

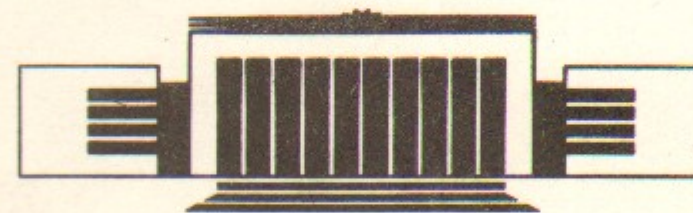


ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

А.Г. Грозин

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ
В НЕОДНОСВЯЗНОЙ ОБЛАСТИ**

ПРЕПРИНТ 89-141



НОВОСИБИРСК

Моделирование квантовой частицы
в неодносвязной области

А.Г. Грозин

Институт ядерной физики
630090, Новосибирск 90, СССР
АННОТАЦИЯ

Для частицы в неодносвязной области существуют различные гомотопические классы траекторий, что приводит к необходимости использования более сложных алгоритмов монте-карловского моделирования. В работе обсуждаются распределение вероятности по гомотопическим классам и средние от функций координат по этим классам. Рассматривается эффект Бома-Ааронова, когда вклады траекторий различных классов содержат различные фазовые множители. Предложен алгоритм моделирования квантовой частицы в неодносвязной области.

Simulating Quantum Particle
in non Simply Connected Space

A.G. Grozin

Institute of Nuclear Physics
630090, Novosibirsk, USSR

ABSTRACT

In the case of a particle in a non simply connected space, there exist different homotopy classes of paths. This leads to the necessity to use more involved Monte Carlo algorithms. Probability distributions over homotopy classes and average values of functions of coordinates over these classes are discussed. Aharonov-Bohm effect is considered, in such a case different homotopy class contributions contain different phase factors. Simulation algorithm for a particle in a non simply connected space is presented.

© Институт ядерной физики СО АН СССР

1. ВВЕДЕНИЕ

Монте-карловское моделирование является мощным и универсальным методом численного решения задач квантовой механики [1—4]. Он основан на том, что среднее от любой функции координат $A(x)$, $x \in Q$ (Q — конфигурационное пространство системы) по каноническому ансамблю при температуре T выражается через функцию Грина в мнимом времени на интервале $\tau' - \tau = \beta = 1/T$:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta e_i} \int_Q dx \psi_i^*(x) A(x) \psi_i(x) = \frac{1}{Z} \int_Q dx A(x) G(\beta, x; 0, x),$$
$$Z = \sum_i e^{-\beta e_i} = \int_Q dx G(\beta, x; 0, x). \quad (1)$$

Записывая функцию Грина в виде фейнмановского интеграла по траекториям, получим

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int Dx A(x(\tau_0)) e^{-S[x]/\hbar}, \quad Z = \int Dx e^{-S[x]/\hbar}, \quad (2)$$

где подразумевается интеграл по всем замкнутым траекториям с периодом β , а τ_0 — произвольный момент времени. Эту формулу можно интерпретировать как среднее по классическому каноническому ансамблю замкнутых траекторий, в котором роль энергии играет действие $S[x]$, а роль температуры — \hbar . Для приближенного вычисления средних (2) непрерывное мнимое время заменяется

дискретной решеткой. Организуется случайный процесс переходов между состояниями траектории. Если любое состояние в принципе достижимо, и выполняется принцип детального баланса, то ансамбль траекторий релаксирует к состоянию равновесия. После этого возможно измерение средних (2).

Если конфигурационное пространство Q неодносвязно, то замкнутые траектории разбиваются на гомотопические классы, не переводимые друг в друга непрерывными деформациями. Область интегрирования в (2) при этом является несвязной. Поэтому возникает проблема определения весов, с которыми вклады отдельных классов входят в (2). Ее рассмотрению и посвящена настоящая работа.

В разделе 2 рассматриваются топологические аспекты вычисления интегралов по траекториям в случае неодносвязного конфигурационного пространства, и в частности эффект Бома-Ааронова, когда вклады траекторий различных классов приобретают различные фазовые множители. В разделе 3 излагается алгоритм моделирования в рассматриваемом случае и его проверка на примере простой задачи. В разделе 4 обсуждаются перспективы применения предлагаемого подхода для исследования топологических эффектов в квантовой теории поля.

В работе [3] уже обсуждалась простая модель с неодносвязным конфигурационным пространством, а именно: квантовый маятник. На этом примере были выяснены некоторые аспекты рассматриваемой проблемы. Однако, как мы покажем в разделе 3, предложенный там алгоритм моделирования очень неэффективен вблизи непрерывного предела.

В некотором отношении аналогичные вопросы встречаются также при моделировании систем тождественных частиц [4]. Траектории можно рассматривать как замкнутые кривые в «пространстве-времени» $Q \times S^1$, где S^1 — замкнутое мнимое время. Поэтому, кроме гомотопического класса относительно Q , они характеризуются числом витков вокруг времени S^1 — кратностью тора.

В случае двумерного пространства Q неодносвязную область можно получить из односвязной выкалыванием точки. При этом возникает кажущийся парадокс. С одной стороны, выколота точка влияет на энергии и волновые функции всех состояний с моментом $l=0$ относительно этой точки, и потому меняет средние (1). С другой стороны, она, казалось бы, приводит лишь к исключению множества меры 0 в интеграле по траекториям (2), что не должно повлиять на его величину. Пусть вырезаемая область имеет малый

ненулевой размер d , а интеграл по траекториям приближен решеточным с шагом a . Тогда условие применимости состоит в том, что сдвиг на шаге по времени $\sqrt{a/m}$ много меньше характерной длины изменения потенциала, в данном случае d . В случае потенциального барьера конечной высоты это условие состоит в том, что траектория не должна перескакивать через барьер [2]. Поэтому нельзя сначала устремить $d \rightarrow 0$, а затем $a \rightarrow 0$.

