

УДК 51-72, 539.182, 538.958

СТОХАСТИЧЕСКОЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНОЕ P -ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОМЕРНОГО БОЗЕ-ГАЗА С ДЕЛЬТА-ОТТАЛКИВАНИЕМ

Е. А. Поляков¹, П. Н. Воронцов-Вельяминов¹, А. П. Любарцев²

Последовательно излагается метод стохастического положительного P -представления для моделирования термодинамических и динамических свойств квантовых систем многих частиц со взаимодействием. Производится тестирование возможностей метода путем вычисления пространственных корреляционных функций одномерного бозе-газа с дельта-отталкиванием между частицами, как в состоянии термодинамического равновесия при конечной температуре, так и при динамической эволюции из заданного начального состояния. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 08-02-00041) и Шведской Королевской академии наук.

Ключевые слова: квантовая статистика, интегралы по траекториям, матрица плотности, сеточные методы.

1. Введение. Одной из самых сложных и важных проблем теоретической физики является задача расчета динамики квантовой системы многих взаимодействующих частиц. Решение данной задачи практически всегда является неизбежным этапом при сравнении квантовой теории с экспериментом. Тем не менее для сколько-нибудь сложной системы, обладающей сильно выраженным квантовым характером и/или значительными межчастичными корреляциями, вполне удовлетворительного решения данной задачи в настоящий момент не существует. Действительно, все прикладные аналитические методы в конечном итоге сводятся к некоторому варианту теории самосогласованного поля, эффективно работающей в случае не сильно выраженных корреляций [1]. При помощи численных методов, основанных на прямом решении уравнения Шредингера (всевозможные разновидности сеточных методов), на данный момент возможно рассмотреть максимум задачу двух квантовых взаимодействующих частиц в трехмерном пространстве (т.е. шестимерное конфигурационное пространство) [2]. Другие применяемые на практике численные методы либо сводят исходную квантово-динамическую задачу к некоторой эффективной классической динамике, что приемлемо лишь для почти квазиклассических систем, либо сводят данную задачу к некоторой квантовой системе без взаимодействия с некоторым приближенным способом учета корреляций между частицами [3]. Единственное исключение — это расчеты равновесных свойств систем квантовых бозе- и бозе-частиц (т.е. квантовых частиц, рассматриваемых без учета их тождественности), содержащих до нескольких сотен частиц, со взаимодействием, где различные методы Монте-Карло позволяют получать строгие (с точностью до статистической погрешности) результаты. Для ферми-систем в состоянии, близком к вырождению, даже для вычисления равновесных свойств необходимо прибегать к существенным приближениям [4].

В связи с вышеописанной проблемой наше внимание привлек метод стохастического положительного P -представления (далее — $P^{(+)}$ -представление) [5–8]. Данный метод, основанный на фундаментальных соотношениях без привлечения каких-либо приближений, позволяет строго сформулировать систему стохастических уравнений для квантовой динамики и термодинамики системы многих частиц со взаимодействием, которые могут быть решены на компьютере методами Монте-Карло. При этом число уравнений (независимых переменных) в данном методе зависит линейно от числа узлов сетки в одночастичном координатном пространстве. Более того, он позволяет единообразно проводить моделирование во мнимом времени (т.е. получать состояние теплового равновесия при заданной температуре и химическом потенциале в большом ансамбле) и квантовую динамику (т.е. эволюцию состояния во времени).

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, ул. Ульяновская, 1, 198504, Ст. Петергоф, г. Санкт-Петербург; Е. А. Поляков, аспирант, e-mail: E.A.Polyakov@gmail.com; П. Н. Воронцов-Вельяминов, профессор, e-mail: voron.wgroup@pobox.spbu.ru

² Division of Physical Chemistry, Arrhenius Laboratory, Stockholm University, S-10691, Stockholm, Sweden; professor, e-mail: sasha@phycs.su.se

Можно совмещать эти два этапа моделирования в одном процессе: приготовление начального равновесного состояния с последующей динамикой. При этом метод позволяет вычислять любые наблюдаемые и их пространственные и временные корреляционные функции.

