第 13 卷 第 9 期 高能物理与核物理 Vol. 13, No. 9
1989 年 9 月 HIGH ENERGY PHYSICS AND NUCLEAR PHYSICS Sept., 1989

关于在格点上的累积展开方法中试探作用量的选取问题

吴济民
(中国科学院高能物理研究所，北京)

摘　要

本文以格点 ϕ^4 理论为例，具体地讨论了在格点的变分-累积展开方法中选取试探作用量 S_0 时，至少应遵从的一个原则.

在格点理论研究中[1]，变分-累积展开法提供了一种有效的、近似的解析计算途径. 按照这种方法，对于一个相互作用为 S 的格点体系，要引入试探作用量 S_0，它由体系的场变量 ϕ_x 组成，并含有变分参数 J，但不含有 ϕ_x 组成的交叉项(例如 $\phi_x\phi_{x+\mu}$). 引入 S_0 的目的是希望一旦当用合理的条件确定了变分参数之后，就可以在相对简单的 S_0 作用体系中求解问题，使问题可解. 当把理论作累积展开时，人们总是只展开到为有限项. 在有限级近似下，体系的配分函数、自由能都是理论中的裸参数和引入的变分参数的函数. 我们再加入这样的物理条件: 即要求体系处在最低自由能状态，从而确定了变分参数，也就确定了 S_0 体系的作用量，进而在 S_0 体系中求解各物理量.

形式上说，选取什么样的试探作用量 S_0 对展开结果似乎不产生什么影响，实际上却不然. 我们的研究表明，选取 S_0 必须考虑到理论作用量 S 的构成. 本文将通过实例来说明正确地选取试探作用量 S_0 应遵从的一个原则.

设我们考虑格点 ϕ^4 理论[2]. 它的作用量是:

$$S = -\sum_{x\mu}\phi_x\phi_{x+\mu} + m^2\sum_x \phi_x^2 + \lambda\sum_x \phi_x^4 \tag{1}$$

这里，ϕ_x 是定义在格点 x 上的单分量的标量场. 对于这样的作用量，至少有下列几种作用量形式可选择为试探作用量:

$$(1)\ S_0 = \sum_x J_{1x}\phi_x,\quad (2)\ S_0 = \sum_x J_{2x}\phi_x^2,\quad (3)\ S_0 = \sum_x J_{4x}\phi_x^4,$$

$$(4)\ S_0 = \sum_x J_{1x}\phi_x + \sum_x J_{2x}\phi_x^2,\quad (5)\ S_0 = \sum_x J_{1x}\phi_x + \sum_x J_{4x}\phi_x^4,$$

$$(6)\ S_0 = \sum_x J_{2x}\phi_x^2 + \sum_x J_{4x}\phi_x^4,$$

本文 1988 年 8 月 30 日收到.

$$(7)\ S_0 = \sum_x J_{1x}\phi_x + \sum_x J_{2x}\phi_x^2 + \sum_x J_{4x}\phi_x^4. \tag{2}$$

其中 J_1、J_2、J_4 等为各自相应的变分参数.

在引入了试探作用量后,体系的配分函数可以表示成下列展开,

$$Z = Z_0 e^{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}K_n} \tag{3}$$

其中 Z_0 为在 S_0 体系中的"配分函数",

$$Z_0 = \int [d\phi] e^{-S_0(\phi, J)} \tag{4}$$

K_n 为 n 级的累积展开量,它们是:

$$K_1 = \langle S_0 - S\rangle_0$$
$$K_2 = \langle (S_0 - S)^2\rangle_0 - \langle S_0 - S\rangle_0^2$$
$$K_3 = \langle (S_0 - S)^3\rangle_0 - 3\langle S_0 - S\rangle_0\langle (S_0 - S)^2\rangle_0 + 2\langle S_0 - S\rangle_0^3$$
$$K_4 = \cdots\cdots$$

以及

$$\langle\cdots\rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0}\int [d\phi] e^{-S_0(\phi, J)}(\cdots) \tag{5}$$

自由能为

$$F = -\frac{1}{N}\ln Z,\ N \text{ 为点阵数目} \tag{6}$$

显然,第一种形式不可被选用,因为这时 Z_0 没有定义,理论展开也失去意义.

