

Całki po trajektoriach Feynmana

Modelowanie komputerowe

Ewelina Kowal, Maciej Kucharski, Adrianna Saribekyan

29 stycznia 2022

Spis treści

1. Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria
2. Funkcja falowa stanu związanego
3. Całkowanie po trajektoriach siatki (Algorytm)

Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria

Szukając bardziej bezpośredniego sformułowania mechaniki klasycznej niż teoria Schroedingera, Feynman poszedł krokami Diraca, który mówił, że zasada najmniejszego działania Hamiltona może być granicą $\hbar \rightarrow 0$ kwantowej zasady najmniejszego działania.

Zauważywszy, że zasada Hamiltona wyjaśnia drogę cząsteczek przez czasoprzestrzeń, Feynman postulował, że kwantowa funkcja falowa opisująca propagację cząstki swobodnej z punktu w czasoprzestrzeni $a = (x_a, t_a)$ do $b = (x_b, t_b)$ może być opisana zależnością:

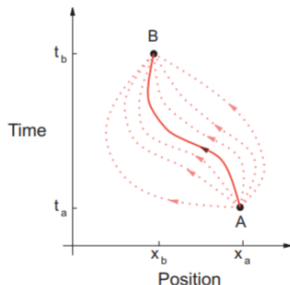
$$\psi(x_b, t_b) = \int dx_a G(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a, t_a), \quad (1)$$

gdzie G , to funkcja Greena:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_b - t_a)}} \exp\left[i\frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}\right]. \quad (2)$$

Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria

Feynman zauważył, że innym sposobem interpretacji równania 1 jest przedstawienie zasady Hamiltona, w której amplituda prawdopodobieństwa (funkcja falowa ψ) dla cząstki, aby się znalazła w punkcie B, jest równa sumie wszystkich ścieżek przez czasoprzestrzeń rozpoczynających się w czasie A i kończących się w B (rys. 2).



Rys.2: Trajektoria cząstki - wykres czasu od położenia.

Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria

To podejście uwzględnia statystyczną naturę mechaniki kwantowej - posiadamy różne możliwe drogi cząstki, o różnym prawdopodobieństwie. Tutaj możemy zauważyć różnicę między teorią Schroedingera, a teorią Feynmana. Ta pierwsza rozwiązuje funkcje falowe i uważa ścieżki za klasyczną koncepcję.

Wartości prawdopodobieństwa dla danej drogi można wyznaczyć korzystając z zasady najmniejszego działania Hamiltona.

Najbardziej ogólny ruch cząstki poruszającej się po klasycznej trajektorii $\bar{x}(t)$ od czasu t_a do t_b odbywa się po torze, takim że działanie $S[\bar{x}(t)]$ jest ekstremum:

$$\delta S[\bar{x}(t)] = S[\bar{x}(t) + \delta x(t)] - S[\bar{x}(t)] = 0, \quad (3)$$

gdzie droga odbywa się między punktem A i B , czyli $\delta(x_a) = \delta(x_b) = 0$.

Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria

Jeśli działanie S przyjmuje się jako całkę krzywoliniową Lagrangianu wzdłuż:

$$S[\bar{x}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L[x(t), \dot{x}(t)] dt, \quad L = T[x, \dot{x}] - V[x], \quad (4)$$

gdzie T jest energią kinetyczną, V energią potencjalną, to to sformułowanie mechaniki klasycznej jest równoważne równaniom różniczkowym Newtona.

Feynman zaobserwował, że klasyczne zachowywanie się swobodnej cząstki ($V = 0$)

$$S[b, a] = \frac{m}{2} (\dot{x})^2 (t_b - t_a) = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}, \quad (5)$$

jest powiązane z propagatorem cząstki swobodnej (2) przez

$$G(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i (t_b - t_a)}} \exp i \frac{S[b, a]}{\hbar}. \quad (6)$$

Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria

Równanie 6 jest ważnym związkiem między mechaniką kwantową, a zasadą najmniejszego działania. Po tym przełomie, Feynman postulował przeformułowanie mechaniki kwantowej, które uwzględniałoby jej aspekty statystyczne, wyrażając $G(a, b)$ jako:

$$G(b, a) = \sum_{\text{paths}} \exp i \frac{S[b, a]}{\hbar} \quad (7)$$

Równanie 7 jest nazywane całkowaniem po trajektoriach (path integral). Tutaj klasyczna akcja S jest sumowana wzdłuż różnych ścieżek, a wykładnik działania jest sumowany po ścieżkach.

Warto zauważyć, że działanie S jest bardzo dużą liczbą, więc nawet jeśli wszystkie trajektorie wchodzi w sumę, to główne wkłady pochodzą od ścieżek przylegających do klasycznej trajektorii \bar{x} .

