Temas avanzados de termodinámica y física estadística − 1er. cuatrimestre de 2013

Guía 3: *Integrales de caminos*

Durante la práctica se calculó la integral de caminos

$$I = \left\langle \exp\left\{ \int_0^t d\tau \ f[x(\tau), \tau] \right\} \right\rangle_{x(0)=0} = \int_{x(0)=0} \mathcal{D}x \ \mathcal{P}[x] \ \exp\left\{ \int_0^t d\tau \ f[x(\tau), \tau] \right\},$$

donde x es un proceso de Wiener y la densidad de probabilidad respecto de la que se calcula el promedio está sujeta a la condición $x(0) = 0$. Además, se consideraron exclusivamente funciones de la forma

$$f(x, \tau) = \lambda p(\tau) x^2.$$

En clase, la integral de caminos se calculó como un límite, discretizando la integral de $f[x(\tau), \tau]$ y dividiendo cada camino que va entre 0 y t, en n tramos,

$$(\tau_0, \tau_1), (\tau_1, \tau_2), \ldots, (\tau_{n-1}, \tau_n),$$

con $\tau_0 = 0$, $\tau_1 = \Delta$, $\tau_2 = 2\Delta, \ldots$, $\tau_n = n\Delta = t$, siempre con $\tau_{i+1} - \tau_i = \Delta$. Así

$$I = \lim_{n\to\infty} I_n,$$

donde

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^{n} dx_i \right) \ p(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; \ldots; x_n, \tau_n | x_0 = 0, \tau_0 = 0) \ \exp\left[\Delta \sum_{i=1}^{n} f(x_i, \tau_i) \right].$$

Aquí

$$p(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; \ldots; x_n, \tau_n | x_0, \tau_0) =$$

$$p(x_n, \tau_n | x_{n-1}, \tau_{n-1}) \ p(x_{n-1}, \tau_{n-1} | x_{n-2}, \tau_{n-2}) \ldots p(x_1, t_1 | x_0, \tau_0),$$

$$p(x_{i+1}, \tau_{i+1} | x_i, \tau_i) = \frac{1}{(\pi\Delta)^{1/2}} \ \exp\left[-\frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\Delta} \right].$$

En clase se demostró que $I = D(0)^{-1/2}$, donde $D(\tau)$ es la solución del problema de contorno

$$D''(\tau) + \lambda p(\tau) D(\tau) = 0, \qquad D(t) = 1, \quad D'(t) = 0.$$

La relación fundamental para llegar a este resultado es la fórmula de la integral gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^{n} dx_i \right) \ \exp\left(- \sum_{i,j=1}^{n} M_{ij} x_i x_j \right) = \left(\frac{\pi^n}{\det M} \right)^{1/2}.$$

Con pequeñas diferencias, el cálculo hecho en clase siguió el paper de I. M. Gel'fand y A. M. Yaglom: J. Math. Phys. **1**, 48 (1960).

El ejercicio. La idea ahora es calcular el promedio fijando también el extremo final. Es decir, usar como densidad para los caminos de n tramos la densidad condicional

$$p(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; \ldots; x_{n-1}, \tau_{n-1} | x_0, \tau_0; X, t).$$

Aunque para mayor sencillez en los cálculos, y para poder comparar mejor con los resultados del paper, tomaremos como densidad una versión no normalizada de la anterior,

$$p(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; \ldots; x_{n-1}, \tau_{n-1} | x_0, \tau_0; X, t)\ p(X, t | x_0, \tau_0). \tag{1}$$

Entonces, por definición, vamos a calcular

$$\tilde{I} = \left\langle \exp\left\{ \int_{t_0}^{t} d\tau\ f[x(\tau), \tau] \right\} \right\rangle_{(x_0, t_0; X, t)} = \lim_{n\to\infty} \tilde{I}_n,$$

donde

$$\tilde{I}_n = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^{n-1} dx_i \right) p(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; \ldots; x_{n-1}, \tau_{n-1} | x_0, \tau_0; X, t)\ p(X, t | x_0, \tau_0)\ \exp\left[\Delta \sum_{i=1}^{n} f(x_i, \tau_i) \right].$$

Siempre es $t_0 = \tau_0 = 0$ y $x_0 = 0$.

