

Feynman pályaintegrál közelítése Metropolis algoritmussal

Nagy Dávid

számítógépes szimulációk II. beadandó

A pályaintegrál Feynman féle értelmezése

A pályaintegrál Feynman féle értelmezése

posztulátumok

|

$$P(\text{esemény}) = |\text{valószínűségi amplitúdó}|^2$$

||

$$P(\text{esemény}) = \left| \sum_{\forall \text{ pálya}} \text{járulék} \right|^2$$



$$P(\text{esemény}) = \left| \sum_{\forall \text{ pálya}} e^{i \frac{S[b,a]}{\hbar}} \right|^2$$



$$P(\text{esemény}) = \left| \sum_{\forall \text{ pálya}} e^{i \frac{S[b,a]}{\hbar}} \right|^2$$

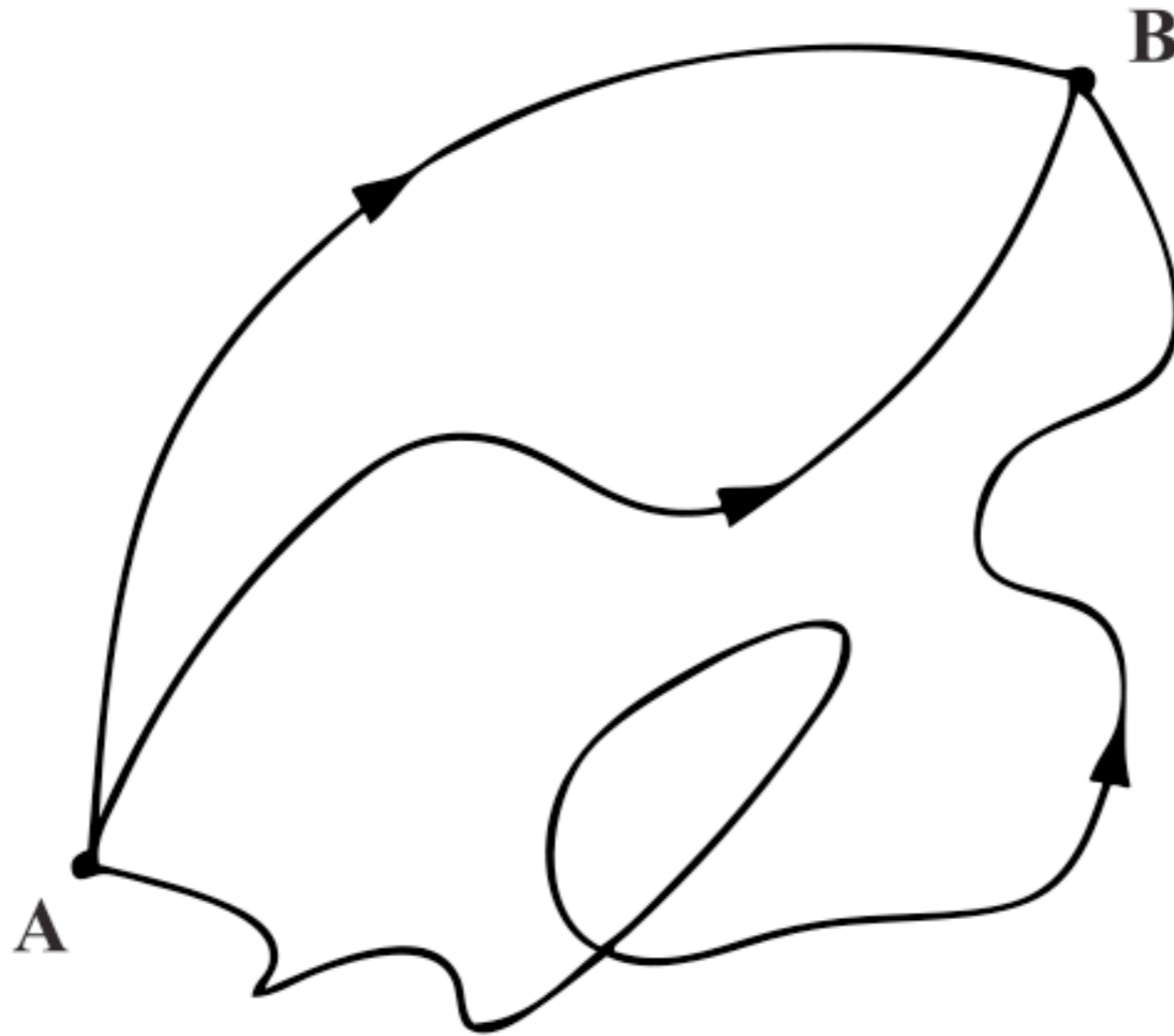
propagátor

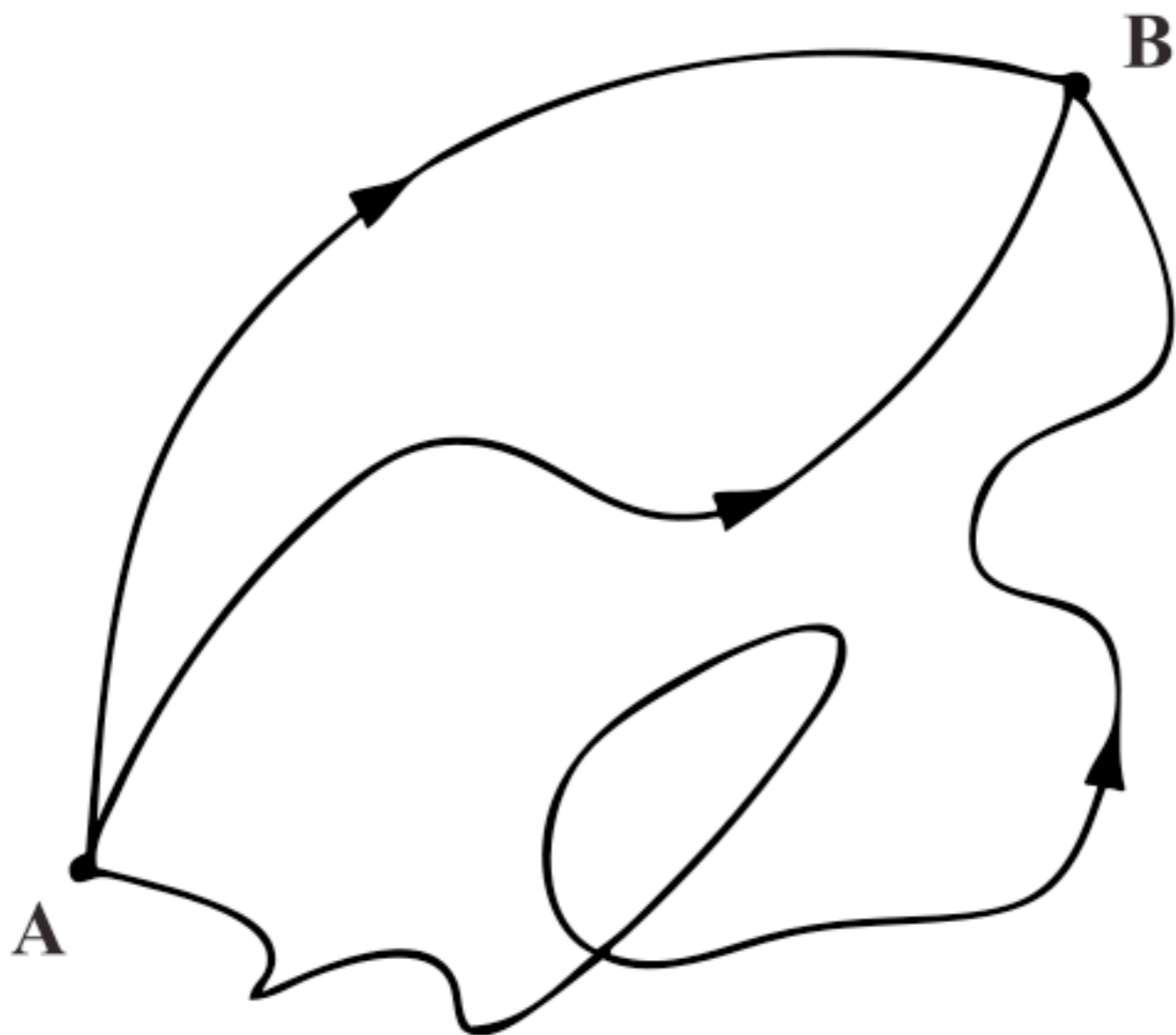


propagátor

$$G(b, a) = \sum_{\forall \text{ pálya}} e^{i \frac{S[b, a]}{\hbar}}$$

$$G(b, a) = \sum_{\forall \text{ pálya}} e^{i \frac{S[b, a]}{\hbar}}$$





$$\psi(x_b, t_b) = \int dx_a G(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a, t_a)$$

példa:
szabad részecskére

$$G(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_b - t_a)}} e^{i \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}} .$$

Kapcsolat a klasszikus mechanikával

$$G(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_b - t_a)}} e^{i \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}}.$$

Hamilton-elv: extrémális

Kapcsolat a klasszikus mechanikával

$$G(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_b - t_a)}} e^{i \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}}.$$

$\hbar \rightarrow 0$ határeset \longrightarrow Hamilton-elv: \square extrémális

Alapállapotú hullámfüggvény kifejezése G -vel

Alapállapot hullámfüggvény kifejezése G-vel

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{E_0 \tau} G(x, -i\tau; x_0, 0)$$

Alapállapot hullámfüggvény kifejezése G-vel

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{E_0 \tau} G(x, -i\tau; x_0, 0)$$



kiterjesztés negatív imaginárius időre

Alapállapot hullámfüggvény kifejezése G-vel

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{E_0 \tau} G(x, -i\tau; x_0, 0)$$

kiterjesztés negatív imaginárius időre

$$G(x, -i\tau; x_0, 0) = \int dx_1 \dots dx_{N-1} e^{\int_0^\tau H(\tau') d\tau'}$$

$$G(x, -i\tau; x_0, 0) = \int dx_1 \dots dx_{N-1} e^{\int_0^\tau H(\tau') d\tau'}$$



az integrált összegként értelmezzük
téridő rácson

$$G(x, -i\tau; x_0, 0) = \int dx_1 \dots dx_{N-1} e^{\int_0^\tau H(\tau') d\tau'}$$

az integrált összegként értelmezzük
téridő rácson

végtelen tagú összeg

$$G(x, -i\tau; x_0, 0) = \int dx_1 \dots dx_{N-1} e^{\int_0^\tau H(\tau') d\tau'}$$

az integrált összegként értelmezzük
téridő rácson

végtelen tagú összeg

sztochasztikus
közelítő algoritmus

Metropolis algoritmus

Metropolis algoritmus

MCMC módszer

Metropolis algoritmus

MCMC módszer

Olyan Markov láncot konstruálunk, amelynek az egyensúlyi eloszlása a kívánt $\pi(x)$ eloszlás. Ezután a Markov lánc egymást követő állapotait tekintjük a mintavételezés eredményeinek.