2. ИНТЕГРАЛ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ДЛЯ ЧАСТИЦЫ В НЕОДНОСВЯЗНОЙ ОБЛАСТИ И ЭФФЕКТ БОМА — ААРОНОВА

Как известно, множество гомотопических классов замкнутых траекторий в Q , обозначаемое $\Pi_1(Q)$, имеет структуру группы, задаваемую последовательным прохождением траекторий. Например, пусть Q получается из односвязной области путем вырезания дырки, такой, что обходящую вокруг нее траекторию нельзя стянуть в точку. Тогда каждая траектория характеризуется числом витков вокруг дырки $n \in Z$, и $\Pi_1(Q) = Z$. В случае двух дырок траектория характеризуется числом витков вокруг первой, затем вокруг второй, затем опять вокруг первой, снова вокруг второй, и так любое число раз. Гомотопическая группа в этом случае является свободным произведением $\Pi_1(Q) = Z * Z$; она некоммутативна. Гомотопическая группа произведения $\Pi_1(Q_1 \times Q_2) = \Pi_1(Q_1) \times \Pi_1(Q_2)$; так, для тора $\Pi_1(Q) = Z^2$. Бывают и другие гомотопические группы. Так, на проективной плоскости P^2 существуют 2 класса замкнутых траекторий, и $\Pi_1(P^2) = Z_2$; то же верно для группы вращений $SO(3)$.

Определим накрывающее пространство \bar{Q} . Сначала фиксируем точку $x_0 \in Q$; точка $x \in \bar{Q}$ определяется своей проекцией $\hat{x} \in Q$ и гомотопическим классом траекторий, соединяющих x_0 с \hat{x} в Q . Замкнутая траектория в Q остается замкнутой в \bar{Q} , только если она стягиваема в точку. Если же траектория принадлежит классу $n \in \Pi_1(Q)$, $n \neq 0$, то, начавшись в точке x , она закончится в точке x' , имеющей ту же проекцию $\hat{x}' = \hat{x}$, но лежащую на другом листе. Обозначим эту точку x' через $x + n$. Накрывающее пространство \bar{Q} односвязно по построению.

Далее мы будем рассматривать квантовую механику на \bar{Q} . Пусть $\bar{G}(\tau', x'; \tau, x)$ ($x', x \in \bar{Q}$) будет функцией Грина на \bar{Q} . Функция Грина $G(\tau', x'; \tau, x)$ на Q дается интегралом по всем

траекториям в Q , идущим из x в x' . В \bar{Q} эти траектории приводят в разные точки $x' + n$. Поэтому

$$G(\tau', x'; \tau, x) = \sum_n \bar{G}(\tau', x' + n; \tau, x). \quad (3)$$

Тогда из (1) следует

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n \langle A \rangle_n, \quad P_n = \frac{Z_n}{Z}, \quad Z = \sum_n Z_n, \quad (4)$$

$$Z_n = \int_Q dx \bar{G}(\beta, x + n; 0, x), \quad \langle A \rangle_n = \frac{1}{Z_n} \int_Q dx A(x) G(\beta, x + n; 0, x).$$

Здесь P_n — вероятность того, что траектория принадлежит гомотопическому классу $n \in \Pi_1(Q)$, а $\langle A \rangle_n$ — среднее величины A по траекториям этого класса.

Функция Грина \bar{G} строится из базиса собственных функций гамильтониана на \bar{Q} и соответствующих собственных значений. Собственные функции с данной энергией образуют унитарное представление группы симметрии гамильтониана $\Pi_1(Q)$. В дальнейшем мы будем рассматривать простейший случай конфигурационного пространства с одной дыркой, $\Pi_1(Q) = Z$. Обобщение на случай Z^n тривиально. Хотя общий формализм применим к любым неодносвязным пространствам, мы не получили явных формул для некоммутативных гомотопических групп.

Поскольку группа Z коммутативна, любое представление приводится к одномерным:

$$\psi_{il}(x + n) = e^{2\pi i l n} \psi_{il}(x). \quad (5)$$

Физически Z — группа симметрии одномерного кристалла, и (5) представляет собой теорему Блоха. Представление определяется квазиимпульсом l , который определен с точностью до прибавления целого числа (т. е. пробегает отрезок длины 1 с отождествленными концами). Индекс i нумерует различные собственные функции, относящиеся к одному представлению l , и представляет собой номер зоны. Энергии состояний (5) есть $\varepsilon_i(l)$ (очевидно, они периодичны по l с периодом 1).

На \bar{Q} можно определить (далеко не единственным образом) функцию $\theta(x)$ такую, что $\theta(x + n) = \theta(x) + 2\pi n$. Тогда $\psi_{il}(x) = e^{i l \theta} u_{il}(x)$, где $u_{il}(x)$ — набор однозначных на Q собственных

функций гамильтониана $\hat{H}_l = e^{-i l \theta} \hat{H} e^{i l \theta}$. Если гамильтониан симметричен относительно сдвигов по θ , то можно перейти к схеме расширенных зон, в которых l пробегает значения от $-\infty$ до $+\infty$; они нумеруются индексом i .

Условие нормировки собственных функций (5) запишем в виде

$$\int_Q dx \psi_{il}^*(x) \psi_{il}(x) = \delta_{il}, \quad (6)$$

или, что эквивалентно,

$$\int_{\bar{Q}} dx \psi_{il}^*(x) \psi_{il}(x) = \delta_{il} \theta(l' - l). \quad (7)$$

Тогда функция Грина равна

$$\bar{G}(\tau', x'; \tau, x) = \sum_i \int dl e^{-\varepsilon_i(l)(\tau' - \tau)} \psi_{il}(x') \psi_{il}^*(x). \quad (8)$$

Итак, окончательно мы получаем для вероятности n -витковой траектории и средних по таким траекториям

$$Z_n = \sum_i \int dl e^{2\pi i l n - \beta \varepsilon_i(l)}, \quad (9)$$

$$\langle A \rangle_n = \frac{1}{Z_n} \sum_i \int dl e^{2\pi i l n - \beta \varepsilon_i(l)} \langle A \rangle_{il}.$$

где $\langle A \rangle_{il}$ — квантовомеханическое среднее $A(x)$ по состоянию $\psi_{il}(x)$.

