

# **Gitter-Monte-Carlo-Simulation des harmonischen und anharmonischen Oszillators im Pfadintegralformalismus in euklidischer Zeit**

**BACHELORARBEIT**  
zur Erlangung des akademischen Grades  
**BACHELOR OF SCIENCE**

vorgelegt am: 10. August 2015

am Fachbereich Physik der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

Name: Magnus Molitor  
Matrikelnummer: 393757

Erstgutachter: Priv.-Doz. Dr. Heitger  
Zweitgutachter: Prof. Dr. Linz

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Pfadintegralformalismus</b>	<b>2</b>
2.1. Euklidisches Pfadintegral . . . . .	3
2.2. Beziehung zur statistischen Physik . . . . .	4
<b>3. Monte-Carlo-Methode</b>	<b>6</b>
3.1. Einfache Monte-Carlo-Integration . . . . .	6
3.2. Monte-Carlo-Integration mit stationären stochastischen Prozessen . . . . .	7
3.3. Markow-Ketten . . . . .	8
3.4. Metropolis-Hastings-Algorithmus . . . . .	9
3.5. Numerische Fehler . . . . .	11
<b>4. Numerische Ergebnisse</b>	<b>12</b>
4.1. Harmonischer Oszillator . . . . .	12
4.1.1. Thermalisierung und Korrelationseffekte . . . . .	12
4.1.2. Energie und Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes	16
4.1.3. Energie des ersten angeregten Zustandes . . . . .	19
4.1.4. Energie des zweiten angeregten Zustandes . . . . .	23
4.2. Anharmonischer Oszillator . . . . .	24
4.2.1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Grundzustandes und Quantentrajek-	
torien . . . . .	25
4.2.2. Energieniveaus des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes	26
4.2.3. Instantonen . . . . .	28
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>34</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>35</b>
A.1. Programmstruktur . . . . .	35
A.2. Anpassung des Parameters $\Delta$ . . . . .	35
A.3. Fehleranalyse . . . . .	36
A.3.1. $\Gamma$ -Methode . . . . .	36
A.3.2. Binning . . . . .	37
A.3.3. Jackknife . . . . .	38
A.4. Moment-Methode für Eigenwerte und Erwartungswerte . . . . .	38
<b>B. Literatur</b>	<b>40</b>
<b>C. Danksagung</b>	<b>41</b>
<b>D. Plagiatserklärung</b>	<b>42</b>

## 1. Einleitung

Feynmans quantenmechanischer Pfadintegralformalismus stellt eine alternative Formulierung der Quantenmechanik dar. Er bietet neben einer sehr anschaulichen Beschreibung der Quantenmechanik zahlreiche Anwendungen in der statistischen Physik, Festkörperphysik und der Quantenfeldtheorie[Mac99].

Die direkte Berechnung des Pfadintegrals ist oft mühsam, sodass nach MacKenzie die meiste Arbeit mit Pfadintegralen darin besteht, sie letztendlich gar nicht auswerten zu müssen[Mac99]. Des Weiteren sind nicht immer analytische Lösungen vorhanden, sodass die Verwendung numerischer Methoden erforderlich ist. Die Pfadintegraldarstellung liefert hierbei eine hilfreiche Relation zwischen statistischer Mechanik und Quantenmechanik, welche den Gebrauch der aus der statistischen Physik stammenden Monte-Carlo-Methode motiviert. Unter Verwendung des Metropolis-Hastings-Algorithmus werden in dieser Arbeit eindimensionale nichtrelativistische quantenmechanische Modelle, wie der harmonische Oszillator und eine Form des anharmonischen Oszillators untersucht. Es wird hierbei die euklidische Darstellung des Pfadintegrals gewählt. Die einzelnen Pfade werden auf einem diskreten imaginären Zeitgitter dargestellt und so niederenergetische Energieeigenwerte und Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten des Grundzustandes ermittelt. Zudem werden für ein tiefes Doppelmuldenpotential Instantonenkonfigurationen behandelt.

Diese Arbeit ist wie folgt gegliedert: In dem Kapitel 2 wird der Pfadintegralformalismus vorgestellt und die Analogie zur statistischen Physik erläutert. In dem danach folgenden Kapitel 3 werden die Grundlagen der numerischen Evaluation von Integralen mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode dargelegt und die Anwendung des Metropolis-Hastings-Algorithmus auf das gegebene physikalische Modell beschrieben. Das Kapitel 4 präsentiert die numerischen Ergebnisse des harmonischen und anharmonischen Oszillators. In dem Kapitel 5 werden die Ergebnisse diskutiert und ein kurzer Ausblick gegeben. Zuletzt werden im Anhang A einige technische Details näher erläutert.

## 2. Pfadintegralformalismus

In diesem Kapitel wird der Pfadintegralformalismus vorgestellt und die Grundidee der Zeitdiskretisierung erläutert. Die Ausführungen beziehen sich hierbei hauptsächlich auf die Quellen [CF81, Mor07].

Ein nicht relativistisches Teilchen der Masse  $m$  vollführt eine eindimensionale Bewegung in einem zeitunabhängigen Potential  $V(x)$ , wobei der Hamiltonoperator folgende Form einnimmt:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (1)$$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass sich das Teilchen zunächst zur Zeit  $t = t_a$  am Ort  $x_a$  und danach zu dem Zeitpunkt  $t = t_b$  am Ort  $x_b$  befindet, ist durch den Propagator  $K$  gegeben:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b(t_b) | x_a(t_a) \rangle = \langle x_b | e^{iH(t_a-t_b)/\hbar} | x_a \rangle, \quad (2)$$

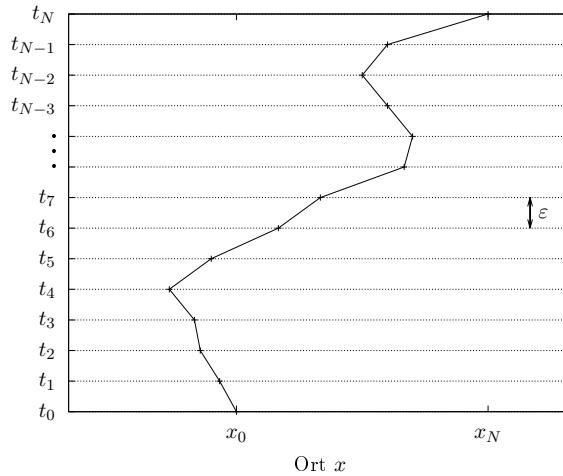
wobei der Operator  $e^{iHt/\hbar}$  als Zeitentwicklungsoperator bezeichnet wird.

In der quantenmechanischen Formulierung des Pfadintegrals ergibt sich diese Übergangswahrscheinlichkeit als Summation über alle möglichen Wege, welche den Anfangspunkt  $x_a(t_a)$  mit dem Endpunkt  $x_b(t_b)$  verknüpfen. Hierbei wird jeder Pfad mit einem Phasenfaktor  $e^{-iS}$  gewichtet, wobei  $S$  für die jeweilige klassische Wirkung des Pfades steht. In dieser Schreibweise ergibt sich die Übergangsamplitude zu

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\text{Alle Pfade von } a \text{ nach } b} e^{iS[\text{Pfad}]/\hbar}. \quad (3)$$

Um von obiger Gleichung Gebrauch zu machen, wird ein Zeitgitter eingeführt: Das Zeitintervall  $[t_a, t_b]$  wird hierzu in Segmente der Breite  $\varepsilon$  und Anzahl  $N$  unterteilt, wobei dem Beginn eines jeden Segments eine Zeitkoordinate  $t_j, j = 0, 1, \dots, N$  und eine kontinuierliche Ortskoordinate  $x(t_j) = x_j$  zugeordnet wird. Die Punkte werden untereinander mit geraden Linien verbunden und es gilt  $x_0 = x_a$  und  $x_N = x_b$ .

Abbildung 1 visualisiert die Darstellung eines Pfades auf dem beschriebenen Zeitgitter.



**Abbildung 1:** Diskretisierung der Zeit zur Darstellung eines Pfades.

Unter Verwendung der Gleichung (3) kann so folgende Form der Übergangsamplitude gewonnen werden:

$$K(x_N, t_N; x_0, t_0) = \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[x_j] \right) \quad (N \rightarrow \infty), \quad (4)$$

wobei die Wirkung des diskreten Zeitgitters gegeben ist durch

$$S = \sum_{j=1}^N \epsilon \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right]. \quad (5)$$

Das Kontinuumslimit beschreibt für ein konstantes Zeitintervall  $[t_a, t_b]$  den Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  und dementsprechend  $\epsilon \rightarrow 0$ . In diesem Fall wird auch folgende Schreibweise verwendet:

$$K(x_N, t_N; x_0, t_0) = \int [dx] \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[x] \right), \quad (6)$$

wobei der Klammerausdruck  $[dx]$  ein Ausdruck für das Kontinuumslimit ist und somit  $\int [dx]$  die Integration über alle Funktionen  $x(t)$  mit den entsprechenden Randbedingungen beschreibt. Das Wirkungsfunktional  $S[x]$  kann wie folgt geschrieben werden:

$$S[x] = \int_{t_0}^{t_N} dt \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right]. \quad (7)$$

## 2.1. Euklidisches Pfadintegral

Der oszillierende Integrand  $\exp(iS[x]/\hbar)$  des quantenmechanischen Pfadintegrals ist mathematisch schwer zu handhaben. Um dieses Problem zu umgehen, wird die euklidische Zeit  $\tau$  eingeführt:

$$\tau = it, \quad \tau > 0. \quad (8)$$

Diese Transformation wird als Wickrotaion bezeichnet und führt auf die euklidische Wirkung  $S_E$

$$S = \int_{t_0}^{t_N} dt \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] = i \int_{\tau_0}^{\tau_N} d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] =: iS_E. \quad (9)$$

In dieser Formulierung wird jeder Pfad mit einem exponentiellen Dämpfungsfaktor gewichtet und für die euklidische Übergangsamplitude  $K_E$  folgt

$$K_E(x_N, \tau_N; x_0, \tau_0) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \exp \left( -\frac{1}{\hbar} S_E[x_j] \right) \quad (N \rightarrow \infty). \quad (10)$$

Die diskretisierte euklidische Wirkung ist gegeben durch:

$$S_E = \sum_{j=1}^N a \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{a} \right)^2 + V(x_j) \right], \quad (11)$$

mit  $a = i\varepsilon$ .

## 2.2. Beziehung zur statistischen Physik

Das euklidische Pfadintegral führt auf eine formale Beziehung zur kanonischen Zustandssumme der statistischen Mechanik. Die thermodynamische Temperatur  $\beta$  erfüllt in diesem Fall die Wahl:

$$\tau_a = 0 \quad \text{und} \quad \tau_b = \beta\hbar. \quad (12)$$

Hieraus folgt mit der Definition der Zustandssumme  $Z(\beta)$  für die inverse Temperatur  $\beta$  der Zusammenhang [Mac99]

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \sum_n e^{-\beta E_n} = \int dx_b dx_a \delta(x_a - x_b) K_E(x_b, \beta\hbar; x_a, 0). \quad (13)$$

Im Folgenden wird  $\hbar = k_b = 1$  verwendet. Die Zustandssumme ist somit selbst ein Pfadintegral. Die Integration erfolgt zunächst, bedingt durch die Delta-Distribution, im Propagator über Wege mit gleichem Anfangs- und Endpunkt. Die anschließende Integration über  $x_b$  summiert über alle periodischen Wege.

Aufgrund dieses Zusammenhangs bietet sich die Benutzung statistischer Methoden an, um Erwartungswerte des quantenmechanischen Systems zu erhalten. Der Erwartungswert eines Operators  $A$  im kanonischen Ensemble in der Quantenstatistik wird definiert als

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H} A) / \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\beta H} A) / Z. \quad (14)$$

In der Pfadintegraldarstellung ergibt sich folgende äquivalente Darstellung:

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N dx_i A(x_1, x_2, \dots, x_n) e^{-S_E[x]}}{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N dx_i e^{-S_E[x]}}, \quad (15)$$

wobei  $A(x_1, x_2, \dots, x_N)$  eine Funktion der Koordinaten  $x_i$  ist.

Die Betrachtung eines quantenmechanischen Systems mit der vollständigen orthonormierten Basis  $|n\rangle$  und den diskreten Energieniveaus  $E_n, n = 0, 1, \dots$  liefert für den Grenzfall  $\beta \rightarrow \infty$  der Gleichung (14)

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | A | n \rangle}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = \langle 0 | A | 0 \rangle. \quad (16)$$

Dies ist in guter Übereinstimmung mit der Analogie zur statistischen Physik: Nähert sich die Temperatur  $1/\beta$  dem Nullpunkt, frieren die statistischen Fluktuationen aus und es ergeben sich Grundzustandserwartungswerte.

Im Weiteren wird die Zeit  $T$  statt der inversen Temperatur  $\beta$  verwendet. Aus obiger Gleichung (16) können auch Grundzustandsenergien bestimmt werden. Da jedoch zu keinem Zeitpunkt der Mittelwert der quadratischen Geschwindigkeit existiert [KR14, CF81],

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{\langle (x_{i+1} - x_i)^2 \rangle}{a^2} = \frac{1}{m} \cdot \frac{1}{a}, \quad (17)$$

ist der Gebrauch des Virial-Theorems

$$\frac{1}{2} m \langle v_i^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle x \cdot V'(x) \rangle \quad (18)$$

zur Berechnung der kinetischen Energie zweckmäßig. Für die Grundzustandsenergie  $E_0$  folgt:

$$E_0 = \lim_{T \rightarrow \infty} \left( \int [dx] e^{-S_E[x]} \left[ \frac{1}{2} x V'(x) + V(x) \right] / \int [dx] e^{-S_E[x]} \right). \quad (19)$$

Höhere Energieniveaus sind über die Definition von Korrelationsfunktionen zugänglich. In der statistischen Physik sind diese wie folgt definiert:

$$C^n = \text{Tr } e^{-HT} x(\tau_1)x(\tau_2)\dots x(\tau_n)/Z. \quad (20)$$

In der Quantentheorie werden diese als  $n$ -Punkt Propagator Funktionen bezeichnet. Um eine kompakte Form zu erhalten, wird zunächst das erzeugende Funktional definiert

$$Z(J) = \text{Tr } e^{-T[H+\sum_i^n J_i x_i]}, \quad (21)$$

wobei  $J_i$  eine komplexe Zahl ist. Obige Form enthält alle Informationen über das System, sodass sich mit  $\delta J_i / \delta J_k = \delta_{ik}$  zunächst folgende Form ableiten lässt:

$$C^{(m)} = \frac{\delta}{\delta J_1} \dots \frac{\delta}{\delta J_m} Z(J)|_{J=0}. \quad (22)$$

Die verbundene  $n$ -Punkt Propagator Funktion ergibt sich über den Logarithmus von  $Z$  zu<sup>1</sup>:

$$C_c^{(n)} = \frac{\delta}{\delta J_1} \dots \frac{\delta}{\delta J_n} \ln Z(J)|_{J=0}. \quad (23)$$

Als Beispiel kann die verbundene Zweipunktfunktion betrachtet werden:

$$C_c^{(2)} = \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle - \langle x(\tau_1) \rangle \langle x(\tau_2) \rangle. \quad (24)$$

Unter Berücksichtigung der Gleichung (24) und (16) folgt im Grenzfall  $T \rightarrow \infty$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C_c^{(2)}(\tau) = \sum_{n=1} e^{-(E_n - E_0)\tau} |\langle 0 | x(0) | n \rangle|^2. \quad (25)$$

Die effektive Masse ist für eine Korrelationsfunktion wie folgt definiert[Mor07]:

$$m_{eff}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \ln \left( \frac{C_c(\tau)}{C_c(\tau + \Delta\tau)} \right). \quad (26)$$

Für das betrachtete Beispiel bildet sich so für  $\tau \rightarrow \infty$  ein Plateau, welches mit der Energielücke zwischen Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand korrespondiert:

$$m_{eff}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \left( \ln \left[ C_c^{(2)}(\tau) / C_c^{(2)}(\tau + \Delta\tau) \right] \right) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \Delta\tau(E_1 - E_0). \quad (27)$$

---

<sup>1</sup> Im Gegensatz zu Gleichung (20) ist diese Form um einen Konstantanteil bereinigt.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi_0(x)|$  kann nach folgender Gleichung bestimmt werden:

$$\langle x | e^{-HT} | x \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n T} \langle x | n \rangle \langle n | x \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} e^{-E_0 T} |\psi_0(x)|^2. \quad (28)$$

Die Analogie zur statistischen Physik motiviert den Gebrauch der Monte-Carlo-Methode zur Bestimmung von Erwartungswerten des quantenmechanischen Systems. Diese Methode wird im folgenden Kapitel beschrieben.

### 3. Monte-Carlo-Methode

In diesem Kapitel werden die Grundlagen der Monte-Carlo-Methode dargelegt und die Anwendung auf das gegebene physikalische Modell beschrieben. Hierzu wird zunächst von einem Beispiel ausgegangen, um die Schwächen der einfachen Monte-Carlo-Integration hervorzuheben. Als Alternative zu der einfachen Integration wird das Importance Sampling eingeführt. Schließlich werden Markow-Ketten behandelt und der Metropolis-Hastings-Algorithmus erläutert.

Die numerische Behandlung von Erwartungswerten wie in Gleichung (15) ist Ziel dieses Kapitels. Diese basiert auf der Berechnung eines  $N$ -dimensionalen Integrals. Zusätzlich wird das Integral im Kontinuumsfall  $N \rightarrow \infty$  unendlich groß. Herkömmliche numerische Verfahren wie Trapezverfahren oder Simpson's Regel erfordern einen großen Rechenaufwand zur Berechnung dieser Integrale. Die im Folgendem beschriebene Monte-Carlo-Methode bietet eine Alternative motiviert durch die statistische Mechanik.

