

Funkcionális módszerek alkalmazhatóságának vizsgálata nemperturbatív kvantumrendszerekben

Molnár Barnabás
ELTE Fizika BSc II. éves hallgató

Témavezető: Fejős Gergely
ELTE TTK Fizikai- és Csillagászati Intézet, Atomfizika Tanszék



ELTE | TTK
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

1. Bevezetés

Kvantumos elméletekben fizikai mennyiségek kvantumos és termális átlagait funkcionál integrális alakban tudjuk kifejezni. Ezen funkcionálintegrálok elvégzése analitikusan triviális esetek kivételével nem lehetséges, így közelítésekhez kell folyamodnunk. Gyengén csatolt rendszereknél a perturbációs számítás jól működő módszer, azonban az így kapott közelítő eredmények erősen kölcsönható rendszerekre már nem alkalmazhatóak, így nem perturbatív közelítéseket kell találnunk.

A funkcionális renormálási csoport módszer (röviden: Functional Renormalization Group - FRG) a szóban forgó fizikai mennyiségekre vonatkozó funkcionálintegrálok elvégzését egy funkcionális differenciálegyenlet megoldására vezeti vissza. Ezt Wetterich-egyenletnek nevezzük, mely analitikusan nem megoldható, de nemperturbatív közelítések alkalmazására ad teret. Egy ilyen közelítés az úgynevezett lokális potenciál közelítés (röviden: Local Potential Approximation - LPA), mellyel jelen dolgozatban részletesen foglalkozunk.

Kvantummechanikában találunk olyan funkcionálintegrálokat, melyek eredményét a Schrödinger-egyenlet megoldásával is tudjuk számszerűsíteni. Ilyen mennyiség például a véges hőmérsékletű állapotösszeg, mely lényegében a Boltzmann-eloszlásban megjelenő normálási faktor. Az állapotösszezből következtetni tudunk a rendszer energiaspektrumára, illetve tetszőleges termodinamikai állapotjelzőkre is, így lényegében az állapotösszeg hőmérsékletfüggését meghatározva a rendszer termális viselkedésének leírását kaphatjuk.

Az állapotösszeg kifejezhető Feynman-féle pályaintegrállal és a Schrödinger-egyenlet megoldásaként kapott energia sajátértékekkel is. Ez lehetőséget ad arra, hogy meghatározzuk az LPA közelítés alkalmazhatóságát egyszerű rendszereken. Mostani vizsgálatunkhoz az anharmonikus oszcillátort választottuk. Az anharmonikus oszcillátor perturbációs számítással jól tárgyalható, így össze tudjuk hasonlítani a perturbatív közelítés eredményit az általunk kiszámolt nemperturbatív LPA eredményeivel.

A dolgozat célja elsősorban matematikai módszerfejlesztés. Az LPA futási egyenletének megoldására keresünk numerikusan kedvező módszert. A futási egyenletet rácson, és hatványsor alakban keresett megoldás segítségével is megoldjuk. Utóbbi esetén a szokványos sorfejtést alkalmazó módszer mellett, egy új formalizmust is kidolgoztunk. Ezek segítségével meghatározzuk az LPA relatív eltérését az Schrödinger-egyenlet megoldásaitól nulla hőmérsékleten, és futásidő szempontjából is összehasonlítjuk a metódusokat. A hatvány sor alakú ansatz esetén fontos kérdés a konvergencia, ezt is vizsgáljuk.

2. Állapotösszeg az energia sajátértékekkel

Az állapotösszeg a Schrödinger-egyenlet megoldásaként kapott energiasajátértékekből kifejezhető. Ez lehetőséget ad arra, hogy össze tudjuk vetni a közelítő módszereinket az egzakt megoldással. Az állapotösszeg a Hamilton-operátorral és annak sajátértékeivel kifejezve:

$$Z(\beta) = \text{Tr}(e^{-\beta\hat{H}}) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta E_m}. \quad (1)$$

Itt $\beta = 1/k_B T$, de mi a továbbiakban a $k_B = 1$ egységrendszerben dolgozunk.

Az állapotösszeg fontos tulajdonsága, hogy kifejezhetőek belőle olyan makroszkópikus termodinamikai állapotjelzők, melyek mérése lehetséges. Ilyen például az energia várható értéke, mely az alábbi módon kapható meg:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta). \quad (2)$$

A nulla hőmérsékletű esetnek megfelelő $\beta \rightarrow \infty$ határesetben, az alapállapot energiát kapjuk várhatóértékként:

$$E_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta). \quad (3)$$

A nemperturbatív közelítő módszerek tárgyalásánál ezzel a módszerrel fogjuk az alapállapot energiát kifejezni, de az egzakt megoldáshoz a Hamilton-operátor sajátérték egyenletének megoldását használjuk.

A funkcionális renormálási csoport lokális potenciál közelítésének alkalmazhatóságát vizsgáljuk ehhez, egy olyan kvantummechanikai rendszert választottunk, mely perturbációszámítással jól tárgyalta, így az anharmonikus oszcillátorra esett a választás. Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2 + g\hat{x}^4. \quad (4)$$

Mi a továbbiakban $m = \omega_0 = 1$ esetet vizsgáljuk, és $\hbar = 1$ egységrendszerben dolgozunk, de az így kapott eredményekből m és ω_0 tetszőleges értékeire megfelelő átskálázásokkal előállathatóak a számított mennyiségek. Látható, hogy a $g = 0$ esetben a harmonikus oszcillátort kapjuk, melynek sajátértékegyenletének megoldása analitikusan is lehetséges. Ez lehetőséget ad majd arra, hogy a numerikus módszereinket a harmonikus eseten validáljuk. A $g \ll 1$ esetben összehasonlítjuk a perturbatív és az egzakt eredményeket, és megvizsgáljuk, hogy milyen g értékekre ad alkalmazható közelítést. A $g \gg 1$ nem perturbatív rendszernél már csak a lokális potenciál közelítés eredményeit hasonlítjuk össze a sajátértékegyenletből kapott megoldásokkal.

A $g \neq 0$ esetben a sajátértékegyenletet analitikusan nem tudjuk megoldani, így numerikus megoldást keresünk. A rendszer Hamilton-operátora $\mathcal{L}^2$ reprezentációban:

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{2} + \left(\frac{x^2}{2} + gx^4 \right) \hat{I}. \quad (5)$$

Itt Δ a Laplace-operátort jelöli.

Ebből egy $N \times N$ mátrixot csinálunk úgy, hogy x -ben felveszünk egy intervallumot, és azt N egyenlő részre osztjuk. Ezen mátrix sajátértékeit a *python scipy* moduljának ritka mátrixokra optimalizált sajátértékegyenlet megoldó függvényével kerestük meg. Az alapállapot energiája

esetében a legkisebb sajátértékkel dolgozunk, de ha véges hőmérsékleten az állapotösszeget számítjuk akkor a (1)-ben látható szummás alakot kell használnunk. Természetesen nem lehetséges mind az N sajátérték megtalálása, így csak az első $M < N$ sajátértékre összegzünk, de mivel az exponenciális függvény gyorsan lecseng, így tudunk olyan M értéket választani, hogy elhanyagolható hibát kapjunk.

$$Z(\beta) = \sum_{m=0}^M e^{-\beta E_m}. \quad (6)$$

Mivel ezzel a módszerrel kapott eredmények megfelelő paraméterválasztással a később tárgyalt közelítő módszerekhez képest elhanyagolható hibával járnak, erre a megoldásra egzaktként fogunk hivatkozni. Tehát a numerikus eredmények pontossága az x -ben felvett intervallumtól, az N és az M számoktól függ. A $g = 0$ esetben ismert a harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenletének megoldása, és abból kiszámítható a véges hőmérsékletű állapotösszeg is.

$$E_n = \frac{1}{2} + n, \quad (7)$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \cdot H_n(x) \cdot e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (8)$$

$$\log Z_h = -\frac{\beta}{2} - \log(1 - e^{-\beta}). \quad (9)$$

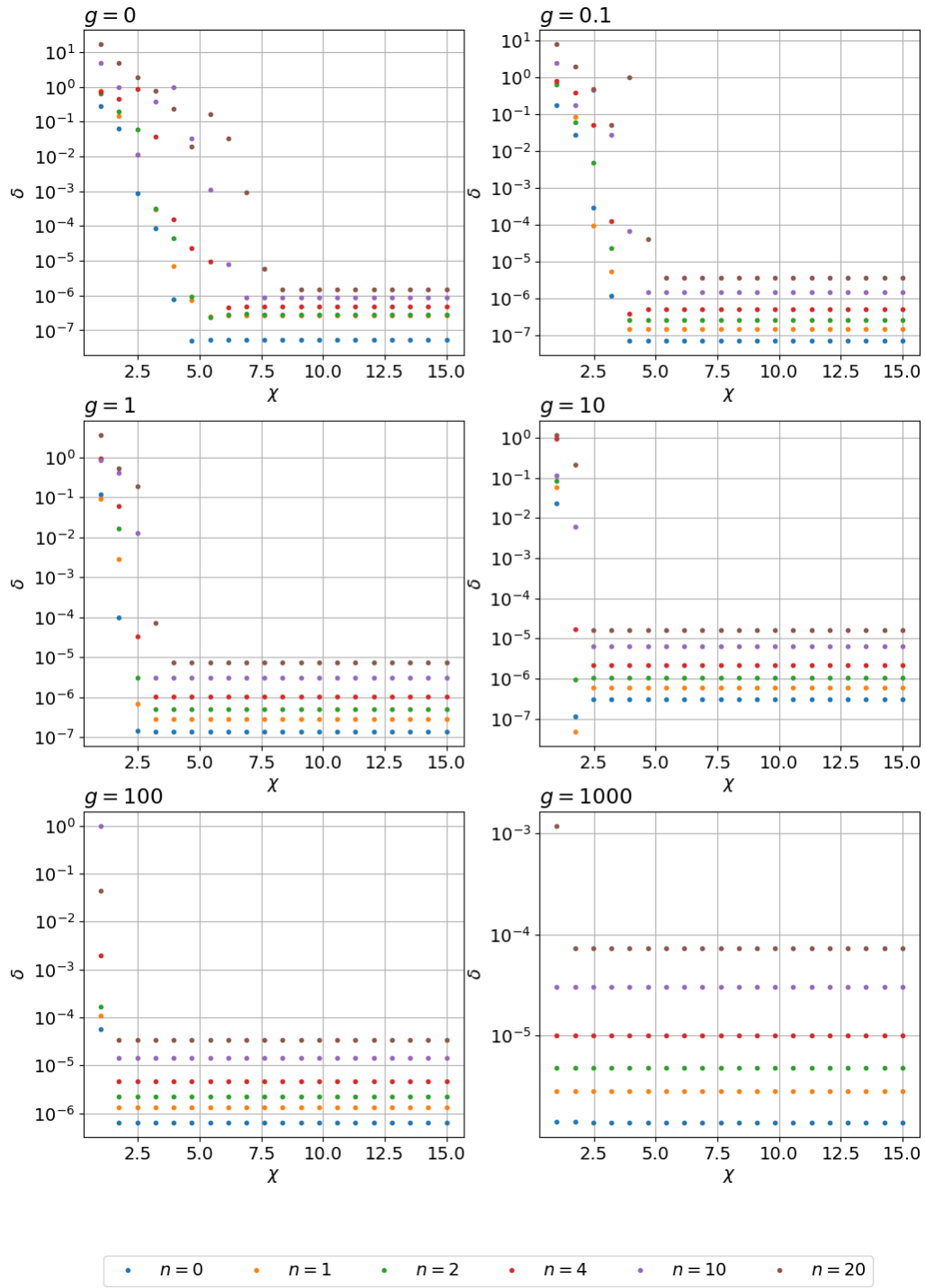
A hullámfüggvényben H_n a Hermite-polinomokat jelöli. Ezen analitikus eredményeken validáljuk a fentebb leírt numerikus módszerünket is.

x -ben vegyünk fel egy $[-\chi, \chi]$ intervallumot. Ezt osszuk fel Δx hosszúságú részekre. Így $N = \left\lfloor \frac{\chi}{\Delta x} \right\rfloor$, az alsó egész értékre azért van szükség mert N egész szám. Vizsgáljuk, hogy miként függ a numerikus eredmény pontossága χ paramétertől. Hat különböző nagyságrendbe eső g érték mellett fogunk vizsgálni. Minden vizsgálandó g értékre egy referencia energia szintet veszünk oly módon, hogy a lehető legpontosabb eredményt kapjuk. A referencia energia szintek szimulálásához $\chi = 30$ és $\Delta x = 0,00005$ paramétereket használtam. Az alábbi ábrán a referencia értékektől való relatív eltérést ábrázoltam χ függvényében, különböző energia szintekre. A Δx paramétert lerögzítjük, $\Delta x = 0,001$. A relatív eltérést az alábbi képlettel számoljuk.

$$\delta(\chi) = \frac{|E_{n,\text{ref}} - E_{n,\text{sim}}(\chi)|}{E_{n,\text{ref}}}. \quad (10)$$

Ahol $E_{n,\text{ref}}$ az n energiaszint referencia értéke, $E_{n,\text{sim}}(\chi)$ pedig az n energia szint szimulált értéke χ paraméter függvényében.

