiv \tilde{y}_j(\tau)$ ausgehend einen neuen Pfad $\tilde{y}_k(\tau)$ mit Wahrscheinlichkeit $W_{j \rightarrow k}$ vor; hierbei muss unabhängig von m $W_{j \rightarrow k} = W_{k \rightarrow j}$ erfüllt sein (i.d.R. einfach zu erfüllen); Beispiel: Wähle zufällig einen Gitterpunkt $\tilde{\tau}$ und verändere den Wert des Pfads an diesem Gitterpunkt von $y(\tilde{\tau})$ zu $y(\tilde{\tau}) + \delta$, wobei δ zufällig im Intervall $[-\Delta y, +\Delta y]$ gewählt wird.
- * Akzeptiere den neuen Pfad mit Wahrscheinlichkeit $\min(1, \exp(-(S[\tilde{y}_k(\tau)] - S[\tilde{y}_j(\tau)])))$, d.h. setze $y_{m+1}(\tau) \equiv \tilde{y}_k(\tau)$, andernfalls behalte den alten Pfad, d.h. setze $x_{m+1}(\tau) \equiv \tilde{y}_j(\tau)$.
- * Nachweis, dass (25) erfüllt ist: Einsetzen der entsprechenden Wahrscheinlichkeiten führt auf

$$\begin{aligned} & \frac{e^{-S[\tilde{y}_j(\tau)]}}{Z} W_{j \rightarrow k} \min\left(1, \exp\left(-\left(S[\tilde{y}_k(\tau)] - S[\tilde{y}_j(\tau)]\right)\right)\right) = \\ & = \frac{e^{-S[\tilde{y}_k(\tau)]}}{Z} W_{k \rightarrow j} \min\left(1, \exp\left(-\left(S[\tilde{y}_j(\tau)] - S[\tilde{y}_k(\tau)]\right)\right)\right); \end{aligned} \quad (27)$$

Verwenden von $W_{j \rightarrow k} = W_{k \rightarrow j}$ liefert

$$\begin{aligned} & \min\left(\exp\left(-S[\tilde{y}_j(\tau)]\right), \exp\left(-S[\tilde{y}_k(\tau)]\right)\right) = \\ & = \min\left(\exp\left(-S[\tilde{y}_k(\tau)]\right), \exp\left(-S[\tilde{y}_j(\tau)]\right)\right) \end{aligned} \quad (28)$$

und zeigt damit, dass Detailed Balance erfüllt ist, d.h. der Metropolis-Algorithmus Pfade gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung $e^{-S[y]}/Z$ generiert.

- Damit der Metropolis-Algorithmus möglichst schnell eine repräsentative Menge von Pfaden $y_j(\tau)$ generiert muss Folgendes gelten:
 - (A) Der neu vorgeschlagene Pfad $\tilde{y}_k(\tau)$ sollte sich möglichst stark von $\tilde{y}_j(\tau)$ unterscheiden (\rightarrow schnelle Bewegung durch den Raum aller Pfade).
 - (B) Der neu vorgeschlagene Pfad $\tilde{y}_k(\tau)$ darf nicht zu oft abgelehnt werden, sonst langsame Bewegung durch den Raum aller Pfade; impliziert ähnliche Wirkung von $\tilde{y}_j(\tau)$ und $\tilde{y}_k(\tau)$ und damit häufig starke Ähnlichkeit von $\tilde{y}_j(\tau)$ und $\tilde{y}_k(\tau)$.
 Mit dem Vorschlagen der neuen Pfade $\tilde{y}_k(\tau)$ sollte ein Kompromiss zwischen (A) und (B) realisiert werden, z.B. durch geeignete Wahl des Parameters Δy .

2.3 Beispiel: HO, numerische Berechnung von Differenzen von Energieeigenwerten

- Betrachte den anharmonischen Oszillator

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (29)$$

- Ziel: Bestimme $\Delta E = E_0 - E_\Omega$ mit Hilfe einer numerischen Gitterrechnung, wobei E_0 die Energie des niedrigsten Energieeigenzustands mit $P = -$ bezeichnet (Grundzustand $|\Omega\rangle$ hat $P = +$).