第二、第三、第六种形式也不可选用,因为在这种选取下,将不发生对称性自发破缺的相变,描写相变的序参数是真空期望值 $\langle\phi\rangle$,按累积展开方法,$\langle\phi\rangle$ 可以写成:

$$\langle\phi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}L_m$$

其中

$$L_1 = \langle\phi\rangle_0$$
$$L_2 = 2\langle\phi(S_0 - S)\rangle_0 - 2\langle\phi\rangle_0\langle S_0 - S\rangle_0$$
$$L_3 = 3\langle\phi(S_0 - S)^2\rangle_0 - 6\langle\phi(S_0 - S)\rangle_0\langle S_0 - S\rangle_0 + 6\langle\phi\rangle_0\langle S_0 - S\rangle_0^2 - 3\langle\phi\rangle_0\langle (S_0 - S)^2\rangle_0$$
$$L_4 = \cdots\cdots \tag{7}$$

这里,各级平均量只含有 ϕ 的奇数次幂乘积. 如果选用第二、第三、第六种作用量为试探作用量 S_0,它们都只含有 ϕ 的偶数次幂,故只能有 $\langle\phi\rangle = 0$. 例如有

$$L_1 = \langle\phi\rangle_0 \frac{\int [d\phi] e^{-\sum_x J_{1x}\phi_x^2}\phi}{\int [d\phi] e^{-\sum_x J_{1x}\phi_x^2}} \tag{8}$$

根据已有的数值计算和解析研究的结果,我们知道格点 ϕ^4 理存在对称性自发破缺的相变,所以这种选取不可取,由此可见,在我们探索未知的时候,由于我们不知道选择 S_0 的

原则，就再可能选用不合适的 S_0，导致错误的结果，这里选用的第二、第三、第六种作用量形式就是一例，因此认识选择原则是十分重要的，

再考虑选用第四、第五、第七种形式的试探作用量，按照累积展开方法，利用(3)—(6)式，我们先逐级计算体系的自由能，以第五种形式的试探作用量为例，有：

$$\begin{aligned} K_1 &= \langle S_0 - S\rangle_0 = Nd\langle\phi\rangle_0^2 + NJ_1\langle\phi\rangle_0 - Nm^2\langle\phi^2\rangle_0 + (J_4-\lambda)\langle\phi^4\rangle_0 \\ K_2 &= \langle(S_0-S)^2\rangle_0 - \langle S_0-S\rangle_0^2 = N\{d[\langle\phi^2\rangle_0^2 - \langle\phi\rangle_0^4] \\ &\quad + 2d(d-1)[\langle\phi^2\rangle_0\langle\phi\rangle_0^2 - \langle\phi\rangle_0^4] + 4J_1d[\langle\phi^2\rangle_0\langle\phi\rangle_0 - \langle\phi\rangle_0^3] \\ &\quad - 4m^2d[\langle\phi^3\rangle_0\langle\phi\rangle_0 - \langle\phi^2\rangle_0\langle\phi\rangle_0^2] + 4(J_4-\lambda)d[\langle\phi^5\rangle_0\langle\phi\rangle_0 \\ &\quad - \langle\phi\rangle_0^2\langle\phi^4\rangle_0] + J_1^2[\langle\phi^2\rangle_0 - \langle\phi\rangle_0^2] - 2J_1m^2[\langle\phi^3\rangle_0 - \langle\phi\rangle_0\langle\phi^2\rangle_0] \\ &\quad + 2J_1(J_4-\lambda)[\langle\phi^5\rangle_0 - \langle\phi\rangle_0\langle\phi^4\rangle_0] + m^4[\langle\phi^4\rangle_0 - \langle\phi^2\rangle_0^2] \\ &\quad - 2m^2(J_4-\lambda)[\langle\phi^6\rangle_0 - \langle\phi^2\rangle_0\langle\phi^4\rangle_0] \\ &\quad + (J_4-\lambda)^2[\langle\phi^8\rangle_0 - \langle\phi^4\rangle_0^2]\} \\ K_3 &= \cdots \end{aligned} \tag{9}$$