#### 3.1. Einfache Monte-Carlo-Integration

In diesem Unterkapitel wird exemplarisch die einfache Monte-Carlo-Integration behandelt und deren Schwächen aufgezeigt. Die Ausführungen beziehen sich hierbei auf Quelle [Mor07]. Für eine kontinuierliche Funktion  $f(X)$  einer kontinuierlichen Zufallsvariablen  $X$  mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p_X(s)$  ergibt sich für den Erwartungswert der Funktion

$$\langle f(X) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(s) p_X(s) ds. \quad (29)$$

Als Beispiel kann eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der Form

$$p_X(x) = \begin{cases} 1/(b-a), & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (30)$$

verwendet werden. Aus dieser wird eine Stichprobe von  $N_{\text{tot}}$  Zufallsvariablen  $X_1, X_2, \dots, X_{N_{\text{tot}}}$  ausgewählt. Dann gilt aufgrund des Gesetzes der großen Zahlen (Beweis siehe [Mor07])

$$\bar{f} = \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} f(X_i), \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \bar{f} = \int_a^b ds p_X(s) f(s). \quad (31)$$

Der Wert  $\bar{f}$  wird hierbei als Monte-Carlo-Schätzwert bezeichnet und stellt für große  $N$  eine gute Approximation des Integrals für flache Funktionen  $f(s)$  dar. Im Grenzfall  $N_{\text{tot}} \rightarrow \infty$  decken die Zufallsvariablen das komplette Intervall  $[a,b]$  ab. Für stark oszillierende oder gepeaktene Funktionen ist eine gleichverteilte Auswahl der Zufallszahlen eher ungünstig. Um einen guten Schätzwert zu erhalten, werden die Zufallszahlen so gewählt, dass besonders viele im Bereich der Oszillationen beziehungsweise der Peaks liegen. Diese Methode wird als Importance Sampling bezeichnet. Die Zufallszahlen sollten demnach aus einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $g(X)$  gezogen werden, sodass die Funktion  $h(X) = f(X)/g(X)$  möglichst konstant ist. Die Integration liefert

$$\int_a^b f(s)ds = \int_a^b h(s)g(s)ds \approx \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} h(X_i), \quad (32)$$

wobei die  $X_i$  aus der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $g(X)$  entnommen werden. Die Funktion  $h(x)$  ist nahezu flach und die Zufallszahlen treten nun besonders häufig an den gepeakten Stellen auf. Diese Methode ist effektiver, jedoch muss die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $g(x)$  ermittelt werden. Für eindimensionale Fälle sind hierzu Transformations- oder Rejektions-Methoden verwendbar, für höherdimensionale Fälle sind diese jedoch nicht praktikabel. Zur Berechnung höherdimensionaler Integrale werden stattdessen stationäre stochastische Prozesse benutzt.

### 3.2. Monte-Carlo-Integration mit stationären stochastischen Prozessen

Im vorherigen Unterkapitel wurde bereits auf die Notwendigkeit von stationären Prozessen hingewiesen. An dieser Stellen wird die Integration mit stationären stochastischen Prozessen explizit behandelt, wobei die Ausführungen sich auf Quelle [Mor07] beziehen.

Ein stochastischer Prozess beschreibt eine Sequenz von Zufallszahlen  $X_t, t \in T$ , welche einer bestimmten Häufigkeitsverteilung entnommen werden. Im Folgenden wird  $T = \mathbb{N}$  gewählt und der Parameter  $t$  als Monte-Carlo-Zeit bezeichnet. Ein stochastischer Prozess wird als stationär bezeichnet, sofern die kumulative Wahrscheinlichkeit einer Zeitabfolge aus  $n$  Zuständen sich unter Veränderung eines Parameters  $h \in \mathbb{N}$  nicht ändert:

$$P(X_{t_0} \leq x_1, \dots, X_{t_n} \leq x_n) = P(X_{t_0+h} \leq x_1, \dots, X_{t_n+h} \leq x_n). \quad (33)$$

Dies bedeutet, dass unabhängig von  $h$  die Sequenzen  $(X_{t_0}, \dots, X_{t_n})$  und  $(X_{t_0+h}, \dots, X_{t_n+h})$  der gleichen Wahrscheinlichkeitsverteilung unterliegen. Im Kapitel 3.1 wurde bereits die Monte-Carlo-Methode für statistisch unabhängige Zufallsgrößen beschrieben. Zur Anwendung der Monte-Carlo-Methode auf stationäre Prozesse ist eine Erweiterung des Gesetzes der großen Zahlen und des zentralen Grenzwertsatzes, der zur Abschätzung des Fehlers dient, erforderlich. Nach dem Gesetz der großen Zahlen für stationäre stochastische Prozessen ergibt sich für einen stationären Prozess  $X_1, X_2, \dots$  mit  $\langle X_k \rangle = \mu$ , Autokovarianz  $\Gamma(s) = \langle (X_k - \mu)(X_{k+s} - \mu) \rangle$ , für die  $\sum_{s=0}^{\infty} |\Gamma(s)| < \infty$  gilt, mit der Definition  $\bar{X}_{N_{\text{tot}}} = (X_1 + X_2 + \dots + X_{N_{\text{tot}}})/N_{\text{tot}}$

$$\lim_{N_{\text{tot}} \rightarrow \infty} P(|\bar{X}_{N_{\text{tot}}} - \mu| \leq \varepsilon) = 0, \quad \text{für alle } \varepsilon > 0. \quad (34)$$

Der Beweis ist der Quelle [Mor07] zu entnehmen. Der zentrale Grenzwertsatz für  $M$ -abhängige Zufallsvariablen besagt: Sei  $X_1, X_2, \dots, X_{N_{\text{tot}}}$  eine stationäre Sequenz von  $M$ -abhängigen Zufallsvariablen ( $X_t$  und  $X_{t+s}$  sind unabhängig für  $s > M$ ) mit Mittelwert  $\mu$  und einer beschränkten Varianz, so konvergiert die Verteilung  $(X_1 + \dots + X_{N_{\text{tot}}} - N_{\text{tot}}\mu)/(\sigma\sqrt{N_{\text{tot}}})$  für große  $N_{\text{tot}}$  gegen die Normalverteilung, wobei gilt:

$$\sigma^2 = \sum_{h=-M}^{h=M} \Gamma(h) \quad \text{für } N_{\text{tot}} \gg M. \quad (35)$$

Der Beweis ist der Quelle [Sti15] zu entnehmen. Wie im Falle der unabhängigen Zufallsvariablen liefert das Gesetz der großen Zahlen für abhängige Zufallsvariablen den Beweis für die Korrektheit des Schätzwertes und der zentrale Grenzwertsatz eine Abschätzung des statistischen Fehlers. Im Folgenden wird ein  $D$ -dimensionales Volumen  $V$  betrachtet und  $N_{\text{tot}}$  Punkte  $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N_{\text{tot}}}$  aus diesem Volumen mit der stationären Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(\vec{x})$  ausgewählt. Insgesamt folgt somit für die Monte Carlo Integration unter Benutzung eines stationären stochastischen Prozesses:

$$\int_V p(\vec{x}) f(\vec{x}) d^Dx \approx \bar{f} \pm \sqrt{\frac{\sum_{h=-\infty}^{\infty} \bar{\Gamma}_f(h)}{N_{\text{tot}}}}, \quad (36)$$

$$\bar{f} = \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} f(\vec{x}_i), \quad \bar{\Gamma}_f(h) = \frac{1}{N_{\text{tot}} - h} \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}-h} (f(\vec{x}_i) - \bar{f})(f(\vec{x}_{i+h}) - \bar{f}),$$

Zudem wurde eine Schätzfunktion  $\bar{\Gamma}$  für den Fehler eingeführt. Hierbei wurde angenommen, dass die Kovarianz endlich ist,  $\sum_{h=0}^{\infty} |\Gamma_f(h)| < \infty$ .

### 3.3. Markow-Ketten

In diesem Kapitel soll eine Art eines stochastischen Prozesses, die sogenannte Markow-Kette, beschrieben werden. Hierbei ist die Erzeugung einer stationären Verteilung  $P^{\text{eq}}$ , wie sie beispielsweise in Gleichung (36) verwendet wurde, Ziel dieses Unterkapitels. Die Ausführungen beziehen sich auf Quelle [CF81].

Eine Markow-Kette wird durch eine  $R \times R$  Matrix  $W(R \leq \infty)$  mit den Elementen  $W_{ij}$  beschrieben wird. Die Elemente  $W_{ij}$  geben die Wahrscheinlichkeit für den Übergang des System aus einem Zustand  $s_i$  in einen anderen diskreten Zustand  $s_j$  in einem Markow-Schritt an. Da die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs  $s_i$  zu irgendeinem Zustand gleich eins sein muss, gilt die Bedingung  $\sum_{j=1}^R W_{ij} = 1$ . Mit der Definition der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte,  $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , für  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$  lässt sich das Prinzip auf kontinuierliche Zustände erweitern:

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0 \quad \text{und} \quad \int d\mathbf{x}' W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1, \quad (\text{für alle } \mathbf{x}). \quad (37)$$

Für einen  $n$ -Schritt Markow-Prozess ergibt sich die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von  $\mathbf{x}$  nach  $\mathbf{x}'$  zu

$$W^{(n)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int d\mathbf{x}_1 \dots \int d\mathbf{x}_{n-1} W(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) W(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \dots W(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}') \quad (38)$$

$$= \int d\mathbf{x}_\alpha W^{n-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\alpha) W(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}'), \quad (39)$$

wobei Gleichung (39) eine verkürzte Schreibweise der Gleichung (38) ist. Im diskreten Fall entspricht obige Gleichung (39) einer einfachen Matrixmultiplikation. Unter Zuhilfenahme der Eigenschaften (37) liefert Gleichung (39) für das Langzeitverhalten des Systems

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W^n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = P^{\text{eq}}(\mathbf{x}'). \quad (40)$$

Demnach ist im Grenzfall für große  $n$  die Übergangswahrscheinlichkeitsfunktion unabhängig von der Anfangskonfiguration und durch  $P^{\text{eq}}(\mathbf{x}')$  gegeben. Des Weiteren lässt sich zeigen, dass die Verteilung  $P^{\text{eq}}(\mathbf{x})$  stationär und der einzige Fixpunkt ist. Zudem erfüllt  $P^{\text{eq}}(\mathbf{x})$  die Eigenschaften einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P^{\text{eq}}(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \text{und} \quad \int d\mathbf{x}' P^{\text{eq}}(\mathbf{x}') = 1, \quad (\text{für alle } \mathbf{x}). \quad (41)$$

Zur Vermeidung von Grenzzyklen wird zusätzlich die sogenannte Detailed-Balance-Bedingung formuliert:

$$\frac{W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{W(\mathbf{x}', \mathbf{x})} = \frac{P^{\text{eq}}(\mathbf{x}')}{P^{\text{eq}}(\mathbf{x})}. \quad (42)$$

### 3.4. Metropolis-Hastings-Algorithmus

In diesem Unterkapitel wird die benötigte stationäre Verteilung  $P^{\text{eq}}$  zur Berechnung der Erwartungswerte in Gleichung (15) aufgestellt und ein Algorithmus zur Erzeugung der Gleichgewichtsverteilung vorgestellt. Die Ausführungen beziehen sich hierbei auf die Quelle [CF81]. Unter Verwendung des diskreten Zeitgitters wird eine Gitterkonfiguration  $\mathbf{x}_k$  durch die Gitterkoordinaten  $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{N_{\text{site}}}^{(k)}, T = N_{\text{site}}a$  beschrieben. Mit dieser Notation wird Gleichung (15) zu

$$\langle A \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\mathbf{x} A(\mathbf{x}) e^{-S_E(\mathbf{x})}}{\int \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-S_E(\mathbf{x})}}, \quad \text{mit} \quad \int \mathcal{D}\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N_{\text{site}}} dx_i. \quad (43)$$

Da der Exponent  $\exp(-S(\mathbf{x}))$  über mehrere Größenordnungen variiert, ist die zufällige Auswahl von  $\mathbf{x}$  wie in der einfachen Monte-Carlo-Integration nicht zweckmäßig. Stattdessen werden Konfiguration  $\mathbf{x}$  mit der Importance-Sampling-Methode unter Ausnutzung von Markow-Ketten nach folgender Verteilung gewählt:

$$P^{\text{eq}}(\mathbf{x}_k) \mathcal{D}\mathbf{x} = \frac{\exp[-S_E(\mathbf{x}_k)] \mathcal{D}\mathbf{x}}{\int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp[-S_E(\mathbf{x})]}. \quad (44)$$

Der Schätzwert der Größe  $\langle A \rangle$  ergibt sich somit zu

$$\bar{A} = \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{tot}}} A(\mathbf{x}_k), \quad (45)$$

wobei  $N_{\text{tot}}$  die Anzahl der erzeugten Systemzustände bezeichnet.

In dieser Arbeit werden die Gitterpunkte sukzessiv bearbeitet, die Übergangswahrscheinlichkeit bei einer Änderung eines einzigen Gitterpunktes  $x_j$  nach  $x'_j$  wird als  $W_s$  bezeichnet. Für die Detailed-Balance-Bedingung (42) folgt

$$\frac{W_s(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{W_s(\mathbf{x}', \mathbf{x})} = \frac{e^{-S_E(x'_j)}}{e^{-S_E(x_j)}}, \quad (46)$$

wobei  $S(x_j)$  nur von der Koordinate  $x_j$  und deren nächsten Nachbarn abhängt. Die Multiplikation aller Übergangswahrscheinlichkeiten für jeden Gitterpunkt stellt einen Markow-Prozess für eine Monte-Carlo-Iteration dar<sup>2</sup>

$$W^{(N_{\text{site}})} = W_s(x'_{N_{\text{site}}}, x_{N_{\text{site}}}) W_s(x'_{N_{\text{site}}-1}, x_{N_{\text{site}}-1}) \dots W_s(x'_2, x_2) W_s(x'_1, x_1). \quad (47)$$

Die konkrete Form der Übergangswahrscheinlichkeit  $W_s$  ist noch nicht eindeutig festgelegt. In dieser Arbeit wird der Metropolis-Hastings-Algorithmus verwendet. Dieser kann leicht nach dem folgenden Schema implementiert werden:

1. Wähle einen neuen zufälligen Wert  $x'_j$  aus einer Vorschlagswahrscheinlichkeit aus.
2. Akzeptiere den neuen Wert  $x'_j$  mit der Wahrscheinlichkeit:

$$P_{\text{acc}} = \min \left( 1, e^{-\Delta S(x'_j, x_j)} \right), \quad \text{mit} \quad \Delta S(x'_j, x_j) = S_E(x'_j) - S_E(x_j). \quad (48)$$

3. Wenn der neue Wert  $x'_j$  nicht akzeptiert wurde, behalte den alten Wert  $x_j$ .

Eine Monte-Carlo-Iteration beruht somit auf der Wiederholung der drei Schritte für alle  $x_j, j = 1, 2, \dots, N_{\text{site}}$ , wobei  $N_{\text{site}}$  die Anzahl der Gitterpunkte bezeichnet. Zusätzlich werden noch die Parameter  $\Delta$  und  $\bar{n}$  eingeführt. Für eine stark gepeakte Wirkung  $S(\mathbf{x})$  ist es sinnvoll die Wahl eines neuen Wertes  $x'_j$  auf die Umgebung  $[x_j - \Delta, x_j + \Delta]$  zu beschränken, wobei hier zusätzlich die Vorschlagswahrscheinlichkeit in diesem Intervall gleich gewählt wird. Der Parameter  $\bar{n}$  steht für die Anzahl, wie oft ein Gitterpunkt innerhalb einer Monte-Carlo-Iteration ausgewählt wird. Die Übergangswahrscheinlichkeit  $W$  kann auch als „Zeitentwicklungsoperator“ im Phasenraum aufgefasst werden.

Zur Berechnung der Erwartungswerte der Gleichung (43) werden Systemzustände gemäß der Gleichung (44) verwendet. Ausgehend von einer beliebigen Anfangskonfiguration  $\mathbf{x}_1$  müssen erst eine gewisse Anzahl an Iterationen  $N_{\text{therm}}$  verworfen werden, bis die Systemzustände gemäß der Gleichgewichtsverteilung  $P_{\text{eq}}$  ausgewählt werden und erst dann können die Konfigurationen verwendet werden. Dieser Vorgang wird als Thermalisierung bezeichnet und kann durch die Erhöhung von  $\bar{n}$  beschleunigt werden.

<sup>2</sup>Statt des Zustandes wird hier der veränderte Gitterpunkt in der Übergangswahrscheinlichkeit dargestellt, da alle anderen Gitterpunkte fest sind.

### 3.5. Numerische Fehler

In diesem Kapitel soll die Bestimmung der statistischen Fehler der Gleichung (36) auf das gegebene Modell angepasst und auf eine handliche Form gebracht werden. Es wird ausschließlich der Fall einer einzigen Observablen unter Zuhilfenahme der Quelle [Wol04] betrachtet. Die Behandlung abgeleiteter Funktionen mehrerer primärer Observablen ist der Quelle [Wol04] zu entnehmen.

