

$SU(2)$ 格点规范场热力学 Monte-Carlo 模拟的改进 ——实现连续物理极限的一种途径*

朱正坤
(苏州大学)

张孝泽 金星南 萨本豪
(中国原子能科学研究院, 北京)

摘 要

本文首次在非对称点阵 ($\xi > 1$) 上模拟了 $SU(2)$ 纯规范场系统的热力学量, 并讨论了有限大小效应和实现连续物理极限问题. 结果表明: 利用非对称点阵易于模拟格点规范场的热力学行为, 也易于讨论趋向连续物理的各种极限. 本文还把纠偏抽样技巧用于格点规范场的 Monte-Carlo 模拟, 不但提高了计算效率, 还能更好地计算热容 C_v 的温度行为.

一、引 言

$SU(2)$ 纯格点规范场系统热力学行为的 Monte-Carlo 模拟已作过许多^[1,2,3]. 其有温点阵一般总是取成: 时间和空间方向各有 N_t 和 N_s ($N_s > N_t$) 个点, 相应的点阵间距为 a_t 和 a_s ($a_s = a_t = a$). 取 N_t^4 、 $a_s = a_t = a$ 点阵为进行热力学量归一化的真空. 系统作用量取成 Wilson 形式

$$S_G = \beta_s \xi^{-1} \sum_{\mu < \nu < 4} P_{\nu}^{\mu\nu} + \beta_t \xi \sum_{\mu < 4} P_{\nu}^{\mu\mu} \quad (1)$$

$$P_{\nu}^{\mu\nu} = 1 - \frac{1}{N_c} \text{Tr}(U_{\nu}^{\mu} U_{\nu+\mu}^{\nu} U_{\nu+\mu+\nu}^{\mu+\nu} U_{\nu}^{\nu+\mu}) \quad (2)$$

其中 $\xi = a_s/a_t$, β_s 、 β_t 分别为空间、时间方向耦合常数, N_c 为色的数目. 系统的温度表达为

$$T = \frac{1}{N_s a_s} \quad (3)$$

* 国家自然科学基金资助项目.
本文 1988 年 1 月 14 日收到.

点阵系统的能量密度 $\langle \epsilon \rangle$ 与 Boltzmann 理想胶子气体能量密度 $\epsilon_{SB} = \frac{\pi^2}{5} T^4$ 之比为^[2]

$$\langle \epsilon \rangle / \epsilon_{SB} = \frac{15}{\pi^2} N_t^3 [(\bar{P}_s - \bar{P}_t) \beta_E + 2N_c C'_s (\bar{P} - \bar{P}_s) + 2N_c C'_t (\bar{P} - \bar{P}_t)] \quad (4)$$

其中 β_E 为真空耦合常数, C'_s 和 C'_t 将在后面定义; \bar{P}_s 和 \bar{P}_t 分别为有温点阵上不含时间链和含时间链的平均方格, 其表达式为

$$\bar{P}_s = \frac{1}{3N_s^3 N_t} \left\langle \sum_{\substack{x \\ \mu < \nu < 4}} P_x^{\mu\nu} \right\rangle \quad (5a)$$

和

$$\bar{P}_t = \frac{1}{3N_s^3 N_t} \left\langle \sum_{\substack{x \\ \mu < 4}} P_x^{\mu 4} \right\rangle \quad (5b)$$

\bar{P} 为真空点阵上的平均方格, 表达式为

$$\bar{P} = \frac{1}{6N_s^3} \left\langle \sum_{\substack{x \\ \mu < \nu}} P_x^{\mu\nu} \right\rangle \quad (6)$$

格点作为一种正规化 (regularization) 的形式, 最后必须回到连续物理极限. 要在点阵上得到连续物理极限, 必须满足以下条件:

(1) 热力学极限

体系自由度总数

$$4N_s^3 N_t \rightarrow \infty \quad (7)$$

(2) 连续极限

$$a_s \rightarrow 0 \quad (8a)$$

$$a_t \rightarrow 0 \quad (8b)$$

并保持温度 T 不变.

然而实际的 Monte-Carlo 模拟, 由于计算机容量和速度的限制, 上述要求是不可能实现的. 因此研究点阵的有限大小效应以及寻找一条易于实现的近似连续物理途径是必要的.