其中，平均值 $\langle\phi^k\rangle_0$ 是

$$\langle\phi^k\rangle_0 = \frac{I(J_1,J_4,k)}{I(J_1,J_4,0)}$$

$$\begin{aligned} I(J_1,J_4,k) &\equiv \int d\phi e^{-J_1\phi - J_4\phi^4}\phi^k \\ &= \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-J_1)^n\frac{\Gamma\left(\frac{1}{4}(n+k+1)\right)}{J_4^{\frac{1}{4}(n+k+1)}} \\ &\qquad n+k=\text{偶} \\ &\qquad Z_0 = I(J_1,J_4,0) \end{aligned} \tag{10}$$

我们采用数值积分和解析求和两种方法计算了平均值 $\langle\phi^k\rangle_0$，以相互检验(见(10)式)，把所得 $\langle\phi^k\rangle_0$ 代入(9)、(3)—(6)式，就可以得到体系的自由能、我们计算到展开 Z_0, K_1, K_2, K_3 级的贡献，再利用自由能最小值条件确定变分参数(这是两变量的极值问题，在本文计算中，我们可以利用计算机直接找到自由能的最小值，从而确定变分参数)，这些变分参数值当然是理论中参数 m^2, λ 的函数。

须要指出，在第四、第五、第七种 S_0 形式下，理论的配分函数、自由能对 J_1 是对称的，以第五种形式 S_0 为例，这一性质可从下式看出，

$$\begin{aligned} Z &= \int[d\phi]e^{-S_0}e^{S_0-S} \\ &= \int[d\phi]e^{-\sum_x J_{1x}\phi_x - \sum_x J_{4x}\phi_x^4}\cdot e^{\sum_x J_{1x}\phi + \sum_x J_{4x}\phi_x^4 - (-\sum_{x\mu}\phi_x\phi_{x+\mu} + m^2\sum_x\phi_x^2 + \lambda\sum_x\phi_x^4)} \end{aligned} \tag{11}$$

(按累积展开法，展开到任意级，这一性质也成立，可见(3)—(5)，(9)式)，所以，虽然在 S_0 中包括 ϕ 的线性项，当对理论作 $\phi\to-\phi$ 变换时，由于理论对 J_1 的这种对称性，S_0 仍然是不变的，作用量 S 也是不变的。于是当理论中出现了对称性破缺现象时 ($\langle\phi\rangle \neq 0$，见后面)，这就不是由于引入了试探作用量 S_0 带来的效应，而是理论自身性质的表现，当然，由于 J_1 对称性，计算结果给出等价的解(见后面)。

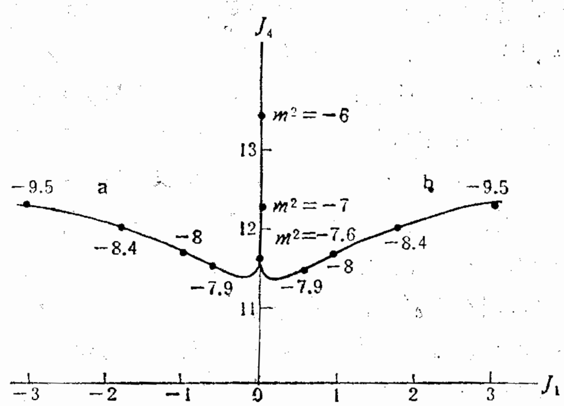

图 1　当选取第五种形式 S_0 时,由自由能最小值条件确定的变分参数 J_1J_4 随 m^2 的变化曲线,m^2 值附于曲线相应的点上(取 $\lambda=25$ 为例)

图1给出当选取第五种形式 S_0 时,由自由能最小值条件确定的变分参数 J_1、J_4 随 m^2 的变化曲线.(取 $\lambda=25$ 为例)当 m^2 变小时,在 J_1-J_4 平面上的两支沿 $J_1=0$ 轴向下同步发展,大约在 $m^2=-7.6$ 处,它们分开成对称的两支曲线,在两个分支曲线上对称的两点,对应着数值相等的自由能,所以两个分支曲线是等价的.