Die Autokorrelationsfunktion einer Observablen  $A$  wird definiert als:

$$\Gamma(t) = \langle (A(\mathbf{x}_\nu) - \langle A \rangle)(A(\mathbf{x}_{\nu+t}) - \langle A \rangle) \rangle. \quad (49)$$

Die Varianz ergibt sich analog zu Gleichung (36) zu:

$$\sigma^2 = \frac{C}{N_{\text{tot}}}, \quad C = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \Gamma(t). \quad (50)$$

Unter Annahme der Symmetrie:

$$\Gamma(-t) = \Gamma(t), \quad (51)$$

kann die Varianz in eine günstige Form überführt werden<sup>3</sup>:

$$\sigma^2 = 2 \cdot \underbrace{\left( \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \frac{\Gamma(t)}{\Gamma(0)} \right)}_{\tau_{\text{int}}} \underbrace{\frac{\Gamma(0)}{N_{\text{tot}}}}_{\sigma_{\text{naive}}^2}, \quad (52)$$

wobei  $N_{\text{tot}}$  die Gesamtanzahl der Iterationen im Gleichgewicht bezeichnet. Für die gegebene Form der Varianz lassen sich zwei Grenzfälle betrachten: Im Fall von  $\Gamma(t) \propto \delta_{0,t}$  liefert  $2\tau_{\text{int}} = 1$  und obige Gleichung (52) stellt den unkorrelierten Fall dar:  $\sigma = \sigma_{\text{naive}}$ . Nach Quelle [NB99] kann ein asymptotisches exponentielles Abfallen von  $\Gamma_{\alpha\beta}$  für große  $t$  angenommen werden, welches durch eine Größe  $\tau$  charakterisiert wird,  $\Gamma \propto \exp(-|t|/\tau)$ . Für ein vollständig exponentielles Verhalten gilt  $\tau_{\text{int}} = \tau + \mathcal{O}(\tau^{-1})$ . Im Allgemeinen ist die Anzahl der unabhängigen Datenpunkte gegeben durch

$$N_{\text{ind}} = \frac{N_{\text{tot}}}{2\tau_{\text{int}}}. \quad (53)$$

Die integrierte Autokorrelationszeit trägt somit maßgeblich zum Fehler bei, wobei sich zwei Methoden zur Bestimmung der integrierten Autokorrelationszeit  $\tau_{\text{int}}$  und somit des statistischen Fehlers eignen: Die  $\Gamma$ -Methode verwendet eine direkte Berechnung der Korrelationsfunktion  $\Gamma$ , während die Binning-Methode über das Verhältnis der „naiven“ Varianz zur tatsächlichen Varianz vorgeht. Eine kurze Beschreibung dieser Methoden ist dem Anhang A.3.1 und A.3.2 zu entnehmen.

---

<sup>3</sup>Die erneute Verwendung des griechischen Buchstabens  $\tau$  steht hier in keinem Zusammenhang mit der euklidischen Zeit.

## 4. Numerische Ergebnisse

Dieses Kapitel stellt den Kern dieser Arbeit dar. Die Monte-Carlo-Simulation wird zur Untersuchung des harmonischen und anharmonischen Oszillators verwendet. Die Bestimmung von Erwartungswerten, Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten und Quantentrajektorien ist hierbei Ziel dieser Untersuchung.

Zur numerischen Berechnung wird die Zeit  $T$  diskretisiert, sodass sich mit  $T = aN_{\text{site}}$  ein Zeitgitter mit  $N_{\text{site}}$  Gitterplätzen und Gitterabstand  $a$  ergibt.

Für die Implementierung der Monte-Carlo-Simulation wurde C++11 verwendet. Eine kurze Programmbeschreibung ist dem Anhang A.1 zu entnehmen.

### 4.1. Harmonischer Oszillator

Aufgrund der exakten Lösbarkeit des harmonischen Oszillators für endliche Gitterabstände  $a$ , ist dieses System besonders gut zur Untersuchung geeignet. Der Hamiltonoperator eines Teilchens der Masse  $m$  im harmonischen Oszillatorenpotential ist wie folgt gegeben:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\mu^2 x^2. \quad (54)$$

Die diskretisierte euklidische Wirkung ergibt sich zu:

$$S_E = a \sum_{i=1}^{N_{\text{site}}} \frac{1}{2} m \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{a^2} + \frac{1}{2} \mu^2 x_i^2. \quad (55)$$

Die analytischen Lösungen für den harmonischen Oszillator sind der Quelle [CF81] zu entnehmen. Es werden aufgrund der Gleichung (13) periodische Randbedingungen verwendet. Es gilt daher:

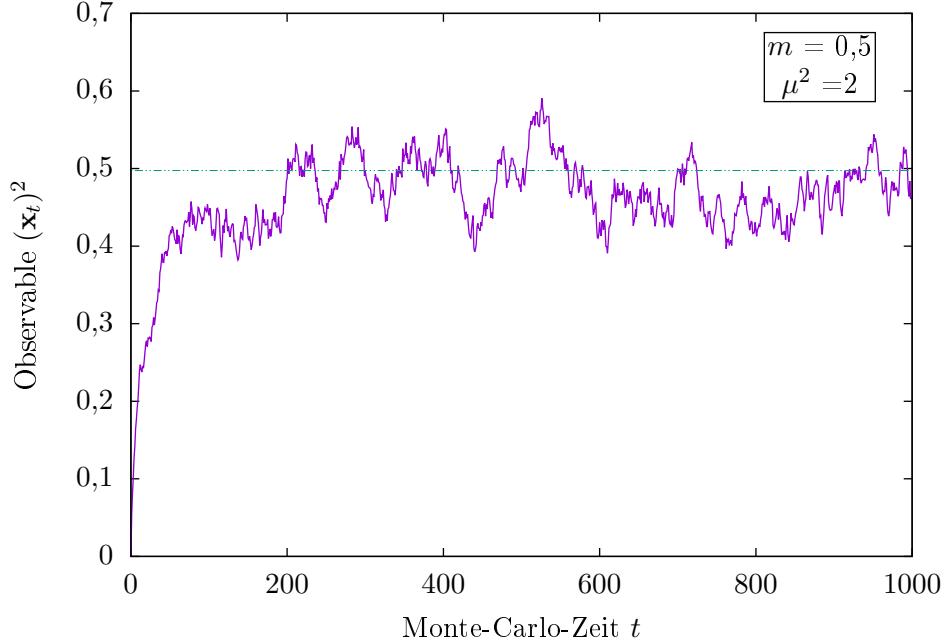
$$x_0 = x_{N_{\text{site}}}. \quad (56)$$

#### 4.1.1. Thermalisierung und Korrelationseffekte

Am Ende des Kapitels 3.4 wurde bereits auf die Notwendigkeit eines Thermalisierungsprozesses hingewiesen. Ein recht einfacher Ansatz, um sicherzustellen, dass das System sich im Gleichgewicht befindet, soll im Folgenden kurz dargelegt werden.

Als Anfangskonfiguration werden alle Koordinaten  $x_j, j = 1, 2, \dots, N_{\text{site}}$  zu null gesetzt. Dies wird als Cold Start bezeichnet, im Gegensatz dazu stellt die Anfangskonfiguration  $x_j \neq 0, \forall j$  einen Hot Start dar. Anschließend wird eine Simulation durchgeführt und für jede Trajektorie die primäre Observable des Interesses als Funktion der Monte-Carlo-Zeit  $t$  berechnet und graphisch analysiert.

Zunächst wird die Zeit  $T$  auf 100 und der Gitterabstand auf  $a = 0,1$  gesetzt. Beispielhaft wird nun der Thermalisierungsprozess der Observablen  $x^2$  untersucht. Die folgende Abbildung 2 zeigt dessen graphische Darstellung.



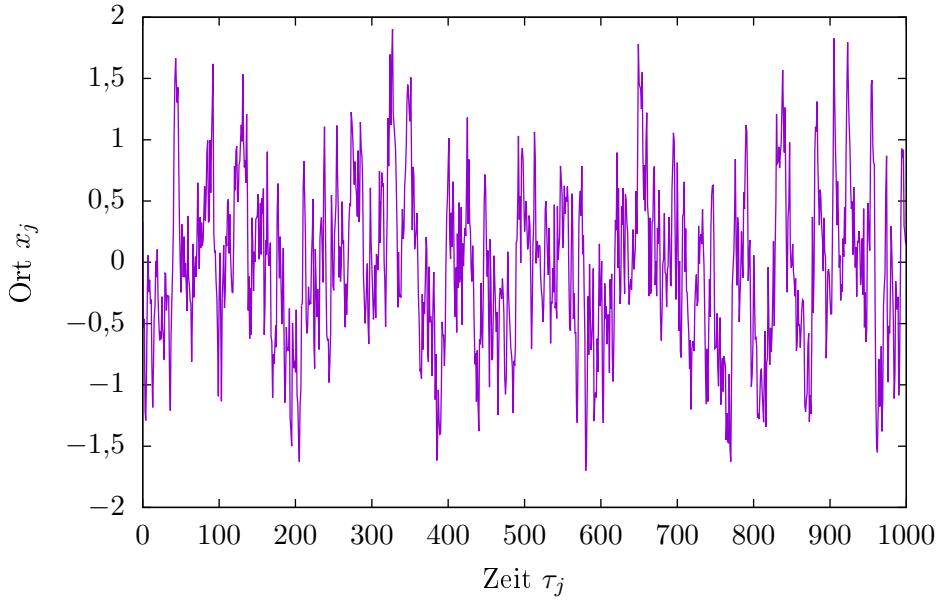
**Abbildung 2:** Die Observable  $x^2$  einer Konfiguration  $\mathbf{x}_t$  als Funktion der Monte-Carlo-Zeit  $t$ . Als Startkonfiguration wird der Cold Start genutzt. Gleichgewicht ist bei etwa  $t = 200$  erreicht. Die gestrichelte Linie gibt den analytisch berechneten Erwartungswert  $\langle x^2 \rangle$  wieder. Die Simulationsparameter sind  $N_{\text{site}} = 1000$ ,  $a = 0,1$  und  $N_{\text{tot}} = 1000$ .

Die Größe  $x^2$  steigt anfangs zunächst mit jeder weiteren Iteration von null an, dann bildet sich ein Plateau. Die Werte fluktuieren ab  $t_{\text{eq}} = 200$  um den analytischen Wert und das System befindet sich somit näherungsweise im Gleichgewicht. Die visuelle Inspektion ermöglicht demnach Einblick, wie lange das System für den Thermalisierungsprozess benötigt. Zusätzlich sollte die Bedingung

$$t_{\text{eq}} \gg \tau_{\text{int}} \quad (57)$$

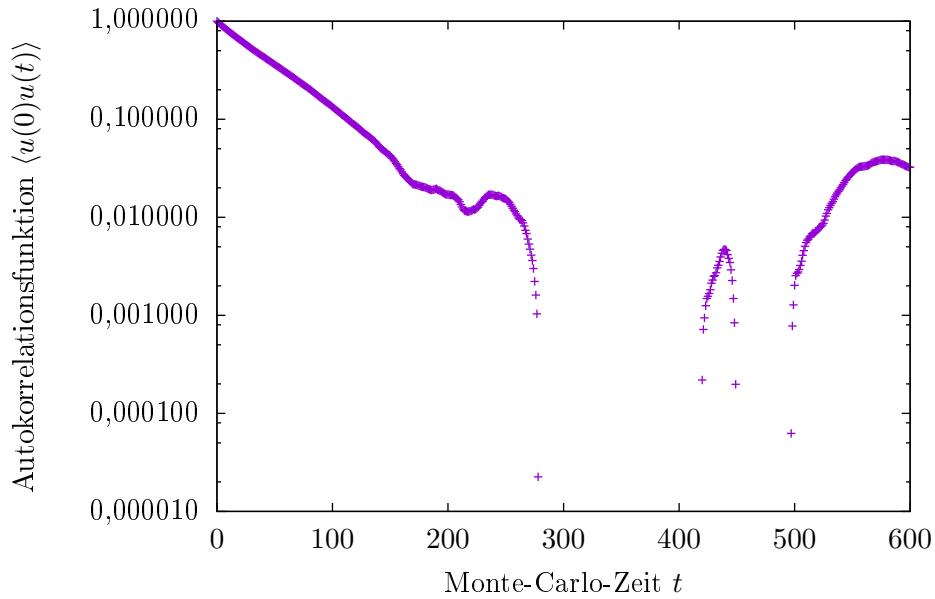
a posteriori verifiziert werden, da die Einflüsse der Nicht-Gleichgewichtsverteilung zwar mit  $\tau/N_{\text{tot}}$  abnehmen [Sok89] und somit der statistische Fehler  $\propto \sqrt{1/N_{\text{tot}}}$  überwiegt, jedoch kann der Vorfaktor der Nicht-Gleichgewichtsverteilung große Werte annehmen. Da der Rechenaufwand für neue Trajektorien gering ist, wird für die Erfüllung der Gleichung (57)  $t_{\text{eq}} \geq 100\tau_{\text{int}}$  festgelegt und die Anzahl der Gleichgewichtsiterationen im Weiteren nicht explizit angegeben. Zuletzt kann angemerkt werden, dass für komplexere Systeme metastabile Zustände existieren können, welche durch visuelle Inspektion des Thermalisierungsprozesses für verschiedene Startkonfigurationen festgestellt werden können. Im Folgenden werden die Parameter zu  $m = \mu = 1$  festgelegt.

Eine typische Trajektorie des quantenmechanischen Teilchens im Oszillatorpotential ist in folgender Abbildung 3 dargestellt. Hierbei wurde der Gitterabstand zu  $a = 0,1$  und die Zeit zu  $T = 100$  gewählt.



**Abbildung 3:** Die Ortskoordinaten  $x_j$  in Abhängigkeit von der imaginären Zeit  $t_j$  für die Trajektorie  $\mathbf{x}_{500}$  im Gleichgewicht. Die Simulationsparameter sind  $a = 0,1$  und  $N_{\text{site}} = 1000$ .

Wie erwartet fluktuiieren die Ortskoordinaten um Null, da  $\langle x \rangle = 0$  gilt. Die Trajektorie ist sehr irregulär und besitzt augenscheinlich kaum Übereinstimmung mit der Bewegung eines klassischen Teilchens. Diese Beobachtung ist in Einklang mit Gleichung (17). Die Abbildungen 2 und 3 weisen die Gemeinsamkeit von Korrelationseffekten auf. Jedoch sind diese grundsätzlich anderer Ursache. Während die Abbildung 2 die Korrelation des Wertes  $x^2$  für unterschiedliche Monte-Carlo-Zeiten  $t$  zeigt, sind in der Abbildung 3 die Orte  $x_j$  für unterschiedliche euklidische Zeiten korreliert. Der erste Effekt wirkt sich nach Gleichung (52) auf den Fehler eines Schätzwertes aus, während der zweite zur Ermittlung höherer Energieniveaus genutzt werden kann. Zunächst werden die Auswirkungen von Korrelationseffekten auf den Fehler näher betrachtet. Die Korrelationsfunktion in Abhängigkeit der Monte-Carlo-Zeit  $t$  ist nach Gleichung (36) gegeben und für die Observable  $x^2$  in folgender Abbildung 4 dargestellt. Es wurden insgesamt  $N_{\text{tot}} = 100000$  Konfigurationen für  $a = 0,1$  und  $T = 100$  erzeugt.



**Abbildung 4:** Die normierte Autokorrelationsfunktion der Observablen  $u = x^2$  als Funktion der Monte-Carlo-Zeit  $t$  auf logarithmischer Ordinatenachse. Die Simulationsparameter sind  $N_{\text{tot}} = 100000, a = 0,1, N_{\text{site}} = 1000$ .

Die Autokorrelationsfunktion  $\Gamma$  zeigt den zu erwartenden exponentiellen Verlauf. Für große Monte-Carlo-Zeiten  $t$  nimmt das Signal stark ab, wohingegen ein konstanter Anteil an Rauschen hinzukommt. Letztendlich ergeben sich somit statistische Fluktuationen.

Es ist somit nicht sinnvoll die gesamte Autokorrelationfunktionen  $\Gamma$  aufzusummen, sondern stattdessen eine Fensterfunktion einzuführen. Diese Methodik liegt der  $\Gamma$ -Methode zu Grunde und wird, wenn nicht anders vermerkt, zur Bestimmung der statistischen Fehler verwendet. Im Gegensatz zu der Jackknife-Binning-Methode ist der Fehler des Fehlers kleiner, was sich positiv auf die Ergebnisse der Simulation auswirkt (vgl. [Wol04]).

Da die Korrelationseffekte direkt den Fehler beeinflussen, ist es nötig diese möglichst klein zu halten. Dazu werden zwischen zwei Pfaden die in die Berechnung (45) einfließen, eine gewisse Anzahl  $N_{\text{skip}}$  an Trajektorien nicht in die Berechnung einbezogen.

Da die integrierte Autokorrelationszeit  $\tau_{\text{int}}$  für ein festes  $T = 100$  mit kleiner werdendem Gitterabstand zunimmt, wird folgende Näherung für den harmonischen Oszillator verwendet:

$$\tau_{\text{int}} \approx 2 \cdot 0,61a^{-1.74}. \quad (58)$$

Diese Gleichung entstammt einer einfachen Analyse der integrierten Autokorrelationszeit von  $x^2$  als Funktion des Gitterabstandes  $a$  und stellt eine grobe Abschätzung dieser Beziehung dar. Dieser Effekt wird auch als „critical slowing down“ bezeichnet [Sok89]. Insgesamt ist zu beachten, dass hier nur die Korrelationseffekte der Observable  $x^2$  betrachtet wurden, prinzipiell ergeben sich für andere Observablen auch andere integrierte Autokorrelationszeiten.

Da der Datenanalyseaufwand mit  $N_{\text{tot}}$  steigt, ist die Einführung des Parameters  $N_{\text{skip}}$  zweckmäßig. Des Weiteren erweist sich die Wahl  $\Delta \approx 2\sqrt{a}$ , wie im Anhang A.2 gezeigt wurde, als

sinnvoll und die Wahl von  $\Delta$  wird nicht explizit aufgeführt, um die Parameterliste übersichtlich zu halten.

