

蒙特卡罗哈密顿新方案及其检验*

黄纯青^{1,2} 罗向前^{1;1)} H. Kröger³

1 (中山大学理工学院物理学系 广州 510275)

2 (佛山科学技术学院光电子与物理学系 佛山 528000)

3 (Département de Physique, Université Laval, Québec, PQ G1K 7P4, Canada)

摘要 蒙特卡罗哈密顿方法(MCH)是研究量子理论的数值模拟新方法,其优点是可求出超出基态的能谱和波函数.旧MCH方案需要自由粒子的信息,较难推广应用于格点规范理论.本文提出克服这个困难的新方案.首先介绍这一方案的思想,并以1维量子力学模型 $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (其中 $\mu^2 < 0, \lambda > 0$)为例说明实现这一新方案的具体计算步骤和方法.

关键词 蒙特卡罗 等效哈密顿量 新方案 波函数 能谱

1 引言

量子理论有两种标准形式:即拉格朗日路径积分量子化形式和哈密顿正则量子化形式.这两种形式各有优缺点,前者易于使用计算机进行数值模拟,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.但是拉氏形式难以计算波函数和激发态能谱.哈氏形式虽然能够计算激发态波函数和能谱,但难以对高维系统进行高阶计算,也难以开展蒙特卡罗数值模拟.1999年,由JIRARI, KRÖGER, 罗向前和MORIARTY提出的蒙特卡罗哈密顿(Monte Carlo Hamiltonian, 以下简称MCH)方法^[1],结合了以上两种形式的优点,在拉格朗日形式下构造出等效哈密顿量,进行计算机模拟,进而得到波函数和能谱,计算系统的热力学函数.该方法已经被成功应用于量子力学^[2-4]及标量场论中^[5].

MCH方法需要计算跃迁矩阵元.在量子力学中,可以通过在自由粒子系统产生组态来计算其跃迁矩阵元.但这种做法推广到格点规范理论^[6]时,有一定的困难.以下先简要介绍其问题所在.

在虚时间下,定义参数 $\beta = T/\hbar$,则粒子从0时刻 x_i 位置的初态到 T 时刻 x_j 位置的末态的跃迁几率幅

为^[1]

$$M_{ij} = \langle x_i, 0 | x_j, \beta \rangle = \langle x_i | e^{-\beta H} | x_j \rangle \approx \sum_{n=1}^N \langle x_i | E_n^{\text{eff}} \rangle e^{-\beta E_n^{\text{eff}}} \langle E_n^{\text{eff}} | x_j \rangle, \quad (1)$$

这里用等效哈密顿量 H^{eff} 近似代替原始哈密顿量 H ,即将问题由无穷维的Hilbert空间格点化且截断为有限维的Hilbert空间中来研究.

另外,根据费曼路径积分量子化理论^[7],上述跃迁几率幅可以写为

$$M_{ij}(\beta) = \frac{1}{K(\beta)} \int [dx] e^{-S(\beta)/\hbar} \Big|_{x_i, 0}^{x_j, \beta}, \quad (2)$$

对于量子力学系统,其作用量可写为

$$S(\beta) = \int_0^{\hbar\beta} dt [V(x) + m\dot{x}^2/2]. \quad (3)$$

为了通过蒙特卡罗重点抽样法来计算跃迁矩阵元 $M_{ij}(\beta)$,将作用量(3)式分成两部分:

$$S = S_0 + S_V = \int_0^{\hbar\beta} dt [m\dot{x}^2/2] + \int_0^{\hbar\beta} dt [V(x)], \quad (4)$$

其中第1部分是自由粒子的作用量.这样跃迁矩阵元可以写成:

$$M_{ij}(\beta) = M_{ij}^0(\beta) \times \frac{\int [dx] e^{-S_V(\beta)/\hbar} e^{-S_0(\beta)/\hbar} \Big|_{x_i, 0}^{x_j, \beta}}{\int [dx] e^{-S_0(\beta)/\hbar} \Big|_{x_i, 0}^{x_j, \beta}}, \quad (5)$$

2005 - 02 - 02 收稿

*国家自然科学基金重点项目(10235040),教育部科学技术研究重点项目(105135),广东省自然科学基金(020127)和广东省教育厅资助
1)通讯作者, E-mail: stslxq@zsu.edu.cn

