

蒙特卡罗等效哈密顿量的1+1维检验*

黄纯青^{1,3} 江俊勤^{2,3} 罗向前^{3*}

H. Jirari⁴ H. Kröger⁴ K. J. M. Moriarty⁵

1 (佛山科技学院物理系 佛山 528000)

2 (广东教育学院物理系 广州 510303)

3 (中山大学物理系 广州 510275)

4 (Département de Physique, Université Laval, Québec, Québec G1K7P4, Canada)

5 (Department of Mathematics, Statistics and Computational Science, Dalhousie University, Halifax, Nova Scotia B3H 3J5, Canada)

摘要 用最近发展起来的蒙特卡罗等效哈密顿量新方法,研究了与量子场论中 Φ^4 模型相似的1+1维量子力学系统 $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (其中 $\mu^2 < 0, \lambda > 0$)的低能物理特性. 计算了能谱、波函数以及热力学可观察量. 获得良好的结果,表明这种新方法有希望推广到多自由度系统和格点规范场论.

关键词 等效哈密顿量 蒙特卡罗方法 能谱 波函数 热力学量

1 引言

量子场论有两种等价形式:拉格朗日形式和哈密顿形式,两者各有优缺点,互为补充.

拉氏形式的优点在于它适合进行蒙特卡罗数值模拟. 过去二十多年来,格点规范场论取得巨大成功主要归功于蒙特卡罗重点抽样法在高维(甚至无限维)积分计算上的广泛使用. 但是拉氏形式不能计算波函数和激发谱.

哈密顿形式的优点在于它不仅能够计算基态能谱,还能够计算波函数和激发谱. 波函数包含更丰富的物理信息^[1],以目前最热门的最轻的胶球 0^{++} 的确认为例,实验上已经有多个候选者,但究竟是 f_0 (1500 MeV)还是 f_1 (1710 MeV),目前还难以确定^[2],原因在于缺乏足够的物理信息. 如果能够使用哈密顿形式计算胶球的波函数,进而研究胶球的产生和衰变过程,就能为实验确认胶球提供指导.

传统的哈密顿形式采用求解薛定谔方程的方法,这种解析方法不能充分利用计算机这一强大有效的工具,难以对高维系统进行高阶计算. 此外传统上这种方法也难以开展

1999-05-10 收稿

* 国家杰出青年科学基金(19825117),国家自然科学基金(19605009)和广东省自然科学基金(9902121)资助

蒙特卡罗数值模拟.

最近我们发展了一种蒙特卡罗哈密顿量模拟新方法^[3],用来计算拉氏形式难以处理的低能区的能谱和波函数,并且以1+1维自由系统 $V(x)=0$,线性谐振子 $V(x)=\frac{1}{2}kx^2$ 和定域势 $V(x)=-V_0\text{sech}^2(x/d)$ 进行检验.

为了更加深入地检验这一新方法的生命力,我们选取和弱电统一理论 Higgs 机制的 Φ^4 模型十分类似的势阱 $V(x)=\mu^2x^2+\lambda x^4$ (其中 $\mu^2<0, \lambda>0$),研究它在低能区的物理特性,计算能谱、波函数以及热力学可观察量.

本文在第2部分介绍蒙特卡罗等效哈密顿量新方法的基本思想;第3部分介绍使用这一新方法计算上述1+1维量子力学系统的结果.计算了能谱、波函数和配分函数 Z 、内能 \bar{E} 、比热 C 等热力学量,并和基于节点法^[4,5]的数值计算结果进行比较.

2 蒙特卡罗等效哈密顿量的基本原理

按照费曼路径积分理论,可以用虚时形式将从 $|x_j, t_j\rangle$ 到 $|x_i, t_i\rangle$ 态之间的跃迁几率幅 M_{ij} 表示为^[6]

$$M_{ij} = \langle x_i, t_i | x_j, t_j \rangle = \langle x_i | e^{-H(t_i-t_j)/\hbar} | x_j \rangle = \langle x_i | e^{-H_{\text{eff}}T/\hbar} | x_j \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle x_i | E_n \rangle e^{-E_n T/\hbar} \langle E_n | x_j \rangle \approx \langle x_i | e^{-H_{\text{eff}}T/\hbar} | x_j \rangle = \sum_{n=1}^N \langle x_i | E_n^{\text{eff}} \rangle e^{-E_n^{\text{eff}}T/\hbar} \langle E_n^{\text{eff}} | x_j \rangle. \quad (1)$$

最后两行用等效哈密顿量 H_{eff} 近似代替原始哈密顿量 H , H_{eff} 比 H 有少得多的自由度.蒙特卡罗等效哈密顿量方法的基本思想就是用蒙特卡罗数值模拟方法计算出等效哈密顿量 H_{eff} ,这样,由(1)式计算跃迁几率幅时只需对 N 个本征态求和.

