

Correlazione in Langevin: Metodo di Parisi

Michele Savi, Alessandro Nervo, Tommaso Bilzi

Equazione di Langevin

EQUAZIONE DI LANGEVIN

L'equazione di Langevin è un'equazione differenziale stocastica della forma

$$dx = b[x(t)]dt + \sqrt{\sigma(t)}dw(t)$$

Dove $b(x)$ e $x(t)$ sono funzioni a valori in \mathbb{R}^n , in particolare $b(x)$ è detto termine di drift, $\sigma(t)$ è una funzione reale positiva (spesso costante), e $w(t)$ è il moto browniano (processo di Wiener) standard in n dimensioni, che possiamo definire assiomaticamente con queste proprietà:

- $w(0) = 0$
- La media di $w(t)$ è nulla
- $E[w_{\square}(t)w_{\square}(s)] = \delta_{\square\square} \min(t,s)$
- Varie $w(t)$ calcolate a diversi istanti sono variabili mutualmente gaussiane

EQUAZIONE DI LANGEVIN

Il processo $x(t)$ è caratterizzato da una densità di probabilità che soddisfa l'equazione di Fokker Planck:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta(\sigma(x) P(x, t)) - \nabla \cdot (b(x) P(x, t))$$

Prendendo come $b(x)$ un campo irrotazionale e avendo σ costante, si può riscrivere $b(x)$ come il gradiente di un'altra funzione ρ , ottenendo

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \sigma \nabla P(x, t) - P(x, t) \nabla \rho \right)$$

Che si annulla per $P = \exp\{2\rho(x) / \sigma\}$.

EQUAZIONE DI LANGEVIN

Allora, tramite la scelta di $b(x)$ e σ , questo permette all'equazione di Langevin di avere una soluzione stazionaria scelta.
In meccanica statistica la scelta comune è

$$P(x) = Z^{-1} e^{-\beta H(x)}$$

Per la quale si hanno

$$b(x) = -\nabla H(x), \sigma = \frac{2}{\beta}$$

EQUAZIONE DI LANGEVIN

Per poter utilizzare l'equazione di Langevin computazionalmente, questa viene così discretizzata:

$$dx_i = b(x_i)d\tau + \sqrt{\sigma}dw$$

Il tempo viene ridotto a indice delle x , le quali formano quindi un reticolo unidimensionale, mentre τ è il tempo di evoluzione dell'equazione di Langevin ($d\tau$ quindi uno step dell'evoluzione).

Il contributo di dw invece è quello del rumore bianco, ovvero ad ogni step equivale all'estrazione di un valore che segue una distribuzione gaussiana centrata in 0.

Correlazione ed energy gap

CORRELAZIONE ED ENERGY GAP

Si ha però l'opportunità di utilizzare l'equazione di Langevin in Meccanica Quantistica a tempo immaginario (formulazione Euclidea), poiché questa si riduce alla Meccanica Statistica classica. Infatti, considerando la funzione $C(t,s)$:

$$C(t, s) = \langle E_0 | q(it) q(is) | E_0 \rangle$$

e, sfruttando la descrizione di Heisenberg per l'operatore di posizione q , si ha

$$\begin{aligned} \langle E_0 | q(it) q(is) | E_0 \rangle &= \langle E_0 | e^{-Ht} q e^{Ht} e^{-Hs} q e^{Hs} | E_0 \rangle \\ &= \langle E_0 | q e^{(t-s)H} q | E_0 \rangle e^{(s-t)E_0} \\ &= \sum_E \langle E_0 | q e^{(t-s)H} | E \rangle \langle E | q | E_0 \rangle e^{(s-t)E_0} \\ &= \sum_E e^{-(E-E_0)(s-t)} |\langle E_0 | q | E \rangle|^2 \end{aligned}$$

CORRELAZIONE ED ENERGY GAP

Ogni vettore può poi essere scomposto sugli autostati di H:

$$\begin{aligned} e^{-(H-E_0)T}|\psi\rangle &= \sum_E e^{-(H-E_0)T}c_E|E\rangle \\ &= c_{E_0}|E_0\rangle + \sum_{E>E_0} c_E e^{-(H-E_0)T}|E\rangle \end{aligned}$$

Per T che tende a $+\infty$ domina il contributo del primo livello energetico e si ottiene la seguente formula:

$$|E_0\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{e^{-(H-E_0)T}|\psi\rangle}{\langle E_0|\psi\rangle}$$

Per ogni ψ non ortogonale a E_0 .

CORRELAZIONE ED ENERGY GAP

Si può quindi sostituire questa relazione nella funzione $C(t,s)$:

$$\begin{aligned}\langle E_0 | e^{-Ht} q e^{-(s-t)H} q e^{Hs} | E_0 \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi | e^{(H-E_0)T} e^{-Ht} q e^{-(s-t)H} q e^{Hs} e^{-(H-E_0)T} | \psi \rangle}{\langle \psi | E_0 \rangle \langle E_0 | \psi \rangle} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi | e^{(T-t)H} q e^{-(s-t)H} q e^{(s-T)H} | \psi \rangle}{\langle \psi | E_0 \rangle \langle E_0 | \psi \rangle} \\ &= \frac{\int D[x(t)] x(t) x(s) \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x)\right] d\tau\right)}{\int D[x(t)] \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x)\right] d\tau\right)}\end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio si è usato il formalismo degli integrali di cammino Feynman.

Si è dimostrato dunque che la funzione $C(t,s)$ si presenta come funzione di correlazione della meccanica statistica, ed è possibile quindi usare l'equazione di Langevin per studiarla.

CORRELAZIONE ED ENERGY GAP

Tornando alla correlazione

$$C(t, s) = \sum_E e^{-(E-E_0)(s-t)} |\langle E_0 | q | E \rangle|^2$$

Considerando un potenziale simmetrico si annulla il termine per E_0 e, prendendo $|s-t|$ molto grande, domina il contributo del primo stato eccitato E_1 .

Da una stima della correlazione si può quindi ottenere direttamente il primo gap di energia:

$$C(t, s) \approx e^{-(E_1-E_0)(s-t)} |\langle E_0 | q | E_1 \rangle|^2$$

Si tratta ora di decidere come calcolare questa correlazione.