Az 1. ábrán látható, hogy g növelésével egyre kisebb χ értékekre ad kis relatív eltérést a szimuláció. Ez annak köszönhető, hogy g növelésével a klasszikusan bejárható terület csökken, így a karakterisztikus hossz is. Minél nagyobb energia szintet veszünk, úgy romlik a módszer pontossága, de ez megfelelő paraméterekkel, még így is elhanyagolható a később tárgyalt közelítő módszerek hibájához képest. g növelésével egyre kisebb χ értékeket elég vennünk, de Δx értékeket csökkentenünk kell a pontosság érdekében.



1. ábra. Szimulált energiaszintek relatív eltérése a referencia értékektől

3. Funkcionális renormálási csoport és a lokális potenciál közelítés

Az állapotösszeg egy konstans szorzó faktor erejéig felírható Feynman-féle pályaintegrállal is. A pályaintegrál levezetése hasonlóan történik az átmeneti amplitúdókra felírható funkcionálintegrállal, mivel az állapotösszeg definíciójában szereplő $\exp(-\beta\hat{H})$ operátor lényegében a képzetes időben felírt időfejllesztő operátor. Az állapotösszeg pályaintegráljában nem a Lagrange-függvény hanem a Hamilton-függvény szerepel, és megköveteljük hogy az $x(\tau)$ függvény periodikus, periódusának hossza éppen β .

$$Z(\beta) = \int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x \exp \left(- \int_0^\beta d\tau H(x(\tau)) \right). \quad (11)$$

Ebből létrehozunk a $Z[h]$ állapotfunktionalt úgy, hogy a $h(\tau) = 0$ esetben visszaadja az állapotösszeget. Az $Z[h]$ funkcionál definíciója:

$$Z[h] := \int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x \exp \left(- \int_0^\beta d\tau H(x(\tau)) + h(\tau)x(\tau) \right). \quad (12)$$

Ezen funkcionál negatív logaritmusának az $x(\tau)$ várható értéke szerinti Legendre-transzformáltjával fogunk dolgozni, melyet effektív hatásnak hívunk. A kitérés átlagát a várható érték képzés szabályainak megfelelően előállítjuk.

$$\bar{x}(\tau') = \frac{\int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x x(\tau') \exp \left(- \int_0^\beta d\tau H(x(\tau)) + h(\tau)x(\tau) \right)}{Z[h]}. \quad (13)$$

$$\Gamma[\bar{x}] = -\log Z[h] - \int d\tau h(\tau)\bar{x}(\tau). \quad (14)$$

Fontos tulajdonság, hogy itt $h(\tau) = 0$ fizikailag releváns esetben $\Gamma[\bar{x}_{\text{ph}}] = -\log Z$. Itt $\bar{x}_{\text{ph}}$ a $h(\tau) = 0$ esetben megvalósuló várható érték.

Az így kapott funkcionált azért nevezzük kvantum effektív hatásnak, mert a viselkedése a klasszikus mechanikából ismert hatás elvvel mutat analógiát. Az első funkcionál deriváltja a $-h(\tau)$, mely a fizikailag releváns esetben nulla, így itt is extrémális lesz a $\Gamma[\bar{x}]$ a megvalósuló esetben.

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{x}(\tau)} = -h(\tau), \quad \left. \frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{x}(\tau)} \right|_{\bar{x}_{\text{ph}}} = 0, \quad \Gamma[\bar{x}_{\text{ph}}] = -\log Z. \quad (15)$$

A funkcionális renormálási csoport a fluktuációk szisztematikus figyelembe vételén alapul. Ehhez egy úgynevezett regulátor függvényt használunk, hogy a k skálaparaméter alatti fluktuációkat elimináljuk. A regulátorfüggvény szabadon választható, de ahhoz, hogy így viselkedjen, teljesítenie kell néhány feltételt.

Az R_k regulátorfüggvényre az alábbi tulajdonságokat követeljük meg Fourier-térben.

$$R_k(\omega_1, \omega_2) = 2\pi \cdot r_k(\omega_1) \cdot \delta(\omega_1 + \omega_2), \quad (16)$$

$$\begin{aligned} k = 0 : r_k(\omega) &= 0, \\ k \rightarrow \infty : r_k(\omega) &\rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (17)$$

Tehát a regulátorfüggvény funkcionális értelemben szimmetrikus. $k \rightarrow \infty$ esetben minden fluktuációt eliminál, $k = 0$ esetben minden fluktuációt megtart. Ezen kívül a legfontosabb tulajdonsága, hogy a fluktuációkat szeparálja Fourier-térben. Tehát azzal, hogy k skálaparaméter feletti frekvenciákra kicsi értékeket vesz fel, ott megtartja a fluktuációkat. A k -nál kisebb frekvenciák esetén viszont nagy, ott elnyomja a fluktuációkat.

A regulátor függvény segítségével létrehozuk az alább definiált $\Gamma_k[\bar{x}]$ funkcionált, melyet skála-függő kvantum effektív hatásnak nevezünk:

$$\begin{aligned} \exp(-\Gamma_k) := \int_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}x \left[\exp \left(- \int_0^\beta d\tau H(x(\tau)) + h(\tau) [x(\tau) - \bar{x}(\tau)] - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' [x(\tau) R_k(\tau, \tau') x(\tau') - \bar{x}(\tau) R_k(\tau, \tau') \bar{x}(\tau')] \right) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

A $k \rightarrow \infty$ határesetben a regulációval létrehozott $\Gamma_k[\bar{x}]$ funkcionál minden fluktuáció kiirtása után a klasszikus hatással egyezik meg, ami ebben az esetben a képzetes időváltozó miatt nem a Lagrange-függvény hanem a Hamilton-függvény idő szerinti integrálja lesz.

$$\Gamma_\infty[\bar{x}] = \int d\tau H(\bar{x}(\tau)). \quad (19)$$

A reguláció másik tulajdonsága, hogy ha a k skálaparaméter zérus, akkor minden fluktuációt figyelembe vettünk, így megkapjuk a kvantum effektív hatást. Tehát a feladatunk a $k \rightarrow \infty$ ismert esetből egy k szerinti futás egyenlet segítségével fejleszteni a skála-függő effektív hatást a keresett $k = 0$ értékre. Ezt a feladatot a Wetterich-egyenlet [1] segítségével végezhetjük el, mely egy funkcionális differenciálegyenlet. Peremfeltételként $k \rightarrow \infty$ esetén a klasszikus hatás szolgál:

$$\partial_k \Gamma_k[\bar{x}] = \frac{1}{2} \int \int d\tau d\tau' (\Gamma_k^{(2)} + R_k)^{-1}(\tau, \tau') \partial_k R_k(\tau, \tau'). \quad (20)$$

Az egyenletben R_k a regulátorfüggvényt jelöli, $\Gamma_k^{(2)}$ pedig a skála-függő effektív hatás második funkcionál deriváltja:

$$\Gamma_k^{(2)}[\bar{x}] \Big|_{\tau, \tau'} = \frac{\delta^2 \Gamma_k}{\delta \bar{x}(\tau) \delta \bar{x}(\tau')}. \quad (21)$$

Ezen egyenlet megoldása analitikusan nem lehetséges, és numerikusan is a funkcionál integrálok elvégzéséhez hasonló nehézségekbe ütközünk. Előnye azonban az, hogy a $\Gamma_k[\bar{x}]$ funkcionálra felírt különböző ansatzok nem perturbatív közelítésekhez vezetnek. Az egyik ilyen lehetőség a lokális potenciál közelítés melyben feltesszük, hogy a skála-függő hatás a klasszikus hatáshoz hasonló alakban keresendő. A skála-függést az effektív potenciálba vesszük figyelembe. Az így felírt ansatz:

$$\Gamma_k[\bar{x}] = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \right)^2 + V_k(\bar{x}(\tau)) \right]. \quad (22)$$

A fizikailag releváns esetben az effektív hatás extrémális, ez az ansatzunkra nézve azt jelenti, hogy az időderiválttól függő tagnak zérusnak kell lennie. Ez azt jelenti, hogy a kitérés várható értéke időben állandó, így a továbbiakban ez, mint egy skalár változó játszik szerepet, nem mint egy függvény. A Wetterich-egyenlet segítségével levezethető a V_k effektív potenciálra egy differenciál egyenlet, így a funkcionális differenciálegyenlet egy parciális differenciálegyenletté redukálódik [2][3].

$$\partial_k V_k = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\partial_k r_k(\omega_n)}{\omega_n^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} + r_k(\omega_n)} \quad , \quad \omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}. \quad (23)$$

Az egyenlet levezetéséhez Fourier-térben dolgoztunk, ezért jelenik meg az ω_n , továbbá kihasználtuk, hogy a regulátor funkcionális értelemben szimmetrikus, amint azt (16)-ban láthattuk.

Most térjünk rá a konkrét regulátor választásra. A lokális potenciál közelítéshez hasonló ansatzok esetén a Litim-féle optimalizált regulátorról belátható, hogy megfelelően definiált értelemben optimális [4]. Ez nem csak a futás optimalizálásához és így a közelítés pontosságának javításához vezet, de a képletek egyszerűsödését is magával hozza. Ezek alapján mi a továbbiakban az alább látható optimalizált regulátort használjuk.

$$r_k(\omega) = (k^2 - \omega^2) \cdot \Theta(k^2 - \omega^2), \quad (24)$$

$$\partial_k r_k = 2k \cdot \Theta(k^2 - \omega^2). \quad (25)$$

A regulátorban Θ a Heaviside-függvényt jelöli, δ pedig a Dirac-delta. Ezek alapján az effektív potenciál futása véges hőmérsékleten az optimalizált regulátorral:

$$\partial_k V_k = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=-N}^N \frac{2k}{\omega_n^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} + k^2 - \omega_n^2} \quad , \quad N = \left\lfloor \frac{k\beta}{2\pi} \right\rfloor. \quad (26)$$

Az N definíciójában alsó egész rész szerepel.

Mivel az ω_n^2 tag kiesik és máshol nem tartalmaz a kifejezés n függést a szumma elvégezhető. Az így kapott eredmény:

$$\partial_k V_k = \frac{1}{2\beta} \cdot \left(2 \left\lfloor \frac{k\beta}{2\pi} \right\rfloor + 1 \right) \cdot \frac{2k}{k^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2}} = \frac{k \left(2 \left\lfloor \frac{k\beta}{2\pi} \right\rfloor + 1 \right)}{\beta \left(k^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \right)}. \quad (27)$$

Vegyük észre, hogy az egyenlet jobb oldala $k \rightarrow \infty$ esetben nem nullához, hanem egy konstanshoz tart. Utóbbi egy $k \rightarrow \infty$ tartományból származó divergenciát okoz az effektív hatásban, melyet UV divergenciának nevezünk, és az effektív hatás konstanssal való eltolhatóságának a következménye. Ezen divergens tag eltüntetésének több módja van. Egyik lehetőség, hogy a kezdeti feltételben egy divergens tagot beépítünk, azonban ez numerikus számításoknál nem előnyös. A másik megoldás, hogy egy konstans levonásával az egyenlet jobb oldalát határértékben nullává tesszük. Ez a két lehetőség ekvivalens, de a számítógépes szimulációk szempontjából a második a használhatóbb. A határérték kiszámítása után az alábbi egyenletre jutunk.

$$\partial_k V_k = \frac{k \left(2 \left\lfloor \frac{k\beta}{2\pi} \right\rfloor + 1 \right)}{\beta \left(k^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \right)} - \frac{1}{\pi}. \quad (28)$$

Ha valamilyen $k = \Lambda \gg 1$ értékről indítjuk a futást, peremfeltételként V_Λ értékre a Hamilton-függvény potenciál része adódik. Ez esetünkben az anharmonikus oszcillátor potenciál függvénye.

$$V_\Lambda(\bar{x}) = \frac{\bar{x}^2}{2} + g\bar{x}^4. \quad (29)$$

A $k = 0$ esetre fejlesztve az effektív hatás ezzel az ansatzal az $\bar{x}$ időfüggésének elhagyásával.

$$\Gamma_0[\bar{x}] = V_0(\bar{x})\beta. \quad (30)$$

A fizikailag releváns esetben Γ_0 visszaadja az állapotösszeg negatív logaritmusát. Az extrémális eset akkor következik be, ha $V_0(\bar{x})$ függvénynek szélsőértéke van. Amennyiben a peremfeltételben megadott klasszikus potenciál páros, ez mindig az $\bar{x} = 0$ helyen lesz. Ezek alapján felírhatjuk az alábbi összefüggést:

$$-\log Z(\beta) = \beta V_0|_{\bar{x}=0}. \quad (31)$$

Összefoglalva a recept a következő: Egy $k = \Lambda \gg 1$ értéken ismerjük az effektív potenciált, ez a kezdőfeltételként megadott klasszikus potenciál. A (28) segítségével $k = 0$ értékre fejlesztjük az effektív potenciált. Ezt kiértékeljük $\bar{x} = 0$ helyen, és ebből kifejezzük a fizikai jelentéssel is bíró $\log Z(\beta)$ mennyiséget. Ebből már számítható az energia várható értéke, és további termodinamikai állapotjelzők is.