#### 4.1.2. Energie und Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes

Die Isolation der Grundzustandserwartungswerte kann über die Gleichung (16) für  $T \rightarrow \infty$  durchgeführt werden. In der Simulation ist der Grenzfall nicht zu realisieren, sodass sich per se Abweichungen von den Grundzustandswerten ergeben. Dennoch lassen sich auch für endliche  $T$  gute Ergebnisse erzielen, wenn die charakteristische Zeitskala des Systems berücksichtigt wird:

$$T_E = 2\pi/E_0. \quad (59)$$

Hieraus folgt für die Wahl des Simulationsparameters

$$T \gg T_E, \quad (60)$$

wobei in dem gegebenen Fall die Grundzustandsenergie bekannt ist. Im Allgemein kann obige Ungleichung durch systematische Erhöhung des Parameters  $T$  und anschließender Analyse der Änderung der Grundzustandswerte überprüft werden. Im Weiteren wird der Parameter  $T$  auf 100 festgelegt. Dass diese Approximation wenigstens für die Energiebestimmung ausreichend ist, kann über die direkte Berechnung der Energie nach Gleichung (16) für ein festes  $T$  gezeigt werden, wobei sich folgende Darstellung ergibt:

$$\langle H \rangle = 0,5\mu \coth(\mu T/2). \quad (61)$$

Unter Gebrauch von  $\mu = 1$  und  $T = 100$  ergibt sich ein systematischer Fehler der deutlich unter dem statistischen Fehler liegt.

Zusätzlich müssen statistische Fluktuationen des „Kristalls“ berücksichtigt werden. Für einen Operator  $A = \sum_{i=1}^{N_{\text{site}}} A_i$  ergeben sich die relativen statistischen Schwankungen um den Mittelwert  $\bar{A}$  zu

$$\Delta_A = \frac{\overline{\Delta A^2}^{1/2}}{|\bar{A}|} \propto 1/\sqrt{N_{\text{site}}}, \quad (62)$$

wobei  $\Delta A = A - \bar{A}$  gilt (vgl. [CF81]). Somit führt eine größere Anzahl an Gitterpunkten auf geringere statistische Schwankungen.

Zuletzt ist es notwendig den Gitterabstand  $a$  entsprechend klein zu wählen, sodass das Kontinuumslimit gut approximiert wird. Mit der charakteristischen Zeit  $T_E$  ergibt sich die Bedingung

$$a \ll T_E. \quad (63)$$

Die systematischen Fehler sind in diesem Fall nicht zu vernachlässigen und führen zu Abweichungen von den Kontinuumswerten. Durch eine Extrapolation auf  $a = 0$  kann jedoch der Kontinuumslimit gewonnen werden. Unter Berücksichtigung dieser Randbedingungen können nun die Grundzustandsenergie und Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bestimmt werden.

Im Pfadintegralformalismus ist die Wahrscheinlichkeit für das Antreffen eines Teilchen zwi-

schen  $x - \Delta x$  und  $x + \Delta x$  ein einfacher zeitlicher Mittelwert über die Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$P(x; T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt' \int_{x-\Delta x}^{x+\Delta x} dx' \frac{K(x_b, T, x', t') K(x', t', x_a, 0)}{K(x_b, T, x_a, 0)}. \quad (64)$$

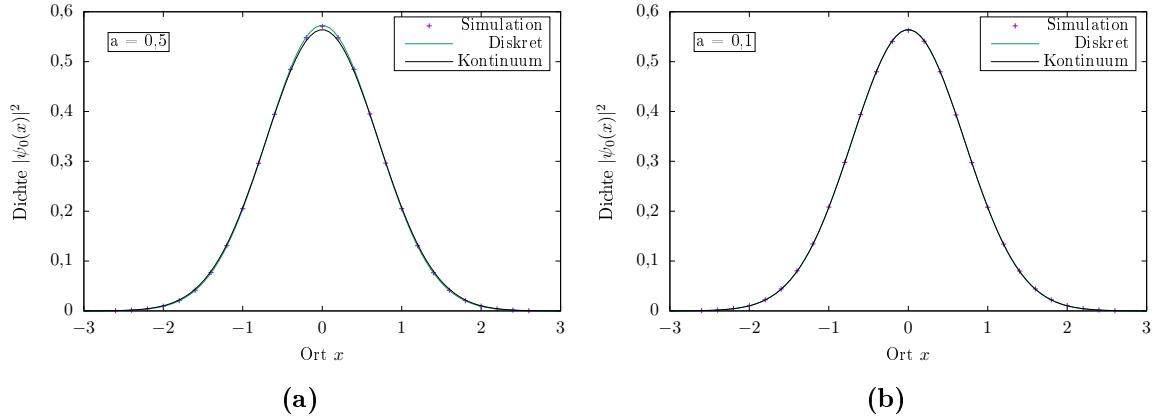
Für große  $T$  kann über Gleichung (28) die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi_0(x)|^2$  des Grundzustands ermittelt werden[CF81]:

$$\frac{P(x, T)}{\Delta x} = |\psi_0(x)|^2 + O\left(\frac{1}{(E_1 - E_0)T}\right). \quad (65)$$

Wenn  $T \gg 1/(E_1 - E_0)$  gilt, ist eine Isolation der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes möglich. In der Simulation wird hierzu die Ortsachse in Segmente  $N_{\text{bin}}$  der Breite  $\Delta x$  geteilt:

$$|\psi_0(x)|^2 = \frac{1}{\Delta x} \sum_k^{N_{\text{tot}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{site}}} \Theta(\Delta x - |x_j^{(k)} - x|) / \sum_k^{N_{\text{tot}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{site}}} 1, \quad (66)$$

wobei  $\Delta x$  klein ist und  $\Theta$  die Heavysidefunktion bezeichnet. Damit die statistischen Fluktuationen in den Segmenten klein sind, werden ungefähr 100000 unabhängige Konfigurationen für  $\Delta x = 0,2$  verwendet. Die Abbildung 5 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes für die Werte  $a = 0,5$  und  $a = 0,1$ .

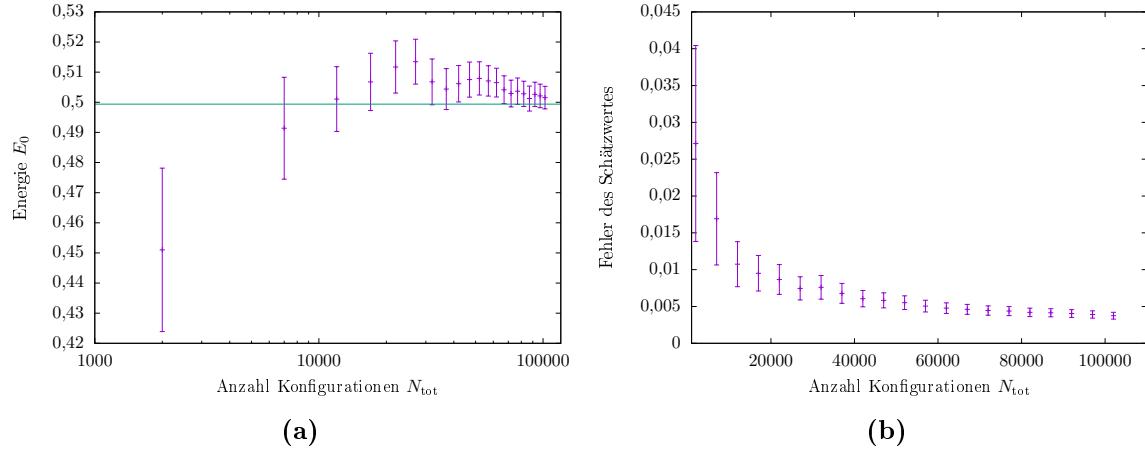


**Abbildung 5:** Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes für den harmonischen Oszillatoren. Die Punkte bezeichnen die Monte Carlo Simulation, die durchgezogene grüne Linie präsentiert die diskrete Theorie und die schwarze gibt die Kontinuumstheorie wieder. Es wurden unter Verwendung von Gleichung (58) ungefähr 100000 unabhängige Konfigurationen verwendet. Für die linke Abbildung (a) wurde  $a = 0,5$  und für die rechte Abbildung (b)  $a = 0,1$  gewählt.

Die diskrete Theorie ist in sehr guter Übereinstimmung mit der Simulation. Die Kontinuumstheorie weicht aufgrund der Verletzung der Gleichung (63) in der linken Abbildung 5a etwas davon ab. Die Wahl eines kleineren Gitterabstands führt in Abbildung 5b zur visuellen Übereinstimmung der drei Theorien.

Die Bestimmung der Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators kann mittels des Virialtheorems (18) durchgeführt werden. Die Masse  $m$  und die Frequenz  $\mu$  werden im Fol-

genden zu eins skaliert. Abbildung 6 zeigt den Schätzwert der Energie und dessen Fehler in Abhängigkeit von  $N_{\text{tot}}$ .



**Abbildung 6:** Schätzwert der Energie (a) und dessen Fehler (b) in Abhängigkeit von  $N_{\text{tot}}$  für den harmonischen Oszillatoren. In der linken Abbildung (a) stellt die durchgezogene Linie den analytischen Wert der Energie dar. Die Simulationsparameter sind  $T = 100$  und  $a = 0,1$ .

Alle Schätzwerte stimmen in der Zwei-Sigma-Umgebung mit dem analytischen Wert überein. Der Fehler zeigt die zu erwartende  $1/\sqrt{N_{\text{tot}}}$ -Abhängigkeit.

Die Fehler können unter Anwendung der Gleichung (58) reduziert werden. Nachfolgende Tabelle zeigt die Schätzwerte und analytische Werte der Energie für verschiedene finite Gitterabstände  $a$ , wobei Gleichung (58) verwendet wurde.

**Tabelle 1:** Schätzwerte und analytische Werte der Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators für verschiedene Gitterabstände  $a$ . Unter Verwendung der Gleichung (58) wurden in etwa  $N_{\text{ind}} \approx 70000$  unabhängige Werte erzeugt.

Gitterabstand $a$	Simulation $E_0$	Theorie $E_0$
1	0,44749(28)	0,44721
0,9	0,45619(27)	0,45596
0,8	0,46399(27)	0,46423
0,7	0,47199(26)	0,47192
0,6	0,47899(25)	0,47891
0,5	0,48500(25)	0,48507
0,4	0,49027(26)	0,49029
0,3	0,49473(27)	0,49449
0,2	0,49761(30)	0,49752
0,1	0,49911(42)	0,49938
0,05	0,49943(45)	0,49985

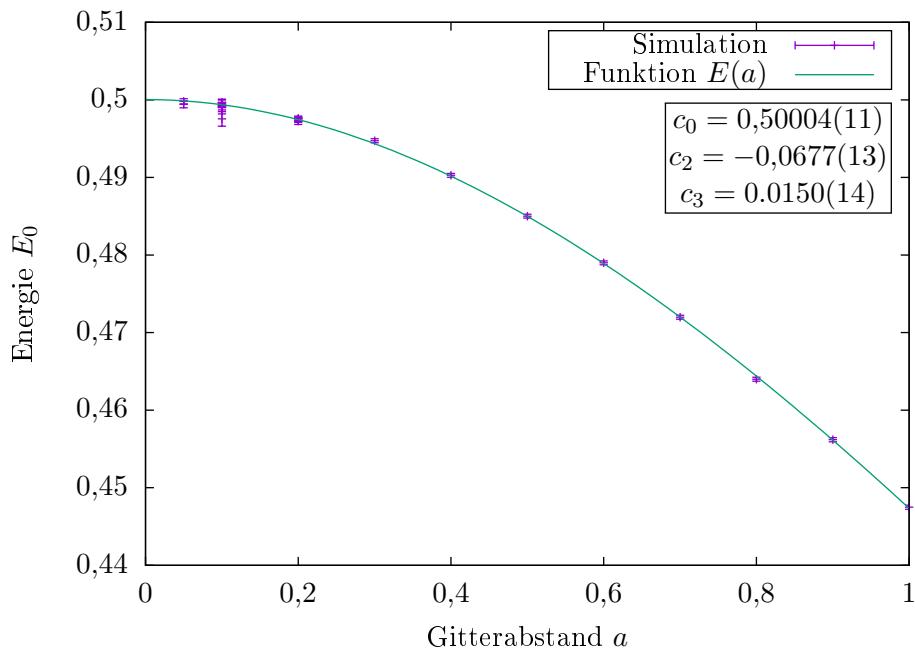
Obige Tabelle zeigt die sehr gute Übereinstimmung der Simulation mit den analytischen Werten.

Der Kontinuumsfall  $a \rightarrow 0$  kann durch Extrapolation bestimmt werden. Der exakte Verlauf

der Energielücke als Funktion des Gitterabstandes ist bekannt, unter Ignoranz dieser Tatsache kann ein einfaches Polynom von Grad drei als Fitfunktion angesetzt werden:

$$E(a) = \sum_{i=0}^3 c_i a^i, \quad (67)$$

wobei die Fitparameter mit  $c_i$  bezeichnet werden. Abbildung 7 zeigt den Schätzwert der Grundzustandsenergie  $E_0$  als Funktion des Gitterabstandes  $a$ , wobei ein asymptotisches Verhalten der Energie als Funktion des Gitterabstandes optisch sichtbar ist, sodass in Gleichung (67) die Wahl  $c_1 = 0$  gerechtfertigt erscheint. Um die Statistik zu erhöhen wurden zusätzliche Energiewerte aufgenommen, welche nicht in Tabelle 1 aufgeführt sind. Die Fitparameter wurden mittels Gnuplot ermittelt, wobei deren Fehler nach Quelle [You12] korrigiert wurden.



**Abbildung 7:** Der Schätzwert der Energie  $E_0$  als Funktion des Gitterabstandes  $a$ . Die Punkte verdeutlichen die Simulationsdaten und die durchgezogene Linie repräsentiert die Anpassung der Gleichung (67) an die Simulationsdaten. Die Fitparameter sind der Abbildung zu entnehmen. Um die Statistik zu erhöhen sind zusätzliche Energiewerte aufgenommen worden, welche nicht in Tabelle 1 aufgeführt sind.

Der Schätzwert der Energie  $E_0$  im Kontinuum von  $0,50004(11)$  ist in guter Übereinstimmung mit dem analytischen Wert von  $0,5$ .

#### 4.1.3. Energie des ersten angeregten Zustandes

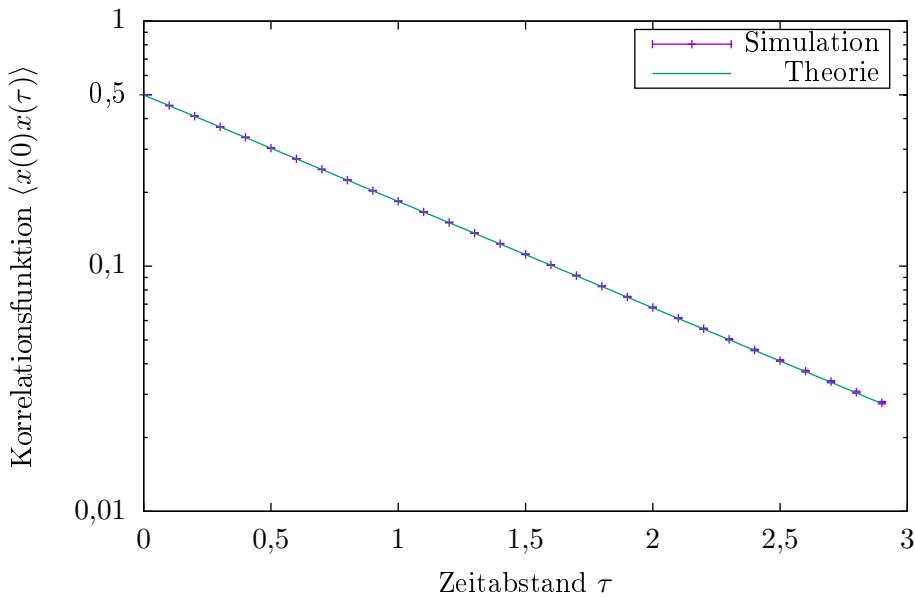
Die Bestimmung der Energie des ersten angeregten Zustandes kann unter Verwendung von Korrelationsfunktionen über Gleichung (25) durchgeführt werden. Da für den harmonischen Oszillatoren der Erwartungswert  $\langle x \rangle = 0$  ist, kann die normale Zweipunktfunktion genutzt werden. Aufgrund der periodischen Randbedingungen sind die Korrelationsfunktionen sym-

metrisch um die Gittermitte. Diese Tatsache kann zur Verdopplung der Statistik genutzt werden, andererseits führt dies zu einer Abänderung der Korrelationsfunktion:

$$C(t) = \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-HT} A(t) A(0)) = \sum_{m,n} \frac{|\langle n | A | m \rangle|^2}{2Z} e^{-E_n T} e^{-(E_m - E_n)T/2} \cosh \left[ \left( \tau - \frac{T}{2} \right) (E_m - E_n) \right], \quad (68)$$

wobei  $A$  hier einen Operator der Form  $x^l, l \in \mathbb{N}$  bezeichnet.

Es wird ein Gitterabstand von  $a = 0,1$  verwendet und unter Verwendung der Gleichung (58)  $N_{\text{ind}} > 50000$  unabhängige Konfigurationen erzeugt. Abbildung 8 zeigt die Korrelationsfunktion  $\langle x(0)x(\tau) \rangle$  gegeben durch die Simulation und Theorie.



**Abbildung 8:** Korrelationfunktion  $\langle x(0)x(\tau) \rangle$  als Funktion des Zeitabstand  $\tau$  für den harmonischen Oszillatoren. Die Punkte veranschaulichen die Ergebnisse der Simulation und die durchgezogene Linie stellt die analytische Vorhersage dar. Unter Verwendung der Gleichung (58) wurden  $N_{\text{ind}} > 50000$  für einen Gitterabstand von  $a = 0,1$  erzeugt.

Die Simulation ist in sehr guter Übereinstimmung mit der Theorie. Zudem deutet die gerade Linie an, dass  $\langle 0 | x | n \rangle$  der Gleichung (25) nur für  $n = 1$  ungleich null ist. Da  $x \sim a + a^\dagger$  gilt, werden keine Anteile höher liegender Energieniveaus aufgenommen. Abweichungen ergeben sich für große  $\tau$  durch statistische Fluktuationen.