研究热力学极限, 式 (7) 告诉我们, 显然以增加 N_t 为宜. 研究 $a_t \rightarrow 0$ 的连续极限, 从 (3) 式可知, 也必须增加 N_s 的数目. 但是从 (4) 式看到由于 ϵ / ϵ_{SB} 近于 1, N_t 愈大, $(\bar{P}_s - \bar{P}_t)$ 就愈小 (因为 (4) 式后二项对 ϵ / ϵ_{SB} 的贡献很小^[1]); 而 \bar{P}_s 和 \bar{P}_t 为小于 1 且头几位数相同, 因此两者相减时有效位数互相抵消, 很难提高统计精度^[4]. 以前这方面的工作 N_t 的取值一般为 $2 \sim 3$ ^[14, 21], 范围很小. 扩大 N_t 的选择范围也就成为研究格点规范场热力学的一个问题.

S. Das 等^[5] 利用 $\xi > 1$ 的非对称点阵做了 $SU(2)$ 纯规范场 Wilson 线的计算以此来研究有限长度效应及连续极限. 我们发现: 用 $\xi > 1$ 的点阵系统计算热力学量, 有利于扩大 N_t 的选择范围, 并易于研究有限大小效应和连续物理极限.

在第二节里将给出不对称点阵模型及热力学量的表达式. 第三节讨论纠偏抽样技巧

和热容 C_V 的计算方法。第四节将给出结果和讨论。

二、不对称点阵和热力学量

用不对称度 $\xi > 1$ 的点阵进行热力学量的模拟, 其有温点阵 $N_s^3 \times N_t$ 的取法应满足条件 $N_s a_s > N_t a_t$ ^[6], 即

$$N_s > \xi^{-1} N_t; \quad (9)$$

相应的为归一化热力学量而取的真空点阵(保持 ξ 与有温点阵相同)应满足条件^[7]

$$N_s \lesssim \xi^{-1} N_t. \quad (10)$$

系统的作用量仍为式(1), 但其中 β_s 和 β_t 可由背景场 (Background field) 方法得到^[8]

$$\beta_s(a_s, \xi) = \beta_E(a_s) + 2N_c C_s(\xi), \quad (11a)$$

$$\beta_t(a_t, \xi) = \beta_E(a_t) + 2N_c C_t(\xi); \quad (11b)$$

$C_s(\xi)$ 和 $C_t(\xi)$ 的值在稍后给出。

系统的温度为

$$T = \frac{\xi}{N_t a_t}; \quad (12)$$

而体积为

$$V = N_s^3 a_s^3, \quad (13)$$

其中 a_s 可由 $G_E^2 = 2N_c/\beta_E$ 代入重整化群方程

$$\Lambda_L a_s = (\beta_0 G_E^2)^{-\beta_1/2\beta_0^2} \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 G_E^2}\right) (1 + o(G_E^2)) \quad (14)$$

得到, 式(14)中

$$\beta_0 = \frac{11N_c}{48\pi^2}, \quad (15a)$$

$$\beta_1 = \frac{17N_c^2 - \frac{3}{2}(N_c^2 - 1)/N_c}{384\pi^4}. \quad (15b)$$

在 $\xi > 1$ 的不对称点阵上, 系统的能量密度及压强的表达式为

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle / \varepsilon_{SB} = \frac{15}{\pi^2} \cdot \frac{N_s^4}{\xi^4} & (\beta_s(\xi) \overline{\Delta P}_s - \xi^2 \beta_t(\xi) \overline{\Delta P}_t \\ & - 2\xi N_c C_s'(\xi) \overline{\Delta P}_s - 2N_c \xi^3 C_t'(\xi) \overline{\Delta P}_t), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\langle \langle \varepsilon \rangle - 3P \rangle a_s^4 = 3a_s \frac{\partial \beta_E}{\partial a_s} (\overline{\Delta P}_s + \xi^2 \overline{\Delta P}_t), \quad (17)$$