Most nézzük meg a nulla hőmérsékletű esetet. Ekkor $\beta \rightarrow \infty$, így az effektív potenciál egyenlete az alábbi módon változik.

$$\partial_k V_k = \frac{k^2}{\pi \left(k^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \right)} - \frac{1}{\pi}. \quad (32)$$

A peremfeltétel a véges hőmérséklethez hasonlóan itt is a klasszikus potenciál lesz, de a V_0 kiértékelésekor $\bar{x} = 0$ -ban már rögtön az alapállapot energiát kapjuk meg.

$$E_0 = V_0|_{\bar{x}=0}. \quad (33)$$

4. Perturbációs számítás

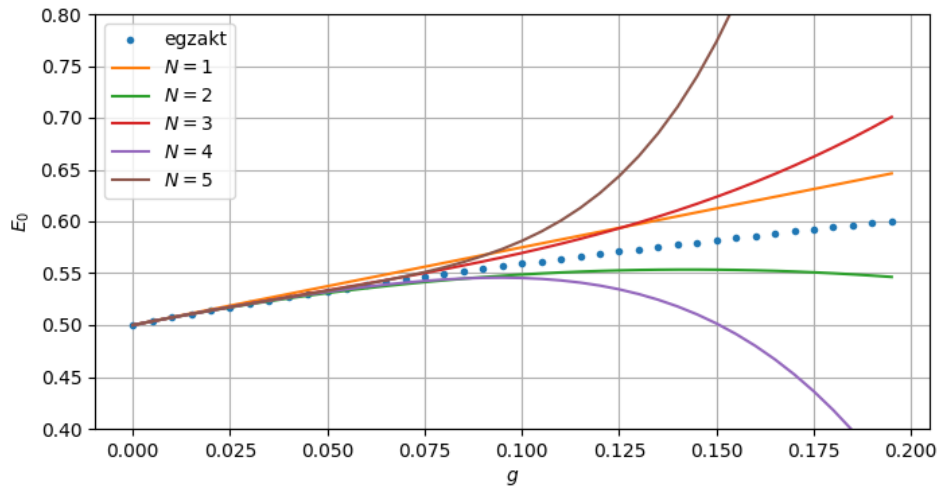
A perturbációs számítás azon alapszik, hogy a rendszerben létezik valamilyen kicsiny paraméter, és a fizikai mennyiségeket ennek Taylor-soraként állítjuk elő. Kvantumtérelméletekben ez általában a csatolási állandó szerinti sorfejtést jelent. Kvantummechanikában egy perturbatív Hamilton-operátort $\hat{H} = \hat{H}_0 + g\hat{H}_p$ alakban írunk fel. Az energia sajátértékeket, és a sajátvektorokat g hatványsorában keressük. A perturbatív közelítés eredményeként a $\hat{H}_0$ sajátértékeihez különböző rendű korrekciókat adunk hozzá. Esetünkben $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2}$ harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora. Ennek sajátértékei a (7)-ben olvashatóak. Az anharmonikus oszcillátor esetén $\hat{H}_p = \hat{x}^4$. Az alapállapot energiára fogjuk összehasonlítani a perturbáció számítását a 2. fejezetben leírt egzakt eredményekkel. Az alapállapot energiát a fentebb leírtak alapján g hatványsorában keressük:

$$E_0(g) = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n g^n. \quad (34)$$

A perturbációs együtthatókat az alábbi táblázatban olvashatjuk [5].

n	A_n
1	$3/4$
2	$-21/8$
3	$333/16$
4	$-30885/128$
5	$916731/256$

1. táblázat. A perturbációs sor együtthatói az anharmonikus oszcillátor alapállapot energiájára



2. ábra. A perturbációs számítás eredményei összehasonlítva az egzakt eredményekkel

A 2. ábrán láthatóak a perturbációs rendekhez tartozó eredmények az alapállapot energiára vonatkozóan. Tehát a 1. táblázatban látható A_n értékekkel felírt polinomok.

$$E_p^{(N)}(g) = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^N A_n g^n. \quad (35)$$

Ezen polinomokat hasonlítjuk össze az egzakt eredményekkel. Jól látható, hogy már kicsiny g értékekre sem ad a perturbációs számítás jó közelítést. Ennek oka, hogy $g = 0$ körül a sor konvergencia sugara nulla. Körülbelül $g = 0.1$ után a perturbációs számítás hibája akkora, hogy nem alkalmazható a közelítés, és ezen az sem segít ha magasabb rendeket veszünk figyelembe. Ez analóg a térelméletekben használatos perturbációs számítással. Ott a csatolási állandó szerinti sorfejtés is aszimptotikus jelleget mutat.

5. Rácsra helyezett effektív potenciál

A (28) egyenletet szeretnénk megoldani. Analitikus megoldásra általános esetben nincs esélyünk, de numerikus megoldásokat kereshetünk. Az ilyen parciális differenciálegyenlet megoldásának egy módja, hogy az $\bar{x}$ változóban egy 1 dimenziós rácsra helyezzük az effektív potenciált. Ez technikailag azt jelenti, hogy egy intervallumot felosztunk egyenlő részekre, és az itt felvett függvényértékekből egy sorozatot alkotunk. Ezen sorozatelemeknek van k függése. Az egyenletben szereplő $\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2}$ tagot, úgy számolhatjuk ki, hogy a kiértékelendő hely körül néhány pontban ismert függvényértékekből fejezzük ki. Tehát a második derivált operátort diszkretizáljuk. A legegyszerűbb mód az lenne, hogy csak 3 pontból, tehát a kiértékelendő helytől egyel balra és jobbra lévő értékekből fejezzük ki, de mi most a nagyobb pontosság érdekében 5 pontból számoljuk. Ehhez használjuk a véges különbségek együtthatóit[6], tehát az alábbi közelítést.

$$\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2}(\bar{x}) \approx \frac{-V_k(\bar{x} - 2h) + 16V_k(\bar{x} - h) - 30V_k(\bar{x}) + 16V_k(\bar{x} + h) - V_k(\bar{x} + 2h)}{12h^2}. \quad (36)$$

Itt h a rácsállandó, tehát a rácspontok távolsága. Természetesen ez a közelítés az intervallum szélén nem alkalmazható, ugyan is nincsen a rácson minden a képletben felhasznált pont. Ekkor szintén 5 pontból számoljuk a második deriváltat, de más képlettel, lényegében bal és jobb oldali deriváltakat veszünk.

$$\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \approx \frac{11V_k(\bar{x} - h) - 20V_k(\bar{x}) + 6V_k(\bar{x} + h) + 4V_k(\bar{x} + 2h) - 1V_k(\bar{x} + 3h)}{12h^2}, \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \approx \frac{35V_k(\bar{x}) - 104V_k(\bar{x} + h) + 114V_k(\bar{x} + 2h) - 56V_k(\bar{x} + 3h) + 11V_k(\bar{x} + 4h)}{12h^2}, \quad (38)$$

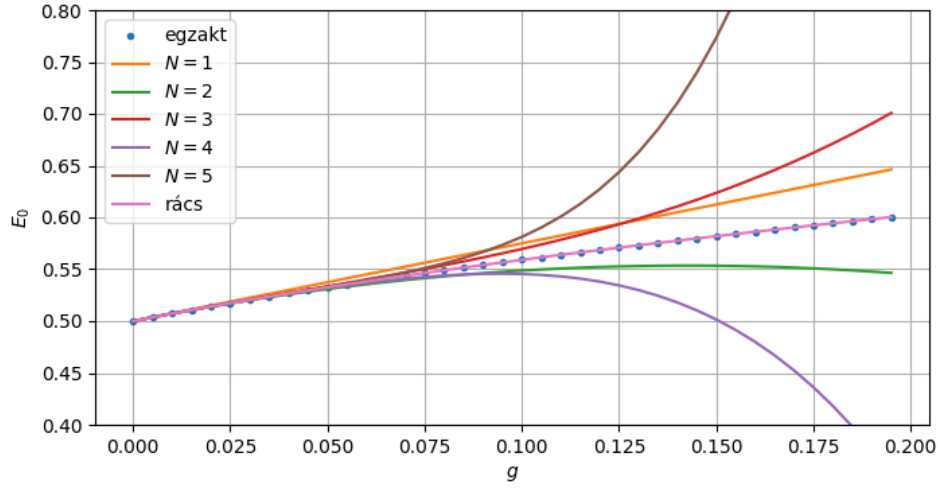
$$\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \approx \frac{-1V_k(\bar{x} - 3h) + 4V_k(\bar{x} - 2h) + 6V_k(\bar{x} - h) - 20V_k(\bar{x}) + 11V_k(\bar{x} + h)}{12h^2}, \quad (39)$$

$$\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} \approx \frac{11V_k(\bar{x} - 4h) - 56V_k(\bar{x} - 3h) + 114V_k(\bar{x} - 2h) - 104V_k(\bar{x} - h) + 35V_k(\bar{x})}{12h^2}. \quad (40)$$

A fentebb olvasható képletek felhasználásával minden sorozat elemre egy differenciálegyenletet vezetünk le, ha a második deriváltakra felírt közelítéseket beírjuk (28)-be. Az így kapott egyenletek csatolt differenciálegyenlet rendszert alkotnak. A differenciálegyenlet rendszer peremfeltételei (29)-ben láthatóak. Tehát egy $k = \Lambda \gg 1$ értékről indítjuk a sorozatelemek futását a klasszikus potenciálnak megfelelő értékekről. Mivel $k = 0$ esetben szeretnénk vizsgálni, az $\bar{x} = 0$ helynek megfelelő rácspont értékéből a (31) egyenlet segítségével kifejezhető az állapotösszeg negatív logaritmus. Ha a $\beta \rightarrow \infty$ határesetet nézzük, akkor (32)-be beírva a közelítéseket kapunk a véges hőmérsékletű esethez hasonló csatolt differenciálegyenlet rendszert, melynek peremfeltételei szintén a klasszikus potenciálnak megfelelő értékek, de a $k = 0$, $\bar{x} = 0$ pontban kiértékelve rögtön az alapállapot energiát kapjuk meg.

Ha az intervallumunkat N részre osztottuk, N darab differenciálegyenletből áll az egyenletrendszerünk. Ezt numerikusan Runge-Kutta módszerrel oldjuk meg. A szimulációt *C++* programnyelvben a *GNU Scientific Library* könyvtár segítségével írtam.

A 3. ábrán láthatóak a perturbációs rendek (35) alapján. Továbbá az egzakt eredmények és a rácsra tett effektív potenciál módszer eredményei az anharmonikus oszcillátor alapállapot energiájára. Az utóbbi szimuláció esetén fontos paraméter, hogy milyen k értékről fejlesztjük le az effektív hatást, ez esetünkben $\Lambda = 10^8$. Jól látható, hogy a perturbációs számítással ellentétben az LPA közelítés jól illeszkedik az egzakt eredményekhez kis g esetén. A vizsgált $g \in [0; 0,2]$ intervallumon nincs jele annak, hogy az LPA eltávolodna az egzakt eredménytől.