现在我们按(7)式,计算序参数 $\langle\phi\rangle$. 本文计算到包括 L_1,L_2,L_3 级贡献,

$$\langle\phi\rangle=L_1+\frac{1}{2}L_2+\frac{1}{3!}L_3+\cdots \tag{12}$$

$$L_1=\langle\phi\rangle_0$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}L_2=&\ \langle\phi(S_0-S)\rangle_0-\langle\phi\rangle_0\langle S_0-S\rangle_0\\ =&\ N\{2d[\langle\phi^2\rangle_0\langle\phi\rangle_0-\langle\phi\rangle_0^3]+J_1[\langle\phi^2\rangle_0-\langle\phi\rangle_0^2]\\ &-m^2[\langle\phi^3\rangle_0-\langle\phi\rangle_0\langle\phi^2\rangle_0]\\ &+(J_4-\lambda)[\langle\phi^5\rangle_0-\langle\phi\rangle_0\langle\phi^4\rangle_0]\}\end{aligned}$$

$$L_3=\cdots$$

其中
$$\langle\phi(\cdots)\rangle_0=\frac{1}{N}\sum_y\langle\phi_y(\cdots)\rangle_0.$$

把前面确定的变分参数值代入后,即得到有关结果,图2给出与极值曲线 a、b 对应的(见图1)$\langle\phi\rangle$ 值曲线 a、b. 这两条 $\langle\phi\rangle$ 值曲线是正负对称的,其物理含意相同,两者都给出二级相变,表现了理论中 $\phi\to-\phi$ 对称性自发破缺现象(在下面的讨论中,我们将只画出两条等价曲线中的一条).

图3、4、5分别给出了当 $\lambda=25$ 时,在第四、第五、第七种 S_0 情况下的$\langle\phi\rangle$值,(MC数据来自[3])计算结果表明,采用第四种形式的 S_0 所给出的结果十分不符合 MC 数据,这里出现了一级相变,而不是二级相变,相变点在 $m_{0c}^2=-9.34$,也偏离二级相变点的正确位置,采用第五种形式的 S_0 后,结果有所改进,出现了二级相变,(可见在试探作用量中 ϕ^4 项的重要性)但结果与 MC 数据尚有一些偏离,采用第七种形式 S_0 给出了比较满意的结果. 目前,只有它才是 S_0 的正确选择.

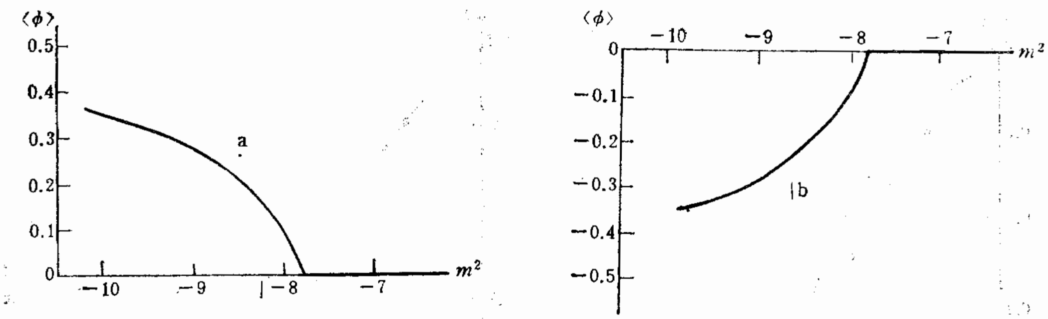

图 2　当 $\lambda=25$ 时，在第五种形式 S_0 下，$\langle\phi\rangle$ 值随 m^2 的行为．a、b 两曲线分别对应于图 1 中的 a、b 两曲线