Знание вероятностей P_n и средних $\langle A \rangle_n$ позволяет легко учесть эффект Бома — Ааронова. Именно, если через дырку в Q проходит магнитный поток Φ , то вклад траекторий, n раз обвивающихся вокруг этой дырки, в числитель и знаменатель в (2) будет содержать дополнительный фазовый множитель:

$$\langle A \rangle_\Phi = \frac{\sum_n P_n \langle A \rangle_n e^{2\pi i n \Phi / \Phi_0}}{\sum_n P_n e^{2\pi i n \Phi / \Phi_0}}, \quad (10)$$

где Φ_0 — квант потока. Ситуация аналогична случаю θ -вакуума в теории поля, где θ играет роль $2\pi\Phi/\Phi_0$, а n — топологический заряд [3].

Однозначными на Q являются только волновые функции с

$l=0$. Подставляя (9) в (4) и вычисля сумму по n , мы получим $\delta(l)$. В Z и $\langle A \rangle$ останутся только вклады состояний $\psi_{i,l=0}$, и мы вернемся к формуле (1). В случае эффекта Бома—Ааронова (10), вместо этого мы получим $\delta(l + \Phi/\Phi_0)$. Таким образом, дают вклад только состояния $\psi_{i,l=-\Phi/\Phi_0}$. С математической точки зрения, говорят, что квантование на неодносвязном конфигурационном пространстве Q неоднозначно: набор состояний в каждом представлении l гомотопической группы $\Pi_1(Q)$ дает неэквивалентное другим представление канонических коммутационных соотношений. Физическая причина этой неоднозначности—эффект Бома—Ааронова: нетривиальные представления соответствуют ненулевым магнитным потокам в дырках в Q , которые нужно задавать дополнительно к описанию системы на Q для ее однозначного квантования.

Таким образом, весьма важным является распределение вероятностей P_n (а также средние $\langle A \rangle_n$). Они могут быть найдены аналитически в ряде предельных случаев. Прежде всего, при высоких температурах характерная длина траекторий $\sim \sqrt{\beta/m}$ мала. Если она много меньше размера вырезанной в Q дырки, то вероятности P_n попасть в любой нетривиальный класс $n \neq 0$ экспоненциально малы. При высоких температурах все траектории имеют $n=0$. С уменьшением T распределение по n становится все более широким. Если характерная длина траектории вокруг дырки $\sim 2\pi r$, то для характерного числа витков n_0 мы имеем $\sqrt{\beta/m} \sim 2\pi r n_0$, откуда

$$n_0 \sim \frac{1}{2\pi\sqrt{IT}}, \quad (11)$$

где $I \sim mr^2$ —момент инерции вращения вокруг дырки. Заметим также, что характерное значение орбитального момента l_0 находится из условия $l_0^2/2I \sim T/2$, откуда

$$l_0 \sim \sqrt{IT}, \quad n_0 l_0 \sim \frac{1}{2\pi}. \quad (12)$$

Последняя форма записи показывает, что число витков и орбитальный момент связаны своего рода соотношением неопределенностей.

Рассмотрим случай низких температур $l_0 \ll 1$. При этом в интегралах (9) дает вклад только окрестность дна самой нижней зоны $i=0$. Из T -инвариантности очевидно, что $\varepsilon_i(l)$ и $\langle A \rangle_{il}$ явля-

ются четными функциями l , и при малых l

$$\varepsilon_0(l) = \varepsilon_0(0) + \frac{l^2}{2I},$$

$$\langle A \rangle_{0l} = \langle A \rangle_{0,l=0} + \frac{bl^2}{2}. \quad (13)$$

Здесь I —аналог эффективной массы. При $l \sim 1$, ε_0 изменяется на величину порядка ширины нижней зоны $\Delta\varepsilon_0$, а $\langle A \rangle_{0l}$ —на величину порядка себя, т. е. $I \sim 1/\Delta\varepsilon_0$, $b \sim \langle A \rangle$.

Разложения (13) можно получить по теории возмущений. При малых l

$$\hat{H}_l = \hat{H} + l\hat{\Omega} + \frac{l^2}{2}\hat{V}, \quad \hat{\Omega} = i[\hat{H}, \theta], \quad \hat{V} = i[\hat{\Omega}, \theta]. \quad (14)$$

Например, если H содержит $\frac{\partial}{\partial\theta}$ только в члене $-\frac{1}{mr^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$ (где r —функция координат), то угловая скорость $\hat{\Omega} = -\frac{i}{mr^2}\frac{\partial}{\partial\theta}$, а операторный коэффициент в центробежной энергии $\hat{V} = \frac{1}{mr^2}$. Во втором порядке теории возмущений (в пространстве однозначных на Q волновых функций)

$$\varepsilon_0(l) - \varepsilon_0(0) = \frac{l^2}{2} V_{00} - l^2 \sum_{i \neq 0} \frac{\Omega_{0i} \Omega_{i0}}{\varepsilon_i - \varepsilon_0}, \quad (15)$$

$$\langle A \rangle_{0l} - \langle A \rangle_{0,l=0} = l^2 \sum_{i \neq 0, j \neq 0} \frac{A_{0i} \Omega_{ij} \Omega_{j0} + \Omega_{0i} A_{ij} \Omega_{j0} + \Omega_{0i} \Omega_{ij} A_{j0}}{(\varepsilon_i - \varepsilon_0)(\varepsilon_j - \varepsilon_0)} -$$

$$- l^2 A_{00} \sum_{i \neq 0} \frac{\Omega_{0i} \Omega_{i0}}{(\varepsilon_i - \varepsilon_0)^2} - \frac{l^2}{2} \sum_{i \neq 0} \frac{A_{0i} V_{i0} + V_{0i} A_{i0}}{\varepsilon_i - \varepsilon_0},$$

где в матричных элементах A_{ij} , Ω_{ij} интеграл берется по Q , и в ε_i подразумевается $l=0$. Аналогично [5], можно показать, что

$$\Omega_{ij} = (\varepsilon_j - \varepsilon_i) I_{ij}, \quad I_{ij} = \int_Q dx u_i^* \frac{\partial u_j}{\partial l} \Big|_{l=0} = -I_{ji}^*. \quad (16)$$