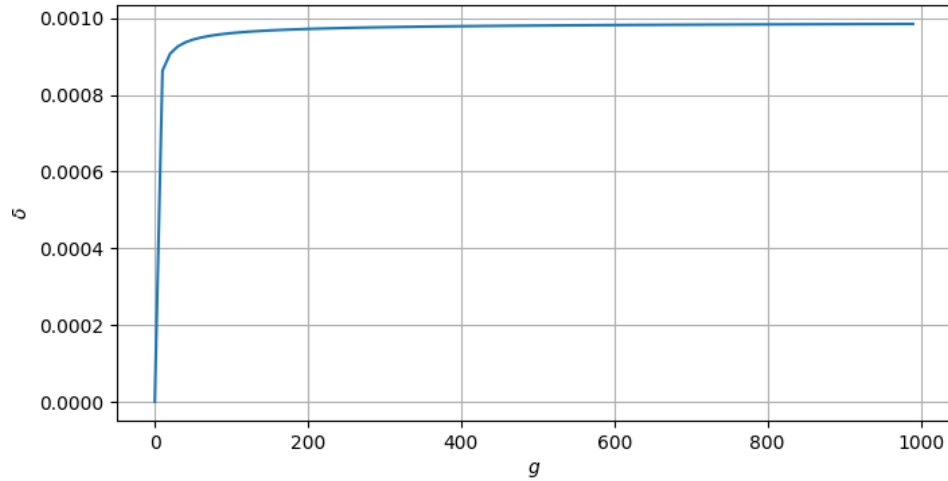


3. ábra. A rácsra helyezett effektív potenciál eredményei összehasonlítva a perturbációs számítás közelítésével az anharmonikus oszcillátor alapállapot energiájára, $\Lambda = 10^8$.

Meg szeretnénk vizsgálni, hogy a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció eredményei, hogyan viszonyulnak az egzakt értékekhez nagy g esetén. Ehhez a szimuláció eredményeinek relatív eltérését vizsgáljuk az egzakt értékekhez viszonyítva.

$$\delta = \frac{|E_{0,\text{rács}} - E_{0,\text{egzakt}}|}{E_{0,\text{egzakt}}} \quad (41)$$

Itt $E_{0,\text{rács}}$ a rácsra tett effektív potenciál szimuláció alapállapot energiára kapott értékeit, $E_{0,\text{egzakt}}$ pedig a 2. fejezetben tárgyalt egzakt módszer eredményeit jelöli.



4. ábra. A rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció alapállapot energiára számolt eredmények relatív eltérése az egzakt értékektől, $\Lambda = 10^8$.

A 4. ábrán láthatóak a relatív eltérések g függése. Itt is $k = \Lambda = 10^8$ értékről fejlesztjük le az effektív potenciált. Látható, hogy a relatív eltérés kis g értékekre gyorsan nő, amíg a meredekség lecsökken, és innentől kezdve g értékétől lényegében függetlenül 0,1% alatt marad.

Összefoglalva a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció alapállapotú energiára számított értékeit hasonlítottuk össze az egzakt módszer és a perturbációs számítás eredményeivel. A perturbatív közelítéssel ellentétben az LPA nemperturbatív eredményei nagy g értékekre is jó közelítést adnak. Az LPA közelítés relatív hibája lényegében g -tól független, és 0,1%-nál kisebb.

6. Hatványsor alakban keresett megoldások

6.1. Egyenletek analitikus előállítása

A rácsra helyezett effektív potenciál szimulációk elég nagy számítási kapacitást igényelnek, ennek elsődleges oka, hogy az intervallumon nagyon sűrűn kell vennünk a pontokat a pontos eredményekhez. Az így létrejövő differenciálegyenlet rendszer nagyon sok egyenletből áll, így hosszú a futási idő, főleg véges hőmérsékletű esetben. Az egyenletek számának csökkentésére tett kísérlet, ha a $\Gamma_k[\bar{x}]$ funkcionálra nem a (22)-ben látható ansatzot tesszük fel, hanem az effektív potenciál tagot $\bar{x}$ szerint sorba fejtjük, és így egy hatványsor alakban keressük a megoldást, ahol a k függést az együtthatók hordozzák magukban.

$$\Gamma_k[\bar{x}] = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \right)^2 + C_k + \frac{1}{2} \omega_{0,k}^2 \bar{x}^2 + g_k \bar{x}^4 + A_k \bar{x}^6 + B_k \bar{x}^8 + \dots \right]. \quad (42)$$

Az együtthatókra a (28)-ból levezethetőek a differenciál egyenletek. Az V_k feltételezett alakját beírjuk az egyenletbe. Ehhez szükségünk lesz az effektív potenciál $\bar{x}$ szerinti második parciális deriváltjára is.

$$V_k(\bar{x}) = C_k + \frac{1}{2} \omega_{0,k}^2 \bar{x}^2 + g_k \bar{x}^4 + A_k \bar{x}^6 + B_k \bar{x}^8 + \dots, \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2} = \omega_{0,k}^2 + 12g_k \bar{x}^2 + 30A_k \bar{x}^4 + 56B_k \bar{x}^6 + \dots. \quad (44)$$

Ezen kifejezéseket behelyettesítjük a (28)-be. A képletek rövidítése érdekében bevezetünk egy α_k segédmenntiséget.

$$\alpha_k = \frac{k \left(2 \left\lfloor \frac{k\beta}{2\pi} \right\rfloor + 1 \right)}{\beta}. \quad (45)$$

Ezzel a segédmenntiséggel felírt egyenlet:

$$\partial_k V_k = \frac{\alpha_k}{k^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2}} - \frac{1}{\pi}. \quad (46)$$

Most behelyettesítjük a (43) és a (44) kifejezéseket az egyenletünkbe.

$$\begin{aligned} \partial_k C_k + \frac{1}{2} \partial_k \omega_{0,k}^2 \cdot \bar{x}^2 + \partial_k g_k \cdot \bar{x}^4 + \partial_k A_k \cdot \bar{x}^6 + \partial_k B_k \cdot \bar{x}^8 + \dots = \\ = \frac{\alpha_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2 + 12g_k \bar{x}^2 + 30A_k \bar{x}^4 + 56B_k \bar{x}^6 + \dots} - \frac{1}{\pi}. \end{aligned}$$

Mi az együtthatókra szeretnénk levezetni differenciálegyenleteket, így ahhoz, hogy ezt megkapjuk, az egyenlet jobb oldalát sorba fejtjük $\bar{x}$ szerint. A két oldalon $\bar{x}$ polinomjai állnak, az együtthatók egyenlővé tételével az ansatzban szereplő k függő tagok mindegyikére egy-egy differenciálegyenletet kapunk. Ez egy csatolt differenciálegyenlet rendszert alkot.

(28) jobb oldalát sorba fejtve kapjuk az alábbi egyenletet. Most csak nyolcad fokú hatványsor alakú ansatzal dolgoztunk, így a sorfejtést is nyolcad rendig végeztük, de ha magasabb fokú tagokra is szeretnénk differenciálegyenletet levezetni, akkor is működik a módszer. Már az itt tárgyalt esetben is látszik, hogy az így kapott egyenletek nagyon bonyolultak. Magasabb rendekben még hosszabb képleteket kapunk.

$$\begin{aligned}
& \partial_k C_k + \frac{1}{2} \partial_k \omega_{0,k}^2 \cdot \bar{x}^2 + \partial_k g_k \cdot \bar{x}^4 + \partial_k A_k \cdot \bar{x}^6 + \partial_k B_k \cdot \bar{x}^8 + \dots = \\
& = \frac{\alpha_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} - \frac{1}{\pi} - \frac{12\alpha_k g_k}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} \cdot \bar{x}^2 + \frac{\alpha_k \left(\frac{144g_k^2}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} - \frac{30A_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} \right)}{k^2 + \omega_{0,k}^2} \cdot \bar{x}^4 + \\
& \quad + \frac{\alpha_k \left(\frac{720A_k g_k}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} - \frac{56B_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} - \frac{1728g_k^3}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^3} \right)}{k^2 + \omega_{0,k}^2} \cdot \bar{x}^6 + \\
& \quad + \frac{\alpha_k \left(\frac{900A_k^2}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} - \frac{12960A_k g_k^2}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^3} + \frac{1344B_k g_k}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} + \frac{20736g_k^4}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^4} \right)}{k^2 + \omega_{0,k}^2} \cdot \bar{x}^8 + \dots
\end{aligned}$$

A két oldalon látható polinomok együtthatóinak egyenlővé tételével kapunk egy csatolt differenciálegyenlet rendszert. Az így előállított differenciálegyenlet rendszereket analitikusan nem tudjuk megoldani, de numerikusan alacsony fokú polinom ansatzokra könnyen kezelhető a probléma. A rácsra helyezett effektív potenciál megoldással szemben a módszer előnye, hogy már nagyságrendekkel kevesebb egyenletből álló egyenletrendszerek esetén is pontos megoldást ad, de az egyenleteket analitikusan a sorfejtés során kell előállítanunk, és ez magasabb fokú esetekben nagyon körülményes. A hátránya a módszernek, hogy jóval bonyolultabb egyenleteket kapunk, ami numerikusan is problémákat okoz.

A nyolcadfokú polinom alakban keresett megoldás esetén kapott differenciálegyenlet rendszer:

$$\partial_k C_k = \frac{\alpha_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} - \frac{1}{\pi}, \quad (47)$$

$$\partial_k \omega_{0,k}^2 = -\frac{24\alpha_k g_k}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2}, \quad (48)$$

$$\partial_k g_k = \frac{\alpha_k \left(\frac{144g_k^2}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} - \frac{30A_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} \right)}{k^2 + \omega_{0,k}^2}, \quad (49)$$

$$\partial_k A_k = \frac{\alpha_k \left(\frac{720A_k g_k}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} - \frac{56B_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} - \frac{1728g_k^3}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^3} \right)}{k^2 + \omega_{0,k}^2}, \quad (50)$$

$$\partial_k B_k = \frac{\alpha_k \left(\frac{900A_k^2}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} - \frac{12960A_k g_k^2}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^3} + \frac{1344B_k g_k}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2} + \frac{20736g_k^4}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^4} \right)}{k^2 + \omega_{0,k}^2}. \quad (51)$$

A $\beta \rightarrow \infty$ nulla hőmérsékletű esetben az egyenletek nem módosulnak, csak az α_k segédmenyi-ségben kell kiszámolnunk a határértéket.

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \alpha_k = \frac{k^2}{\pi}. \quad (52)$$

A fentiekben leírt módszerrel előállított differenciálegyenlet rendszer peremfeltételei szintén a klasszikus potenciálból adódnak. Esetünkben ez az anharmonikus oszcillátor potenciál függvénye. Az egyenleteinket $k = \Lambda \gg 1$ értékről indítjuk, a differenciálegyenlet rendszer segítségével

$k = 0$ értékekre fejlesztjük az együtthatókat.

$$V_\Lambda(\bar{x}) = \frac{\bar{x}^2}{2} + g\bar{x}^4. \quad (53)$$

Ebből már látható, hogy az együtthatók peremfeltételei az alábbiak lesznek.

$$\omega_{0,\Lambda}^2 = 1, \quad g_\Lambda = g, \quad A_\Lambda = B_\Lambda = C_\Lambda = 0.$$

A $k = 0$ esetben az effektív potenciál $\bar{x} = 0$ helyen felvett értékéből számoljuk az állapotösszeg negatív logaritmusát a (31) egyenlet alapján. Ez a polinom alakban felírt ansatz miatt csak a konstans tagot tartalmazza.

$$\beta V_0|_{\bar{x}=0} = \beta C_0 = -\log Z(\beta). \quad (54)$$

A $\beta \rightarrow \infty$ nulla hőmérsékletű esetben a (33) alapján a konstans tag $k = 0$ helyen felvett értéke már rögtön az alapállapot energiát adja meg.

$$V_0|_{\bar{x}=0} = C_0 = E_0. \quad (55)$$

Először egy olyan speciális közelítést vizsgálunk meg, amikor az ansatzban negyedfokú polinomot használunk, de sem az ω_0 , sem a g tag nem kap k függést. Az alábbi alakban keressük a megoldást:

$$\Gamma_k[\bar{x}] = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \right)^2 + C_k + \frac{1}{2} \omega_0^2 \bar{x}^2 + g\bar{x}^4 \right]. \quad (56)$$

Ebben az esetben csak C_k -nak van futása, tehát egy darab egyenletünk van. Ami a $\beta \rightarrow \infty$ esetben:

$$\partial_k C_k = \frac{k^2}{\pi(k^2 + \omega_0^2)} - \frac{1}{\pi} = \frac{-\omega_0^2}{\pi(k^2 + \omega_0^2)}. \quad (57)$$

Ezt az egyenletet analitikusan is meg tudjuk oldani az alábbi módon.

$$E_0 = C_{k=0} = \int_0^\infty dk \frac{\omega_0^2}{\pi(k^2 + \omega_0^2)} + C_\Lambda = \frac{\omega_0}{2}. \quad (58)$$

Az alapállapot energiára ebben a közelítésben a $g = 0$ harmonikus oszcillátor esetet kaptuk meg.