而 $M_{ij}^0(\beta)$ 对应于自由粒子的传播子. 例如, 在1维量子力学中, 它有如下解析表达式:

$$M_{ij}^0(\beta) = \frac{1}{K(\beta)} \int [dx] e^{-S_0(\beta)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} e^{-m(x_i-x_j)^2/2\hbar^2\beta}, \quad (6)$$

这样在用蒙特卡罗重点抽样法来计算(5)式后面部分

$$\frac{\int [dx] e^{-S_V(x)/\hbar} e^{-S_0(x)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta}}{\int [dx] e^{-S_0(x)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta}}$$

的值后就可以得到 $M_{ij}(\beta)$, 并采用线性代数方法将其对角化即可得到系统的能谱和波函数^[1].

上述方案的出发点之一是: 在量子力学和场论中, 对于自由粒子或自由标量场, $M_{ij}^0(\beta)$ 有解析解. 但是对格点规范理论^[6]而言, 不容易从作用量中分出自由作用量而计算解析出 $M_{ij}^0(\beta)$, 必须找出新方法来计算 $M_{ij}(\beta)$.

为了将MCH方法推广应用于格点规范理论, 文中提出一个可以克服上述困难的方案. 第2部分将介绍这一方案的基本思想, 第3部分以1维量子力学的模型势 $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (其中 $\mu^2 < 0, \lambda > 0$) 为例, 说明实现这一新方案的具体计算方法和步骤, 并对结果作一些讨论.

2 MCH新方案的基本思想

2.1 原理

由(1)式可得

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \ln M_{ij}(\beta) = - \frac{\langle x_i | H e^{-\beta H} | x_j \rangle}{\langle x_i | e^{-\beta H} | x_j \rangle}. \quad (7)$$

利用(7)式, 可以定义平均能量算符 \hat{U} , 其矩阵元为

$$U_{ij}(\beta) = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln M_{ij}(\beta) = - \frac{\langle x_i | H e^{-\beta H} | x_j \rangle}{\langle x_i | e^{-\beta H} | x_j \rangle}. \quad (8)$$

易见 $U_{ij}(\beta)$ 适合用蒙特卡罗模拟方法进行计算. 对(8)式积分可得

$$C_{ij}(\beta) = \frac{M_{ij}(2\beta)}{M_{ij}(\beta)} = e^{-\int_{\beta}^{2\beta} U_{ij}(\beta') d\beta'}. \quad (9)$$

另一方面, 从0时刻 x_i 位置的初态到 $2\hbar\beta$ 时刻 x_j 位置的末态的跃迁几率幅可以写为

$$M_{ij}(2\beta) = \langle x_i | e^{-2\beta H} | x_j \rangle \approx \sum_{k=1}^N \langle x_i | e^{-\beta H^{\text{eff}}} | x_k \rangle \langle x_k | e^{-\beta H^{\text{eff}}} | x_j \rangle = \sum_{k=1}^N M_{ik}(\beta) M_{kj}(\beta), \quad (10)$$

由(9)和(10)式可得

$$C_{ij}(\beta) M_{ij}(\beta) = \sum_{k=1}^N M_{ik}(\beta) M_{kj}(\beta), \quad (11)$$

这是一个以 $N \times N$ 个跃迁矩阵元为未知量的非线性方程组, 解之可得与蒙特卡罗等效哈密顿量相联系的矩阵 $M(\beta)$. 然后用线性代数方法对其进行对角化

$$M(\beta) = \Lambda^+ D(\beta) \Lambda, \quad (12)$$

其中 Λ 为么正矩阵、 D 为对角矩阵. 这样, 比较(1)式和(12)式可得

$$\Lambda_{ik}^+ = \langle x_i | E_k^{\text{eff}} \rangle, \quad D_k(\beta) = e^{-\beta E_k^{\text{eff}}}. \quad (13)$$

由(13)式可得第 k 个能量本征值

$$E_k^{\text{eff}} = - \frac{\ln D_k(\beta)}{\beta}, \quad (14)$$

相应地第 k 个本征波函数可由么正矩阵 Λ^+ 的第 k 列得到, 这样就得到系统的能谱和波函数的近似解. 由此就可以进一步研究体系的热力学性质, 如比热、自由能、相结构等.