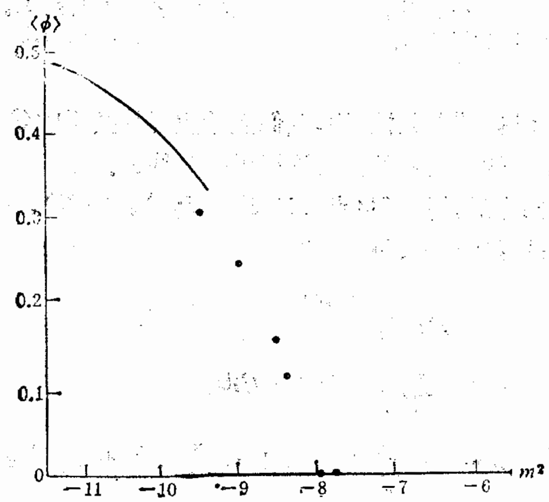

图 3　选取第四种 S_0，$\langle\phi\rangle$ 的行为（取 $\lambda=2.5$，MC 数据来自[3]）

目前我们还不能对展开的收敛性作一般性的证明，但从上述讨论已经看到：(1)在有一类 S_0 选取下，即使计算到整个展开式，也不可能收敛到合理的物理结果，例如第二、三、六种形式 S_0；(2) 在有一类 S_0 选取下，至少在目前有限级展开下，也得不到合理的物理结果，例如第四、第五种形式 S_0；(3) 正确的选择 S_0 必须紧密地考虑到理论作用量的结构，在这里，就只能是第七种形式．

我们看到，在理论作用量 S 中含有 ϕ_x 的线性项、平方项、四次方项；只有在第七种形式中才都含有这几种作用结构，我们引入试探作用量 S_0，希望能在 S_0 体系中解决问题，因此，我们要求 S_0 尽可能地"接近" S，尽可能多地包含有作用量 S 的信息．当我们采用了自由能极值条件确定了 S_0 中的变分参数后，从一定意义上说，S_0 成了作用量 S 的"等效"作用量，我们要求 S_0 中含有尽可能多的 S 的信息，那么致少要求在 S_0 中含有 S 的各种结构，如果在 S 中出现各种场量 ϕ_x、$\phi_x\cdots$ 等的线性项、平方、四次方项等，则在 S_0 中也要求出现相应的项结构．（当然不应出现诸如 $\phi_x\phi_{x+\mu}$ 交叉项，否则在 S_0 体系中也难求解）第七种形式满足这个要求，成为这里唯一合理的选择．