Отсюда получаем аналог формулы Зейтца для эффективной массы

$$\frac{1}{I} = V_{00} - 2 \sum_{i \neq 0} (\varepsilon_i - \varepsilon_0) |I_{i0}|^2, \quad (17)$$

$$b = - \sum_{i \neq 0} \frac{A_{0i} V_{i0} + \text{c.c.}}{\varepsilon_i - \varepsilon_0} - 2A_{00} \sum_{i \neq 0} |I_{i0}|^2 +$$

$$+ 2 \sum_{i \neq 0, j \neq 0} \left[A_{ij} I_{i0}^* I_{j0} + \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\varepsilon_j - \varepsilon_0} (A_{j0} I_{i0}^* I_{ij} + \text{c.c.}) \right].$$

Из (13) вытекает гауссово распределение по гомотопическим классам (при $l_0 \ll 1$, т. е. $n_0 \gg 1/2\pi$)

$$P_n = \frac{1}{Z} e^{-2\pi^2 I T n^2} = \frac{1}{Z} e^{-n^2/2n_0^2}, \quad Z = \sum_n e^{-n^2/2n_0^2}, \quad (18)$$

$$\langle A \rangle_n = \langle A \rangle_{l=0} - \frac{1}{2} b I T ((2\pi)^2 I T n^2 - 1) = \langle A \rangle_{l=0} - \frac{b}{8\pi^2 n_0^2} \left(\frac{n^2}{n_0^2} - 1 \right),$$

$$n_0 = \frac{1}{2\pi\sqrt{IT}}.$$

При $n \leq n_0$, в существенной области $l \leq l_0$ показатель экспоненты в (9) $2\pi n l \leq 1$, т. е. подинтегральная функция делает не более 1 колебания. В области $n \gg n_0$ она быстро осциллирует, и P_n экспоненциально малы (хотя формула (18) может быть неприменима).

Результаты (18) применимы при $T \ll \Delta\varepsilon_0$. Возможна ситуация, когда частица в основном находится в потенциальной яме, и туннелирование по топологически нетривиальным траекториям маловероятно. В этом случае уровень в яме превращается в узкую зону, $\Delta\varepsilon_0$ мало, и область применимости (18) узка. Оказывается возможным получить результаты при гораздо более слабом условии $T \ll \Delta\varepsilon_{01}$, где $\Delta\varepsilon_{01}$ — расстояние до первого возбужденного уровня в яме, т. е. до следующей зоны.

Записывая волновую функцию через функции Ванье

$$\psi_{0l}(x) = \sum_n \psi_0(x-n) e^{2\pi i n l},$$

получаем для средних

$$\varepsilon_0(l) = \sum_n H_n e^{2\pi i n l}, \quad H_n = \int_{\bar{Q}} dx \psi_0^*(x) \hat{H} \psi_0(x-n),$$

$$\langle A \rangle_{0l} = \sum_n A_n e^{2\pi i n l}, \quad A_n = \int_{\bar{Q}} dx \psi_0^*(x) A(x) \psi_0(x-n). \quad (19)$$

В приближении сильной связи, функция Ванье $\psi_0(x)$ близка к волновой функции основного состояния ямы, $H_0 = \varepsilon_0$ — к его энергии, а A_0 — к среднему от A по этому состоянию. Интегралы перекрытия быстро убывают с $|n|$; оставляя в (19) только члены с $n = 0, \pm 1$, имеем

$$\varepsilon_0(l) = \varepsilon_0 - \delta \cos 2\pi l, \quad \langle A \rangle_{0l} = A_0 - \gamma \cos 2\pi l,$$

$$\delta = -2H_1, \quad \gamma = -2A_1. \quad (20)$$

Отсюда распределение вероятности по гомотопическим классам

$$P_n = \frac{I_n(\beta\delta)}{\sum_n I_n(\beta\delta)}, \quad \langle A \rangle_n = A_0 - \gamma \frac{I'_n(\beta\delta)}{I_n(\beta\delta)}. \quad (21)$$

При низких температурах $\beta\delta \gg 1$ формулы (21) переходят в (18) (с $I = 1/(2\pi)^2 \delta$). Наоборот, при $\beta\delta \ll 1$ $P_n \sim (\beta\delta)^n$, т. е. вероятность топологически нетривиальных траекторий мала.

Приближение сильной связи (случай узких зон) можно обсуждать на несколько другом языке. А именно, туннелированию отвечает инстантон (или антиинстантон) — классическая траектория в мнимом времени из гомотопического класса $n = \pm 1$. При малой вероятности туннелирования применимо приближение разреженного инстантонного газа. В нем считается, что типичная траектория из гомотопического класса n содержит изолированные инстантоны (n_+ инстантонов и n_- антиинстантонов, $n_+ - n_- = n$), разделенные большими промежутками колебаний вблизи дна ямы. Для энергии низшего состояния с данным l (называемого в этой связи θ -вакуумом, $\theta = 2\pi l$) приближение разреженного инстантонного газа дает формулу (20). Более подробно такой подход обсуждается в [3].

3. АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Условие применимости дискретизации мнимого времени с шагом a состоит в том, что характерная длина участка траектории на одном шаге $\sim \sqrt{a/m}$ много меньше характерных размеров

задачи, в данном случае размеров топологически нетривиальной траектории. Сдвиг точки траектории на одном шаге моделирования порядка величины ее дрожания $\sim \sqrt{a/m}$. Поэтому при выполнении условия применимости переход траектории в ходе моделирования из одного гомотопического класса в другой или строго запрещен, или экспоненциально маловероятен.

Пусть, например, неодносвязная область Q получена из односвязной области Q_0 путем вырезания дырки — области недоступной для частиц. Тогда естественный способ моделирования состоит в применении какого-либо алгоритма в Q_0 с отбрасыванием изменений, переводящих точку траектории в недоступную область. В случае алгоритма Метрополиса, если величина максимального сдвига на шаге (она порядка $\sqrt{a/m}$) меньше минимального диаметра дырки, переход в другой гомотопический класс строго запрещен. В случае же алгоритма тепловой ванны, сколь угодно большой сдвиг имеет ненулевую вероятность, и переход возможен. Однако вероятность сдвига на величину, много большую $\sqrt{a/m}$, в данном случае превышающую диаметр дырки, экспоненциально мала.