2.2 统计误差的估计

根据(11)式, $M_{ij}(\beta)$ 的统计误差是由 C_{ij} 的统计误差决定. C_{ij} 的统计误差是由 U_{ij} 的统计误差决定的. 在使用(8)式进行蒙特卡罗模拟时, 可以得到 U_{ij} 的统计误差.

假设将区域 $[\beta, 2\beta]$ 分成宽为 $\Delta\beta'$ 的 N_{β} 等份, 采用Metropolis重点抽样方法^[8]计算(20)式所示包括两个端点在内的 $N_{\beta} + 1$ 个等分点处的 $U_{ij}(\beta')$. 则(9)式可近似为 $C_{ij}(\beta) \approx \exp \left[- \sum_{k=1}^{N_{\beta}} U_{ij}(\beta'_k) \Delta\beta' \right]$, 若 $U_{ij}(\beta'_k)$ 的统计误差为 $\Delta U_{ij}(\beta'_k)$, 则 $C_{ij}(\beta)$ 的统计误差为

$$\Delta C_{ij}(\beta) \approx C_{ij}(\beta) \Delta\beta' \sqrt{\sum_{k=1}^m (\Delta U_{ij}(\beta'_k))^2}.$$

解(11)式所示的非线性方程组得到 M_{ij} 并计算出 $C_{ij}(\beta)$ 的统计误差后, 即可估计 M_{ij} 的统计误差 ΔM_{ij} 了. 由(11)式可得

$$\left(\sum_{k=1}^N (M_{ik} \Delta M_{kj} + M_{kj} \Delta M_{ik}) \right) - C_{ij} \Delta M_{ij} = M_{ij} \Delta C_{ij},$$

解此非齐次线性方程组, 可得 M_{ij} 的统计误差 ΔM_{ij} . 然后, 可以使用下述迭代方案估算能级和波函数的统计误差.

首先假设波函数矩阵 Λ 不变, 由于误差 $\Delta M(\beta)$ 的引入, 存在矩阵 $D'(\beta)$, 使得 $D'(\beta) = \Lambda[M(\beta) + \Delta M(\beta)]\Lambda^+$, 这样 $D'(\beta)$ 矩阵的 k 行 k 列元素为

$$[D'(\beta)]_{k,k} = \exp[-\beta(E_k^{\text{eff}} + \Delta E_k^{\text{eff}})], \quad (15)$$

其中 ΔE_k^{eff} 为 $\Delta M(\beta)$ 引起的第 k 个能级的误差. 据此易得

$$\Delta E_k^{\text{eff}} = -\frac{1}{\beta} \ln([D'(\beta)]_{k,k}) - E_k^{\text{eff}}. \quad (16)$$

其次假设能级 E_k^{eff} 不变, 存在波函数矩阵 $\Lambda' = \Lambda + \Delta\Lambda$, 使得

$$M(\beta) + \Delta M(\beta) = \Lambda'^+ D(\beta) \Lambda' = (\Lambda + \Delta\Lambda)^+ D(\beta) (\Lambda + \Delta\Lambda), \quad (17)$$

略去和 $\Delta\Lambda$ 相关的高次项, 可得

$$(\Delta M)_{ij} = \sum_{k=1}^N e^{-\beta E_k^{\text{eff}}} [A_{ik}(\Delta\Lambda)_{kj} + A_{kj}(\Delta\Lambda)_{ik}], \quad (18)$$

$$i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, N.$$

这是一个线性方程组, 解此方程组, 可得矩阵 $\Delta\Lambda$, 而第 k 个波函数的误差由矩阵 $(\Delta\Lambda)^+$ 的第 k 列给出.

3 计算实例

3.1 计算公式

根据上述原理, 首先介绍在量子力学中如何实现上述方案.