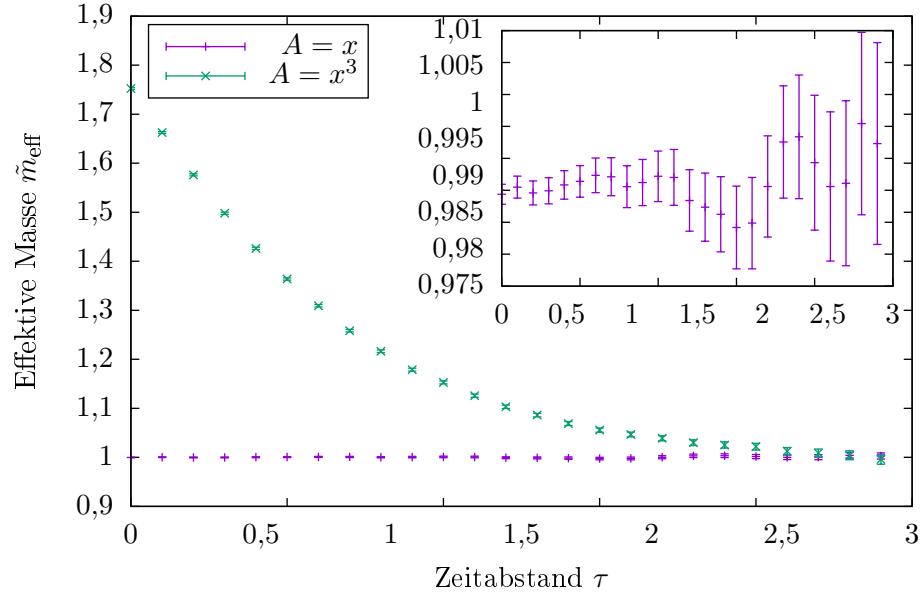
Erneute Betrachtung der Gleichung (68) zeigt, dass aufgrund des Nicht-Kommutierens des Ortsoperators mit dem Paritätsoperators, sowohl der Operator  $A = x$  als auch  $A = x^3$ , den Grundzustand mit gerader Parität mit dem ersten angeregten Zustand ungerader Parität koppeln. Demnach gilt

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} m_{\text{eff}}^x = \lim_{\tau \rightarrow \infty} m_{\text{eff}}^{x^3} = a(E_1 - E_0). \quad (69)$$

Im Folgenden wird die Beziehung

$$\tilde{m}_{\text{eff}} = a^{-1} m_{\text{eff}} \quad (70)$$

genutzt, die beiden Definitionen unterscheiden sich somit nur um den Faktor  $a^{-1}$ . Die Abbildung 9 zeigt die effektive Masse für die Operatoren  $x$  und  $x^3$ . Für die Simulation wurde ein Gitterabstand von  $a = 0,1$  verwendet und  $N_{\text{ind}} > 50000$  unabhängige Konfigurationen erzeugt.

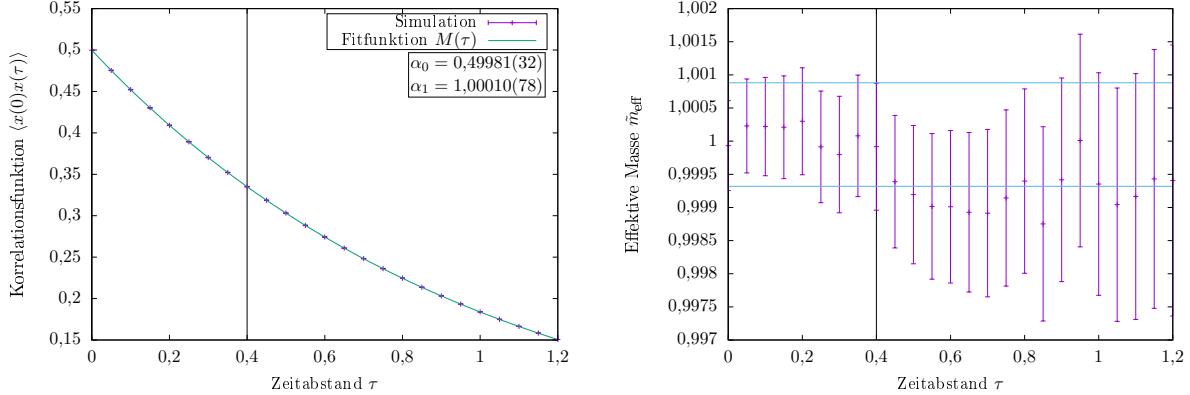


**Abbildung 9:** Die effektive Masse  $\tilde{m}_{\text{eff}}$  als Funktion des Zeitabstands  $\tau$  für die Operatoren  $A = x$  und  $A = x^3$ . Der Ausschnitt zeigt die  $\tilde{m}_{\text{eff}}^x$  auf einer vergrößerten Ordinatenachse. Es wurde eine Gitterkonstante von  $a = 0,1$  verwendet und  $N_{\text{ind}} > 50000$  Datensätze erzeugt.

Die effektive Masse  $\tilde{m}_{\text{eff}}^x$  zeigt wie erwartet ein sofortiges Eintreten eines Plateaus, im anderen Fall konvergiert die effektive Masse deutlich langsamer gegen die Energielücke, da zusätzliche Beiträge von höheren Energiezuständen enthalten sind. In dem vergrößerten Ausschnitt ergeben sich für größer werdendes  $\tau$  Fluktuationen, da die Amplitude der Korrelationsfunktion exponentiell abnimmt. Demnach sollte der Bereich zur Bestimmung der Energielücke  $E_1 - E_0$  einen Kompromiss zwischen statistischem und systematischem Fehler darstellen.

Die Bestimmung der Energielücke wird im Folgenden mit Hilfe von  $\tilde{m}_{\text{eff}}^x$  ausgeführt, wobei auf die einfache Bezeichnung  $\tilde{m}_{\text{eff}}$  zurückgegriffen wird. Da die Daten in Abbildung 9 korreliert sind, wird eine Jackknife-Binning-Analyse durchgeführt, welche kurz in den Kapiteln A.3.3 und A.3.2 beschrieben wird. Es wird ein Plateauwert der integrierten Autokorrelationszeit für den Operator  $x$  bestimmt und die Daten entsprechend der ermittelten Binlänge in Jackknife-Bins unterteilt. Der eigentliche Fit wird mit Gnuplot (Marquardt-Levenberg) in jedem dieser Jackknife-Bins durchgeführt. Die Fitparameter und Fehler lassen sich anschließend nach Kapitel A.3.3 bestimmen. Als Fitfunktion dienen zwei Exponentialfunktionen der Form  $M(\tau) = \alpha_1 (e^{-\alpha_0 t} + e^{-\alpha_0(T-t)})$ .

Die folgende Abbildung 10 zeigt die effektive Masse  $\tilde{m}_{\text{eff}}$  sowie die Anpassung der Funktion  $M(\tau)$  an die Daten. Es wird eine feste Binlänge von 50 verwendet für eine Gesamtzahl von  $N_{\text{ind}} > 50000$  Konfigurationen und ein Gitterabstand von  $a = 0,05$  gewählt.



- (a) Die Korrelationsfunktion  $\langle x(0)x(\tau) \rangle$  für einen Gitterabstand von  $a = 0,05$ . Die durchgezogene Linie symbolisiert die Anpassung an die Simulation. Die vertikale Linie verdeutlicht das für den Fit gewählte Zeitfenster  $[0, \tau_2]$ .
- (b) Die effektive Masse  $\tilde{m}_{\text{eff}}$  als Funktion des Zeitabstandes  $\tau$  für  $a = 0,05$ . Die Punkte stellen die Ergebnisse der Simulation dar. Die vertikale Linie verdeutlicht das für den Fit gewählte Zeitfenster  $[0, \tau_2]$ , während die doppelt horizontale Linie das Fehlerband, bestimmt durch eine Jackknife-Binning-Analyse, darstellt.

**Abbildung 10:** Bestimmung der effektiven Masse des ersten angeregten Zustandes des harmonischen Oszillators. Es wird  $a = 0,05$  und  $N_{\text{ind}} > 50000$  gesetzt, wobei Gleichung (58) verwendet wird.

Die ersten neun Datenpunkte in Abbildung 10b werden als Plateauwerte angenommen, danach ergeben sich aufgrund des kleiner werdenden Signals Fluktuationen. Der Parameter  $\alpha_1$  entspricht dem Schätzwert der Energielücke  $E_1 - E_0$  und wird zu

$$\alpha_1 = 1,00010(78) \quad (71)$$

bestimmt. Dieser ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert von 0,99990. Die Wiederholung dieser Vorgehensweise für verschiedene Gitterabstände  $a$  liefert die in Tabelle 2 dargestellten Energielücken. Zusätzlich sind die analytischen Werte aufgeführt.

**Tabelle 2:** Schätzwerte und analytische Werte der Energielücke  $E_1 - E_0$  für verschiedene Gitterabstände  $a$ . Unter Verwendung der Gleichung (58) wurden  $N_{\text{ind}} > 50000$  unabhängige Werte erzeugt.

Gitterabstand $a$	Simulation $E_1 - E_0$	Theorie $E_1 - E_0$
0,2	0,99875(72)	0,99834
0,1	1,00034(96)	0,99958
0,05	1,00010(78)	0,99990

Alle Werte stimmen mit den analytischen Vorhersagen überein. Die Energiewerte für  $a = 0,05$  und  $a = 0,1$  sind im Bereich ihrer Fehler konsistent mit dem Kontinuumswert von 1.

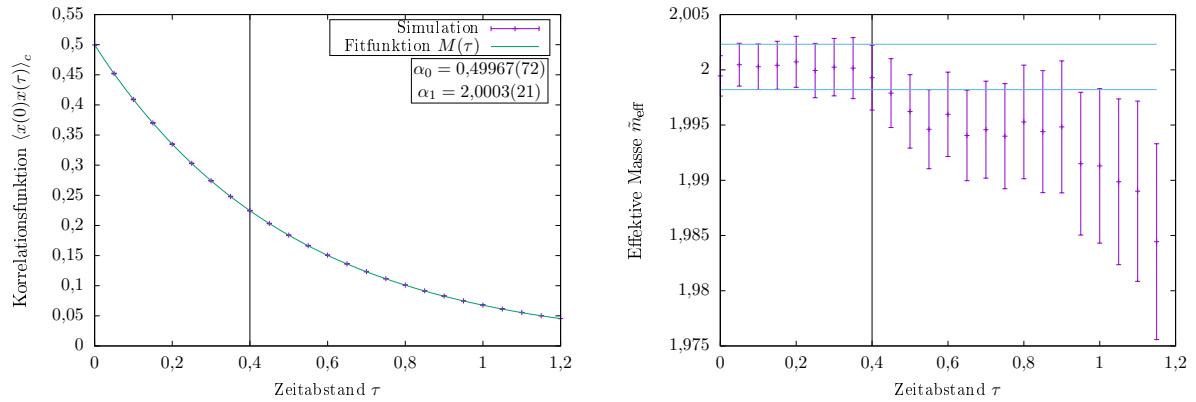
#### 4.1.4. Energie des zweiten angeregten Zustandes

Zur Bestimmung des zweiten angeregten Energiezustandes kann erneut die effektive Masse verwendet werden. Der Operator  $x^2$  koppelt hierbei den Grundzustand mit dem zweiten angeregten Zustand. Hierbei ist zu beachten, dass gilt

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C(\tau) = \sum_{n=0} e^{-(E_n - E_0)\tau} |\langle 0|x(0)|n \rangle|^2 = |\langle 0|x^2|0 \rangle| + \sum_{n=1} e^{-(E_n - E_0)\tau} |\langle 0|x(0)|n \rangle|^2. \quad (72)$$

Der erste Summand der obigen Gleichung stellt einen Konstantanteil dar, welcher zur Extraktion der Energie des zweiten angeregten Energiezustandes eliminiert werden muss. Aus diesem Grund wird die verbundene Zwei-Punkt-Funktion verwendet.

Die Abbildung 11 zeigt die effektive Masse  $\tilde{m}_{\text{eff}}$  als Funktion von  $\tau$  für einen Gitterabstand von  $a = 0,1$ . Zusätzlich ist die Anpassung an das Plateau dargestellt. Es wurden  $N_{\text{ind}} > 40000$  Konfigurationen und eine Binlänge von 50 verwendet.



- (a) Die Korrelationsfunktion  $C_c^2(\tau)$  für einen Gitterabstand von  $a = 0,05$ . Die durchgezogene Linie symbolisiert die Anpassung an die Simulation. Die vertikale Linie verdeutlicht das für den Fit gewählte Zeitfenster  $[0, \tau_2]$ .
- (b) Die effektive Masse als Funktion der Zeit  $\tau$  für  $a = 0,05$ . Die Punkte stellen die Ergebnisse der Simulation dar. Die vertikale Linie verdeutlicht das für den Fit gewählte Zeitfenster  $[0, \tau_2]$ , während die doppelt horizontale Linie das Fehlerband, bestimmt durch eine Jackknife-Binning-Analyse, darstellt.

**Abbildung 11:** Bestimmung der effektiven Masse des zweiten angeregten Zustandes. Es wird  $a = 0,05$  und  $N_{\text{ind}} > 40000$  gesetzt, wobei Gleichung (58) verwendet wird.

Abbildung 11b zeigt für die effektive Masse zwar ein Plateauverhalten, jedoch sind die statistischen Fehler aufgrund der Subtraktion des konstanten Anteils  $|\langle 0|x^2|0 \rangle|$  größer. Die untenstehende Tabelle 3 zeigt die Energielücke  $E_2 - E_0$  für verschiedene Gitterabstände  $a$ .

**Tabelle 3:** Schätzwerte und analytische Werte der Energielücke  $E_2 - E_0$  für verschiedene Gitterabstände  $a$ . Unter Verwendung der Gleichung (58) wurden  $N_{\text{ind}} > 40000$  unabhängige Werte erzeugt.

Gitterabstand $a$	Simulation $E_1 - E_0$	Theorie $E_1 - E_0$
0,2	1,9963(19)	1,9967
0,1	1,9997(21)	1,9992
0,05	2,0003(21)	1,9998

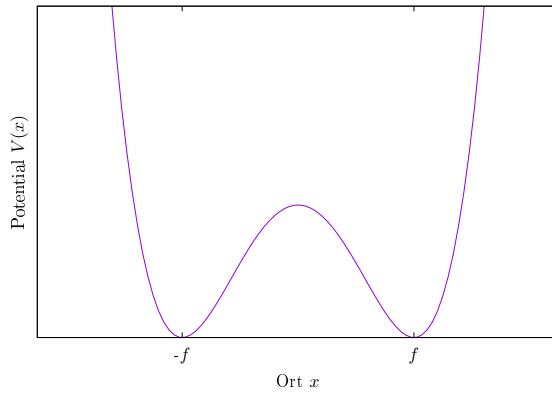
Alle Werte stimmen mit den analytischen Vorhersagen überein. Die Energiewerte für  $a = 0,05$  und  $a = 0,1$  sind im Bereich ihrer Fehler konsistent mit dem Kontinuumswert von 2.

## 4.2. Anharmonischer Oszillator

In diesem Kapitel steht die Untersuchung eines anharmonischen Oszillators im Vordergrund. Dieses Modell ist analytisch nicht exakt berechenbar. Der Hamiltonoperator des Teilchens ist wie folgt gegeben:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \lambda(x^2 - f^2)^2. \quad (73)$$

Das Doppelmuldenpotential ist in Abbildung dargestellt.



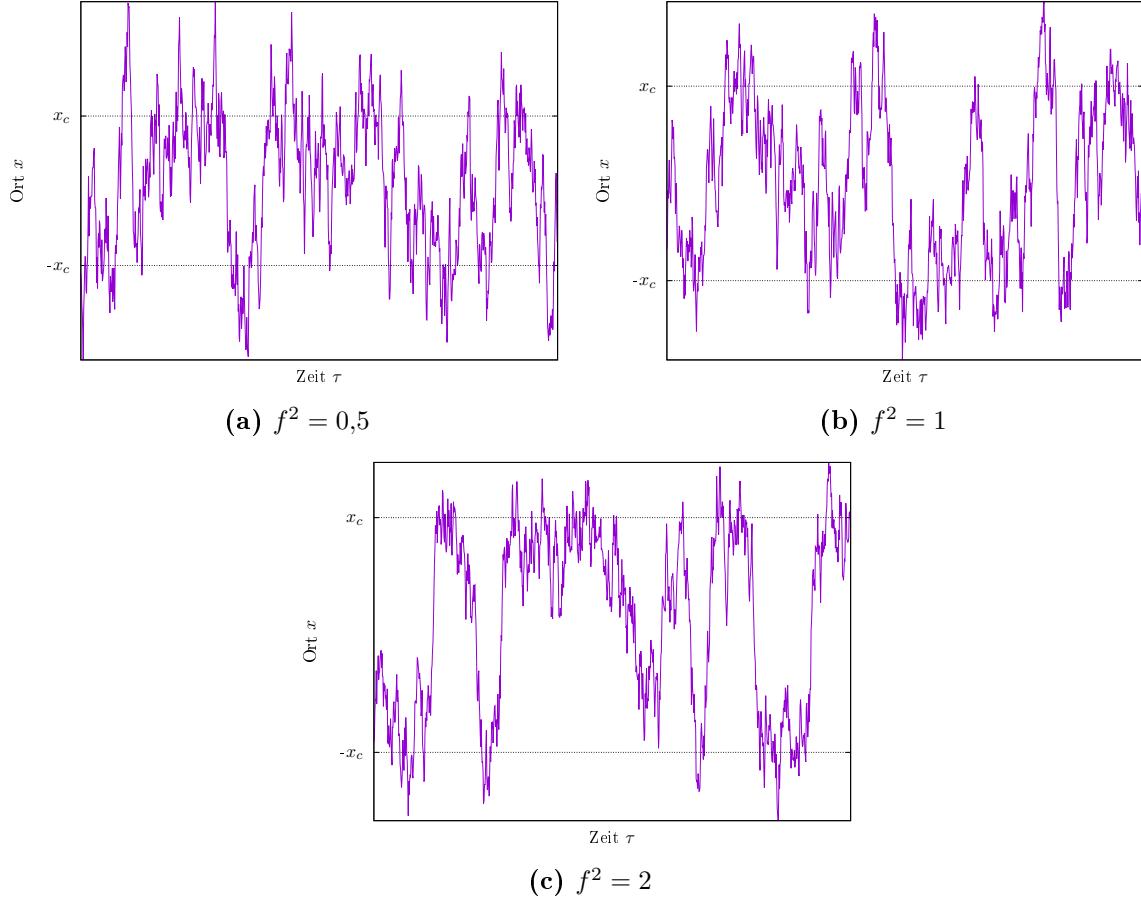
**Abbildung 12:** Das Potential  $V(x) = \lambda(x^2 - f^2)^2$  des anharmonischen Oszillators. Die Minima befinden sich an den Stellen  $\pm f$ .