Metropolis algoritmus

- 1 kezdünk valamilyen x_0 kezdeti állapotból

Metropolis algoritmus

- 1 kezdünk valamilyen x_0 kezdeti állapotból
- 2 egy tetszőleges, de szimmetrikus proposal distribution segítségével válasszunk egy javasolt állapotot

Metropolis algoritmus

- 1 kezdünk valamilyen x_0 kezdeti állapotból
- 2 egy tetszőleges, de szimmetrikus proposal distribution segítségével válasszunk egy javasolt állapotot
- 3 számítsuk ki az elfogadási arányt $a = \frac{P(x')}{P(x_t)}$

Metropolis algoritmus

- 1 kezdünk valamilyen x_0 kezdeti állapotból
- 2 egy tetszőleges, de szimmetrikus proposal distribution segítségével válasszunk egy javasolt állapotot
- 3 számítsuk ki az elfogadási arányt

$$a = \frac{P(x')}{P(x_t)}$$

konstans szorzó, pl az állapotösszeg ilyenkor kiesik, elég egy a valószínűséggel arányos faktorra, pl az energiával számlálni

Metropolis algoritmus

1 kezdünk valamilyen x_0 kezdeti állapotból

2 egy tetszőleges, de szimmetrikus proposal distribution segítségével válasszunk egy javasolt állapotot

3 számítsuk ki az elfogadási arányt $a = \frac{P(x')}{P(x_t)}$

4a Ha $a > 1$ akkor fogadjuk el a javasolt állapotot

4b Ha $a < 1$ akkor a valószínűséggel fogadjuk el a javasolt állapotot, egyébként dobjuk el

Metropolis algoritmus hátrányai

Metropolis algoritmus hátrányai

korrelált minták

Metropolis algoritmus hátrányai

korrelált minták

burn-in periódus

Algoritmus a pályaintegrál rácson való közelítésére

Algoritmus a pályaintegrál rácson való közelítésére

- 1 vegyünk fel egy téridő rácsot $M \times N$ ponttal, ahol előbbi a tér, utóbbi az idő beosztásainak száma.

Algoritmus a pályaintegrál rácson való közelítésére

- 1 vegyünk fel egy téridő rácsot $M \times N$ ponttal, ahol előbbi a tér, utóbbi az idő beosztásainak száma.
- 2 minden t_j időponthoz rendeljünk egy x_j helyet, hogy megkapjuk a részecske diszkrétizált világvonalát

Algoritmus a pályaintegrál rácson való közelítésére

- 1 vegyünk fel egy téridő rácsot $M \times N$ ponttal, ahol előbbi a tér, utóbbi az idő beosztásainak száma.
- 2 minden t_j időponthoz rendeljünk egy x_j helyet, hogy megkapjuk a részecske diszkretizált világvonalát
- 3 javasoljuk egy véletlenszerű t_j hez tartozó x megváltoztatását

Algoritmus a pályaintegrál rácson való közelítésére

- 1 vegyünk fel egy téridő rácsot $M \times N$ ponttal, ahol előbbi a tér, utóbbi az idő beosztásainak száma.
- 2 minden t_j időponthoz rendeljünk egy x_j helyet, hogy megkapjuk a részecske diszkrétizált világvonalát
- 3 javasoljuk egy véletlenszerű t_j hez tartozó x megváltoztatását
- 4 számítsuk ki az energiát a képlet szerint
$$\sum_{j=1}^N \frac{m}{2} \left(\frac{x(j) - x(j-1)}{\epsilon} \right)^2 + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \left(\frac{x(j) + x(j-1)}{2} \right)^2$$

Algoritmus a pályaintegrál rácson való közelítésére

1 vegyünk fel egy térítő rácst $M \times N$ ponttal, ahol előbbi a tér, utóbbi az idő beosztásainak száma.