Most vizsgáljuk meg, hogy mi történik ha a megoldást szintén negyed fokú polinom alakban keressük, és az ω_0 együtthatónak adunk k függést, de a g tagot továbbra is konstansnak hagyjuk. Az így felírt ansatz a következő.

$$\Gamma_k[\bar{x}] = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \right)^2 + C_k + \frac{1}{2} \omega_{0,k}^2 \bar{x}^2 + g\bar{x}^4 \right]. \quad (59)$$

A korábban említett módszerrel itt is le tudunk vezetni egy differenciálegyenlet rendszert a $\omega_{0,k}$ és a C_k változókra.

$$\partial_k C_k = \frac{\alpha_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} - \frac{1}{\pi}, \quad (60)$$

$$\partial_k \omega_{0,k}^2 = -\frac{24\alpha_k g}{(k^2 + \omega_{0,k}^2)^2}. \quad (61)$$

Ezt az egyenletrendszert analitikusan itt már nem tudjuk megoldani egzaktul, de ha (61) jobb oldalán csak vezető rendig nézzük $\omega_{0,k}$ -t akkor, egy analitikusan is kezelhető problémára jutunk. Tehát az $\omega_{0,k} \approx \omega_0$ közelítéssel élve (61) jobb oldalán, az alábbi differenciálegyenletet kapjuk $\beta \rightarrow \infty$ esetben.

$$\partial_k \omega_{0,k}^2 = \frac{-24k^2 g}{\pi (k^2 + \omega_0^2)^2}. \quad (62)$$

Az egyenletet kiintegrálva kapjuk $\omega_{0,k}^2$ függvényt:

$$\omega_{0,k}^2 = \int_k^\infty dk' \frac{24k'^2 g}{\pi (k'^2 + \omega_0^2)^2} + \omega_{0,\Lambda}^2 = \frac{6g}{\pi} \left(\frac{2k}{k^2 + \omega_0^2} + \frac{\pi}{\omega_0} + \frac{2 \tan^{-1} \left(\frac{k}{\omega_0} \right)}{\omega_0} \right) + \omega_0^2. \quad (63)$$

Ezt a függvényt helyettesítjük be (60)-be. Így $\beta \rightarrow \infty$ nulla hőmérsékleten a C_k futása:

$$\partial_k C_k = \frac{k^2}{\pi \left(k^2 + \frac{6g}{\pi} \left(\frac{2k}{k^2 + \omega_0^2} + \frac{\pi}{\omega_0} + \frac{2 \tan^{-1} \left(\frac{k}{\omega_0} \right)}{\omega_0} \right) + \omega_0^2 \right)} - \frac{1}{\pi}. \quad (64)$$

Ezt g szerint sorba fejtjük első rendig, és kiintegráljuk. Így az alapállapot energiára kapunk közelítő eredményt.

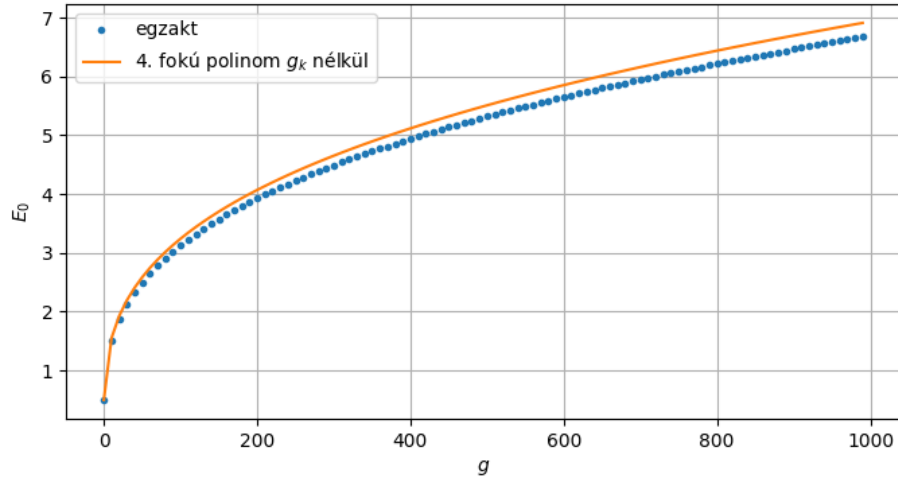
$$\begin{aligned} E_0 = C_{k=0} &= \int_0^\infty dk \left[\frac{1}{\pi} - \frac{k^2}{\pi \left(k^2 + \frac{6g}{\pi} \left(\frac{2k}{k^2 + \omega_0^2} + \frac{\pi}{\omega_0} + \frac{2 \tan^{-1} \left(\frac{k}{\omega_0} \right)}{\omega_0} \right) + \omega_0^2 \right)} \right] + C_\Lambda \approx \\ &\approx \int_0^\infty dk \left[\frac{\omega_0^2}{\pi (k^2 + \omega_0^2)} + \frac{6gk^2 \left(\pi (k^2 + \omega_0^2) - 2 (k^2 + \omega_0^2) \tan^{-1} \left(\frac{k}{\omega_0} \right) + 2k\omega_0 \right)}{\pi^2 \omega_0 (k^2 + \omega_0^2)^3} \right] = \frac{\omega_0}{2} + \frac{3}{4\omega_0^2} g. \end{aligned} \quad (65)$$

Ez megegyezik a 4. fejezetben olvasható perturbációs számítás első rendű eredményével. A 1. táblázatban éppen $3/4$ szerepel első rendű korrekcióként $\omega_0 = 1$ esetben.

A (60) és (61) egyenleteket közelítés nélkül, numerikusan is megoldjuk. A perturbatív eredményekről láttuk, hogy csak nagyon kicsiny g mellett adnak alkalmazható közelítést, reményeink szerint az egyenletrendszerek numerikus megoldásából kapott eredmények nagy g mellett is alkalmazhatóak maradnak.

Az egyenletrendszereket numerikusan a *python scipy* moduljának Runge-Kutta módszert alkalmazó differenciálegyenlet megoldó függvényének segítségével megoldjuk a nulla hőmérsékletű $\beta \rightarrow \infty$ esetre. Az alapállapot energia egzakt értékeit összehasonlítjuk az így kapott eredményekkel. A továbbiakban minden differenciálegyenlet megoldásakor $k = \Lambda = 10^8$ értékről fejlesztjük le az együtthatókat, a klasszikus potenciálból származó peremfeltételekről.

A 5. ábrán látható, hogy a sorfejtéssel kapott egyenletrendszer megoldásából származó eredmények már a legegyszerűbb esetben is jól megközelítik az egzakt értékeket. A perturbációs számítással ellentétben itt nagy g értékekre is viszonylag jó a közelítés.

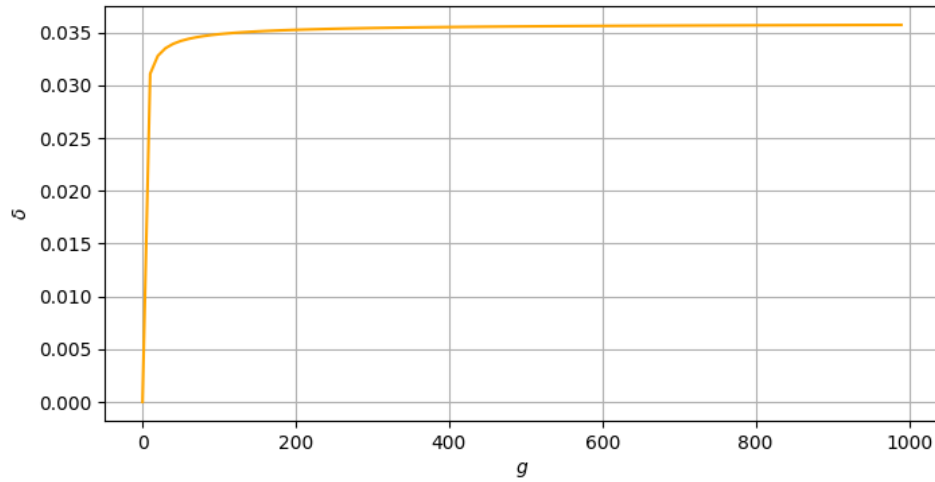


5. ábra. A (60) és (61)-ből álló differenciálegyenlet rendszer megoldásának, és az egzakt eredmények összehasonlítása, $\Lambda = 10^8$.

Vizsgáljuk a (60) és (61)-ből álló egyenletrendszer megoldásából származó nulla hőmérsékletű közelítés relatív eltérését az egzakt értékektől. Ehhez az alábbi alakban állítjuk elő a relatív eltéréseket:

$$\delta = \frac{|E_{0,\text{poly}} - E_{0,\text{egzakt}}|}{E_{0,\text{egzakt}}}. \quad (66)$$

Itt $E_{0,\text{poly}}$ a polinom alakban keresett megoldások egyenletrendszerének megoldásával kapott közelítés alapállapotú energiára adott eredményeit, $E_{0,\text{egzakt}}$ pedig az egzakt értékeket jelöli.



6. ábra. A (60) és (61)-ből álló differenciálegyenlet rendszer megoldásának, és az egzakt eredmények relatív eltérése, $\Lambda = 10^8$.

A 6. ábrán láthatjuk, hogy kis g esetén a relatív eltérés gyorsan nő, de egy idő után beáll egy adott értékre, és innen lényegében g -tól független. Összehasonlítva a rácsra tett effektív potenciál szimuláció relatív eltérését mutató 4. ábrával, megállapítható, hogy ott kisebb a relatív eltérés, de reményeink szerint az ansatz polinom fokszámának növelésével egyre közelebb jutunk az ott látott értékekhez.

Most a g tagnak is k függést adva a negyed fokú polinom alakú ansatzra is nézzük meg a sorfejtéssel előállított egyenleteket.

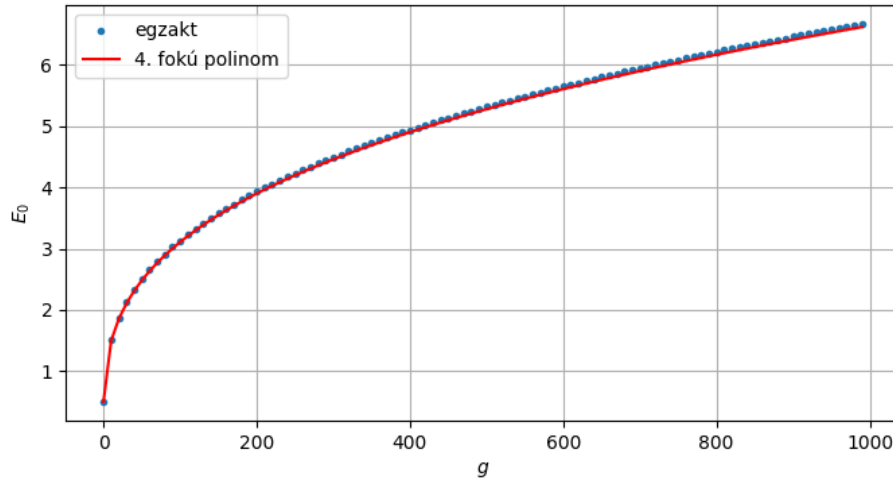
$$\Gamma_k[\bar{x}] = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \right)^2 + C_k + \frac{1}{2} \omega_{0,k}^2 \bar{x}^2 + g_k \bar{x}^4 \right]. \quad (67)$$

$$\partial_k C_k = \frac{\alpha_k}{k^2 + \omega_{0,k}^2} - \frac{1}{\pi}, \quad (68)$$

$$\partial_k \omega_{0,k}^2 = - \frac{24 \alpha_k g_k}{\left(k^2 + \omega_{0,k}^2 \right)^2}, \quad (69)$$

$$\partial_k g_k = \frac{144 \alpha_k g_k^2}{\left(k^2 + \omega_{0,k}^2 \right)^3}. \quad (70)$$

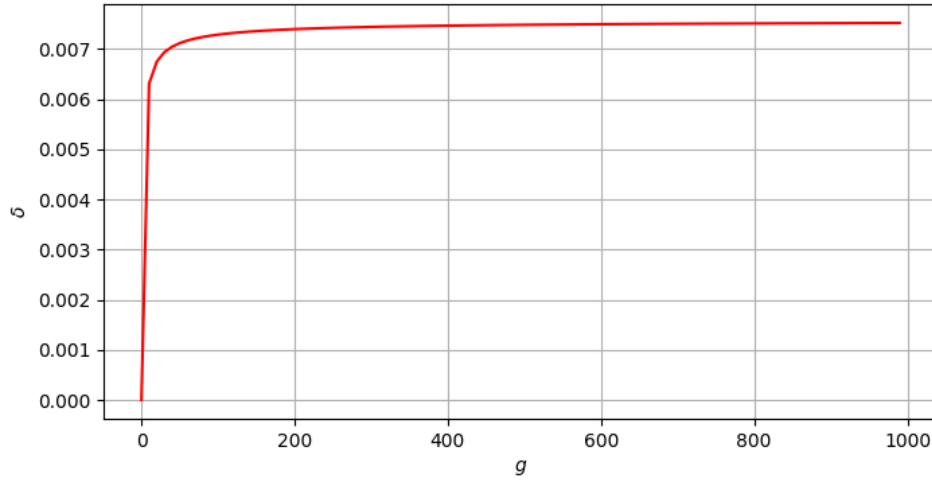
Itt is a fentebb említett Runge-Kutta differenciálegyenlet megoldó függvény segítségével, $k = \Lambda = 10^8$ értékről fejlesztjük le az együtthatókat a klasszikus potenciálból származó peremfeltételekről.