Аналогично, в случае задачи о частице на окружности, при естественном построении решеточной модели не возникает неоднозначности, по какой из двух дуг окружности, соединяющих соседние точки, проходит траектория, и гомотопический класс фиксирован. В более сложной дискретной модели [3] такая неоднозначность вводится и считается, что участок траектории, соединяющий две соседние точки, может совершить любое число витков вокруг окружности. Однако при выполнении условия применимости расстояние между соседними точками траектории $\sim \sqrt{a/m}$ много меньше радиуса окружности R , и перезамыкание траектории, требующее увеличения этого расстояния до величины $\sim R$, экспоненциально маловероятно.

Для вычисления средних (2) необходимо, чтобы любая траектория была достижимой в процессе моделирования. Для этого можно в принципе использовать алгоритмы, допускающие переходы между гомотопическими классами (как это сделано, например, в [3]). Однако в таком случае либо условия применимости дискретной модели не выполнены или выполнены плохо (именно так обстоит дело в [3]), либо, когда мы действительно находимся вблизи непрерывного предела, время релаксации между гомотопическими классами (и, следовательно, время счета, необходимое для правильного вычисления средних) экспоненциально велико.

Другой путь — вычислять отдельно средние по гомотопическим классам $\langle A \rangle_n$, и усреднять их с вероятностями P_n . Их нахождение из моделирования сводится к проблеме абсолютной нормировки Z_n , для которой эффективный алгоритм неизвестен [2]. Численное определение P_n необходимо при $n_0 \sim 1$, так как в случае $n_0 \gg 1$ применима формула (18), а в случае $n_0 \ll 1$ траектории с $n \neq 0$ вообще несущественны. Поэтому реально представляют интерес небольшое число гомотопических классов.

Если формулы типа (18), (21) неприменимы, можно применить трюк с введением дополнительного параметра $S \rightarrow S(\alpha)$ [2]: $\frac{\partial \ln Z_n}{\partial \alpha} = \langle \frac{\partial S}{\partial \alpha} \rangle_{n,\alpha}$. Пусть $\alpha = \alpha_1$ соответствует исходному действию, а при $\alpha = \alpha_0$ все P_n известны. Тогда можно получить относительные вероятности при $\alpha = \alpha_1$ по формуле

$$\ln \left[\frac{P_n(\alpha_1)}{P_n(\alpha_0)} \left(\frac{P_m(\alpha_0)}{P_m(\alpha_1)} \right)^{-1} \right] = \int_{\alpha_0}^{\alpha_1} \left(\langle \frac{\partial S}{\partial \alpha} \rangle_{n,\alpha} - \langle \frac{\partial S}{\partial \alpha} \rangle_{m,\alpha} \right) d\alpha. \quad (22)$$

Для этого требуется моделирование на всем интервале от α_0 до α_1 с измерением $\langle \partial S / \partial \alpha \rangle$.

Простейший способ введения параметра: $S \rightarrow \alpha S$. Условие применимости распределения (18) $\alpha IT \ll 1$ всегда выполняется при достаточно малых α , но в этом случае возникают трудности с условием применимости дискретизации времени $\sqrt{a/m\alpha} \ll R$. В пересечении этих областей применимости мы имеем $\langle S \rangle_n = \text{const} + 2\pi^2 IT n^2$, что позволяет определить I из результатов моделирования. Зная I , мы можем экстраполировать подынтегральную функцию в (22) до $\alpha = 0$, где траектории со всеми n равновероятны. С ростом α условие $\alpha IT \ll 1$ нарушается, зависимость $\langle S \rangle_n$ от n^2 отклоняется от линейной, и распределение становится негауссовым. Формулы (18) применимы при $n_0 \ll \sqrt{N}$, когда изменение действия на шаге мало.

В качестве простого примера рассмотрим двумерную модель: частица в кольце между окружностями с радиусами R_1 и R_2 без потенциала. Без ограничения общности можно положить $m=1$ и $R_2=1$. Мы выбрали $R_1=0.5$.

Моделирование проводилось по алгоритму Метрополиса. Оптимальная величина максимального сдвига на шаге в двумерном случае была определена методом [4], и оказалась равной $2.1 \sqrt{a/m}$. Малость максимального сдвига по сравнению с R_1

гарантирует невозможность перехода в другой гомотопический класс.

Проводились измерения среднего действия $\langle S \rangle$ и величины $\langle 1/r^2 \rangle$. Выбор именно такой функции от r произволен; он объясняется тем, что эта величина равна первому члену в формуле (17) для $1/I$, что позволяет оценить роль высших состояний.

Оценка статистических ошибок производилась по алгоритму [6], примененному к последовательности средних по 1 проходу. Такая оценка должна быть правильной при достаточно большой статистике. Практически эта оценка оказывается не очень устойчивой — в близких условиях она отличается в несколько раз. В тех случаях, когда алгоритм не может проследить достаточно далекодействующие корреляции, он занижает ошибку. Поэтому следует больше доверять большим величинам ошибок, чем соседним с ними меньшим.

Основной заход моделирования проводился на решетке из $N=20000$ шагов по времени по $a=0.001$ каждый. Первые 200 проходов не учитывались в целях релаксации; измерения производились в течение 2000 проходов. Рассматривались траектории с числом витков n от 0 до 40 через 2, и далее до 100 через 10. Этот заход занял около 50 часов процессорного времени на ЭВМ ЕС-1061.

Величина дрожания траектории на шаге решетки $\sqrt{a/m} \sim 0.03$ мала по сравнению с характерным размером задачи $R_1=0.5$, так что решеточное приближение применимо. Рассматриваемая решетка соответствует температуре $T=1/\beta=1/Na=0.05$. Поэтому характерная величина $l_0 \sim \sqrt{IT} \sim 0.2$ (как мы скоро убедимся, данные моделирования подтверждают естественную оценку $l \sim 1$). Значит, формулы (18) должны быть применимы даже при $\alpha=1$.