2 minden t_j időponthoz rendeljünk egy x_j helyet, hogy megkapjuk a részecske diszkrétizált világvonalát

3 javasoljuk egy véletlenszerű t_j hez tartozó x megváltoztatását

4 számítsuk ki az energiát a
$$\sum_{j=1}^N \frac{m}{2} \left(\frac{x(j) - x(j-1)}{\epsilon} \right)^2 + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \left(\frac{x(j) + x(j-1)}{2} \right)^2$$
 képlet szerint

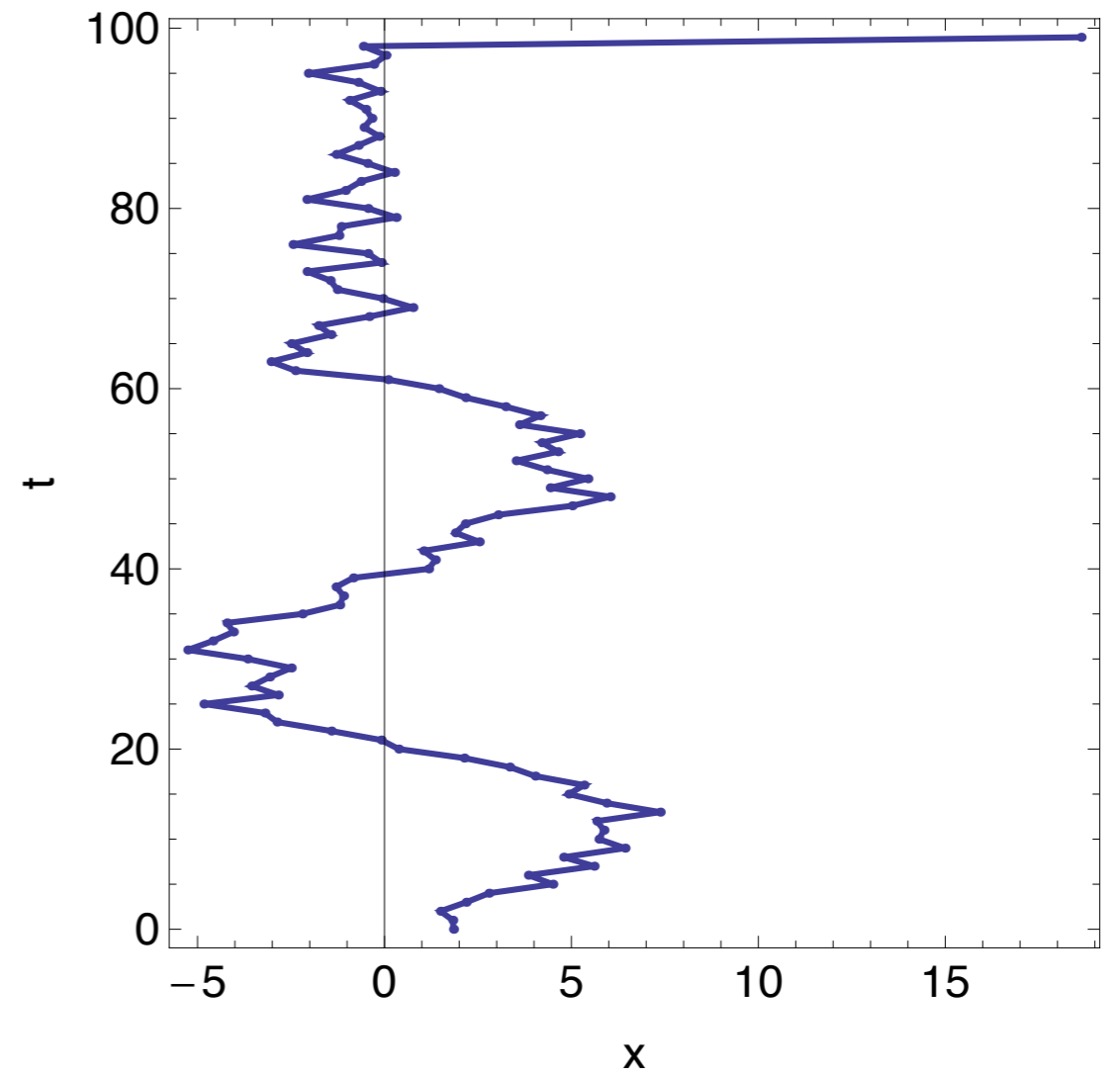
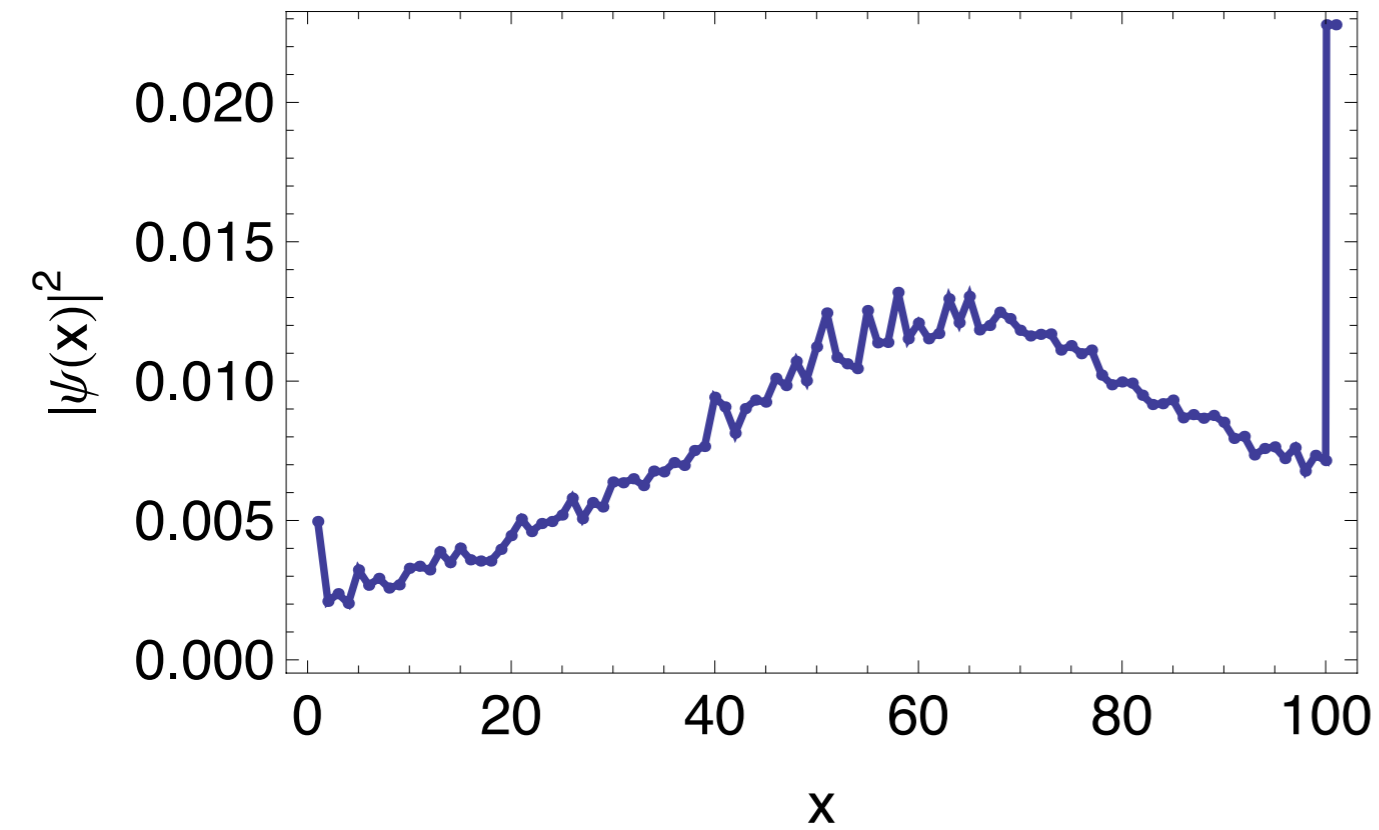
5a Ha $\pi(x')/\pi(x) > 1$ akkor fogadjuk el a javasolt állapotot