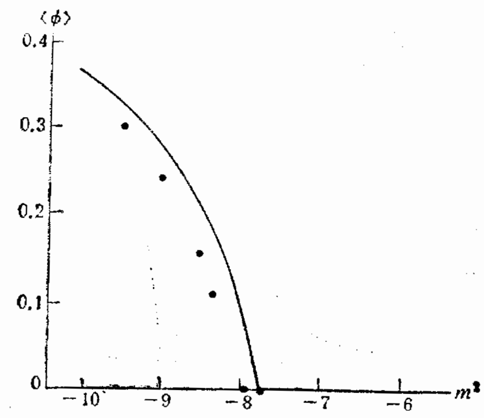

图 4 选取第五种 S_0，⟨φ⟩ 的行为（取 $\lambda=25$，MC 数据来自[3]）

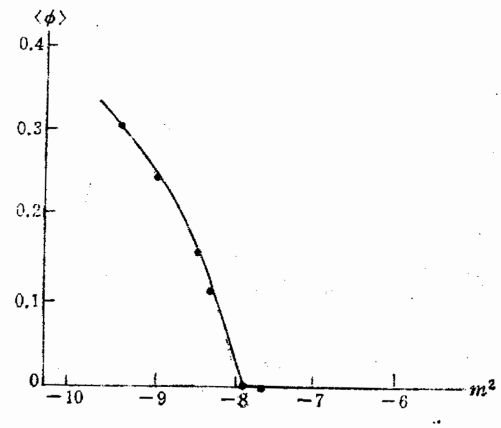

图 5 选取第七种 S_0，⟨φ⟩ 的行为（取 $\lambda=25$，MC 数据来自[3]）

当然，这里的讨论还属于“现象性”的，我们还希望寻找关于收敛性的一般性证明，寻找收敛的判据等等。本文的讨论可为此讨论提供一些线索。

按照上述观点，我们先后计算了格点 $SU(2)$，$U(1)$，$Z(N)$，ϕ^4，Z_2-Z_2 定模 Higgs 理论，都正确地选择了试探作用量，例如[4-6]：

$$SU(2) \qquad S=\frac{\beta}{2N}\sum_p \mathrm{Tr}(U_p+U_p^\dagger-2) \qquad U_p=\prod U_l$$

$$S_0=\sum_l \mathrm{Tr}(J_lU_l^\dagger+J_l^\dagger U_l) \tag{13}$$

$$\phi^{4[6]} \qquad S=-\sum_{x\mu}\phi_x\phi_{x+\mu}+m^2\sum_x\phi_x^2+\lambda\sum_x\phi_x^4$$

$$S_0=\sum_x J_{1x}\phi_x+\sum_x J_{2x}\phi_x^2+\lambda\sum_x\phi_x^4 \tag{14}$$

Z_2 规范场 $-Z_2$ 定模 Higgs 理论[7]

$$S=\beta\sum_p(U_p+U_p^\dagger)+\beta_h\sum_{ij}\phi_iU_{ij}\phi_j$$

$$S_0=\sum_l J_{1l}U_l+\sum_x J_{2x}\phi_x \tag{15}$$

在 $SU(N)$ 规范理论中，链变量 U_l 线性地出现在作用量中，U_l 本身又是负的，所以线性组合 $S_0=\sum_l \mathrm{Tr}(J_lU_l^\dagger+J_l^\dagger U_l)$ 是最合理的选择，如果把 U_p 作为独立变量，那么选择

$$S_0=\sum_p \mathrm{Tr}(J_p^\dagger U_p+J_pU_p^\dagger)$$

也是十分合理的。在格点 ϕ^4 理论中，选取第七种 S_0 形式后，计算发现 J_4 变分参数十分接近 λ 值，所以我们选取(14)式 S_0 作为格点 ϕ^4 理论的很好的试探作用量。 在所有这些计算中，所得结果都与有关的 MC 结果十分符合，从另一个侧面也证实了本文所阐明的选取试探作用量 S_0 的这个原则的合理性。

参　考　文　献

[1] K . G. Wilson, *Phys. Rev.* **D10** (1974), 2445.
[2] 可见 K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.*,**55** (1983),583. 以及其所引文献.
[3] K. Huang, E. Manousakis and J. Polonyi, *Phys. Rev.*, **D35**(1987), 3187.
[4] 吴济民、赵佩英,高能物理与核物理, **10**(1986),297.
[5] 吴济民、赵佩英, BIHEP-TH-88-30.
[6] C. M. Wu, Z. K. Zhu, P. Y. Zhao, Y. S. Song, S. J. Dong, H. P. Ying, S. S. Xue, BIHEP-TH-88-29.
[7] 吴济民、杨金民、李文雄　定模 Z_2-Higgs 模型(准备中).

ON THE CHOICE OF THE TRIAL ACTION IN VARIATIONAL-CUMULANT EXPANSION APPROACH ON LATTICE

WU JIMIN

(Institute of High Energy Physics, Academia Sinica, Beijing)

ABSTRACT

We take lattice ϕ^4 theory as an example to illustrate one of the principles for the choice of the trial action in variational-cumulant expansion approach on lattice.