Klassisch betrachtet, würde ein niederenergetisches Teilchen sich in einer der Mulden des Potentials  $V(x)$  befinden. Es existieren somit zwei entartete Grundzuständen. Quantenmechanisch wird diese Entartung auf Grund des Tunneleffekts aufgehoben, sodass der Grundzustand gerade Parität und der erste angeregte Zustand ungerade Parität aufweist. Für die Simulation wird die euklidische Wirkung wie folgt diskretisiert:

$$S_E = a \sum_{i=1}^{N_{\text{site}}} \frac{1}{2} m \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{a^2} + \lambda(x_i - f^2)^2. \quad (74)$$

#### 4.2.1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Grundzustandes und Quantentrajektorien

Zuerst sollen periodische Randbedingungen  $x_{N_{\text{site}}} = x_0$  und  $\lambda = 1$  betrachtet werden. Die folgenden Abbildungen zeigen typische Quantentrajektorien für unterschiedliche Parameter  $f^2$ .



**Abbildung 13:** Quantentrajektorien des anharmonischen Oszillators für verschiedene Parameter  $f^2$  und  $m = \lambda = 1$ . Es wurde  $T = 100$ ,  $a = 0,05$  und  $\bar{n} = 15$  gewählt.

Wie Abbildung 13c deutlich zeigt, weisen die Quantentrajektorien für diese Parameterwahl zwei charakteristische Zeitskalen auf. Zum Einen ergeben sich quantenmechanische Fluktuation mit einer Oszillationszeit  $\tau_{osc}$  um die Minima  $\pm x_c = \pm f$  des Potentials, zum Anderen wird die Bewegung auf größeren Zeitskalen  $\tau$  durch die Tunnelzeit  $\tau_{tun}$  bestimmt.

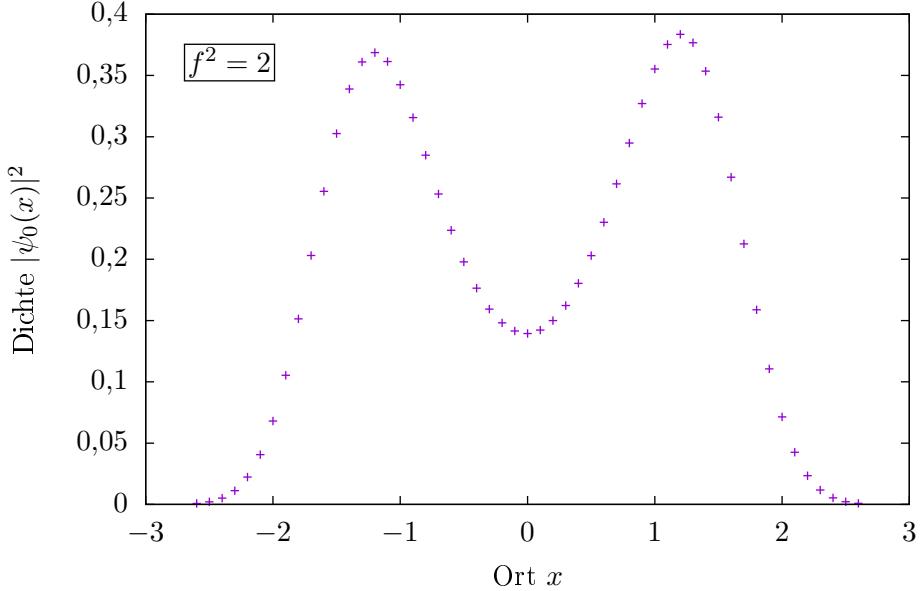
Die Oszillationszeit  $\tau_{osc}$  kann über die semiklassische Näherungsmethode der euklidischen Übergangsamplitude zu  $\omega^{-1} = (\sqrt{8\lambda f^2/m})^{-1}$  bestimmt werden<sup>4</sup>. Die Tunnelzeit  $\tau_{tun}$  ist proportional zu  $\omega^{-1} \exp(m^2\omega^3/12\lambda)$ . Eine verlässliche Simulation muss somit beide Zeitskalen berücksichtigen, woraus folgende Ungleichungen folgen:

$$a \ll \tau_{osc} \quad \text{und} \quad \tau_{tun} \ll N_{\text{site}}a. \quad (75)$$

Es wird angenommen, dass die obigen starken Ungleichungen für  $T = 100$  und  $a = 0,05$  erfüllt sind, da keine signifikante Änderung der Ergebnisse bei Erhöhung von  $T$  und Erniedrigung

<sup>4</sup>Diese stellen die reskalierten Gleichungen der Quelle [Mac99] dar.

von  $a$  eintreten. Zur Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes wird analog zu dem harmonischen Oszillator vorgegangen. Es wurden insgesamt  $N_{\text{tot}}$  Konfigurationen erzeugt, wobei  $N_{\text{skip}} = 61$  verwendet wird. Abbildung 14 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes für  $f^2 = 2$ ,  $m = 0,5$  und  $\lambda = 1$ .

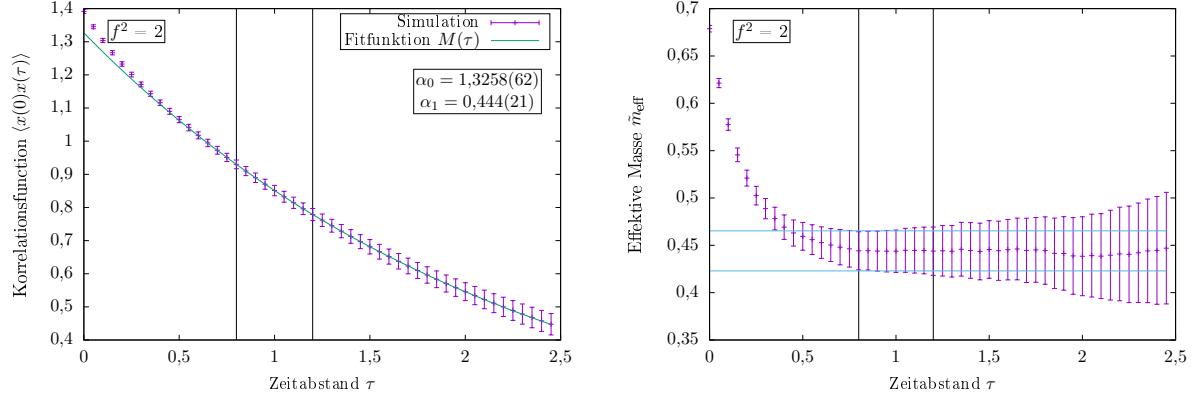


**Abbildung 14:** Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes als Funktion des Ortes für  $f^2 = 2$ ,  $m = 0,5$  und  $\lambda = 1$ . Die Simulationsparameter sind  $N_{\text{tot}} = 50100$ ,  $N_{\text{skip}} = 61$ ,  $T = 100$  und  $a = 0,05$ .

Die geringe Anzahl von Tunnelprozessen in Abbildung 13c führt zu einer geringen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte um den Ursprung. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist leicht asymmetrisch um den Ursprung, dies ist auf die Numerik zurückzuführen. Eine Vergrößerung von  $N_{\text{tot}}$  führt zu einer symmetrischen Verteilung, welche aufgrund der Symmetrie des Potentials zu erwarten ist.

#### 4.2.2. Energieniveaus des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes

Die Anwendung des Virialtheorems liefert die Energie des Grundzustandes und über die effektive Masse kann die Energie des ersten angeregten Zustandes bestimmt werden. Hierbei wird aufgrund von Korrelationseffekten der Parameter  $\bar{n}$  zu 20 gewählt. Die folgende Abbildung 15 zeigt exemplarisch die Bestimmung der Energiedicke  $E_1 - E_0$  über die effektive Masse für  $f^2 = 2$ . Hierbei wird analog zum harmonischen Oszillator vorgegangen: Es wird ein Plateau der effektiven Masse bestimmt und in diesem Bereich eine abfallende und ansteigende Exponentialfunktion  $M(\tau)$  angepasst.

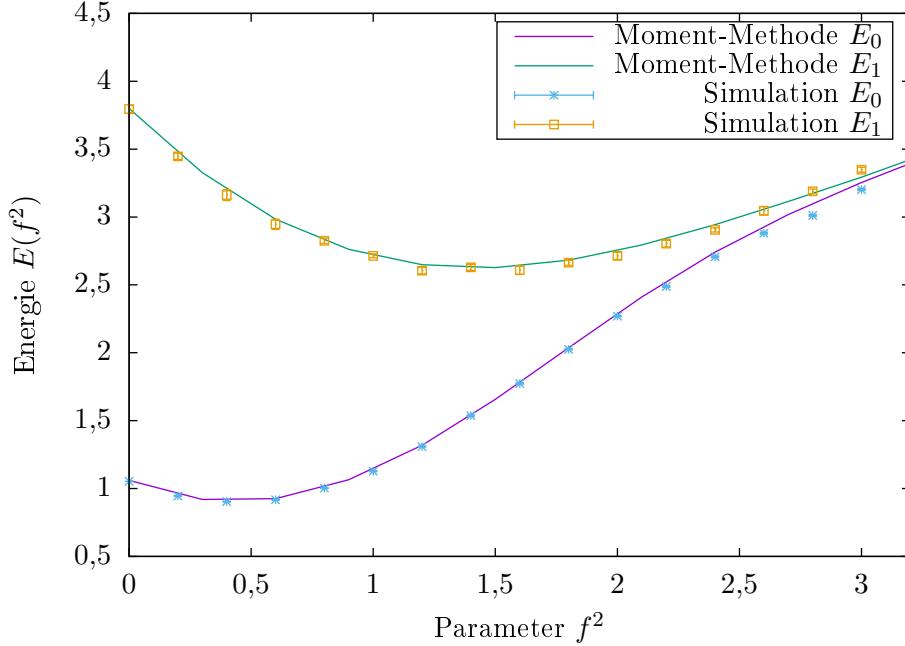


- (a) Die Korrelationsfunktion des harmonischen Oszillators für einen Gitterabstand von  $a = 0,05$ . Die durchgezogene Linie symbolisiert die Anpassung an die Simulation. Die vertikale Linie verdeutlicht das für den Fit gewählte Zeitfenster  $[\tau_1, \tau_2]$ .
- (b) Die effektive Masse  $\tilde{m}_{\text{eff}}$  als Funktion der Zeit  $\tau$  für  $a = 0,05$ . Die Punkte stellen die Ergebnisse der Simulation dar. Die vertikale Linie verdeutlicht das für den Fit gewählte Zeitfenster  $[\tau_1, \tau_2]$ , während die doppelt horizontale Linie das Fehlerband bestimmt durch eine Jackknife-Binning-Analyse mit  $B = 500$  darstellt.

**Abbildung 15:** Bestimmung der effektiven Masse des ersten angeregten Zustandes. Es wurde eine Gesamtanzahl von  $N_{\text{tot}} = 5000$  bei  $N_{\text{skip}} = 30$  und  $\bar{n} = 20$  gewählt.

Im Gegensatz zum harmonischen Oszillator koppelt  $x$  sowohl den Grundzustand mit dem ersten angeregten Zustand als auch andere höhere gelegene Energiezustände. Für große  $\tau$  ergibt sich jedoch ebenfalls ein Plateauverhalten der effektiven Masse. Hierbei ist zu beachten, dass aus Laufzeitgründen eine sehr geringe Anzahl von Samples  $N_{\text{tot}} = 5000$  gewählt wurde. Die Resultate sind in diesem Fall eher qualitativer Natur und führen besonders für große  $f^2$  nicht immer zu einem deutlichen Plateauverhalten wie in Abbildung 15b. Grund hierfür ist die Zunahme an Korrelationseffekten.

Abbildung 16 zeigt die Energie des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes für einen festen Gitterabstand von  $a = 0,05$  als Funktion des Parameters  $f^2$ . Zudem ist die Kontinuumslösung eines anderen numerischen Verfahrens, der Moment-Methode [BDS80], dargestellt. Eine kurze Beschreibung dieser Methode ist dem Anhang A.4 zu entnehmen. Da unterschiedliche Simulationen für die Grundzustandsenergie und die effektive Masse durchgeführt wurden, können die Fehler einfach kombiniert werden. Für die Grundzustandsenergie wurde  $N_{\text{tot}} = 10000$  und  $N_{\text{skip}} = 30$  verwendet. Für die Moment-Methode wurde der gleiche Versuchszustand wie in [BDS80] gewählt und  $M = 200$  verwendet (vgl. [BDS80]).



**Abbildung 16:** Die Energie des Grundzustandes und ersten angeregten Zustandes als Funktion des Parameters  $f^2$ . Die durchgezogene Linie repräsentiert die Ergebnisse der Moment-Methode [BDS80] im Kontinuumsfall und die Punkte stellen die Ergebnisse der Simulation dar. Die Simulationsparameter sind für die Grundzustandsenergie  $N_{\text{tot}} = 10000$  und  $N_{\text{skip}} = 30$  und für die Energie des ersten angeregten Niveaus  $N_{\text{tot}} = 5000$ ,  $N_{\text{skip}} = 30$ , und  $\bar{n} = 20$ .

Die Simulation stimmt qualitativ gut mit der anderen numerischen Methode überein. Für große  $f^2$  sind die Energien nahezu identisch, welches intuitiv richtig erscheint: Für größer werdendes  $f^2$  bewegen sich die Potentialmulden immer weiter auseinander, die Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt ab.

#### 4.2.3. Instantonen

Nach Quelle [Mac99] kann das Potential  $V(x)$  um ein Minimum entwickelt werden und die störungstheoretischen Korrekturen für die Wellenfunktion und Energie angebracht werden. Für das andere Minimum kann entsprechend vorgegangen werden. Aus Symmetriegründen würden somit die Grundzustandsenergien, egal für welche störungstheoretische Ordnung, übereinstimmen, sodass ein entarteter Grundzustand auftreten würde. Tatsächlich ist dieser jedoch nicht entartet. Dies kann über eine semiklassische Näherungsmethode gezeigt werden [Mac99, VZNS82].

Das Pfadintegral soll nun in dem semiklassischen Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  betrachtet werden. In der Simulation kann der semiklassische Grenzfall durch einen großen Störfaktor  $f^2$  approximiert werden.

In diesem Fall kann das Pfadintegral mit Hilfe der Sattelpunktmethode angenähert werden. Anders ausgedrückt dominieren die Regionen um lokale Extrema (Minima) der euklidischen Wirkung das Pfadintegral. Für das Doppelmuldenpotential werden nun die Übergangsamplituden

$$\langle -f | e^{-HT} | f \rangle \text{ und } \langle f | e^{-HT} | -f \rangle \quad (76)$$

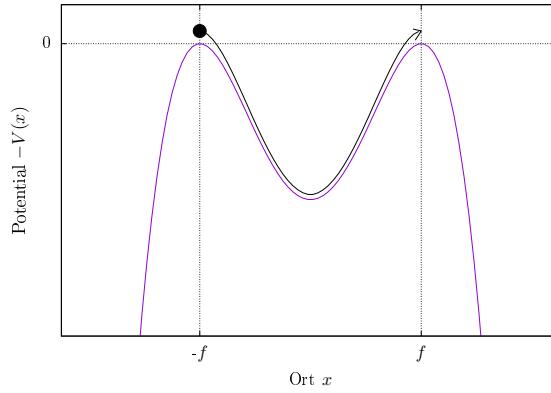
betrachtet, wobei der Anfangszeitpunkt sich bei  $t = -T/2$  und der Endzeitpunkt bei  $t = T/2$  befinden soll. Für die Pfade  $X(t)$  mit extremaler Wirkung gilt die Bedingung

$$\delta S_E = S_E[X(\tau) + \delta x(\tau)] - S_E[X(\tau)] = \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \delta x(\tau) \left[ -\frac{d^2 X}{d\tau^2} + V'(X) \right] = 0, \quad (77)$$

wobei  $V' = dV/dx$ . Woraus nach dem Variationsprinzip die klassische Bewegungsgleichung für ein Teilchen in einem Potential  $-V(x)$  folgt:

$$\frac{d^2 X}{d\tau^2} = V'(X). \quad (78)$$

In euklidischer Zeit entspricht dies einem Teilchen was sich im invertierten Potential  $-V(x)$  bewegt (vgl. Abbildung 17).