7. ábra. A (68), (69) és (70)-ből álló differenciálegyenlet rendszer megoldásának, és az egzakt eredmények összehasonlítása, $\Lambda = 10^8$.

A 7. ábrán látható a negyed fokú polinom ansatz egyenleteiből származó közelítés az alapállapot energiára. Ezt összehasonlítjuk az egzakt eredményekkel. A 5. ábrához képest látványosan jobb közelítést ad, és nagy g esetén is jól illeszkedik az egzakt értékekhez.

A 8. ábrán a negyed fokú polinom alakban keresett megoldás közelítés (66) alapján számolt relatív eltérésének g függését ábrázoltuk. Összehasonlítva a 6. ábrával, látható, hogy a g tagnak k függést adva érdemben csökkentettük a közelítés egzakttól való relatív eltérését.



8. ábra. A (68), (69) és (70)-ből álló differenciálegyenlet rendszer megoldásának, és az egzakt eredmények relatív eltérése, $\Lambda = 10^8$.

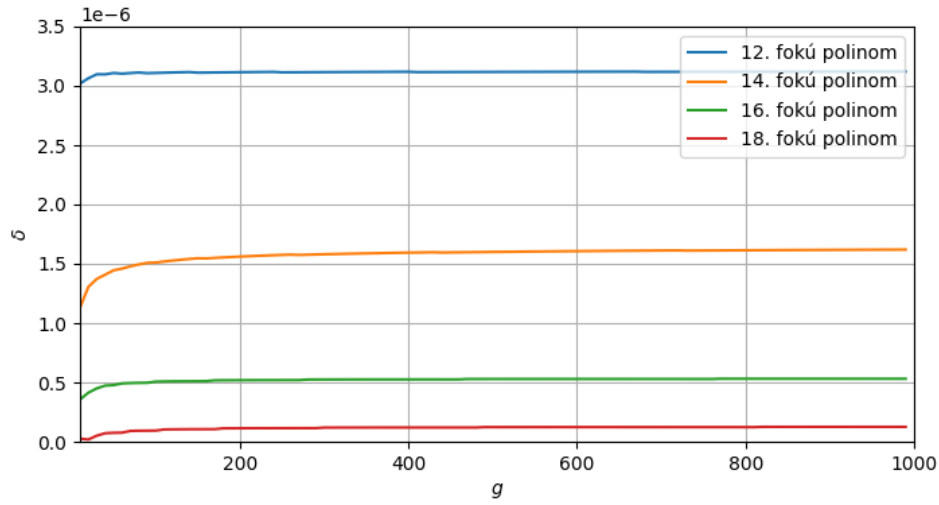
Ezen eredményeken felbuzdulva vizsgáljuk a magasabb fokú polinom alakban keresett megoldásokat. Fontos kérdés az így kapott eredmények konvergenciája. A perturbációs számításnál ismeretes, hogy az ilyen hatványsor alakú ansatzok aszimptotikus sorokhoz vezethetnek. A várakozásunk az, hogy amennyiben a polinom fokának növelésével az eredmények konvergálnak, határértékben a rácsra helyezett effektív potenciál módszerrel kapott eredményekhez közelít. Éppen ezért a magasabb fokú polinom ansatzokkal kapott közelítő eredmények a 5. fejezetben kapott eredményektől vett relatív eltérését vizsgáljuk. A relatív eltérést az alábbi képlet alapján számoljuk ebben az esetben:

$$\delta = \frac{|E_{0,\text{poly}} - E_{0,\text{rács}}|}{E_{0,\text{rács}}}. \quad (71)$$

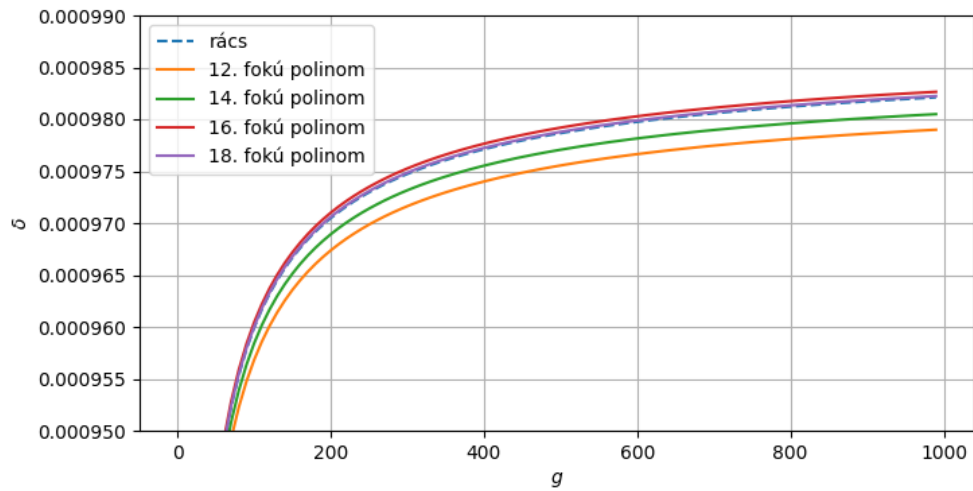
Itt $E_{0,\text{poly}}$ a különböző fokú polinom ansatzokból kapott közelítés alapállapoti energiára adott értékeit, $E_{0,\text{rács}}$ pedig a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció eredményeit jelöli.

A sorfejtésből kapott egyenletrendszer megoldásakor, és a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció esetén is $k = \Lambda = 10^8$ értékről indítjuk a differenciálegyenlet megoldó programot. A 9. ábrán látszik, hogy a várakozásunk beigazolódott. Az ansatz polinom fokszámának növelésével a közelítés eredményei egyre közelebb lesznek a rácson megoldott differenciálegyenletből kapott értékekhez. A polinom fokszámának növelésével az eredmények konvergálnak, mégpedig a várakozásunknak megfelelően a 5. fejezetben kapott értékekhez.

A 10. ábrán a rácson megoldott differenciálegyenlet esetén a (41) alapján, a polinom alakban keresett megoldások esetén (66) alapján számított egzakt értékektől vett relatív eltéréseket láthatjuk. Itt is megfigyelhető, hogy az ansatz polinom fokszámának növelésével az eredmények a rácson megoldott differenciálegyenletből kapott értékekhez közelednek. A hatványsor ansatz esetén is kijelenthető, hogy lényegében g -től függetlenül 0,1 % alatt marad a relatív eltérés.



9. ábra. A különböző fokú polinom alakban keresett megoldásokból származó közelítések relatív eltérése a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció eredményeitől, $\Lambda = 10^8$.



10. ábra. A rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció, és magasabb fokú polinom alakban keresett megoldások eredményeinek relatív eltérése az egzakt értékektől, $\Lambda = 10^8$.

Ebben az alfejezetben páros polinom alakban kerestük a (28) megoldásait. Az ansatz polinom együtthatóinak k függésére differenciálegyenleteket vezettünk le. Az így analitikusan előállított differenciálegyenlet rendszereket a $\beta \rightarrow \infty$ nulla hőmérsékletű esetre numerikusan megoldottuk. Azt tapasztaltuk, hogy a polinom fokának növelésével az eredmények konvergálnak, mégpedig a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció értékeihez. Ennek köszönhetően ezzel a módszerrel már a rácson vett megoldásnál jóval kevesebb egyenletből álló egyenletrendszer megoldásával is pontos eredményeket kapunk. Ez numerikusan kedvező, de az itt analitikusan előállított egyenletek annyira hosszúak, és bonyolultak, hogy nagy futási időket kapunk a magasabb fokszámoknál.

6.2. Formalizmus tetszőleges rendekre

Az előző alfejezetben tárgyalt módszer legnagyobb hátránya, hogy bár relatíve kevés egyenletre van szükségünk a pontos eredményekhez, de ezen egyenleteket analitikusan kell előállítanunk. Az így előállított képletek magasabb fokú polinomok esetén nagyon bonyolultak, és hosszúak. Numerikusan nehezen kezelhetők ezek a kifejezések, és ez hosszú futási időket eredményez. Végleges hőmérséklet esetén ez hatványozottan igaz.

Szeretnénk egy olyan formalizmust fejleszteni, ami rendelkezik azzal az előnnyel, hogy a rácsra helyezett effektív potenciál eseténél kevesebb egyenletből áll a differenciálegyenlet rendszer, és numerikusan kényelmesen előállíthatóak az egyenletek. Az előző fejezethez hasonlóan itt is hatványsor alakban keressük a megoldást, de az (28) jobb oldalát nem fejtjük sorba. Ehelyett az együtthatókat vektorba rendezzük, és az együtthatók k szerinti deriváltjára mátrix invertálással vezetünk le egyenleteket. Az invertálást numerikusan tudjuk elvégezni a differenciálegyenlet megoldás minden lépésében. Ez számítási kapacitás szempontjából jóval kedvezőbb, mint a sorfejtéssel kapott egyenletekkel írt szimuláció.

A skála függő effektív hatásban az effektív potenciált $\bar{x}$ páros polinomjaként keressük. A k függést az együtthatókba építjük. A páros polinom ansatz esetünkben azért elég, mert a peremfeltételként megadott klasszikus potenciál is páros, és így a futás során nem generálódnak páratlan tagok. A továbbiakban leírt számolás általános hatványsor esetén is elvégezhető.

$$\Gamma_k[\bar{x}] = \int d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \right)^2 + \sum_{n=0}^{\infty} a_k^{(n)} \bar{x}^{2n} \right], \quad (72)$$

$$V_k = \sum_{n=0}^{\infty} a_k^{(n)} \bar{x}^{2n}. \quad (73)$$

Bevezetünk egy α_k segédmenntiséget, és ezzel felírjuk a (28) egyenletet.

$$\partial_k V_k = \frac{\alpha_k}{k^2 + \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2}} - \frac{1}{\pi}. \quad (74)$$

Az egyenlet jobb oldalát most nem fejtjük sorba, ehelyett a hányadossal felszorozunk. Így némi átalakítás után az alábbi egyenletet kapjuk.

$$k^2 \partial_k V_k + (\partial_k V_k) V_k'' + \frac{V_k''}{\pi} = \alpha_k - \frac{k^2}{\pi}. \quad (75)$$

Itt V_k'' az effektív potenciál második $\bar{x}$ szerinti parciális deriváltját jelöli. Tehát $V_k'' = \frac{\partial^2 V_k}{\partial \bar{x}^2}$. Itt érdemes bevezetni α_k helyett egy új γ_k segédmenntiséget.

$$\gamma_k = \alpha_k - \frac{k^2}{\pi}. \quad (76)$$

A (73)-ból egyszerűen kifejezhető $\partial_k V_k$ és V_k'' :

$$\partial_k V_k = \sum_{n=0}^{\infty} \partial_k a_k^{(n)} \bar{x}^{2n}, \quad (77)$$

$$V_k'' = \sum_{n=0}^{\infty} a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1) \bar{x}^{2n}. \quad (78)$$

Ezeket a (75)-ba behelyettesítve kapjuk az alábbi egyenletet.