其中

$$\overline{\Delta P}_s = \overline{P}_s^T - \overline{P}_s^V, \quad (18a)$$

$$\overline{\Delta P}_t = \overline{P}_t^T - \overline{P}_t^V, \quad (18b)$$

这儿 \overline{P}_s^T 和 \overline{P}_t^T 为有温点阵 $(N_s^T)^3 \times N_t^T$ 上的量, 其表达式为

$$\overline{P}_s^T = \frac{1}{3(N_s^T)^3 N_t^T} \left\langle \sum_{\mu < \nu < \lambda} P_{\mu\nu}^{\mu\nu} \right\rangle, \quad (19a)$$

$$\bar{P}_i^T = \frac{1}{3(N_i^T)^3 N_i^T} \left\langle \sum_x P_x^{\mu 4} \right\rangle, \quad (19b)$$

而 \bar{P}_i^V 和 \bar{P}_i^T 为真空点阵 $(N_i^V)^3 \times N_i^V$ 上的量,其表达式为

$$\bar{P}_i^V = \frac{1}{3(N_i^V)^3 N_i^V} \left\langle \sum_x P_x^{\mu\nu} \right\rangle, \quad (20a)$$

$$\bar{P}_i^V = \frac{1}{3(N_i^V)^3 N_i^V} \left\langle \sum_x P_x^{\mu 4} \right\rangle. \quad (20b)$$

另外:

$$C'_i(\xi) = \frac{\partial C_i(\xi)}{\partial \xi} \quad (21a)$$

$$C'_i(\xi) = \frac{\partial C_i(\xi)}{\partial \xi}. \quad (21b)$$

热容 C_V 可由表达式:

$$C_V = \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} \quad (22)$$

求得;具体算法将在下节给出.

三、纠偏抽样技巧

格点规范场中物理量 O 的期望值 $\langle O \rangle$ 的表达式为

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\{U\}} O(\{U\}) e^{-S(\{U\})}}{\sum_{\{U\}} e^{-S(\{U\})}}, \quad (23)$$

其中 $S(\{U\})$ 为作用量(如式(1)), $\{U\}$ 为链变量组态. 用 Monte-Carlo 方法计算 $\langle O \rangle$ 的值就是以正比于 $e^{-S(\{U\})}$ 的分布进行抽样,若取平衡后的 N 个组态作统计平均,则 $\langle O \rangle$ 的 Monte-Carlo 估计为

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i. \quad (24)$$

对于另一作用量为 $S'(\{U\})$ 的有温系统,其物理量 O 的期望值 $\langle O \rangle'$ 为

$$\langle O \rangle' = \frac{\sum_{\{U\}} O(\{U\}) e^{-S'(\{U\})}}{\sum_{\{U\}} e^{-S'(\{U\})}}. \quad (25)$$

它又可以写为

$$\langle O \rangle' = \frac{\sum_{\{U\}} O(\{U\}) W e^{-S(\{U\})}}{\sum_{\{U\}} W e^{-S(\{U\})}}, \quad (26)$$

$$W = \exp(S(\{U\}) - S'(\{U\})). \quad (27)$$

所以计算 $\langle O \rangle$ 仍可以利用由 $\exp(-S(\{U\}))$ 抽样获得的组态; 于是 $\langle O \rangle$ 的 Monte-Carlo 估计为

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N W_i O_i}{\sum_{i=1}^N W_i} \quad (28)$$

以上用 $\exp(-S(\{U\}))$ 分布的抽样组态求具有 $\exp(-S'(\{U\}))$ 分布的系统的量的过程叫做纠偏抽样^[9]. 显然利用纠偏抽样技巧可以大大提高计算效率.

另外, 由于纠偏抽样各参数点的相关性好^[9], 可以用来较精确地计算 $C_V = \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T}$. 用它同时计算不同温度 T_1 和 T_2 系统的能量密度 $\langle \epsilon \rangle_1$ 和 $\langle \epsilon \rangle_2$, 所以 C_V 就可由差分

$$C_V = \frac{\langle \epsilon \rangle_2 - \langle \epsilon \rangle_1}{T_2 - T_1} \quad (29)$$

给出; 从而避免了用拟合 $\langle \epsilon \rangle - T$ 曲线来求 C_V 的值^[2].