В настоящей работе мы тестируем данный метод для различных режимов системы, в последнее время вновь ставшей предметом многих исследований, — одномерного бозе-газа с дельта-отталкиванием. Мы сравниваем (там, где это возможно) результаты для энергии, плотности, локальных и нелокальных корреляционных функций с соответствующими аналитическими данными.

Действительно, в течение длительного времени однородный одномерный бозе-газ был не более чем моделью, представляющей академический интерес для математической физики, поскольку эта модель допускает аналитическое рассмотрение при помощи анзаца Бете [9]. Однако сравнительно недавний успех в улавливании и охлаждении щелочных бозе-атомов в сильно анизотропных магнито-оптических ловушках, в которых реализуется одномерная геометрия [10–12] (когда квантовое движение в поперечных направлениях ограничено нуль-колебаниями), возродил теоретический интерес к одномерной модели. В случае сильного взаимодействия в таких системах наблюдаются интересные физические эффекты (например, переход Хаббарда–Мотта в оптической решетке) [13].

Существуют различные теоретические методы исследования бозе-газа со взаимодействием частиц при конечной температуре. Так, в случае разреженного газа, $na^3 \ll 1$ (где n — концентрация газа, a — длина рассеяния [14]), существуют различные методы эффективной теории поля для большого канонического ансамбля [15]; в случае сильного взаимодействия применяются вариационные схемы с использованием анзаца Гудвиллера [16]; квантовые методы Монте-Карло, такие как диффузионный метод Монте-Карло [17] (DQMC) или метод Монте-Карло для интегралов по траекториям [18] (PIMC), применяются для расчета из первых принципов корреляционных функций и критической температуры начала конденсации T_c для нескольких сотен частиц в каноническом ансамбле. При этом в диффузионном методе Монте-Карло для определения T_c используется критерий макроскопической заселенности одной из собственных функций одночастичной матрицы плотности $\langle \hat{\Psi}(r') \hat{\Psi}(r) \rangle$ [19], которую нетрудно вычислить в процессе моделирования. С использованием SSE-алгоритмов Монте-Карло [20] диаграмного метода Монте-Карло и, в частности, “метода червя”, ряд авторов детально исследуют многие свойства бозе-газов при низких температурах [21]. По-видимому будучи предпочтительным для исследования равновесных свойств, SSE-метод позволяет оценивать динамические корреляционные функции квантовой системы лишь косвенно, с помощью преобразования Лапласа мацубаровской корреляционной функции, что на практике не эффективно. В этом контексте метод стохастического P -представления выгодно отличается возможностью непосредственного вычисления динамических корреляционных функций, в том числе и при конечной температуре.

Исходно нашей задачей было повторение результатов, изложенных в работах [5–8, 22, 23]. Однако результаты некоторых наших вычислений получились отличными от изложенных в данных работах. Кроме того, со времени их опубликования стали доступны новые аналитические результаты, что позволило провести более полное тестирование метода. Все это привело нас к необходимости опубликования данной работы.

Во втором разделе настоящей работы излагается идея обобщенного фазового пространства, в котором квантовая динамика представляется в виде некоторого стохастического процесса, что является основой метода $P^{(+)}$ -представления. В третьем разделе излагается физическая модель, для которой будет тестироваться данный метод, и ее характерные параметры. В четвертом и пятом разделах поэтапно на конкретных моделях строится реализация метода для рассматриваемой модели, с иллюстрирующими вычислениями. В шестом и седьмом разделах приводятся результаты вычисления пространственных корреляционных функций в состоянии равновесия в двух различных режимах бозе-газа и в зависимости от времени при динамической эволюции из начального когерентного состояния.