Metodo di Parisi

METODO DI PARISI

Nel 1981 Parisi fornisce un metodo per stimare la correlazione attraverso l'equazione di Langevin.

L'idea del metodo si basa sull'inserire un termine di sorgente nella hamiltoniana nel sito al tempo $t=j$.

$$H_\lambda = H - \lambda x_j$$

L'equazione di Langevin con questo termine di sorgente diventa quindi

$$dx_i = (b(x_i) + \lambda \delta_{ij}) d\tau + dw$$

METODO DI PARISI

Si può espandere x in potenze di λ fino al primo ordine:

$$x_i = x_i^{(0)} + \lambda x_i^{(1)} + O(\lambda^2)$$

Inserendo lo sviluppo nell'equazione di Langevin e identificando i termini con coefficienti λ uguali, si ottiene la seguente coppia di equazioni di evoluzione del sistema di Langevin:

$$dx_i^{(0)} = b(x_i^{(0)})d\tau + dw$$

$$dx_i^{(1)} = \frac{\partial b(x_i^{(0)})}{\partial x_i^{(0)}} x_i^{(1)} d\tau + \delta_{ij} d\tau$$

METODO DI PARISI

Dal teorema di fluttuazione-dissipazione si ha:

$$\langle x_i x_j \rangle = \frac{d}{d\lambda} \langle x_i \rangle \Big|_{\lambda=0}$$

Ne deriva quindi:

$$\langle x_i x_j \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau x_i^{(1)}(t) dt$$

Ovvero, la correlazione dopo il tempo $|i - j|$ è la media integrale di $x_i^{(1)}$ in dt .
Dal punto di vista computazionale, questa diviene una semplice media discreta.

Implementazione generale

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

Siccome l'evoluzione del sistema è data da dx , si tratterebbe di fare un integrale:

$$x(\tau + d\tau) = x(\tau) + \int_{\tau}^{\tau + d\tau} b[x(t)]dt + \sqrt{\sigma}[w(\tau + d\tau) - w(\tau)]$$

Che viene discretizzato tramite il metodo dei trapezi:

$$x(\tau + d\tau) = x(\tau) + \frac{b[x(\tau)] + b[x(\tau + d\tau)]}{2}d\tau + \sqrt{\sigma}[w(\tau + d\tau) - w(\tau)]$$

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

La quantità $b[x(\tau + d\tau)]$ presente nel metodo dei trapezi è però funzione della quantità stessa che si vuole calcolare, per cui si utilizza il meno raffinato metodo di Eulero per fare preliminarmente il conto:

$$x(\tau + d\tau) = x(\tau) + b[x(\tau)]d\tau + \sqrt{\sigma}dw(\tau)$$

L'unione dei due algoritmi porta un errore $O(d\tau^2)$; per $d\tau$ piccoli il risultato è quindi più preciso che nel caso si utilizzi solo uno dei due.

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

Dovendo il drift venire discretizzato, per una Hamiltoniana generica del tipo

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{m(x_{k+1} - x_k)^2}{2a^2} + \sum_{k=0}^N V(x_k)$$

Dove a è il rapporto fra tempo totale T e numero di siti N .
Si ottiene, calcolandone la derivata rispetto a x_i fissato,

$$b(x_i) = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{mx_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{a^2} - V'(x_i)$$

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

Il termine contenente la differenza seconda discreta è implementato nel programma attraverso la matrice D2 ottenuta attraverso il seguente codice:

Codice Matlab:

```
a = T/N;  
  
e = ones(N,1);  
D2 = spdiags([-e e],0:1,N,N);  
D2(1,N) = 1;  
D2 = D2+D2';  
D2 = D2/a^2;
```

Matrice D2

$$\frac{1}{a^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

Nel setup del programma sono presenti i seguenti parametri variabili:

- N: numero di siti indipendenti fatti evolvere
- T: tempo totale euclideo ($\alpha = T/N$)
- Tlang: tempo totale di evoluzione di Langevin
- steps: numero di suddivisioni del tempo di Langevin ($d\tau = T_{\text{lang}}/\text{steps}$, chiamato tau nel programma)
- g: costante di accoppiamento del potenziale
- skips: intervallo di campionamento della correlazione (per evitare fenomeni di autocorrelazione)
- therm: numero di passi fatti prima di prendere misure
- exps: numero di esperimenti indipendenti
- trim: intervallo scelto per il fitting (per tempi troppo alti la correlazione cambia comportamento)

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

```
parfor r = 1:exps
x0 = zeros(N,1);
x1 = zeros(N,1);
Xc = [];
for j = 0:therm
for j = 0:skip:steps
    for m = 1:skip
        noise = D*randn(N,1);
        % metodo dei trapezi!
        x0eu = x0 + (D2*x0 - x0 - 4*g*x0.*x0.*x0) * tau + noise;
        x0 = x0 + 0.5*tau*((D2*x0 - x0 - 4*g*x0.*x0.*x0)+...
            (D2*x0eu - x0eu - 4*g*x0eu.*x0eu.*x0eu))+noise;
        x1eu = x1 + (D2*x1 - x1 - 12*g*x0.*x0.*x1) * tau;
        x1 = x1 + 0.5*((D2*x1 - x1 - 12*g*x0.*x0.*x1) + ...
            (D2*x1eu - x1eu - 12*g*x0eu.*x0eu.*x1eu)) * tau;
        x1(Jsource) = x1(Jsource) + tau;

    end

    Xc = [Xc,x1];

end

end
```

Il cuore del programma è poi questa serie di “for” annidati, la quale parte da un parfor che, qualora sia possibile, fa simultaneamente un numero “exps” di esperimenti.

Vengono quindi per ogni esperimento inizializzate le X e il vettore Xc dove le X_1 vengono accumulate per farne la media alla fine del programma. “Jsource” è l’indice della x in cui è posta la sorgente.

Ogni esperimento ha poi una fase di termalizzazione (minimizzata nella figura) che evolve il sistema con Eulero, seguita dalla fase di misura, che avviene ogni “skip” passi mentre il sistema continua ad evolvere con il metodo dei trapezi.

IMPLEMENTAZIONE GENERALE

Dopo aver calcolato la media per ogni x del vettore delle x_i , si utilizza la routine "fitcorr" per trovare l'energy gap dalla pendenza della retta (in grafico semilogaritmico per le ordinate) della correlazione in funzione del tempo euclideo, tramite la funzione fminsearch. Con la sorgente posta nel primo sito (x_1), questo è il fitting richiesto:

```
function [s, f, Xf] = fitcorr(Xc, setup, interv)
    N = str2num(setup{1});           % extract parameters
    T = str2num(setup{2});

    hbar = 1. ;
    t = linspace(0,T,N)';

    opt = optimset('TolFun', 1e-4,...
                  'TolX', 1e-4,...
                  'MaxIter', 1e6,...
                  'MaxFunEval', 1e6,...
                  'Display','on');

    ti = t(interv);

    z = fminsearch(@corr , [0.5, 1.], opt, ti, Xc, T);

    s = z(1);
    f = z(2);

    Xf = f*(exp(-s*t)+exp(-s*(T-t)));

end
```

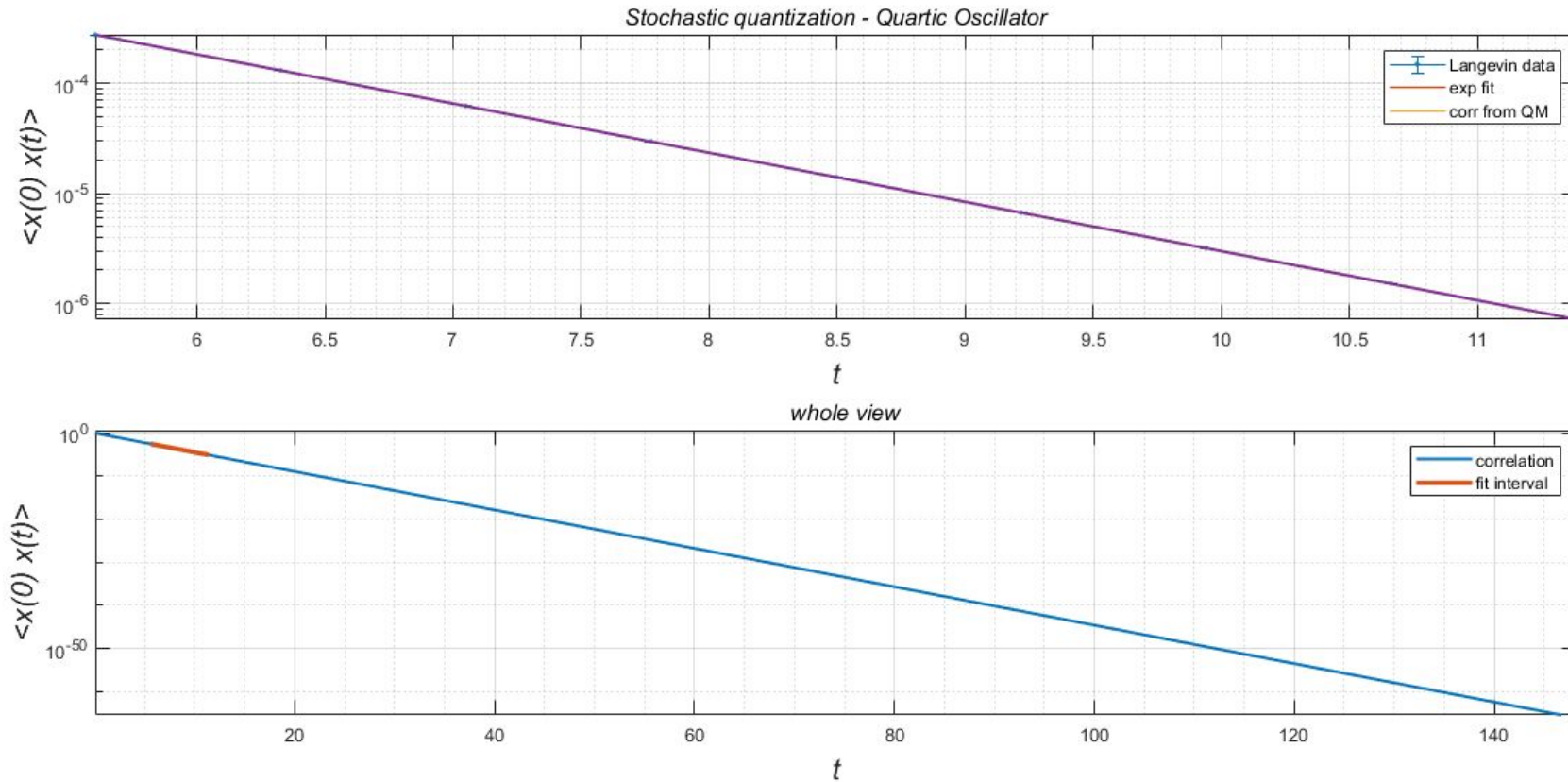
```
function err = corr(z, t, Xc, T)

    s=z(1);
    f=z(2);

    err = norm( Xc - f*(exp(-s*t) + exp(-s*(T-t)))));

end
```


IMPLEMENTAZIONE GENERALE



Esempio di fitting fatto per trovare la correlazione, in grafico semilogaritmico, per l'oscillatore anarmonico, con $g = 0.01$

Ottimizzazione variabili

OTTIMIZZAZIONE VARIABILI

Per testare la precisione del programma si è deciso di studiare l'oscillatore armonico, del quale il primo gap energetico è noto, per confrontare il valore ottenuto con quello teorico.

Vengono quindi fatti variare i parametri per vedere come cambi l'accuratezza del risultato, e sono scelti poi quelli che danno un risultato migliore, tenendo conto che:

- N: all'aumentare della dimensione diminuiscono gli errori dovuti alla discretizzazione ($a=T/N$)
- T: Il valore è legato al potenziale utilizzato
- Tlang: all'aumentare del tempo di evoluzione l'accuratezza migliora, ma aumenta tau
- steps: deve essere tenuto alto per mantenere τ il più basso possibile ($\tau=Tlang/steps$)
- skips: è utile mantenerlo alto per evitare errori di autocorrelazione
- therm: la termalizzazione deve essere sufficientemente alta da scostarsi dal vettore nullo con cui si parte, ma valori troppo alti aumentano la durata del programma senza benefici
- exps: più alto il numero degli esperimenti più l'errore associato al gap è basso, ma se l'errore è già basso è più conveniente usare la potenza di calcolo per altre variabili
- trim: per valori troppo bassi sono rilevanti i contributi dei livelli energetici maggiori di 1, mentre per valori troppo alti c'è un'inversione dell'andamento dovuto alle condizioni periodiche

OTTIMIZZAZIONE VARIABILI

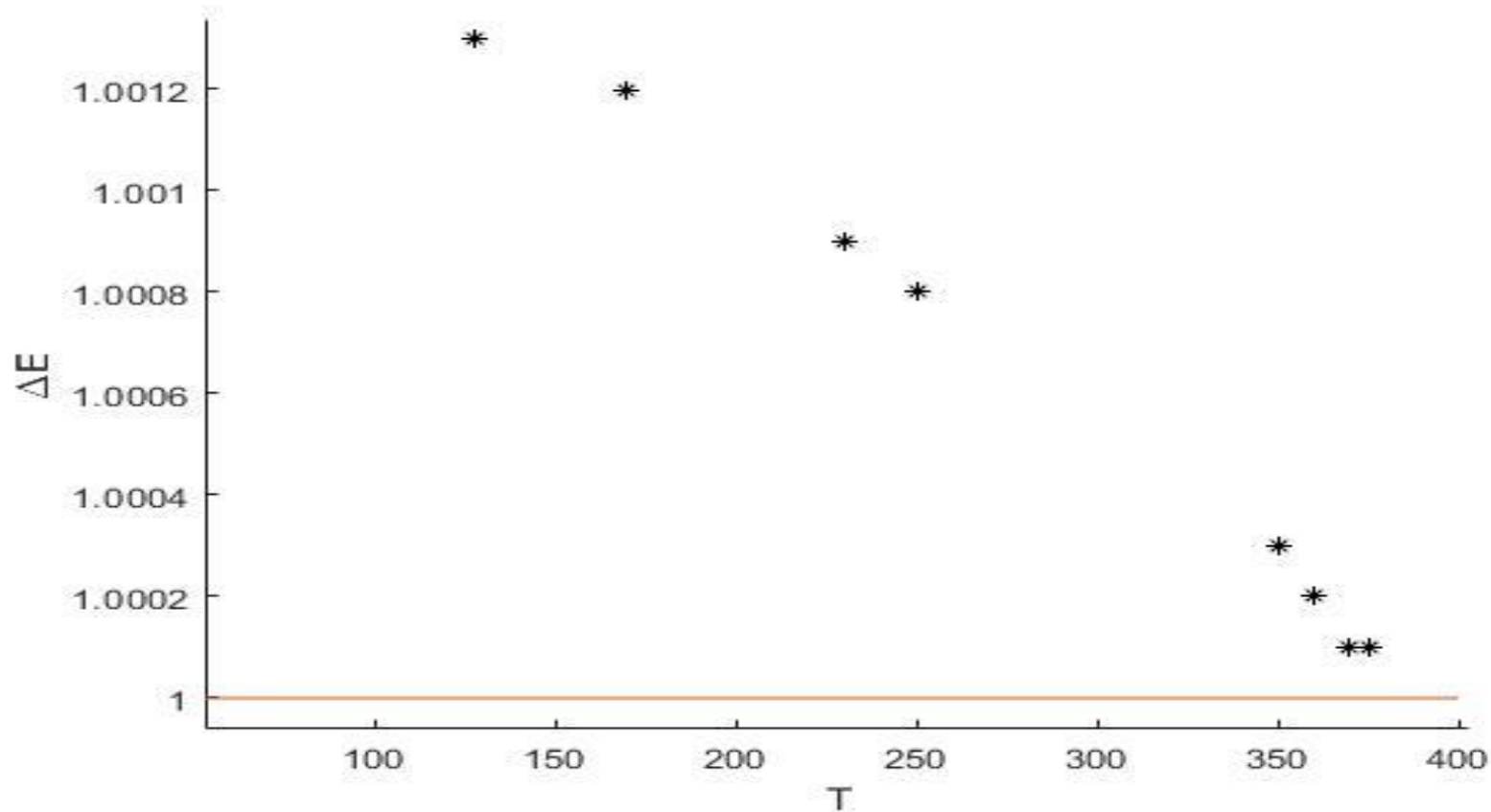


Grafico che mostra l'andamento dell'energy gap in funzione del tempo euclideo totale scelto per l'oscillatore armonico.

La linea gialla rappresenta il valore teorico.

Per valori più alti il valore dell'energy gap esplode (~ 10).

OTTIMIZZAZIONE VARIABILI

Non tutte le variabili hanno stesso valore ottimale per diversi potenziali, ma, in generale, sono state fatte diverse prove e le variabili usate con buona precisione e minore peso computazionale sono:

- N: 2048
- T: 370
- Tlang: 256
- skips: 64
- therm: 128
- exps: 4
- trim: [64,16] (fit fatto da $T/64$ a $T/16$)

steps è stato fatto fatto variare per ogni esperimento per poi estrapolare per tau che tende a 0, attraverso un fit quadratico.

Potenziali analizzati

- Oscillatore anarmonico

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + gx^4$$

- Potenziale di Fokker-Planck

$$V(x) = \frac{x^2 - 1}{2} + gx(1 - x^2) + \frac{g^2 x^4}{2}$$

Si considerano m , ω e \hbar di valore 1.

Oscillatore anarmonico

OSCILLATORE ANARMONICO

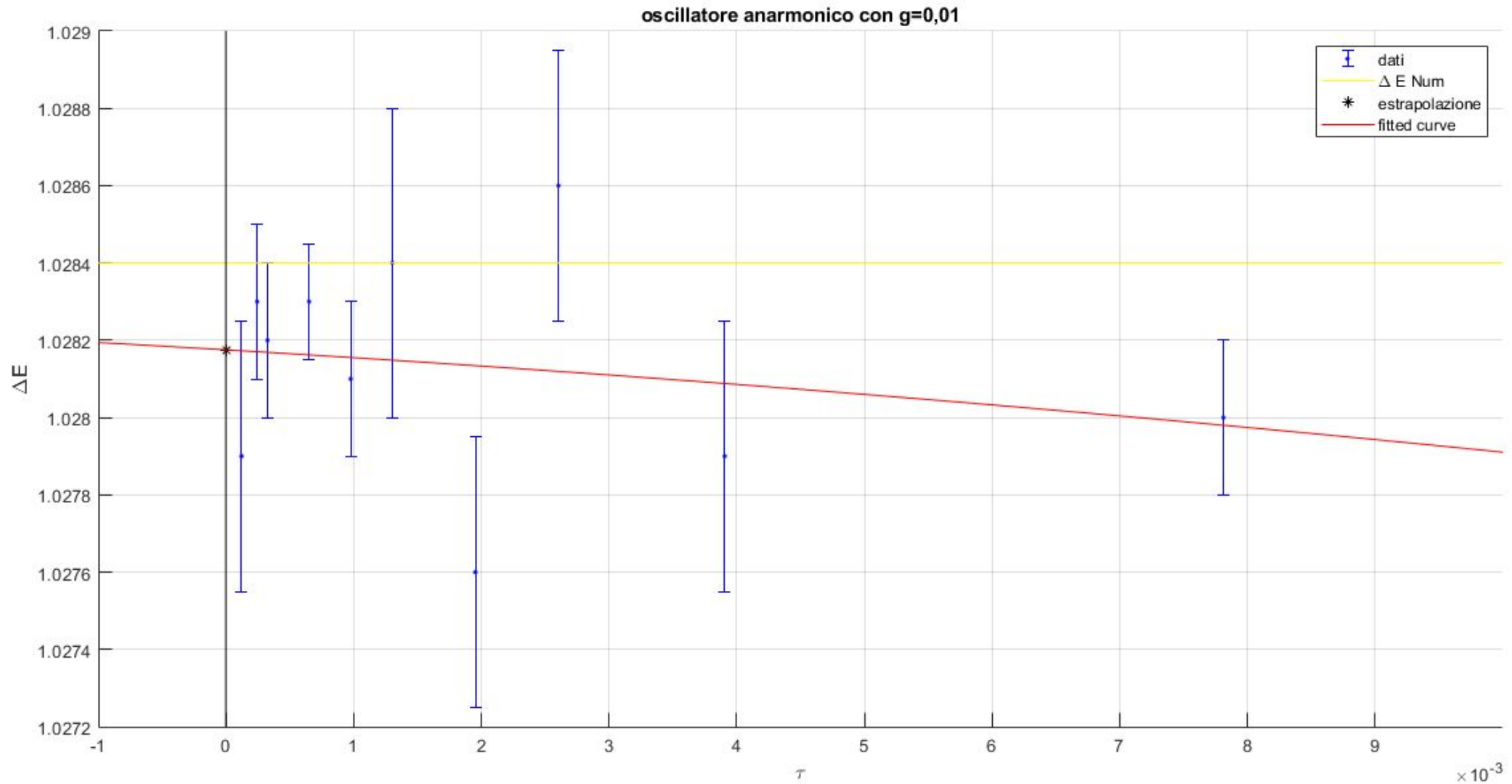
$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + gx^4$$

Le equazioni di evoluzione discretizzate e a tempo euclideo per l'oscillatore anarmonico sono:

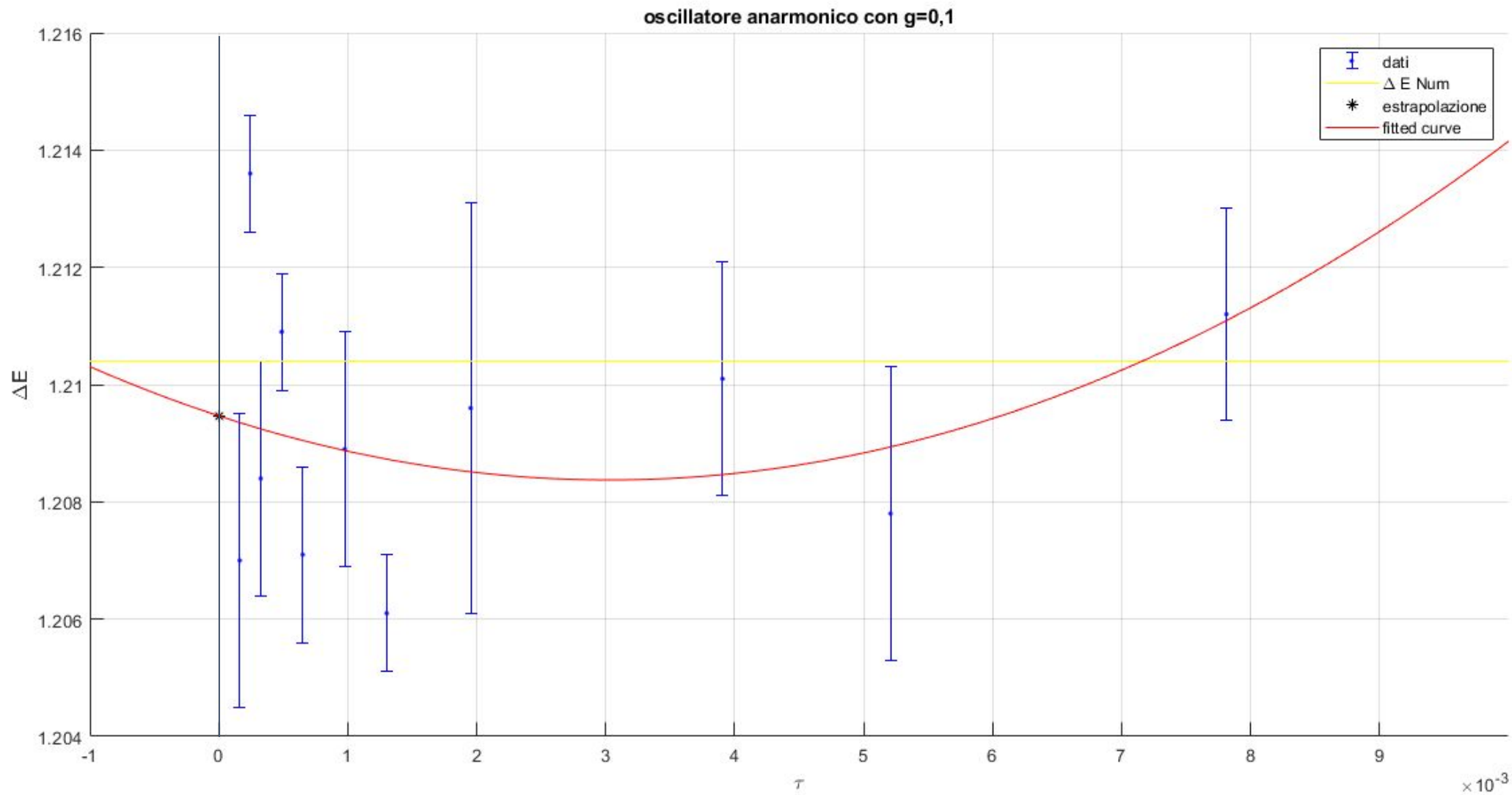
$$\begin{aligned}\Delta x_{(0)} &= (D^2 \cdot x_{(0)} - x_{(0)} - 4gx_{(0)}^3)\Delta\tau + \Delta w \\ \Delta x_{(1)} &= (D^2 \cdot x_{(1)} - x_{(1)} - 12gx_{(0)}^2x_{(1)})\Delta\tau + \delta_{ij}\Delta\tau\end{aligned}$$

Per alleggerire la notazione si è sottinteso l'indice i

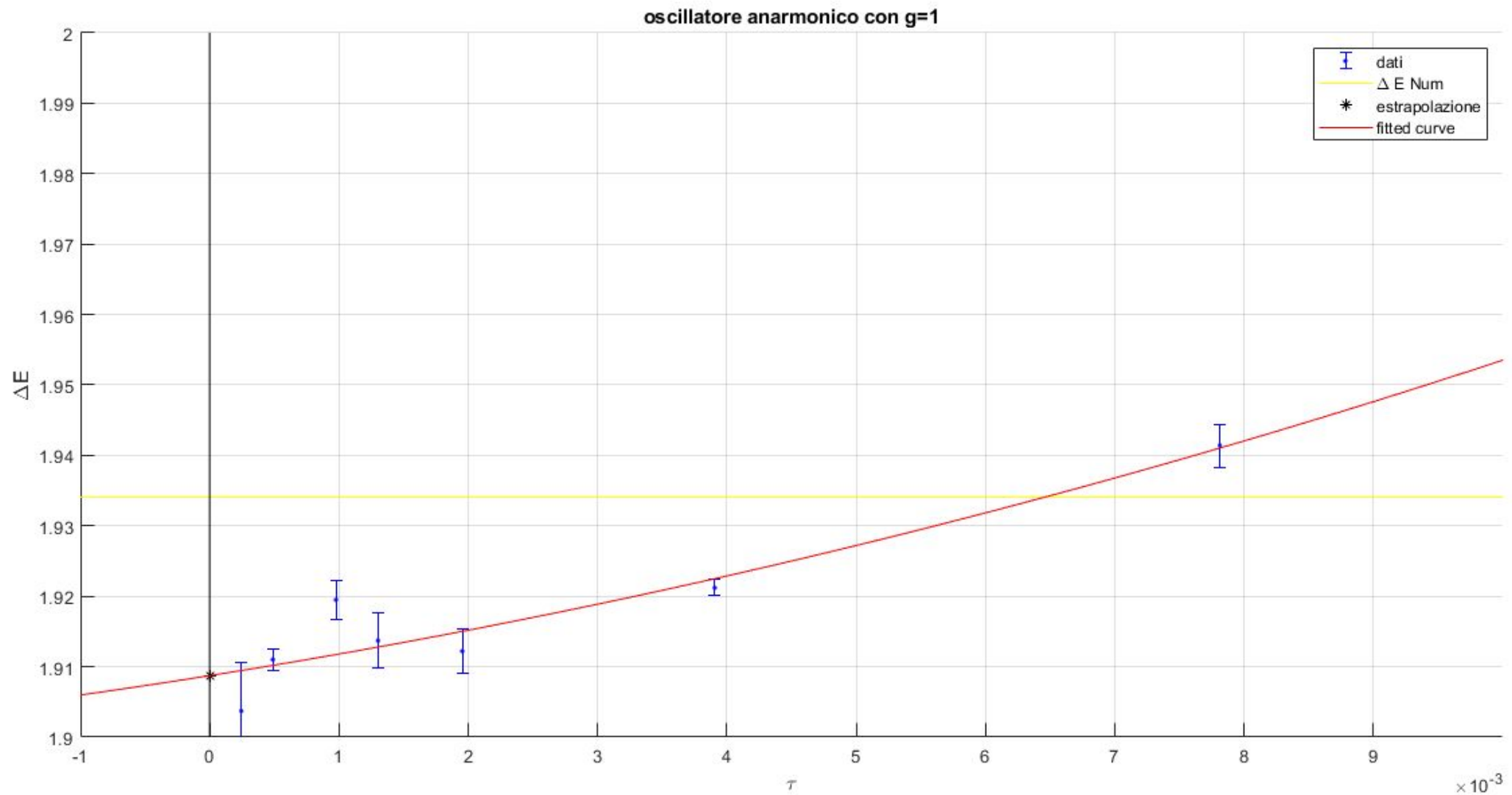
OSCILLATORE ANARMONICO



OSCILLATORE ANARMONICO



OSCILLATORE ANARMONICO



Potenziale di Fokker-Planck

POTENZIALE DI FOKKER-PLANCK

$$V(x) = \frac{x^2 - 1}{2} + gx(1 - x^2) + \frac{g^2 x^4}{2}$$

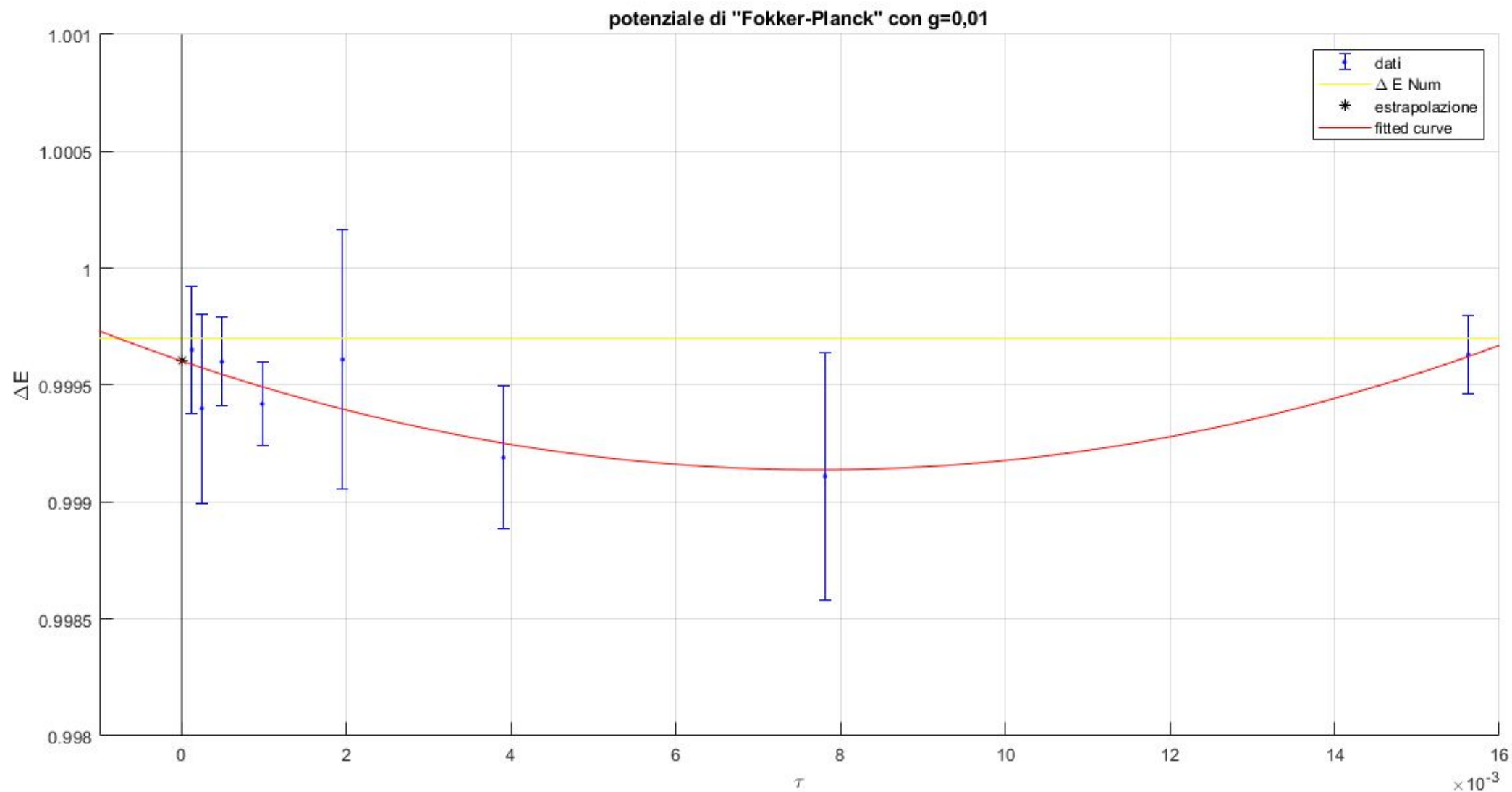
Le equazioni di evoluzione discretizzate e a tempo euclideo per il potenziale di Fokker-Planck sono:

$$\Delta x_{(0)} = (D2 \cdot x_{(0)} - x_{(0)} - g + 3gx_{(0)}^2 - 2g^2 x_{(0)}^3) \Delta \tau + \Delta w$$

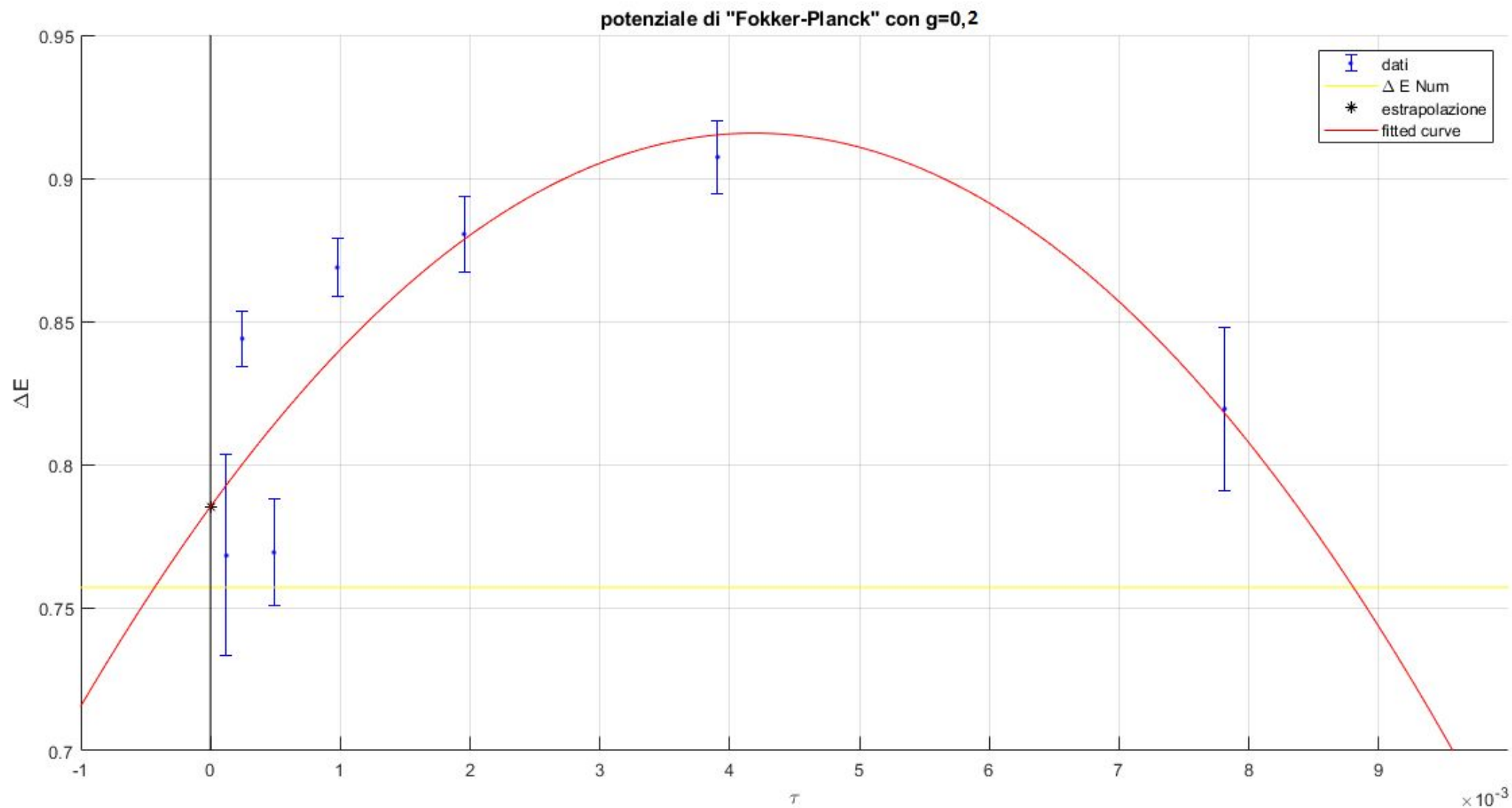
$$\Delta x_{(1)} = (D2 \cdot x_{(1)} - x_{(1)} + 6gx_{(0)}x_{(1)} - 6g^2 x_{(0)}^2 x_{(1)}) \Delta \tau + \delta_{ij} \Delta \tau$$

Dove, per alleggerire la notazione, si è sottinteso l'indice i .

POTENZIALE DI "FOKKER-PLANCK"



POTENZIALE DI "FOKKER-PLANCK"



ANALISI DEI RISULTATI

Oscillatore anarmonico				
g	$\Delta E(\text{Parisi})$	$\Delta E(\text{numerico})$	$\Delta E(\text{perturbativo})$	$\Delta E(\text{Fourier})$
0.01	1.0282 ± 0.0005	1.0284	1.0284	1.04 ± 0.06
0.1	1.209 ± 0.003	1.2104	1.2053	1.21 ± 0.08
1	1.91 ± 0.01	1.9341	1.6079	1.74 ± 0.09
Potenziale di "Fokker-Plank"				
g	$\Delta E(\text{Parisi})$	$\Delta E(\text{numerico})$	$\Delta E(\text{perturbativo})$	
0.01	0.9996 ± 0.0002	0.9997	0.9976	
0.2	0.78 ± 0.06	0.7571	-108.042	

Appendice

CORRELAZIONE E TRASFORMATA DI FOURIER

Il metodo alternativo utilizzato per il calcolo della correlazione è ottenuto dall'utilizzo della trasformata di Fourier. Data la definizione di correlazione:

$$C(a) = \sum_{k=0}^{N-1} x_k x_{k+a}$$

Si applica la trasformata di Fourier, ottenendo

$$\tilde{C}(a) = \sum_{a=0}^{N-1} e^{-i\alpha a} \sum_{k=0}^{N-1} x_k x_{k+a} = \sum_{k=0}^{N-1} x_k e^{i\alpha k} \sum_{a=0}^{N-1} x_{k+a} e^{-i\alpha(k+a)} = \tilde{x}_\alpha^* \tilde{x}_\alpha$$

Quindi per calcolare la correlazione C basta scrivere

```
y = fft(x);  
C = ifft(y.*conj(y), 'symmetric');
```

CALCOLO NUMERICO DEL GAP

Per avere un riscontro numerico si utilizza uno script ("schr1d.m") che fa utilizzo della trasformata di Fourier (fft) per definire il momento p , quindi calcola l'hamiltoniana e utilizza la funzione "eigs" di Matlab (basato sul metodo di Arnoldi) per diagonalizzarla.

I risultati dati dal calcolo numerico sono affidabili per i potenziali descritti, ma, al contrario dell'utilizzo dell'equazione di Langevin, non è possibile ampliare il metodo a sistemi con più di 3 gradi di libertà.

```
[Psi,E] = eigs(@Ham, N, Neig,'SA',opts);  
E = diag(E);  
  
gap = E(2)-E(1)  
  
%%--- embedded routines  
function Hpsi = Ham(psi)  
    psixx = real(ifft(K2.*fft(psi)));  
    Hpsi = 0.5* psixx + V .* psi;  
end
```

BIBLIOGRAFIA E CREDITI

- Corso di "Metodi Probabilistici della Fisica", 2021, E. Onofri
- "Applicazioni dell'equazione di Langevin in meccanica quantistica unidimensionale", F. Ori, E. Farinella, D. Scalabrini
- "L'equazione di Langevin e la sua applicazione al calcolo del primo gap energetico", L. Celada, F. Zanni
- "Appunti dalle lezioni di Meccanica Quantistica", 2015-2016, E. Onofri
- "Path integral Monte carlo applicati a problemi di M.Q.", 2006, N. Macellari, C. Meneghelli
- "Correlation functions and computer simulations", 1981, G. Parisi
- "Perturbative Theory without gauge fixing", G. Parisi, Wu Yongshi
- "Some remarkable examples in eigenvalue perturbation theory", 1978, I.W. Herbst, B. Simon

Le routine "schr1D", "fitcorr", e la base del programma su cui è stato costruito il metodo di Parisi sono del Prof. E. Onofri.