5b Ha $\pi(x')/\pi(x) < 1$ akkor $\exp(-dE)$ valószínűséggel fogadjuk el a javasolt állapotot, egyébként dobjuk el

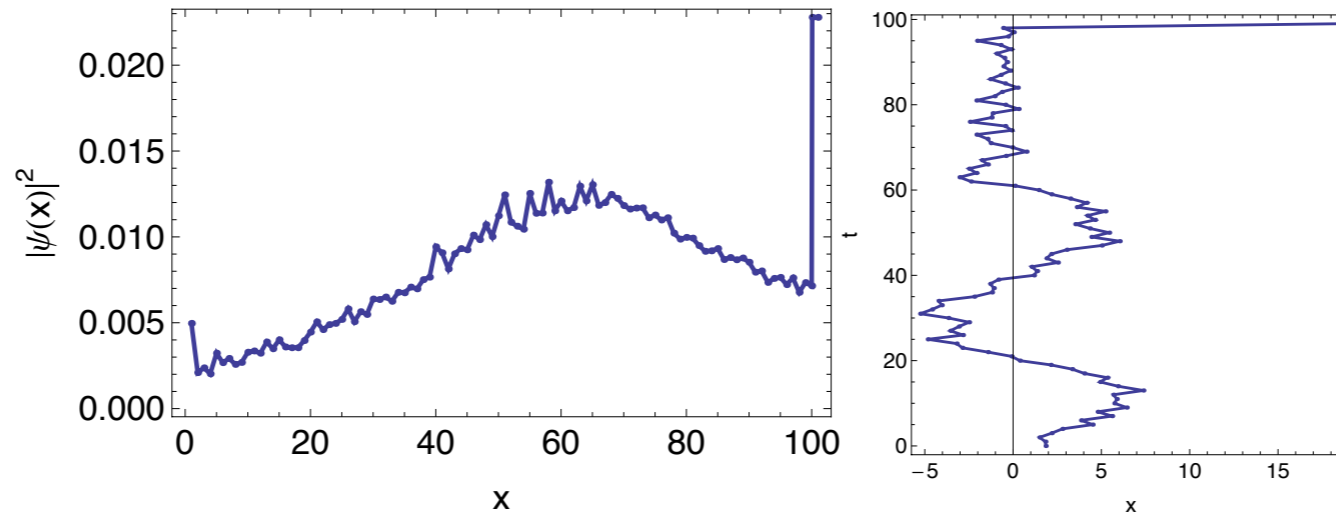
Problémák

Problémák

QMC.py-vel



Problémák

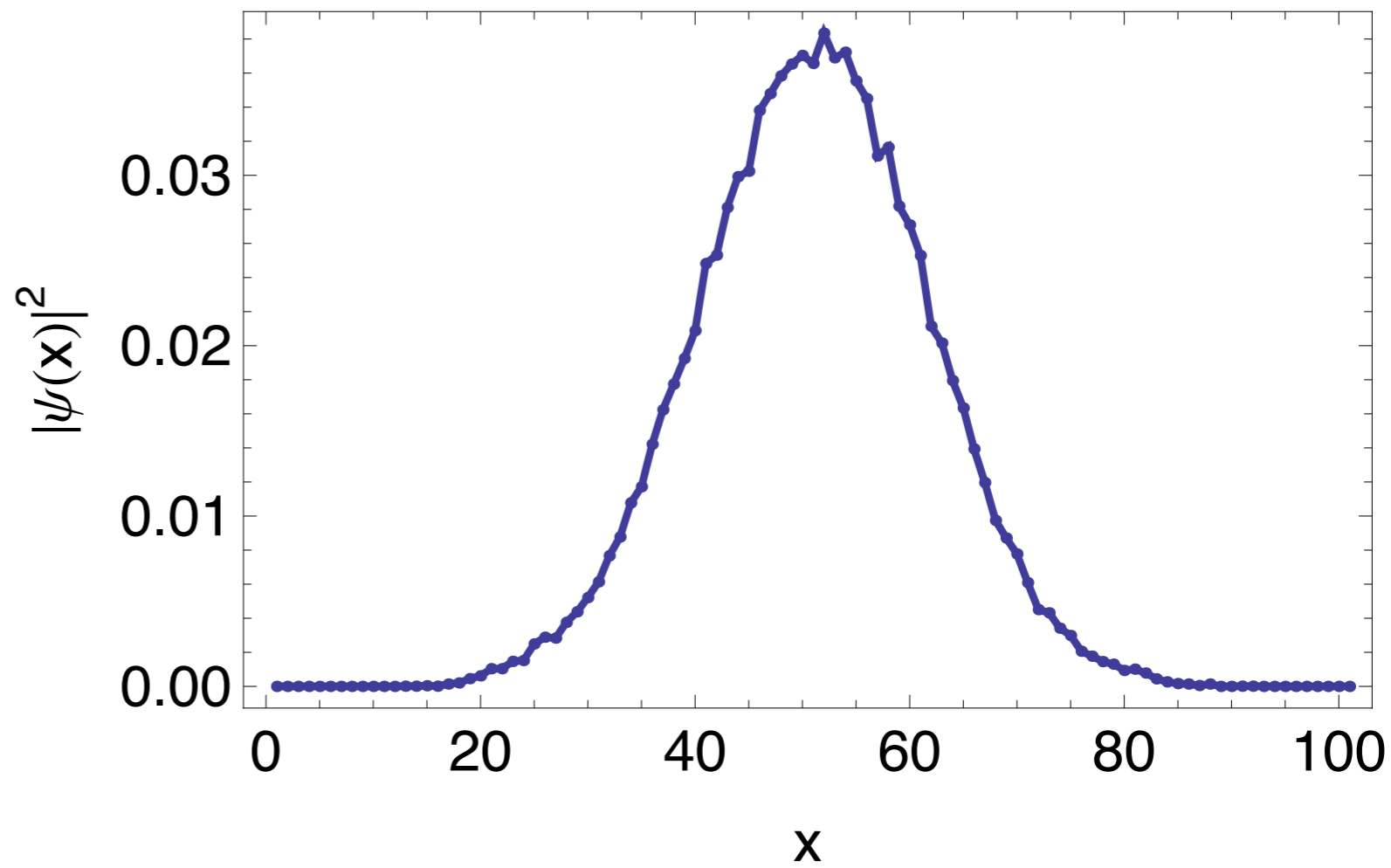
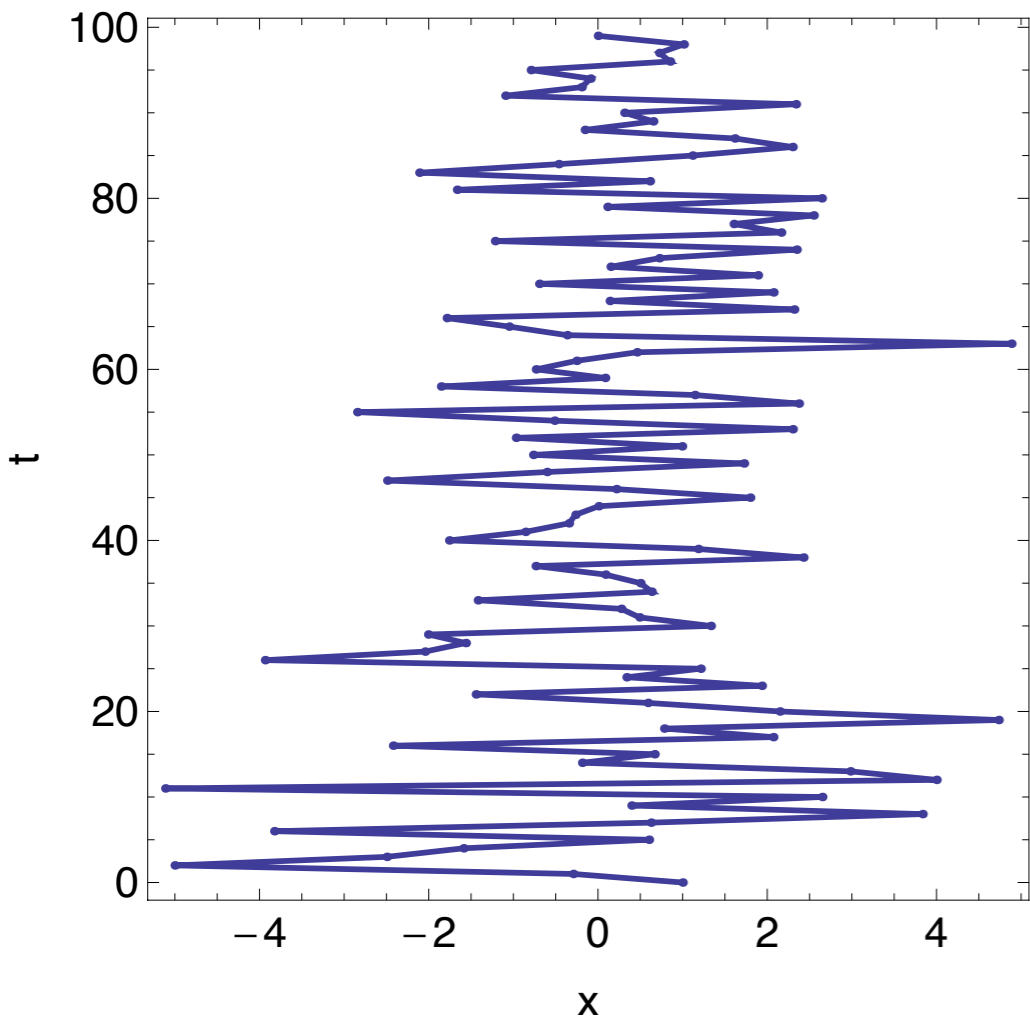