2. Идея метода [5]. Пусть мы имеем квантовую систему с гамильтонианом \hat{H} , состояние которой описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$ (например, $\rho = \exp(-\hat{H}/T)$ в случае канонического ансамбля либо $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ для системы в чистом состоянии Ψ), и нас интересует поведение средней величины некоторого наблюдаемого $\langle \hat{O}(\tau) \rangle$ от времени (либо обратной температуры) τ . Тогда задача заключается в том, чтобы найти такое пространство параметров $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_M)$ и такую всюду положительную c -числовую функцию $P = P(\lambda, \tau)$, описывающую состояние системы \hat{H} в зависимости от τ , чтобы, во-первых, $\langle \hat{O}(\tau) \rangle$ выразилось в виде среднего по P :

$$\langle \hat{O}(\tau) \rangle = \int d\lambda O(\lambda) P(\lambda), \quad (1)$$

и, во-вторых, сама функция P имела бы в качестве уравнения эволюции по τ некоторое уравнение Фок-

кера–Планка,

$$\partial_\tau P(\lambda; \tau) = -\partial_\nu A_\nu(\lambda) P(\lambda; \tau) + \frac{1}{2} \partial_\nu \partial_{\nu'} D_{\nu\nu'}(\lambda; \tau) P(\lambda; \tau), \quad (2)$$

где далее будет подразумеваться суммирование по повторяющимся индексам, а греческие индексы пробегают все M компонент вектора λ ; $D_{\mu\mu'}(\lambda)$ — неотрицательная матрица. Иными словами, надо построить некоторое соответствие

$$\widehat{O} \mapsto O(\lambda), \quad \widehat{\rho}(\tau) \mapsto P(\lambda, \tau), \quad (3)$$

справедливое в любой момент времени τ и обладающее свойствами (1) и (2). Построив данное соответствие, можно использовать известное соответствие между уравнением Фоккера–Планка и стохастическим дифференциальным уравнением (СДУ) [24], согласно которому уравнению (2) соответствует стохастический процесс в форме Ито: $d\lambda_\mu = A_\mu(\lambda) d\tau + B_{\mu\mu'} dW_{\mu'}$, или в форме Стратоновича

$$d\lambda_\mu = \left[A_\mu(\lambda) - \frac{1}{2} B_{\nu\nu'} \partial_\nu B_{\mu\nu'} \right] d\tau + B_{\mu\mu'} dW_{\mu'},$$

для которого функция $P(\lambda, \tau)$ является плотностью распределения вероятности значений $\lambda(\tau)$ стохастического процесса в момент времени τ . Здесь dW_μ — приращения винеровского процесса, $\langle dW_\mu \rangle = 0$, $\langle dW_\mu dW_{\mu'} \rangle = \delta_{\mu\mu'} d\tau$, $D_{\mu\mu'} = B_{\mu\nu} B_{\mu'\nu}$. Таким образом, построив соответствие (3), можно было бы свести исходную квантовую задачу вычисления $\langle \widehat{O}(\tau) \rangle$ к задаче усреднения величины $O(\lambda)$ по классическому стохастическому s -числовому процессу в пространстве λ , что на компьютере эффективно решается с помощью различных вариантов метода Монте-Карло. В этом случае функция $P(\lambda)$ называется распределением квазивероятностей, причем приставка “квази” подчеркивает, что эта функция не является распределением вероятностей какой-либо физической величины. Это всего лишь статистическая интерпретация математической структуры уравнений ее эволюции во времени. При этом пространство λ называется (обобщенным) фазовым пространством квантовой системы [25–31].

Метод $P^{(+)}$ -представления дает одно из возможных конструктивных решений задачи построения соответствия (3).

Необходимо отметить, что на практике не любое решение данной задачи будет пригодно для компьютерных вычислений. Практически пригодным можно признать лишь такое решение, для которого размерность M пространства λ растет линейно или, в крайнем случае, полиномиально с размером (числом частиц) квантовой системы \widehat{H} . Далее, по крайней мере для ферми-частиц, данная задача в общем случае не разрешима. Как следует из результатов [32], если бы был найден общий алгоритм решения данной проблемы, то, используя его, на компьютере за полиномиальное время можно было бы решать задачи, принадлежащие классу сложности NP , что по современным представлениям невозможно. Тем не менее это не означает, что данная задача вообще не разрешима ни для какой ферми-системы. Для частных систем, обладающих какими-либо внутренними симметриями или другими благоприятствующими чертами, такое решение может оказаться вполне возможным (так, например, в одномерном случае проблемы знаков при моделировании равновесного состояния ферми-систем не существует [33]).