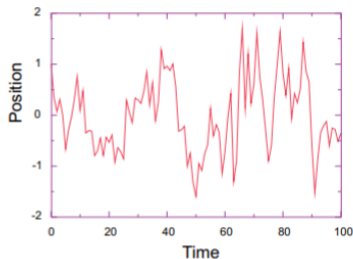
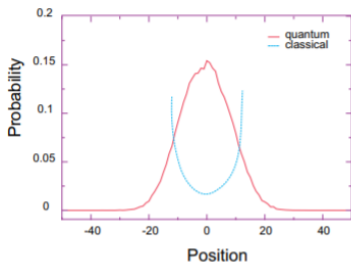
Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria

W rzeczywistości, ponieważ S jest ekstremum dla klasycznej trajektorii, jest stałą do pierwszego rzędu w zmienności ścieżek, a więc pobliskie ścieżki mają fazy które zmieniają się płynnie i stosunkowo wolno.

Natomiast ścieżki dalekie od klasycznej trajektorii są wazone przez szybko oscylujące $\exp\left[\frac{iS}{\hbar}\right]$, a gdy jest wiele ścieżek, to mają tendencję do anulowania się nawzajem.

W granicy klasycznej $\hbar \rightarrow 0$, mamy wkład tylko pojedynczej trajektorii klasycznej, toteż równanie 7 staje się zasadą najmniejszego działania Hamiltona.

Czasoprzestrzenne rozchodzenie się fal Feynmana - teoria



Rys.3: Przykład trajektorii użytej w obliczeniach całek po trajektoriach.

Funkcja falowa stanu związanego

Przechodząc do dalszych obliczeń, założymy, że Hamiltonian \tilde{H} spełnia zależność funkcji własnych

$$\tilde{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad (8)$$

ponieważ Hamiltonian \tilde{H} jest Hermitowski, rozwiązania \tilde{H} tworzą kompletny zbiór ortonormalny, gdzie ogólne rozwiązanie jest postaci

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_n t} \psi_n(x), \quad c_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi(x, t=0), \quad (9)$$

gdzie wartość współczynników rozszerzalności c_n wynika z ortonormalności ψ_n . Podstawiając c_n mamy

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \sum_n \psi_n^*(x_0) \psi_n(x) e^{-iE_n t} \psi(x_0, t=0) \quad (10)$$

Funkcja falowa stanu związanego

Porównując funkcję 10 z funkcją 2, dostajemy rozwinięcie funkcji własnej dla G .

$$G(x, t; x_0, t_0 = 0) = \sum_n \psi_n^*(x_0) \psi_n(x) e^{-iE_n t} \quad (11)$$

Szukamy rozwiązania dla funkcji falowej stanu związanego, gdzie wszystkie trajektorie zaczynają się i kończą w punkcie $x = x_0$, z założeniem, że $t_0 = t$, kontynuując rozwiązanie 11 dla ujemnego czasu urojonego:

$$G(x, -i\tau; x, 0) = \sum_n |\psi_n(x)|^2 e^{-E_n \tau} = |\psi_0|^2 e^{-E_0 \tau} + |\psi_1|^2 e^{-E_1 \tau} + \dots$$

$$\Rightarrow |\psi_0(x)|^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{E_0 \tau} G(x, -\tau; x, 0), \quad (12)$$

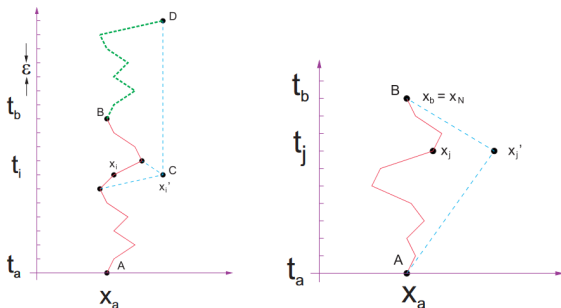
gdzie granica odpowiada długim czasom urojonym τ , po których części ψ o wyższych energiach ulegają rozpadowi szybciej, pozostawiając tylko stan podstawowy ψ_0 .

Funkcja falowa stanu związanego

Tym sposobem udało nam się dojść do rozwiązania dla funkcji falowej stanu podstawowego bezpośrednio w kategoriach propagatora G w postaci jawnej (równ. 12).