四、结果和讨论

用背景场方法求得的 $\xi = 1$ 和 $\xi = 2$ 不对称点阵的 $C_s(\xi)$ 、 $C_l(\xi)$ 和 $C'_s(\xi)$ 、 $C'_l(\xi)$ 的数值给在表 1 中.

表 1

ξ	$C_s(\xi)$	$C_l(\xi)$	$C'_s(\xi)$	$C'_l(\xi)$
1	0	0	0.11403	-0.06759
2	0.06153	-0.02849	0.03064	-0.01313

我们在 4^4 、 $\xi = 2$ (其相应的真空为 $4^3 \times 8$ 、 $\xi = 2$) 和 $4^3 \times 2$ 、 $\xi = 1$ (相应真空为 4^4 、 $\xi = 1$) 上模拟了 $SU(2)$ 纯格点规范场系统热力学: 能量密度、热容量和压强, 结果分别给在图 1——图 3 中. 4^4 点阵做了大约 2600 迭代 (sweep), $4^3 \times 2$ 点阵做了 4300 迭代 (sweep). 从图 1, $\langle \epsilon \rangle / \epsilon_{SB}$ 的温度行为可以看出: $\xi = 1$ 点阵的过渡区比 $\xi = 2$ 点阵的过渡区要宽, 同时非禁闭相, $\xi = 1$ 的 $\langle \epsilon \rangle$ 值偏离 ϵ_{SB} 也比 $\xi = 2$ 的偏离大. 这说明 $\xi = 2$ 点阵的有限大小效应比 $\xi = 1$ 点阵的有限大小效应要小. 同时也说明 $\xi > 1$ 的点阵是一种较快的趋向连续物理极限的途径.

另外从热容量作为温度的函数曲线的图 2 可以看到, 峰值位置对应的非禁闭相变温度 $T_c / \Lambda_L = 36.5 \pm 2.0$. 图 3 给出了纯 $SU(2)$ 格点规范场系统压强的温度行为 (状态方程).

为什么图 1 中给出的 $4^3 \times 4$ 、 $\xi = 2$ 点阵, 尽管 $N_t = 4$ 较大而 $\langle \epsilon \rangle / \epsilon_{SB}$ 的精确度又较好呢? 因为从 (16) 式可知, 不对称点阵 $\langle \epsilon \rangle / \epsilon_{SB}$ 的值由 ξ 、 N_t 和 $(\beta_t \overline{\Delta P_t} - \beta_t \xi^2 \overline{\Delta P_t})$ 决定. 当点阵具有 $\xi > 1$ 的可调量 ξ 时, 只要保证 N_t / ξ 较小, $(\beta_t \overline{\Delta P_t} - \xi^2 \beta_t \overline{\Delta P_t})$ 就可以稍大; 这样只要 ξ 较大, N_t 也就可以取较大的值, 又可保证 Monte-Carlo 模拟有较高的

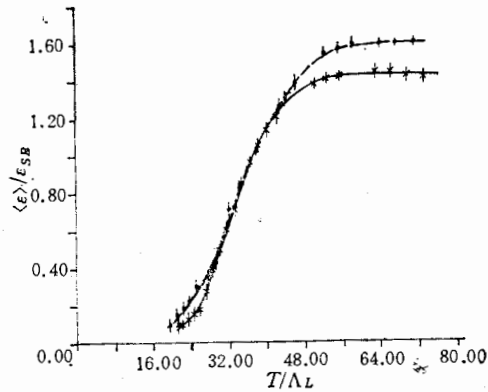


图1 能量密度 $\langle \epsilon \rangle$ 与 Boltzmann 理想气体能量密度之比 $\langle \epsilon \rangle / \epsilon_{SB}$ 作为温度 T / Λ_L 的函数关系。

×号代表 $4^3 \times 4, \xi = 2$ 点阵, ·号代表 $4^3 \times 2, \xi = 1$ 点阵. ($\Lambda_L \approx 5.2 \text{ MeV}$)