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} k^2 \partial_k a_k^{(n)} \bar{x}^{2n} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1) \bar{x}^{2n} + \\ & + \left(\sum_{m=0}^{\infty} \partial_k a_k^{(m)} \bar{x}^{2m} \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_k^{(i+1)} (2i+2)(2i+1) \bar{x}^{2i} \right) = \gamma_k. \end{aligned} \quad (79)$$

A két egyszeres szummát egyesítjük, és a dupla szummánál egy index cserét hajtunk végre. Az $m+i=n$ index bevezetésével a $\bar{x}$ ugyan olyan hatvány kitevővel szerepel majd, mint az első két tag esetén, így lehetőségünk lesz mindent egy összegzés alá behozni.

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \left[k^2 \partial_k a_k^{(n)} + \frac{a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1)}{\pi} \right] \bar{x}^{2n} + \\ & + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=0}^n \partial_k a_k^{(n-i)} a_k^{(i+1)} (2i+2)(2i+1) \bar{x}^{2n} = \gamma_k. \end{aligned} \quad (80)$$

Az n indexre összegzést egy szumma alá vesszük.

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \left[k^2 \partial_k a_k^{(n)} + \frac{a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1)}{\pi} + \right. \\ & \left. + \sum_{i=0}^n \partial_k a_k^{(n-i)} a_k^{(i+1)} (2i+2)(2i+1) - \delta_{n0} \gamma_k \right] \bar{x}^{2n} = 0. \end{aligned} \quad (81)$$

Az egyenlet bal oldala $\bar{x}$ változóban egy polinom, ez akkor lesz nulla minden k értékre, ha az összes együttható zérus. Ez azt jelenti, hogy az n indexre szummában szereplő kifejezés minden n esetén nulla.

$$k^2 \partial_k a_k^{(n)} + \frac{a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1)}{\pi} + \sum_{i=0}^n \partial_k a_k^{(n-i)} a_k^{(i+1)} (2i+2)(2i+1) - \delta_{n0} \gamma_k = 0. \quad (82)$$

Egy oldalra rendezzük a k szerinti deriváltakat nem tartalmazó tagokat, és a $k^2 \partial_k a_k^{(n)}$ tagot is a szumma alá bevesszük.

$$\sum_{i=0}^n \left[a_k^{(i+1)} (2i+2)(2i+1) + \delta_{i0} k^2 \right] \partial_k a_k^{(n-i)} = \delta_{n0} \gamma_k - \frac{a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1)}{\pi}. \quad (83)$$

Újabb index cserét végrehajtva kapjuk az alábbi egyenletet. A $q = n-i$ index bevezetésével a k szerinti deriváltakat egy változóban tudjuk kezelni, ez ad majd lehetőséget a vektor formalizmus használatára.

$$\begin{aligned} & \delta_{n0} \gamma_k - \frac{a_k^{(n+1)} (2n+2)(2n+1)}{\pi} = \\ & = \sum_{q=0}^n \left[a_k^{(n-q+1)} (2(n-q)+2)(2(n-q)+1) + k^2 \delta_{nq} \right] \partial_k a_k^{(q)}. \end{aligned} \quad (84)$$

Az összegzés felső határát szeretnénk végtelenbe felvenni, ezt a $\chi_{[0,n]}(q)$ függvény beírásával megtehetjük. A függvény definíciója az alábbi.

$$\chi_I(q) = \begin{cases} 1, & \text{ha } q \in I \\ 0, & \text{ha } q \notin I \end{cases}$$

Ezen függvény felhasználásával alakul ki az alábbi egyenlet.

$$\begin{aligned} & \delta_{n0}\gamma_k - \frac{a_k^{(n+1)}(2n+2)(2n+1)}{\pi} = \\ & = \sum_{q=0}^{\infty} \chi_{[0,n]}(q) \left[a_k^{(n-q+1)}(2(n-q)+2)(2(n-q)+1) + k^2\delta_{nq} \right] \partial_k a_k^{(q)}. \end{aligned} \quad (85)$$

Most rendezzük az $a_k^{(n)}$ együtthatókat egy vektorba. Az egyenlet bal oldalán egy vektor n komponense áll. A jobb oldal pedig egy mátrix szorzásként interpretálható. A k szerinti deriváltakat is rendezzük egy vektorba, így a szumma maradék része egy mátrixot ad.

$$\vec{\mathbf{a}}(k)_n = a_k^{(n)}. \quad (86)$$

A bal oldalon álló vektor csak $\vec{\mathbf{a}}$ és k függő. Ez legyen $\vec{\mathbf{v}}$ vektor.

$$\vec{\mathbf{v}}(\vec{\mathbf{a}}, k)_n = \delta_{n0}\gamma_k - \frac{\vec{\mathbf{a}}_{n+1}(2n+2)(2n+1)}{\pi}. \quad (87)$$

A jobb oldalon álló mátrix is $\vec{\mathbf{a}}$ és k függvénye.

$$\mathbf{M}(\vec{\mathbf{a}}, k)_{nq} = \chi_{[0,n]}(q) \left[\vec{\mathbf{a}}_{(n-q+1)}(2(n-q)+2)(2(n-q)+1) + k^2\delta_{nq} \right]. \quad (88)$$

Ezeket felhasználva az egyenletünk az alábbi vektoriális formában megfogalmazott differenciál egyenletet adja.

$$\vec{\mathbf{v}}(\vec{\mathbf{a}}, k) = \mathbf{M}(\vec{\mathbf{a}}, k)\partial_k \vec{\mathbf{a}}. \quad (89)$$

A mátrix invertálását numerikusan végezzük majd el, az egyenlet átírva az inverzzel.

$$\partial_k \vec{\mathbf{a}} = \mathbf{M}^{-1} \vec{\mathbf{v}}. \quad (90)$$

Összefoglalva az alábbi mennyiségeket definiáltuk, és ezekkel írtuk fel a differenciál egyenletet.

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \frac{k \left(2 \left\lfloor \frac{k\beta}{2\pi} \right\rfloor + 1 \right)}{\beta} - \frac{k^2}{\pi}, \\ \vec{\mathbf{a}}(k)_n &= a_k^{(n)}, \\ \vec{\mathbf{v}}(\vec{\mathbf{a}}, k)_n &= \delta_{n0}\gamma_k - \frac{\vec{\mathbf{a}}_{n+1}(2n+2)(2n+1)}{\pi}, \\ \mathbf{M}(\vec{\mathbf{a}}, k)_{nq} &= \chi_{[0,n]}(q) \left[\vec{\mathbf{a}}_{(n-q+1)}(2(n-q)+2)(2(n-q)+1) + k^2\delta_{nq} \right], \\ \partial_k \vec{\mathbf{a}} &= \mathbf{M}^{-1} \vec{\mathbf{v}}. \end{aligned}$$

A $\beta \rightarrow \infty$ nulla hőmérsékletű esetben a formalizmus megegyezik, csupán a γ_k segédmennyiségben szerepel β függés, így csak itt kell venni a határértéket.

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \gamma_k = 0. \quad (91)$$

Az itt látható képleteket végtelen sok együtthatóra vezettük le, természetesen numerikusan ezt nem fogjuk tudni kezelni. Megoldás az, hogy csak N számú együtthatót veszünk figyelembe. $\partial_k \vec{\mathbf{a}}_M = 0$ ha $M > N$. Tehát a klasszikus potenciál peremfeltételként megadott együtthatói

maradnak minden k értékre. Az anharmonikus oszcillátor esetében csak negyed fokú a klasszikus potenciál, így az ennél magasabb hatványú tagok együtthatói nulla értékről indulnak. Tehát itt $\vec{\alpha}$ és $\vec{\nu}$ vektorok $N + 1$ komponensből állnak, mert a 0 indexet is figyelembe kell vennünk. $\mathbf{M}$ pedig $(N + 1) \times (N + 1)$ mátrix lesz. Az egyenletet $k = \Lambda \gg 1$ értékről indítjuk, a klasszikus potenciál együtthatóiról. A $k = 0$ értékre fejlesztve az $\vec{\alpha}$ vektort, megkapjuk az effektív potenciált együtthatóit $k = 0$ -ban. Az $\bar{x} = 0$ helyen kiértékelve itt az effektív potenciált számolhatjuk az állapotösszeg negatív logaritmusát. Ebben csak a konstans tag szerepel.

$$\beta V_0|_{\bar{x}=0} = \beta \vec{\alpha}_0 = -\log Z(\beta). \quad (92)$$

A nulla hőmérsékletű esetben rögtön megkapjuk az alapállapot energiát.

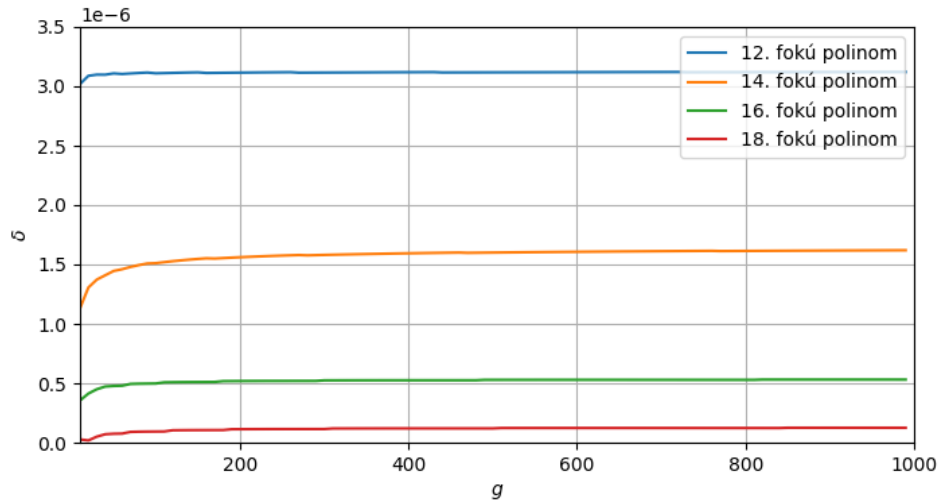
$$V_0|_{\bar{x}=0} = \vec{\alpha}_0 = E_0. \quad (93)$$

Peremfeltételeink az anharmonikus oszcillátor potenciáljából adódnak.

$$V_\Lambda = \frac{\bar{x}^2}{2} + g\bar{x}^4 = \sum_{n=0}^N a_\Lambda^{(n)} \bar{x}^{2n}. \quad (94)$$

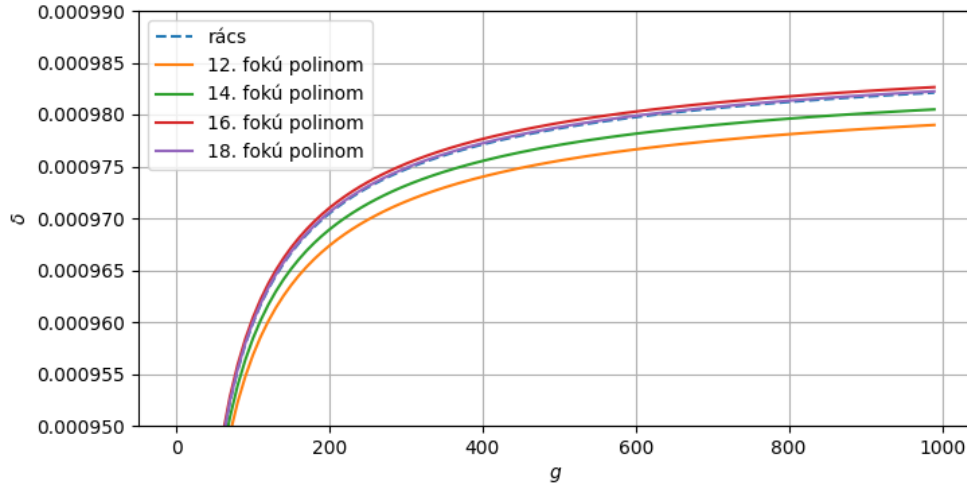
$$a_\Lambda^{(n)} = \vec{\alpha}_n(\Lambda). \quad (95)$$

Az $\vec{\alpha}$ egyenletét numerikusan oldjuk meg a *python scipy* moduljának Ruge-Kutta módszert alkalmazó differenciálegyenlet megoldó függvényével. Az $\mathbf{M}$ mátrix invertálását a differenciálegyenlet megoldásának minden lépésében numerikusan végezzük el a *python numpy* moduljának segítségével. Az együtthatókat $k = \Lambda = 10^8$ értékről fejlesztjük le. Az így kapott eredményeknek meg kell egyezniük az előző alfejezet analitikusan előállított egyenleteinek megoldásából származó értékekkel. Ennek oka, hogy az ansatz mindkét esetben páros polinom, és a numerikus megoldás minden paramétere megegyezik.



11. ábra. Az általános formalizmus eredményeinek a rácson megoldott differenciálegyenletből származó értékektől vett relatív eltérése, $\Lambda = 10^8$.