3. Исследуемая система. В настоящей работе метод $P^{(+)}$ -представления тестируется на системе одномерного квантового бозе-газа в различных режимах. Данная система имеет гамильтониан

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \partial_{x_j}^2 + \frac{g}{2} \sum_{i \neq j} \delta(x_i - x_j). \quad (4)$$

Введем приведенные единицы, которые далее всюду будем использовать. Пусть мы выбрали единицы так, что $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, $\tilde{x} = \rho x$, где ρ — линейная концентрация частиц газа при данных условиях (температуре T и химическом потенциале μ в случае равновесного состояния), так что в новых единицах линейная плотность $\tilde{\rho} = 1$; далее введем приведенную температуру $\tilde{T} = \frac{k_B T}{\rho^2}$, параметр взаимодействия $\gamma = \frac{g}{2\rho}$.

Аналогично приведем гамильтониан $\tilde{\widehat{H}} = \frac{\widehat{H}}{\rho^2}$ и химический потенциал $\tilde{\mu} = \frac{\mu}{\rho^2}$. Опустив тильды у \tilde{x} , $\tilde{\widehat{H}}$ и $\tilde{\mu}$, получим гамильтониан в приведенных единицах:

$$\widehat{H} = -\sum_j \partial_{x_j}^2 + \gamma \sum_{i \neq j} \delta(x_i - x_j). \quad (5)$$

Свойства однородного одномерного бозе-газа зависят от двух безразмерных параметров. Первый параметр — параметр взаимодействия $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 \rho}$. Режим идеального бозе-газа достигается при $\gamma \rightarrow 0$. В противоположном пределе $\gamma \rightarrow \infty$ наступает режим Тонкса–Жирандо: энергии налетающей частицы недостаточно, чтобы протуннелировать через межчастичный потенциал взаимодействия, и поскольку в одномерном случае две частицы могут поменяться местами только путем туннелирования, в этом пределе газ ведет себя так, как если бы частицы были идеальными фермионами (фермионизация бозе-газа).

Второй параметр — приведенная температура $\tilde{T} = \frac{T}{T_d}$, где введена температура квантового вырождения $T_d = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2mk_B}$, т.е. температура, ниже которой среднее межчастичное расстояние $\frac{1}{\rho}$ становится меньше тепловой длины волны де Бройля (наступает режим квантового вырождения).

В классификации режимов бозе-газа играют важную роль следующие характерные масштабы: среднее межчастичное расстояние $l_\rho = \frac{1}{\rho}$; тепловая длина волны де Бройля $\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$; корреляционный радиус $\xi = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2m\rho g}}$ — характерная длина пространственных флуктуаций плотности. Одномерная длина рассеяния $a_{1D} = \frac{\hbar^2}{mg}$ — характерное расстояние, на котором ощутимо влияние одной частицы. В режиме фермионизации $\gamma \gg 1$ масштаб a_{1D} является эффективным размером твердой сферы.

Отметим, что параметры μ , γ и \tilde{T} не являются независимыми. Поскольку в приведенных единицах $\rho(\tilde{T}) = 1$, то химический потенциал является функцией $\mu = \mu(\gamma, \tilde{T})$, обеспечивающей это равенство для плотности при заданных γ и \tilde{T} .