直接从作用量出发用蒙特卡罗重点抽样方法计算跃迁几率幅 $M_{ij}(T)$ 的方法为:在位形空间中引入均匀格点(节点坐标为 x_i),对于给定的 N ,跃迁几率幅 $M_{ij}(T)$ 可表示为:

$$M_{ij}(T) = \langle x_i, T | x_j, 0 \rangle = \int [dx] \exp[-S_{\text{Eucl}}(x)/\hbar] \Big|_{x_j, 0}^{x_i, T}, \quad (2)$$

($i, j \in 1, 2, \dots, N$)

式中 S_{Eucl} 为对应于给定路径 C 的欧几里德作用量(下面省去下标 Eucl)

$$S(C) = \int_0^T dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \right) \Big|_C. \quad (3)$$

为了计算跃迁几率幅,将 S 分解为 S_0 和 S_V 两部分

$$S = S_0 + S_V \equiv \int_0^T dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \Big|_C + \int_0^T dt V(x) \Big|_C,$$

并将 $M_{ij}(T)$ 表示为

$$M_{ij}(T) = M_{ij}^0(T) \frac{\int [dx] \exp[-S_V(x)/\hbar] / \exp[-S_0(x)/\hbar] \Big|_{x_j, 0}^{x_i, T}}{\int [dx] \exp[-S_0(x)/\hbar] \Big|_{x_j, 0}^{x_i, T}}$$

这里 $\exp(-S_V/\hbar)$ 被视为可观察量. 式中积分比可用蒙特卡罗重点抽样法计算, 而对应自由作用量 S_0 的跃迁几率幅 M_{ij}^0 可表示为

$$M_{ij}^0 = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar T}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar T}(x_i - x_j)^2\right]$$

有了 $M_{ij}(T)$, 就可得到正厄米矩阵

$$M(T) = (M_{ij}(T))_{N \times N}. \quad (7)$$

使用 Jacobi 对角化方法, 可求得 $N \times N$ 正交矩阵 U 和 $N \times N$ 实对角矩阵 D , 使

$$M(T) = U^* D(T) U. \quad (8)$$

这样, 由(1)式和(8)式得

$$U_{ik}^* = \langle x_i | E_k^{\text{eff}} \rangle, D_k(T) = e^{-E_k^{\text{eff}} T/\hbar}. \quad (9)$$

由(9)式得能谱

$$E_k^{\text{eff}} = -\frac{\hbar}{T} \ln D_k(T), \quad (10)$$

相应地第 k 个本征态可由矩阵 U 的第 k 列得到. 因此就由矩阵元 $M_{ij}(T)$ 构造了等效哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k=1}^N |E_k^{\text{eff}}\rangle E_k^{\text{eff}} \langle E_k^{\text{eff}}|$$

3 计算方法和结果

3.1 计算方法

对于势阱 $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ 欧几里德作用量为

$$S = \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \mu^2 x^2 + \lambda x^4 \right]$$

在以下的计算中, 取 $\mu^2 = -1/2$, $\lambda = 1/4$, 相应地 $S_0 = \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 \right]$, $S_V = \int_0^T dt \left[-\frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{4} x^4 \right]$, 代入(5)式, 使用蒙特卡罗重点抽样法(例如 Metropolis 方法^[7])即可计算出 $N \times N$ 实对称矩阵 $M(T)$, 将其对角化可得 $N \times N$ 正交矩阵 U 和 $N \times N$ 实对角矩阵 D , 从而得到势阱 $V(x) = -\frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{4} x^4$ 的能谱和本征波函数.

定义配分函数 Z 、内能 \bar{E} 和比热 C

$$Z(\beta) = \text{Tr}(e^{-\beta H}),$$

$$\bar{E}(\beta) = \frac{1}{Z} \text{Tr}(H e^{-\beta H}), C(\beta) = \frac{\partial \bar{E}}{\partial \text{Temp}}. \quad (13)$$

$\beta = \frac{1}{k_B \text{Temp}}$, k_B 为玻尔兹曼常数, Temp 为热力学温度. 通过虚参数 T 将 $\beta = \frac{1}{k_B \text{Temp}}$ 和 $\beta = \frac{T}{\hbar}$ 等同起来.