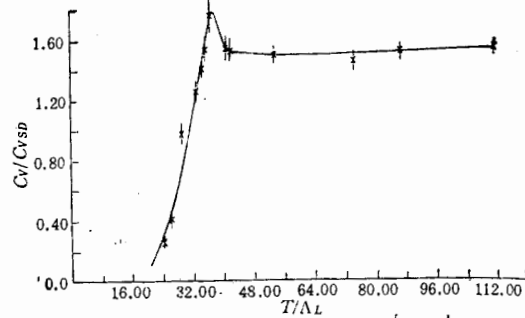


图2 $4^3 \times 4, \xi = 2$ 点阵的热容 C_V 与 Boltzmann 理想气体热容 $C_{VSB} = \frac{4}{5} \pi^2 T^3$ 之比 C_V / C_{VSB}

与温度 T / Λ_L 的函数关系 ($\Lambda_L \approx 5.2 \text{ MeV}$)

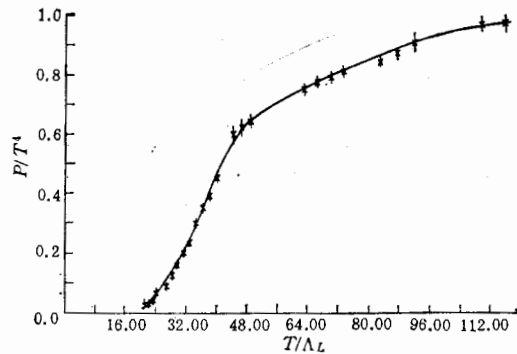


图3 $4^3 \times 4, \xi = 2$ 点阵的压强 P 与温度之比 P / T^4 与温度 T / Λ_L 之间的函数关系 ($\Lambda_L \approx 5.2 \text{ MeV}$)

统计精度。

总之, $\xi > 1$ 不对称点阵的应用,可以在计算机容许的范围内更好地研究点阵趋向连续物理的各种极限。纠偏抽样技巧的应用又提高了计算效率;特别是由于纠偏抽样各温度的相关性好,用它来算热容 C_V 更有其独到之处。

需要指出,由于计算机的限制,我们研究的点阵还嫌不够大。不过以上结论也适用于研究 $SU(N)$ 规范体系以及包括费米子系统的热力学行为。

最后,作者对裴鹿成教授有益的讨论表示感谢。也感谢原子能院 Cyber-825 和 VAX-780 机房的同志们,我们的大部分计算是在那儿完成的。

参 考 文 献

- [1] J. Engels, F. Karsch, H. Satz, I. Montvay, *Phys. Lett.*, 101B (1981), 89.
- [2] J. Engels, F. Karsch and H. Satz, *Nucl. Phys.*, B205(1982), 545.
- [3] J. Engels, et al., *Nucl. Phys.*, B280(1987), 577.
- [4] 萨本豪、朱正坤、张孝泽、金星南,高能物理与核物理,12(1988),601.

- [5] S. Das and J. Kogut, *Nucl. Phys.*, B265(1986), 303.
[6] S. Das and J. Kogut, *Phys. Rev.*, D31(1985), 2704.
[7] J. Engels, F. Karsch and H. Satz, *Nucl. Phys.*, B205(1982), 239.
[8] F. Karsch, *Nucl. Phys.*, B205(1982), 285.
[9] 裴鹿成、张孝泽、蒙特卡罗方法在粒子输运问题中的应用, 科学出版社, 1986.

IMPROVEMENT OF THERMODYNAMICAL MONTE CARLO SIMULATION IN $SU(2)$ PURE LATTICE GAUGE FIELD THEORY —AN APPROACH TO CONTINUUM PHYSICS LIMIT

ZHU ZHENGKUN

(Suzhou University)

ZHANG XIAOZE JIN XINGNAN SA BENHAO

(Institute of Atomic Energy, Beijing)

ABSTRACT

The thermodynamical quantities of $SU(2)$ pure lattice gauge field have been simulated first time on the asymmetric lattice ($\xi > 1$). The finite size effect and continuum physics limits have also been studied. The results show that the use of asymmetric lattice is of benefit to calculate the thermodynamical quantities and study the behavior of continuum physics limits. In addition, it is explained that the efficiency of the whole Monte Carlo simulation and the calculation of heat capacity will be improved quite a lot by using bias sampling technique.