■ **1.** Demostrar, calculando las probabilidades condicionales escritas más arriba, que la única diferencia entre la expresión anterior y el cálculo hecho en clase es que, antes de tomar el límite, la variable $x_n = X$ no se integra,

$$\tilde{I}_n = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^{n-1} dx_i \right) p(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; \ldots; x_n, \tau_n | x_0 = 0, \tau_0 = 0)\ \exp\left[\Delta \sum_{i=1}^{n} f(x_i, \tau_i) \right].$$

Todos los caminos sobre los que se promedia parten de $x_0 = 0$ en $t = 0$ y terminan en $x_n = X$ en $\tau_n = t$. Como x_n está fijo, el término $(x_n - x_{n-1})^2$ que aparece en uno de los exponentes da lugar a un factor proporcional a $X x_{n-1}$ que es lineal, y no cuadrático, en las variables de integración. Deberá usarse entonces una generalización de la integral gaussiana dada antes, a saber

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^{n} dx_i \right) \exp\left(-\sum_{i,j=1}^{n} M_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i \right) = \left(\frac{\pi^n}{\det M} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j \left(M^{-1} \right)_{ij} \right].$$

Recordar la fórmula para la matriz inversa $(M^{-1})_{ij} = C_{ij} (\det M)^{-1}$, donde C_{ij} es el cofactor del elemento ij de M. Como casi todos los elementos de M y del vector $\boldsymbol{\alpha}$ son cero, calcular estas cosas no es demasiado complicado. El punto crucial para avanzar en el cálculo es absorber, dentro de la definición de las matrices, los factores Δ que no se cancelen. Por ejemplo, si aparece $\Delta \det M$, escribir eso como $\det \tilde{M}$, donde $\tilde{M}$ se obtiene multiplicando por Δ la última fila de M. De un modo muy parecido a lo que se hizo en clase, o a lo que figura en el primer ejemplo en el paper de Gel'fand y Yaglom, se demuestra que en el límite en que $\Delta \to 0$, el cálculo de la integral se reduce a la solución de un problema de contorno.

■ **2.** Completar todos los pasos que llevan a la ecuación (1.29) del paper de Gel'fand y Yaglom. Luego considerar en particular el caso $p = 1$, es decir, $f(x,\tau) = \lambda x^2$, y completar los pasos que llevan a la ecuación (1.31).

■ **3.** Mostrar explícitamente que si se integra en X se recupera el resultado al que se llegó en clase, que corresponde a la ecuación (1.18) del paper,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dX \; \tilde{I}_n = I_n.$$

En una de las clases teóricas se dedujo la ecuación de Feynman−Kac. Para un proceso de Wiener con probabilidad de transición

$$p(x,t|x',t') = \frac{e^{-(x-x')^2/t}}{(\pi t)^{1/2}},$$

la ecuación de Feynman−Kac se escribe como

$$\frac{\partial}{\partial t} G(x,t;x_0,t_0) = V(x) G(x,t;x_0,t_0) + \frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial x^2} G(x,t;x_0,t_0),$$

con la condición inicial

$$G(x,t;x_0,t) = \delta(x - x_0).$$

Aquí G es un valor medio calculado respecto de caminos con extremos fijos, x_0 en t_0 y x en t, según la densidad no normalizada (1),

$$G(x,t;x_0,t_0) = \left\langle \exp\left\{ \int_{t_0}^{t} d\tau \; V[x(\tau)] \right\} \right\rangle_{(x_0,t_0;x,t)}.$$

Si $V(x) = \lambda x^2$, la ecuación de Feynman−Kac debería llevar de vuelta al resultado (1.31) del paper de Gel'fand y Yaglom, pues al tomar $p(\tau) = 1$ en la definición de f,

$$f(x,\tau) = \lambda p(\tau) x^2,$$

resulta $f = V$.

■ **4.** Resolver la ecuación de Feynman−Kac tomando $x_0 = 0$, $t_0 = 0$ y $x = X$. Usar el ansatz

$$G(X,t;0,0) \equiv G(X,t) = h(t) e^{g(t) X^2}.$$

Al escribir la ecuación diferencial, habrá funciones que sólo dependen de t igualadas a funciones de t y de x. Usar ese hecho para encontrar un par de ecuaciones diferenciales para h y para g. Prestar atención a las constantes de integración, pues son fundamentales para escribir la condición inicial en $t = 0$. Para fijar la condición inicial, tener en cuenta que si una secuencia de funciones parametrizada por un parámetro $\epsilon > 0$, cumple con

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} f_\epsilon(x) = 0, \qquad \text{si } x \neq 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \; f_\epsilon(x) = 1,$$

entonces $f_\epsilon(x) \to \delta(x)$. Reproducir, siguiendo este camino, el resultado (1.31) del paper.