我们已经将原始哈密顿量 H 近似为蒙特卡罗等效哈密顿量 H_{eff} 和 H_{eff} 对应的热力学量可以表示为

$$Z_{\text{eff}}(\beta) = \sum_{k=1}^N e^{-\beta E_k^{\text{eff}}}, \bar{E}_{\text{eff}}(\beta) = \frac{\sum_{k=1}^N E_k^{\text{eff}} e^{-\beta E_k^{\text{eff}}}}{\sum_{k=1}^N e^{-\beta E_k^{\text{eff}}}}$$

$$C_{\text{eff}}(\beta) = k_B \beta^2 \left[\frac{\sum_{k=1}^N (E_k^{\text{eff}})^2 e^{-\beta E_k^{\text{eff}}}}{Z_{\text{eff}}(\beta)} - \bar{E}_{\text{eff}}^2(\beta) \right] \quad (14)$$

这样只需使用上述蒙特卡罗等效哈密顿量新方法计算出前 N 个能谱,即可计算相应的热力学量. 类似地,用节点法搜索出能谱后也可以用上述公式计算这几个热力学量.

3.2 计算结果

表 1 给出了前 4 个能级的比较,可以看到,在低能区蒙特卡罗等效哈密顿量方法的结果和节点法的结果一致.

图 1—3 给出前 3 个态函数的比较,可以看出两种不同方法的结果很好一致. 其中节点法计算了 800 个坐标点对应的波函数的数值,作图时将其连接为连续曲线. 而本文的等效哈密顿量方法中选择 $N=20$,对应给出了 20 个坐标点处的波函数数值. 图 4 和图 5 给出了两种方法计算出的比热 C 和内能 \bar{E} 的比较,可以看出两者也很好一致. 其中用节点法计算出前 20 个能级,然后使用(14)式计算出相应的热力学量.

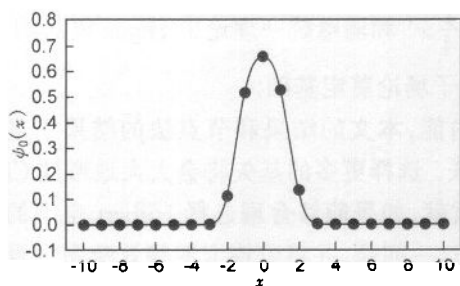


图 1 基态波函数的比较

--- 蒙特卡罗等效哈密顿量方法结果
 ——— 节点法结果

$$V(x) = -x^2/2 + x^4/4,$$

$$m = 1, T = 1, \hbar = 1, \Delta x = 1, N = 20$$

表 1 前 4 个能量本征值的比较

量子数 n	节点法	本文(MC法)
0	0.1472	0.1439
1	0.8723	0.8688
2	2.1280	2.1822
3	3.5911	3.7440

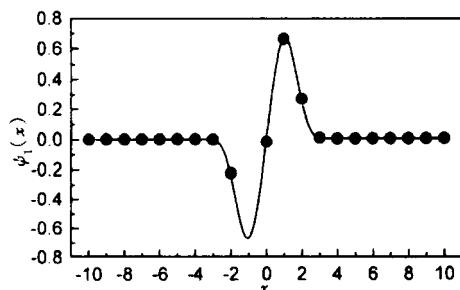


图 2 第一激发态波函数的比较

符号说明同图 1.

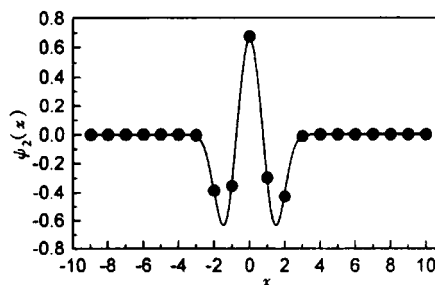


图 3 第二激发态波函数的比较

符号说明同图 1.

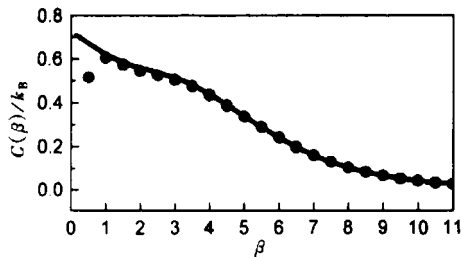


图4 比热的比较
符号说明同图1.