Результаты показаны на рис. 1, 2. Усы соответствуют оценке статистических ошибок по алгоритму [6], и меньшие из них, вероятно, занижены. Для того, чтобы точки с заниженными ошибками не влияли на подгонку сильнее, чем надо, в подгонке для $\langle S \rangle$ все ошибки считались одинаковыми, а в подгонке для $\langle 1/r^2 \rangle$ — зависящими от n как $1 + (n/25)^2$ (что примерно воспроизводит плавную часть зависимости). Поскольку при достаточно больших n возможны отклонения от линейной по n^2 зависимости, производилась подгонка многочленом $a + bn^2 + cn^4$. Отличие коэффициента c от 0 находится в пределах его ошибки. Изображенные на рисунках прямые представляют собой линейную часть подгоночного

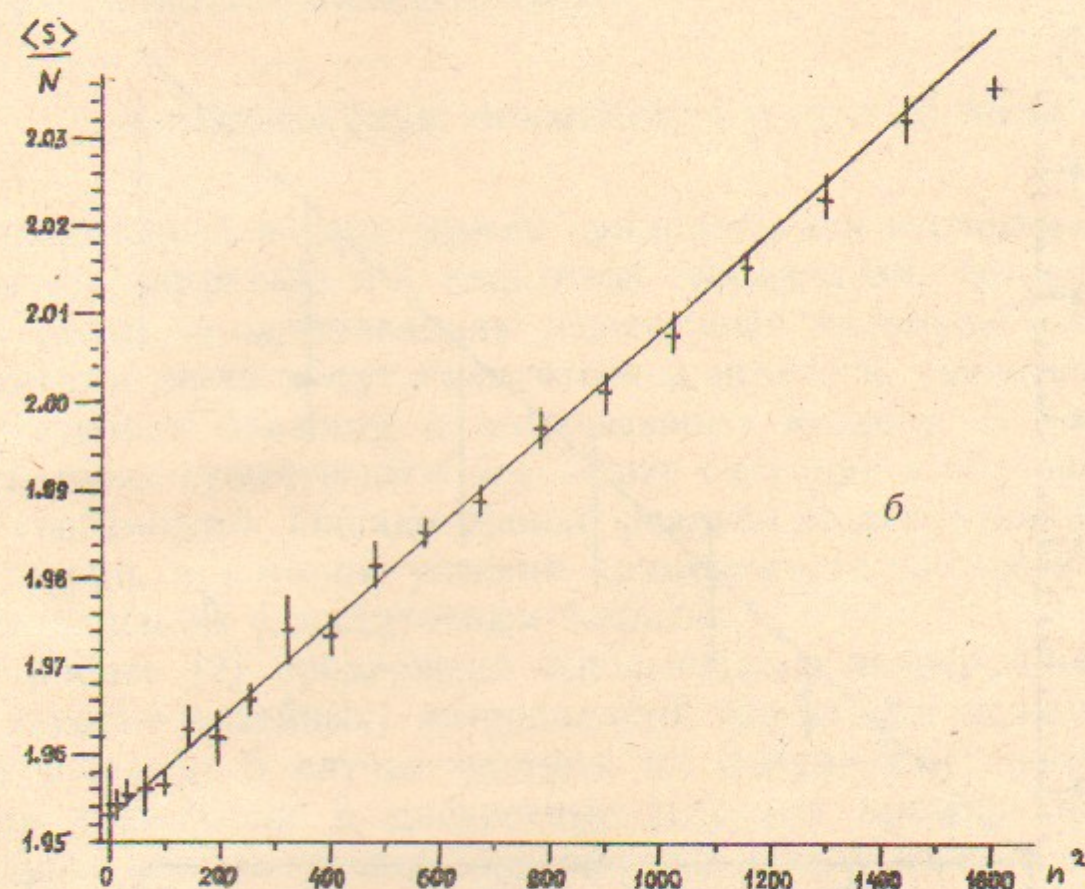
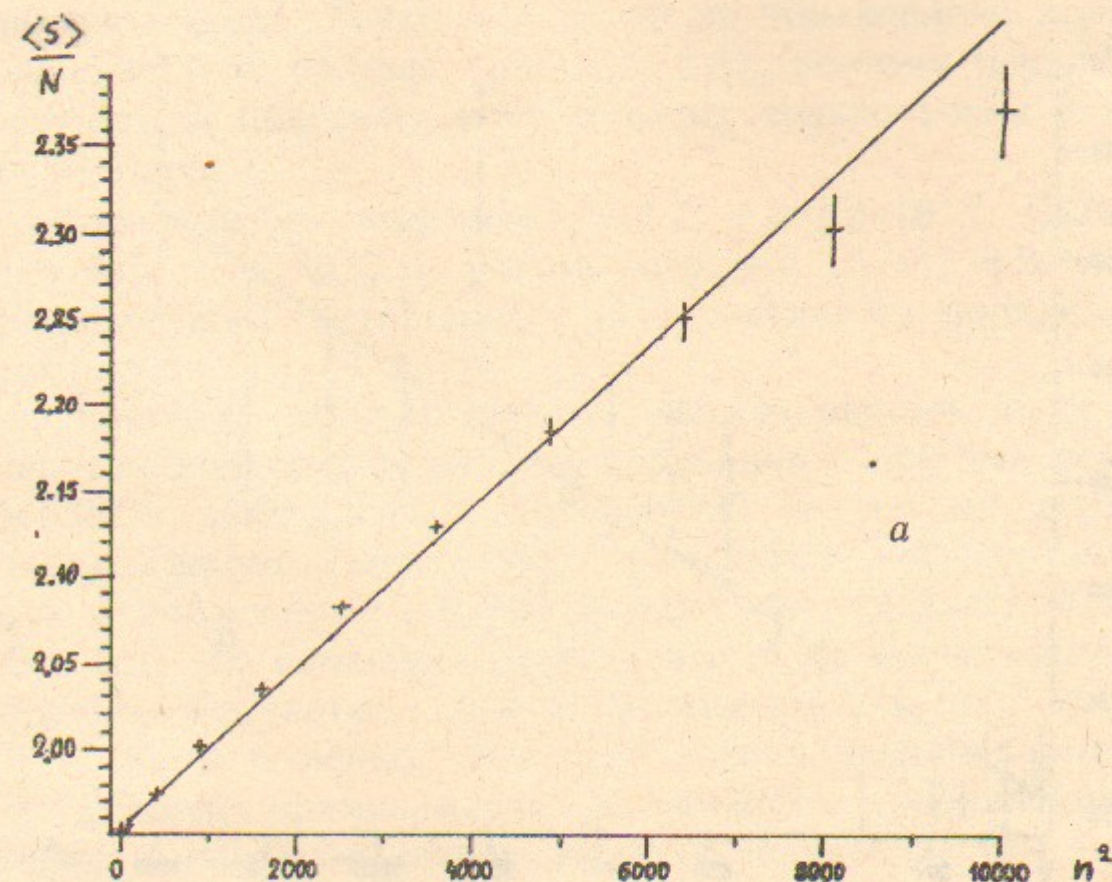


Рис. 1.