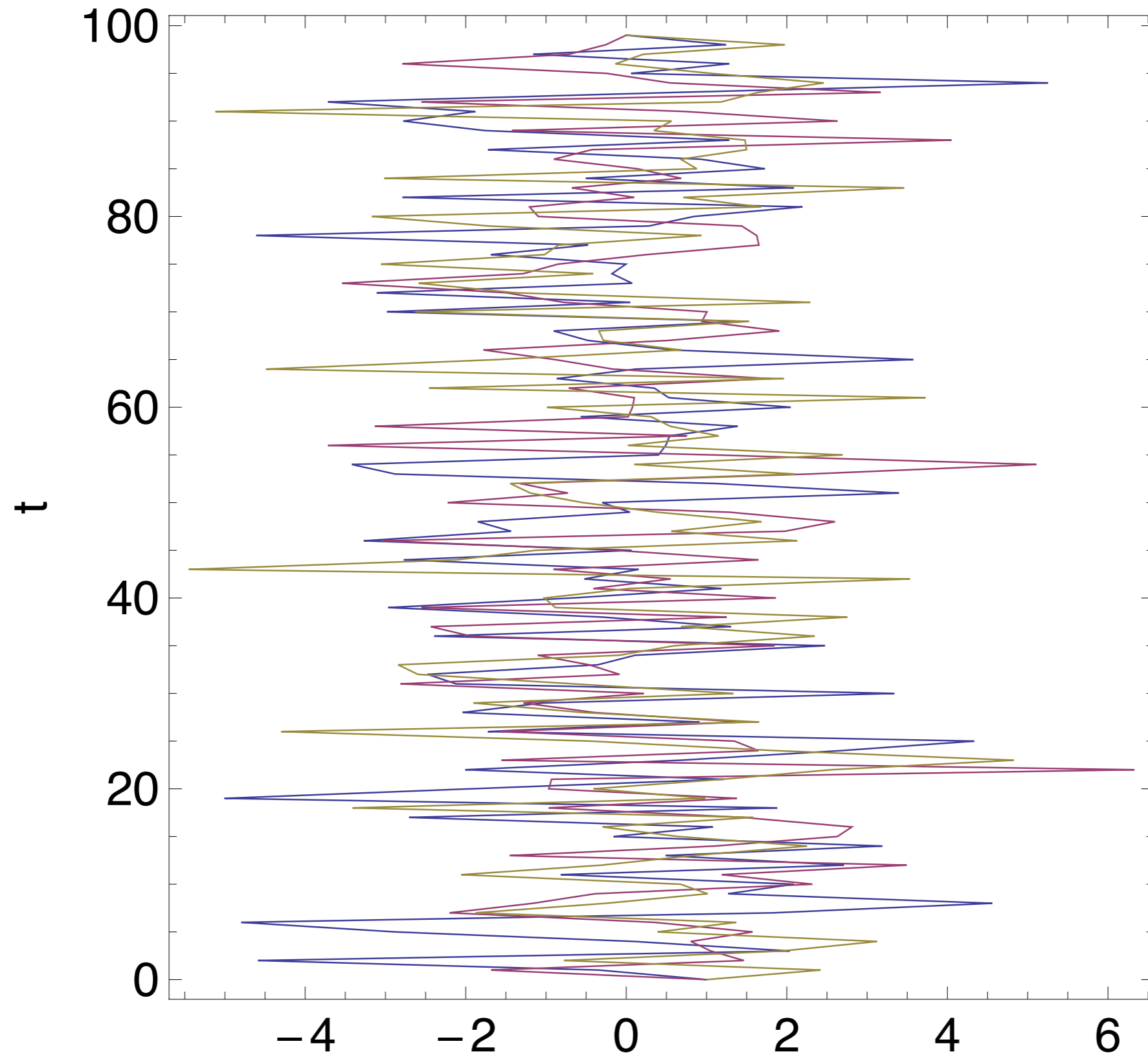
A végpontok nincsenek rögzítve

Az numerikus deriválás a potenciál a végpontra nem vonatkozik, így ez egy idő után 'elmászik' a végtelenbe, innen származik a valószínűségegsűrűség utolsó pontjában a magas érték.