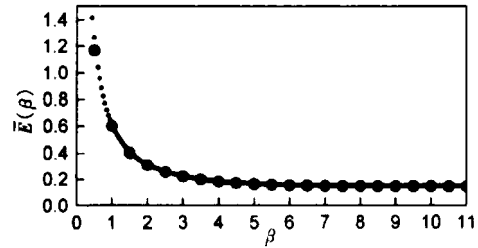


图5 内能的比较
符号说明同图1.

4 结论和讨论

通过计算势阱 $V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$ 的能谱、波函数和热力学量,验证了蒙特卡罗等效哈密顿量方法适合于处理 $1+1$ 维局部势问题的低能物理,其计算结果和节点法的结果一致,但节点法只能处理可分离变量的系统,而蒙特卡罗法适用于任意高维系统,而且我们发展蒙特卡罗等效哈密顿量数值模拟方法的最终目的是用来解决多自由度系统和格点规范场论问题. 由于势阱 $V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$ 和弱电统一理论中 Higgs 机制的 Φ^4 模型十分类似,本例的成功为把该方法推广到量子场论奠定基础.

可以看到,在 $\beta < 1$ 的区域内,对于比热和内能,本文的结果和节点法的结果还是存在一定差异,原因在于我们仅仅选择了 20 个基矢. 选择更多的基矢将会大大地增加 CPU 计算时间. 幸运的是我们发现不少矩阵元没有贡献,如果能够合理选择 Hilbert 空间的基矢,就可以大大地减少计算量. 我们将继续研究这一问题,并将蒙特卡罗等效哈密顿量数值模拟方法应用于多自由度系统和格点规范场论.

参考文献 (References)

- 1 JIANG J Q, LUO X Q et al. Phys. Rev., 1999, **D60**:014501
- 2 LUO XiangQian, CHEN QiZhou. Mod. Phys. Lett., 1996, **A11**:1435;
LUO XiangQian. High Energy Phys. and Nucl. Phys. (in Chinese), 1999, **23**:188
(罗向前, 高能物理与核物理. 1999, **23**:188)
- 3 Jirani H, Kröger H, LUO X Q et al. Phys. Lett., 1999, **A6**:258
- 4 Falkensteiner P, Grosse H, Schoberd F. Comput. Phys. Commun., 1985, **34**:287
- 5 CHEN Zhijiang, DING YiBin, KONG FanMei. Comput. Phys. (in Chinese), 1987, **4**:113
(陈之江, 丁亦兵, 孔繁梅. 计算物理, 1987, **4**:113)
- 6 Feynman R P, Hibbs A R. QUANTUM MECHANICS AND PATH INTEGRALS, McGraw-Hill, 1965
- 7 Metropolis N, Rosenbluth A, Rosenbluth M et al. J. Chem. Phys., 1953, **21**:1087

Monte Carlo Effective Hamiltonian in 1 + 1 Dimensional Case

HUANG ChunQing^{1,3} JIANG JunQin^{2,3} LUO XiangQian^{3*}

H. Jirari⁴ H. Kröger⁴ K. J. M. Moriarty⁵

1 (Department of Physics, Foshan Science and Technology College, Foshan 528000, China)

2 (Department of Physics, Guangdong Institute of Education, Guangzhou 510303, China)

3 (Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275, China)

4 (Département de Physique, Université Laval, Québec, Québec G1K7P4, Canada)

5 (Department of Mathematics, Statistics and Computational Science, Dalhousie University, Halifax, Nova Scotia B3H 3J5, Canada)

Abstract Using a recently developed Monte Carlo effective Hamiltonian method, we study the low energy physics of 1 + 1 dimensional quantum mechanical system $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (here $\mu^2 < 0, \lambda > 0$), which is similar to Higgs potential in the standard model of unified electroweak theory. Good results of the spectra, wavefunctions and thermodynamical observables are obtained. It shows that the new Monte Carlo Hamiltonian method has potential application to systems with many degrees of freedom and lattice gauge theory.

Key words effective Hamiltonian, Monte Carlo method, energy spectra, wavefunction, thermodynamical observables

Received 10 May 1999

* Supported by National Natural Science Fund for Distinguished Young Scholars(19825117), National Natural Science Foundation of China(19605009)and Guangdong Provincial Natural Science Foundation (9902121)