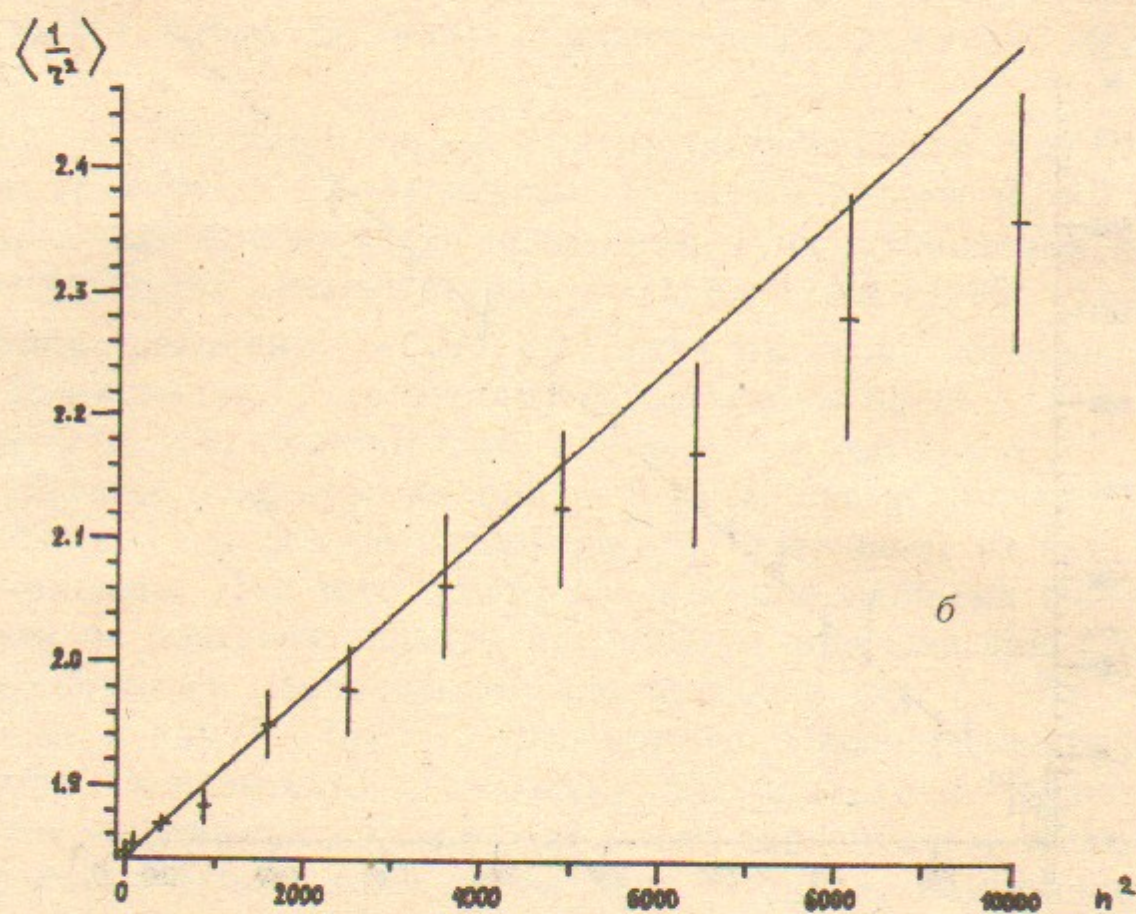
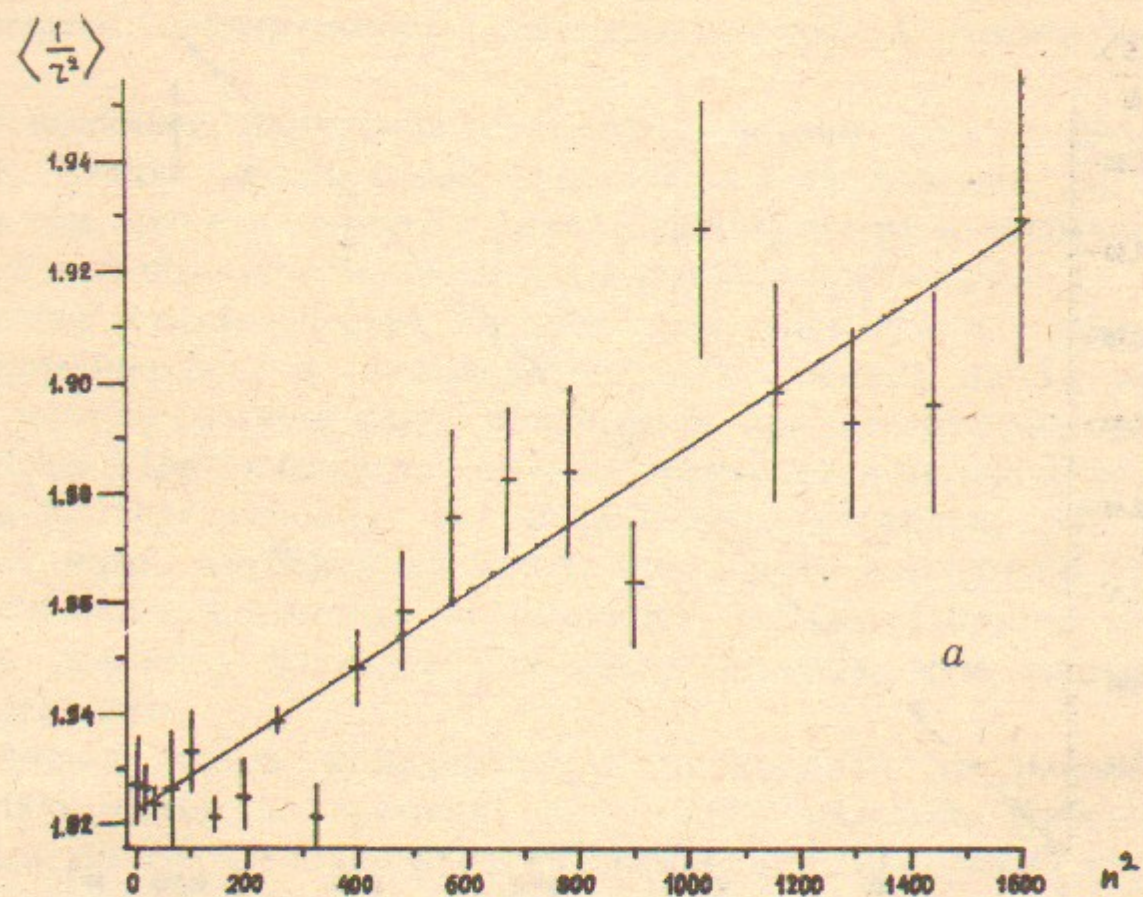