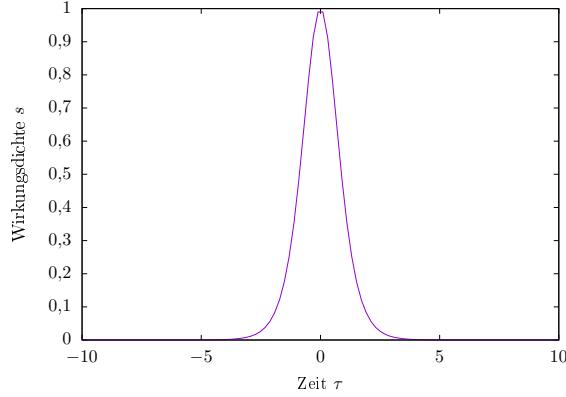
**Abbildung 17:** Das Potential  $-V$  in Abhängigkeit des Ortes  $x$ . Die Minima befinden sich an den Stellen  $\pm f$ . Zusätzlich ist eine mögliche klassische Bewegung des Teilchens in diesem Potential eingezeichnet: Das Teilchen bewegt sich auf dem mechanischen Profil von einem Maximum bei  $-f$  zum anderen Maximum bei  $f$ .

Die wichtigen Pfade in diesem Problem sind Lösungen der Gleichung (78) mit beschränkter Wirkung für  $T \rightarrow \infty$ , da diese die Hauptdistributionen zum Integral liefern. Die offensichtliche Lösung ist die Bewegung des Teilchens vom Maximum  $-V(\pm f)$  hin zum anderen Maximum  $-V(\mp f)$  im Grenzfall  $T \rightarrow \infty$ . Eine dieser Bewegung auf dem mechanischen Profil  $-V(x)$  ist in Abbildung 17 dargestellt. Mathematisch ergibt sich folgende Lösung der Gleichung (78):

$$X(\tau) = f \tanh \left( \frac{\omega}{2} (\tau - \tau_0) \right), \quad (79)$$

wobei  $\tau_0$  die Zeit für den Nulldurchgang bezeichnet. Diese Lösung wird als Instanton oder auch Pseudoteilchen bezeichnet. Die Lösung (79) ist zeitlich lokalisiert mit einer Breite von  $\omega^{-1}$ . Für  $\tau \rightarrow \pm\infty$  geht  $x$  zwar an unterschiedliche Orte  $\pm f$ , diese sind jedoch physikalisch betrachtet äquivalente Grundzustände. Als „instant“ wird diese Konfiguration aus dem Grund bezeichnet, dass sie für einen kurzen Zeitpunkt von einem zum anderen Grundzustand wechselt.

Abbildung 18 zeigt die Wirkungsdichte  $s = \dot{x}^2 + V(x)$  des Instantons, diese Darstellung unterstreicht nochmals den Pseudoteilchencharakter.



**Abbildung 18:** Wirkungsdichte  $s = \dot{x}^2 + V(x)$  eines Instantons, wobei  $\tau_0 = 0, \omega = 0,5$  und  $f = 1$  gewählt wurde.

Bisher wurde nur eine Lösung der Gleichung (78) untersucht<sup>5</sup>. Da das Zeitintervall  $T$  sehr groß ist, können auch Abfolgen von Instantonen und Antiinstantonen auftreten. In dem gegebenen Fall können allerdings nur ungerade Anzahlen von Instantonen auftreten, da der Anfangs/Endpunkt durch  $\pm f$  gegeben sind. Die Übergangsamplitude ist nach Quelle [VZNS82] wie folgt gegeben:

$$\langle -f | e^{-HT} | f \rangle = \frac{\omega}{\pi} e^{-\omega T/2} \sinh(\omega T d), \quad (80)$$

wobei  $d$  die Instantonendichte  $\frac{6}{\pi} \sqrt{S_0} e^{-S_0}$  beschreibt und die Wirkung  $S_0$  eines Instantons gleich  $\frac{m^2 \omega^3}{12 \lambda}$  ist. Obige Gleichung gilt für

$$|\tau_i - \tau_j| \gg \omega^{-1}, \quad (81)$$

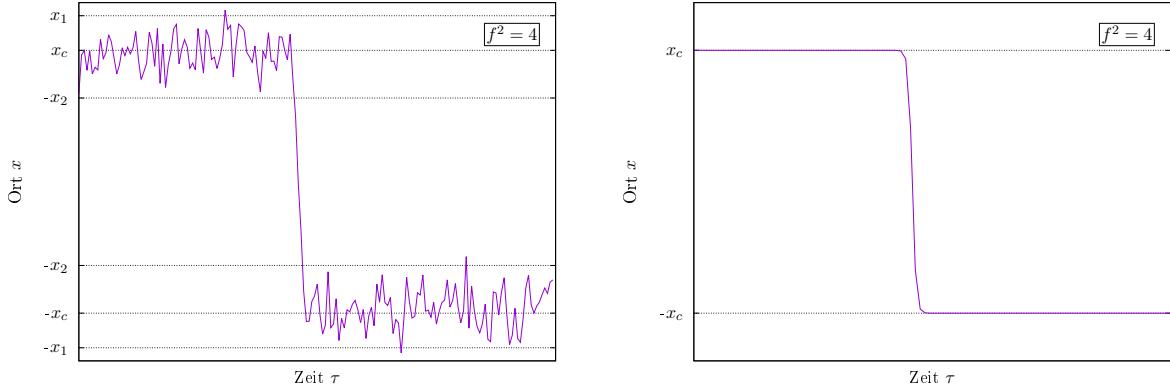
wobei die Indizes  $i$  und  $j$  zwei benachbarte Zentren zweier Instantonen bezeichnen. Anders formuliert muss die Entfernung benachbarter Instantonen viel größer sein als deren Weite. Dies kann durch sehr kleine  $\lambda$  erreicht werden. Obiges Modell wird als Dilute Instanton Gas bezeichnet [VZNS82]. In diesem Fall verhalten sich die Pseudoteilchen wie ein ideales Gas, es treten keine Wechselwirkungen auf. Um in der Simulation ein einziges Instanton zu finden, müssen antiperiodische Randbedingungen verwendet werden:

$$x(N_{\text{site}} + i) = -x(i). \quad (82)$$

Zusätzlich wird eine geringe Instantonendichte gewählt. Die folgenden Abbildungen 19 zeigen die Instantonlösung (79) sowie eine Quantentrajektorie der Simulation.

---

<sup>5</sup>Streng genommen sind aufgrund der Zeitinvarianz der Hamiltonoperators, beliebige Nulldurchgänge zu betrachten. Es ergibt sich somit eine unendliche Anzahl der Lösungen gleicher Art.



- (a) Eine Quantentrajektorie des anharmonischen Oszillators mit antiperiodischen Randbedingungen. Die klassischen Umkehrpunkte sind mit  $\pm x_1$  und  $\pm x_2$  bezeichnet. Zusätzlich sind die klassischen Minima  $\pm x_c$  des Potential markiert. Es wurde  $f^2 = 4$ ,  $\lambda = m = 1$  gewählt und  $T = 100$ ,  $a = 0,05$ .

- (b) Die klassische Tunnellösung (79) in euklidischer Zeit. Die klassischen Minima des Potentials sind mit  $\pm x_c$  bezeichnet.

**Abbildung 19:** Instantonen im Doppelmuldenpotential.

Die Simulation und Theorie sind in guter Übereinstimmung. In der Simulation ergeben sich erwartungsgemäß quantenmechanische Fluktuationen in den Potentialmulden. Deren Amplituden werden begrenzt von den klassischen Umkehrpunkten des Teilchens. Jetzt werden symmetrische Randbedingungen verwendet und als Hot Start eine Instanton-Antiinstanton-Konfiguration gewählt. Diese kann theoretisch über einen Summen-Ansatz ausgedrückt werden:

$$x(\tau) = f(-1 + \tanh(\omega(\tau - \tau_I)/2) - \tanh(\omega(\tau - \tau_A)/2)) \quad (83)$$

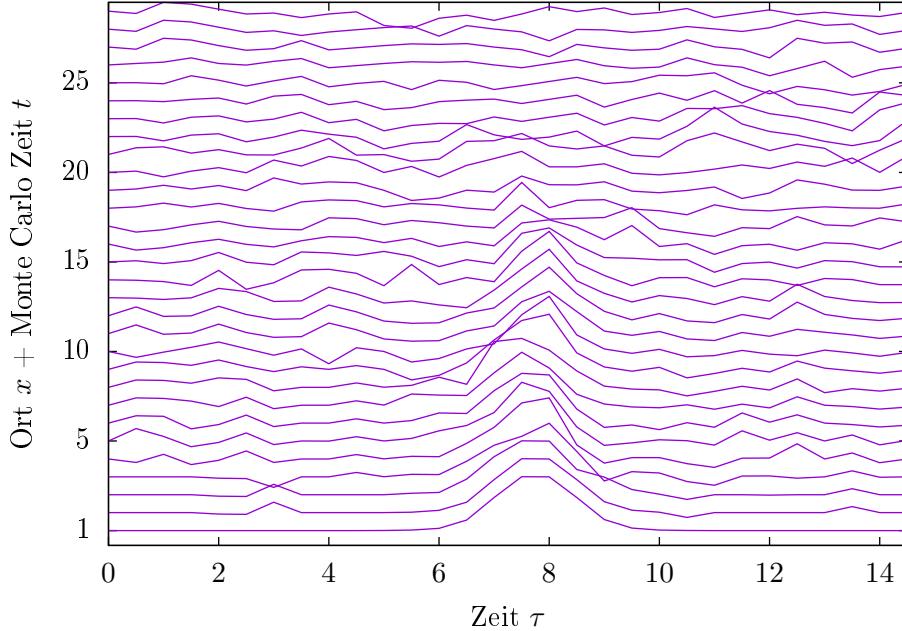
wobei  $\tau_I$  und  $\tau_A$  die Mittelpunkte der Pseudoteilchen bezeichnen. Die Wirkung dieses Paars ist nach [Sch04] für den Abstand  $\tau_{IA} = |\tau_I - \tau_A|$  für große  $\tau_{IA}$  gegeben durch:

$$S_{IA}(\tau_{IA}) = 2S_0(1 - 6 \exp(-f\tau_{IA})) + \dots \quad (84)$$

Für  $\tau_{IA} \rightarrow 0$ , folgt nach Gleichung (83) eine Wirkung von  $S_E = 0$ : Das Instanton annihielt mit dem Antiinstanton. Das verwendete Zeitgitter besitzt  $T = 15$ ,  $a = 0,5$  und die Parameter werden so gewählt, dass die Instantonendichte im Gleichgewicht folgende Gleichung erfüllt:

$$\rho_{eq} \cdot T \ll 1. \quad (85)$$

Die folgende Abbildung 20 zeigt die Quantentrajektorien in Abhängigkeit von der Monte-Carlo-Zeit  $t$ .

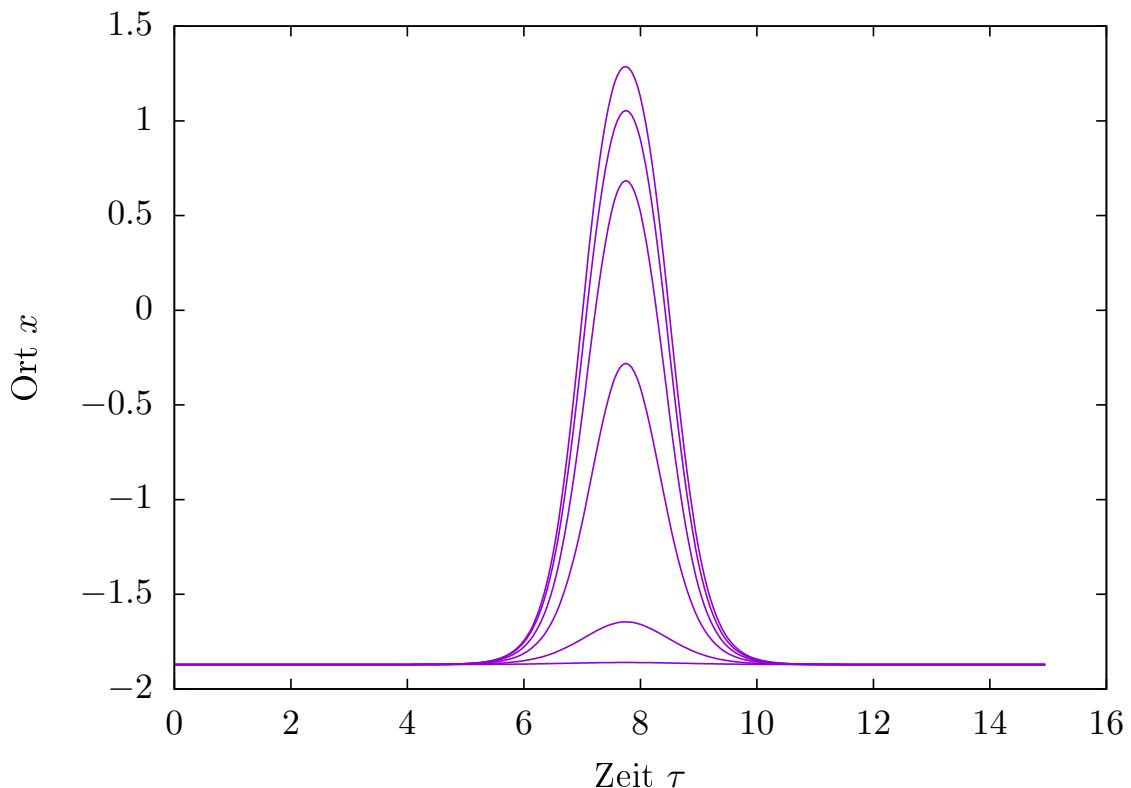


**Abbildung 20:** Die Annihilation eines Instanton-Anti-Instanton-Paars in der Monte-Carlo-Simulation. Es wurde  $f^2 = 3,5$  und  $\lambda = 0,4$  verwendet. Für das Zeitgitter gilt  $T = 15$  und  $a = 0,5$ .

Die beiden Pseudoteilchen bewegen sich zunächst aufeinander zu und annihilieren dann bei einer Monte-Carlo-Zeit von etwa  $t = 20$ . Die Dauer dieses Vorgangs ist abhängig von der Größe der Fluktuationen im Gegensatz zum Instanton-Antiinstanton-Abstand  $\tau_{IA}$ . Ein alternativer Zugang ist die Betrachtung der Wirkung als eine Art Profil: Ähnlich wie bei einer Bergwanderung wird ein beliebiger Startpunkt gewählt und anschließend der Kraft bis ins Tal gefolgt[Shu88]. Die Veränderung des Pfades kann iterativ berechnet werden durch:

$$x_{n+1}(\tau) = x_n(\tau) - \epsilon f_n(\tau), \quad (86)$$

wobei  $\epsilon$  ein numerischer Faktor und  $f_n(\tau)$  die klassische Kraft ist, welche durch  $\delta S / \delta x$  gegeben ist. Die folgende Abbildung 21 zeigt das numerische Resultat für  $\epsilon = 0,01$ , wobei die unterschiedlichen Linien einem Iterationsabstand von 1000 entsprechen.



**Abbildung 21:** Die Annihilation eines Instanton-Anti-Instanton-Paars unter Verwendung von 86.

Dieses Ergebnis ist qualitativ konsistent mit dem aus der Monte-Carlo-Simulation gefundenen Ergebnis.

## 5. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden der harmonische und eine Form des anharmonischen Oszillators mit der Monte-Carlo-Methode unter der Verwendung des Metropolis-Hastings-Algorithmus betrachtet. Die Ergebnisse der Simulation für den harmonischen Oszillator sind in guter Übereinstimmung mit den analytischen Werten. Obschon auf die Fehlerbestimmung der numerischen Ergebnisse viel Wert gelegt wurde, ist im Hinblick auf die Exaktheit der numerischen Ergebnisse die Verwendung der Monte-Carlo-Methode für den einfachen harmonischen Oszillator natürlich im Vergleich zu anderen Methoden nicht notwendig, dennoch bietet es interessante Einblicke in die Funktionsweise der Monte-Carlo-Methode und ebnnet so den Weg für komplexere Modelle. Sokal formuliert diesen Zusammenhang folgendermaßen: „Die Monte-Carlo ist eine extrem schlechte Methode und sollte nur genutzt werden, wenn die Alternativen noch schlechter sind“[Sok89]. Für höherdimensionale Integrale ist dies der Fall und die Monte-Carlo-Simulation kann problemlos durch Einführung weiterer Variablen auf mehr Freiheitsgrade erweitert werden.

Zusätzlich lassen sich leicht Grundzustandserwartungswerte eines Teilchens in einem beliebigen Potential erhalten. Für den harmonischen Oszillator wurde zudem die Energie des ersten angeregten und des zweiten angeregten Zustandes bestimmt. Hierbei zeigt sich ein Nachteil dieser Methodik: Höher gelegene Zustände erfahren eine exponentielle Unterdrückung im imaginären Zeitformalismus, sodass die Extraktion höher gelegener Niveaus erschwert wird. In der Simulation führt dies zu größeren Fehlern, welche sich aufgrund des  $1/\sqrt{N_{\text{tot}}}$ -Gesetzes nur langsam minimieren lassen.