在量子力学中, 将与时间相关的变量 β 格点化为均匀的 N_t 份, 间距为 a_t , 即 $\beta = a_t N_t$. 注意到

$$K(a_t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar a_t} \right)^{N_t/2}, \quad \text{由(2)式和(8)式可得}$$

$$U_{ij}(\beta) = -\frac{1}{N_t} \frac{\partial}{\partial a_t} \ln \left[\frac{1}{K(a_t)} \int [dx] e^{-S(a_t)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta} \right] =$$

$$\frac{1}{2a_t} + \frac{1}{\hbar N_t} \frac{\int [dx] \frac{\partial S}{\partial a_t} e^{-S(a_t)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta}}{\int [dx] e^{-S(a_t)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta}}. \quad (19)$$

将(3)式改写为离散形式:

$$S(a_t) \approx \sum_{k=0}^{N_t-1} \left[\frac{1}{\hbar a_t} \frac{m}{2} (x_{k+1} - x_k)^2 + \hbar a_t V(x_k) \right]$$

代入(19)式, 可得

$$U_{ij}(\beta) = \frac{1}{2a_t} + \frac{1}{\hbar N_t} \times$$

$$\frac{\int [dx] \sum_{k=0}^{N_t-1} \left[\frac{-m}{2\hbar a_t^2} (x_{k+1} - x_k)^2 + \hbar V(x_k) \right] e^{-S(a_t)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta}}{\int [dx] e^{-S(a_t)/\hbar} \Big|_{x_i,0}^{x_j,\beta}}, \quad (20)$$

上述表达式中的泛函路径积分的比值可以用蒙特卡罗重点抽样法计算.

3.2 模型、计算参数和步骤

文中以与量子场论中 ϕ^4 模型相似的 1 维量子力学模型势 $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (其中 $\mu^2 < 0, \lambda > 0$) 为例进行计算. 计算参数和步骤如下:

(1) 选取 $\mu^2 = -0.5, \lambda = 0.25, \hbar = 1, m = 1, \beta = 0.5$, 空间格点数 $N = 13, dx = 1.0$, 将区域 $[\beta, 2\beta]$ 分成 $N_\beta = 20$ 等份, 采用 Metropolis 重点抽样方法^[8] 计算(20)式所示包括两个端点在内的 21 个等分点处的 $U_{ij}(\beta')$.

计算每一个 $U_{ij}(\beta')$ 时, 先预热 500 个组态, 并每隔 100 个组态进行一次抽样. $x_i = x_j$ 时, 取时间格点数 $N_t = 20$, 共抽样 500 次, 计算其统计平均值和统计误差; $x_i \neq x_j$ 时, 取时间格点数 $N_t = 40$, 共抽样 1000 次, 计算其统计平均值和统计误差.

(2) 使用数值积分的梯形公式求出(9)式所定义的 $C_{ij}(\beta)$ 的近似值, 得到 13×13 个元素的 C 矩阵.

(3) 解非线性方程组(11), 可以得到 13×13 个元素的 $M(\beta)$ 矩阵. 采用线性代数方法将其对角化, 即可得到相应的能谱和波函数的数值解.

(4) 用前述方法计算能级、波函数以及它们的统计误差, 并作图.

3.3 计算结果和讨论

表 1 给出了用 MCH 新方案得到的能谱, 图 1 至图 3 为 MCH 新方案得到的波函数, 并和旧 MCH 方案得到的能谱(选择相同的模拟计算参数)以及基于节点定理 Runge-Kutta 方法^[9] 得到的能谱和波函数相比较. 从图表可见, MCH 新方案的结果和另外两种方法的结果符合得很好, 这就证明了蒙特卡罗等效哈密顿量新方案是可行的.

表 1 前 4 个能级的计算结果

量子数	能级	能级	能级
n	(New MCH)	(Old MCH)	(Runge Kutta)
1	0.1422±0.0026	0.1491±0.0096	0.1472
2	0.8441±0.0563	0.8698±0.0264	0.8722
3	2.1421±0.0152	2.1546±0.0469	2.1279
4	3.8479±0.2327	3.7173±0.0944	3.5910

对于本方案的计算过程, 以下几点值得说明.

(1) 本方案实施时最大的困难是求解(11)式所示的非线性方程组, 由于它是一个齐次方程组, 存在平凡解(所有未知数为0), 而真正的解本身也有不少接近零, 因此用求解非线性方程组的一般算法极易得到平凡解. 当将它转化为全局优化问题加以求解时, 因为目标函数存在大量局部极小点, 牛顿法无能为力, 最后采用模拟退火算法^[10]求得全局最优解后再用梯度法进行局部搜索求解. 这时 N 不能选得太大. 太大的 N 会使得计算工作量大增.

(2) N_t, N_β 要选择适当. N_t 太小使得时间方向的路径积分步长太大, 引起作用量的 a_t 误差较大. 但太大的 N_t 或使得路径更加曲折, 需要更高的统计量. 如图4所示, N_t 在一定的范围内, 结果比较稳定. 同理 N_β 也要选择适当. N_β 太小使得数值积分步长较大, 引起 C_{ij} 误差较大. 但太大的 N_β 不但使机时增加, 而且使得通过 U_{ij} 传递给 C_{ij} 的误差增大, 引起结果的不稳定. 如图5所示, N_β 在一定的范围内, 结果也比较稳定.

(3) 在实际计算中, 注意到模型势的对称性使得波函数具有确定的宇称, 利用波函数的对称性可以使非线性方程组的变量数目大为减少.

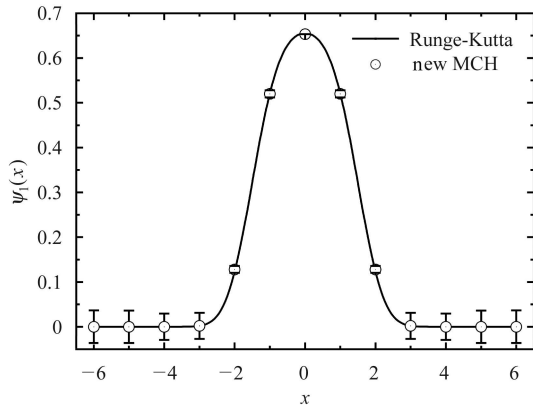


图 1 基态波函数

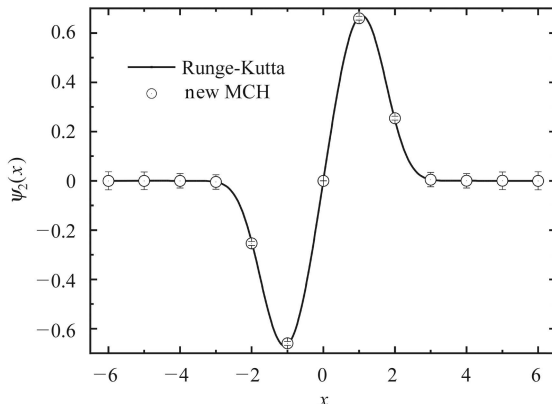


图 2 第1激发态波函数

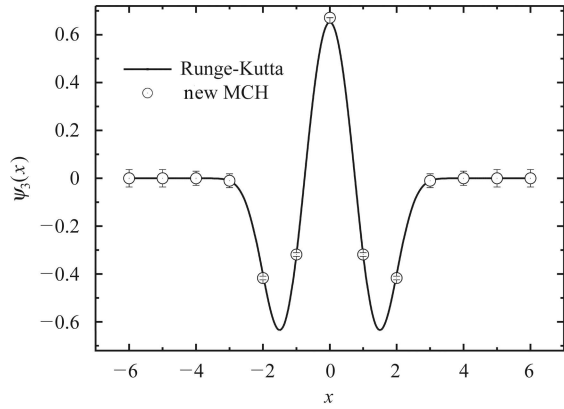


图 3 第2激发态波函数

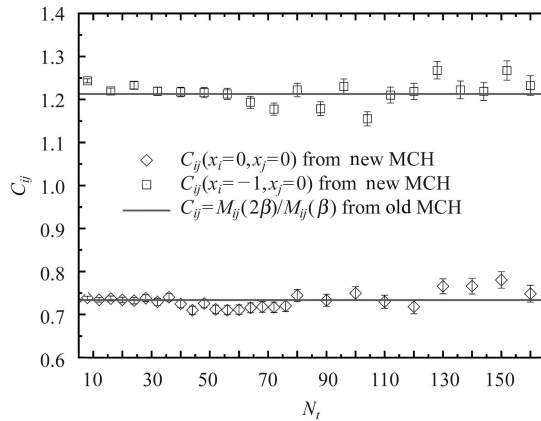


图 4 C_{ij} 随 N_t 的变化

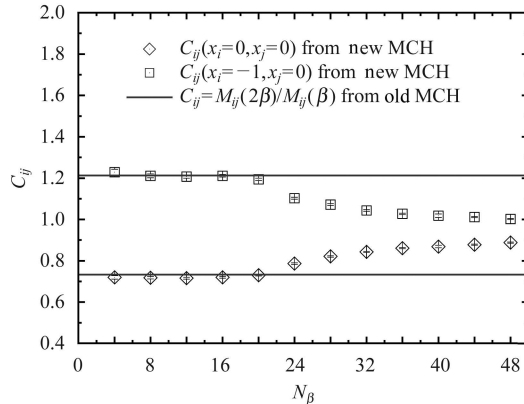


图 5 C_{ij} 随 N_β 的变化

4 结论

本文叙述了MCH新方案的数学和物理原理, 介绍了估算统计误差的方法, 并且以1维量子力学模型势 $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (其中 $\mu^2 < 0, \lambda > 0$) 为例检验了本方案的可行性. 结果表明, 本新方案不需要知道自由粒子的任何信息, 就可以求得跃迁矩阵元, 从而得

出基态和激发态的能谱和波函数. 它的确可以克服MCH旧方案的困难, 为将MCH方法推广到格点规范理论点燃了希望之光. 比起格点规范理论的常规计算

方法, MCH方法有望应用于研究QCD激发态和有限密度相变^[11, 12]等.

参考文献(References)

- 1 Jirari H, Kroger H, LUO X Q et al. Phys. Lett., 1999, **A258**: 6—14
- 2 HUANG C Q, JIANG J Q, LUO X Q et al. HEP & NP, 2000, **24**: 478—483 (in Chinese)
(黄纯青, 江俊勤, 罗向前等. 高能物理与核物理, 2000, **24**: 478—483)
- 3 LUO X Q, LIU J J, HUANG C Q et al. Commun. Theor. Phys., 2002, **38**: 561—565
- 4 JIANG J Q, HUANG C Q, LUO X Q et al. Commun. Theor. Phys., 2000, **34**: 723—728
- 5 HUANG C Q, Kroger H, LUO X Q et al. Phys. Lett., 2002, **A299**: 483—493
- 6 Wilson K G. Phys. Rev., 1974, **D10**: 2445—2459
- 7 Feynman R P, Hibbs A R. Quantum Mechanics and Path Integrals. McGraw-Hill Press, 1965
- 8 Metropolis N et al. J. Chem. Phys., 1953, **21**: 1087—1092