- **Schritt 1:**

Drücke alle dimensionsbehafteten Größen in Einheiten des Gitterabstands a aus, d.h.

$\hat{a} = a/a = 1$, $\hat{x} = x/a$, $\hat{y} = y/a$, $\hat{\tau} = \tau/a$, ... ($\hbar = c = 1$, also haben Längen und Zeiten gleiche Einheiten, etc.); übliches Vorgehen bei Gitterrechnungen; falls gewünscht, können am Ende dimensionsbehaftete Größen in einer speziellen physikalischen Einheit, z.B. Sekunden, ausgedrückt werden, indem man den Gitterabstand entsprechend setzt.

- **Schritt 2:**

Generiere Pfade $\hat{y}_j(\hat{\tau})$ mittels einer Monte-Carlo-Simulation, hier Metropolis-Algorithmus:

- Verwende z.B. Parameter

$$* N = \hat{T} = 64, \hat{m} = ma = 0.125, \hat{\omega} = \omega a = 0.125$$

(Richtlinie für die Wahl sinnvoller Parameter: Die inverse zu extrahierende Energiedifferenz $1/(\hat{E}_0 - \hat{E}_\Omega) \approx 1/\hat{\omega} = 8.0$ [hat Einheit Länge] sollte sowohl kleiner als das Gitter sein [$1/(\hat{E}_0 - \hat{E}_\Omega) \approx 8.0 \ll \hat{T} = 64$] als auch größer als der Gitterabstand [$1/(\hat{E}_0 - \hat{E}_\Omega) = 8.0 \gg \hat{a} = 1$]).

- Starte mit zufälligem “heißen” Pfad, $\hat{y}(\hat{\tau}) \in [-5.0, +5.0]$; 1 000 Thermalisierungssweeps (jeder Gitterpunkt wird einmal verändert), um das System ins Gleichgewicht zu bringen, 1 000 000 weitere Sweeps ($\Delta\hat{x}/a = 6.0$, liefert etwa eine Akzeptanzrate von 50%, was ein guter Erfahrungswert für eine schnelle Bewegung durch den Raum aller Pfade ist), jeder 10-te Pfad wird zur Observablenberechnung verwendet.

- Abbildung 1 zeigt die Thermalisierung während der Monte-Carlo-Simulation; das System scheint nach wenigen Schritten im Gleichgewicht zu sein, die 1 000 Thermalisierungssweeps sind also sehr vorsichtig gewählt.

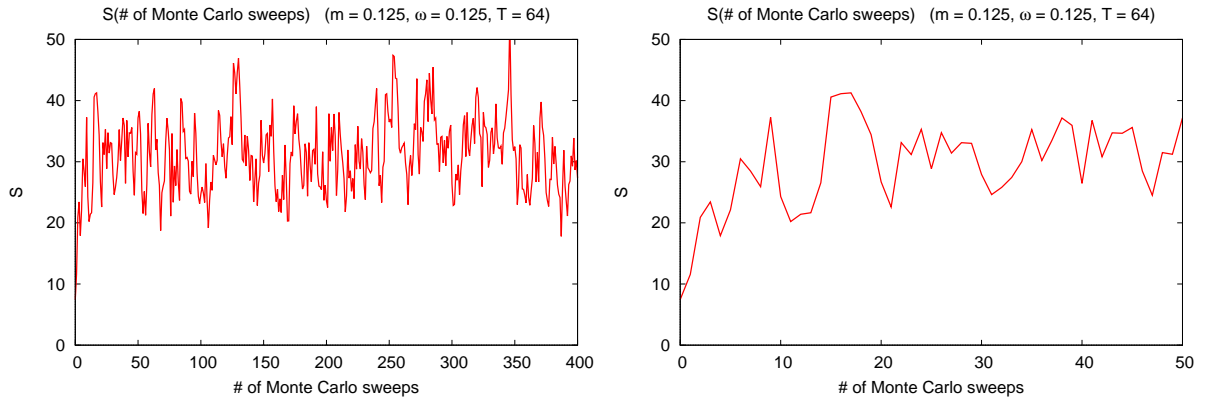


Abbildung 1: S als Funktion der Anzahl der Monte-Carlo-Sweeps ($\hat{\lambda} = 0.0$).