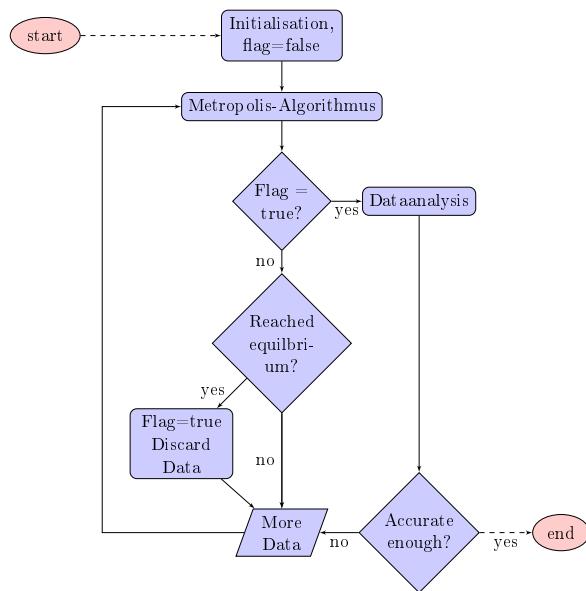
Zusätzlich wurde das System des anharmonischen Oszillators untersucht, wobei sich der nicht pertubative Zugang der Monte-Carlo-Methode als günstig erweist. Die Erwartungswerte der Energie für den ersten angeregten und den Grundzustand stimmen qualitativ gut mit den Ergebnissen der Moment-Methode überein und es konnte somit die klassische Vermutung eines entarteten Grundzustands widerlegt werden. Der Grund für die Aufhebung der Entartung in der Quantenmechanik sind Tunnelphänomene. In imaginärer Zeit sind diese Tunnellösungen klassische Lösungen eines Teilchens in dem Potential  $-V(x)$ . Diese, als Instantonen bezeichneten Lösungen, konnten in guter Übereinstimmung in der Monte-Carlo-Simulation wiedergefunden werden. Zuletzt wurde die Instanton-Antiinstanton-Wechselwirkung betrachtet.

Als Ausblick wäre eine nähere Untersuchung des Dilute-Instanton-Modells von Interesse. Beispielsweise könnten ein Vergleich der Energie des Grundzustandes und ersten angeregten Zustandes mit [VZNS82] erfolgen. Zudem könnte die Monte-Carlo-Simulation auch auf andere Theorien, wie zum Beispiel die Quantenchromodynamik, angewandt werden.

## A. Anhang

### A.1. Programmstruktur

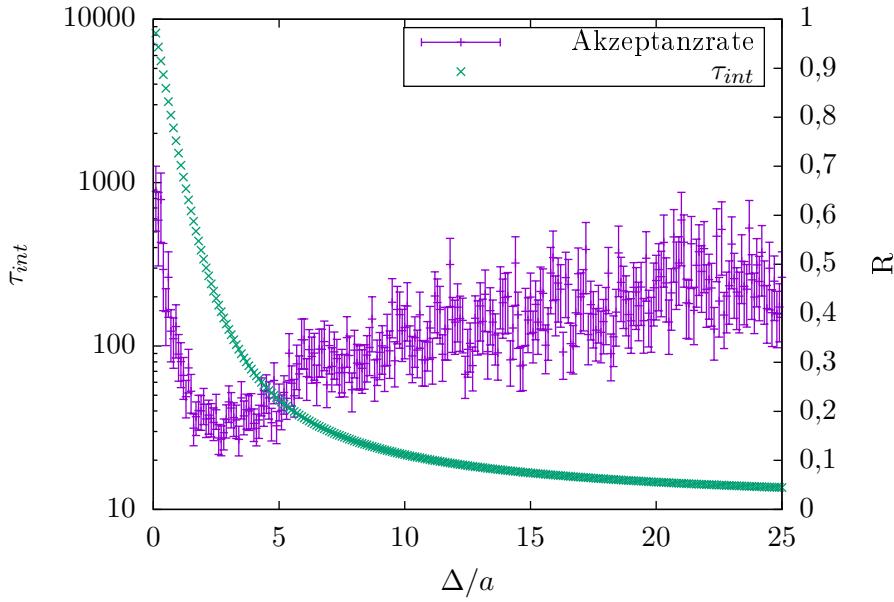
Zunächst werden die Simulationsparameter initialisiert und eine Startgitterkonfiguration festgelegt. Unter Gebrauch des Metropolis-Hastings-Algorithmus werden anschließend neue Gitterkonfigurationen erstellt, dabei wird aufgrund seiner guten Eigenschaften der Mersenne Twister genutzt[Mor07]. Ist der Thermalisierungsprozess abgeschlossen, werden die Nicht-Gleichgewichts-Daten verworfen und verwertbare Konfigurationen produziert. Danach werden die Daten analysiert und primäre Observablen oder komplexere Funktionen berechnet. Unterprogramme führen hierbei die Jackknife-Binning-Analyse oder die  $\Gamma$ -Methode aus. Sofern das Ergebnis ausreichend ist, wird der Vorgang abgeschlossen, im anderen Fall können zusätzliche Konfigurationen erstellt werden.



**Abbildung 22:** Die Programmstruktur der Monte-Carlo-Simulation. Eine Beschreibung ist dem oben stehenden Text zu entnehmen.

### A.2. Anpassung des Parameters $\Delta$

In diesem Kapitel wird die Abhängigkeit der integrierten Autokorrelationszeit  $\tau_{int}$  der Operators  $x^2$  in Abhängigkeit von dem Parameter  $\Delta$  für eine feste Zeit  $T$  ermittelt. Zusätzlich wird die Akzeptanzrate von  $x_j \rightarrow x'_j$  berechnet. Abbildung 23 zeigt das Ergebnis dieser Untersuchung.



**Abbildung 23:** Die integrierte Autokorrelationszeit der Observablen  $x^2$  auf einer logarithmischen Skala in Abhängigkeit des Parameters  $\Delta$  wird durch die lila Punkte verdeutlicht. Die Akzeptanzrate ist auf der rechten Ordinatenachse dargestellt. Die Simulationsparameter sind  $a = 0,1$ ,  $T = 100$  und  $N_{\text{tot}} = 1000$ .

Wie erwartet nimmt die Akzeptanzrate mit steigendem  $\Delta$  ab. Für die integrierte Autokorrelationszeit ergibt sich jedoch ein Minimum im Bereich  $2\sqrt{a} - 4\sqrt{a}$ , welches in etwa einer Akzeptanzrate von 50% entspricht. Eine hohe Akzeptanzrate deutet darauf hin, dass das Integrationsvolumen langsam durchlaufen wird, während für eine zu kleine Akzeptanzrate sehr viel Zeit auf die Ablehnung neuer Konfigurationen verwendet wird [Mor07]. In den Simulationen wird überprüft, dass die Akzeptanzrate ungefähr bei 50% liegt, woraus auch aus diesem Gesichtspunkt die Wahl

$$\Delta \approx 2\sqrt{a} \quad (87)$$

plausibel erscheint.

### A.3. Fehleranalyse

#### A.3.1. $\Gamma$ -Methode

Die  $\Gamma$ -Methode dient zur Berechnung von Mittelwerten beliebiger Funktionen und deren statistischen Fehler in Monte-Carlo-Simulationen. Hierbei werden die relevanten Autokorrelationsfunktionen summiert und die integrierte Korrelationszeit berechnet. Zur kurzen Erklärung dieser Methode wird die Notation der Quelle [Wol04] verwendet: Primäre Observablen  $A_\alpha$  werden durch einen griechischen Index charakterisiert. Davon abgeleitete Funktionen erhalten folgende Darstellung:

$$F \equiv f(A_1, A_2, \dots) \equiv f(A_\alpha). \quad (88)$$

Die Schätzwerte von  $N$  Monte-Carlo-Iterationen der Observable  $A_\alpha$  erhalten die Bezeichnung

$$a_\alpha^i, \quad i = 1 \dots N. \quad (89)$$

Für den Fehler  $\sigma_F$  ergibt sich das Analogon zu Gleichung (52) zu:

$$\sigma_F^2 = \frac{C_F}{N} = \frac{2\tau_{int,F}}{N} v_F, \quad (90)$$

mit der „naiven“ Varianz für  $F$

$$v_F = \sum_{\alpha\beta} f_\alpha f_\beta \Gamma_{\alpha\beta}(0), \quad \text{mit} \quad \Gamma_{\alpha\beta} = \langle (a_\alpha^i - A_\alpha)(a_\beta^j - A_\beta) \rangle \quad (91)$$

und der integrierten Autokorrelationszeit:

$$\tau_{int,F} = \frac{1}{2v_F} \sum_{t=-\infty}^{t=\infty} \underbrace{\sum_{\alpha\beta} f_\alpha f_\beta \Gamma_{\alpha\beta}(t)}_{\Gamma_F(t)}. \quad (92)$$

Da der Fehler  $\sigma_F$  selbst ein Schätzwert ist und somit auch mit einem statistischen Fehler versehen ist, ist es notwendig den Fehler des Fehlers möglichst klein zu halten. Aus diesem Grund wird der Schätzer von  $C_F$  wie folgt gewählt

$$\bar{C}_F(W) = \left[ \bar{\Gamma}_F(0) + 2 \sum_{t=1}^W \bar{\Gamma}_F(t) \right] \quad (93)$$

Für ein großes  $W$  ist der Schätzwert kaum verzerrt, jedoch nimmt das Signal proportional zu  $\exp(-W/\tau)$  ab, wobei das Rauschen konstant bleibt. Es ist somit ein Kompromiss zwischen statistischem und systematischem Fehler, wobei der optimale Wert für  $W$  den gesamten relativen Fehler minimiert:

$$\frac{\delta_{tot}(\bar{\sigma}_F)}{\bar{\sigma}_F} \approx \frac{1}{2} \min_W \left( \exp(-W/\tau) + 2\sqrt{(W/N)} \right). \quad (94)$$

Unter dieser Bedingung kann eine automatische Fensterfunktion-Prozedur entwickelt werden, für dessen genaue Gestalt auf Quelle [Wol04] verwiesen wird.

### A.3.2. Binning

In diesem Kapitel wird ebenfalls die Notation von Quelle [Wol04] verwendet. Die Binning-Methode dient zur Bestimmung der statistischen Fehler von korrelierten Daten  $a^i, i = 1 \dots N$ . Hierbei wird die Datenmenge in  $N_B$  Abschnitte der Länge  $B$  unterteilt. Diese Untermengen werden als Bins bezeichnet, wobei für den Mittelwert des  $k$ ten Bins gilt:

$$b^k = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B a^{(k-1)B+i}, \quad k = 1, \dots, N_B. \quad (95)$$

Wird die Binlänge  $B$  groß genug gewählt, ergeben sich quasi unkorrelierte Bins. Als Schätzer des Fehlers wird folgende Darstellung gewählt:

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{k=1}^{N_B} (f(b^k) - \bar{f})^2, \quad (96)$$

wobei  $\bar{f}$  die Funktion  $f$  angewandt auf den Mittelwert der gesamten Datenmenge ist. In dieser Arbeit wird die hier beschriebene Binning-Methode mit der Jackknife-Methode (vgl. A.3.3 kombiniert. Diese sogenannten Jackknife-Bins werden fast auf die gesamte Statistik angewandt, welches beispielsweise zu einer verbesserten Stabilität von Fits führt. Eine genauere Beschreibung ist der Quelle [Wol04] zu entnehmen.

### A.3.3. Jackknife

Jackknife lässt sich den Resampling-Methoden zuordnen und dient zur Berechnung der Varianz und der Verzerrung. Diese Methode soll kurz in Anlehnung an Quelle [Ber04] erläutert werden. Bei dieser Technik wird systematisch ein Wert  $x_i$  aus einer Stichprobenmenge  $\{x_k\}$  entfernt, der Mittelwert  $x_i^J$  dieser Untermenge gebildet und die Schätzwerte  $f_i^J(x_i^J)$  einer Funktion  $f$  berechnet. Abschließend ergibt sich der Jackknife-Schätzwert  $\bar{f}^J$  der Größe  $\langle f \rangle$  über eine erneute Mittelung über alle  $f_i^J$ .

Mathematisch erschließt sich somit folgende Formulierung:

$$\bar{f}^J = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^J \quad \text{mit} \quad f_i^J = f(x_i^J) \quad \text{und} \quad x_i^J = \frac{1}{N-1} \sum_{k \neq i} x_k. \quad (97)$$

Der Schätzwert der Varianz  $\sigma^2$  ergibt sich zu

$$\bar{\sigma}_J^2(\bar{f}^J) = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (f_i^J - \bar{f}^J)^2. \quad (98)$$

Im Gegensatz zu den auf linearer Approximation basierenden Fehlerfortpflanzungsmethoden, ist die Jackknife-Methode für nichtlineare Funktionen unter statistischen Fluktuationen stabiler. Zudem sind keine Berechnungen partieller Ableitungen notwendig.

Eine Reduktion der Verzerrung des Schätzwertes ist nach den Quellen [Wol04, Ber04] möglich, in dieser Arbeit wird jedoch davon abgesehen.

### A.4. Moment-Methode für Eigenwerte und Erwartungswerte

Die Moment-Methode ist einen numerische Methode zur Bestimmung von Eigenwerten eines quantenmechanischen Systems, dessen Potential ein Polynom in den Ortskoordinaten  $\vec{x} = (x_1, \dots, x_N)$  einnimmt[BDS80]. Es wird eine Schrödingergleichung der Form

$$H\psi = E\psi \quad , H = \sum_{i=1}^N p_i^2 + V \quad (99)$$

betrachtet und zusätzlich die Momente definiert:

$$S_{n_1 n_2 \dots n_N} = \langle \phi | x_1^{n_1} \dots x_N^{n_N} | \psi \rangle, \quad (100)$$

wobei  $|\psi\rangle$  der exakte Eigenzustand der Gleichung (99) und  $|\phi\rangle$  ein Versuchszustand ist. Der Versuchszustand erfüllt folgende Gleichungen:

$$\phi(x) = \langle \vec{x} | \phi \rangle = \exp \left[ - \int_0^{\vec{x}} d\vec{x}' \cdot \vec{g}(\vec{x}') \right] \quad (101)$$

$$\vec{\nabla} \phi(x) = - \vec{g}(x) \phi(x) \quad (102)$$

$$\nabla^2 \phi(x) = (\vec{g} \cdot \vec{g} - \nabla \cdot g) \phi(x). \quad (103)$$

Das Matrixelement  $\langle \phi | x_1^{n_1} \dots x_N^{n_N} H | \psi \rangle$  führt über eine Kommutatorrelation auf folgende Beziehung:

$$E S_{n_1 n_2 \dots n_N} = \langle \phi | \left( -\vec{g} \cdot \vec{g} + (\nabla \cdot g) + V + \sum_{i=1}^N [2g_i(x) n_i x_i^{-1} - n_i(n_i - 1)x_i^{-2}] \right) x_1^{n_1} \dots x_N^{n_N} | \psi \rangle. \quad (104)$$

Sind sowohl  $g$  als auch  $V$  Polynome im Ort, kann obige Rekursionsbeziehung zur Bestimmung der Eigenwerte benutzt werden. Eine detaillierte Beschreibung insbesondere die Anwendung auf den anharmonischen Oszillatoren ist der Quelle [BDS80] zu entnehmen. Hierbei ist zu beachten, dass [BDS80, Gleichung (20)] und darauf folgende Gleichungen kleine Fehler aufweisen. Die genau Fehlerbeschreibung ist dem Programmcode der Moment-Methode zu entnehmen.

## B. Literatur

- [BDS80] R. Blankenbecler, T. DeGrand and R. L. Sugar, Moment method for eigenvalues and expectation values, Phys. Rev. D **21**, 1055–1061 (Feb 1980).
- [Ber04] B. Berg, Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis: With Web-based Fortran Code, World Scientific, 2004.
- [CF81] M. Creutz and B. Freedman, A statistical approach to quantum mechanics, Annals of Physics **132**(2), 427 – 462 (1981).
- [KR14] B. Koch and I. Reyes, Differentiable-Path Integrals in Quantum Mechanics, (2014), arXiv:1404.6551.
- [Mac99] R. MacKenzie, Path integral methods and applications, (1999), quant-ph/0004090.
- [Mor07] C. Morningstar, The Monte Carlo method in quantum field theory, (2007), hep-lat/0702020.
- [NB99] E. Newman and G. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Clarendon Press, 1999.
- [Sch04] T. Schäfer, Instantons and Monte Carlo methods in quantum mechanics, (2004), hep-lat/0411010.
- [Shu88] E. Shuryak, Toward the quantitative theory of the instanton liquid IV.: Tunneling in the double-well potential, Nuclear Physics B **302**(4), 621 – 644 (1988).
- [Sok89] A. D. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms*, 1989, Lecture notes from Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande. Updated in 1996 for the Cargèse Summer School on “Functional Integration: Basics and Applications”.
- [Sti15] R. A. Stine, Asymptotic Distributions in Time Series, Undergraduate and Graduate Statistics Courses, Abrufdatum:13.06.2015, [http://www-stat.wharton.upenn.edu/~stine/stat910/lectures/11\\_clt.pdf](http://www-stat.wharton.upenn.edu/~stine/stat910/lectures/11_clt.pdf).
- [VZNS82] A. Vainshtein, V. I. Zakharov, V. Novikov and M. A. Shifman, ABC’s of Instantons, Sov.Phys.Usp. **25**, 195 (1982).
- [Wol04] U. Wolff, Monte Carlo errors with less errors, Comput.Phys.Commun. **156**, 143–153 (2004), hep-lat/0306017.
- [You12] P. Young, Everything you wanted to know about Data Analysis and Fitting but were afraid to ask, (2012), arXiv:1210.3781.

## C. Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei denjenigen bedanken, die mich während der Anfertigung dieser Bachelorarbeit unterstützt und motiviert haben.

Besonderer Dank gilt Herrn Dr. Heitger für die Vergabe der Thematik und die Betreuung. Des Weiteren möchte ich Herrn Dr. Linz für die Übernahme der Zweitkorrektur danken.

Neben meinen Freunden, insbesondere Johann Adrian, und meiner Familie möchte ich mich bei Berthold dafür bedanken, dass er sich trotz Urlaubs die Zeit genommen hat, meine Bachelorarbeit zu lesen.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei Fenna, nicht nur für das Korrekturlesen, den Zuspruch beim Frojo essen, sondern für die gesamte Unterstützung über meine Bachelorarbeit hinweg bedanken.

## D. Plagiatserklärung

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit über Gitter-Monte-Carlo-Simulation des harmonischen und anharmonischen Oszillators im Pfadintegralformalismus in euklidischer Zeit selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken - auch elektronischen Medien - dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

---

Ort, Datum

Unterschrift

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in einer Datenbank einverstanden.

---

Ort, Datum

Unterschrift