Całkowanie po trajektoriach siatki

Na początku tworzymy siatkę punktów dyskretnych w czasoprzestrzeni i przedstawiamy trajektorie ruchu cząstki jako serie prostych linii łączących pozycje dla jednego czasu z pozycją dla następnego:



Rys.4: Wykresy trajektorii w czasoprzestrzeni

Całkowanie po trajektoriach siatki

Tak jak powiedziałem, dzielimy trajektorie między punktami A i B na N jednakowych kroków o rozmiarze ε i oznaczamy je indeksem j :

$$\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{t_b - t_a}{N} \Rightarrow t_j = t_a + j\varepsilon \quad (j = 0, N) \quad (13)$$

Dokładniej byłoby używać $x(t_j)$ do określenia pozycji trajektorii w czasie t_j , jednak w praktyce dyskretyzujemy przestrzeń równomiernie oraz posiadamy połączenia między najbliższymi punktami.

Całkowanie po trajektoriach siatki

Kiedy już stworzyliśmy naszą siatkę, możemy rozpatrzyć całki oraz pochodne na połączeniach między punktami:

$$\frac{dx_j}{dt} \simeq \frac{x_j - x_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} = \frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}, \quad (14)$$

$$S_j \simeq L_j \Delta t \simeq \frac{1}{2} m \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\varepsilon} - V(x_j) \varepsilon \quad (15)$$

gdzie zakładamy, że Lagranżjan jest stały na każdym połączeniu.

Całkowanie po trajektoriach siatki

Całki trajektorii na siatce wyznaczamy na podstawie twierdzenia o złożeniu dla propagatorów (G):

$$G(b, a) = \int dx_j G(x_b, t_b; x_j, t_j) G(x_j, t_j; x_a, t_a) \quad (t_a < t_j, t_j < t_b) \quad (16)$$

Dla cząstki swobonej równanie propagatora przybiera postać:

$$G(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_b - t_j)}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_j - t_a)}} \int dx_j e^{i(S[b,j] + S[j,a])}$$

$$G(b, a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_b - t_a)}} \int dx_j e^{iS[b,a]} \quad (17)$$

Całkowanie po trajektoriach siatki

Dla trajektorii o N -punktach między liniami (tak jak na rys.4) równanie (16) wygląda następująco:

$$G(b, a) = \int dx_1 \cdots dx_{N-1} e^{iS[b, a]}, \quad S[b, a] = \sum_{j=1}^N S_j, \quad (18)$$

gdzie S_j jest wartością działania dla połączenia j .

W tym momencie całka nad jedną trajektorią pokazaną na rys.4 stała się sumą N elementów, która stanie się sumą nieskończonej ilości elementów w momencie kiedy krok czasu ε dąży do zera.

Całkowanie po trajektoriach siatki

Propagator (7) jest sumą wszystkich połączeń między punktami A i B. Każde połączenie jest wazone poprzez eksponente jej działania wzdłuż trajektorii:

$$G(x, t; x_0, t_0) = dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} e^{iS[x, x_0]}, \quad (19)$$

$$S[x, x_0] = \sum_{j=1}^{N-1} S[x_{j+1}, x_j] \simeq \sum_{j=1}^{N-1} L(x_j, \dot{x}_j) \varepsilon \quad (20)$$

gdzie $L(x_j, \dot{x}_j)$ jest średnią wartością Lagranżjanu na połączeniu j w momencie $t = j\varepsilon$.

Całkowanie po trajektoriach siatki

Możemy zauważyć, że G jest określony dla ujemnego urojonego czasu w wyrażeniu (12) dla funkcji falowej stanu podstawowego. Podobnie rozważamy Lagranżjan dla $t = -i\tau$

$$L(x, \dot{x}) = T - V(x) = +\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x), \quad (21)$$

$$\Rightarrow L\left(x, \frac{dx}{-id\tau}\right) = -\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V(x) \quad (22)$$

gdzie dla ułatwienia obliczeń zakładamy, że potencjał $V(x)$ nie zależy od prędkości i innych wartości x .

Całkownie po trajektoriach siatki

Po odwróceniu znaku energii kintycznej L możemy zastosować we wzorze operator Hamiltonianu, opisujący funkcję współrzędnych uogólnionych.

$$H(x, \frac{dx}{-id\tau}) = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) = E \quad (23)$$

$$\Rightarrow L(x, \frac{dx}{-id\tau}) = -H(x, \frac{dx}{d\tau}) \quad (24)$$

Przepisując całkę po trajektorii t z L jako całkę po τ z H możemy wyrazić funkcję Greena i jej działanie w ujęciu Hamiltonianu. Otrzymujemy następujący wzór gdzie całka krzywolinowa z H obejmują całą trajektorię.

$$G(x, -i\tau; x_0, 0) = dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} e^{-H(\tau') d\tau'} \quad (25)$$

Całkownie po trajektoriach siatki

Całkę z H wyrażamy jako średnią energię na każdym ogniwnie, gdzie $E_j = T_j + V_j$, oraz sumujemy, aby uzyskać łączną energię E :

$$H(\tau)d\tau = \sum_j \epsilon E_j = \epsilon \epsilon(x_j) \quad (26)$$

W rezultacie otrzymujemy funkcję podziału, co wykazuje podobieństwo do termodynamiki.