A 11. ábrán látható hogy az általános formalizmusban is N növelésével egyre közelebb kerülünk, a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció eredményeihez. Az ábra lényegében megegyezik a 9. ábrával. Itt is kijelenthető, hogy a figyelembe vett együtthatók számának növelésével az eredmények konvergálnak a rácson vett megoldásokhoz.

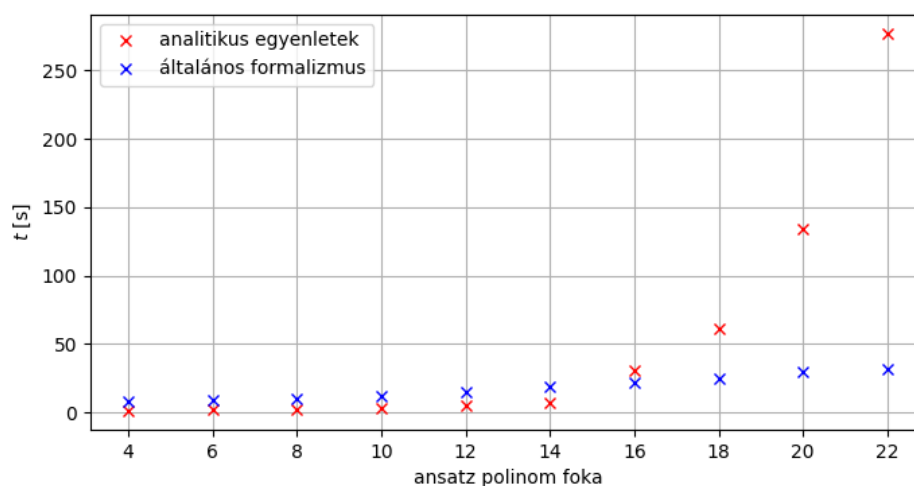


12. ábra. A rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció, és az általános formalizmus eredményeinek egzakt értékektől vett relatív eltérése, $\Lambda = 10^8$.

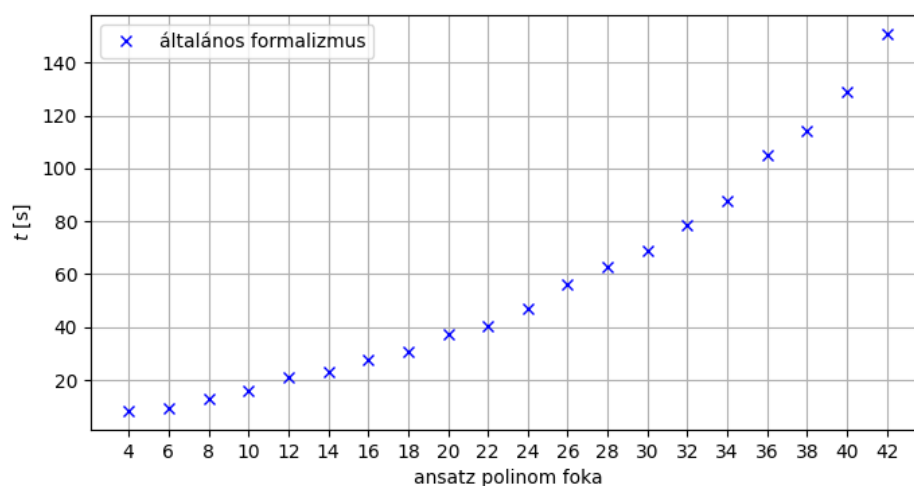
A 12. ábrán látszik, hogy az egzaktól mért relatív eltérések is konvergálnak a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció eredményeihez. Ez az ábra lényegében megegyezik a 10. ábrával. Ennek oka szintén az, hogy az általános formalizmus csak az egyenletek előállítását módosítja a 6.1. alfejezetben tárgyalt módszerhez képest, az általános formalizmus egyenletei ekvivalensek az analitikusan, sorfejtéssel előállított egyenletrendszerekkel.

Az általános formalizmus alkalmazása elsősorban numerikus szempontból előnyös, persze ezen túl a magasabb rendekre vett hosszadalmas sorfejtés is elkerülhető. A vektoriális alakban felírt egyenletek megoldása magasabb fokú ansatz polinomokra jóval kisebb futásidővel jár mint a 6.1. alfejezetben látható differenciálegyenlet rendszerek kiértékelése. Ezt úgy fogjuk megnézni, hogy az eddig is vizsgált $g \in [0, 1000]$ intervallumon 100 pontban számoljuk ki az alapállapot energiát, minden esetben a *python scipy* moduljának Runge-Kutta módszert alkalmazó differenciálegyenlet megoldó függvényével. Az együtthatókat $k = \Lambda = 10^8$ értékről fejlesztjük le a megoldás során.

A 13. ábrán látható az általános formalizmus, és a 6.1. alfejezetben tárgyalt módszer futásidőjének összehasonlítása. Látható, hogy alacsony fokszámnál gyorsabb a sorfejtéssel előállított egyenletek megoldása, mert ott már előre analitikusan megadtuk az egyenletrendszereket, és azok még rövidebb és egyszerűbb képleteket tartalmaznak. A fokszám növelésével azonban az analitikus egyenletek futásidője jóval nagyobb ütemben nő, mint az általános formalizmus esetén, így 16. fokú polinomtól már gyorsabb az általános formalizmusban dolgozni. A 14. ábrán már csak az általános formalizmus vizsgáljuk, de itt magasabb fokszámokra is. Az analitikus egyenletek megoldása 22. fok felett már értelmetlen, olyan hosszú képletekkel már nem lehet dolgozni, és a futási idő is nagyon nagy. Viszont az ábrán látjuk, hogy az általános formalizmus még 42. fokú ansatz polinom esetén is jóval gyorsabb, mint az általunk vizsgált legmagasabb fokú analitikus képlet.



13. ábra. Az analitikusan előállított egyenletek, és az általános formalizmus egyenleteinek megoldásának futási ideje az ansatz polinom fokszámának függvényében, $\Lambda = 10^8$.



14. ábra. Az általános formalizmus szimulációjának futásideje az ansatz polinom fokszámának függvényében, $\Lambda = 10^8$.

A két ábra alapján tehát kijelenthető, hogy az általános formalizmus kedvezőbb numerikus szempontból mint a sorfejtéssel való egyenlet előállítás.

Ebben az alfejezetben a 6.1. alfejezethez hasonlóan páros polinom alakban kerestük az effektív potenciál futásegyenletének megoldását. Míg az előző alfejezetben a (28) bal oldalának sorfejtésével analitikusan állítottuk elő az egyenleteket, addig itt egy általánosabb formalizmust fejlesztettünk az együtthatók futásának meghatározására. A formalizmusban az együtthatókat vektorba rendeztük, és arra vezettünk le egy vektoriális differenciálegyenletet. Az egyenletben szerepel egy mátrix invertálás, melyet numerikusan végzünk el a differenciálegyenlet megoldás minden lépésében. A módszer egyenletei ekvivalensek az analitikusan előállított differenciálegyenlet rendszerek-

kel, de a számítási kapacitás szempontjából magasabb fokú ansatz polinomokra jóval kedvezőbb az általános formalizmus. Az ansatz polinom fokszámának növelésével az eredmények konvergálnak a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció értékeihez, így nagy fokszámokra az általános formalizmus a numerikus hibák nagyságrendjébe eső különbséggel megközelíti azt. A módszer nagy előnye a rácsra tett effektív hatás szimulációval szemben, hogy kevesebb paramétertől függ a pontosság. Míg ott az $\bar{x}$ -ben felvett intervallumtól, és a felvett pontok mennyiségétől, itt csak az ansatz polinom fokszámától függ a pontosság. A csatolt egyenletrendszer itt jóval kevesebb egyenletből áll, mint a rácson való megoldásnál. Tehát amennyiben létezik az effektív potenciál sorfejtése $\bar{x}$ szerint, ez a formalizmus nagyszerű eszköz a lokális potenciál közelítés egyenletének megoldására.

Most a klasszikus potenciál speciális tulajdonsága miatt csak páros polinom ansatzokkal foglalkoztunk, de a formalizmus általános polinom feltételezésével is alkalmazható. Ha a sor kifejtési pontja függ k -tól, közel megegyező levezetéssel szintén kaphatunk egy hasonló vektoriális differenciálegyenletet. A legfontosabb tulajdonság amit a levezetés kihasznált, hogy (28) jobb oldalán a nevezővel felszorozva legfeljebb két szummás tag szorzata szerepel, ez adott lehetőséget a mátrixok, és a vektorok bevezetésére. Ahhoz, hogy az effektív potenciál futása ilyen alakú legyen, a Litim-féle optimalizált regulátort kellett használnunk. Megjegyezzük, hogy a kvantumtérelmélet lokális potenciál közelítésének futási egyenlete a Litim-féle regulátorral (28)-cal analóg alakú, így a formalizmus kis módosításokkal ott is alkalmazhatóvá tehető.

7. Összefoglalás

A dolgozatban a funkcionális renormálási csoport lokális potenciál közelítésének különböző megoldási módszereivel foglalkoztunk, és azokat hasonlítottuk össze egymással, a perturbációs számítás eredményeivel, és az egzakt értékekkel egy egyszerű kvantummechanikai rendszeren, az anharmonikus oszcillátoron.

Az effektív potenciál futásának egyenletét először úgy oldottuk meg, hogy azt egy egydimenziós rácsra tettük. Az így kapott eredményeket összehasonlítottuk a perturbatív és az egzakt módszer eredményeivel. Azt tapasztaltuk, hogy a lokális potenciál közelítés egzakt eredményektől mért relatív eltérése az anharmonicitást jellemző paramétertől lényegében független, és 0,1 % alatt marad a nulla hőmérsékletű esetben. Ez ellentétben áll a perturbatív eredményekkel, amik csak nagyon kicsiny g mellett adnak alkalmazható közelítést.

Ezek után az effektív potenciált páros polinom alakban kerestük. Első körben az együtthatókra sorfejtéssel analitikusan vezettünk le egyenleteket, melyeket numerikusan megoldottunk. A módszer előnye, hogy már relatíve kevés egyenletből álló egyenletrendszerekre is pontos eredményeket ad, de az analitikusan levezetett képletek nagyon bonyolultak, így numerikusan nem jól alkalmazható a technika. Azt találtuk, hogy a polinom foksámának növelésével az így kapott eredmények konvergálnak a rácsra helyezett effektív potenciál szimuláció értékeihez.

A numerikus alkalmazhatóság növelése érdekében egy új formalizmust fejlesztettem ki, melyben ugyanúgy páros polinom alakban keressük a megoldást, de az egyenleteket nem sorfejtéssel állítjuk elő, hanem az együtthatókat vektorba tesszük, és arra vezetünk le egy vektoriális differenciálegyenletet. A formalizmus együtthatókra levezetett futási egyenletei ekvivalensek a sorfejtéssel előállított egyenletekkel, de azok megoldása numerikusan sokkal kedvezőbb mint az analitikus előállítás esetén. A formalizmus alkalmazható skálafüggő kifejtési ponttal rendelkező sor ansatz esetén is, és kis módosításokkal kvantumtérelméletben is működőképesé tehető.

A dolgozatban elsősorban a nulla hőmérsékletű esetben az alapállapot energiával foglalkoztunk, de minden itt leírt módszer véges hőmérsékleten is alkalmazható. Az LPA relatív hibáját nulla hőmérsékleten meghatároztuk, mely várakozásaink szerint $T > 0$ -ra hőmérsékletfüggő. Ennek vizsgálata további kutatás tárgyát képezi.

Hivatkozások

- [1] Christof Wetterich. Exact evolution equation for the effective potential. *Physics Letters B*, 301(1):90–94, 1993.
- [2] Jürgen Berges, Nikolaos Tetradis, and Christof Wetterich. Non-perturbative renormalization flow in quantum field theory and statistical physics. *Physics Reports*, 363(4):223–386, 2002. Renormalization group theory in the new millennium. IV.
- [3] TIM R. MORRIS. The exact renormalization group and approximate solutions. *International Journal of Modern Physics A*, 09(14):2411–2449, 1994.
- [4] Daniel F. Litim. Optimized renormalization group flows. *Phys. Rev. D*, 64:105007, Oct 2001.
- [5] Carl M. Bender and Tai Tsun Wu. Anharmonic oscillator. *Phys. Rev.*, 184:1231–1260, Aug 1969.
- [6] Cameron R. Taylor. Finite difference coefficients calculator. <https://web.media.mit.edu/~crtaylor/calculator.html>, 2016.