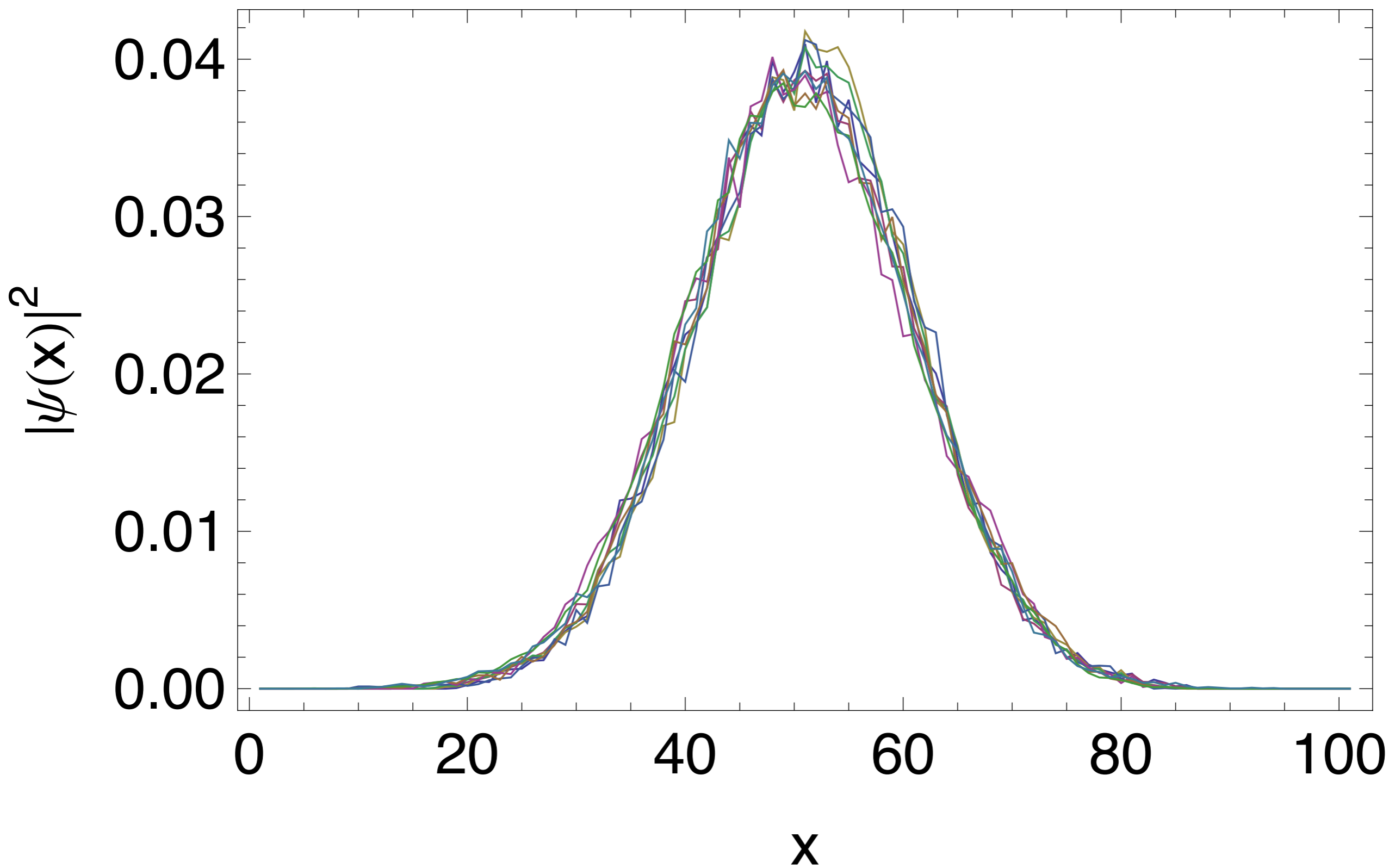
Az energia képletéből hiányoznak a konstansok. A metropolis algoritmusban szereplő boltzmann-faktorból is hiányzik epsilon. Ezek miatt az időlépések hossza nem állítható.