Całkowanie po trajektoriach siatki

Następnie przekształcamy równanie Schrodingera zależne od czasu na równanie dyfuzji ciepła:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial (-i\tau)} = \frac{-\nabla^2}{2m} \psi \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \frac{\nabla^2}{2m} \psi \quad (27)$$

Suma po ścieżkach w funkcji Greena może być wyrażona przez czynnik Boltzmana, która ściśle wiąże nasze rozważania z termodynamiką.

$$P = e^{-\epsilon \epsilon} = e^{-\epsilon/k_B T} \Rightarrow k_B T = \frac{1}{\epsilon} = \frac{\hbar}{\epsilon} \quad (28)$$

Iplementacja

```

7   N = 100
8   M = 101
9   xsacle = 10.
10  path = np.zeros([M], float)
11  prob = np.zeros([M], float) # Initialize
12

```

Rys.1: Funkcje liczące całkę oraz prawdopodobieństwo.

```

16  def trjaxis(): # axis
17      trax = curve(pos = [vector(-97,-100, 0),vector(100,-100, 0)], color = color.cyan, display = trajec)
18      label(pos = vector(0,-110, 0), text = '0', box = 0, display = trajec)
19      label(pos = vector(60, -110, 0), text = 'x', box = 0, display = trajec)
20
21  wvgraph = display(x = 340, y = 150, width = 500, height = 300, title = 'Ground State')
22  wvplot = curve(x = range(0, 100), display = wvgraph)
23  wvfax = curve(color = color.cyan)
24
25  def wvfaxis(): # axis for probability
26      wvfax = curve(pos=[vector(-600,-155, 0),vector(800,-155, 0)], display = wvgraph, color = color.cyan)
27      curve(pos = [vector(1,-150, 0),vector(0,400, 0)], display = wvgraph, color = color.cyan)
28      label(pos = vector(-80, 450, 0), text = 'Probability', box = 0, display = wvgraph)
29      label(pos = vector(600, -220, 0), text = 'x', box = 0, display = wvgraph)
30      label(pos = vector(0, -220, 0), text = '0', box = 0, display = wvgraph)
31
32  trjaxis()
33  wvfaxis() # plot axes
34

```

Rys.2: Dobranie odpowiednich osi.

Implementacja

```
34 |
35 | def energy(path): # H0 energy
36 |     sums = 0.
37 |     for i in range(0, N-2):
38 |         sums += (path[i+1] - path[i]) * (path[i+1] - path[i])
39 |     sums += path[i+1] * path[i+1];
40 |     return sums
41 |
```

Rys.3: Funkcja licząca całkę energii.

```
42 | def plotpath(path): # plot trajectory in xy scale
43 |     for j in range(0, N):
44 |         trplot.x[j] = 220 * path[j]
45 |         trplot.y[j] = m2 * j - 100
46 |
47 | def plotwvf(prob):
48 |     for i in range(0, 100):
49 |         wvplot.color = color.yellow
50 |         wvplot.x[i] = 8 * i - 400 # convenient coordinates
51 |         wvplot.y[i] = 4.0 * prob[i] - 150 # for centered figure
52 |
53 |     oldE = energy(path) # find E of path
```

Rys.4: Funkcje rysujące wykresy odpowiednio trajektorii na osi xy oraz prawdopodobieństwa stanu podstawowego.

Iplementacja

```

55 while True: # pick random element
56     rate(10) # slows the painting
57     element = int(N * random.random()) # Metropolis algorithm
58     change = 2.0 * (random.random() - 0.5)
59     path[element] += change # change path
60     newE = energy(path); # find new E
61     if newE > oldE and math.exp(- newE + oldE) <= random.random():
62         path[element] -= change # reject
63         plotpath(path) # plot resulting last trajectory
64     elem = int((path[element] * 16 + 50) # if path = 0, elem = 50

```

Rys.5: Zastosowanie algorytmu Metropolis.

```

70     if elem < 0:
71         elem = 0, # negative case not allowed
72     if elem > 100:
73         elem = 100 # if exceed max
74     probab[elem] += 1 # increase probabily for that x value
75     plotwvf(prob) # plot probab
76     oldE = newE

```

Rys.6: Funkcja rysująca wykres prawdopodobieństwa rosnący dla wartości x.

Bibliografia

"A Survey of Computational Physics"

Rubin H. Landau, José Páez and Cristian C. Bordeianu

Dziękujemy za uwagę!