- **Schritt 3:**

Berechne die Korrelationsfunktion von x ,

$$\langle \Omega | \hat{x}(\hat{\tau}_2) \hat{x}(\hat{\tau}_1) | \Omega \rangle \approx C(\hat{\tau}_2, \hat{\tau}_1) \equiv \frac{1}{Z} \prod_{n=0}^{N-1} d\hat{y}(n) \hat{y}(\hat{\tau}_2) \hat{y}(\hat{\tau}_1) e^{-S_E[\hat{y}]} \quad (30)$$

via (20); Abbildung 2 (links) zeigt das numerische Ergebnis.

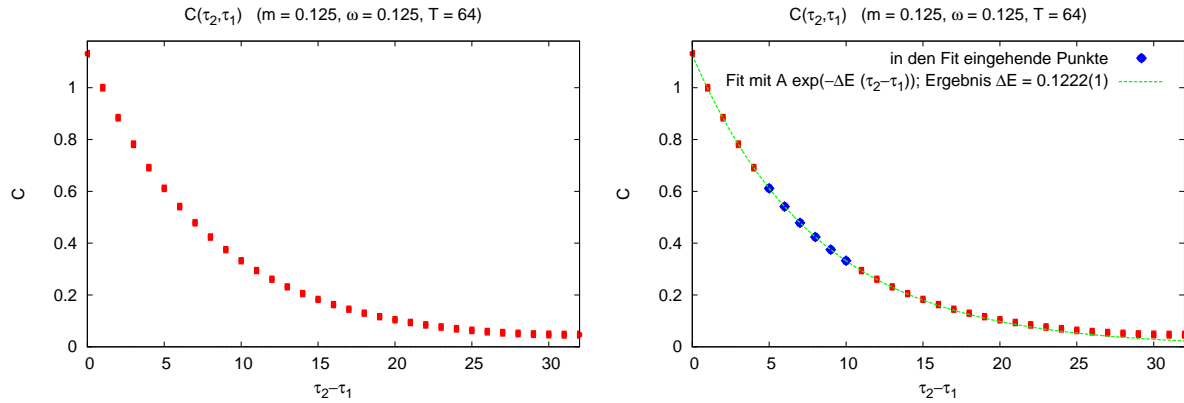


Abbildung 2: C als Funktion von $\hat{\tau}_2 - \hat{\tau}_1$ (links); Fit mit $Ae^{-\Delta\hat{E}(\hat{\tau}_2 - \hat{\tau}_1)}$.

• **Schritt 4:**

- Fitte $Ae^{-\Delta\hat{E}(\hat{\tau}_2 - \hat{\tau}_1)}$ an die numerischen Ergebnisse für $C(\hat{\tau}_2, \hat{\tau}_1)$ (Fitparameter A und $\Delta\hat{E}$) um die gesuchte Energiedifferenz $\Delta E = \Delta\hat{E}/a$ zu extrahieren (siehe Abbildung 2 (rechts)).
- Numerisches Ergebnis für $\Delta\hat{E}$: $\Delta\hat{E} = 0.1221 \pm 1$; die Abweichungen vom analytischen Ergebnis $\Delta E = \omega$ liegen nicht im Rahmen des statistischen Fehlers und liegen in systematischen Fehlerquellen begründet (endliches a und T).

• **Schritt 5:**

Extrapoliere mit Hilfe numerischer Ergebnisse für $\Delta\hat{E}$ für verschiedene Werte von a (also verschieden feine Gitterabstände) und T (also verschieden große periodische Zeitausdehnungen) ins Kontinuum und zu unendlicher Zeitausdehnung, d.h. zu $a = 0$ und $T = \infty$, um Ergebnisse frei von systematischen Fehlern zu erhalten (hier nicht gemacht bzw. gezeigt).

Literatur

- [1] R. P. Feynman, "Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics," *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- [2] S. Lottini, O. Philipsen and M. Wagner, "Quantenfeldtheorie II," Vorlesungsskript, Goethe-Universität Frankfurt am Main, Sommersemester 2012. Springer (1988).
- [3] L. H. Ryder, "Quantum field theory," Cambridge University Press.
- [4] H. J. Rothe, "Lattice gauge theories: an introduction," World Scientific Lecture Notes in Physics.