- 9 HUANG C Q. J. Foshan Univ., 1993, **4**: 59—62 (in Chinese)
(黄纯青. 佛山大学学报, 1993, **4**: 59—62)
- 10 KANG L S, XIE Y, YOU S Y et al. Non Numerical Parallel Algorithm - Simulated Annealing. Beijing: Science Press, 1994 (in Chinese)
(康立山, 谢云, 尤矢勇等. 非数值并行算法—模拟退火算法. 北京: 科学出版社, 1994)
- 11 Gregory E B, GUO S, Kroger H et al. Phys. Rev., 2000, **D62**: 054508
- 12 LUO X Q. Phys. Rev., 2004, **D70**: 091504

New Approach to Monte Carlo Hamiltonian and Test*

HUANG Chun-Qing^{1,2} LUO Xiang-Qian^{1;1)} H. Kröger³

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

2 (Department of Photoelectronics and Physics, Foshan University, Foshan 528000, China)

3 (Département de Physique, Université Laval, Québec, PQ G1K 7P4, Canada)

Abstract Monte Carlo Hamiltonian method is a new algorithm for numerical simulation of quantum theories. The advantage is its ability to study spectrum and wave functions beyond the ground state. The previous approach needs information on free particles and is difficult to be used for lattice gauge theory. In this paper, we propose a new approach to MCH, which may overcome the difficulty. We describe the basic ideas, and use a 1-dimensional quantum mechanical model $V(x) = \mu^2 x^2 + \lambda x^4$ (with $\mu^2 < 0, \lambda > 0$) as an example.

Key words Monte Carlo, effective Hamiltonian, new approach, wave functions, spectrum

Received 2 February 2005

*Supported by NSFC Key Project(10235040), Key Project of Chinese Ministry of Education(105135), Natural Science Foundation (020127) and Ministry of Education of Guangdong Province

1) Corresponding author, E-mail: stslxq@zsu.edu.cn