Рис. 2.

многочлена $a + bn^2$. Точки с n от 50 до 100 неплохо ложатся на продолжение этих прямых (рис. 1,б, 2,б), поэтому неудивительно, что результаты подгонок, учитывающих только точки с $n \leq 40$ и все точки, близки.

В результате мы получили $I = 1.1$, $b = 1.2 \cdot 10^{-3}$. Ошибка в I порядка 10%, в b 30%. С учетом того, что $\langle 1/r^2 \rangle \approx 2$, видно, что сумма по высшим состояниям в (17) составляет порядка 50% от первого члена.

Для проверки влияния систематических ошибок были произведены еще несколько заходов моделирования с другими решетками: 8000×0.0025 , 2000×0.01 и 8000×0.025 (с тем же количеством проходов). Первые 2 решетки соответствуют той же температуре $T = 0.05$, а последняя $T = 0.005$. Все результаты для I лежат между 1.0 и 1.1, что свидетельствует о малой величине систематических ошибок. Результаты для b составляют $2.6 \cdot 10^{-3}$, $4.0 \cdot 10^{-3}$ и $6.8 \cdot 10^{-3}$, соответственно. Они существенно увеличиваются с ростом a . Условие применимости решеточного приближения лучше выполнены в основном заходе, поэтому полученное там значение b наиболее надежно. Однако возможно, что даже оно содержит значительную систематическую ошибку.

4. ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ В ТЕОРИИ ПОЛЯ

Аналогичный подход можно применять для исследования топологических эффектов и в квантовой теории поля. Тот факт, что в современных моделированиях решеточных калибровочных теорий инстантоны легко могут появляться и исчезать, свидетельствует о недостаточной близости к непрерывному пределу. В четырехмерных моделях существенное улучшение ситуации в обозримом будущем невозможно. Однако вполне реально моделирование двумерных теорий, в котором условия применимости дискретной модели выполнялись бы с достаточным запасом.

В работе [2] предложено использование непрерывных (например, кусочно линейных) интерполяций траектории между решеточными точками. В случае частицы на окружности информацию о точках траектории в дискретные моменты времени необходимо дополнить топологической информацией о том, по которой из двух дуг проходит траектория между соседними точками. Тогда исключается всякая неоднозначность в вопросе о числе витков траектории.

Кусочно-линейная интерполяция легко обобщается на случай теории обычных (т. е. образующих линейное пространство) полей на треугольной (в n -мерном случае симплектической) решетке. В более сложных случаях (нелинейные σ -модели, калибровочные поля) вопрос о построении непрерывной интерполяции по решеточным данным более сложен, но, вероятно, разрешим.

В качестве примера рассмотрим двумерную $O(3)\sigma$ -модель на треугольной решетке. Каждой точке решетки соответствует значение поля — точка на сфере. Кроме того, необходима топологическая информация о том, который из двух сферических треугольников, образованных значениями поля в трех соседних точках решетки, соответствует полям внутри этой решеточной ячейки. По этим данным можно построить (не единственным образом) интерполяцию, обобщающую кусочно-линейную и в любом случае гарантирующую непрерывность поля на границах решеточных треугольников.

При таком подходе топологический заряд на решетке однозначно определен. Он фиксируется при задании начальной конфигурации поля, и не меняется при моделировании. Необходимо проводить моделирование для каждого топологического заряда отдельно. Для определения распределения вероятности по топологическим зарядам можно использовать методы, предложенные в настоящей работе.

Благодарности. Я глубоко признателен С.Л. Панфилю за многочисленные конструктивные обсуждения, без которых эта работа не могла бы быть выполнена. Я благодарен также Н.А. Гусевскому за обсуждение гомотопических групп, и Э.В. Шуряку за обсуждение алгоритмов моделирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Creutz M., Freedman B. Ann. Phys. 1981, v.132 p.427.
2. Shuryak E.V., Zhirov O.V. Nucl. Phys. 1984, v.B242, p.394.
3. Bunk B., Wolf U. Nucl. Phys. 1983, v.B215 [FS7] p.495.
4. Grozin A.G., Grozina N.A. Nucl. Phys. 1986, v.B275 [FS17] p.357.
5. Вонсовский С.Н., Кацнельсон М.И. Квантовая физика твердого тела. п. 4.1.4. М.:Наука, 1983.
6. Daniel G.J., Hey A.J.G., Mandula J.E. Phys. Rev. 1982, v.D30 p.2230.

А.Г. Грозин

Моделирование квантовой частицы в неодносвязной области

Ответственный за выпуск С.Г. Попов

Работа поступила 23 октября 1989 г.
Подписано в печать 13.XI. 1989 г. МН 10484
Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 1,1 печ.л., 0,9 уч.-изд.л.
Тираж 150 экз. Бесплатно. Заказ № 141

Набрано в автоматизированной системе на базе фото-
наборного автомата ФА1000 и ЭВМ «Электроника» 1
отпечатано на ротапринтере Института ядерной физики
СО АН СССР,
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.