Javított kód

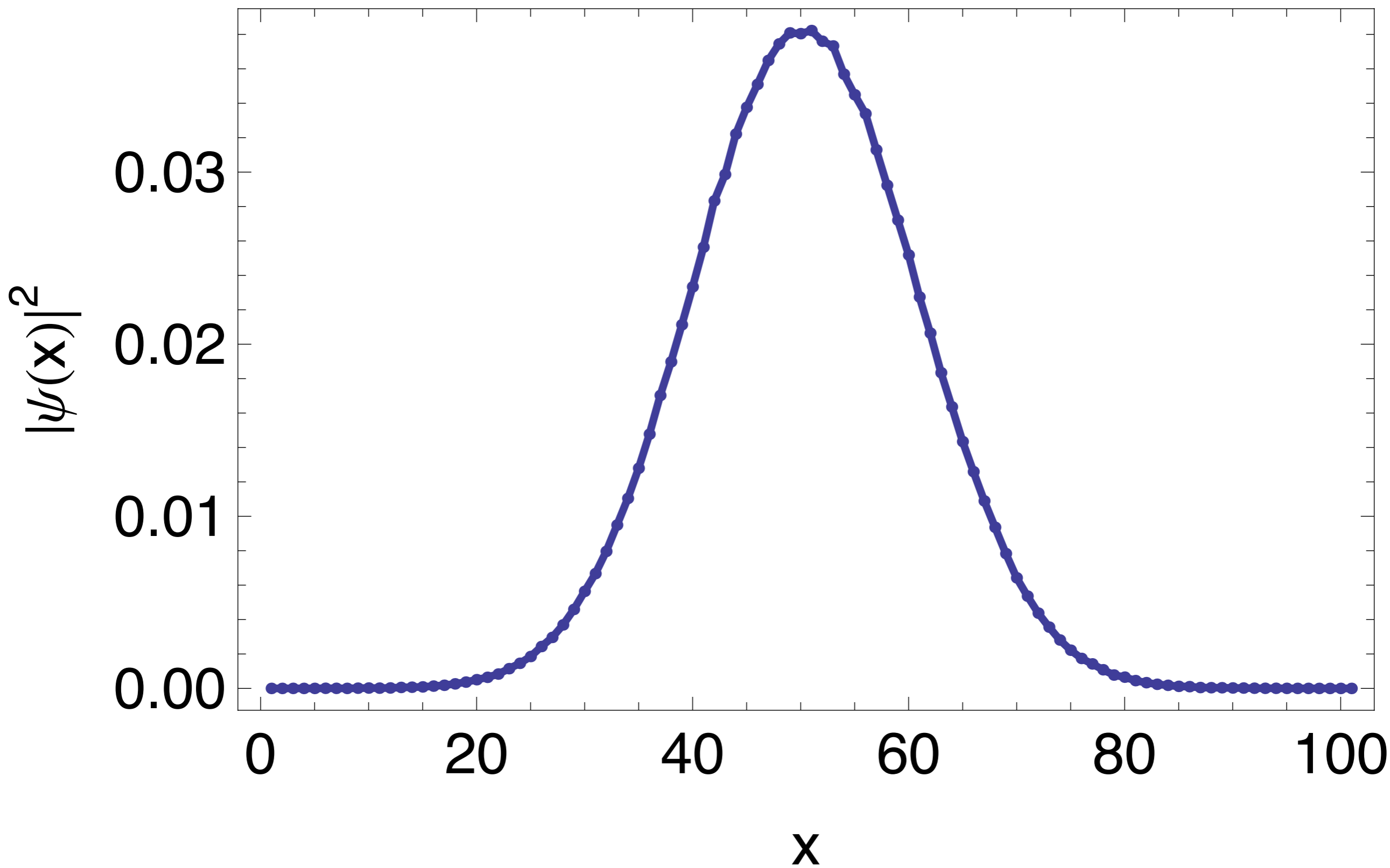




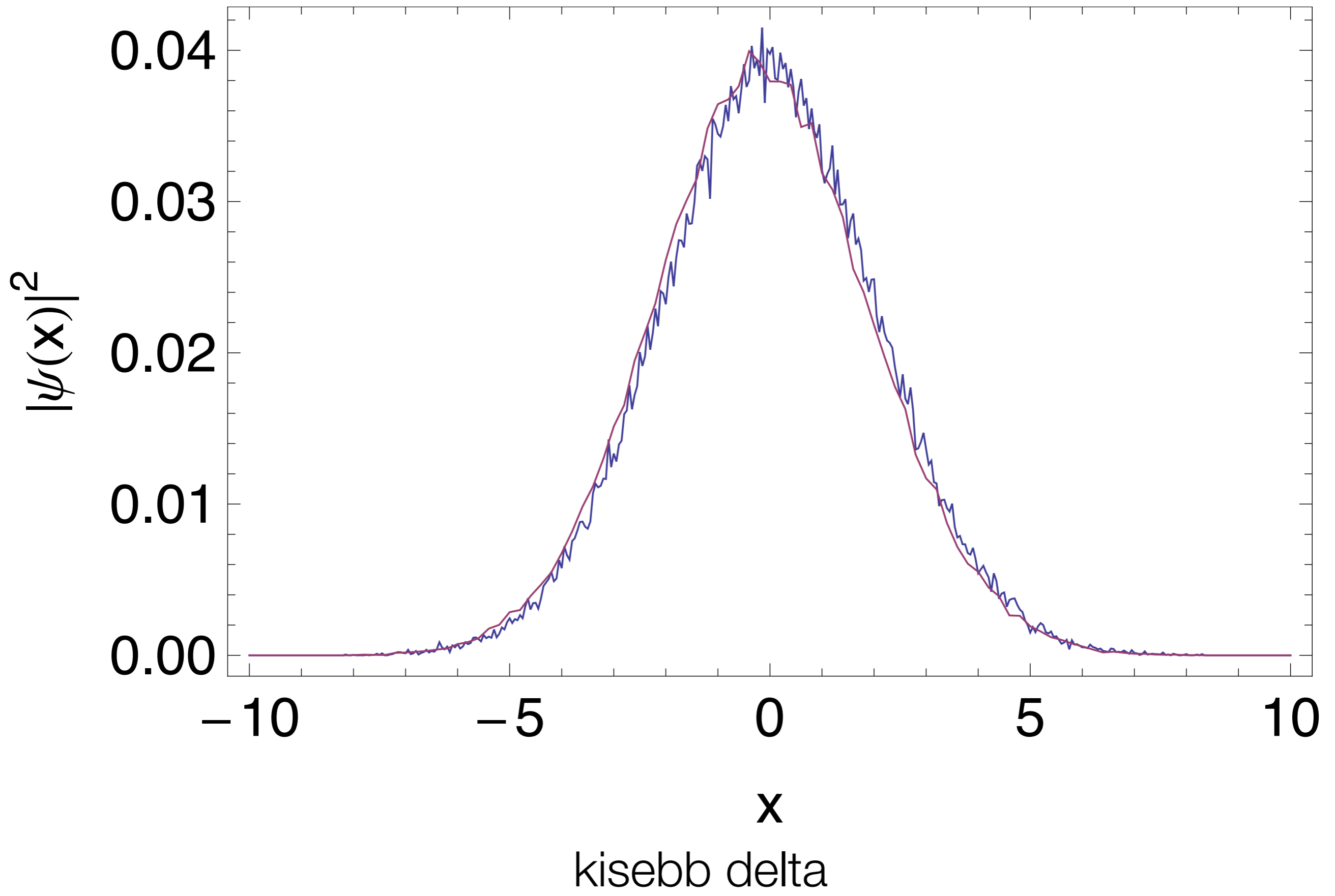
Néhány példa pálya $\sim 30k$ lépésből

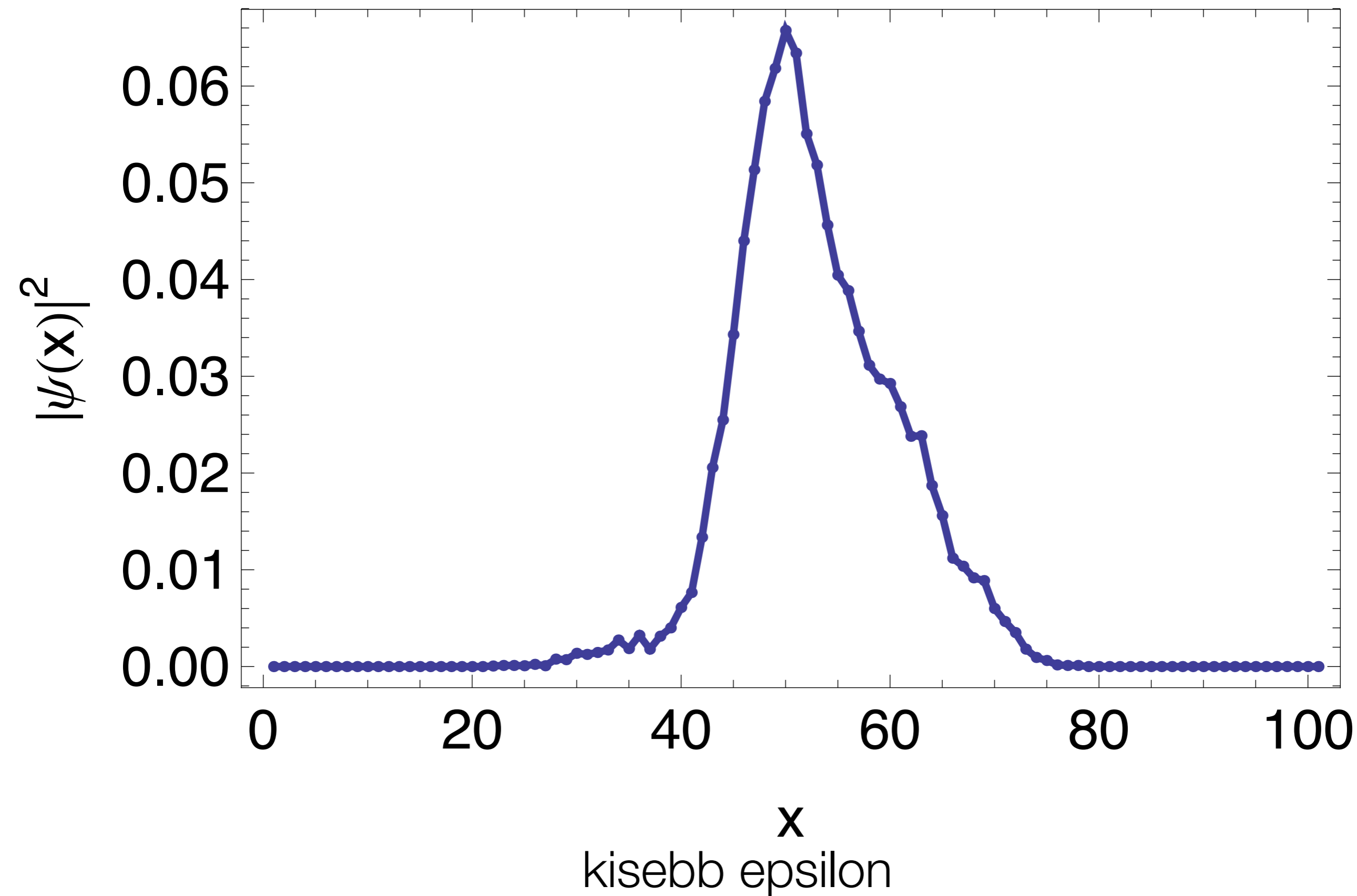


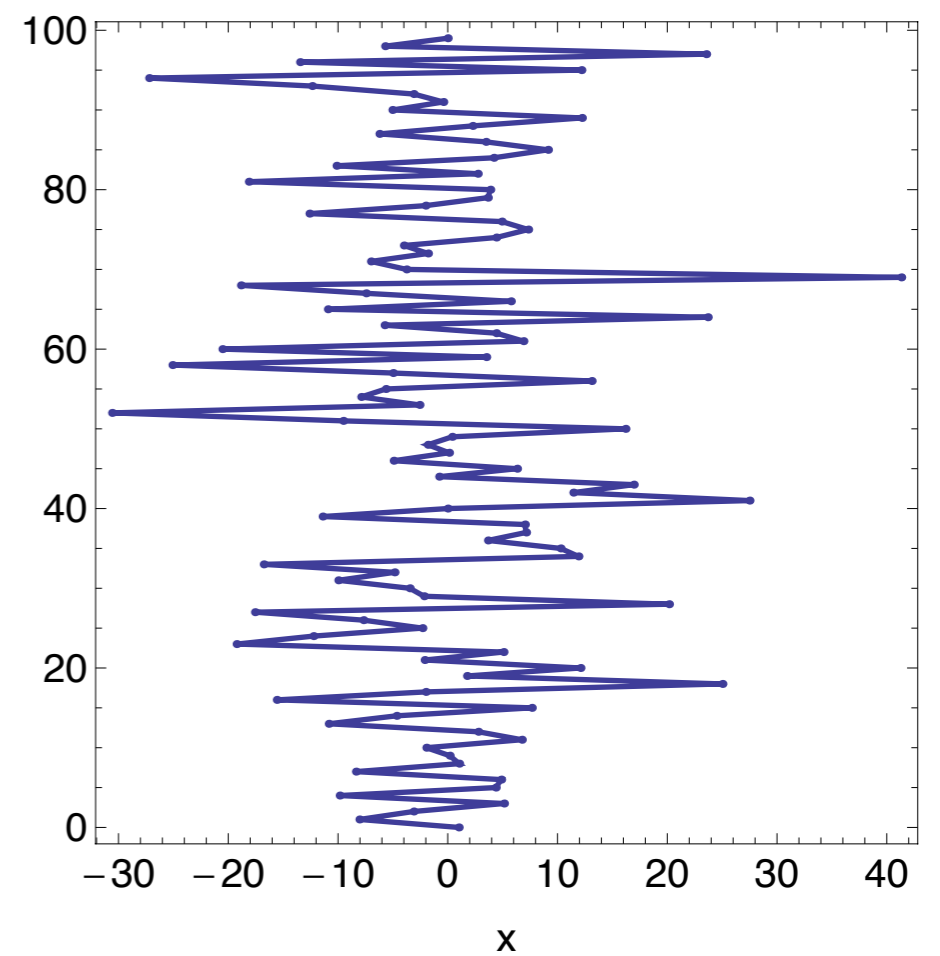
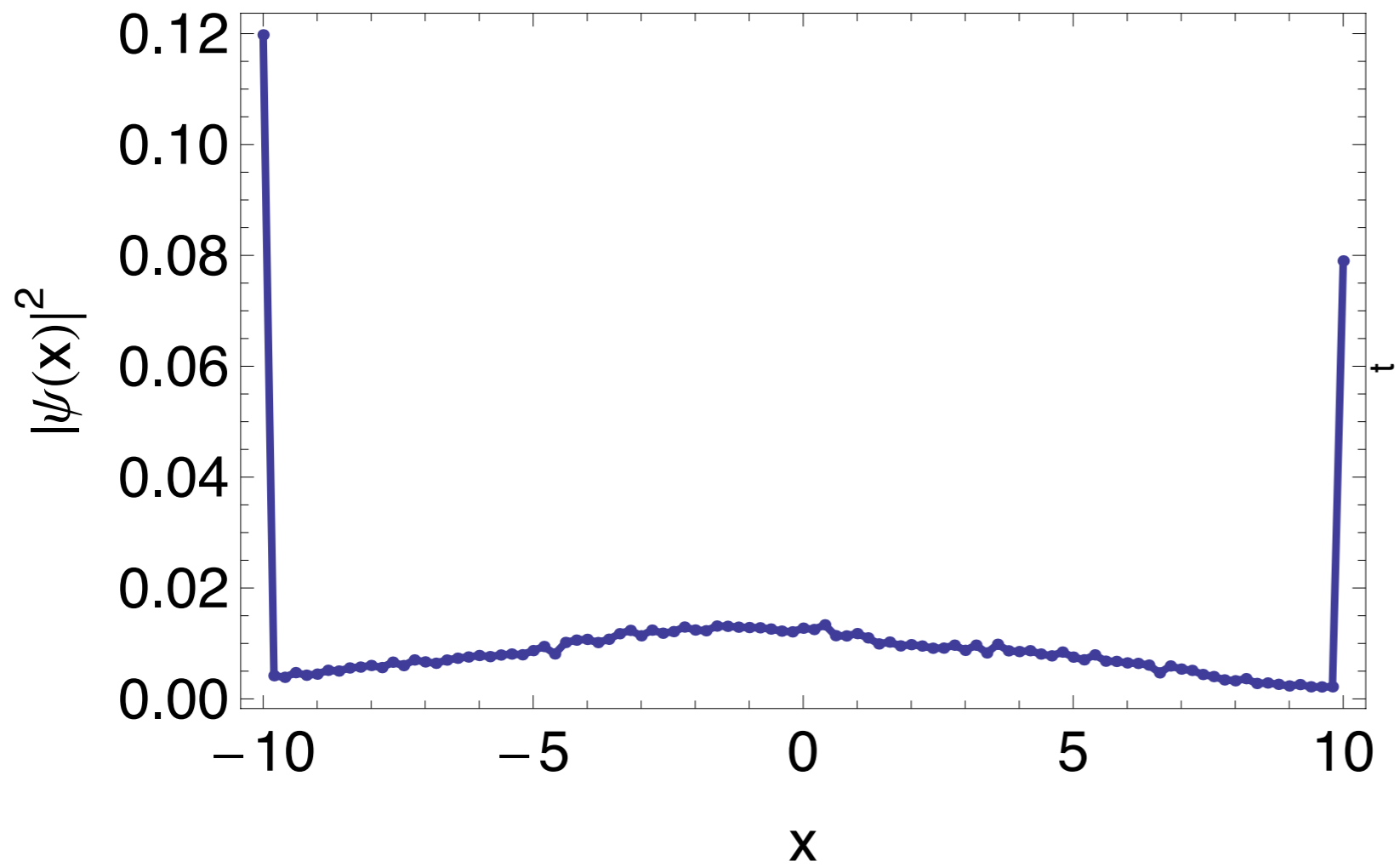
Néhány példa hullámfv. egyenként ~30k lépésből



Hosszabb futtatás = pontosabb $\psi(x)$ értékek







nagy planck állandó = nagy hőmérséklet

Alapállapot energiája

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\omega}{2 \langle \psi | \psi \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \psi(x) dx$$

Alapállapot energiája

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\omega}{2 \langle \psi | \psi \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \psi(x) dx$$

a kétszeres derivált euler módszerrel
használhatatlan, ezért illeszték és
analitikusan számolok

$$\psi_{analytic}(x) = 0.195545 \sqrt{e^{-0.114748(0.113287+x)^2}}$$

Alapállapot energiája

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\omega}{2 \langle \psi | \psi \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \psi(x) dx$$

a kétszeres derivált euler módszerrel
használhatatlan, ezért illeszték és
analitikusan számolok

$$\psi_{analytic}(x) = 0.195545 \sqrt{e^{-0.114748(0.113287+x)^2}}$$

természetes egységekben: $0.431448\omega \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega$