

LÍNEA DE MUNDO MONTE CARLO: UN ACERCAMIENTO AL PROBLEMA DE SOBRE MUESTREO

TESIS

QUE COMO PARTE DE LOS REQUISITOS PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS EN EL ÁREA DE FÍSICA

PRESENTA

Iván Ahumada Hernández

*Instituto de Física y Matemáticas
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*

Morelia, Michoacán, México. Abril de 2022

Director de tesis:
Dr. Axel WEBER

Codirector de tesis:
Dr. James Paul EDWARDS

A mi familia.

*“Abuelos, padres y tíos.
De los buenos manantiales
se forman los buenos ríos”*

Resumen

Introducimos una modificación simple a las simulaciones Monte Carlo de la integral de camino de Feynman para mejorar el muestreo de interacciones localizadas. Desarrollamos nuevos algoritmos que generan un ensamble de trayectorias en potenciales de fondo simples cuyo efecto es concentrar las trayectorias alrededor de la región de interacción y, de este modo, mejoramos el muestreo estadístico del sistema.

Esto sobrepasa limitaciones de algoritmos previos que sufren un problema de *sobre muestreo* para tiempos grandes que limita la precisión, causado por la difusión espacial de la raíz cuadrada de las trayectorias de movimiento Brownianas que están lejanas de la región de interacción. Probamos la validez de nuestro enfoque apelando a trabajo analítico previo sobre la distribución de la línea de Wilson sobre trayectorias de integral de caminos y probamos las mejoras en algunos sistemas cuánticos simples para ilustrar su alcance.

Palabras clave: mecánica cuántica, integral de caminos, técnica Monte Carlo, línea de mundo, método numérico.

Abstract

We introduce a simple modification to Monte Carlo simulations of the Feynman path integral to improve sampling of localized interactions. We develop new algorithms that generate an ensemble of trajectories in simple background potentials whose effect is to concentrate them about the interaction region, reminiscent of importance sampling, thereby improving the statistical sampling of the system.

This overcomes limitations of previous algorithms that suffer a long-time undersampling problem that limits precision, caused by the square root spatial diffusion of Brownian motion trajectories away from the support of the interaction. We prove the validity of our approach by appealing to previous analytic work on the distribution of the Wilson line over path integral trajectories and test the improvements on some simple quantum mechanical systems to illustrate their strength.

Keywords: quantum mechanics, path integral, Monte Carlo technique, worldline, numerical method.

Índice general

Resumen	5
Abstract	7
Introducción	1
1. Propagador e integrales de camino	5
1.1. Formalismo operacional	6
1.2. Operador de evolución temporal	7
1.3. Propagador	8
1.4. La integral de camino de Feynman	11
1.5. Ejemplos del cálculo del propagador	14
1.5.1. Partícula libre	14
1.5.2. Potencial lineal	17
1.5.3. Potencial lineal con valor absoluto	19
1.5.4. Oscilador armónico	23
1.5.5. Potencial Pöschl-Teller modificado	26
1.6. Transformaciones integrales del propagador	30
1.6.1. El potencial de camino promedio	31
2. Formalismo línea de mundo Monte Carlo	35
2.1. Espacio euclideo y mecánica estadística	35
2.2. Teoría de perturbaciones: expansión del propagador	37
2.3. Línea de mundo Monte Carlo	39
2.3.1. Implementación numérica	41
2.3.2. Algoritmo Yloop	43
2.3.3. Errores del formalismo	46
3. El problema de sobre muestreo	49
3.1. Evidenciando el sobre muestreo	50
3.2. Métodos para abordar el problema	57

3.2.1. Método del prefactor	57
3.2.2. Método de modificación a la acción	74
4. Resultados	83
4.1. Método del prefactor	83
4.1.1. Oscilador armónico	83
4.1.2. Potencial lineal	87
4.2. Método de la modificación de la acción	90
4.2.1. Oscilador armónico	90
4.2.2. Potencial lineal con valor absoluto	93
4.2.3. Potencial modificado de Pöschl-Teller	95
4.2.4. Potencial lineal	96
4.2.5. Partícula libre	98
5. Conclusiones	101
Bibliografía	107
Apéndice A. Pruebas de convergencia	109
Apéndice B. Código	115
Agradecimientos	131

Introducción

El objetivo principal de la mecánica cuántica es determinar la función de onda que representa el estado de un sistema y conocer cómo evoluciona esta función en el tiempo, es decir, se busca una predicción de un comportamiento futuro de un sistema dinámico. El conocimiento de dicho estado es necesario para conocer las probabilidades para los posibles resultados de mediciones que se hacen en el sistema.

Existen al menos dos formalismos equivalentes para determinar la evolución de un sistema cuántico¹: el formalismo operacional o algebraico y el formalismo funcional, mejor conocido como formalismo de integrales de camino. En el primer formalismo, la evolución temporal de un estado cuántico es descrita por la ecuación de Schrödinger, en donde el operador hamiltoniano que actúa en un espacio de Hilbert toma un rol central. Asimismo, es posible representar la evolución temporal para un sistema arbitrario usando el operador de evolución temporal para calcular el propagador, que nos proporciona la amplitud de probabilidad de transición que tiene una partícula de ir de un estado inicial a uno final. Obteniendo la función de onda y la evolución temporal de un sistema determinamos por completo su estado, necesario para medir la magnitud de una cierta observable.

El formalismo de integrales de camino, introducido por R. Feynman [1] es una alternativa para estudiar sistemas cuánticos. Este formalismo permite calcular el propagador de un sistema sumando sobre todos los caminos posibles que conectan a un punto inicial y a uno final en el espacio-tiempo, donde cada camino está pesado por un factor exponencial cuyo argumento es la acción asociada a cada camino. La amplitud de probabilidad total va a ser la suma de las amplitudes parciales dadas por cada camino, que serán iguales en magnitud pero diferentes en el factor de fase, que es la exponencial de la acción. En este sentido, el formalismo de las integrales de camino es también llamado formalismo funcional dado

¹Nos referimos a un sistema cuántico **no** relativista, en caso contrario nos referiremos a la teoría cuántica relativista como *Quantum Field Theory* (Teoría Cuántica de Campos) o como QFT por sus siglas en inglés.

que se integra sobre un espacio de funciones, donde ahora la función lagrangiana toma un papel principal.

Feynman fue quien originalmente propuso utilizar la integral de camino para una partícula relativista como una herramienta especial en el cálculo de amplitudes para la teoría cuántica de campos [2, 3], pero por un largo lapso esta técnica fue raramente utilizada. No fue hasta la década de los 90's en donde dicha técnica se consolidó adquiriendo el nombre de *formalismo línea de mundo* con los trabajos de Bern-Kosower [4, 5], inspirados en la teoría de cuerdas y con el trabajo de Strassler [6], que recupero el trabajo de Bern-Kosower para trabajar en el contexto de QFT usando las propuestas de Feynman.

En este formalismo amplitudes perturbativas de N puntos son calculadas analíticamente por integrales de camino gaussianas sobre trayectorias de partículas puntuales. Para una revisión más detallada del formalismo línea de mundo en QFT se recomienda el *review* de C. Schubert [7] y el reporte mostrado en [8].

El esfuerzo de analizar cálculos no perturbativos en este formalismo condujo al desarrollo en paralelo de técnicas numéricas para la evaluación de las integrales de camino relativistas de Feynman. Nieuwenhuis y Tjon desarrollaron una técnica basada en la evaluación directa tipo Monte Carlo de la integral de camino que llamaron “representación de Schwinger-Feynman” [9, 10, 11] en los 90's, este método fue aplicado al análisis no perturbativos de estados ligados. En el 2001, Gies y Langfeld [12] retomaron el enfoque numérico tipo Monte Carlo del trabajo antes mencionado. En su técnica, ahora llamada línea de mundo Monte Carlo (WLMC por sus siglas en inglés) o línea de mundo numérico, se discretiza la integral de camino sobre trayectorias cerradas por una suma sobre un número finito de trayectorias representativas de partículas, llamadas lazos cerrados². Estos lazos realizan un muestreo del potencial y nos permiten aproximarnos a la integral de trayectoria que representa el propagador. Así pues, el formalismo línea de mundo Monte Carlo se puede aplicar a la solución de problemas importantes en el contexto de QFT, por ejemplo, cálculos para dar una aproximación a amplitudes de energías de Casimir [13, 14, 15], en difusión cuántica de campos magnéticos [12], en el cálculo de tasas de creación de pares de partículas [16, 17], cálculo de acciones efectivas cuánticas [18, 19], en el estudio de dinámicas línea de mundo no perturbativas [20]; también se ha aplicado para el cálculo de tensores, como el tensor de polarización del vacío [21] y tensores de energía-momento [22, 23].

A pesar de que el formalismo línea de mundo Monte Carlo fue originalmente concebido para estimar cantidades físicas en el contexto de QFT, recientemente

²Aunque parezca pleonasma, se menciona lazos cerrados porque existen lazos abiertos, la naturaleza de los lazos depende de las condiciones de frontera.

se ha utilizado para trabajar en el contexto de mecánica cuántica no relativista [24].

Es importante mencionar que este método numérico no es el único para la evaluación numérica de las integrales de camino usado en la literatura, por ejemplo, véase [25, 26, 27, 28, 29], pero muchas de estas alternativas evalúan la integral de camino por principios más indirectos. Diversos enfoques numéricos para la evaluación integral de caminos en la mecánica cuántica de una sola partícula, generalmente, implican una adaptación más específica al potencial dado. Usualmente uno trata de crear ensambles de trayectorias que se relajen a una distribución con un determinado peso estadístico, usando algoritmos que usan el método del baño de calor [30, 31, 32] y otras implementaciones basadas en algoritmos iterativos de estilo Metropolis [33, 34, 35, 36]. Se puede alcanzar una mayor precisión en estos métodos si se adapta las simulaciones al problema en cuestión, modificaciones como el uso de información analítica aproximada en el comportamiento del sistema en tiempos cortos [37, 38, 39] o incluyendo funciones de onda de prueba para mejorar el muestreo numérico [40, 41, 42].

Uno de los beneficios que veremos del formalismo línea de mundo Monte Carlo es que el método es bastante general, se caracteriza por una construcción rápida y no recursiva de un ensamble de lazos que es pesada según la acción libre, no la completa, modelando así un movimiento browniano libre; en este sentido, el formalismo es universal en cuanto el método debería ser aplicable a cualquier potencial cuántico para dar una estimación confiable a las integrales de camino.

Pero como todo método numérico, este formalismo no está libre de errores. El método tiene principalmente dos fuentes de error de naturaleza numérica inherentes del paso de lo continuo a lo discreto. El primer error, llamado error sistemático, es debido a la discretización de las trayectorias sobre el parámetro línea de mundo del tiempo propio. El segundo error, llamado error estadístico, es debido al reemplazo de la integral sobre trayectorias con una suma sobre un número finito de lazos. Ambos errores pueden ser reducidos conforme se aumenta el tamaño del número de lazos representativos de las trayectorias y el número de puntos por cada lazo que sustituyen la parametrización del tiempo propio. No obstante de que los errores pueden ser reducidos, en principio, escogiendo un número suficientemente grande de número de lazos y puntos por lazo, se conoce que los cálculos del formalismo línea de mundo Monte Carlo generalmente pierden precisión para valores grandes de tiempo debido al fenómeno numérico de *sobre muestreo* de los lazos.³ El problema de sobre muestreo es debido a que la extensión espacial de las trayectorias empieza a crecer como la raíz cuadrada del tiempo, por lo tanto, para los potenciales localizados se moverán fuera de la región donde el potencial es fuerte. En el límite continuo esto no representa

³En la literatura este problema es conocido como *undersampling* u *overlap problem*.

un problema ya que obtendríamos las contribuciones o pesos relativos correctos entre trayectorias que se alejan del potencial y las que no lo hacen, pero con un número finito de trayectorias estas propiedades estadísticas se pierden.

Aunque este problema ya es conocido en la literatura, solo pocos trabajos hablan de un método para superar el problema, por ejemplo, en el trabajo de G. Dunne et. al [43] implementaron un método tipo cadena de Markov al que llamaron Monte Carlo Híbrido (HMC por sus siglas en inglés). Este tema también se estudia en [19] para el caso específico del oscilador armónico.

Es objetivo del presente trabajo el estudio y desarrollo de métodos que puedan solventar de manera eficiente y universal, es decir, aplicado a cualquier potencial, el problema de sobre muestreo en el contexto de la mecánica cuántica no relativista, esperando que los avances aquí presentados sean también útiles en el caso relativista. Además se analiza la eficiencia de la implementación de estos métodos en cuestión de precisión en cálculos de propiedades físicas de un sistema.

La tesis está organizada de la siguiente manera: en el Capítulo 1 damos un breve repaso del formalismo operacional de la mecánica cuántica no relativista, posteriormente usamos el formalismo funcional para mostrar la integral de camino de Feynman y presentamos ejemplos detallados del cálculo analítico del propagador para cuatro sistemas físicos. Introducimos el potencial de camino promedio como una de las transformaciones integrales del propagador y, finalmente, se muestran histogramas de las funciones de distribución de probabilidad dadas por el potencial de camino promedio para dos sistemas físicos. En el Capítulo 2 revisamos brevemente el espacio físico en el que se va a trabajar durante el desarrollo de la tesis e introducimos el formalismo línea de mundo Monte Carlo con su respectiva implementación numérica. Mostramos el algoritmo base con el que generamos las trayectorias representativas y discutimos brevemente las principales limitaciones del método numérico. En el Capítulo 3 evidenciamos el problema de sobre muestreo para los sistemas que revisamos en el primer Capítulo; presentamos dos métodos desarrollados para abordar el problema de forma teórica y estudiamos de forma detallada funciones de distribución de probabilidad con la implementación de estos dos métodos. En el Capítulo 4 se exponen los resultados obtenidos de la implementación numérica de ambos métodos y los comparamos con los resultados analíticos para los cuatro diferentes sistemas.

Se muestran en el apéndice pruebas de convergencia para encontrar valores adecuados de un parámetro importante de los métodos desarrollados y se muestra, de forma explícita, el código utilizado para realizar las estimaciones numéricas.

Capítulo 1

Propagador e integrales de camino

En mecánica cuántica existe una cantidad llamada amplitud de probabilidad asociada a cualquier proceso mediante el cual un evento en la naturaleza puede tener lugar. Interpretamos el cuadrado del valor absoluto de la amplitud total como la probabilidad que tiene el evento de ocurrir. Podemos asociar una amplitud con el evento global sumando las amplitudes de cada proceso alternativo, es decir, la amplitud para un evento es la suma de las amplitudes de las diferentes formas alternativas en las que el evento puede ocurrir.

Consideremos a una partícula moviéndose de un punto y a un punto x en un intervalo de tiempo dado, puede considerarse que la partícula ha hecho esto a través de un cierto camino en el espacio y en el tiempo. Por lo tanto deberíamos asociar una amplitud parcial con cada trayectoria posible, la amplitud total será la suma de las contribuciones de cada uno de los caminos posibles. El camino o trayectoria que resuelve la ecuación de movimiento clásica es solo una de las muchas trayectorias posibles que la partícula cuántica puede tomar. Esta idea se le atribuye a R. Feynman con sugerencias previas hechas por Dirac sobre la fase que toma cada camino, proporcional a $e^{\frac{i}{\hbar}S}$. Esta nueva forma de ver la amplitud de probabilidad de transición de un sistema cuántico representa el núcleo del formalismo funcional de las integrales de camino, el cuál debe ser tratado de forma cuidadosa matemáticamente hablando.

Es propósito de este capítulo mostrar un primer acercamiento al formalismo funcional y mostrar ejemplos prácticos sobre su uso para diferentes sistemas cuánticos; estos sistemas servirán como punto de partida para probar nuestros métodos numéricos más adelante. Para introducir la integral de camino es preferible empezar con un breve repaso sobre el formalismo operacional estándar del cuál hablaremos a continuación.

1.1. Formalismo operacional

Encontraremos que, en mecánica cuántica no relativista, el problema fundamental es determinar la evolución temporal de los estados cuánticos, necesarios para obtener información sobre la amplitud de probabilidad del sistema. Para un estado $|\psi(0)\rangle$ a tiempo $t_0 = 0$, la ecuación de Schrödinger provee el estado en un tiempo posterior t , es decir, $|\psi(t)\rangle$

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

donde \hat{H} es el operador hamiltoniano¹² El conocimiento del estado a un tiempo t_0 implica su conocimiento en todos los tiempos posteriores.

En el espacio de posiciones la ecuación de Schrödinger se ve como

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\psi(t)\rangle &= \int dy \langle x|\hat{H}|y\rangle \langle y|\psi(t)\rangle \\ i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= \int dy \langle x|\hat{H}|y\rangle \psi(y,t) \end{aligned} \quad (1.2)$$

donde hemos introducido la descomposición de la identidad

$$\mathbb{I} = \int dy |y\rangle\langle y|. \quad (1.3)$$

Tomando

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (1.4)$$

obtenemos, por una parte en el elemento de matriz, para el componente de la energía potencial

$$\langle x|V(\hat{x})|y\rangle = V(x)\langle x|y\rangle = V(x)\delta(x-y).$$

¹A lo largo de la tesis trabajaremos en unidades naturales, por lo tanto $\hbar = c = 1$.

²Por simplicidad en la notación, en este capítulo trabajaremos en una dimensión. La generalización a tres dimensiones es directa.

Representamos la parte cinética como sigue:

$$\begin{aligned}
 \left\langle x \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| y \right\rangle &= \frac{1}{2m} \int \frac{dp}{2\pi} \langle x|p\rangle p^2 \langle p|y\rangle \\
 &= \frac{1}{2m} \int dp \frac{p^2}{2\pi} e^{ip(x-y)} \\
 &= -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int dp \frac{e^{ip(x-y)}}{2\pi} \\
 &= -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-y)
 \end{aligned}$$

donde hemos insertando la descomposición de la identidad pero ahora en términos de los eigenestados de momento (definidos por $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$):

$$\mathbb{I} = \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle \langle p|. \quad (1.5)$$

Substituyendo obtenemos

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= \int dy \left[-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-y) + V(x) \delta(x-y) \right] \psi(y, t) \\
 i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= \left[-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t)
 \end{aligned} \quad (1.6)$$

que es la versión usual de la ecuación de Schrödinger.

1.2. Operador de evolución temporal

Una formulación alternativa para encontrar la amplitud es en términos del operador de evolución temporal $\hat{U}(t, t_0)$ definido como

$$\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \begin{cases} |\psi(t)\rangle & t \geq t_0 \\ 0 & t < t_0 \end{cases} \quad (1.7)$$

es decir, el operador de evolución aplicado al estado o ket $|\psi(t_0)\rangle$ produce el estado en un tiempo posterior: $|\psi(t)\rangle$.

Como consecuencia de la definición anterior tenemos que

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad (1.8)$$

Substituyendo (1.7) en la ecuación de Schrödinger, se tiene:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t, t_0)H|\psi(t_0)\rangle \quad (1.9)$$

de la cual obtenemos

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0)H. \quad (1.10)$$

Cuando el operador hamiltoniano \hat{H} no depende del tiempo, (1.10) puede ser fácilmente integrada, tomando en cuenta la condición (1.8) se obtiene:

$$\hat{U}(t, t_0) = \theta(t) e^{-i\hat{H}(t-t_0)} \quad (1.11)$$

donde θ es la función escalón de Heaviside definida como

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (1.12)$$

Con el operador de evolución temporal definido podemos calcular la evolución temporal de una función de onda dada $\psi(y, t_0)$ como sigue, recordando que $\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle$. La evolución temporal de la función de onda esta dada por

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x|\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ &= \int dy \langle x|\hat{U}(t, t_0)|y\rangle \langle y|\psi(t_0)\rangle. \end{aligned} \quad (1.13)$$

1.3. Propagador

Definimos el elemento de matriz del espacio de posiciones del operador de evolución temporal como

$$K(x, y; t, t_0) \equiv \langle x|\hat{U}(t, t_0)|y\rangle = \langle x|e^{-i\hat{H}(t-t_0)}|y\rangle \quad (1.14)$$

K es usualmente llamado el **propagador** ya que da la amplitud para una partícula en la posición inicial y al tiempo t_0 para propagarse a la posición final x al tiempo t .

Conociendo la expresión para el propagador y la función de onda al tiempo inicial podemos generar la evolución temporal de la función de onda

$$\psi(x, t) = \int dy K(x, y; t, t_0) \psi(y, t_0). \quad (1.15)$$

Podemos obtener una representación diferente del propagador de la siguiente manera. Ya vimos previamente que la evolución temporal de un estado puede darse a través del operador de evolución temporal $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle$ donde $|\psi(t_0)\rangle$ obedece la ecuación de eigenvalores $\hat{H}|\psi(t_0)\rangle = E|\psi(t_0)\rangle$, que es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En esta última ecuación, E , la energía total del sistema, es el eigenvalor del operador \hat{H} .

En general, para un operador \hat{O} , su **espectro** es el conjunto de valores $\{\lambda\}$ para los cuales $\hat{O} - \lambda\mathbb{I}$ **no** es invertible. El conjunto de todos los eigenvalores $\{\lambda\}$ puede ser discreto o continuo, correspondiente a la descripción de un sistema con estados ligados o de estados de dispersión respectivamente.

Si se conocen las eigenfunciones de un hamiltoniano entonces el propagador puede presentarse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 K(x, y; t, t_0) &= \langle x|e^{-i\hat{H}(t-t_0)}|y\rangle \\
 &= \sum_{n,m} \langle x|\psi_n\rangle \langle \psi_n|e^{-i\hat{H}(t-t_0)}|\psi_m\rangle \langle \psi_m|y\rangle \\
 &= \sum_{n,m} \psi_n(x)\psi_m^*(y)e^{-iE_m(t-t_0)}\delta_{n,m} \\
 &= \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y)e^{-iE_n(t-t_0)} \tag{1.16}
 \end{aligned}$$

donde hemos insertado la relación de cerradura (o completitud) de los eigenestados de energía

$$\mathbb{I} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|.$$

Si el sistema acepta estados de dispersión debemos agregar un término que refleje la inclusión de dichos estados, así, la forma más general de escribir el propagador es:

$$K(x, y; t, t_0) = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y)e^{-iE_n(t-t_0)} + \int dE \psi_E(x)\psi_E^*(y)e^{-iE(t-t_0)}. \tag{1.17}$$

A la ecuación (1.17) se le conoce como **descomposición espectral** del propagador K .

Supongamos que conocemos el propagador K por algún método pero sin conocer todas las energías E_n . Hacemos la siguiente extensión analítica sobre los

tiempos reales³:

$$\begin{aligned} t &\longrightarrow -i\frac{t_E}{2} \\ t_0 &\longrightarrow i\frac{t_E}{2} \end{aligned}$$

en donde el subíndice E denota que se está trabajando en el espacio euclideo⁴. Hacemos la sustitución en el propagador

$$\begin{aligned} K(x, y; -it_E/2, it_E/2) &= \langle x | e^{-iH(-i\frac{t_E}{2} - i\frac{t_E}{2})} | y \rangle \\ &= \langle x | e^{-Ht_E} | y \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) e^{-E_n t_E} \end{aligned} \quad (1.18)$$

Si tomamos el límite para tiempos largos $t_E \rightarrow \infty$ el término con la energía de estado base E_0 domina sobre todas las demás energías E_i con $i \neq 0$.

$$K(x, y; -it_E/2, it_E/2) \underset{t_E \rightarrow \infty}{\sim} e^{-E_0 t_E} \psi_0(x) \psi_0^*(y) + \mathcal{O}(e^{-E_1 t_E}) \quad (1.19)$$

Despreciando los términos pequeños podemos obtener la energía del estado base E_0 explotando el comportamiento asintótico de la exponencial

$$\ln K(x, y; -it_E/2, it_E/2) \underset{t_E \rightarrow \infty}{\sim} -E_0 t_E + \ln \psi_0(x) \psi_0^*(y)$$

Entonces la energía del estado base la podemos calcular con la siguiente expresión

$$E_0 = - \lim_{t_E \rightarrow \infty} \frac{d}{dt_E} \ln(K(x, y; -it_E/2, it_E/2)). \quad (1.20)$$

Esta relación nos dice que podemos calcular la energía del estado base como menos la pendiente de la recta que produzca el logaritmo natural del propagador para tiempos grandes.

Con este método somos capaces de conocer la energía del estado base de un sistema cuántico con solo conocer el potencial al que está sometido, sin la necesidad de recurrir a la función de onda que describe al sistema como es el caso del método variacional o sin tener que resolver la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, como mencionamos anteriormente, son limitados los sistemas que admiten una solución cerrada para el propagador. Afortunadamente, el formalismo de las integrales de camino permite desarrollar un método numérico para apro-

³La extensión analítica usada formalmente es conocida como **rotación de Wick**.

⁴En el próximo capítulo hablaremos sobre este espacio con más detalle.

ximar el valor del propagador: el método **línea de mundo Monte Carlo** el cual será introducido en el próximo capítulo.

1.4. La integral de camino de Feynman

Existe una alternativa por la cual el propagador puede ser calculado: **la integral de camino de Feynman** [1]. Una discusión más detallada del método se encuentra en [44]. En este trabajo vamos a introducir la integral de camino siguiendo el desarrollo dado en [45], para esto dividimos el propagador (1.14) como el producto de N factores e insertamos la relación de completitud (1.3) $N - 1$ veces entre los varios factores

$$\begin{aligned} K &= \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | y \rangle = \langle x | \left(e^{-i\hat{H}\frac{T}{N}} \right)^N | y \rangle = \langle x | e^{-i\epsilon\hat{H}} e^{-i\epsilon\hat{H}} \dots e^{-i\epsilon\hat{H}} | y \rangle \\ &= \langle x | e^{-i\epsilon\hat{H}} \mathbb{I} e^{-i\epsilon\hat{H}} \mathbb{I} \dots \mathbb{I} e^{-i\epsilon\hat{H}} | y \rangle = \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \prod_{k=1}^N \langle x_k | e^{-i\epsilon\hat{H}} | x_{k-1} \rangle, \end{aligned} \quad (1.21)$$

en donde, por conveniencia, hemos denotado $T = (t - t_0)$ como el tiempo total de propagación, $x_0 \equiv y$, $x_N \equiv x$, $y \equiv \frac{T}{N}$. Ahora debemos estimar el valor de la amplitud de transición infinitesimal que aparece en esta expresión, para esto insertamos N veces la descomposición de la identidad, pero ahora expresada en términos de los eigenestados de momento (1.5) para obtener

$$\begin{aligned} K &= \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \prod_{k=1}^N \langle x_k | \mathbb{I} e^{-i\epsilon\hat{H}} | x_{k-1} \rangle \\ &= \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \prod_{k=1}^N \langle x_k | p_k \rangle \langle p_k | e^{-i\epsilon\hat{H}} | x_{k-1} \rangle. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Debemos evaluar el siguiente elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle p | e^{-i\epsilon\hat{H}} | x \rangle &= \langle p | \left(\mathbb{1} - i\epsilon\hat{H} + \frac{(i\epsilon\hat{H})^2}{2!} + \dots \right) | x \rangle \\ &= \langle p | x \rangle - i\epsilon \langle p | \hat{H} | x \rangle + \dots \\ &= \langle p | x \rangle (1 - i\epsilon H + \dots) \\ &= \langle p | x \rangle e^{-i\epsilon H + \dots}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Esta aproximación es válida en el límite de ϵ pequeño, i.e. $\epsilon \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$. En la tercera línea la sustitución de $\langle p|\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})|x\rangle = \langle p|x\rangle H(x, p)$ sigue por la estructura simple del hamiltoniano (1.4) que estamos usando, que permite actuar al operador de momento a la izquierda y al operador de posición a la derecha para obtener los respectivos eigenvalores de cada operador⁵. Usando la ecuación (1.23) hasta términos de orden $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ en (1.22) obtenemos

$$\begin{aligned} K &= \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \prod_{k=1}^N \langle x_k | p_k \rangle \langle p_k | x_{k-1} \rangle e^{-i\epsilon H(x_{k-1}, p_k)} \\ &= \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \prod_{k=1}^N [e^{-ip_k(x_k - x_{k-1}) - i\epsilon H(x_{k-1}, p_k)}] \\ &= \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \exp \left\{ i\epsilon \sum_{k=1}^N \left[p_k \frac{(x_k - x_{k-1})}{\epsilon} - H(x_{k-1}, p_k) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

En el límite continuo $N \rightarrow \infty$ podemos escribir formalmente la expresión anterior (1.24) como

$$K(x, y; t, t_0) = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \exp \left\{ i \int_{t_0}^t dt' [p\dot{x} - H(x, p)] \right\} \quad (1.25)$$

que es conocida como la **integral de camino en el espacio fase**. Aquí hemos reconocido en el argumento del exponente la versión discreta de la acción clásica en el espacio fase

$$\epsilon \sum_{k=1}^N \left[p_k \frac{(x_k - x_{k-1})}{\epsilon} - H(x_{k-1}, p_k) \right] \longrightarrow S[x, p] = \int_{t_0}^t dt' [p\dot{x} - H(x, p)] \quad (1.26)$$

donde $t - t_0 = T = N\epsilon$ es el tiempo total de propagación.

Podemos integrar sobre los momentos en (1.24) considerando la forma explícita del hamiltoniano como $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, entonces la integral de camino en el espacio fase previa se ve como

$$K = \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \exp \left\{ i\epsilon \sum_{k=1}^N \left[p_k \frac{(x_k - x_{k-1})}{\epsilon} - \frac{p_k^2}{2m} - V(x_{k-1}) \right] \right\}. \quad (1.27)$$

⁵Existe una prueba más rigurosa de que estas manipulaciones son correctas para una larga clase de potenciales $V(x)$, la llamada **fórmula de Trotter**.

Observamos que la integral sobre los momentos es de tipo gaussiano con una extensión analítica para incluir valores complejos. Completando el cuadrado obtenemos

$$K = \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left\{ i\epsilon \sum_{k=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_{k-1}) \right] \right\}, \quad (1.28)$$

esta expresión final de la integral de camino contiene la acción en el espacio de configuraciones discretizada

$$\epsilon \sum_{k=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_{k-1}) \right] \longrightarrow S[x] = \int_{t_0}^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right), \quad (1.29)$$

donde reconocemos al lagrangiano clásico del sistema. Tomando nuevamente el límite continuo cuando $N \rightarrow \infty$ llegamos a la representación del propagador en el formalismo de integrales de camino

$$K(x, y; t, t_0) = \int \mathcal{D}x e^{iS[x(t)]}. \quad (1.30)$$

La expresión anterior es llamada **integral de camino en el espacio de configuraciones** y es interpretada como una integral funcional sobre las trayectorias. Representa la suma de las amplitudes de propagación que corresponden a todos los posibles caminos $x(t')$ que conectan al punto inicial (y, t_0) con el punto final (x, t) en el espacio-tiempo. La función $x(t')$ tendrá la propiedad de que $x(t_0) = y$ y $x(t) = x$, es decir, que los extremos del camino van a estar fijos. La amplitud de probabilidad para un sistema cuántico será la suma de las contribuciones de todos los posibles caminos que van entre los puntos finales y y x , en contraste con la situación en mecánica clásica, en la que sólo hay una trayectoria particular bien definida, la llamada trayectoria clásica, que es el camino que extremiza la acción.

Al día de hoy no hay una definición matemática precisa de la medida $\mathcal{D}x$, se debe confiar en algunos métodos de regularización.

1.5. Ejemplos del cálculo del propagador

En mecánica cuántica existe un número limitado de problemas cuya solución se conoce en forma exacta, en consecuencia, el cálculo de propagadores en forma exacta esta igualmente limitado. Algunos ejemplos de sistemas que admiten una solución analítica son:

- Partícula libre
- Potencial lineal
- Oscilador armónico
- Oscilador armónico forzado
- Potencial Pöschl-Teller modificado
- Potencial tipo delta de Dirac, entre otros.

En esta sección trataremos solo algunos de los sistemas mencionados, calcularemos el propagador de la partícula libre, el del potencial lineal y el del oscilador armónico mediante el formalismo de integrales de camino para ejemplificar el método, también calcularemos la descomposición espectral del propagador para el potencial lineal con valor absoluto y para el potencial Pöschl-Teller modificado.

1.5.1. Partícula libre

La partícula libre es un sistema libre de interacción ($V(x) = 0$), su dinámica solo esta dada por la contribución de la energía cinética $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, cuyo propagador se puede calcular de forma exacta. Es posible calcular el propagador de la partícula libre de diversas formas. Empezamos evaluando el elemento de matriz en el espacio de posiciones del operador de evolución temporal transformando al espacio de momentos y, por simplicidad, tomamos $t_0 = 0$:

$$\begin{aligned}
 K(x, y; t, 0) &= \langle x | \hat{U}(t, 0) | y \rangle = \langle x | e^{-i\hat{H}t} | y \rangle \\
 &= \int \frac{dp}{2\pi} \langle x | p \rangle e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \langle p | y \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-y) - i\frac{p^2}{2m}t} \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \exp\left(i\frac{m(x-y)^2}{2t}\right) \tag{1.31}
 \end{aligned}$$

donde hemos realizado en el último paso una integración gaussiana (con extensión analítica).

Se puede calcular también el propagador usando (1.28), calculando repetidamente las integrales gaussianas sobre las x_i 's y tomando el límite $N \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
K &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left\{ i \epsilon \sum_{k=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 \right] \right\} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left\{ i \frac{m}{2\epsilon} [(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2 + \dots + (x_N - x_{N-1})^2] \right\} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2\pi i \epsilon}{m} \right)^{\frac{N-1}{2}} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \sqrt{\frac{k}{k+1}} \right) e^{-i \frac{m}{2N\epsilon} (x-y)^2} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2\pi i \epsilon}{m} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i \frac{m}{2N\epsilon} (x-y)^2} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i N \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i \frac{m}{2N\epsilon} (x-y)^2} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} e^{-i \frac{m}{2t} (x-y)^2}, \tag{1.32}
\end{aligned}$$

que concuerda con el resultado (1.31) antes obtenido. El límite $N \rightarrow \infty$ en este caso no es necesario puesto que siempre se cumple la relación $\epsilon = \frac{t}{N}$.

Existe otra alternativa de calcular el propagador para la partícula libre [45], usemos ahora la definición de la integral de camino en el espacio de posiciones (1.30). Partimos de la acción

$$S[x(t')] = \int_0^t dt' \frac{m}{2} \dot{x}^2(t'). \tag{1.33}$$

cuya ecuación de movimiento es $\ddot{x} = 0$, con las condiciones de frontera $x(0) = y$ y $x(t) = x$. La solución a la ecuación de movimiento con estas condiciones es la trayectoria clásica

$$x_{cl}(t') = (x - y) \frac{t'}{t} + y \tag{1.34}$$

que produce el valor mínimo de la acción

$$S[x_{cl}] = \frac{m}{2} \frac{(x - y)^2}{t}. \tag{1.35}$$

Ahora podemos representar una trayectoria arbitraria $x(t')$ como el camino clásico $x_{cl}(t')$ más fluctuaciones cuánticas $q(t')$

$$x(t') = x_{cl}(t') + q(t') \tag{1.36}$$

donde las fluctuaciones cuánticas $q(t')$ deben desvanecerse para $t' = t_0 = 0$ (en

este caso) y $t' = t$ para preservar las condiciones de frontera, esto es, $q(0) = 0 = q(t)$. Así, la acción para un camino arbitrario se puede escribir como

$$\begin{aligned}
S[x_{cl} + q] &= \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} (\dot{x}_{cl} + \dot{q})^2 \right) \\
&= \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 + \frac{m}{2} \dot{q}^2 + m \dot{x}_{cl} \dot{q} \right) \\
&= S[x_{cl}] + S[q] + \int_0^t dt' \left(m \frac{d}{dt} (\dot{x}_{cl} q) - m \ddot{x}_{cl} q \right) \\
&= S[x_{cl}] + S[q] + \cancel{m \dot{x}_{cl} q \Big|_{t'=0}^{t'=t}} - m \int_0^t dt' (\ddot{x}_{cl}) q, \quad (1.37)
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado la constricción de las condiciones de frontera tipo Dirichlet y la ecuación de movimiento clásica. Por lo que obtenemos

$$S[x_{cl}(t') + q(t')] = S[x_{cl}(t')] + S[q(t')]. \quad (1.38)$$

Desde que todos los caminos $q(t')$ empiezan de $q(0) = 0$ y regresan al punto $q(t) = 0$, la integral sobre los caminos puede ser función solo de los puntos finales. Esto quiere decir que el propagador (1.30) puede ser escrito solamente como:

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{iS[x]} = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}(x_{cl}q) e^{i(S[x_{cl}+q])} \\
&= \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i(S[x_{cl}] + S[q])} \\
&= e^{iS[x_{cl}]} \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{iS[q]} \\
&= e^{i\frac{m}{2i}(x-y)^2} \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i \int_0^t dt' \frac{m}{2} \dot{q}^2}, \quad (1.39)
\end{aligned}$$

donde hemos usado la invariancia traslacional de la medida de la integral de camino en la forma $\mathcal{D}x = \mathcal{D}(x_{cl} + q) = \mathcal{D}q$. El factor $\int \mathcal{D}q e^{iS[q]}$, llamado factor de normalización, es indeterminado cuando trabajamos directamente en el límite continuo, pero podemos fijarlo requiriendo que el resultado final satisfaga la ecuación de Schrödinger. Esto requiere

$$\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i \int_0^t dt' \frac{m}{2} \dot{q}^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}}. \quad (1.40)$$

Notemos que en (1.39) la fase de la exponencial es simplemente la acción para el camino clásico⁶. Aunque no es de mucha relevancia física el propagador de la partícula libre, veremos más adelante que tomará un papel especial como factor de normalización.

1.5.2. Potencial lineal

Para el potencial lineal consideremos a una partícula de masa m moviéndose en una dimensión bajo la influencia de una interacción constante k , como puede ser, por ejemplo, una partícula bajo la influencia de una aceleración gravitacional constante g , de tal forma que $k = mg$. La energía potencial esta dada por

$$V(x) = kx \quad (1.41)$$

y el lagrangiano es

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - kx. \quad (1.42)$$

El propagador para este caso se puede calcular de forma exacta y puede ser evaluado en al menos dos formas diferentes. Comencemos usando la definición de la integral de camino en el espacio de posiciones (1.30). Partimos de la acción

$$S[x_{cl}(t')] = \int_0^{t'} dt' \left(\frac{1}{2}m\dot{x}_{cl}^2(t') - kx_{cl}(t') \right), \quad (1.43)$$

cuya ecuación de movimiento es $m\ddot{x} + k = 0$, con las condiciones de frontera $x(0) = y$ y $x(t) = x$. La solución a la ecuación de movimiento con estas condiciones es la trayectoria clásica

$$x_{cl}(t') = \frac{k}{2m}t'^2 + \left[\frac{(x-y)}{t} - \frac{k}{2m}t \right] t' + y \quad (1.44)$$

que produce el valor mínimo de la acción

$$S[x_{cl}] = \frac{1}{2t}m(x-y)^2 - \frac{kt}{2}(x+y) - \frac{k^2t^3}{24m}. \quad (1.45)$$

Ahora, nuevamente, podemos representar una trayectoria arbitraria $x(t')$ como el camino clásico $x_{cl}(t')$ más fluctuaciones cuánticas $q(t')$

$$x(t') = x_{cl}(t') + q(t')$$

⁶Solo se puede obtener esta expresión para el propagador si el integrando tiene un lagrangiano de la forma general $L = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t)$.

donde las fluctuaciones cuánticas $q(t')$ deben obedecer las condiciones de frontera $q(0) = 0 = q(t)$. Así, la acción para un camino arbitrario se puede escribir como

$$\begin{aligned}
S[x_{cl} + q] &= \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} (\dot{x}_{cl} + \dot{q})^2 - k(x_{cl} + q) \right) \\
&= \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 + \frac{m}{2} \dot{q}^2 + m\dot{x}_{cl}\dot{q} - kx_{cl} - kq \right) \\
&= S[x_{cl}] + S[q] + \int_0^t dt' \left(m \frac{d}{dt} (\dot{x}_{cl}q) - m\ddot{x}_{cl}q \right) \\
&= S[x_{cl}] + S[q] + \cancel{m\dot{x}_{cl}q \Big|_{t'=0}^{t'=t}} - m \int_0^t dt' (\ddot{x}_{cl})q \\
&= S[x_{cl}] + \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - kq \right) - m \int_0^t dt' \left(-\frac{k}{m} \right) q
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado la restricción de las condiciones de frontera tipo Dirichlet y la ecuación de movimiento clásica. Por lo que obtenemos

$$S[x_{cl}(t') + q(t')] = S[x_{cl}(t')] + S_0[q(t')]. \quad (1.46)$$

en donde $S_0[q]$ denota la acción de la partícula libre. De esta forma podemos escribir el propagador como

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{iS[x]} = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}(x_{cl}q) e^{i(S[x_{cl}] + S_0[q])} \\
&= \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i(S[x_{cl}] + S_0[q])} \\
&= \left[\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{iS_0[q]} \right] e^{iS[x_{cl}]} \\
&= \left[\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i \int_0^t dt' \frac{m}{2} \dot{q}^2} \right] e^{i \left[\frac{1}{2i} m(x-y)^2 - \frac{kt}{2}(x+y) - \frac{k^2 t^3}{24m} \right]}.
\end{aligned}$$

Notemos que el prefactor es justo el propagador de la partícula libre (1.40), por lo que el propagador para el potencial lineal es

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} \exp \left\{ i \left[\frac{m(x-y)^2}{2t} - \frac{kt}{2}(x+y) - \frac{k^2 t^3}{24m} \right] \right\}. \quad (1.47)$$

La segunda forma de calcular el propagador del potencial lineal es usando (1.28) directamente y realizar las integraciones sucesivas:

$$\begin{aligned} K &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{j=1}^{N-1} dx_j \right) \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left\{ i\epsilon \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 - kx_{j-1} \right] \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right) \\ &\quad \times \exp \left\{ i\epsilon \left[\frac{m}{2} \frac{(x_1 - x_0)^2}{\epsilon^2} - kx_0 + \frac{m}{2} \frac{(x_2 - x_1)^2}{\epsilon^2} - kx_1 + \dots + \frac{m}{2} \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\epsilon^2} - kx_{N-1} \right] \right\} \end{aligned}$$

después de j integraciones obtenemos

$$K = \left(\frac{m}{2\pi i (j+1)\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{im}{2\epsilon(j+1)} (x_{j+1} - x_0)^2 - i\epsilon k \frac{j}{2} (x_{j+1} + x_0) - i \frac{k^2 \epsilon^3}{24m} j(j+1)(j+2) \right]. \quad (1.48)$$

En el límite en que j es grande, esta expresión se reduce al resultado (1.47) previamente derivado.

1.5.3. Potencial lineal con valor absoluto

Una de las funciones de energía potencial que tiene estados ligados es el potencial lineal con valor absoluto

$$V(x) = k|x|, \quad (1.49)$$

donde k es una constante arbitraria positiva. Encontrar el propagador del potencial lineal con valor absoluto con los métodos descritos hasta ahora resulta en una tarea complicada debida precisamente al valor absoluto en el potencial; sin embargo, se puede dar una expresión cerrada al cálculo de la función de Green, como se muestra en [46]. Nosotros en este trabajo vamos a aproximar el propagador mediante su descomposición espectral (1.16), para esto es necesario conocer las eigenfunciones de energía del sistema. Partimos de la ecuación de Schrödinger (ES) para una partícula de masa m ligada a este potencial

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k|x| \psi(x) = E \psi(x). \quad (1.50)$$

Podemos manipular más fácilmente el valor absoluto restringiendo nuestra atención a $x \geq 0$, esto lo podemos hacer debido a la simetría de paridad del sistema porque el operador diferencial es par y $V(-x) = V(x)$, así que existen dos tipos de soluciones $\psi(-x) = \pm \psi(x)$. Si ambos $\psi(x)$ y $\psi(-x)$ son soluciones,

también serán sus sumas par e impar

$$\psi_{par} = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)], \quad \psi_{impar} = \frac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)], \quad (1.51)$$

que son caracterizadas por

$$\psi_{par}(-x) = \psi_{par}(x), \quad \psi_{impar}(-x) = -\psi_{par}(x), \quad (1.52)$$

de modo que, exigimos la continuidad de ψ y $\frac{d\psi}{dx}$

$$\frac{d}{dx}\psi_{par}(0) = 0, \quad \psi_{impar}(0) = 0. \quad (1.53)$$

Dicho esto, empezamos manipulando la (1.50) en la región $x \geq 0$, la ES se ve como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - 2mk \left(x - \frac{E}{k} \right) \psi(x) = 0. \quad (1.54)$$

Buscamos escribir la ecuación diferencial anterior en términos de variables adimensionales, basados en escalas propias de longitud y de energía⁷. Sea que definamos

$$y \equiv (2mk)^{\frac{1}{3}}x \equiv k_0x, \quad E_0 \equiv \left(\frac{k^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.55)$$

y ϵ tal que $\epsilon = E/E_0$. La derivada cambia ahora por

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{dy} \frac{dy}{dx} = k_0^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dy}, \quad (1.56)$$

entonces manipulamos la (1.54) de la siguiente forma

$$\begin{aligned} k_0^{\frac{2}{3}} \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} - k_0^3 x \psi(y) + 2mE \psi(y) &= 0 \\ \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} - k_0^{\frac{1}{3}} x \psi(y) + \frac{2mE}{k_0^{\frac{2}{3}}} \psi(y) &= 0 \\ \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} - k_0^{\frac{1}{3}} x \psi(y) + \frac{E}{E_0} \psi(y) &= 0 \\ \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} - (y - \epsilon) \psi(y) &= 0. \end{aligned} \quad (1.57)$$

⁷Para que esto sea rigurosamente cierto, debemos recuperar a \hbar en nuestro análisis, la escala adimensional de longitud es $x_0 = (\hbar^2/mk)^{1/3}$ y la de energía $E_0 = (\hbar^2 k^2/m)^{1/3}$.

Hacemos un cambio de variable $z = y - \epsilon$ para finalmente obtener

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - z\psi(z) = 0. \quad (1.58)$$

Esta es la **ecuación de Airy**, cuya solución general es la combinación de dos soluciones linealmente independientes

$$\psi(x) = a \text{Ai}(z) + b \text{Bi}(z), \quad (1.59)$$

donde Ai es la función de Airy y Bi es la función de Airy de segunda especie. Necesitamos que $\psi(x)$ tienda a cero conforme $x \rightarrow \infty$ para que la solución sea cuadrado integrable, por lo que excluimos de la solución a Bi, por lo tanto tenemos que

$$\psi(x) \propto \text{Ai}(z) \text{ con } z = (2mk)^{\frac{1}{3}} \left(x - \frac{E}{k} \right), \quad x \geq 0 \quad (1.60)$$

Notemos que las condiciones de frontera en $x = 0$ se traducen a los ceros de las funciones Ai y Ai'. En otras palabras, los ceros de la función de Airy determinan las energías cuantizadas. Esto es

$$\begin{aligned} \left(\frac{2m}{k^2} \right)^{\frac{1}{3}} E &= \left\{ \begin{array}{ll} -\tilde{\sigma}_1, -\tilde{\sigma}_2, \dots & \text{para } \psi_{par} \\ -\bar{\sigma}_1, -\bar{\sigma}_2, \dots & \text{para } \psi_{impar} \end{array} \right\} \\ &= \left\{ \begin{array}{ll} -\sigma_0, -\sigma_2, \dots & \text{para } \psi_{par} \\ -\sigma_1, -\sigma_3, \dots & \text{para } \psi_{impar} \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (1.61)$$

en donde $\tilde{\sigma}$ denota los ceros de Ai'(z)

$$\begin{aligned} -\tilde{\sigma}_1 &\approx 1.018793 \times 0.9980 \\ -\tilde{\sigma}_2 &\approx 3.248198 \times 0.999914 \\ -\tilde{\sigma}_3 &\approx 4.820099 \times 0.999991 \end{aligned}$$

y $\bar{\sigma}$ denota los ceros de Ai(z)

$$\begin{aligned} -\bar{\sigma}_1 &\approx 2.338107 \times 1.000638 \\ -\bar{\sigma}_2 &\approx 4.087949 \times 1.000028 \\ -\bar{\sigma}_3 &\approx 5.520560 \times 1.000005. \end{aligned}$$

Los eigenvalores de energía para el potencial lineal están dados por:

$$E_m = (-\sigma_m) \left(\frac{k^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{para } m = 0, 1, 2, \dots \quad (1.62)$$

Por lo tanto la solución completa para el potencial lineal con valor absoluto es [47]:

$$\psi_m(x) = c_m (2mk)^{\frac{1}{6}} \text{Ai}(\sigma_m + (2mk)^{\frac{1}{3}}x), \quad x > 0 \quad (1.63)$$

en donde c_m son constantes positivas que son determinadas por normalización. Aquí la notación $\psi_0, \psi_2, \psi_4, \dots$ es para las soluciones pares, y $\psi_1, \psi_3, \psi_5, \dots$ para las impares. Algunos valores de los coeficientes c_m son [47]:

$$\begin{aligned} c_0 &\approx 1.30784 \times 0.9325 \\ c_1 &\approx 1.01549 \times 1.0070 \\ c_2 &\approx 0.93634 \times 0.9960 \\ c_3 &\approx 0.88046 \times 1.0015, \end{aligned}$$

etc. Conociendo cada una de las componentes que conforman a las eigenfunciones y conociendo los eigenvalores para la energía podemos aproximar el propagador según (1.16):

$$\begin{aligned} K &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) e^{-iE_n t} \\ &= \sum_n \left[c_n (2mk)^{\frac{1}{6}} \text{Ai}(\sigma_n + (2mk)^{\frac{1}{3}}x) \right] \left[c_n (2mk)^{\frac{1}{6}} \text{Ai}(\sigma_n + (2mk)^{\frac{1}{3}}y) \right]^* \\ &\times \exp \left\{ -i \left[(-\sigma_n) \left(\frac{k^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \right] t \right\}. \end{aligned}$$

Desde que estamos trabajando con valores reales de la variable x para la función de Airy y los coeficientes c_m son constantes positivas reales tenemos que la descomposición espectral para el propagador se ve como

$$\begin{aligned} K(x, y; t, 0) &= (2mk)^{\frac{1}{3}} \sum_n c_n^2 \left[\text{Ai}(\sigma_n + (2mk)^{\frac{1}{3}}x) \right] \left[\text{Ai}(\sigma_n + (2mk)^{\frac{1}{3}}y) \right] \\ &\times \exp \left\{ -i \left[(-\sigma_n) \left(\frac{k^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \right] t \right\}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

El potencial lineal es de relevancia física en el estudio del espectro de energía de un sistema ligado quark-antiquark llamado *quarkonium* [48], en donde x es

reemplazado por la distancia de separación r del quark-antiquark.

1.5.4. Oscilador armónico

Si la partícula ahora interactúa con un potencial de un oscilador armónico de masa m , que oscila con una frecuencia angular ω , tal que

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (1.65)$$

la integral de camino es nuevamente integrable.

Para calcular el propagador del oscilador armónico usamos la integral de camino de Feynman (1.30). Vamos a considerar todos los caminos como variaciones del camino clásico

$$x(t') = x_{cl}(t') + q(t')$$

en donde $x_{cl}(t')$ es la solución del oscilador armónico clásico $m\ddot{x} + m\omega^2x = 0$, de tal forma que el propagador se puede escribir como (con $t_0 = 0$):

$$K(x, y; t, 0) = \int \mathcal{D}q(t') e^{iS[x_{cl}(t')+q(t')]}, \quad (1.66)$$

donde se debe cumplir la siguiente restricción usual de extremos fijos

$$q(0) = q(t) = 0. \quad (1.67)$$

La acción es

$$\begin{aligned} S[x_{cl} + q] &= \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2}(\dot{x}_{cl} + \dot{q})^2 - \frac{m\omega^2}{2}(x_{cl} + q)^2 \right) \\ &= \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2}\dot{x}_{cl}^2 + \frac{m}{2}\dot{q}^2 + m\dot{x}_{cl}\dot{q} - \frac{m\omega^2}{2}x_{cl}^2 - \frac{m\omega^2}{2}q^2 - m\omega^2x_{cl}q \right) \\ &= S[x_{cl}] + S[q] + \int_0^t dt' \left(m\frac{d}{dt'}(\dot{x}_{cl}q) - m\ddot{x}_{cl}q - m\omega^2x_{cl}q \right) \\ &= S[x_{cl}] + S[q] + \cancel{mx_{cl}q|_{t'=0}^{t'=t}} - m \int_0^t dt' (\ddot{x}_{cl} + \omega^2x_{cl})q, \end{aligned} \quad (1.68)$$

donde hemos utilizado la restricción (1.67) y la ecuación de movimiento clásica en (1.68). Hemos demostrado nuevamente que nos queda

$$S[x_{cl}(t') + q(t')] = S[x_{cl}(t')] + S[q(t')]. \quad (1.69)$$

El propagador (1.66) puede ser escrito solamente como:

$$\begin{aligned} K(x, y; t, 0) &= e^{iS[x_{cl}]} \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{iS[q]} \\ &= e^{iS[x_{cl}(t)]} \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i \int_0^t dt' \frac{m}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)}. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Calculamos la acción del camino clásico y después el prefactor para dar una expresión completa del propagador en (1.70). Para calcular la acción $S[x_{cl}]$ del oscilador armónico partimos de la integral para la acción:

$$S[x_{cl}(t')] = \int_0^{t'} dt' \frac{m}{2} (\dot{x}_{cl}^2 - \omega^2 x_{cl}^2). \quad (1.71)$$

El camino clásico, $x_{cl}(t')$, es determinado cuando resolvemos la ecuación de movimiento $\ddot{x}_{cl} + \omega x_{cl} = 0$ con condiciones de frontera $x_{cl}(0) = y$ y $x_{cl}(t) = x$ cuya solución es

$$x_{cl}(t') = y \cos(\omega t') + \frac{x - y \cos(\omega t)}{\sin(\omega t)} \sin(\omega t'). \quad (1.72)$$

Resolviendo para la acción del oscilador armónico obtenemos:

$$S[x_{cl}] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy] \quad (1.73)$$

y, entonces, reducimos el propagador del oscilador armónico a

$$K(x, y; t, 0) = \exp \left\{ i \left[\frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy] \right] \right\} N_\omega(t) \quad (1.74)$$

donde hemos definido al prefactor como

$$N_\omega(t) \equiv \int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i \frac{m}{2} \int_0^t dt' (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)}. \quad (1.75)$$

Solo nos queda encontrar dicho término. Existen diversos métodos por los cuales el prefactor del oscilador armónico puede ser evaluado, en [44] escriben la integral de camino correspondiente a este y después evalúan mediante una serie de Fourier, también es posible evaluar el prefactor como lo hacen en [49] usando el método del determinante para un operador.

Nosotros vamos a adoptar el método utilizado en [45], en donde se divide por la correspondiente integral de camino libre, desde que el cociente es finito y bien

definido, entonces

$$N_\omega(t) = N(t) \frac{N_\omega(t)}{N(t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \frac{\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i\frac{m}{2} \int_0^t dt' (q^2 - \omega^2 q^2)}}{\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i\frac{m}{2} \int_0^t dt' q^2}}, \quad (1.76)$$

ahora escribimos la fluctuación $q(t')$ como una serie de Fourier de la función seno con período $t - t_0 = t$. Tomando las condiciones de frontera tipo Dirichlet usuales $q(0) = q(t) = 0$, esto es de la forma

$$q(t') = \sum_{n=1}^{\infty} q_n \sin\left(\frac{n\pi t'}{t}\right) \quad (1.77)$$

con coeficientes reales q_n . Es posible especificar un camino a través de los coeficientes q_n en lugar de los valores de las funciones q en cualquier valor particular de t' , entonces la integral sobre todas las trayectorias puede pensarse como una integral sobre todos los posibles valores de cada coeficiente q_n . La medida de la integral de camino se vuelve

$$\int \mathcal{D}q = \prod_{n=1}^{\infty} \int dq_n \quad (1.78)$$

hasta una constante indeterminada que de todos modos se cancela entre el numerador y el denominador. De esta manera obtenemos

$$\frac{\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i\frac{m}{2} \int_0^t dt' (q^2 - \omega^2 q^2)}}{\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} \mathcal{D}q e^{i\frac{m}{2} \int_0^t dt' q^2}} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} dq_n e^{it\frac{m}{4} (\omega_n^2 - \omega^2) q_n^2}}{\int_{q(0)=0}^{q(t)=0} dq_n e^{it\frac{m}{4} \omega_n^2 q_n^2}} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_n^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.79)$$

donde hemos definido $\omega_n \equiv \frac{\pi n}{t}$. El producto infinito converge, es la famosa representación del producto de Euler de la función seno,

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{(n\pi)^2}\right) = \frac{\sin x}{x}. \quad (1.80)$$

Sustituyendo esta expresión en (1.76), obtenemos

$$N_\omega(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} \left(\frac{\omega t}{\sin(\omega t)} \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega t)}}. \quad (1.81)$$

Ahora es posible escribir la expresión completa para el propagador del oscilador armónico

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega t)}} \times \exp \left\{ i \left[\frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy] \right] \right\}. \quad (1.82)$$

El oscilador armónico es uno de los problemas más importantes en mecánica cuántica. No solo ilustra muchos de los conceptos básicos y métodos de la teoría sino también tiene relevancia física, esencialmente cualquier pozo de potencial puede ser aproximado por un oscilador armónico simple, entonces describe fenómenos desde la vibración molecular hasta la estructura nuclear. En nuestro trabajo, este sistema tomará un rol central en la búsqueda de una solución al problema de sobre muestreo.

1.5.5. Potencial Pöschl-Teller modificado

El potencial Pöschl-Teller modificado es, junto al potencial de Morse, uno de los potenciales anarmónicos más estudiados en el campo de la física y la química, describe excitaciones vibracionales de ciertos modos moleculares y también juega un papel importante en la matemática de solitones [50]. El potencial es modificado en el sentido de que, con un cambio de variables al potencial original de Pöschl-Teller, surge como un potencial efectivo⁸. El potencial para una partícula de masa m esta dado por

$$V(x) = -\frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda + 1)}{\cosh^2(\alpha x)}, \quad (1.83)$$

donde α esta relacionado con el rango del potencial y λ es un entero positivo, $\lambda = 1, 2, 3, \dots$, relacionado con el número de estados ligados del sistema. A diferencia de los otros potenciales que hemos estudiado, el potencial de Pöschl-Teller modificado admite soluciones tanto de estados ligados como de estados de dispersión. Para calcular el propagador usaremos la descomposición espectral

⁸A este potencial también se le conoce como *potencial Rosen-Morse* [51] o *reflectionless potential* (potencial sin reflejos).

(1.17) tal y como lo hicimos con el potencial lineal con valor absoluto. Empezamos resolviendo la ecuación de Schrödinger siguiendo el enfoque realizado en [52, 50] (también existe un análisis del potencial y sus soluciones en [53]):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 2m \left(E + \frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha x)} \right) \psi(x) = 0 \quad (1.84)$$

Realizamos el siguiente cambio de variable

$$\xi = \tanh(\alpha x), \quad (1.85)$$

ahora las derivadas cambian a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} &= \frac{d}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \alpha \frac{1}{\cosh^2(\alpha x)} \frac{d}{d\xi} = \alpha(1 - \tanh^2(\alpha x)) \frac{d}{d\xi} = \alpha(1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \\ \frac{d^2}{dx^2} &= \alpha^2(1 - \xi^2) \left[(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} \right] \end{aligned}$$

y definimos

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\alpha^2}, \quad (1.86)$$

sustituimos las relaciones anteriores en (1.84)

$$\begin{aligned} \alpha^2(1 - \xi^2) \left[(1 - \xi^2) \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} \right] + 2m \left(E + \frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha x)} \right) \psi(\xi) &= 0 \\ (1 - \xi^2) \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} + \left[\lambda(\lambda+1) - \frac{\kappa^2}{1 - \xi^2} \right] \psi(\xi) &= 0. \end{aligned} \quad (1.87)$$

Esta es la ecuación de los polinomios asociados de Legendre, en donde los índices λ y κ son el grado y el orden del polinomio asociado de Legendre respectivamente $P_\lambda^\kappa(\xi)$. Esta ecuación puede ser escrita de forma hipergeométrica haciendo la sustitución

$$\psi(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{\kappa}{2}} \omega(\xi), \quad (1.88)$$

con lo que llegamos a

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2\omega(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi(\kappa + 1) \frac{d\omega(\xi)}{d\xi} + [\lambda(\lambda + 1) - \kappa(\kappa + 1)]\omega(\xi) = 0. \quad (1.89)$$

Si hacemos el cambio de variable

$$u = \frac{1}{2}(1 - \xi) \quad (1.90)$$

Llegamos a la expresión deseada

$$u(1-u)\frac{d^2\omega(u)}{du^2} + (\kappa+1)(1-2u)\frac{d\omega(u)}{du} - (\kappa-\lambda)(\kappa+\lambda+1)\omega(u) = 0. \quad (1.91)$$

La solución finita para $u = 0$, equivalentemente a $\xi = 1$, esto es para $x = \infty$ es la función hipergeométrica

$$\omega(u) = {}_2F_1(\kappa - \lambda, \kappa + \lambda + 1, \kappa + 1; u), \quad (1.92)$$

donde la función hipergeométrica esta definida por la serie

$${}_2F_1(a,b,c;x) = 1 + \frac{ab}{1!c}x + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)}x^2 + \dots \quad (1.93)$$

De esta forma tenemos

$$\psi(\xi) = N(1 - \xi^2)^{\frac{\kappa}{2}} {}_2F_1\left(\kappa - \lambda, \kappa + \lambda + 1, \kappa + 1; \frac{1}{2}(1 - \xi)\right). \quad (1.94)$$

Para que $\psi(\xi)$ se mantenga finita en $\xi = -1$, equivalentemente en $x = -\infty$, se debe cumplir la condición

$$\kappa - \lambda = -n, \quad \text{con } n = 0, 1, 2, 3, \dots, \lambda - 1 \quad (1.95)$$

donde podemos conocer los eigenvalores para la energía como

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2m}(\lambda - n)^2, \quad (1.96)$$

donde $\kappa = \lambda - n > 0$. El número de estados ligados es determinado por el límite $\kappa = \lambda - n = 0$, dando lugar a $n_{max} = \lambda$. La constante de normalización N que aparece en (1.94) es determinada observando la relación que existe entre las funciones hipergeométricas y los polinomios asociados de Legendre

$$P_\lambda^\kappa(x) = \frac{(-1)^\kappa \Gamma(\lambda + \kappa + 1)(1 - x^2)^{\frac{\kappa}{2}}}{2^\kappa \Gamma(\lambda - \kappa + 1)\kappa!} {}_2F_1\left(\kappa - \lambda, \kappa + \lambda + 1, \kappa + 1; \frac{1}{2}(1 - x)\right). \quad (1.97)$$

Sustituyendo esta relación en (1.94) nos permite escribir soluciones de la forma

$$\psi(\xi) = (-1)^{\lambda-n} Q_n^\lambda(P) P_\lambda^{\lambda-n}(\xi) \quad (1.98)$$

donde $Q_n^\lambda(P)$ es una constante de normalización que debe ser determinada por los polinomios asociados de Legendre. Teniendo en cuenta la siguiente relación

de ortogonalidad para los polinomios de Legendre

$$\int_{-1}^1 \frac{P_\ell^m P_\ell^n}{1-x^2} dx = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq n \\ \frac{(\ell+m)!}{m(\ell-m)!} & \text{si } m = n \neq 0 \\ \infty & \text{si } m = n = 0 \end{cases} \quad (1.99)$$

obtenemos

$$Q_n^\lambda(P) = \sqrt{\alpha \frac{(\lambda-n)n!}{(2\lambda-n)!}}. \quad (1.100)$$

Las funciones de onda del potencial modificado de Pöschl-Teller adquieren la forma final en términos de los polinomios asociados de Legendre

$$\psi(x) = (-1)^{\lambda-n} \sqrt{\alpha \frac{(\lambda-n)n!}{(2\lambda-n)!}} P_\lambda^{\lambda-n}(\tanh(\alpha x)). \quad (1.101)$$

Si usamos la siguiente relación para los polinomios

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x)$$

llegamos a

$$\psi(x) = \sqrt{\alpha(\lambda-n) \frac{(2\lambda-n)!}{n!}} P_\lambda^{n-\lambda}(\tanh(\alpha x)). \quad (1.102)$$

Los estados de dispersión se obtienen de la ecuación anterior con una continuación analítica apropiada, en donde se cambia $\kappa \rightarrow -i\kappa$, reemplazando $n \rightarrow \lambda + i\kappa$. Conociendo la forma definitiva de las eigenfunciones, tanto para los estados ligados como para los de dispersión, además de los eigenvalores de la energía, escribimos la descomposición espectral del propagador dada en [46] como:

$$\begin{aligned} K(x, y; t, 0) &= \alpha \sum_{n=0}^{\lambda-1} (\lambda-n) \frac{(2\lambda-n)!}{n!} P_\lambda^{n-\lambda}(\tanh(\alpha x)) P_\lambda^{n-\lambda}(\tanh(\alpha y)) e^{i \frac{\alpha^2}{2m} (\lambda-n)^2 t} \\ &+ \alpha \sum_{\pm} \int_0^\infty d\kappa \frac{\kappa}{2 \sinh(\pi \kappa)} P_\lambda^{i\kappa}(\pm \tanh(\alpha x)) P_\lambda^{i\kappa}(\pm \tanh(\alpha y)) e^{-i \frac{\alpha^2}{2m} \kappa^2 t}, \end{aligned} \quad (1.103)$$

en [46] también se señala que el término de dispersión es equivalente al propagador de la partícula libre, debido a esto se menciona que el potencial Pöschl-Teller es uno del tipo sin reflexión (en el sentido de problemas de dispersión). El propa-

gador se ve como:

$$K(x, y; t, 0) = \alpha \sum_{n=0}^{\lambda-1} (\lambda - n) \frac{(2\lambda - n)!}{n!} P_{\lambda}^{n-\lambda}(\tanh(\alpha x)) P_{\lambda}^{n-\lambda}(\tanh(\alpha y)) e^{i \frac{\alpha^2}{2m} (\lambda - n)^2 t} + \sqrt{\frac{m}{2\pi i t}} \exp \left[i \frac{m}{2\alpha^2 t} (x - y)^2 \right]. \quad (1.104)$$

La relación anterior es la que vamos a usar más adelante en este trabajo.

1.6. Transformaciones integrales del propagador

En esta sección repasamos las dos transformaciones integrales del propagador no relativista que se presentan en [54]. Las dos representaciones del propagador son la función de impacto⁹ $\bar{\mathcal{H}}(z|x, y; t, 0)$ y el potencial de camino promedio¹⁰ $\bar{\mathcal{P}}(v|x, y; t, 0)$; que tienen el siguiente carácter de transformaciones integrales invertibles del propagador¹¹:

$$K(x, y; t, 0) = \int d^D z \bar{\mathcal{H}}(z|x, y; t, 0), \quad (1.105)$$

$$K(x, y; t, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \bar{\mathcal{P}}(v|x, y; t, 0) e^{-v}. \quad (1.106)$$

Estas transformaciones integrales se pueden interpretar como **distribuciones de probabilidad** (una vez normalizadas) en trayectorias de partículas que miden la contribución relativa a la integral de camino de las trayectorias que cruzan un punto espacial dado (la función de impacto) y la probabilidad de los valores de la integral de línea del potencial a lo largo de una trayectoria en el ensamble (potencial de camino promedio).

Las dos representaciones son útiles para un muestreo numérico de la integral de camino. Un buen muestreo de estas distribuciones ayuda a mitigar las limitaciones de un muestreo directo, en donde las contribuciones excesivamente grandes o pequeñas al propagador pueden ser estadísticamente improbables y, en consecuencia, submuestreado.

En esta tesis trabajamos con el potencial de camino promedio como un indicador de que nuestro método numérico está muestreando bien el potencial de un sistema, por lo que nos enfocaremos en su definición; para ver la definición precisa

⁹En la literatura conocida como *Hit function*

¹⁰También conocido como *Path-averaged potential*

¹¹La representación del propagador es en el espacio euclideo, mismo que se detallará en el siguiente capítulo

de la función de impacto revisar [54] y sobre generalizaciones de esta función [55].

1.6.1. El potencial de camino promedio

El potencial de camino promedio se define por la función $\bar{\mathcal{P}}(v)$ donde $v \equiv \int_0^t dt' V(x(t'))$ es la integral del potencial a lo largo de la trayectoria $x(t')$. Se expresa como una integral de camino constreñida

$$\bar{\mathcal{P}}(v|x, y, t, 0) \equiv \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x \delta \left(v - \int_0^t dt' V(x(t')) \right) e^{-\int_0^t dt' \frac{1}{2} m \dot{x}^2}. \quad (1.107)$$

Podemos demostrar que si usamos (1.107) en el lado derecho de (1.106) obtenemos el propagador correcto (en el espacio euclideo):

$$\begin{aligned} K &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \left[\int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x \delta \left(v - \int_0^t dt' V(x(t')) \right) e^{-\int_0^t dt' \frac{1}{2} m \dot{x}^2} \right] e^{-v} \\ &= \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{-\int_0^t dt' \frac{1}{2} m \dot{x}^2} \int_{-\infty}^{\infty} dv \delta \left(v - \int_0^t dt' V(x(t')) \right) e^{-v} \\ &= \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{-\int_0^t dt' \frac{1}{2} m \dot{x}^2} e^{-\int_0^t dt' V(x(t'))} \end{aligned}$$

La determinación del propagador a través de la integral de camino equivale al valor esperado de las integrales de línea exponenciadas del potencial, esto motiva a escribir la probabilidad de valores de estas integrales de línea sobre trayectorias de partículas con distribución gaussiana en sus velocidades.

Se puede escribir el potencial de camino promedio en términos del propagador usando la representación de Fourier de la función delta

$$\bar{\mathcal{P}}(v|x, y, t, 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{ivz} \tilde{K}(x, y; t, 0, z), \quad (1.108)$$

donde \tilde{K} está relacionado con el propagador K por la substitución $V(x) \rightarrow izV(x)$ bajo la integral de camino.

Introducimos una función de distribución de probabilidad normalizada¹² como

$$\mathcal{P}(v|x, y; t, 0) \equiv \frac{\bar{\mathcal{P}}(v|x, y, t, 0)}{K_0(x, y; t, 0)}, \quad (1.109)$$

¹²A lo largo del trabajo nos vamos a referir a esta función como PDF (*Probability Density Function*) por sus siglas en inglés.

que tiene área unitaria. K_0 denota el propagador de la partícula libre por lo que la normalización para $\mathcal{P}(v)$ siempre es conocida analíticamente.

Como ejemplo del cálculo analítico de (1.109) usamos un sistema con potencial cuadrático y otro con uno lineal. Para el potencial lineal $V(x) = kx$ la aplicación de la ecuación (1.107) da

$$P(v|x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{6}{\pi k^2 t^3}} e^{-\frac{3}{2t}(x+y)^2} e^{-\frac{6}{k^2 t^3}[v^2 - kt(x+y)v]}, \quad (1.110)$$

donde se ha usado el propagador (1.47) con una extensión analítica en el tiempo¹³, $m = 1$ y fue suficiente cambiar $k \rightarrow izk$ para que la substitución $V(x) \rightarrow izV(x)$ tomara lugar. En la siguiente Figura 1.1 se demuestra el resultado analítico de este PDF y su acuerdo con el muestreo numérico; en el próximo capítulo explicaremos como se hizo dicho muestreo.

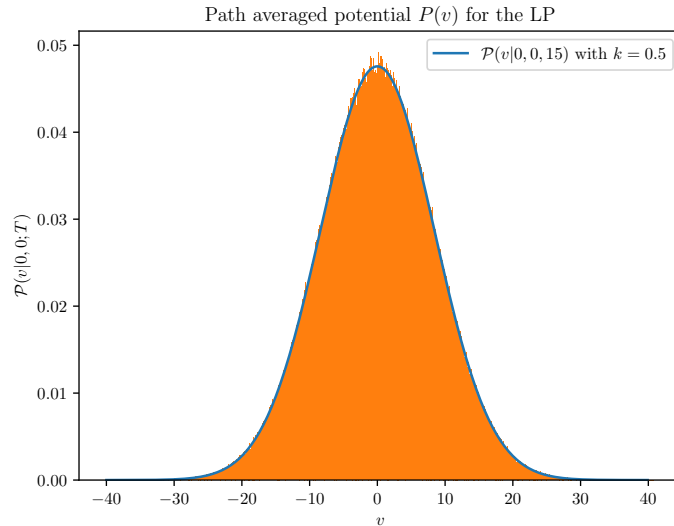


Figura 1.1: PDF para el potencial lineal $V(x) = kx$ con $x = y = 0$. La línea azul sólida representa el resultado analítico (1.110) y el histograma representa el muestreo computacional hecho con el método línea de mundo Monte Carlo.

Para el potencial cuadrático, el oscilador armónico en este caso, se usa nuevamente la ecuación (1.107) con el propagador presentado en su descomposición espectral, se escala la frecuencia angular $\omega \rightarrow \sqrt{iz}\omega$ y se toma la parte real de

¹³Esta extensión analítica hace que se trabaje en el **espacio euclideo**, mismo que se presentará en el próximo capítulo.

las integrales sobre z para obtener una suma de integrales de Fourier. Se resuelven estas integrales tomando $y = x = 0$, tal que la integral en z se pueda escribir en términos de la función modificada de Bessel de segunda especie K_n (los detalles se encuentran en el artículo citado en esta sección).

El potencial de camino promedio normalizado para el oscilador armónico es:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(v|0, 0; t, 0) &= 64 \theta(v) \sqrt{\frac{\omega t}{2\pi^2}} \sum_{\mathbf{n} \text{ par}} \frac{n! v_n^{\frac{3}{2}} e^{-v_n}}{2^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{n}{2}\right)!^2 \left[(n + \frac{1}{2}) \omega t\right]^{\frac{5}{2}}} \\
&\times \Re \left[\left(v_n - \frac{3}{4} \right) K_{-\frac{1}{4}}(-v_n) - v_n K_{-\frac{5}{4}}(-v_n) \right] \\
&= 64 \theta(v) \sqrt{\frac{\omega t}{2\pi^2}} \sum_{\mathbf{n} \text{ par}} \frac{n! v_n^{\frac{3}{2}} e^{-v_n}}{2^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{n}{2}\right)!^2 \left[(n + \frac{1}{2}) \omega t\right]^{\frac{5}{2}}} \\
&\times \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(v_n - \frac{3}{4} \right) K_{\frac{1}{4}}(v_n) + v_n K_{\frac{5}{4}}(v_n) \right] \quad (1.111)
\end{aligned}$$

donde se ha definido

$$v_n \equiv \frac{\left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \omega t \right]^2}{8v}$$

por brevedad, $\theta(v)$ denota la función de Heaviside indicando que $v \geq 0$. De igual forma que en el caso del potencial lineal, en la Figura 1.2 mostramos el resultado analítico de este potencial de camino promedio y debajo el muestreo dado por el método numérico.

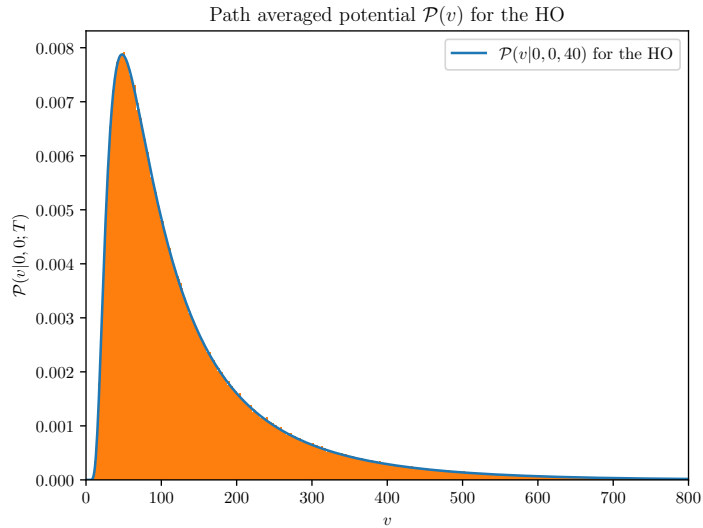


Figura 1.2: PDF para el oscilador armónico con $x = y = 0$. La línea azul sólida representa el resultado analítico (1.111) y el histograma representa el muestreo computacional hecho con el método línea de mundo Monte Carlo.

El estudio del potencial de camino promedio como función de distribución de probabilidad toma un papel muy importante en este trabajo ya que es una herramienta para comprobar la correcta implementación del método numérico para cualquier tiempo $T = t - t_0$ y, además, servirá para determinar de forma analítica los factores de compensación que debemos hacer para atacar el problema de sobre-muestreo, como se mostrará más adelante en la tesis.

Capítulo 2

Formalismo línea de mundo Monte Carlo

En este capítulo introducimos el **formalismo línea de mundo Monte Carlo** y su conexión con el formalismo funcional para obtener, de manera aproximada, el propagador de un sistema arbitrario.

Además se presenta el algoritmo que se utilizó para las simulaciones numéricas y se realiza una breve discusión sobre los errores de este método numérico.

2.1. Espacio euclideo y mecánica estadística

La mecánica cuántica y la mecánica estadística pueden ser relacionadas a través de una extensión (o continuación) analítica. Esta relación puede ser vista considerando la partícula libre descrita en el capítulo anterior. Continuamos analíticamente el parámetro del tiempo a valores puramente imaginarios haciendo $t \rightarrow -i\beta$ tal y como lo hicimos en la descomposición espectral del propagador; consideremos por el momento $t_0 = 0$. Con esta continuación analítica el propagador de la partícula libre (1.31) se ve como

$$K_0(x, y; \beta, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} e^{-\frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{\beta}}, \quad (2.1)$$

que es el *núcleo de calor libre* (o kernel de calor libre, como también se conoce).

Este núcleo de calor obedece la ecuación de calor con la condición $K_0 \xrightarrow{\beta \rightarrow 0} \delta(x - y)$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} K_0(x, y; \beta, 0) = \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_0(x, y; \beta, 0). \quad (2.2)$$

Esta continuación analítica es conocida como rotación de Wick, como se había mencionado con anterioridad. Una rotación de Wick puede ser hecha directamente en la integral de camino para trabajar en el **espacio euclideo**. Extendiendo analíticamente el parámetro del tiempo como $t \rightarrow -it_E$ ¹, encontramos que la acción en el espacio de Minkowski (tiempo físico t) se vuelve una acción euclidea con **tiempo euclideo** t_E

$$iS[x] = i \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) \longrightarrow -S_E[x] = - \int_0^{t_E} dt'_E \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right) \quad (2.3)$$

donde el punto denota siempre derivación con respecto al argumento. La acción euclidea es positiva definida. De esta forma el propagador se ve como

$$K(x, y; -it_E, 0) = \langle x | e^{-\hat{H}t_E} | y \rangle \equiv K(x, y; t_E, 0) = \int_{x(0)=y}^{x(t_E)=x} \mathcal{D}x e^{-S_E[x(t_E)]}, \quad (2.4)$$

donde el factor oscilante de la integral de camino cambia a un factor de decaimiento exponencial, haciendo más sencillo estudiar la convergencia de la integral. Esta forma de la integral de camino coincide con la integral funcional que estudia el movimiento browniano y la ecuación de calor.

Esta integral de camino es útil en mecánica estadística ya que podemos obtener la función de partición a través de esta relacionando t_E con el inverso de la temperatura Θ por $t_E = 1/(k\Theta)$, con k siendo la constante de Boltzmann. Empezamos escribiendo la traza del operador de evolución temporal, en donde podemos usar eigenestados de energía, ya sea que el espectro sea discreto o continuo

$$Z \equiv \text{Tr} e^{-i\hat{H}t} = \sum_n e^{-iE_n t} = \int dx \langle x | e^{-i\hat{H}t} | x \rangle. \quad (2.5)$$

Ahora hacemos la continuación analítica $t \rightarrow -i\beta$ para obtener la función de partición estadística Z_E de un sistema cuántico con hamiltoniano \hat{H} .

$$\begin{aligned} Z_E &\equiv \text{Tr} e^{-\hat{H}\beta} = \sum_n e^{-E_n \beta} = \int dx \langle x | e^{-\hat{H}\beta} | x \rangle \\ &= \int dx K(x, x; -i\beta, 0) = \int_{PBC} \mathcal{D}x e^{-S_E[x(t_E)]}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

en donde *PBC* (*periodic boundary conditions*) denota condiciones de frontera periódicas y significa que la suma es sobre todos los posibles estados en donde

¹Debido a este cambio el formalismo línea de mundo también es conocido como *imaginary time formalism* (formalismo de tiempo imaginario).

los caminos son cerrados, $x(0) = x(\beta)$, en un tiempo euclideo β .

Ya vimos anteriormente que una de las aplicaciones de la rotación de Wick es calcular de forma aproximada la energía del estado base a través del propagador (1.20). De ahora en adelante trabajaremos con el **propagador euclideo** (2.4), por lo que omitiremos el subíndice E a menos que se indique lo contrario.

2.2. Teoría de perturbaciones: expansión del propagador

Como hemos mencionado en el capítulo anterior, en general, para un potencial $V(x)$ arbitrario no es posible resolver de forma exacta la integral de camino para el cálculo del propagador, salvo algunos casos como los revisados anteriormente. Sin embargo, si el potencial es pequeño comparado con el término cinético podemos usar teoría de perturbaciones sobre el caso de la partícula libre para un potencial arbitrario, requiriendo solamente suavidad en el potencial. Empezamos escribiendo el propagador en el espacio euclideo

$$K(x, y; t, 0) = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{-S_E[x]}$$

en donde la acción euclidea esta dada por

$$S_E[x] = \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right).$$

Volvemos a re-parametrizar la trayectoria $x(t')$ como

$$x(t') = x_0(t') + \tilde{q}(t') \quad (2.7)$$

en donde $x_0 = \frac{x-y}{t}t' + y$ es la trayectoria libre y $\tilde{q}(t')$ es una fluctuación que obedece las condiciones de frontera tipo Dirichlet $\tilde{q}(0) = \tilde{q}(t) = 0$.

Recordemos que podemos dividir el propagador por el propagador libre K_0 si el término cinético y el potencial son cuadráticos. Escribimos el propagador como

$$K(x, y; t, 0) = e^{-S_E[x_0(t')]} \int \mathcal{D}\tilde{q} e^{-S_E[x]}. \quad (2.8)$$

Por simplicidad se considera al sistema confinado en una línea y se hace el re-escalamiento del tiempo $t' = t\tau$ de manera que podamos escribir el propagador euclideo de la forma en la que se calcula en el trabajo de O. Corradini y C.

Schubert [45]:

$$\begin{aligned} K(x, y; t, 0) &= e^{-S_E[x_0(\tau)]} \int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-S_E[x]} \\ &= e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2 - t \int_0^1 d\tau V(x_0(\tau))} \end{aligned} \quad (2.9)$$

La relación anterior la podemos escribir de manera equivalente de la siguiente forma, tal y como lo hicimos con el oscilador armónico:

$$\begin{aligned} K &= K_0(x, y; t, 0) \frac{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2 - t \int_0^1 d\tau V(x_0(\tau) + \tilde{q}(\tau))}}{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2}} \\ &= \left(\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2} \right) e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \frac{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2 - t \int_0^1 d\tau V(x_0(\tau) + \tilde{q}(\tau))}}{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2}} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \frac{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2 - t \int_0^1 d\tau V(x_0(\tau) + \tilde{q}(\tau))}}{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2}}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Se puede obtener una expansión perturbativa para la amplitud de probabilidad si el término del potencial es suficientemente pequeño comparado con el cinético. Si este es el caso, entonces se expande en serie de Taylor el potencial en el exponente alrededor de la solución de la partícula libre x_0 . Esto da paso a un conjunto infinito de términos de interacción²:

$$S_{int} = -t \int_0^1 d\tau \left(V(x_0) + V'(x_0)\tilde{q} + \frac{1}{2!}V^{(2)}(x_0)\tilde{q}^2 + \frac{1}{3!}V^{(3)}(x_0)\tilde{q}^3 + \dots \right) \quad (2.11)$$

Después de expandir el exponente, ahora se expande también el término exponencial $e^{-t \int_0^1 d\tau V(x_0(\tau) + \tilde{q}(\tau))}$. Entonces solo quedamos con la acción libre $S_0[\tilde{q}]$ en el exponente y polinomios en \tilde{q} como prefactores que se deben de integrar con el

²Los términos de esta expansión tienen una conexión con la notación gráfica de los diagramas de Feynman, véase [45]

peso de la integral de caminos cinética, i.e, términos de la forma:

$$\frac{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} \tilde{q}(\tau_1)\tilde{q}(\tau_2)\cdots\tilde{q}(\tau_n) e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 \dot{\tilde{q}}^2}}{\int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 \dot{\tilde{q}}^2}} \equiv \langle \tilde{q}(\tau_1)\tilde{q}(\tau_2)\cdots\tilde{q}(\tau_n) \rangle, \quad (2.12)$$

entonces el propagador completo, junto con los términos perturbativos se puede escribir de manera compacta como

$$\begin{aligned} K(x, y; t, 0) &= \left(\frac{m}{2\pi t}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x_0(\tau)+\tilde{q}(\tau))} \right\rangle \\ &= K_0(x, y; t, 0) \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Las funciones $\langle \mathcal{O} \rangle$ son referidas, en general, como **funciones de correlación** y tienen una conexión con el llamado **funcional generacional** $Z[J]$, el cual no utilizaremos en este trabajo. El término $\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \rangle$ representa el valor esperado respecto a los caminos cerrados con una distribución de velocidad gaussiana

$$\mathcal{P}[\{\tilde{q}\}] = \exp\left(-\frac{m}{2t} \int_0^1 d\tau \dot{\tilde{q}}^2\right). \quad (2.14)$$

La representación perturbativa del propagador (2.13) nos permite implementar el método numérico línea de mundo Monte Carlo, que representa una herramienta alternativa en situaciones donde el propagador no puede ser calculado de forma cerrada.

2.3. Línea de mundo Monte Carlo

El método numérico línea de mundo Monte Carlo (también llamado línea de mundo numérico) fue introducido por primera vez en el trabajo de H. Gies y K. Langfeld en el 2001 [12] para estimar las funciones de correlación (o valores esperados) antes presentados en el contexto de QFT. El método se basa en considerar una suma finita sobre caminos, que es la versión discretizada de la integral sobre el espacio de trayectorias de dimensión infinita, que son discretizados a un número finito de puntos con distribución de velocidad gaussiana, donde el parámetro discretizado es el tiempo propio. La suma discretizada sobre trayectorias distribuidas acorde a (2.14) provee una aproximación a la integral sobre los caminos que define el propagador.

Existen diversos algoritmos desarrollados en la literatura para generar ensambles

de trayectorias cerradas gaussianamente distribuidas basados en la técnica Monte Carlo, inventada por N. Metropolis et. al [33] en 1953. El término Monte Carlo se refiere a la inherente aleatoriedad³ presente en este método de integración numérica.

El muestreo Monte Carlo es usualmente usado en dos tipos de problemas relacionados:

- Muestreo de una distribución $p(x)$.
- Cálculo aproximado de integrales de la forma $\int f(x)p(x) dx$, i.e., calculando la expectación de $f(x)$ usando la densidad $p(x)$.

Estos dos problemas están íntimamente relacionados ya que si podemos muestrear $p(x)$ entonces, también, podemos resolver el problema de calcular integrales. Supongamos que $\{x^{(i)}\}$ es una muestra aleatoria independiente e idénticamente distribuida extraída de $p(x)$, entonces, la **ley fuerte de los grandes números** nos dice:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x^{(i)}) \xrightarrow{a.s.} \int f(x)p(x) dx, \quad (2.15)$$

en donde *a.s* significa que la convergencia es casi segura (*Almost sure convergence*). Es más, la tasa de convergencia es proporcional a \sqrt{N} . Sin embargo, la constante de proporcionalidad incrementa exponencialmente con la dimensión de la integral.

Observamos entonces que el método Monte Carlo nos ayuda precisamente a estimar integrales con un determinado peso. En nuestro trabajo buscamos calcular el propagador de un sistema arbitrario, por lo que podemos comparar el lado derecho de (2.15) con la transformación integral inversa del propagador (1.106), en donde el potencial de camino promedio $\bar{\mathcal{P}}(v)$ juega un rol análogo a la distribución $p(x)$. Como veremos más adelante, la forma del propagador (2.13) nos permite calcular el propagador mediante un valor esperado, que con el formalismo línea de mundo Monte Carlo lo estimaremos como un promedio pesado, que correspondería al lado izquierdo de (2.15).

La dificultad de la implementación numérica radica en la imposición de las condiciones de frontera para la creación de los lazos; por ejemplo, en mecánica cuántica no relativista se requieren lazos con extremos cerrados, es decir, condiciones tipo Dirichlet; en cambio en el contexto de QFT se requieren lazos cerrados con centro de masa fijo.

³Estrictamente hablando los métodos Monte Carlo usan números **pseudo-aleatorios** generados a través de un PRNG (*pseudorandom number generator*).

En [56] presentan cuatro algoritmos distintos que generan el ensamble de lazos discretos: algoritmo de **baño de calor**, **caminatas aleatorias**, algoritmo de descomposición de Fourier **Floops** y algoritmo de diagonalización explícita **Vloops**. En trabajos consecuentes se han desarrollado otros algoritmos como el algoritmo **Dloops** presentado en [19] y los algoritmos **LSOL** (*linearly shifted open loops*) e **Yloops**, ambos introducidos en [24]. Todos estos algoritmos generan trayectorias con distribución gaussiana en sus velocidades.

Para poder implementar numéricamente este método primero notemos que la distribución de velocidades gaussiana (2.14) depende tanto de los parámetros m y t , por lo que su implementación numérica sería costosa puesto que tendríamos que generar lazos para cada valor de m y t . Es posible evitar este problema introduciendo caminos unitarios $\{q\}$ definidos de la siguiente forma

$$\tilde{q}(\tau) = \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau), \quad (2.16)$$

dando lugar a una distribución de velocidades gaussiana estandarizada. Ahora la trayectoria $x(\tau)$ se ve como

$$x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau), \quad (2.17)$$

donde ahora $\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \rangle$ representa el valor de expectación sobre **caminos unitarios cerrados** o **lazos cerrados** con una distribución de velocidades gaussiana independiente de t y m :

$$\mathcal{P}[\{q\}] = \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^1 d\tau \dot{q}^2\right). \quad (2.18)$$

2.3.1. Implementación numérica

Para la implementación numérica necesitamos discretizar los lazos, esto quiere decir que cada lazo $q(\tau)$ es representado por un número finito N_p de puntos q_k de tal forma que solo discretizamos el parámetro de tiempo τ del lazo⁴:

$$\{q(\tau)\} \longrightarrow \{q_k\} \in \mathbb{R}^D, \quad k = 1, 2, \dots, N_p. \quad (2.19)$$

De esta manera **no discretizamos el espacio-tiempo** en una red, por lo que conservamos la simetría espacio-temporal, es decir, invariancia de Lorentz; además

⁴En el contexto de QFT el parámetro que se discretiza es el tiempo propio.

el formalismo línea de mundo conserva invariancia de norma y simetría quiral en el caso fermionico.

Los diversos algoritmos antes mencionados sirven para generar un ensamble de N_L lazos discretos y cerrados, obedeciendo un funcional de distribución de velocidades gaussiano $P[\{q(\tau)\}]$,

$$P[\{q(\tau)\}] = \exp\left(-\frac{N_p}{2} \sum_{k=1}^{N_p} (q_k - q_{k-1})^2\right), \text{ con } q_0 = q_{N_p} = 0 \quad (2.20)$$

en donde N_p denota el número de puntos por lazo. La suma es la forma discreta del factor de peso $\exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^1 d\tau \dot{q}^2\right)$. Una vez que el ensamble ha sido generado, este puede ser usado para calcular $\langle \dots \rangle$ para diferentes valores de t .

Sin embargo, el ensamble de lazos (o *loop cloud*) puede ser utilizado para funciones de correlación de diferentes cantidades físicas, por lo que tenemos, en general, para una cantidad \hat{O} que:

$$\langle \hat{O} \rangle_q = \frac{\int \mathcal{D}q(\tau) \hat{O} \mathcal{P}[\{q(\tau)\}]}{\int \mathcal{D}q(\tau) \mathcal{P}[\{q(\tau)\}]} \quad (2.21)$$

en donde

$$\mathcal{P}[\{q(\tau)\}] = \exp\left(-C \int_0^1 dt \dot{q}^2(t)\right) \quad (2.22)$$

es la distribución de velocidades gaussiana estandarizada correspondiente al sistema físico: C es una constante que varia si el sistema es relativista ($C = 1/4$) o no relativista ($C = 1/2$).

Entonces la finalidad de la técnica **línea de mundo Monte Carlo** es calcular de manera aproximada estas funciones de correlación o valores esperados utilizando un conjunto finito de lazos representativos (ensamble de lazos) generados a través de un ordenador. El promedio se aproxima entonces como la media de una cantidad física evaluado en cada una de las líneas de mundo del ensamble:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{N_L} \sum_{\{q\}} \hat{O}[q]. \quad (2.23)$$

La versión discretizada de la integral de línea a lo largo de las trayectorias en el

caso más simple⁵ es

$$v_i \equiv \int_0^1 d\tau V(x_i(\tau)) \longrightarrow \frac{1}{Np} \sum_{k=1}^{Np} V(x_i(\tau_k)), \quad (2.24)$$

en donde recalcamos la discretización del tiempo.

2.3.2. Algoritmo Yloop

Una vez que hemos visto la implementación numérica general del formalismo pasaremos a revisar el algoritmo Yloop propuesto en [24]. Con este algoritmo generamos el ensamble de trayectorias representativas que servirán para aproximar las funciones de correlación antes descritas.

En nuestro trabajo escogemos como base el algoritmo Yloops por su sencilla implementación y su velocidad de ejecución, siendo este más rápido, por ejemplo, que el algoritmo Vloops, debido a que posee menos pasos algebraicos para la generación de los lazos con las condiciones tipo Dirichlet que se requieren.

Para describir el algoritmo empezamos escribiendo el argumento de la exponencial en (2.20) y mostramos su respectiva diagonalización. Recordemos que

⁵Existen versiones más complicadas de la discretización del potencial, como la regla del punto medio.

$q_0 = q_{N_p} = 0$, así

$$\begin{aligned}
Y &= \sum_{k=1}^{N_p} (q_k - q_{k-1})^2 \\
&= q_{N_p-1}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-1} (q_k - q_{k-1})^2 + q_1^2 \\
&= q_{N_p-1}^2 + (q_{N_p-1} - q_{N_p-2})^2 + \sum_{k=2}^{N_p-2} (q_k - q_{k-1})^2 + q_1^2 \\
&= 2 \left(q_{N_p-1} - \frac{1}{2} q_{N_p-2} \right)^2 + \frac{1}{2} q_{N_p-2}^2 + (q_{N_p-2} - q_{N_p-3})^2 + \sum_{k=2}^{N_p-3} (q_k - q_{k-1})^2 + q_1^2 \\
&= 2 \left(q_{N_p-1} - \frac{1}{2} q_{N_p-2} \right)^2 + \frac{3}{2} \left(q_{N_p-2} - \frac{2}{3} q_{N_p-3} \right)^2 + \frac{1}{3} q_{N_p-3}^2 + (q_{N_p-3} - q_{N_p-4})^2 \\
&\quad + \sum_{k=2}^{N_p-4} (q_k - q_{k-1})^2 + q_1^2 \\
&= \dots \\
&= \sum_{k=1}^{N_p-2} \frac{k+1}{k} \left(q_{N_p-k} - \frac{k}{k+1} q_{N_p-k-1} \right)^2 + \frac{1}{N_p-1} q_1^2 + q_1^2 \\
&= \sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{k+1}{k} \left(q_{N_p-k} - \frac{k}{k+1} q_{N_p-k-1} \right)^2. \tag{2.25}
\end{aligned}$$

Entonces se encuentra que

$$Y = \sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{N_p+1-k}{N_p-k} \bar{q}_k^2, \tag{2.26}$$

en donde

$$\bar{q}_k = q_k - \frac{N_p-k}{N_p+1-k} q_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, N_p-1. \tag{2.27}$$

De esta forma el **algoritmo Yloop** es

1. Generar $N_p - 1$ números ω_i , $i = 1, 2, \dots, N_p - 1$, distribuidos según $\mathcal{P}(\omega_i) \propto \exp(-\omega_i^2)$.

2. Calcular

$$\bar{q}_i = \sqrt{\frac{2}{N_p}} \sqrt{\frac{N_p - i}{N_p + 1 - i}} \omega_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_p - 1. \quad (2.28)$$

3. Construir el lazo unitario de acuerdo a

$$\begin{aligned} q_1 &= \bar{q}_1, \\ q_i &= \bar{q}_i + \frac{N_p - i}{N_p + 1 - i} q_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, N_p - 1. \end{aligned} \quad (2.29)$$

4. Repetir el proceso N_L veces.

Se puede usar el algoritmo Yloop para generar lazos con su centro de masa en el origen del sistema coordinado, haciendo un desplazamiento a cada lazo generado $\{q\}$ con condiciones de frontera tipo Dirichlet por $-(q_1 + q_2 + \dots + q_{N_p-1})/N_p$. En la Figura 2.1 se muestran diferentes lazos creados por el algoritmo Yloop.

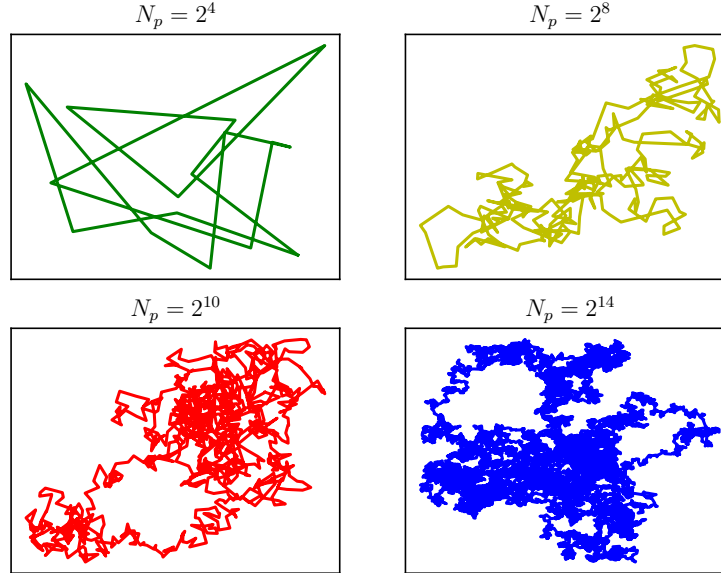


Figura 2.1: Diferentes lazos línea de mundo con condiciones de frontera tipo Dirichlet mostrados a diferentes niveles de discretización de puntos por lazo.

2.3.3. Errores del formalismo

Como todo método numérico, este formalismo no está libre de errores. El método tiene principalmente dos fuentes de error de naturaleza numérica inherentes del paso de lo continuo a lo discreto. El primer error, llamado **error sistemático**, es debido a la discretización de las trayectorias sobre el parámetro línea de mundo del tiempo τ ; el segundo error, llamado **error estadístico**, es debido al reemplazo de la integral sobre trayectorias con una suma sobre un número finito de lazos.

En los trabajos iniciales de Gies y Langfeld [12, 18] se ha sugerido que la desviación estándar de la media sobre el número de lazos es una buena estimación del error estadístico:

$$\text{SEM}(\hat{O}) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_L} (\hat{O}_i - \langle \hat{O} \rangle)^2}{N_L(N_L - 1)}}. \quad (2.30)$$

Dudas sobre la validez de la estimación del error estadístico a través de esta ecuación fueron expuestas en [57], en donde exponen que la distribución de los ensambles de lazos en general no es gaussiana; como tal, la estimación de la varianza puede ser volátil y puede no caracterizar la extensión de la distribución muy bien.

D. Mazu y J. Heyl apuntaron correctamente en [57] que el uso del mismo ensamble de lazos para valores diferentes de t para calcular el valor esperado múltiples veces en una integral resulta en incertidumbres fuertemente correlacionadas. Para disminuir estas correlaciones, en este trabajo usamos un diferente ensamble de lazos para cada valor de t , sobrepasando las correlaciones⁶.

Ambos errores pueden ser reducidos conforme se aumenta el tamaño del número de lazos representativos de las trayectorias N_L y el número de puntos por cada lazo N_p que sustituyen la parametrización del tiempo, además de generar para cada t un ensamble de lazos independiente. No obstante de que los errores pueden ser reducidos, en principio, escogiendo un número suficientemente grande de número de lazos y puntos por lazo, se conoce que los cálculos del formalismo línea de mundo Monte Carlo generalmente pierden precisión para valores grandes de tiempo debido al fenómeno numérico de **sobre muestreo** de los lazos⁷. La motivación de este proyecto es desarrollar un método que ayude a reducir, si es posible a sobrepasar, el problema de sobre-muestreo de forma universal,

⁶Una implementación paralela del formalismo línea de mundo Monte Carlo automáticamente disminuye las correlaciones ya que cada núcleo o hilo, según sea su caso, genera un ensamble independiente de lazos.

⁷En la literatura este problema es conocido como *undersampling u overlap problem*.

es decir, aplicado a un sistema arbitrario, del cual hablaremos en el siguiente capítulo.

Capítulo 3

El problema de sobre muestreo

En pocas palabras, el fenómeno numérico de **sobre muestreo** de líneas de mundo es que la técnica línea de mundo Monte Carlo pierde precisión a valores grandes del tiempo.

Este problema parece ser independiente del error sistemático mencionado anteriormente pero tiene que ver con el error estadístico. El problema es que la suma discreta (2.23) no obtiene la contribución correcta relativa de las trayectorias que están muy cerca o muy lejos del potencial localizado a medida que el tiempo t aumenta. La razón de este fenómeno es que la extensión espacial de las trayectorias crece proporcionalmente a \sqrt{t} (como se puede observar en (2.16)), por lo tanto, para potenciales localizados arbitrarios se moverán fuera de la región donde el potencial es fuerte. En el límite continuo, cuando el número de trayectorias es infinito, este comportamiento es correcto, el problema deriva en que con un número finito de trayectorias se pierde la contribución relativa correcta entre la trayectoria parametrizada por una solución de la partícula libre y las fluctuaciones cuánticas $q(\tau)$.

Aunque este problema ya es conocido en la literatura, solo pocos trabajos hablan de un método para superarlo, por ejemplo, en el trabajo de G. Dunne et. al [43] implementaron un método tipo cadena de Markov al que llamaron Monte Carlo Híbrido (HMC por sus siglas en inglés). Este tema también se estudia en [19] para el caso específico del oscilador armónico, en donde proponen una parametrización analítica a una función que reproduce el comportamiento del propagador a tiempos grandes; sin embargo, esto solo fue hecho para el caso del propagador del oscilador armónico.

En [24] reconocen este problema en sus resultados y sugieren que podrían disminuir el fenómeno de sobre muestreo incorporando información sobre el potencial en el algoritmo que genera las trayectorias; mencionan que se puede incorporar un paso al algoritmo que favorezca trayectorias que permanezcan cercanas a valores más pequeños del potencial a través de una modificación estilo cadena de

Markov, sin que afecte la distribución de velocidades gaussianas de las trayectorias.

El objetivo del presente trabajo es el estudio y desarrollo de métodos que puedan solventar de forma eficiente y universal, es decir, aplicado a un potencial arbitrario, el problema de sobre muestreo en el contexto de la mecánica cuántica no relativista, esperando que los avances aquí presentados sean también útiles en el caso relativista.

3.1. Evidenciando el sobre muestreo

Para abordar el problema primero necesitamos estudiar una cantidad física (o un sistema) que exhiba este problema a valores grandes de t .

Aproximar la energía del estado base a través del propagador (1.20) para un potencial dado es un buen punto de partida, desde que la estimación es dada, teóricamente, en el límite donde t tiende a infinito. Recordamos la expresión para la energía del estado base para una rápida referencia

$$E_0 = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \ln(K(x, y; t, 0)).$$

Observamos cómo el sobre muestreo se manifiesta en la estimación del logaritmo del propagador para cuatro potenciales diferentes revisados en el capítulo 1:

- Oscilador armónico (HO por sus siglas en inglés)

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

- Potencial lineal (LP)

$$V(x) = kx.$$

- Potencial lineal con valor absoluto (ALP)

$$V(x) = k|x|.$$

- Potencial Pöschl-Teller modificado (MPT)

$$V(x) = - \frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda + 1)}{\cosh^2(\alpha x)}.$$

Se puede observar en la Figura 3.1 que de estos cuatro potenciales solo el potencial lineal es no simétrico, los demás son simétricos y en el caso del potencial Pöschl-Teller es, además, localizado.

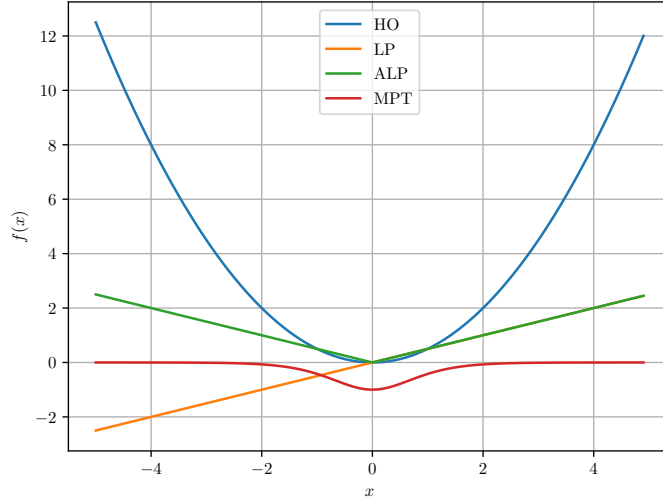


Figura 3.1: Potenciales utilizados para observar y probar los métodos para superar el sobre muestreo.

Evidenciamos el problema de sobre muestreo en el cálculo del logaritmo del propagador. Partimos mostrando como se ve el problema en el caso del oscilador armónico, cuyo propagador lo calculamos en la sección 1.5.4 en una dimensión en el espacio de posiciones (1.82). Para poder hacer la comparación con la expresión obtenida para la implementación numérica es necesario realizar una rotación al espacio euclideo, por lo que hacemos la continuación analítica usual $t \rightarrow -it$. Aplicando la rotación de Wick y teniendo en cuenta que $t_0 = 0$ el propagador del oscilador armónico en el espacio euclideo se ve como

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega t)}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2 \sinh(\omega t)}[(x^2 + y^2) \cosh(\omega t) - 2xy]\right). \quad (3.1)$$

Nos interesa comparar esta expresión analítica para el propagador del oscilador armónico con la relación (2.13), la expansión perturbativa del propagador, que para el potencial del oscilador armónico se ve como

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2i}(x-y)^2} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau \frac{1}{2} m\omega^2 x^2} \right\rangle \quad (3.2)$$

con

$$x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}}q(\tau). \quad (3.3)$$

Para hacer la implementación numérica es necesario discretizar la integral que esta en el argumento de la exponencial en el valor esperado, por lo que nos conviene definir $\langle \dots \rangle$ como

$$\langle W(v) \rangle = \langle e^{-tv} \rangle; \quad v = \frac{m\omega^2}{2} \int_0^1 d\tau x^2(\tau), \quad (3.4)$$

en donde el nombre de W se asigno por la analogía que se tiene con el lazo de Wilson en cálculos hechos en el contexto de QFT. La versión discreta de la integral v es

$$v = \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \frac{m\omega^2}{2} x^2(\tau_k), \quad (3.5)$$

N_p representa los puntos por lazo. De esta forma estamos de acuerdo con la ecuación (2.24). Con esta relación y con la discretización (2.23) somos capaces de calcular numéricamente el valor de expectación. De la ecuación (3.1) observamos que el propagador depende de la combinación de los parámetros físicos m , ω y t , así como de los puntos extremos fijos x e y ; por lo que fijamos los parámetros $m = \omega = 1$ y $x = 0 = y$ dejando t libre.

En la Figura 3.2 se observa una comparación de $-\ln(K)$ como función del tiempo t entre la expresión analítica y la estimación numérica calculada a través del algoritmo Yloop. Notamos una buena compatibilidad entre ambas cantidades para un intervalo de tiempo $0 < t < 60$, a partir de $t > 60$ la incompatibilidad empieza a manifestarse y, conforme aumenta el tiempo, se vuelve evidente la discrepancia entre la estimación numérica y la expresión analítica. Como mencionamos anteriormente, el error estadístico y el error sistemático se pueden disminuir aumentando el número de lazos N_L y el número de puntos por lazo N_p de forma considerable, en principio a infinito, sin embargo, numéricamente eso no es posible. Además, podemos reducir el error debido a correlaciones creando un conjunto de ensambles independientes para cada valor de t . A pesar de usar un número $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ considerablemente grandes podemos darnos cuenta de la pérdida de precisión del método numérico para tiempos grandes.

De igual forma podemos observar como se manifiesta el sobre muestreo para otros potenciales.

En el caso del potencial lineal con valor absoluto (1.5.3) el propagador en el es-

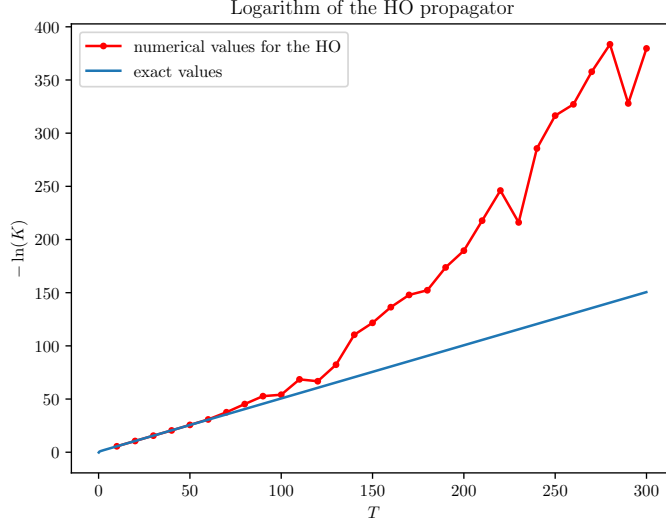


Figura 3.2: Gráfica de $-\ln(K)$ del oscilador armónico con $m = \omega = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$.

pacio euclideano se ve como:

$$\begin{aligned}
 K(x, y; t, 0) &= (2mk)^{\frac{1}{3}} \sum_n c_n^2 \left[\text{Ai}(\sigma_n + (2mk)^{\frac{1}{3}}x) \right] \left[\text{Ai}(\sigma_n + (2mk)^{\frac{1}{3}}y) \right] \\
 &\times \exp \left\{ - \left[(-\sigma_n) \left(\frac{k^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \right] t \right\}. \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

Comparamos esta expresión analítica del logaritmo del propagador del potencial lineal con valor absoluto (3.6) con la siguiente expansión perturbativa del propagador

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau k|x|} \right\rangle, \quad x(\tau) = (x-y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau). \quad (3.7)$$

En este caso fijamos los parámetros $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, de manera que nuevamente queda t libre. En la Figura 3.3 se observa una comparación de $-\ln(K)$ como función del tiempo t entre la expresión analítica y la estimación numérica calculada a través del algoritmo Yloop. Notamos una buena compatibilidad entre ambas cantidades para un intervalo de tiempo $0 < t < 80$, a partir de $t > 80$ la incompatibilidad empieza a manifestarse y, conforme aumenta el

tiempo, se vuelve evidente.

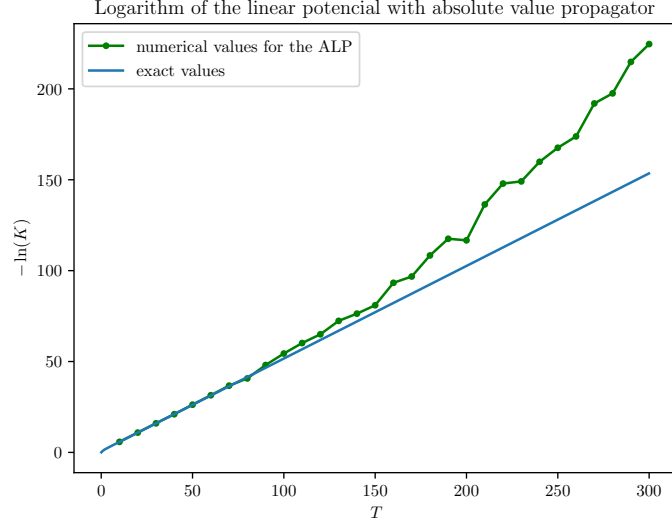


Figura 3.3: Gráfica de $-\ln(K)$ del potencial con valor absoluto, parámetros fijados a $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, $N_L = 500000$ y $N_p = 5000$.

El propagador del potencial modificado de Pöschl-Teller (1.5.5) en el espacio euclideo se ve como:

$$K(x, y; t, 0) = \alpha \sum_{n=0}^{\lambda-1} (\lambda - n) \frac{(2\lambda - n)!}{n!} P_{\lambda}^{n-\lambda}(\tanh(\alpha x)) P_{\lambda}^{n-\lambda}(\tanh(\alpha y)) e^{\frac{\alpha^2}{2m}(\lambda-n)^2 t} + \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} \exp\left[-\frac{m}{2\alpha^2 t}(x-y)^2\right]. \quad (3.8)$$

Volvemos a comparar esta expresión analítica del logaritmo del propagador del potencial modificado de Pöschl-Teller (3.8) con la siguiente expansión perturbativa del propagador

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \left\langle e^{t \int_0^1 d\tau \frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha x)}} \right\rangle, \quad x(\tau) = (x-y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau). \quad (3.9)$$

Fijamos los parámetros $m = 1$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ y $x = 0 = y$, quedando t libre. En la Figura 3.4 se observa una comparación de $\ln(K)$ como función del tiempo t entre la expresión analítica y la estimación numérica. Observamos una buena compatibilidad entre ambas cantidades para un intervalo de tiempo $0 <$

$t < 90$, a partir de $t > 90$ la incompatibilidad empieza a manifestarse. En esta ocasión no estamos sobre estimando los valores del propagador si no que los estamos subestimando como se aprecia en la Figura 3.4, de cualquier forma nos referiremos a esta pérdida de precisión para tiempos grandes generalizada como sobre muestreo.

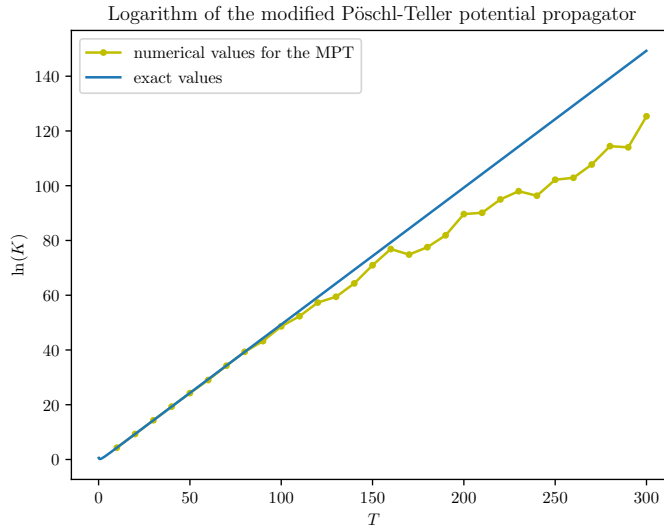


Figura 3.4: Gráfica de $\ln(K)$ del potencial modificado de Pöschl-Teller con $m = 1$, $\alpha = \lambda = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$.

Finalmente veamos como se manifiesta el sobre muestreo para el caso del potencial lineal. El propagador del potencial lineal (1.5.2) en el espacio euclideo se ve como

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} \exp \left\{ \left[-\frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{t} - \frac{kt}{2}(x+y) + \frac{k^2 t^3}{24m} \right] \right\}. \quad (3.10)$$

Comparamos esta expresión analítica del logaritmo del propagador del potencial lineal (3.10) con la siguiente expansión perturbativa del propagador

$$K(x, y; t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau kx} \right\rangle, \quad x(\tau) = (x-y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau). \quad (3.11)$$

Fijamos los parámetros $m = 1$, $k = 0.5$ y $x = 0 = y$, quedando t libre. En la Figura 3.5 se observa una comparación de $\ln(K)$ como función del tiempo t entre la expresión analítica y la estimación numérica. Observamos una buena

compatibilidad entre ambas cantidades para un intervalo de tiempo $0 < t < 10$, a partir de $t > 12$ la incompatibilidad empieza a manifestarse. Al igual que en el caso del potencial modificado Pöschl-Teller, en esta ocasión no estamos sobre estimando los valores del propagador si no que los estamos subestimando como se aprecia en la Figura 3.5. Notemos que en este caso el comportamiento del logaritmo del propagador no es lineal como en los anteriores casos, por lo que la ventana del tiempo no es la misma. Así mismo, la incompatibilidad de los resultados empieza desde un tiempo más pequeño por esta misma razón. Detuvimos el estudio en $t = 40$ porque para valores más grandes el valor del propagador excedía el límite de memoria disponible para trabajar con un doble, ocasionando un problema de *overflow*. Finalmente es importante mencionar que para el caso del potencial lineal no vamos a estimar la energía del estado base puesto que la energía para este sistema no es acotada desde abajo, es decir, carece de estados ligados.

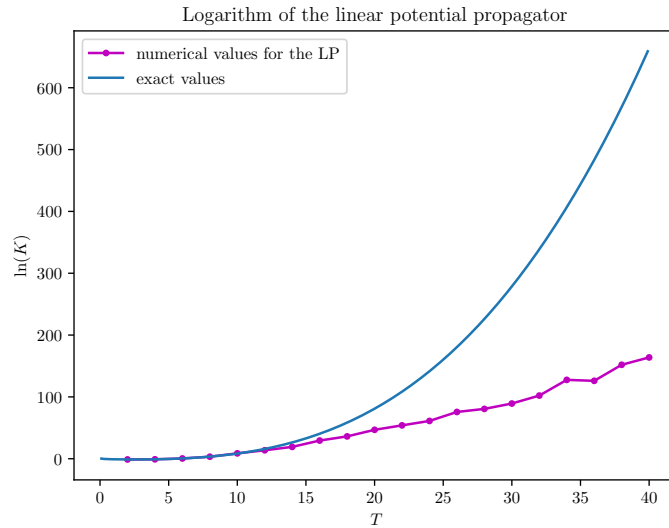


Figura 3.5: Gráfica de $\ln(K)$ del potencial lineal con $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, $N_L = 500000$ y $N_p = 5000$.

3.2. Métodos para abordar el problema

Ya que hemos visto como afecta el problema de sobre muestreo en diversos sistemas a la estimación numérica del propagador (o del logaritmo del propagador) para tiempos grandes, ahora presentamos como abordar el problema. Sabemos que el algoritmo esta generando, para tiempos grandes, trayectorias que ya no muestrean de forma correcta el potencial. Necesitamos modificar las trayectorias de tal forma que son generadas con mayor probabilidad en las zonas donde el potencial tiene una mayor contribución al cálculo del propagador.

Esto debe ser hecho sin introducir sesgo alguno, o compensar el sesgo que las modificaciones introduzcan.

En nuestras simulaciones tenemos dos métodos diferentes para modificar los algoritmos con el propósito de disminuir el problema de sobre muestreo. A continuación detallamos los métodos utilizados.

3.2.1. Método del prefactor

La estimación fundamental Monte Carlo (MC) que realizamos es la siguiente:

$$K = \int \mathcal{D}x e^{-\int_0^1 d\tau \left[\frac{m}{2t} \dot{x}^2 + tV(x) \right]} \longrightarrow K_0 \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_0 \stackrel{MC}{=} K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i}, \quad (3.12)$$

en donde K_0 denota el propagador de la partícula libre, $\langle \dots \rangle_0$ quiere decir que la función de correlación se calcula con la distribución de velocidades gaussiana libre¹ (2.22) y $\{v_i\}$ es la versión discretizada de la integral de línea a lo largo de las trayectorias (2.24) que sigue la distribución de velocidades $v_i \sim \mathcal{P}(v)$; la expresión $\stackrel{MC}{=}$ en el lado derecho de la ecuación denota estimación Monte Carlo. Debido a la distribución sobre los $\{v_i\}$ el promedio aritmético en el lado derecho de (3.12) es una estimación Monte Carlo de la transformación integral inversa del propagador, i.e., de la ecuación (1.106)

$$K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i} \stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v} = K. \quad (3.13)$$

Esta generación de las trayectorias que se calculan a través de la distribución gaussiana de velocidades (2.22) es la que vamos a modificar para influir la generación de trayectorias que se acerquen con mayor probabilidad a las zonas donde

¹En unos momentos más veremos en que sentido es *libre*.

el potencial recibe una mayor contribución al cálculo del propagador. Presentamos dos modificaciones diferentes a la distribución de velocidades gaussiana, cada una ayuda de forma diferente a la generación del ensamble de las trayectorias según el tipo de potencial que estemos estudiando, ya sea potenciales simétricos localizados o asimétricos. Presentamos a continuación la modificación para potenciales simétricos y localizados.

Oscilador armónico de fondo

En nuestras simulaciones modificamos la forma en la que se generan las trayectorias implementando un potencial estilo oscilador armónico, inspirados en el *término de masa* del trabajo de Olindo Corradini y Maurizio Muratori [58], en el cuál se modifica la distribución de velocidades gaussiana discretizada (2.20) de la siguiente forma:

$$Y \longrightarrow Y^{(\alpha)} = \sum_{k=1}^{N_p} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2], \quad \alpha > 0, \quad (3.14)$$

Siguiendo el tratamiento mostrado en [58] y en el trabajo de J. Edwards, M. Anabel et. al. [24] describimos el algoritmo empezando con su respectiva dia-

gonalización. Recordemos que $q_0 = q_{N_p} = 0$, así

$$\begin{aligned}
Y^{(\alpha)} &= \sum_{k=1}^{N_p} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] \\
&= q_{N_p-1}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-1} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] + q_1^2 + \alpha q_1^2 \\
&= q_{N_p-1}^2 + (q_{N_p-1} - q_{N_p-2})^2 + \alpha q_{N_p-1}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-2} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] + q_1^2 + \alpha q_1^2 \\
&= q_{N_p-1}^2(2 + \alpha) - 2q_{N_p-1}q_{N_p-2} + q_{N_p-2}^2 + [(q_{N_p-2} - q_{N_p-3})^2 + \alpha q_{N_p-2}^2] \\
&\quad + \sum_{k=2}^{N_p-3} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] + q_1^2 + \alpha q_1^2 \\
&= (2 + \alpha) \left[q_{N_p-1} - \frac{1}{2 + \alpha} q_{N_p-2} \right]^2 + \left(1 - \frac{1}{2 + \alpha} \right) q_{N_p-2}^2 + q_{N_p-2}^2 - 2q_{N_p-2}q_{N_p-3} \\
&\quad + q_{N_p-3}^2 + \alpha q_{N_p-2}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-3} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] + q_1^2 + \alpha q_1^2 \\
&= (2 + \alpha) \left[q_{N_p-1} - \frac{1}{2 + \alpha} q_{N_p-2} \right]^2 + \left(2 + \alpha - \frac{1}{2 + \alpha} \right) q_{N_p-2}^2 - 2q_{N_p-2}q_{N_p-3} \\
&\quad + q_{N_p-3}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-3} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] + q_1^2 + \alpha q_1^2 \\
&= (2 + \alpha) \left[q_{N_p-1} - \frac{1}{2 + \alpha} q_{N_p-2} \right]^2 + \left(2 + \alpha - \frac{1}{2 + \alpha} \right) \left[q_{N_p-2} - \frac{1}{2 + \alpha - \frac{1}{2 + \alpha}} q_{N_p-3} \right]^2 \\
&\quad + \left(2 + \alpha - \frac{1}{2 + \alpha - \frac{1}{2 + \alpha}} \right) q_{N_p-3}^2 - 2q_{N_p-3}q_{N_p-4} + q_{N_p-4}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-3} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] \\
&\quad + q_1^2 + \alpha q_1^2 \\
&= \dots \\
&= \sum_{k=1}^{N_p-2} C_k^{(\alpha)} \left(q_{N_p-k} - \frac{1}{C_k^{(\alpha)}} q_{N_p-k-1} \right)^2
\end{aligned}$$

Entonces se encuentra que

$$Y^{(\alpha)} = \sum_{k=1}^{N_p-1} C_{N_p-k}^{(\alpha)} \bar{q}_k^2, \quad (3.15)$$

en donde

$$\bar{q}_k = q_k - \frac{1}{C_{N_p-k}^{(\alpha)}} q_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, N_p - 1. \quad (3.16)$$

y

$$\begin{aligned} C_1^{(\alpha)} &= 2 + \alpha \\ C_k^{(\alpha)} &= C_1^{(\alpha)} - \frac{1}{C_{k-1}^{(\alpha)}}, \quad k = 2, \dots, N_p - 1. \end{aligned} \quad (3.17)$$

De esta forma el **algoritmo Yloop modificado** es el siguiente

1. Generar $N_p - 1$ números ω_i , $i = 1, 2, \dots, N_p - 1$, distribuidos según $\mathcal{P}(\omega_i) \propto \exp(-\omega_i^2)$.

2. Calcular

$$\bar{q}_i = \sqrt{\frac{2}{N_p}} \sqrt{\frac{1}{C_{N_p-i}^{(\alpha)}}} \omega_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, N_p - 1. \quad (3.18)$$

3. Construir el lazo unitario de acuerdo a

$$\begin{aligned} q_1 &= \bar{q}_1, \\ q_i &= \bar{q}_i + \frac{1}{C_{N_p-i}^{(\alpha)}} q_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, N_p - 1. \end{aligned} \quad (3.19)$$

4. Repetir el proceso N_L veces.

Podemos observar que los coeficientes $C_k^{(\alpha)}$ reproducen los mismos que en el algoritmo original Yloop para $\alpha = 0$, i.e., $\frac{k+1}{k}$.

Es importante recalcar que en el trabajo de O. Corradini y M. Muratori la implementación de este algoritmo modificado fue hecho con el motivo de estabilizar y acelerar la convergencia, en este sentido es una especie de regulador de las trayectorias generadas.

En nuestro trabajo relacionamos el *término de masa* α con la frecuencia angular Ω de un oscilador armónico de fondo. En este caso dicho oscilador armónico

de fondo no tendrá la finalidad de acelerar y estabilizar la convergencia sino que tendrá como propósito empujar las trayectorias a que muestreen valores más pequeños del potencial a estudiar; esta afirmación quedará más clara conforme se avanza en la lectura. Para observar la relación que hay en ambas cantidades empezamos viendo como discretizamos la acción de forma detallada:

$$\int_0^t \dot{q}^2 dt' = \frac{1}{t} \int_0^1 \dot{q}^2 d\tau \longrightarrow \frac{N_p}{t} \sum_k (q_k - q_{k-1})^2$$

$$\int_0^t q^2 dt' = t \int_0^1 q^2 d\tau \longrightarrow \frac{t}{N_p} \sum_k q_k^2$$

Analizamos ahora la versión discretizada de la distribución gaussiana multiplicada por el siguiente factor

$$\begin{aligned} \frac{N_p}{t} Y^{(\alpha)} &= \frac{N_p}{t} \sum_{k=1}^{N_p} [(q_k - q_{k-1})^2 + \alpha q_k^2] \\ &= \sum_{k=1}^{N_p} \left[\frac{N_p}{t} (q_k - q_{k-1})^2 + \frac{N_p}{t} \alpha q_k^2 \right] \\ &= \sum_{k=1}^{N_p} \left[\frac{N_p}{t} (q_k - q_{k-1})^2 + \frac{N_p}{t} \frac{t^2}{N_p^2} \left(\frac{N_p^2}{t^2} \alpha \right) q_k^2 \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\longrightarrow \int_0^t dt' (\dot{q}^2 + \Omega^2 q^2) \quad (3.21)$$

Aquí hemos llamado Ω al factor multiplicativo que incluye a α en el segundo término del lado derecho de (3.20) (lo que está dentro del paréntesis), de modo que la relación entre ambas cantidades es:

$$\alpha = \frac{\Omega^2 t^2}{N_p^2}, \quad (3.22)$$

en donde $\Omega > 0$. Aquí podemos notar que en nuestro caso la frecuencia angular de fondo depende del parámetro t . De esta forma nosotros hemos modificado la distribución de velocidades gaussiana normalizada de

$$\mathcal{P}[\{q\}] = \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^1 d\tau \dot{q}^2\right)$$

a

$$\mathcal{P}[\{q\}] = \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^1 d\tau (\dot{q}^2 + t^2 \Omega^2 q^2)\right). \quad (3.23)$$

La función de correlación en el cálculo del propagador (2.13) ahora va a estar pesada por esta nueva distribución (3.23); lo denotamos de la siguiente manera:

$$\left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_{\Omega}. \quad (3.24)$$

Esta modificación a la distribución de velocidades gaussiana modifica a su vez la forma en la que los $\{v_i\}$ están distribuidos, ahora lo están según una distribución $\{v_i^{\Omega}\} \sim \mathcal{P}_{\Omega}(v)$

$$\left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_{\Omega} \stackrel{MC}{=} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i^{\Omega}} \quad (3.25)$$

que dan una estimación Monte Carlo a la siguiente integral

$$K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i^{\Omega}} \stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \mathcal{P}_{\Omega}(v) e^{-v}. \quad (3.26)$$

Notemos que en este caso **no** obtenemos una transformación integral del propagador, ya que $\mathcal{P}_{\Omega}(v)$ no es la distribución correcta que lo muestrea, sin embargo, podemos buscar cómo transformar (3.26) en la integral correcta.

En la integral anterior, la distribución de probabilidad normalizada es (en el caso de un oscilador armónico de frecuencia ω)

$$\mathcal{P}_{\Omega}(v) = \frac{1}{K_{\Omega}} \int \mathcal{D}x \delta\left(v - \int d\tau \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) e^{-\int d\tau [\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2]} \quad (3.27)$$

$$= \sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} e^{-\frac{\Omega^2}{\omega^2} v} \mathcal{P}(v), \quad (3.28)$$

en donde $\mathcal{P}(v)$ es el PDF (1.111) del oscilador armónico. Observamos que podemos factorizar la distribución de probabilidad $\mathcal{P}(v)$ de $\mathcal{P}_{\Omega}(v)$, por lo tanto podemos escribir la integral (3.26) como sigue

$$K_0 \int dv \mathcal{P}_{\Omega}(v) e^{-v} = K_0 \int dv F(v) \mathcal{P}(v) e^{-v} \quad (3.29)$$

donde hemos identificado la función multiplicativa como

$$F(v) = \sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} e^{-\frac{\Omega^2}{\omega^2} v}. \quad (3.30)$$

Observamos que si tomamos el límite cuando $\Omega \rightarrow 0$ la función $F(v)$ es igual a uno, recuperando la distribución original.

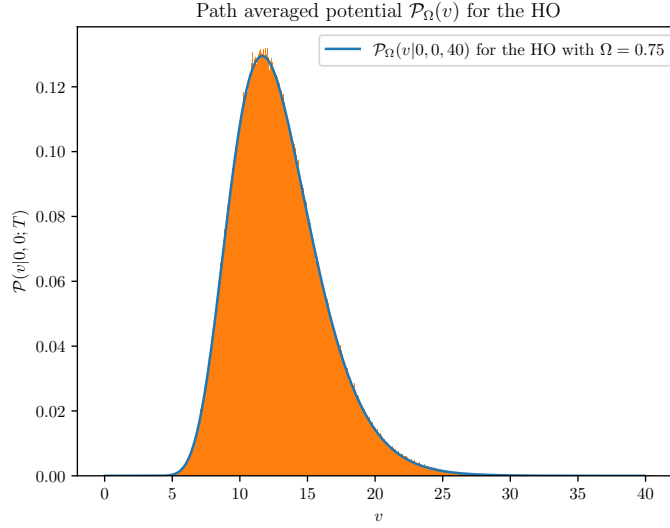


Figura 3.6: Función de distribución de probabilidad $\mathcal{P}_\Omega(v)$ con $x = y = 0$ con $\Omega = 0.75$. La línea azul sólida representa la función analítica y debajo de la curva el histograma generado por el algoritmo.

El término estilo oscilador armónico que fue añadido en la distribución de velocidades gaussiana tiene como consecuencia que las trayectorias ahora están siendo generadas con este potencial de fondo, es decir, es menos probable que las trayectorias se encuentren más lejos del mínimo del potencial; esto se ve reflejado en una mayor contribución al término e^{-v_i} . Dicho de otra forma, la modificación hace que el algoritmo tome valores más pequeños de v_i como se puede apreciar en la Figura 3.7; esta modificación también causa que la extensión espacial de los lazos ahora se concentre en valores cercanos al origen, como se aprecia en la Figura 3.8.

De la ecuación (3.29) es evidente que para obtener la transformación integral inversa correcta del propagador debemos dividir entre el factor $F(v)$ en la estimación Monte Carlo para remover esta función no deseada.

$$\begin{aligned}
 K_0 \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_\Omega &\longrightarrow K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i^\Omega}}{F(v_i^\Omega)} \\
 &\stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v}.
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

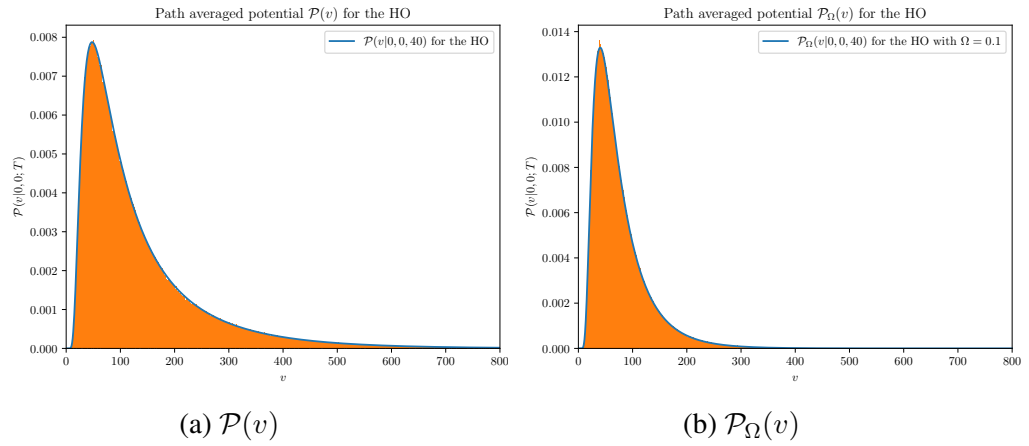


Figura 3.7: Comparación de las dos funciones de distribución de probabilidad que se han presentado hasta ahora para el oscilar armónico. Notamos que en la figura (b) la nueva distribución toma valores más pequeños de $\{v_i\}$.

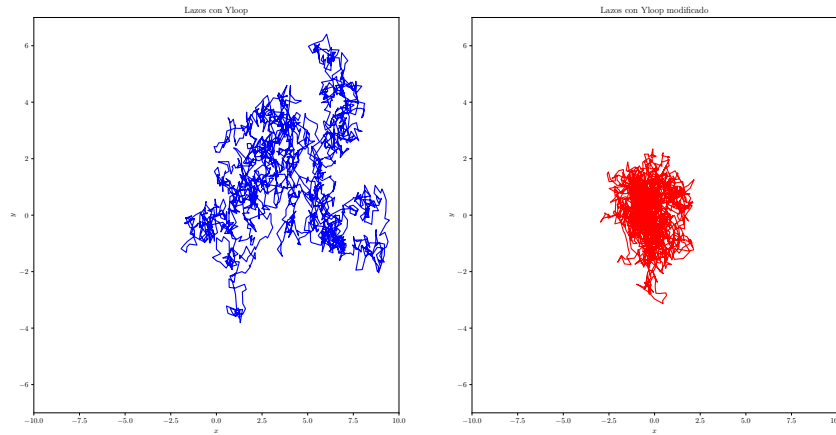


Figura 3.8: Comparación de la extensión espacial de los lazos generados con el algoritmo Yloop original y con el algoritmo Yloop modificado.

Con el factor $F(v)$ en la ecuación (3.31) corregimos el sesgo que introdujimos al modificar la distribución de velocidades gaussiana en la estimación del propagador, por lo tanto, llamamos a este término el **prefactor**, de aquí el nombre del método.

Podemos aprender más de este método interpretando la modificación a la suma como una transformación en los $\{v_i^\Omega\}$. La escribimos como

$$K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i^\Omega}}{F(v_i^\Omega)} = K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-(v_i^\Omega + \log(F(v_i^\Omega)))} \quad (3.32)$$

$$\equiv K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v'_i}, \quad (3.33)$$

en donde hemos definido un nuevo conjunto de variables $\{v'_i\} \equiv \{v_i^\Omega + \log(F(v_i^\Omega))\}$. Este promedio modificado es una estimación Monte Carlo de la siguiente integral:

$$K_0 \int dv \mathcal{P}'(v) e^{-v}, \quad (3.34)$$

con una nueva distribución, $\mathcal{P}'(v)$, que es inducida por $\mathcal{P}_\Omega(v)$. Para calcular esta nueva distribución, consideremos el siguiente resultado elemental de la probabilidad y la estadística:

Teorema 1. (Método de las transformaciones). Sea X una variable aleatoria continua con una función de densidad f_X y el conjunto de posibles valores A . Para la función invertible $h : A \rightarrow \mathbf{R}$, sea $Y = h(X)$ una variable aleatoria con un conjunto de posibles valores $B = h(A) = \{h(a) : a \in A\}$. Supongamos que la inversa de $y = h(x)$ es la función $x = h^{-1}(y)$, que es diferenciable para todos los valores de $y \in B$. Entonces f_Y , la función de densidad de Y , es dada por

$$f_Y(y) = f_X(h^{-1}(y)) |(h^{-1})'(y)|, \quad y \in B. \quad (3.35)$$

Demostración 1. Sean F_X y F_Y las funciones de distribución de X e $Y = h(X)$, respectivamente. Diferenciabilidad de h^{-1} implica que esta es continua. Desde que una función invertible continua es estrictamente monótona, h^{-1} es también estrictamente creciente o estrictamente decreciente. Si es estrictamente creciente, $(h^{-1})'(y) > 0$ y $(h^{-1})'(y) = |(h^{-1})'(y)|$. Además, en este caso, h es estrictamente creciente entonces

$$F_Y(y) = P(h(X) \leq y) = P(X \leq h^{-1}(y)) = F_X(h^{-1}(y)).$$

Diferenciando,

$$F'_y(y) = F'_X(h^{-1}(y))(h^{-1})'(y) = f_X(h^{-1}(y))|(h^{-1})'(y)|.$$

Si h^{-1} es estrictamente decreciente, $(h^{-1})'(y) < 0$ y aquí $-(h^{-1})'(y) = |(h^{-1})'(y)|$. En este caso, h es también estrictamente decreciente y obtenemos

$$F_y(y) = P(h(X) \leq y) = P(X \geq h^{-1}(y)) = 1 - F_X(h^{-1}(y)).$$

Diferenciando,

$$F'_y(y) = -F'_X(h^{-1}(y))(h^{-1})'(y) = f_X(h^{-1}(y))|(h^{-1})'(y)|. \quad \blacksquare$$

En nuestro caso, tenemos

$$v' = v + F(v) = v \left(1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2}\right) + \log \left(\sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} \right) \equiv f(v).$$

Así, desde que los $\{v_i^\Omega\}$ están distribuidos acorde a \mathcal{P}_Ω , encontramos

$$\mathcal{P}'(v) = \mathcal{P}_\Omega \left(\left(v - \log \left[\sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} \right] \right) \frac{\omega^2}{\omega^2 - \Omega^2} \right) \frac{\omega^2}{\omega^2 - \Omega^2}. \quad (3.36)$$

Para ver que esta es la correcta distribución la sustituimos en (3.34), haciendo un cambio de variables a $v = \left(v - \log \left[\sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} \right] \right) \frac{\omega^2}{\omega^2 - \Omega^2}$ encontramos

$$\begin{aligned} K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-(v_i^\Omega + \log(F(v_i^\Omega)))} &= K_0 \int dv \mathcal{P}_\Omega(v) e^{-v} \times \sqrt{\frac{\Omega t}{\sinh(\Omega t)}} e^{\frac{\Omega^2}{\omega^2} v} \\ &= K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v} \\ &= K, \end{aligned}$$

como es requerido.

En la siguiente Figura 3.9 observamos la función de distribución de probabilidad (3.36).

Como veremos más adelante en la sección de resultados, la modificación a la distribución de velocidades gaussiana con un potencial estilo oscilador armónico ayuda en el caso de **potenciales simétricos y localizados**, como es el caso del potencial oscilador armónico, potencial lineal con valor absoluto y el potencial Pösch-Teller. Para potenciales asimétricos esta modificación no va a ser de

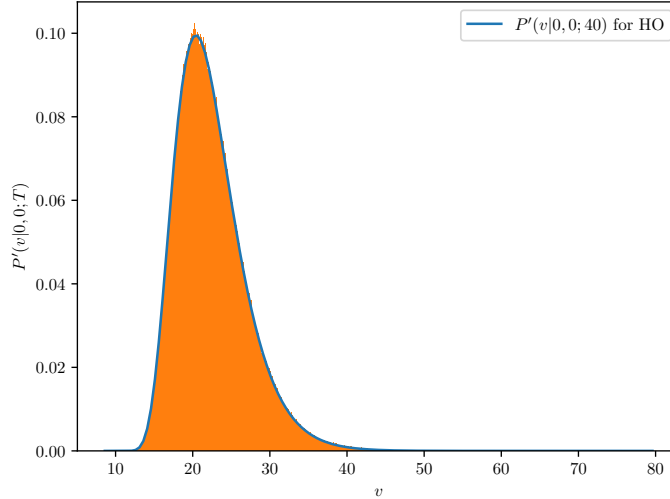


Figura 3.9: Función de distribución de probabilidad \mathcal{P}' con $x = y = 0$. Nuevamente la línea azul sólida representa la función analítica y debajo de la curva el histograma generado por el algoritmo.

mucha utilidad ya que estaría empujando las trayectorias a zonas en donde tendrían una gran contribución al término $\sum e^{-v_i}$; por lo que no sería de mucho ayuda, por ejemplo, en el caso de la estimación del propagador para el potencial lineal.

Potencial lineal de fondo

Para potenciales asimétricos podemos generar trayectorias acorde a un potencial lineal, en donde cambiamos el algoritmo de O. Corradini y M. Muratori [58] para incluir un término lineal, entonces modificamos la distribución de velocidades gaussiana de la siguiente manera:

$$Y \longrightarrow Y^{(\beta)} = \sum_{k=1}^{N_p} [(q_k - q_{k-1})^2 + 2\beta q_k], \quad \beta > 0, \quad (3.37)$$

cuya diagonalización es la siguiente, recordando que se cumple $q_0 = q_{N_p} = 0$:

$$\begin{aligned}
Y^{(\beta)} &= \sum_{k=1}^{N_p} [(q_k - q_{k-1})^2 + 2\beta q_k] \\
&= q_1^2 + 2\beta q_1 + q_{N_p-1}^2 + \sum_{k=2}^{N_p-1} [(q_k - q_{k-1})^2 + 2\beta q_k] \\
&= q_1^2 + 2\beta q_1 + q_{N_p-1}^2 + [(q_{N_p-1} - q_{N_p-2})^2 + 2\beta q_{N_p-1}] + \sum_{k=2}^{N_p-2} [(q_k - q_{k-1})^2 + 2\beta q_k] \\
&= q_1^2 + 2\beta q_1 + 2 \left[q_{N_p-1} - \frac{1}{2}(q_{N_p-2} - \beta) \right]^2 + \frac{1}{2} q_{N_p-2}^2 + q_{N_p-2} \beta - \frac{1}{2} \beta^2 + q_{N_p-2}^2 - 2q_{N_p-2} \\
&\quad + q_{N_p-3}^2 + 2\beta q_{N_p-2} + \sum_{k=2}^{N_p-3} [(q_k - q_{k-1})^2 + 2\beta q_k] \\
&= q_1^2 + 2\beta q_1 + 2 \left[q_{N_p-1} - \frac{1}{2}(q_{N_p-2} - \beta) \right]^2 + \frac{3}{2} \left[q_{N_p-2} - \frac{2}{3} \left(q_{N_p-3} - \frac{3}{2} \beta \right) \right]^2 + \frac{1}{2} q_{N_p-3}^2 \\
&\quad + 2q_{N_p-3} \beta - \frac{3}{2} \beta^2 - \frac{1}{2} \beta^2 + \sum_{k=2}^{N_p-3} [(q_k - q_{k-1})^2 + 2\beta q_k] \\
&= \dots \\
&= \sum_{k=1}^{N_p-2} \frac{k+1}{k} \left[q_{N_p-k} - \frac{k}{k+1} \left(q_{N_p-k-1} - \frac{k+1}{2} \beta \right) \right]^2 + \frac{1}{N_p-1} q_1^2 + q_1^2 + 2(N_p-1)\beta q_1 \\
&\quad + 2\beta q_1 + \frac{N_p(N_p-1)}{4} \beta^2 - \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{2} + 3 + 5 + \dots \right) \beta^2 \\
&= \sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{k+1}{k} \left[q_{N_p-k} - \frac{k}{k+1} \left(q_{N_p-k-1} - \frac{k+1}{2} \beta \right) \right]^2 - \sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{k(k+1)}{4} \beta^2 \\
&= \sum_{k=1}^{N_p-1} C_k^{(\beta)} \left[q_{N_p-k} - \frac{1}{C_k^{(\beta)}} (q_{N_p-k-1} - \beta_k) \right]^2 - \sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{\beta_k^2}{C_k^{(\beta)}}.
\end{aligned}$$

Entonces tenemos que

$$Y^{(\beta)} = \sum_{k=1}^{N_p-1} C_{N_p-k}^{(\beta)} \bar{q}_k^2 - \sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{\beta_k^2}{C_k^{(\beta)}}, \quad (3.39)$$

en donde

$$\bar{q}_k = q_k - \frac{1}{C_{N_p-k}^{(\beta)}}(q_{k-1} - \beta_{N_p-k}), \quad k = 1, 2, \dots, N_p - 1 \quad (3.40)$$

$$C_k^{(\beta)} = \frac{k+1}{k} \quad (3.41)$$

$$\beta_k = \frac{k+1}{2}\beta. \quad (3.42)$$

La suma final en (3.39) puede ser evaluada resultando en

$$\sum_{k=1}^{N_p-1} \frac{\beta_k}{C_k^{(\beta)}} = \frac{\beta^2}{12} N_p (N_p + 1) (N_p - 1) \quad (3.43)$$

Multiplicamos el resultado de la suma por N_p/t como lo hicimos previamente con la versión discretizada de la distribución de velocidades gaussiana

$$\frac{m}{2} \frac{N_p}{t} \frac{\beta^2}{12} N_p (N_p + 1) (N_p - 1) = \frac{\kappa^2 t^3}{24m} \frac{(N_p + 1)(N_p - 1)}{N_p^2} \longrightarrow \frac{\kappa^2 t^3}{24m} \quad (3.44)$$

con la relación final válida en el límite continuo $N_p \rightarrow \infty$.

De esta forma el **algoritmo Yloop modificado linealmente** es el siguiente:

1. Generar $N_p - 1$ números ω_i , $i = 1, 2, \dots, N_p - 1$, distribuidos según $\mathcal{P}(\omega_i) \propto \exp(-\omega_i^2)$.
2. Calcular

$$\bar{q}_i = \sqrt{\frac{2}{N_p}} \sqrt{\frac{1}{C_{N_p-i}^{(\beta)}}} \omega_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, N_p - 1. \quad (3.45)$$

3. Construir el lazo unitario de acuerdo a

$$q_1 = \bar{q}_1, \\ q_i = \bar{q}_i + \frac{1}{C_{N_p-i}^{(\alpha)}} \left(q_{i-1} - \sqrt{\frac{m}{t}} \beta_{N_p-i} \right), \quad i = 2, 3, \dots, N_p - 1.$$

4. Repetir el proceso N_L veces.

Nota importante: cuando implementamos este algoritmo en nuestro código, estamos generando lazos unitarios $\{q\}$, que son re-escalados según $q(\tau) = \sqrt{\frac{m}{t}} \tilde{q}(t\tau)$. Como tal, cuando estamos generando los $\{q\}$, necesitamos convertir

nuestros β en sus equivalentes unitarios, dados por $\beta_{unit} = \sqrt{\frac{m}{t}} \beta$. El resultado es que los β dados arriba son divididos por el factor de re-escalamiento para formar los lazos unitarios, de los cuales son re-escalados para dar los lazos físicos. Es fácil ver que en este caso si $\beta = 0$ tenemos unicamente los coeficientes $C_k^{(\beta)}$, que coinciden con los del algoritmo original, i.e. $\frac{k+1}{k}$.

Volviendo a insertar los factores apropiados de m y la medida de la integral identificamos el término lineal con un potencial de fondo $V(x) = \kappa x$, en donde la relación entre β y la constante del potencial κ es

$$\beta = \frac{\kappa}{m} \left(\frac{t}{N_p} \right)^2 \quad (3.46)$$

con $\beta > 0$. De esta forma nosotros hemos modificado ahora la distribución de velocidades gaussiana normalizada como

$$\mathcal{P}[\{q\}] = \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^1 d\tau (\dot{q}^2 + t^2 \kappa q) \right). \quad (3.47)$$

La función de correlación en el cálculo del propagador (2.13) ahora va a estar pesada por esta nueva distribución (3.47); lo denotamos de la siguiente manera:

$$\left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_{\beta}. \quad (3.48)$$

La nueva distribución de velocidades gaussiana modifica la forma en la que los $\{v_i\}$ están distribuidos, ahora lo están según una distribución $\{v_i^{\beta}\} \sim \mathcal{P}_{\kappa}(v)$

$$\left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_{\beta} = \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i^{\beta}} \quad (3.49)$$

que dan una estimación Monte Carlo a la integral

$$K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i^{\beta}} \stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \mathcal{P}_{\kappa}(v) e^{-v}. \quad (3.50)$$

Podemos calcular la modificación al potencial de camino promedio para el potencial lineal, $V(x) = \kappa x$, generando trayectorias en un potencial lineal de fon-

do:

$$\mathcal{P}_\kappa(v) = \frac{1}{K_\kappa} \int \mathcal{D}x \delta \left(v - \int d\tau kx \right) e^{-\int d\tau [\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \kappa x]} \quad (3.51)$$

$$= \mathcal{P} \left(v + \frac{k\kappa t^3}{12m} \right) \quad (3.52)$$

$$= \frac{K_0}{K_\kappa} e^{-\frac{\kappa}{k}v} \mathcal{P}(v) \quad (3.53)$$

$$= \left[e^{\frac{\kappa t}{2}(x+y) - \frac{\kappa^2 t^3}{24}} \right] e^{-\frac{\kappa}{k}v} \mathcal{P}(v) \quad (3.54)$$

donde K_κ es el propagador del potencial lineal con una constante de acoplamiento κ , aquí $\mathcal{P}(v)$ es el PDF (1.110) del potencial lineal. De igual forma a como lo hicimos con el oscilador armónico, incluimos (3.54) en la integral (3.50) para factorizar $\mathcal{P}(v)$ de $\mathcal{P}_\kappa(v)$

$$K_0 \int dv \mathcal{P}_\kappa(v) e^{-v} = K_0 \int dv H(v) \mathcal{P}(v) e^{-v} \quad (3.55)$$

en donde hemos identificado el **prefactor** $H(v)$ como

$$H(v) = \frac{K_0}{K_\kappa} e^{-\frac{\kappa}{k}v} = \left[e^{\frac{\kappa t}{2}(x+y) - \frac{\kappa^2 t^3}{24}} \right] e^{-\frac{\kappa}{k}v}. \quad (3.56)$$

La modificación de la distribución de velocidades gaussiana (3.47) empuja ahora a las trayectorias a tomar valores negativos de $\{v_i\}$, que es precisamente lo que estábamos buscando en este caso para tener una mayor contribución a la suma $\sum e^{-v_i}$. Esta modificación se puede observar en la siguiente Figura 3.10.

De la ecuación (3.55) notamos que para obtener la transformación integral inversa correcta del propagador debemos dividir entre el factor de compensación $H(v)$ en la suma de la estimación Monte Carlo.

$$K_0 \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau))} \right\rangle_\beta \longrightarrow K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i^\beta}}{H(v_i^\beta)} \quad (3.57)$$

$$\stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v}.$$

Interpretamos la modificación a la suma (3.57) como una transformación en los $\{v_i^\beta\}$, de forma análoga a como lo hicimos con el oscilador armónico de fondo.

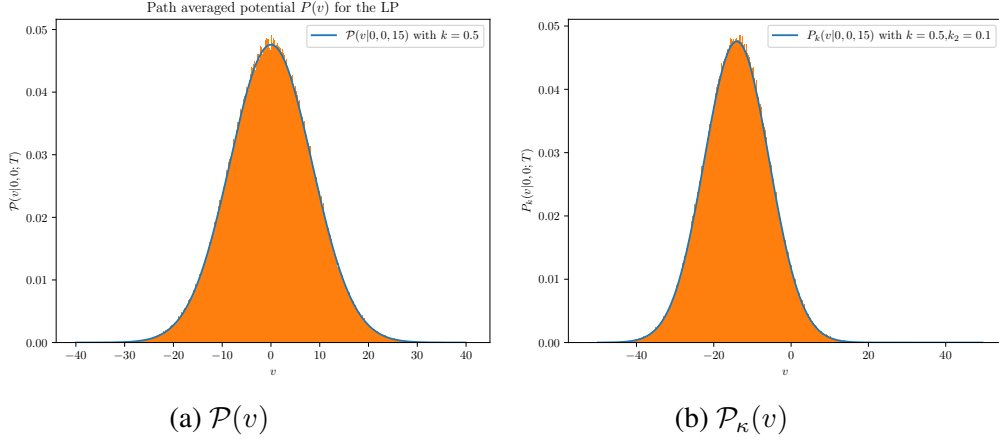


Figura 3.10: Comparación de la dos funciones de distribución de probabilidad: una para el potencial lineal, otra para el potencial lineal en un fondo lineal. La línea sólida azul es la función analítica, debajo un histograma generado numéricamente. En (b), k_2 toma el rol de κ .

Escribimos la suma como

$$K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i^\beta}}{H(v_i^\beta)} = K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-(v_i^\beta + \log(H(v_i^\beta)))} \quad (3.58)$$

$$\equiv K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-v_i''}, \quad (3.59)$$

en donde hemos definido un nuevo conjunto de variables $\{v_i''\} \equiv \{v_i^\beta + \log(H(v_i^\beta))\}$. Este promedio modificado es una estimación Monte Carlo de la siguiente integral:

$$K_0 \int dv \mathcal{P}''(v) e^{-v}, \quad (3.60)$$

con una nueva distribución, $\mathcal{P}''(v)$, que es inducida por $\mathcal{P}_k(v)$. Para calcularla, usamos el resultado del Teorema 1 antes presentado.

En este caso tenemos

$$v'' = v + \log(H(v)) = v \left(1 - \frac{\kappa}{k}\right) + \frac{\kappa t}{2} \left[(x + y) - \frac{\kappa t^2}{12} \right] \equiv f(v)$$

Así, desde que los $\{v_i^\beta\}$ están distribuidos acorde a $\mathcal{P}_\kappa(v)$, encontramos

$$\mathcal{P}''(v) = \mathcal{P}_\kappa \left(\frac{k}{k-\kappa} \left(v + \frac{\kappa t}{2} \left[\frac{\kappa t^2}{12} - (x+y) \right] \right) \right) \left| \frac{k}{k-\kappa} \right|. \quad (3.61)$$

Verificamos que esta es la correcta distribución, la sustituimos en (3.60), haciendo un cambio de variables a $v = \frac{k}{k-\kappa} \left(v + \frac{\kappa t}{2} \left[\frac{\kappa t^2}{12} - (x+y) \right] \right)$ encontramos

$$\begin{aligned} K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-(v_i^\beta + \log(H(v_i^\beta)))} &= K_0 \int dv \mathcal{P}_\kappa(v) e^{-v} \times e^{\frac{\kappa t}{2} \left[\frac{\kappa t^2}{12} - (x+y) \right]} e^{\frac{\kappa}{k} v} \\ &= K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v} \\ &= K, \end{aligned}$$

como es requerido.

En la siguiente Figura 3.11 observamos la función de distribución de probabilidad (3.61).

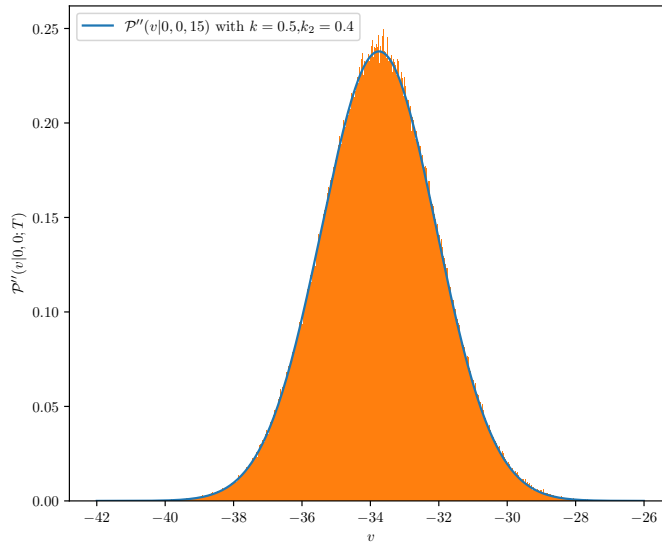


Figura 3.11: Función de distribución de probabilidad \mathcal{P}'' con $x = y = 0$. Nuevamente la línea azul sólida representa la función analítica y debajo de la curva el histograma generado por el algoritmo. Aquí k_2 representa κ .

Observamos de las ecuaciones (3.31) y (3.57) que el método del prefactor solo sirve para potenciales cuya función de distribución de probabilidad es conocida, como es el caso del oscilador armónico y el potencial lineal, o en los casos para los cuales podemos calcular el cociente de las dos distribuciones para poder dividir por el factor de compensación.

Si quisiéramos usar (3.31) para el potencial lineal con valor absoluto o con el potencial de Pöschl-Teller modificado necesitaríamos conocer su PDF de cada uno para poder deducir su respectivo prefactor, término que corrige el sesgo introducido por los potenciales de fondo.

Es necesario entonces la implementación de un método en la que no sea necesario el conocimiento explícito de las funciones de distribución de probabilidad para un determinado potencial, el método debería aplicarse solo con el conocimiento del potencial a estudiar; mismo que revisaremos en la siguiente sección.

3.2.2. Método de modificación a la acción

Una vez introducidas las dos formas en las que hemos modificado la distribución de velocidades gaussiana (ecuaciones (3.23) y (3.47)) y cómo estas modificaciones afectan las distribuciones que siguen los conjuntos de los valores $\{v_i\}$, podemos introducir el método de la **modificación de la acción**. El método se basa esencialmente en modificar la acción en la integral de camino que discretizamos con los potenciales de fondo a utilizar, de tal forma que cuando hagamos la expansión perturbativa del propagador nuevamente contemos con una función de correlación pesada por la distribución del potencial de fondo, pero con un término que quita el sesgo en esta función de correlación que aproximamos.

Oscilador armónico de fondo

Empezamos mostrando como se ve la modificación con el potencial de fondo estilo oscilador armónico, mismo que servirá para estimar el propagador para potenciales simétricos y localizados. Hacemos esencialmente el siguiente cambio:

$$K = \int \mathcal{D}x e^{-\int_0^1 d\tau \left\{ \frac{m}{2i} \dot{x}^2 + t \left[\frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 + V(x) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right] \right\}} \longrightarrow K_\Omega \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau \left[V(x(\tau)) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right]} \right\rangle_\Omega, \quad (3.62)$$

en donde K_Ω representa el propagador del oscilador armónico con frecuencia angular Ω . Para poder entender como llegamos al lado derecho de la ecuación (3.62) debemos realizar la expansión perturbativa del propagador con la modifi-

cación que hicimos a la acción, esto es:

$$\begin{aligned}
K &= \int \mathcal{D}x e^{-\int_0^1 d\tau \left\{ \frac{m}{2i} \dot{x}^2 + t \left[\frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 + V(x) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right] \right\}} \\
&= K_\Omega \frac{\int \mathcal{D}x e^{-\int_0^1 d\tau \left[\frac{m}{2i} \dot{x}^2 + t \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right]} e^{-\int_0^1 d\tau t \left[V(x) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right]}}{\int \mathcal{D}x e^{-\int_0^1 d\tau \left[\frac{m}{2i} \dot{x}^2 + t \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right]}} \\
&= K_\Omega \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau)) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2} \right\rangle_\Omega.
\end{aligned}$$

Ahora estimamos el propagador con la función de correlación modificada como

$$K_\Omega \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau)) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2} \right\rangle_\Omega = K_\Omega \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} \quad (3.63)$$

en donde ahora la discretización de la integral de línea del potencial se ve como

$$\tilde{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau \left[V(x_i(\tau)) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau) \right] \longrightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \left[V(x_i(\tau_k)) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau_k) \right]. \quad (3.64)$$

El lado derecho de (3.63) da una estimación Monte Carlo a la siguiente integral

$$K_\Omega \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} = K_\Omega \int dv \tilde{\mathcal{P}}(v) e^{-v} \quad (3.65)$$

En la integral anterior, la función de distribución de probabilidad normalizada es (en el caso de un oscilador armónico de frecuencia ω)

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{P}}(v) &= \frac{1}{K_\Omega} \int \mathcal{D}x \delta \left(v - \int d\tau \frac{1}{2} m (\omega^2 - \Omega^2) x^2 \right) e^{-\int d\tau \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right]} \\
&= \mathcal{P}_{\Omega, \omega'}(v)
\end{aligned} \quad (3.66)$$

$$= \sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} e^{-\frac{\Omega^2}{\omega^2 - \Omega^2} v} \mathcal{P}_{\omega'}(v), \quad (3.67)$$

donde en $\mathcal{P}_{\omega'}(v)$ reemplazamos $\omega \rightarrow \omega' = \sqrt{\omega^2 - \Omega^2}$ en $\mathcal{P}(v)$, que es el PDF (1.111) del oscilador armónico. En la Figura 3.12 podemos ver la forma del PDF (3.67).

Al igual y como lo hicimos en el método del prefactor, en esta ocasión es conveniente factorizar la función de distribución de probabilidad $\mathcal{P}_{\tilde{\omega}}(v)$ de $\tilde{\mathcal{P}}(v)$, para

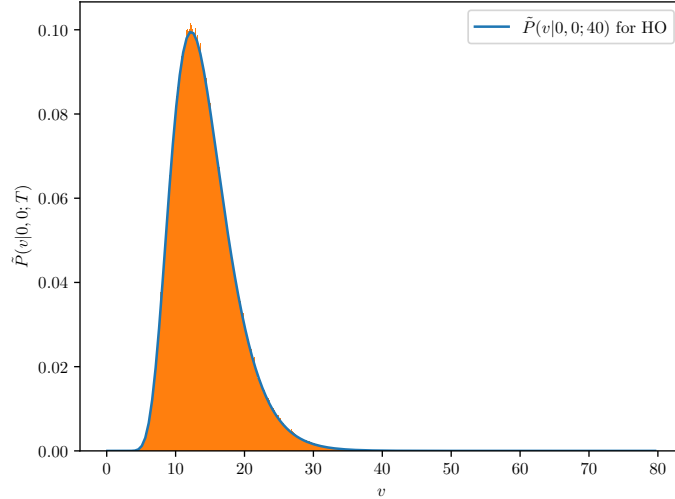


Figura 3.12: Función de distribución de probabilidad $\tilde{\mathcal{P}}(v)$ con $x = y = 0$. La línea azul sólida representa la función analítica y debajo de la curva el histograma generado por el algoritmo.

reescribir la integral (3.65) así

$$K_{\Omega} \int dv \tilde{\mathcal{P}}(v) e^{-v} = K_0 \int dv G(v) \mathcal{P}_{\bar{\omega}}(v) e^{-v} \quad (3.68)$$

donde la función multiplicativa $G(v)$ es:

$$G(v) = e^{-\frac{\Omega^2}{\omega^2 - \Omega^2} v}. \quad (3.69)$$

En su forma actual no es obvio que la integral en (3.68) sea la correcta transformación integral inversa del propagador. De hecho, como sabemos del método del prefactor, las transformaciones integrales de aquel método requerían ser modificadas dividiendo por el prefactor, mientras que en este caso la integral resulta ser la correcta.

Demostremos que la estimación Monte Carlo (3.68) ya está bien tal como está. Para lograr esto, interpretemos el factor multiplicativo $G(v)$ como una transformación de los valores de $\{\tilde{v}_i\}$ como sigue (notemos que esto **no** es una compensación, solo una forma conveniente de entender qué se está calculando con la integral): tomamos la integral (3.68), vemos que corresponde a una estimación

Monte Carlo de

$$\begin{aligned}
 K_0 \int dv G(v) \mathcal{P}_{\bar{\omega}}(v) e^{-v} &\stackrel{MC}{=} K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} G(\tilde{v}_i) e^{-\tilde{v}_i} \\
 &= K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{\tilde{v}_i - \log(G(\tilde{v}_i))} \\
 &\equiv K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\hat{v}_i}
 \end{aligned}$$

En la primera igualdad las variables $\{\tilde{v}_i\}$ siguen la distribución $\mathcal{P}_{\bar{\omega}}$. Aquí hemos definido $\{\hat{v}_i \equiv \{\tilde{v}_i - \log(G(\tilde{v}_i))\} = \{\tilde{v}_i(1 + \frac{\Omega^2}{\omega^2 - \Omega^2})\}$. Para encontrar la distribución sobre \hat{v} consideramos la siguiente transformación: dado que $\tilde{v} \sim \mathcal{P}_{\bar{\omega}}$ usamos el resultado del Teorema 1 (3.35) para deducir que $\hat{v} \sim \hat{\mathcal{P}}$ donde

$$\hat{\mathcal{P}}(v) = \mathcal{P}_{\bar{\omega}}\left(\frac{\omega^2 - \Omega^2}{\omega^2}v\right) \frac{\omega^2 - \Omega^2}{\omega^2}. \quad (3.70)$$

Ahora usamos esto para calcular la integral como

$$\begin{aligned}
 K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\hat{v}_i} &\stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \hat{\mathcal{P}}(v) e^{-v} \\
 &= K_0 \int dv \mathcal{P}_{\bar{\omega}}(v) e^{-\frac{\omega^2}{\omega^2 - \Omega^2}v}
 \end{aligned} \quad (3.71)$$

en donde en la segunda línea hicimos el cambio de variables obvio para simplificar el argumento de la distribución de probabilidad.

Para proceder necesitamos una información analítica sobre la forma funcional de la distribución. Inspección de la representación en serie para la integral de camino promedio 1.111 da la dependencia funcional sobre ω como

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(v) &= \frac{1}{\omega^2} f\left(\frac{\omega^2}{v}\right) \\
 \Rightarrow \mathcal{P}_{\bar{\omega}} &= \frac{1}{\omega^2 - \Omega^2} f\left(\frac{\omega^2 - \Omega^2}{v}\right),
 \end{aligned} \quad (3.72)$$

para alguna función (complicada) f . Ahora hacemos un cambio de variables $v =$

$\frac{\omega^2}{\omega^2 - \Omega^2} v$ en (3.71) que nos lleva a

$$\begin{aligned} K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\hat{v}_i} &\stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \frac{1}{\omega^2} f\left(\frac{\omega^2}{v}\right) e^{-v} \\ &= K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v} \\ &= K. \end{aligned}$$

Entonces vemos que reproducimos correctamente el propagador deseado.

En esta ocasión la estimación Monte Carlo (3.63) es, desde un principio, la correcta para el propagador de un sistema arbitrario con potencial simétrico y localizado, como lo es el potencial del oscilador armónico, el potencial con valor absoluto y el potencial de Pöschl-Teller modificado; pero es de esperarse que esta estimación no funcione para el potencial lineal ya que es asimétrico. El problema radica en que la modificación del oscilador armónico de fondo empuja las trayectorias a tomar valores más pequeños de v_i , pero no logra que estos tomen valores negativos, necesarios para maximizar la suma $\sum e^{-v_i}$, como se requiere en el caso del potencial lineal.

Potencial lineal de fondo

Para sobrepasar este problema, partimos de manera análoga al potencial oscilador armónico de fondo pero ahora con el potencial lineal de fondo, i.e. modificamos ahora la acción de la siguiente manera:

$$K = \int \mathcal{D}x e^{-\int_0^1 d\tau \left\{ \frac{m}{2i} \dot{x}^2 + t[\kappa x + V(x) - \kappa x] \right\}} \longrightarrow K_\kappa \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau)) - \kappa x} \right\rangle_\kappa, \quad (3.73)$$

en donde K_κ representa el propagador del potencial lineal con constante de acoplamiento κ . Estimamos el propagador con la función de correlación modificada como

$$K_\kappa \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau V(x(\tau)) - \kappa x} \right\rangle_\kappa = K_\kappa \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\bar{v}_i} \quad (3.74)$$

en donde ahora la discretización de la integral de línea del potencial se ve como

$$\bar{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau [V(x_i(\tau)) - \kappa x_i(\tau)] \longrightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} [V(x_i(\tau_k)) - \kappa x_i(\tau_k)]. \quad (3.75)$$

El lado derecho de (3.74) da una estimación Monte Carlo a la integral

$$K_\kappa \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\bar{v}_i} = K_\kappa \int dv \bar{\mathcal{P}}(v) e^{-v} \quad (3.76)$$

En la integral anterior, la función de distribución de probabilidad normalizada es (en el caso de un potencial lineal con constante de acoplamiento k)

$$\bar{\mathcal{P}}(v) = \frac{1}{K_\kappa} \int \mathcal{D}x \delta \left(v - \int d\tau (k - \kappa)x \right) e^{-\int d\tau [\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \kappa x]} \quad (3.77)$$

$$= \mathcal{P}_{\kappa, \kappa'}(v) \quad (3.78)$$

$$= \frac{K_0}{K_\kappa} e^{-\frac{\kappa}{k-\kappa}v} \mathcal{P}_{\bar{\kappa}}(v) \quad (3.79)$$

$$= \left[e^{\frac{\kappa t}{2}(x+y) - \frac{\kappa^2 t^3}{24}} \right] e^{-\frac{\kappa}{k-\kappa}v} \mathcal{P}_{\kappa'}(v), \quad (3.80)$$

donde en $\mathcal{P}_{\kappa'}(v)$ reemplazamos $k \rightarrow k' = k - \kappa$ en $\mathcal{P}(v)$, que es el PDF (1.110) del potencial lineal. En la Figura 3.13 podemos ver la forma del PDF (3.80).

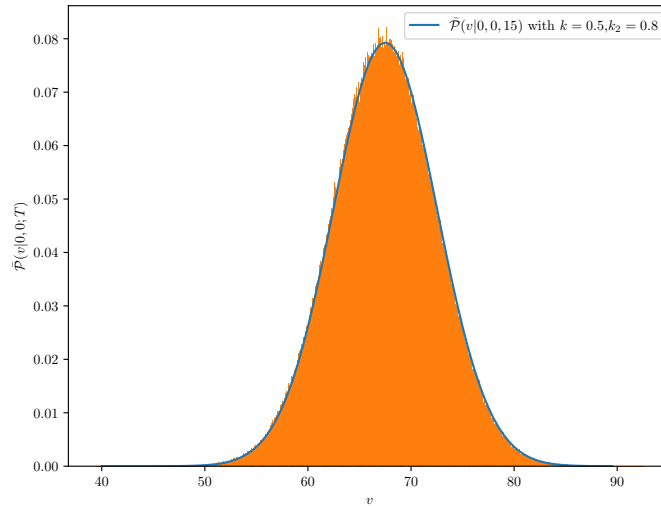


Figura 3.13: Función de distribución de probabilidad $\bar{\mathcal{P}}(v)$ con $x = y = 0$. La línea azul sólida representa la función analítica y debajo de la curva el histograma generado por el algoritmo. Aquí k_2 representa κ .

Como lo hemos estado haciendo, factorizaremos la función de distribución de

probabilidad $\mathcal{P}_{\bar{\kappa}}(v)$ de $\bar{\mathcal{P}}(v)$, para reescribir la integral (3.76) así

$$K_{\kappa} \int dv \bar{\mathcal{P}}(v) e^{-v} = K_0 \int dv M(v) \mathcal{P}_{\bar{\kappa}}(v) e^{-v} \quad (3.81)$$

donde hemos identificado la función multiplicativa $M(v)$ como

$$M(v) = e^{-\frac{\kappa}{k-\kappa}v}. \quad (3.82)$$

Demostremos que la estimación Monte Carlo (3.81) es la correcta. Para lograr esto, interpretemos el factor multiplicativo $M(v)$ como una transformación de los valores de $\{\bar{v}_i\}$ como sigue (nuevamente notemos que esto **no** es una compensación, solo una forma conveniente de entender qué se está calculando con la integral): tomamos la integral (3.81), vemos que corresponde a una estimación Monte Carlo de

$$\begin{aligned} K_0 \int dv M(v) \mathcal{P}_{\bar{\kappa}}(v) e^{-v} &\stackrel{MC}{=} K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} M(\bar{v}_i) e^{-\bar{v}_i} \\ &= K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{\bar{v}_i - \log(M(\bar{v}_i))} \\ &\equiv K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\check{v}_i} \end{aligned}$$

En la primera igualdad las variables $\{\bar{v}_i\}$ siguen la distribución $\mathcal{P}_{\bar{\kappa}}$. Aquí hemos definido $\{\check{v}_i \equiv \{\bar{v}_i - \log(M(\bar{v}_i))\} = \{\bar{v}_i(1 + \frac{\kappa}{k-\kappa})\}$. Para encontrar la distribución sobre \check{v} consideramos la siguiente transformación: dado que $\bar{v} \sim \mathcal{P}_{\bar{\kappa}}$ usamos el resultado del Teorema 1 (3.35) para deducir que $\check{v} \sim \check{\mathcal{P}}$ donde

$$\check{\mathcal{P}}(v) = \mathcal{P}_{\bar{\kappa}}\left(\frac{k-\kappa}{\kappa}v\right) \frac{k-\kappa}{k}. \quad (3.83)$$

Ahora usamos esto para calcular la integral como

$$K_0 \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\check{v}_i} \stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \check{\mathcal{P}}(v) e^{-v} \quad (3.84)$$

$$= K_0 \int dv \mathcal{P}_{\bar{\kappa}}(v) e^{-\frac{k}{k-\kappa}v} \quad (3.85)$$

en donde en la segunda línea hicimos el cambio de variables obvio para simplificar el argumento de la distribución de probabilidad.

Para proceder necesitamos una información analítica sobre la forma funcional de la distribución. Inspección de la forma funcional para la integral de camino promedio 1.110 da la dependencia funcional sobre κ como

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(v) &= \frac{1}{k} f\left(\frac{v}{k}\right) \\ \Rightarrow \mathcal{P}_{\bar{\kappa}} &= \frac{1}{k - \kappa} f\left(\frac{v}{k - \kappa}\right),\end{aligned}\quad (3.86)$$

para alguna función f . Ahora hacemos un cambio de variables $v = \frac{k}{k - \kappa} v$ en (3.85) que nos lleva a

$$\begin{aligned}K_0 \frac{1}{N_L} \sum_i^{N_L} e^{-\check{v}_i} &\stackrel{MC}{=} K_0 \int dv \frac{1}{k} f\left(\frac{v}{k}\right) e^{-v} \\ &= K_0 \int dv \mathcal{P}(v) e^{-v} \\ &= K.\end{aligned}$$

Vemos que reproducimos correctamente el propagador deseado.

Una vez que hemos mostrado de forma detallada las correcciones que hacemos a las estimaciones Monte Carlo al propagador, mostramos los resultados obtenidos en la aproximación del logaritmo del propagador para diversos sistemas a valores grandes de t en el próximo capítulo.

Capítulo 4

Resultados

Una de las formas para demostrar que los métodos presentados en el capítulo anterior nos ayudan a disminuir el problema de sobre muestreo en el formalismo línea de mundo Monte Carlo es a través de la reproducción de resultados bien establecidos.

Usaremos los cálculos analíticos de los diversos propagadores mostrados en el Capítulo 1 para comparar las aproximaciones al logaritmo de cada una de estas expresiones generadas con el método numérico. Además, mostramos para los sistemas que admiten estados ligados una aproximación a la energía del estado base.

Comenzaremos mostrando los resultados obtenidos con el método del prefactor y posteriormente con los del segundo método de modificación de la acción.

4.1. Método del prefactor

Recordemos que para la implementación de este método es necesario el conocimiento de la distribución de probabilidad del sistema con el que estamos trabajando o en los casos para los cuales podemos calcular el cociente de las dos distribuciones para poder dividir sobre el factor de compensación. En este trabajo contamos solamente con el conocimiento analítico de la distribución de probabilidad del oscilador armónico y del potencial lineal, por lo tanto solo podemos analizar estos dos sistemas mediante este método. Comenzamos revisando el oscilador armónico.

4.1.1. Oscilador armónico

En la sección 3.1 mostramos la forma analítica del propagador del oscilador armónico en el espacio euclideo (3.1) y vimos la comparación con la estima-

ción numérica sin ninguna modificación, es decir, con la implementación del algoritmo original Yloop. En este momento presentamos la aproximación del propagador del oscilador armónico con el método del prefactor.

Para comenzar debemos reconocer que el oscilador armónico es un potencial simétrico, por que lo debemos usar el oscilador armónico de fondo. En este caso es posible encontrar la forma exacta del factor de compensación, entonces la expansión perturbativa del propagador incluyendo el factor de compensación se ve como

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= K_0 \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau \frac{1}{2} m \omega^2 x^2} \right\rangle_{\Omega} \\
&\rightarrow \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i \Omega}}{F(v_i \Omega)} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i \Omega}}{\sqrt{\frac{\sinh(\Omega t)}{\Omega t}} e^{-\frac{\Omega^2}{\omega^2} v_i}} \quad (4.1)
\end{aligned}$$

con $x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau)$. En estas expresiones pusimos la forma en la que vamos a discretizar el valor esperado. Finalmente, para la implementación numérica, es necesario discretizar la integral del argumento de la exponencial en el valor esperado, que en este caso es la misma que en el algoritmo original, con la diferencia de que las trayectorias fueron generadas bajo la influencia del oscilador armónico de fondo. Entonces

$$v_i = \frac{m\omega^2}{2} \int_0^1 d\tau x_i^2(\tau) \rightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \frac{m\omega^2}{2} x^2(\tau_k). \quad (4.2)$$

Con esta relación y con la discretización explícita del valor esperado ya somos capaces de calcular numéricamente el propagador. Nuevamente fijamos los parámetros $m = \omega = 1$ y los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre.

En la Figura 4.1 podemos observar una comparación de $-\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (3.1) y la estimación numérica (4.1) calculada a través del algoritmo Yloop modificado con el prefactor para un valor de la frecuencia angular $\Omega = 0.75$. La línea azul cielo muestra el resultado del propagador si solo utilizamos el algoritmo Yloop modificado sin el prefactor, la línea con puntos rojos denota la expresión (4.1) en donde se ha usado el algoritmo modificado con la inclusión del factor de compensación. A diferencia de la Figura 3.2, en donde notamos una buena compatibilidad entre el resultado analítico y numérico en un intervalo de tiempo aproximado de $t \in [0, 60]$ y una

discrepancia a partir de $t > 60$ evidenciando el problema de sobre muestreo, en esta ocasión vemos que la compatibilidad se extiende, en la Figura 4.1, hasta $t = 100$.

Podemos aprender de esta Figura 4.1 la importancia que tiene en el desarrollo de este trabajo las distribuciones de probabilidad, aprendimos que la modificación del algoritmo Yloop por un término cuadrático modifica el muestreo de las trayectorias y por lo tanto la estimación del propagador, hecho que no fue notificado en el trabajo inicial de O. Corradini y M. Muratori [58] puesto que a tiempos pequeños no es notable esta diferencia; esto puede ser entendido observando la relación (3.22), en donde podemos notar que el comportamiento de α depende del tiempo, para valores de t pequeños α va a ser pequeño, ocultando así la diferencia que hace esta modificación en la distribución de velocidad gaussiana, sin embargo, se vuelve evidente la discrepancia a tiempos grandes.

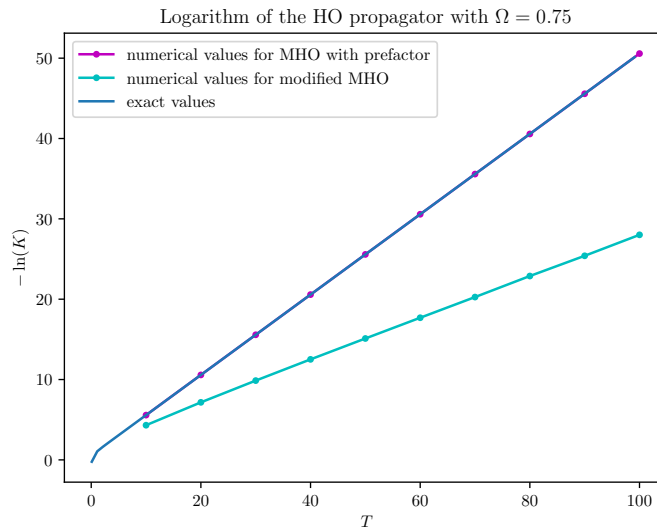


Figura 4.1: Gráfica con $m = 1$, $\omega = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $-\ln(K)$ del oscilador armónico. MHO significa *Modified Harmonic Oscillator* y representa el resultado del algoritmo Yloop modificado.

Es normal preguntarnos si esta compatibilidad se extiende para valores mayores del tiempo, y tal como se puede apreciar en la Figura 4.2 la compatibilidad entre la estimación numérica y la analítica se extiende a un valor de $t = 200$, que en principio puede seguir con un valor adecuado de la frecuencia angular Ω del oscilador armónico de fondo.

Esta última afirmación nos genera una nueva duda: ¿Cómo escogemos el valor

adecuado de la frecuencia angular Ω del oscilador armónico de fondo tal que reproduzca de manera confiable la estimación del logaritmo del propagador? La respuesta no es trivial desde que el cálculo del propagador depende de muchos parámetros como la masa m del sistema, las constantes de los potenciales, los puntos finales x e y , etc.; y tal como se ha visto en los resultados de J. P. Edwards et. al. [24], modificaciones con diferentes valores conducen a variaciones en las estimaciones numéricas (generalmente entre mayor es el valor de un parámetro mayor será la incompatibilidad entre la estimación numérica y la analítica).

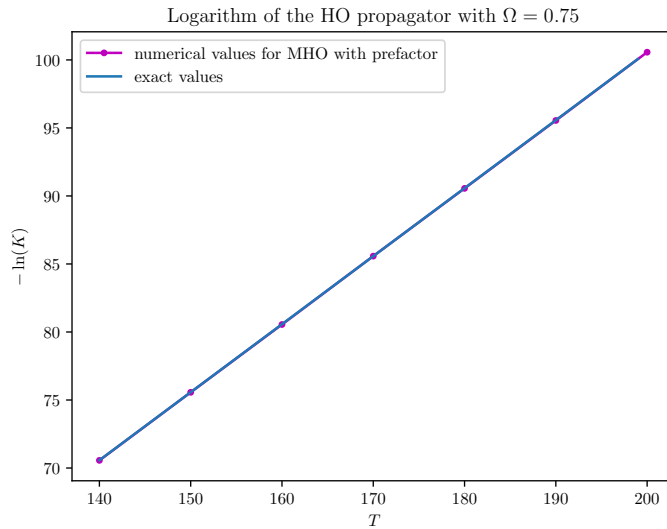


Figura 4.2: Gráfica con $m = 1$, $\omega = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $-\ln(K)$ del oscilador armónico.

Observar como estas desviaciones toman lugar según la modificación de todas los parámetros con los que cuenta el propagador y sus distintas combinaciones de valores sería una labor ardua en el sentido computacional. Desde nuestra experiencia podemos afirmar que el valor de la frecuencia del oscilador armónico de fondo Ω esta relacionado con el valor que usamos para la constante del potencial del sistema que estamos analizando (en este caso $\omega = 1$), aunque no conocemos analíticamente una relación exacta, a través de distintas simulaciones observamos que los valores de Ω no deben estar muy alejados con los de ω para obtener una buena precisión. En el Apéndice A mostramos pruebas de convergencia sobre un valor fijo del propagador variando la frecuencia angular Ω . En la Figura 4.3 observamos la estimación del logaritmo del oscilador armónico

para dos valores distintos de Ω ; en la subfigura (a) notamos que con un valor de $\Omega = 1.5$ obtenemos nuevamente una buena compatibilidad entre ambas distribuciones en una ventana de tiempo $t \in [10, 100]$, mientras que en (b) la compatibilidad se pierde desde un comienzo, en donde el valor de $\Omega = 5.0$ ya es demasiado grande (en comparación con el valor $\omega = 1$), haciendo que el factor de compensación sobre estime el valor del logaritmo del propagador.

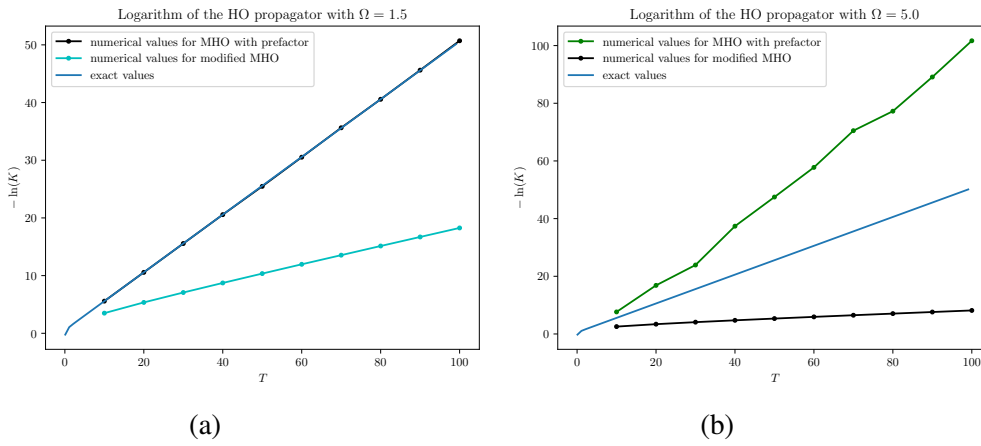


Figura 4.3: Comparación de la estimación de $-\ln(K)$ para el oscilador armónico para distintos valores de Ω . Se observa en (b) que para un valor grande de Ω en comparación con ω ya no reproduce correctamente el logaritmo del propagador.

De las figuras antes mostradas podemos mencionar que hemos sobrepasado (o al menos disminuido) el problema de sobre muestreo a través de este método del prefactor, sin embargo, es una gran limitante que solo se pueda aplicar para los sistemas cuyo potencial de camino promedio o función de distribución de probabilidad sea conocido, ya que, en general, no es trivial su cálculo. En la siguiente sección mostraremos que el método de la modificación a la acción nos ayuda a sobrepasar esta dificultad y, en ese sentido, es más universal; pero antes de hacerlo veamos el resultado de esta modificación para un sistema del cual si conocemos su distribución de probabilidad: el potencial lineal.

4.1.2. Potencial lineal

Igualmente que en el caso del oscilador armónico, en la sección 3.1 mostramos la forma analítica del propagador del potencial lineal en el espacio euclideo (3.10) y vimos la comparación con la estimación numérica sin ninguna modificación. Mostramos ahora la aproximación al propagador del potencial lineal con el método del prefactor.

El potencial lineal es un potencial asimétrico, por lo que debemos usar el potencial lineal de fondo. Como se ha mencionado con anterioridad, en este caso es posible encontrar la forma exacta del factor de compensación, entonces la expansión perturbativa del propagador y su respectiva discretización incluyendo el factor de compensación es la siguiente

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= K_0 \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau kx} \right\rangle_{\beta} \\
&\rightarrow \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i^{\beta}}}{H(v_i^{\beta})} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \frac{e^{-v_i^{\beta}}}{\left[e^{\frac{\kappa t}{2}(x+y) - \frac{\kappa^2 t^3}{24}} \right] e^{-\frac{\kappa}{k} v_i}} \quad (4.3)
\end{aligned}$$

con $x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}}q(\tau)$. La discretización de la integral de línea del potencial en el argumento de la exponencial es, nuevamente, la misma que en el algoritmo original, destacando que ahora la generación de las trayectorias es bajo la influencia del potencial lineal de fondo. De esta forma

$$v_i = k \int_0^1 d\tau x_i(\tau) \rightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} k x(\tau_k). \quad (4.4)$$

Con esta relación y con la discretización explícita del valor esperado ya somos capaces de calcular numéricamente el propagador. Fijamos los parámetros $m = 1$, $k = 0.5$ y los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre.

En la Figura 4.4 podemos observar una comparación de $\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (3.10) y la estimación numérica (4.3) calculada a través del algoritmo Yloop modificado linealmente con el prefactor o factor de compensación con un valor de la constante de acoplamiento del potencial lineal de fondo de $\kappa = 0.4$. La línea verde muestra el resultado del propagador si solo utilizamos el algoritmo Yloop modificado linealmente sin el prefactor, la línea con puntos rojos denota la expresión (4.3) en donde se ha usado el algoritmo modificado con la inclusión del factor de compensación. A diferencia de la Figura 3.5, en donde notamos una buena compatibilidad entre el resultado analítico y numérico en un intervalo de tiempo aproximado de $t \in [2, 12]$ y una discrepancia a partir de $t > 12$ evidenciando el problema de sobre muestreo, en esta ocasión vemos que la compatibilidad se extiende, en la Figura 4.4, hasta $t = 30$. Observamos buena compatibilidad incluso para un valor muy grande de t , considerando que para este sistema los problemas de *overflow* aparecen apro-

ximadamente para un valor de $t = 40$. Recalamos el valor muy semejante entre las constantes de acoplamiento κ y k , reafirmando nuestra observación de que estos valores no deben estar muy dispersos entre si. En la Figura 4.5 se muestra una comparación de la estimación del $\ln(K)$ para distintos valores de κ en la que se puede observar la discrepancia a tiempos grandes para aquellos valores de κ que están más alejados del valor $k = 0.5$, mostrando que con $\kappa = 0.4$ y $\kappa = 0.6$, valores relativamente cercanos a k , obtenemos una buena aproximación.

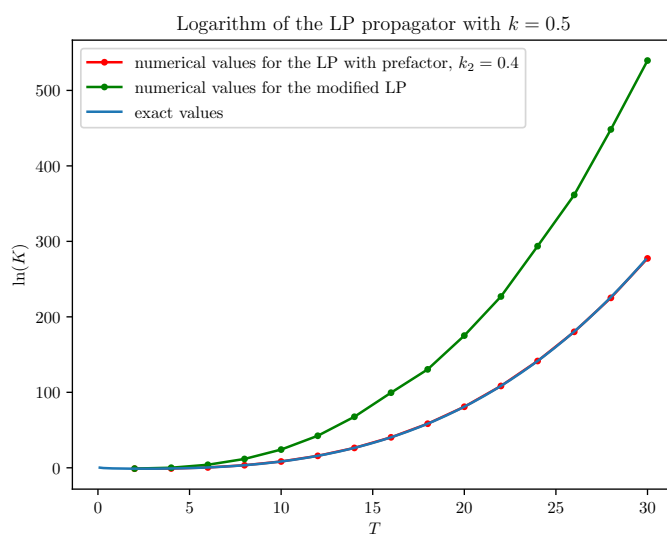


Figura 4.4: Gráfica con $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, $N_L = 500000$ y $N_p = 5000$ para el $\ln(K)$ del potencial lineal. LP significa *Linear Potential* y representa el resultado del algoritmo Yloop modificado linealmente. En este caso k_2 toma el rol de κ .

Con estos resultados es evidente que hemos mejorado las estimaciones de los propagadores del oscilador armónico y el potencial lineal a tiempos grandes, cuyas funciones de distribución de probabilidad son conocidas, pero para el caso donde tengamos un sistema cuyo PDF no sea conocido necesitaremos la introducción del método de la modificación de la acción, en donde analizamos estos mismos potenciales y además otros dos en donde desconocemos dichas funciones de distribución de probabilidad.

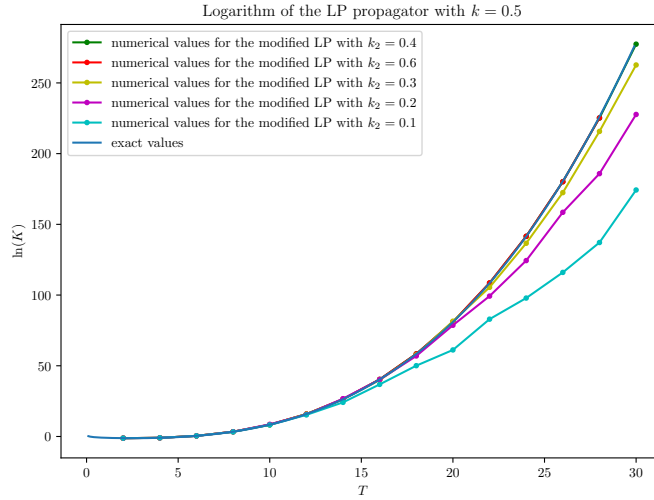


Figura 4.5: Gráfica con $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, $N_L = 500000$ y $N_p = 5000$ para el $\ln(K)$ del potencial lineal en donde se muestra la estimación numérica para valores distintos de κ . En este caso k_2 toma el rol de κ .

4.2. Método de la modificación de la acción

Con la introducción del método de la modificación de la acción somos capaces de implementar la filosofía que se obtiene con el método del prefactor, esto es, modificar las trayectorias y compensar el sesgo introducido, sin la necesidad de conocer las funciones de distribución. Para la implementación de este método solo es necesario saber que potencial de fondo utilizar, dependiendo si el sistema a estudiar viene dado por un potencial simétrico o asimétrico. Como muestra de que este método puede ser aplicado a una mayor variedad de potenciales, ahora estudiamos, además del oscilador armónico, el potencial lineal con valor absoluto y el potencial modificado de Pöschl-Teller como potenciales simétricos. Terminamos el análisis con el potencial lineal y mostramos un sistema que por primera vez se puede aproximar con este formalismo línea de mundo Monte Carlo, la partícula libre.

4.2.1. Oscilador armónico

Comparamos nuevamente la forma del propagador del oscilador armónico en el espacio euclideo (3.1) con la estimación numérica realizada a través del método de la modificación de la acción con el algoritmo Yloop modificado. La expan-

sión perturbativa del propagador y su respectiva discretización se ven como

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= K_{\Omega} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right)} \right\rangle_{\Omega} \\
&\rightarrow K_{\Omega} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} \\
&= \sqrt{\frac{m\Omega}{2\pi \sinh(\Omega t)}} e^{-\frac{m\Omega}{2 \sinh(\Omega t)} [(x^2 + y^2) \cosh(\Omega t) - 2xy]} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i}
\end{aligned} \tag{4.5}$$

con $x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau)$. Aquí usamos la misma masa m tanto como para el oscilador armónico estudiado como para el potencial de fondo estilo oscilador armónico, diferenciándose solo en sus frecuencias de oscilación. Para la implementación numérica es necesario discretizar la integral del argumento de la exponencial en el valor esperado, que en este caso se ve de la siguiente manera

$$\tilde{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau \left[\frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2(\tau) - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau) \right] \rightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \left[\frac{1}{2} m (\omega^2 - \Omega^2) x_i^2(\tau_k) \right]. \tag{4.6}$$

Con esta relación y con la discretización explícita del valor esperado ya somos capaces de implementar el método numérico. Fijamos los parámetros $m = 1$, $\omega = 1$, los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre. En la Figura 4.6 podemos observar una comparación de $-\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (3.1) y la estimación numérica (4.5) calculada a través del algoritmo Yloop modificado con el método de la modificación de la acción para un valor de la frecuencia angular $\Omega = 0.75$. La línea roja muestra el resultado de la estimación numérica si solo utilizamos el algoritmo Yloop original, la línea sólida amarilla con puntos denota la expresión (4.5) en donde se ha usado el algoritmo modificado con la modificación a la acción. En esta Figura 4.6 podemos observar la discrepancia entre la estimación numérica y la analítica usando el algoritmo original y como el método de la modificación de la acción corrige esta incompatibilidad para tiempos de t grandes, en donde hemos extendido la ventana (el rango) hasta un valor de $t = 300$.

Este resultado nos permite estimar la energía del estado base E_0 a partir de la pendiente de $-\ln(K)$ como función del tiempo t . Usando ensambles con $N_L = 20000$ lazos y $N_p = 2000$ puntos por lazo, estimamos el gradiente a través de un ajuste lineal sobre una región de la gráfica donde consideramos que nuestros resultados numéricos muestran buena linealidad. De la gráfica observamos que, a diferencia del trabajo de James P. Edwards et. al. [24], obtenemos buena lineali-

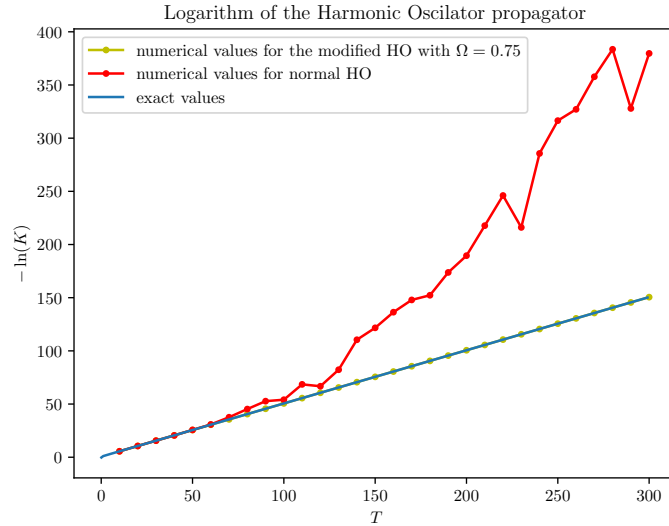


Figura 4.6: Gráfica con $m = 1$, $\omega = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $-\ln(K)$ del oscilador armónico utilizando el método de la modificación de la acción.

dad de las estimaciones numéricas incluso a tiempos grandes, por lo que escoger un buen intervalo ahora no es un problema mayor, la ventana en donde realizar el ajuste en este trabajo fue más bien una decisión relacionada al poder de cómputo, ya que la estimación del estado base la hicimos realizando 50 repeticiones para cada valor de t en donde queríamos obtener el valor de $-\ln(K)$.

Por ejemplo, estimamos la energía del estado base para este sistema en un intervalo de tiempo de $t \in [5, 30]$ ¹, en donde calculamos el valor de $-\ln(K)$ 50 veces y después promediamos los resultados, con saltos en el tiempo de $t = 0.25$. Ajustamos un modelo lineal a los datos obtenidos en este intervalo usando Mathematica con la instrucción *LinearModelFit*. Nuestra estimación de la energía del estado base (para $m = 1$, $\omega = 1$, $\Omega = 0.75$, $x = y = 0$) fue

$$E_0 = 0.4999954, \quad t \in [5, 30], \quad (4.7)$$

mostrando una precisión de cinco dígitos en comparación con el resultado exacto ($E_0 = 0.5$). La principal limitación en la precisión de este resultado fue nuestra falta de recursos computacionales, puesto que en [24] realizaban mil repeti-

¹Compárese con en el trabajo [24] donde se realizó un estudio similar con una ventana de $t \in [5, 19]$

ciones y después promediaban el resultado, reduciendo considerablemente los errores por correlación, comparado a nuestro trabajo en donde fue 50 veces las repeticiones; aún así, logramos una estimación considerablemente buena ya que conseguimos 6 dígitos de precisión. La elección de la ventana es debido a esta misma limitación computacional, en principio, la compatibilidad entre el resultado analítico y el numérico nos daba para extender la ventana a tiempos mayores, pero el costo computacional para hacer dichos cálculos se vuelve muy robusto.

Podemos repetir nuestras estimaciones numéricas para diferentes valores de los parámetros del oscilador armónico, pero el objetivo principal de este trabajo fue corregir la incompatibilidad de las estimaciones a valores grandes de t , recomendamos la lectura de [24] para ver estimaciones de la energía del estado base con diferentes valores de los parámetros.

4.2.2. Potencial lineal con valor absoluto

Comparamos ahora la forma del propagador del potencial lineal con valor absoluto en el espacio euclideo (3.6) con la estimación numérica realizada a través del método de la modificación de la acción con el algoritmo Yloop modificado, ya que este potencial a estudiar es simétrico. La expansión perturbativa del propagador y su respectiva discretización se ven como

$$\begin{aligned}
 K(x, y; t, 0) &= K_{\Omega} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau \left(k|x| - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right)} \right\rangle_{\Omega} \\
 &\rightarrow K_{\Omega} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} \\
 &= \sqrt{\frac{m\Omega}{2\pi \sinh(\Omega t)}} e^{-\frac{m\Omega}{2 \sinh(\Omega t)} [(x^2+y^2) \cosh(\Omega t) - 2xy]} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i}
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

con $x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau)$ como es usual. La discretización de la integral del argumento de la exponencial en el valor esperado en este caso se ve de la siguiente forma

$$\tilde{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau \left[k|x_i(\tau)| - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau) \right] \rightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \left[k|x_i(\tau_k)| - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau_k) \right]. \tag{4.9}$$

Con esta relación y con la discretización explícita del valor esperado ya somos capaces de implementar el método numérico. Fijamos los parámetros $m = 1$, $k = 0.5$, los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre.

En la Figura 4.7 podemos observar una comparación de $-\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (3.6) y la estimación numérica (4.8) calculada a través del algoritmo Yloop modificado con el método de la modificación de la acción para un valor de la frecuencia angular $\Omega = 0.75$. La línea verde muestra el resultado de la estimación numérica si solo utilizamos el algoritmo Yloop original, la línea sólida roja con puntos denota la expresión 4.8 en donde se ha usado el algoritmo modificado con la modificación a la acción. En esta Figura 4.7 podemos observar la discrepancia entre la estimación numérica y la analítica usando el algoritmo original y como el método de la modificación de la acción corrige esta incompatibilidad para tiempos t grandes, en donde hemos extendido la ventana nuevamente (el rango) hasta un valor de $t = 300$.

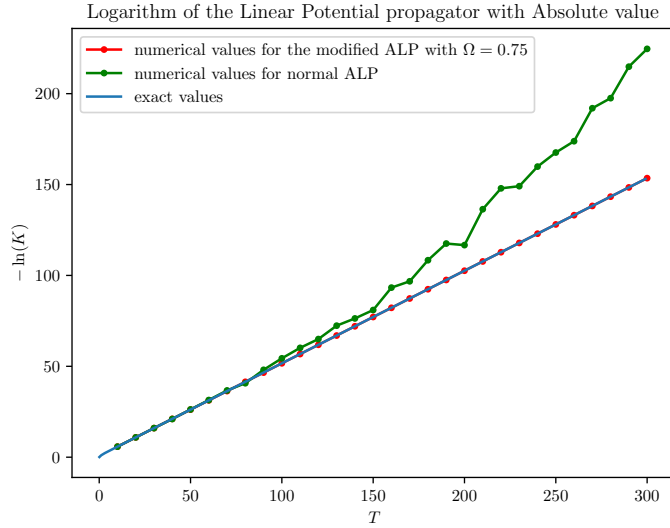


Figura 4.7: Gráfica con $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $-\ln(K)$ del potencial lineal con valor absoluto utilizando el método de la modificación de la acción.

Estimamos la energía del estado base E_0 usando ensambles con $N_L = 20000$ lazos y $N_p = 2000$ puntos por lazo, en un intervalo de tiempo $t \in [5, 30]$, en donde calculamos el valor de $-\ln(K)$ 50 veces y después promediamos los resultados, con saltos en el tiempo de $t = 0.25$. Nuestra estimación de la energía del estado base (para $m = 1$, $k = 0.5$, $\Omega = 0.75$, $x = y = 0$) para este sistema fue

$$E_0 = 0.509386, \quad t \in [5, 30], \quad (4.10)$$

mostrando una precisión de cuatro dígitos en comparación con el resultado analíti-

co $(E_0 \approx 0.509397)^2$.

4.2.3. Potencial modificado de Pöschl-Teller

Terminamos mostrando la estimación del último potencial simétrico que estudiamos en este trabajo. Comparamos el resultado analítico para el logaritmo del propagador del potencial modificado de Pöschl-Teller (3.8) con la estimación numérica realizada a través del método de la modificación de la acción con el algoritmo Yloop modificado. La expansión perturbativa del propagador y su respectiva discretización se ven como

$$\begin{aligned}
 K(x, y; t, 0) &= K_\Omega \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau \left[-\frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha x)} - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2 \right]} \right\rangle_\Omega \\
 &\rightarrow K_\Omega \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} \\
 &= \sqrt{\frac{m\Omega}{2\pi \sinh(\Omega t)}} e^{-\frac{m\Omega}{2 \sinh(\Omega t)} [(x^2+y^2) \cosh(\Omega t) - 2xy]} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

con $x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau)$. La discretización de la integral de línea del potencial a lo largo de las trayectorias se ve como

$$\tilde{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau \left[-\frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha x_i(\tau))} - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau) \right] \rightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \left[-\frac{\alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha x_i(\tau_k))} - \frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau_k) \right]. \tag{4.12}$$

Para la implementación numérica fijamos los parámetros $m = \alpha = \lambda = 1$ y los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre.

En la Figura 4.8 podemos observar una comparación de $\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (3.8) y la estimación numérica (4.11) calculada a través del algoritmo Yloop modificado con el método de la modificación de la acción para un valor de la frecuencia angular $\Omega = 0.75$. La línea amarilla muestra el resultado de la estimación numérica si solo utilizamos el algoritmo Yloop original, la línea sólida verde con puntos denota la expresión 4.11 en donde se ha usado el algoritmo modificado con la modificación a la acción. En esta Figura 4.8 podemos observar la discrepancia entre la estimación numérica y la analítica usando el algoritmo original, que en este caso es un submuestreo, y co-

²La aproximación aquí es debido a que E_0 depende de los ceros de la función de Airy y de su derivada, donde hemos cortado a seis dígitos de precisión los valores.

mo el método de la modificación de la acción corrige esta incompatibilidad para tiempos de t grandes, en donde hemos extendido la ventana nuevamente (el rango) hasta un valor de $t = 300$.

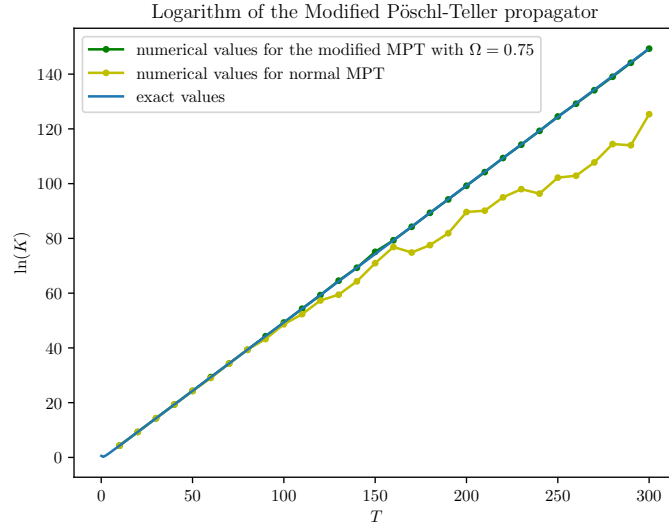


Figura 4.8: Gráfica con $m = 1$, $\alpha = \lambda = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $\ln(K)$ del potencial modificado Pöschl-Teller utilizando el método de la modificación de la acción.

Estimamos la energía del estado base E_0 usando ensambles con $N_L = 20000$ lazos y $N_p = 2000$ puntos por lazo, en un intervalo de tiempo $t \in [30, 50]$, repitiendo el mismo proceso que en los dos sistemas anteriores. Nuestra estimación de la energía del estado base (para $m = 1$, $\alpha = \lambda = 1$, $\Omega = 0.75$, $x = y = 0$) para este sistema fue

$$E_0 = -0.50011517, \quad t \in [30, 50], \quad (4.13)$$

mostrando una precisión de tres dígitos en comparación con el resultado exacto ($E_0 = -0.5$).

4.2.4. Potencial lineal

Estudiamos nuestro sistema asimétrico, el potencial lineal. Comparamos el resultado analítico del logaritmo del propagador para el potencial lineal (3.10) con la aproximación numérica realizada a través del algoritmo Yloop modificado

linealmente con el método de la modificación de la acción. La expansión perturbativa del propagador y su respectiva discretización es la siguiente:

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= K_\kappa \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau (kx - \kappa x)} \right\rangle_\beta \\
&\longrightarrow K_\kappa \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi t}} \exp \left\{ \left[-\frac{m(x-y)^2}{2t} - \frac{\kappa t}{2}(x+y) + \frac{\kappa^2 t^3}{24m} \right] \right\} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i}
\end{aligned} \tag{4.14}$$

con $x(\tau) = (x-y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}}q(\tau)$. La discretización de la integral de línea del potencial a lo largo de las trayectorias se ve como

$$\tilde{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau [kx_i(\tau) - \kappa x_i(\tau)] \rightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} [(k - \kappa)x_i(\tau_k)]. \tag{4.15}$$

Para la implementación numérica fijamos los parámetros $m = 1$, $k = 0.5$ y los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre.

En la Figura 4.9 podemos observar una comparación de $\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (3.10) y la estimación numérica (4.14) calculada a través del algoritmo Yloop modificado linealmente con el método de la modificación de la acción para un valor de la constante de acoplamiento $\kappa = 0.48$. La línea amarilla muestra el resultado de la estimación numérica si solo utilizamos el algoritmo Yloop original, la línea sólida roja con puntos denota la expresión 4.14 en donde se ha usado el algoritmo modificado linealmente con la modificación a la acción. En esta Figura 4.9 podemos observar la discrepancia entre la estimación numérica y la analítica usando el algoritmo original, que en este caso es un submuestreo nuevamente, y como el método de la modificación de la acción corrige esta incompatibilidad para tiempos de t grandes, en donde hemos extendido la ventana (el rango) hasta un valor de $t = 40$.

En este caso no hicimos una estimación del estado base puesto que este sistema no admite estados ligados. Aún así, utilizamos este potencial como muestra de que el algoritmo Yloop modificado linealmente sirve para reducir el problema de sobre muestreo para un potencial asimétrico.

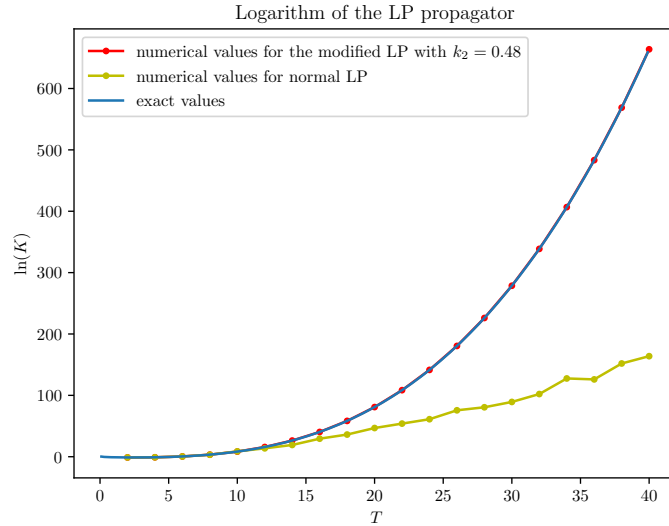


Figura 4.9: Gráfica con $m = 1$, $k = 0.5$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $\ln(K)$ del potencial lineal utilizando el método de la modificación de la acción.

4.2.5. Partícula libre

Como una curiosidad de este método de la modificación de la acción, es que si fijamos el potencial a estudiar idénticamente a cero $V(x(\tau)) = 0$ deberíamos ser capaces de obtener, a través de este formalismo, una estimación numérica del propagador libre. Aunque no es un resultado sorprendente, este formalismo no podía reproducir esta estimación a través de la generación de la nube de lazos (o ensamble de lazos), puesto que ya se daba como conocido el propagador de la partícula libre, desde que se usa como factor de normalización en la expansión perturbativa del propagador.

Cualquiera de los dos algoritmos presentados en este trabajo, ya sea el algoritmo Yloop modificado o el modificado linealmente permiten calcular la partícula libre. A estas alturas la expansión perturbativa del propagador es bastante familiar,

pero la escribimos nuevamente para mostrar los detalles.

$$\begin{aligned}
K(x, y; t, 0) &= K_{\Omega} \left\langle e^{-t \int_0^1 d\tau (0 - \frac{1}{2} m \Omega^2 x^2)} \right\rangle_{\Omega} \\
&\longrightarrow K_{\Omega} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i} \\
&= \sqrt{\frac{m\Omega}{2\pi \sinh(\Omega t)}} e^{-\frac{m\Omega}{2 \sinh(\Omega t)} [(x^2 + y^2) \cosh(\Omega t) - 2xy]} \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} e^{-\tilde{v}_i}
\end{aligned} \tag{4.16}$$

con $x(\tau) = (x - y)\tau + y + \sqrt{\frac{t}{m}} q(\tau)$. La discretización de la integral de línea del potencial a lo largo de las trayectorias es:

$$\tilde{v}_i \equiv \int_0^1 d\tau \left[-\frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau) \right] \longrightarrow \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \left[-\frac{1}{2} m \Omega^2 x_i^2(\tau_k) \right]. \tag{4.17}$$

Fijamos el parámetro de la masa del oscilador armónico como $m = 1$ y los puntos extremos fijos a $x = y = 0$ para dejar el parámetro t libre.

En la Figura 4.10 podemos observar una comparación de $\ln(K)$ como función del tiempo entre la expresión analítica (1.39) en el espacio euclideo y la estimación numérica (4.16) calculada a través del algoritmo Yloop modificado con el método de la modificación de la acción para un valor de la frecuencia angular $\Omega = 0.01$. La línea roja sólida con puntos denota la expresión (4.16) en donde se ha usado el algoritmo modificado con la modificación a la acción. En este caso, al tratarse de la partícula libre, necesitamos una contribución muy pequeña del potencial de fondo, por esa razón la elección de un valor pequeño para la frecuencia angular Ω . Vemos que podemos estimar de manera correcta el logaritmo del propagador para un tiempo grande $t = 300$.

Es la primera ocasión en la que se estima esta cantidad física con el formalismo línea de mundo Monte Carlo por lo que no es conocido si este sistema exhibe el problema de sobre muestreo, sin embargo, es una buena demostración de que la sustracción del potencial de la acción compensa la modificación en el algoritmo de la generación de las trayectorias.

Es bien conocido que la partícula libre no admite estados ligados e incluso no es un sistema físico normalizable, pero como mencionamos en el Capítulo 1, este sistema fue de especial relevancia ya que las expansiones perturbativas del propagador las hicimos a través de las trayectorias que satisfacen la ecuación de movimiento de la partícula libre con sus respectivas condiciones de frontera; además, el propagador de este sistema fue utilizado como factor de normaliza-

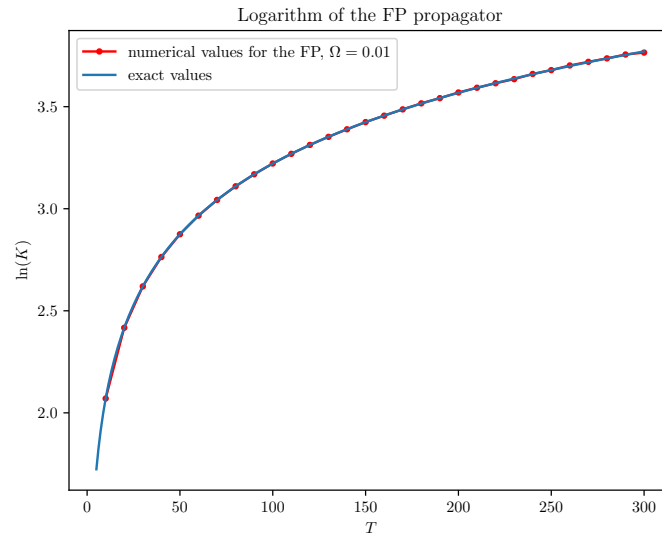


Figura 4.10: Gráfica con $m = 1$, $x = 0 = y$, $N_L = 500k$ y $N_p = 5k$ para el $\ln(K)$ de la partícula libre usando el algoritmo Yloop modificado.

ción en dicha expansión.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos revisado el formalismo funcional de la mecánica cuántica para estudiar la evolución temporal de sistemas cuánticos no relativistas. Mostramos que, a través de la formulación de la integral de camino de Feynman, somos capaces de utilizar un método numérico estilo Monte Carlo que utiliza la generación de trayectorias representativas, a las que llamamos lazos línea de mundo, para aproximar el propagador de una sola partícula no relativista. La principal característica del método línea de mundo Monte Carlo es que solo el tiempo propio es discretizado, no el espacio-tiempo, hecho que permite preservar la simetría del grupo de Lorentz (en el contexto de QFT), simetría de norma y simetría quiral en el caso del estudio de fermiones; en el caso no relativista, permite conservar simetrías de traslación y rotación ya que en este caso solo el tiempo real es discretizado. Otra característica de este método es que la generación de las trayectorias es independiente del potencial a estudiar, permitiendo ser aplicado a una gran variedad de sistemas físicos; pero esta universalidad tiene un precio a pagar, dado que las trayectorias modelan un movimiento browniano libre se van a extender conforme pasa el tiempo haciendo que, para potenciales que están localizados, se presente un problema de falta de precisión a tiempos grandes, el llamado problema de sobre muestreo.

En este trabajo nos enfocamos en desarrollar métodos que nos ayudan a limitar esta pérdida de precisión a tiempos grandes. Para lograr tal cometido fue necesario modificar las trayectorias de una forma en la que se concentraran en la región en donde el potencial de interés tenga una mayor contribución (o intensidad), sin introducir un sesgo debido a estas modificaciones o cambios.

Dada que la extensión espacial de las trayectorias se debía a la naturaleza del movimiento browniano, es decir, debido a la distribución de velocidades gaussianas, fue una idea natural modificar la forma en que dichas trayectorias eran generadas a este nivel, por lo que se estudió el efecto de introducir un término cuadrático en la distribución de velocidades en el caso de potenciales simétricos;

y un término lineal en la distribución de velocidades en el caso de potenciales asimétricos. Para estudiar cómo es que esta modificación afectaba la generación de las trayectorias fue necesario la revisión de una de las transformaciones integrales del propagador: el potencial de camino promedio.

Mostramos en el capítulo 3 cálculos analíticos para determinar los factores necesarios a introducir para compensar el sesgo de las modificaciones que realizamos a la generación de trayectorias, que sirven tanto para potenciales simétricos como asimétricos y, además, mostramos un método nuevo el cual funciona incluso en ocasiones donde no se conocen de forma analítica las funciones de distribución de probabilidad para los sistemas que se están estudiando; solo el conocimiento del propagador de los potenciales de fondo, que en este caso fueron el oscilador armónico y el potencial lineal, eran necesarios.

Mostramos la eficiencia y el alcance de estas modificaciones al método numérico estudiando cuatro diversos potenciales cuyo propagador es conocido de forma cerrada. Logramos reducir la incompatibilidad entre las expresiones analíticas y las estimaciones numéricas para valores grandes del tiempo, logrando una buena aproximación al propagador, y por lo tanto, nos permitió dar una buena estimación a la medición de una cantidad física: la energía del estado base para los potenciales que admitían estados ligados.

Con estos resultados hemos limitado el problema de sobre muestreo en el contexto de mecánica cuántica no relativista. Pero, hasta ahora, nuestro tratamiento solo contempla partículas bosónicas, en donde no se incluye el espín.

Queda como trabajo a futuro la inclusión de sistemas fermiónicos y el estudio de potenciales singulares, como el potencial delta de Dirac, el potencial de Coulomb y el potencial de Yukawa, potenciales estudiados en [24]. Asimismo es necesario el estudio de diferentes potenciales asimétricos, puesto que estudiamos uno cuyo potencial de fondo es el mismo, sin embargo, no son muchos los sistemas que estén sujetos bajo un potencial asimétrico que acepte estados ligados y que a su vez tenga una representación cerrada del propagador.

También sería ideal explorar y comprobar que los métodos desarrollados en este trabajo funcionan correctamente en el contexto de la teoría cuántica de campos para estudiar sistemas curvos, energías de Casimir, tensores de energía-momento y estados ligados relativistas, en donde problemas relacionados con el sobre muestreo y con la aparición de singularidades en el potencial de interacción se presentan.

Finalmente es necesario seguir el estudio de las funciones de distribución de probabilidad para distintos potenciales, en donde se puede hallar aún más información no trivial que pueda ser aplicada a diferentes aspectos de la mecánica cuántica. En este trabajo el conocimiento de la forma funcional de dichas funciones han sido de gran ayuda para resolver un problema computacional.

Bibliografía

- [1] R. P. Feynman, “Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 20, pp. 367–387, Apr 1948.
- [2] R. P. Feynman, “An operator calculus having applications in quantum electrodynamics,” *Physical Review*, vol. 84, no. 1, p. 108, 1951.
- [3] R. P. Feynman, “Space-time approach to quantum electrodynamics,” *Physical Review*, vol. 76, no. 6, p. 769, 1949.
- [4] Z. Bern and D. A. Kosower, “Color decomposition of one-loop amplitudes in gauge theories,” *Nuclear Physics B*, vol. 362, no. 1-2, pp. 389–448, 1991.
- [5] Z. Bern and D. A. Kosower, “The computation of loop amplitudes in gauge theories,” *Nuclear Physics B*, vol. 379, no. 3, pp. 451–561, 1992.
- [6] M. J. Strassler, “Field theory without feynman diagrams: one-loop effective actions,” *Nuclear Physics B*, vol. 385, no. 1-2, pp. 145–184, 1992.
- [7] C. Schubert, “Perturbative quantum field theory in the string-inspired formalism,” *Physics Reports*, vol. 355, no. 2-3, pp. 73–234, 2001.
- [8] J. P. Edwards and C. Schubert, “Quantum mechanical path integrals in the first quantised approach to quantum field theory,” *arXiv preprint arXiv:1912.10004*, 2019.
- [9] Y. A. Simonov and J. Tjon, “The feynman-schwinger representation for the relativistic two-particle amplitude in field theory,” *Annals of Physics*, vol. 228, no. 1, pp. 1–18, 1993.
- [10] T. E. Nieuwenhuis, *The Feynman-Schwinger representation of field theory applied to two-body bound states*. PhD thesis, Universiteit Utrecht, 1995.

- [11] T. Nieuwenhuis and J. Tjon, “Nonperturbative study of generalized ladder graphs in a ϕ^2 & χ theory,” *Physical review letters*, vol. 77, no. 5, p. 814, 1996.
- [12] H. Gies and K. Langfeld, “Quantum diffusion of magnetic fields in a numerical worldline approach,” *Nuclear Physics B*, vol. 613, no. 1-2, pp. 353–365, 2001.
- [13] L. Moyaerts, K. Langfeld, and H. Gies, “Worldline approach to the casimir effect,” *arXiv preprint hep-th/0311168*, 2003.
- [14] H. Gies and K. Klingmüller, “Worldline algorithms for casimir configurations,” *Physical Review D*, vol. 74, no. 4, p. 045002, 2006.
- [15] H. Gies and K. Klingmüller, “Quantum energies with worldline numerics,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 39, no. 21, p. 6415, 2006.
- [16] H. Gies and K. Klingmüller, “Pair production in inhomogeneous fields,” *Physical Review D*, vol. 72, no. 6, p. 065001, 2005.
- [17] G. V. Dunne and C. Schubert, “Worldline instantons and pair production in inhomogenous fields,” *Physical Review D*, vol. 72, no. 10, p. 105004, 2005.
- [18] H. Gies and K. Langfeld, “Loops and loop clouds—a numerical approach to the worldline formalism in qed,” *International Journal of Modern Physics A*, vol. 17, no. 06n07, pp. 966–976, 2002.
- [19] H. Gies, J. Sanchez-Guillen, and R. A. Vázquez, “Quantum effective actions from nonperturbative worldline dynamics,” *Journal of High Energy Physics*, vol. 2005, no. 08, p. 067, 2005.
- [20] S. Franchino-Viñas and H. Gies, “Propagator from nonperturbative worldline dynamics,” *Physical Review D*, vol. 100, no. 10, p. 105020, 2019.
- [21] H. Gies and L. Roessler, “Vacuum polarization tensor in inhomogeneous magnetic fields,” *Physical Review D*, vol. 84, no. 6, p. 065035, 2011.
- [22] M. Schäfer, I. Huet, and H. Gies, “Energy-momentum tensors with worldline numerics,” in *International Journal of Modern Physics: Conference Series*, vol. 14, pp. 511–520, World Scientific, 2012.
- [23] M. Schäfer, I. Huet, and H. Gies, “Worldline numerics for energy-momentum tensors in casimir geometries,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 49, no. 13, p. 135402, 2016.

- [24] J. P. Edwards, U. Gerber, C. Schubert, M. A. Trejo, T. Tsiftsi, and A. Weber, “Applications of the worldline monte carlo formalism in quantum mechanics,” *Annals of Physics*, vol. 411, p. 167966, 2019.
- [25] J. Rejcek, S. Datta, N. Fazleev, J. Fry, and A. Korzeniowski, “Application of the feynman-kac path integral method in finding the ground state of quantum systems,” *Computer physics communications*, vol. 105, no. 2-3, pp. 108–126, 1997.
- [26] A. Korzeniowski, J. Fry, D. Orr, and N. Fazleev, “Feynman-kac path-integral calculation of the ground-state energies of atoms,” *Physical review letters*, vol. 69, no. 6, p. 893, 1992.
- [27] A. Korzeniowski, “On computer simulation of feynman-kac path-integrals,” *Journal of computational and applied mathematics*, vol. 66, no. 1-2, pp. 333–336, 1996.
- [28] B. J. Berne and D. Thirumalai, “On the simulation of quantum systems: path integral methods,” *Annual Review of Physical Chemistry*, vol. 37, no. 1, pp. 401–424, 1986.
- [29] N. Makri, “Numerical path integral techniques for long time dynamics of quantum dissipative systems,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 36, no. 5, pp. 2430–2457, 1995.
- [30] M. Creutz, L. Jacobs, and C. Rebbi, “Experiments with a gauge-invariant ising system,” *Physical Review Letters*, vol. 42, no. 21, p. 1390, 1979.
- [31] M. Creutz, L. Jacobs, and C. Rebbi, “Monte carlo study of abelian lattice gauge theories,” *Physical Review D*, vol. 20, no. 8, p. 1915, 1979.
- [32] M. Creutz and B. Freedman, “A statistical approach to quantum mechanics,” *Annals of Physics*, vol. 132, no. 2, pp. 427–462, 1981.
- [33] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines,” *The journal of chemical physics*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.
- [34] M. J. Westbroek, P. R. King, D. D. Vvedensky, and S. Dürr, “User’s guide to monte carlo methods for evaluating path integrals,” *American Journal of Physics*, vol. 86, no. 4, pp. 293–304, 2018.
- [35] S. Mittal, M. J. Westbroek, P. R. King, and D. D. Vvedensky, “Path integral monte carlo method for the quantum anharmonic oscillator,” *European Journal of Physics*, vol. 41, no. 5, p. 055401, 2020.

- [36] F. R. Brown and T. J. Woch, “Overrelaxed heat-bath and metropolis algorithms for accelerating pure gauge monte carlo calculations,” *Physical Review Letters*, vol. 58, no. 23, p. 2394, 1987.
- [37] A. Balaž, A. Bogojević, I. Vidanović, and A. Pelster, “Recursive schrödinger equation approach to faster converging path integrals,” *Physical Review E*, vol. 79, no. 3, p. 036701, 2009.
- [38] A. Balaž, I. Vidanović, A. Bogojević, and A. Pelster, “Ultra-fast converging path-integral approach for rotating ideal bose-einstein condensates,” *Physics Letters A*, vol. 374, no. 13-14, pp. 1539–1549, 2010.
- [39] D. Stojiljković, A. Bogojević, and A. Balaž, “Efficient calculation of energy spectra using path integrals,” *Physics Letters A*, vol. 360, no. 2, pp. 205–209, 2006.
- [40] S. Datta, J. Fry, N. Fazleev, S. Alexander, and R. Coldwell, “Feynman-kac path-integral calculations with high-quality trial wave functions,” *Physical Review A*, vol. 61, no. 3, p. 030502, 2000.
- [41] S. Alexander and R. Coldwell, “Oscillator strengths of helium computed using monte carlo methods,” *The Journal of chemical physics*, vol. 124, no. 5, p. 054104, 2006.
- [42] A. Sarsa, K. Schmidt, and W. Magro, “A path integral ground state method,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 113, no. 4, pp. 1366–1371, 2000.
- [43] G. Dunne, H. Gies, K. Klingmüller, and K. Langfeld, “Worldline monte carlo for fermion models at large n_f ,” *Journal of High Energy Physics*, vol. 2009, no. 08, p. 010, 2009.
- [44] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, and D. F. Styer, *Quantum mechanics and path integrals*. Courier Corporation, 2010.
- [45] O. Corradini and C. Schubert, “Spinning particles in quantum mechanics and quantum field theory,” *arXiv preprint arXiv:1512.08694*, 2015.
- [46] C. Grosche and F. Steiner, *Handbook of Feynman path integrals*. 1998.
- [47] J. Schwinger, “Quantum mechanics: symbolism of atomic measurements,” 2003.
- [48] J. J. Sakurai and E. D. Commins, “Modern quantum mechanics, revised edition,” 1995.

- [49] B. R. Holstein, *Topics in advanced quantum mechanics*. Courier Corporation, 2013.
- [50] S.-H. Dong, *Factorization method in quantum mechanics*, vol. 150. Springer Science & Business Media, 2007.
- [51] H. Kleinert, *Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets*. World scientific, 2009.
- [52] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, vol. 3. Elsevier, 2013.
- [53] S. Flügge, *Practical quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [54] J. P. Edwards, U. Gerber, C. Schubert, M. A. Trejo, and A. Weber, “Integral transforms of the quantum mechanical path integral: Hit function and path-averaged potential,” *Physical Review E*, vol. 97, no. 4, p. 042114, 2018.
- [55] J. P. Edwards, V. A. González-Domínguez, I. Huet, and M. A. Trejo, “Non-perturbative quantum propagators in bounded spaces,” *arXiv preprint arXiv:2110.04969*, 2021.
- [56] H. Gies, K. Langfeld, and L. Moyaerts, “Casimir effect on the worldline,” *Journal of High Energy Physics*, vol. 2003, no. 06, p. 018, 2003.
- [57] D. Mazur and J. S. Heyl, “Casimir interactions between magnetic flux tubes in a dense lattice,” *Physical Review D*, vol. 91, no. 6, p. 065019, 2015.
- [58] O. Corradini and M. Muratori, “A monte carlo approach to the worldline formalism in curved space,” *Journal of High Energy Physics*, vol. 2020, no. 11, pp. 1–23, 2020.

Apéndice A

Pruebas de convergencia

Como mencionamos en los resultados, no es sencillo saber elegir el valor de la frecuencia angular Ω del oscilador armónico de fondo o de la constante de acoplamiento κ para el potencia lineal. La decisión del valor a elegir esta relacionada con los valores que tienen los diversos parámetros de los potenciales a estudiar.

Este conocimiento fue empírico dado por las siguientes **pruebas de convergencia**. Estas pruebas consisten en calcular el valor del logaritmo del propagador para los diversos potenciales aquí estudiados en un tiempo fijo t para distintos valores de Ω y κ . Observamos para cuales valores de Ω y κ la estimación del logaritmo del propagador se acerca más al valor analítico de esta cantidad, con una cierta ventana de tolerancia (error) sobre el valor analítico.

Comenzamos con el estudio del potencial lineal con valor absoluto. En la Figura A.1 y Figura A.2 mostramos gráficos en donde comparamos la estimación numérica de $-\ln(K)$ para distintos valores de Ω , que en este caso va desde $\Omega = 0.3$ hasta $\Omega = 1.0$. La línea negra punteada representa el valor analítico del logaritmo del propagador para ese determinado tiempo t , y las líneas punteadas azules están a una diferencia del 0.05 % por arriba y por debajo del valor exacto de $-\ln(K)$, proporcionándonos una región o ventana de tolerancia sobre el valor analítico¹.

De estas pruebas podemos observar que los valores de Ω que mejoran la estimación numérica son aquellos que se acercan al valor de la constante de acoplamiento k del potencial lineal con valor absoluto con un error del valor analítico no mayor del 0.05 %. De esta manera justificamos el uso de un valor para la frecuencia angular de $\Omega = 0.75$ en nuestras simulaciones, para el caso en el que $k = 0.5$.

¹Esta ventana de tolerancia fue elegida a lo que nosotros consideramos una buena aproximación al valor analítico.

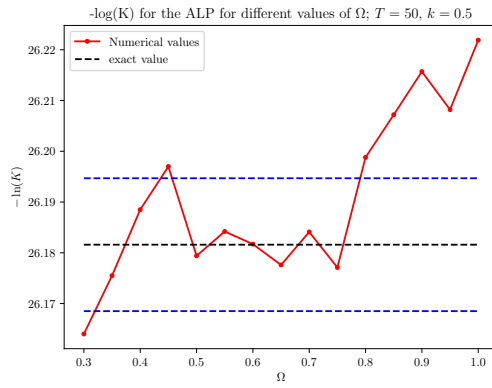
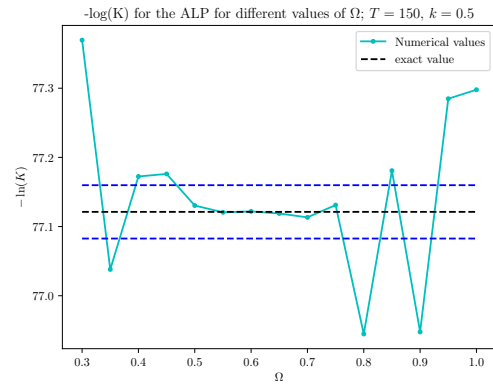
(a) $t = 50$ (b) $t = 150$

Figura A.1: Distintas pruebas de convergencia para conocer el valor adecuado a elegir de Ω analizando el potencial lineal con valor absoluto.

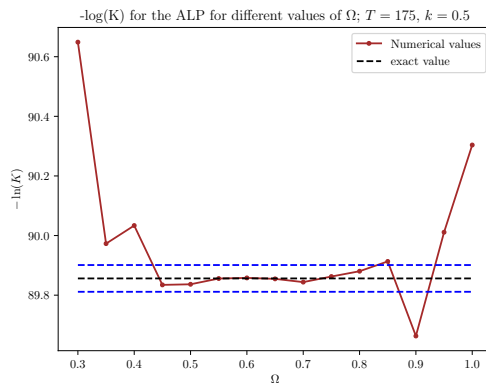
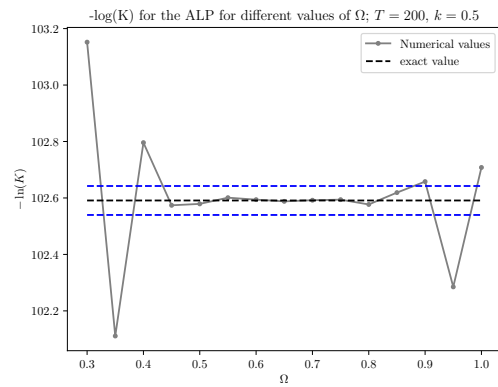
(c) $t = 175$ (d) $t = 200$

Figura A.2: Distintas pruebas de convergencia para conocer el valor adecuado a elegir de Ω analizando el potencial lineal con valor absoluto.

De igual forma, fue necesario repetir esta prueba en el caso del potencial modificado de Pöschl-Teller. Los parámetros que utilizamos en este potencial para las pruebas fue $\alpha = \lambda = 1$ por lo que esperaríamos de nuestra experiencia previa que un valor de Ω cercano a uno sería la mejor opción para reproducir el logaritmo del potencial. Sin embargo, de la Figura A.3 y Figura A.4 podemos notar que, para nuestra sorpresa, los mejores valores de Ω que podemos escoger es en un intervalo de $\Omega \in [0.45, 0.75]$ para obtener una estimación satisfactoria del propagador (en una ventana de error no mayor del 0.05 %). Afortunadamente en nuestras simulaciones escogimos un valor de $\Omega = 0.75$, por lo que nuestro parámetro esta dentro del rango de tolerancia que estas pruebas de convergencia nos arrojan.

Queda pendiente la explicación de este fenómeno a nivel teórico puesto que, como lo mencionamos anteriormente, la decisión para elegir un valor correcto de Ω para el caso del potencial modificado de Pöschl-Teller se basó en estas pruebas de convergencia.

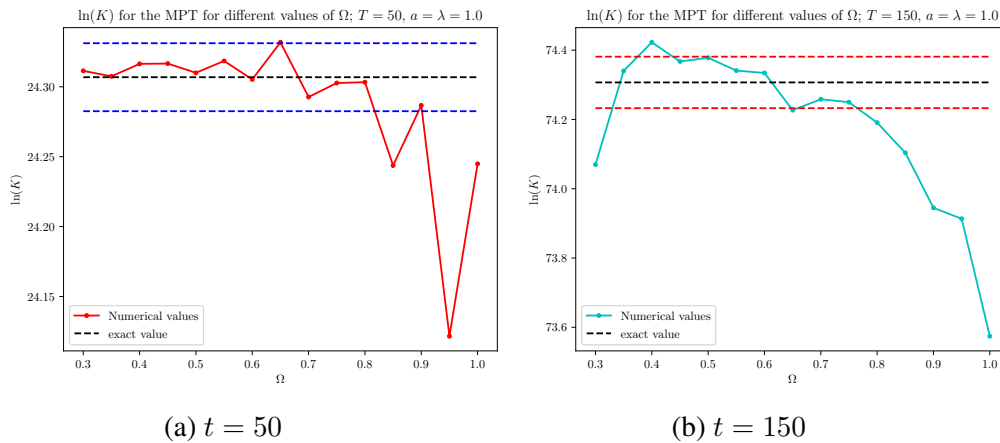


Figura A.3: Distintas pruebas de convergencia para conocer el valor adecuado a elegir de Ω analizando el potencial modificado de Pöschl-Teller.

Finalmente, mostramos las pruebas de convergencia para el potencial lineal, en donde ahora buscamos un valor adecuado para κ . Al igual que en las pruebas anteriores, la línea negra punteada significa el valor analítico de $\ln(K)$ para un tiempo t en particular. Las líneas punteadas por arriba y por debajo de esta línea negra nuevamente nos dan una región de tolerancia del 0.05 % sobre el valor exacto. De la Figura A.5 y Figura A.6 observamos que en este caso, al tratarse del potencial lineal con valor de constante de acoplamiento $k = 0.5$, los valores de κ que mejor van a dar una estimación son aquellos que se acerquen al valor de $\kappa = 0.5$.

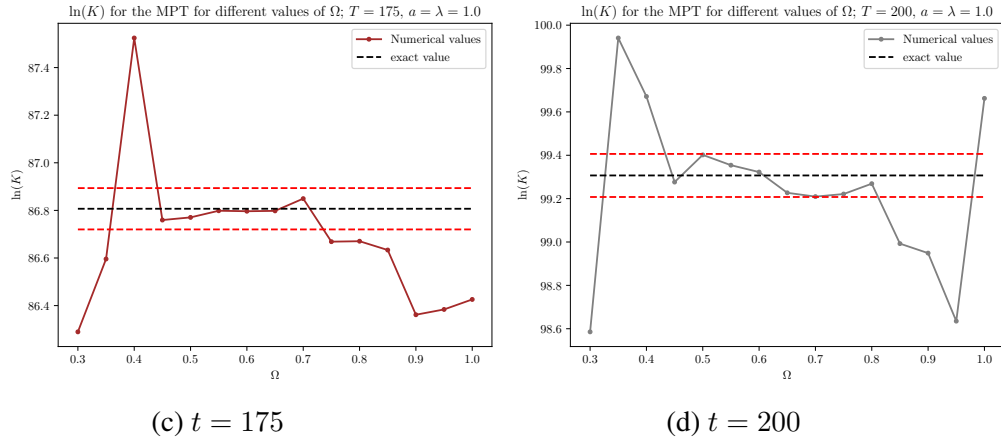


Figura A.4: Distintas pruebas de convergencia para conocer el valor adecuado a elegir de Ω analizando el potencial modificado de Pöschl-Teller.

De aquí es obvio que sucede si κ es idénticamente igual a k , el valor esperado no va a tener ninguna contribución y solo va a sobrevivir la estimación exacta del propagador en el caso de que estemos utilizando el método de la modificación de la acción y, en ese sentido el estudio del potencial lineal con el algoritmo Yloop modificado linealmente es un poco trivial. Es necesario estudiar un potencial asimétrico distinto para verificar el comportamiento de κ en ese caso.

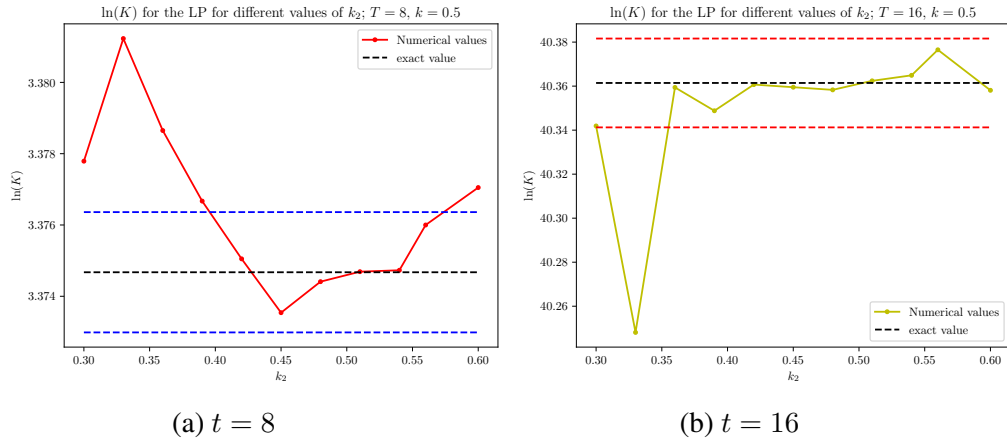


Figura A.5: Distintas pruebas de convergencia para conocer el valor adecuado a elegir de κ analizando el potencial lineal.

Complementamos las pruebas de convergencia analizando el comportamiento de Ω como función del tiempo t tomando en cuenta los resultados obtenidos para

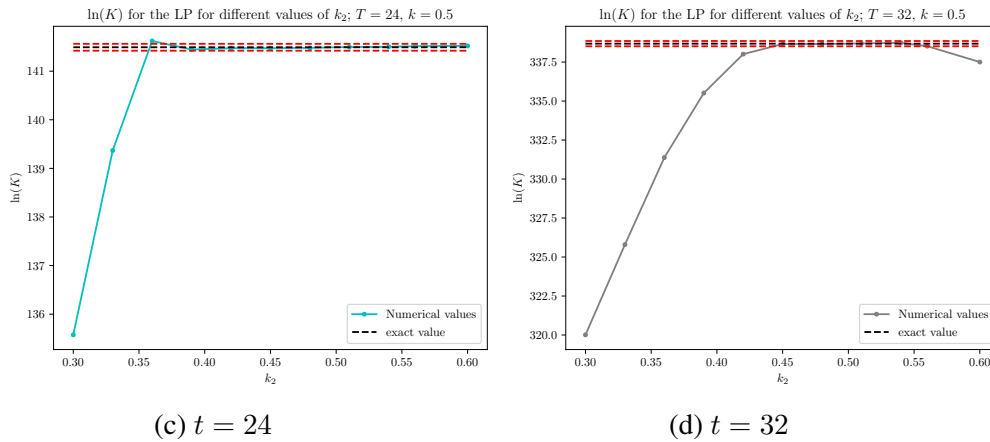


Figura A.6: Distintas pruebas de convergencia para conocer el valor adecuado a elegir de κ analizando el potencial lineal.

esta prueba. Buscamos la forma en la que se comporta Ω en el tiempo para ver si era posible deducir una forma funcional o para comprobar si cambiaba mucho en el tiempo. Para lograr esto graficamos los valores máximos y mínimos de Ω que estaban dentro de nuestra ventana de tolerancia para cada tiempo en los que realizamos estas pruebas, que van en un intervalo de $t \in [25, 300]$ con saltos de $t = 25$ como función del tiempo.

Como se puede observar de la Figura A.7 el comportamiento de Ω parece ser constante a través del tiempo si tomamos un promedio de los valores máximos y mínimos. De esta forma determinamos que no es necesario cambiar de valor a Ω conforme aumentamos el rango de t .

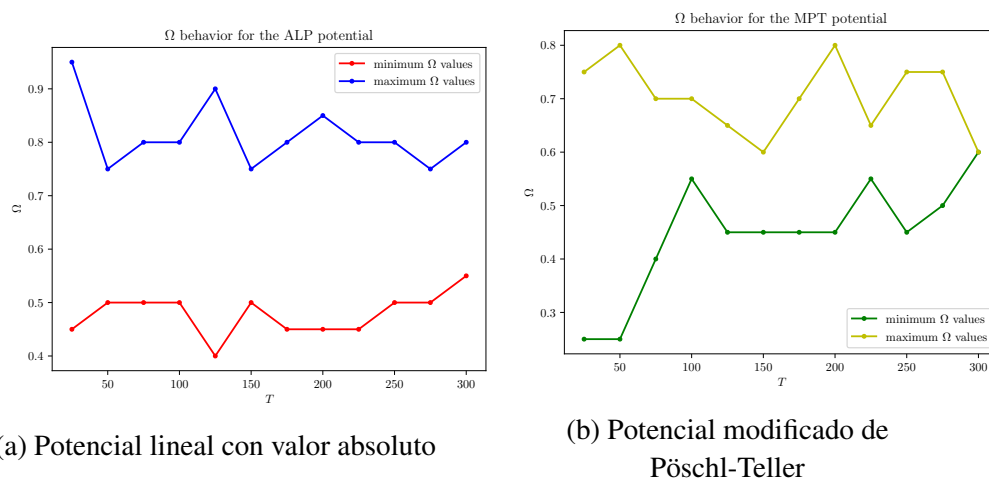


Figura A.7: Comportamiento de Ω como función del tiempo t para el potencial lineal con valor absoluto (a) y para el potencial modificado de Pöschl-Teller (b).

Apéndice B

Código

En este apéndice mostramos el código explícito escrito en el lenguaje de programación C++ con el que se estuvo realizando las simulaciones durante el trabajo. Vamos a dividir por bloques al código dependiendo si es una parte en común de todo el código o si es una parte especial para la implementación de algún método de los revisados anteriormente en específico.

Nota importante: el siguiente código no esta indentado de forma correcta debido al espacio con el que se contaba en la páginas.

Primer bloque

En esta primera parte del código se definen las librerías necesarias para la correcta ejecución del código, así como las variables y los arreglos a utilizar. Se define también el PRNG que este caso es el generador MT19937, la función *Marsaglia* que genera las muestras distribuidas normalmente, los archivos de salida y se define el inicio de un contador del tiempo de ejecución del programa. Este bloque es una parte en común de todo el programa.

```
1 /*
2 * File: main.cpp
3 * This program generates a loop cloud by the method of modified
   Yloop
4 */
5
6 #define _USE_MATH_DEFINES
7 #include <cstdlib>
8 #include <iostream>
9 #include <random>
10 #include <cmath>
11 #include <limits>
```

```

12 #include <fstream>
13 #include <time.h>
14 #include <sstream>
15 #include <chrono>
16
17 using namespace std;
18
19 /*
20 *
21 */
22
23 const int nc=1; //no. of coordinates
24 const int np=2000; //no. of points per loop
25 const int nl=20000; //no. of loops
26 double YLoops[np+1][nc]={0}; //Array for the Yloops
27 double x[np+1][nc]={0}; //Array for the spatial points
28 double vintegral[nl]={0}; //Array for the v_i=integral V dtau
29 double ww[np-1]={0}; //The Gaussian random numbers
30 double v[np-1]={0}; //The associated v
31 double C[np-2]={0}; //Array for the coefficients C
32 double B[np-2]={0}; //Array for the coefficients B
33
34 double xi[nc] = {0}; //Initial point
35 double xf[nc] = {0}; //Final point
36 double w = 1.0; //Angular frequency
37 double m = 1.0; //Mass of the system
38 double Omega=0.75; //Angular frequency \Omega
39 double k2=0.48; //Couple constant \kappa
40 double k = 0.5; //For the LP and ALP
41 double lambda = 1.0; //For the MPT
42 double a = 1.0; //For the MPT
43
44 //To seed the RNG
45 unsigned seed=std::chrono::system_clock::now().time_since_epoch
    ().
46 count();
47 //PRNG
48 std::mt19937_64 gen(seed);
49 //real uniform distribution
50 std::uniform_real_distribution<double> dis(-1.0, 1.0);
51
52 //Marsaglia function
53 double Marsaglia(double mean, double stdDev){
54     static double spare;
55     static bool hasSpare = false;
56     if (hasSpare) {
57         hasSpare = false;
58         return spare * stdDev + mean;
59     } else {

```

```

60     double u, v, s;
61     do{
62         u = dis(gen);
63         v = dis(gen);
64         s = u*u+v*v;
65     } while (s >= 1.0 || s == 0.0);
66     s = sqrt((-2.0*log(s))/s);
67     spare = v*s;
68     hasSpare = true;
69     return mean + stdDev * u * s;
70 }
71 }
72
73 int main(int argc, char** argv){
74
75     //we generate an output file for the distributions
76     //std::ofstream ofsPDF("pdfM2HOT100.dat"); //any name
77
78     //An output file for the results
79     std::ostringstream oss;
80     oss <<"MYLoopMH"<<"M2ALPprueba1.txt"; //any name
81     cout << oss.str() << "\n";
82     std::ofstream ofs(oss.str().c_str());
83
84     //Record start time
85     auto start = std::chrono::high_resolution_clock::now();

```

Segundo bloque

En este segundo bloque se empieza a generar la nube de lazos para cada valor de t , es decir, se generan los lazos a través de los respectivos algoritmos mostrados. Este bloque representa el corazón del código, por lo que vamos a dividir los bloques según el método utilizado.

Método del prefactor con algoritmo Yloop modificado

Este bloque en específico muestra como se genera la nube de lazos con el algoritmo Yloop modificado (potencial de fondo estilo oscilador armónico) y se implementa el método del prefactor.

```

1  /* Here starts the loop over values of t, for each value of t we
   generate
2  a independent set of unitary loops */
3
4  //Here it starts

```

```

5 for(int tv = 40; tv < 40+1; tv+= 10)
6 {
7
8 //Variables that will be updated during the loop
9
10 double t = (double)tv; //time variable
11 double ex = 0; //variable for the exponential
12 double Kv = 0; //variable for the kernel
13 double f0 = 0; //variable for normalization factor
14
15 double xy = 0; //define fixed points
16 double sumexp = 0.0; //for the exponential sum
17 double expmean = 0.0; //for the exponential mean
18 double alpha = 0.0; //our mass term
19 double Pf = 0.0; //variable for prefactor
20 double f = 0.0;
21
22 alpha=((Omega*Omega)*(t*t)/(double)(np*np));
23
24 //generation of coefficient C
25 C[0]=2+alpha;
26 for(int k=1;k<np-2;k++)
27 {
28 C[k]=C[0]-(1.0/(double)C[k-1]);
29 }
30
31 //variable assignment
32 for (int i = 0; i < nc; i++)
33 {
34 xy += (xi[i]-xf[i])*(xi[i]-xf[i]);
35 }
36
37 //K_0 prefactor
38 f0 = sqrt((m)/(2.0*M_PI*t))*exp(-m*xy/(2*t));
39
40 /* Here we are going to generate the Nl loops(it will be
41 different
42 for each value of t, since we restart the loop on loop for all
43 values
44 other than t) */
45 for(int loop=0;loop<nl;loop++)
46 {
47
48 /*These variables are used to calculate the argument to the
49 exponential (the integral of V over the path)*/
50
51 double earg = 0.0;
52 //double earg2 = 0.0;

```

```

52
53 // Dimensionality (d = 1 for the moment)
54 for(int coord=0;coord<nc;coord++)
55 {
56
57 //Steps 1, 2 and 3: calculate the v's and construct the
loops
58 for(int j=0;j<np-2;j++)
59 {
60 ww[j]=Marsaglia(0.0,1.0/sqrt(2.0));
61 }
62
63 for (int j=1;j<np-1;j++)
64 {
65 //non relativistic QM
66 v[j] = sqrt(2.0/np)*sqrt(1.0/C[(np-2)-j])*ww[j-1];
67 }
68
69 for(int j=0;j<np+1;j++)
70 {
71 if(j == 0)
72 YLoops[0][coord]=0; //Firts point is 0
73 if(j == 1)
74 YLoops[1][coord] = v[j]; //q[1] = v[1]
75 if(j == np)
76 YLoops[np][coord] = 0; //Last point is 0
77
78 if(j > 1 && j < np)
79 YLoops[j][coord] = v[j] + 1.0/(C[(np-1)-j])*YLoops[j-1][
coord];
80
81 //The true point along the path
82 x[j][coord] = xf[coord] + (xi[coord]-xf[coord])*(double(
j)/double(np))+ sqrt((t)/m)*YLoops[j][coord];
83
84 //We calculate the value of the potential at point j
85 double rr = x[j][0]*x[j][0];
86 //We add to the value of the integral of the potential
over the path
87 earg += rr; //we are counting the integral of the
potential
88 //earg2 += x[j][0];
89
90 }
91
92 }
93 //generated loop
94

```

```

95  /* Now we have the generated loop and we have been
    calculating
96  the integral of the potential over the path */
97
98  //The integral of V over the path
99  ex = exp(-t*(m*w*w/2.0)*earg/(np)); //exp(-int V dtau)
100  //we define the Prefactor for the sum
101  Pf = sqrt(sinh(Omega*t)/(Omega*t))*exp(-(((Omega*Omega)/(w*w)
    )*(t*(m*w*w/2.0)*earg/(np)))));
102  //We add to the average with respect to the loops
103  sumexp += (ex/Pf);
104
105  //v_i for the distributions
106  vintegral[loop] = t*(m*w*w/2.0)*earg/(np);
107
108  }

```

Método del prefactor con algoritmo Yloop modificado linealmente

Este bloque en específico muestra como se genera la nube de lazos con el algoritmo Yloop modificado linealmente (potencial de fondo lineal) y se implementa el método del prefactor.

```

1  /* Here starts the loop over values of t, for each value of t we
    generate
2  a independent set of unitary loops */
3
4  //Here it starts
5  for(int tv = 50; tv < 50+1; tv+= 10)
6  {
7
8      //Variables that will be updated during the loop
9
10     double t = (double)tv;
11     double ex = 0;
12     double Kv = 0;
13     double f0 = 0;
14
15     double xy = 0.0;
16     double xy2 = 0.0;
17     double sumexp = 0.0;
18     double expmean = 0.0;
19     double beta = 0.0;    \\for the Beta variable
20     double Pf = 0.0;
21
22     //definition on the Beta variable

```

```

23 beta = ((k2/m)*(t*t)/(double)(np*np));
24
25 //generation of the coefficients C and B
26 for(int k=0;k<np-2;k++)
27 {
28     C[k]=((k+2.0)/(k+1.0));
29 }
30
31 for(int k=0;k<np-2;k++)
32 {
33     B[k]=((k+2.0)/2.0)*beta;
34 }
35
36 //variable assignment
37 for (int i = 0; i < nc; i++)
38 {
39     xy += (xi[i]-xf[i])*(xi[i]-xf[i]);
40     xy2 += xi[i]+xf[i];
41 }
42
43 //K_0 prefactor
44 f0 = sqrt((m)/(2.0*M_PI*t))*exp(-m*xy/(2*t));
45
46 /* Here we are going to generate the Nl loops(it will be
47    diferent
48    for each value of t, since we restart the loop on loop for all
49    values
50    other than t) */
51 for(int loop=0;loop<nl;loop++)
52 {
53     /*These variables are used to calculate the argument to the
54     exponential (the integral of V over the path)*/
55     double earg = 0.0;
56
57     //Dimensionality (d = 1 for the moment)
58     for(int coord=0;coord<nc;coord++)
59     {
60         //Steps 1, 2 and 3: calculate the v's and construct the
61         loops
62         for(int j=0;j<np-2;j++)
63         {
64             ww[j]=Marsaglia(0.0,1.0/sqrt(2.0));
65         }
66
67         for (int j=1;j<np-1;j++)
68         {
69             //non relativistic QM

```

```

69     v[j] = sqrt(2.0/np)*sqrt(1.0/C[(np-2)-j])*ww[j-1];
70     }
71
72     for(int j=0;j<np+1;j++)
73     {
74         if(j == 0)
75             YLoops[0][coord]=0; //First point is 0
76         if(j == 1)
77             YLoops[1][coord] = v[j]; //q[1] = v[1]
78         if(j == np)
79             YLoops[np][coord] = 0; //Last point is 0
80
81         if(j > 1 && j < np)
82             YLoops[j][coord] = v[j] + (1.0/(C[(np-1)-j]))*(YLoops[j
-1][coord)-(B[(np-1)-j]/sqrt(t/m)));
83
84         //The true point along the path
85         x[j][coord] = xf[coord]+(xi[coord]-xf[coord])*(double(j)
/double(np))+sqrt((t)/m)*YLoops[j][coord];
86
87         //We calculate the value of the potential at point j
88         earg += x[j][0]; //for the LP
89         //We add to the value of the integral of the potential
over the path
90
91     }
92
93     }
94     //generated loop
95
96     /* Now we have the generated loop and we have been
calculating
97     the integral of the potential over the path */
98
99     //The integral of V over the path
100    ex = exp(-((t*earg*k)/(np))); //exp(-int V dtau) //for
the LP
101    //we define the Prefactor for the sum
102    Pf = exp((k2*t/2.0)*xy2 - ((k2*k2)*(t*t*t)/24) - (k2/k)*((t
*earg*k)/(np)));
103    //We add to the average with respect to the loops
104    sumexp += (ex/Pf);
105
106    //v_i for the distributions
107    vintegral[loop] = ((t*earg*k)/(np)) + log(Pf);
108
109 }

```

Método de la modificación a la acción con algoritmo Yloop modificado

Este bloque muestra como se genera la nube de lazos con el algoritmo Yloop modificado (potencial de fondo estilo oscilador armónico) y se implementa el método de la modificación a la acción.

```

1  /* Here starts the loop over values of t, for each value of t
2  we generate a independent set of unitary loops */
3
4  //Here it starts
5  for(int tv = 5; tv < 30+1; tv+= 1)
6  {
7
8      //Variables that will be updated during the loop
9      double t = (double)tv;
10     double ex = 0;
11     double Kv = 0;
12     double f0 = 0;
13
14     double xixf = 0;
15     double xixf2 = 0;
16     double sumexp = 0.0;
17     double expmean = 0.0;
18     double alpha = 0.0;
19
20     alpha=((Omega*Omega) * (t*t) / (double) (np*np));
21
22     //generation of the coefficient C
23     C[0]=2+alpha;
24     for(int k=1;k<np-2;k++)
25     {
26         C[k]=C[0]-(1.0/(double)C[k-1]);
27     }
28
29     //variable assignment
30     for (int i = 0; i < nc; i++)
31     {
32         xixf += (xf[i]*xf[i])+(xi[i]*xi[i]);
33         xixf2 += xf[i]*xi[i];
34     }
35
36     //K_Omega prefactor
37     f0=sqrt((m*Omega) / (2.0*M_PI*sinh(Omega*t))) * exp(-(m*Omega)
38     / (2*sinh(Omega*t))) * ((xixf*cosh(Omega*t)) - (2*xixf2));
39
40     /* Here we are going to generate the Nl loops(it will be
41     diferent for each value of t, since we restart the loop on

```

```

loop for all values other than t) */
40
41 for(int loop=0;loop<nl;loop++)
42 {
43
44     /*These variables are used to calculate the argument to
the
45     exponential (the integral of V over the path)*/
46
47     double earg = 0.0;
48     //double earg2 = 0.0;
49     double earg3 = 0.0;
50     //double earg4 = 0.0;
51
52     // Dimensionality (d = 1 for the moment)
53     for(int coord=0;coord<nc;coord++)
54     {
55         //Steps 1, 2 and 3: calculate the v's and construct the
loops
56         for(int j=0;j<np-2;j++)
57         {
58             ww[j]=Marsaglia(0.0,1.0/sqrt(2.0));
59         }
60
61         for (int j=1;j<np-1;j++)
62         {
63             //non relativistic QM
64             v[j] = sqrt(2.0/np)*sqrt(1.0/C[(np-2)-j])*ww[j-1];
65         }
66
67         for(int j=0;j<np+1;j++)
68         {
69             if(j == 0)
70                 YLoops[0][coord]=0; //Firts point is 0
71             if(j == 1)
72                 YLoops[1][coord] = v[j]; //q[1] = v[1]
73             if(j == np)
74                 YLoops[np][coord] = 0; //Last point is 0
75
76             if(j > 1 && j < np)
77                 YLoops[j][coord] = v[j] + 1.0/(C[(np-1)-j])*YLoops[j
-1][coord];
78
79             //The true point along the path
80             x[j][coord]=xf[coord]+
81             (xi[coord]-xf[coord])*(double(j)/double(np))+
82             sqrt((t)/m)*YLoops[j][coord];
83
84             //We calculate the value of the potential at point j

```

```

85     double rr = x[j][0]*x[j][0];           //for the HO
86     //We add to the value of the integral of the potential
      over the path
87     earg += rr; //we are counting the integral of the
      potential
88     //earg2 += x[j][0];           //for the LP
89     earg3 += abs(x[j][0]);           //for the ALP
90     //earg4 += (1/(cosh(x[j][0])*cosh(x[j][0]))); //
      for the MPT
91     }
92   }
93   //generated loop
94
95   //v_i for the distributions
96   //vintegral[loop] = ((t*m*earg)/(2*np))*((w*w)-(Omega*
      Omega));
97
98   /* Now we have the generated loop and we have been
      calculating
99   the integral of the potential over the path */
100
101   //The integral of V over the path
102   //exp(-int V dtau) //for the HO
103   //ex = exp(-((t*m*earg)/(2*np))*((w*w)-(Omega*Omega)));
104   //for the ALP
105   ex = exp(-(t/(double)np)*((k*earg3)-(m*Omega*Omega*earg
      /2.0)));
106   //for the MPT
107   //ex=exp(-(t/(double)np)*((-a*a*lambda*(lambda+1)/(2.0*m)
      )*earg4)-(m*Omega*Omega*earg/2.0)));
108
109   //We add to the average with respect to the loops
110   sumexp += ex;
111
112   }

```

Método de la modificación a la acción con algoritmo Yloop modificado linealmente

Este bloque muestra como se genera la nube de lazos con el algoritmo Yloop modificado (potencial de fondo lineal) y se implementa el método de la modificación de la acción.

```

1 /* Here starts the loop over values of t, for each value of t we
   generate
2 a independent set of unitary loops */
3

```

```

4 //Here it starts
5 for(int tv = 2; tv < 40+1; tv+= 2)
6 {
7
8 //Variables that will be updated during the loop
9 double t = (double)tv;
10 double ex = 0;
11 double Kv = 0;
12 double f0 = 0;
13
14 double xixf = 0;
15 double xixf2 = 0;
16 double sumexp = 0.0;
17 double expmean = 0.0;
18 double beta = 0.0;
19
20 beta = ((k2/m)*(t*t)/(double)(np*np));
21
22 //generation of the coefficients C and B
23 for(int k=0;k<np-2;k++)
24 {
25     C[k]=((k+2.0)/(k+1.0));
26 }
27
28 for(int k=0;k<np-2;k++)
29 {
30     B[k]=((k+2.0)/2.0)*beta;
31 }
32
33 //variable assignment
34 for (int i = 0; i < nc; i++)
35 {
36     xixf += (xi[i]-xf[i])*(xi[i]-xf[i]);
37     xixf2 += xi[i]+xf[i];
38 }
39
40 //K_k prefactor
41 f0 = sqrt(1/(2.0*M_PI*t))*exp(-(1/(2*t))*xixf-(k2*t/2)*xixf2
42     +((k2*k2)*(t*t*t)/24));
43
44 /* Here we are going to generate the Nl loops(it will be
45     diferent
46     for each value of t, since we restart the loop on loop for all
47     values
48     other than t) */
49
50 for(int loop=0;loop<nl;loop++)
51 {
52     /*These variables are used to calculate the argument to the

```

```

50     exponential (the integral of V over the path)*/
51
52     double earg = 0.0;
53
54     //Dimensionality (d = 1 for the moment)
55     for(int coord=0;coord<nc;coord++)
56     {
57         //Steps 1, 2 and 3: calculate the v's and construct the
loops
58         for(int j=0;j<np-2;j++)
59         {
60             ww[j]=Marsaglia(0.0,1.0/sqrt(2.0));
61         }
62
63         for (int j=1;j<np-1;j++)
64         {
65             //non relativistic QM
66             v[j] = sqrt(2.0/np)*sqrt(1.0/C[(np-2)-j])*ww[j-1];
67         }
68
69         for(int j=0;j<np+1;j++)
70         {
71             if(j == 0)
72                 YLoops[0][coord]=0; //First point is 0
73             if(j == 1)
74                 YLoops[1][coord] = v[j]; //Q[1] = v[1]
75             if(j == np)
76                 YLoops[np][coord] = 0; //Last point is 0
77
78             if(j > 1 && j < np)
79                 YLoops[j][coord] = v[j] + (1.0/(C[(np-1)-j]))*(YLoops[j
-1][coord]-(B[(np-1)-j]/sqrt(t/m)));
80
81             //The true point along the path
82             x[j][coord] = xf[coord]+(xi[coord]-xf[coord])*(double(j)
/double(np))+sqrt((t)/m)*YLoops[j][coord];
83
84             //We calculate the value of the potential at point j
85             earg += x[j][0]; //for the LP
86             //We add to the value of the integral of the potential
over the path
87         }
88
89     }
90     //generated loop
91
92     //v_i for the distributions
93     //vintegral[loop] = ((t*earg)/(np))*(k-k2);
94

```

```
95     /* Now we have the generated loop and we have been
96     calculating
97     the integral of the potential over the path */
98     //The integral of V over the path
99     ex = exp(-((t*earg)/(np))*(k-k2)); //exp(-int V dtau)
100    //for the LP
101    //ex = exp(-(t/(double)np)*((k*earg2)-(m*Omega*Omega*earg
102    /2.0))); //for the ALP
103    //ex = exp(-(t/(double)np)
104    *((-a*a*lambda*(lambda+1)/(2.0*m))*earg4)-(m*Omega*Omega*
105    earg/2.0)); //for the MPT
106
107    //We add to the average with respect to the loops
108    sumexp += ex;
109
110 }
```

Tercer bloque

Este bloque es también una parte en común del programa, representa las últimas líneas del código en donde se calcula el promedio que representa el valor esperado y el propagador para posteriormente imprimir los resultados en un archivo de salida. Se muestra comentado las líneas de código necesarias para imprimir la distribución de los v_i que sirven para generar los histogramas correspondientes. Finalmente se calcula el tiempo de ejecución y se imprime en pantalla.

```

1 //Mean over loops
2 expmean = sumexp/(nl);
3 //Kernel
4 Kv = f0*expmean;
5 ofs << t << "\t" << Kv << "\t" << -log(Kv) << "\n";
6 //here the sign of the logarithm depends on the system
7 }
8
9 //to close the file
10 ofs.close();
11 cout << oss.str() << "\n";
12
13 //print the v_i distribution
14 /*for(int i=0;i<nl; i++)
15 {
16     ofsPDF<<std::fixed<<vintegral[i]<<std::endl;
17 }*/
18
19 // Record end time
20 auto finish = std::chrono::high_resolution_clock::now();
21 std::chrono::duration<double> elapsed = finish - start;
22 std::cout << "Elapsed time: " << elapsed.count() << " s\n";
23
24 cout<<"Process done"<<endl;
25
26 return 0;
27 }

```


Agradecimientos

Aprovecho este espacio para agradecer a aquellas personas que han sido parte de mi formación académica de posgrado.

Agradezco a los profesores Thomas Zannias, Pablo Genaro Martínez y Olivier Sarbach; con sus respectivas cátedras consolidé conocimientos básicos sobre la física a un nivel más profesional.

De igual forma agradezco a mis sinodales los profesores Adnan Bashir, Axel Weber y Juan Carlos Arteaga, por aceptar tomar estos roles de forma inesperada, además de que agradezco sus comentarios en la revisión de la tesis.

También agradezco al profesor Christian Schubert, experto en el área del formalismo WL, quien me enseñó los métodos y herramientas básicas que se utilizan en esta interesante área. Asimismo, estoy muy agradecido con María Anabel Trejo por el tiempo que se tomó para la revisión de este trabajo, además de aportarme con sus valiosos comentarios y conocimientos sobre el método WLMC.

Finalmente estoy profundamente agradecido con mi asesor James P. Edwards porque, a pesar de las condiciones adversas a las que nos enfrentamos, siempre me brindó su dirección, conocimiento, consejos y correcciones que permitieron el desarrollo de este trabajo. No me queda más que expresar mi admiración y respeto por su dedicación como profesor.