В целях моделирования методом $P^{(+)}$ -представления перепишем гамильтониан (4) в представлении вторичного квантования:

$$\hat{H} = \int dx \hat{\psi}^+(x) [-\partial_x^2 + \gamma \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x)] \hat{\psi}(x), \quad (6)$$

где операторы рождения $\hat{\psi}^+(x)$ и уничтожения $\hat{\psi}(x)$ в точке x удовлетворяют коммутационному соотношению $[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^+(x')] = \delta(x - x')$. Производя дискретизацию интеграла в (6), определяем сетку с узлами x_j на расстоянии Δx друг от друга в интервале $[-x_{\max}, x_{\max} - \Delta x]$, $x_j = \Delta x [-N_{\text{grid}}/2 + j]$, $\Delta x = \frac{2x_{\max}}{N_{\text{grid}}}$, $j = 0, \dots, N_{\text{grid}} - 1$. Вводим операторы рождения и уничтожения в узлах сетки $\hat{a}_j^+ = \hat{\psi}^+(x_j) \sqrt{\Delta x}$, $\hat{a}_j = \hat{\psi}(x_j) \sqrt{\Delta x}$, $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = \delta_{ij}$. Дискретный (решеточный) гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = \sum_j \left[-\hat{a}_j^+ T_{ji} \hat{a}_i + \frac{\gamma}{\Delta x} \hat{a}_j^{+2} \hat{a}_j^2 \right], \quad (7)$$

где T_{ji} — дискретный аналог второй производной. Предполагается, что x_{\max} выбрано достаточно большим, чтобы не влиять на удельные свойства рассматриваемой системы, а число узлов N_{grid} таким, чтобы заселенностями состояний с импульсами $k > k_{\max} = \frac{\pi}{\Delta x}$ можно было пренебречь. Для вычисления действия оператора T_{ji} используется быстрое преобразование Фурье (см. раздел 6.3), поэтому бозе-газ моделируется в периодической ячейке $[-x_{\max}, x_{\max}]$.

Изложение метода $P^{(+)}$ -представления применительно к системе с гамильтонианом (7) мы будем вести конструктивно, строя соответствие (3) поэтапно, сначала для самой простой системы — одномерного гармонического осциллятора, что соответствует рассмотрению единственного члена вида $-\mu \hat{a}^+ \hat{a}$ в гамильтониане (7); затем для ангармонического осциллятора Керра $\hat{H}_1 = -\mu \hat{a}^+ \hat{a} + \kappa \hat{a}^{+2} \hat{a}^2$, что соответствует гамильтониану (7) в приближении одной моды $N_{\text{grid}} = 1$; и затем для системы связанных осцилляторов Керра, что соответствует системе с полным гамильтонианом (5) в представлении вторичного квантования. При этом каждый этап мы будем иллюстрировать вычислениями для равновесного состояния (во мнимом времени) и в реальном времени (динамика).

4. $P^{(+)}$ -представление для гармонического осциллятора. Начнем рассмотрение данного метода на примере простейшей системы — гармонического осциллятора. Гармонический осциллятор играет ключевую роль в квантовой теории многих тел. Дело в том, что система без взаимодействия частиц в результате процедуры вторичного квантования предстает в виде дискретного (в случае конечного объема)

либо непрерывного (в случае неограниченной в пространстве системы) набора гармонических осцилляторов. Тогда, как видно из (7), парные взаимодействия между частицами приводят к ангармоническим членам четвертого порядка, в общем случае связывающим между собою различные осцилляторы. Моделирование ангармонических членов будет рассмотрено в разделе 5.

В приведенных единицах гамильтониан осциллятора имеет вид $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2}$.

Как известно [34], данный гамильтониан можно разбить на множители

$$\hat{H} = \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}, \tag{8}$$

где \hat{a}^+ и \hat{a} — операторы рождения и уничтожения, которые задаются как $\hat{a}^+ = \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}$ и $\hat{a} = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}$ и являются канонически сопряженными: $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$. Для простоты опустим $1/2$ в (8) и введем в рассмотрение собственные функции $|\alpha\rangle$ и $\langle\alpha|$ этих операторов: $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, $\langle\alpha|\hat{a}^+ = \alpha^*\langle\alpha|$, причем диапазоном значений α является вся комплексная плоскость. Собственные функции $|\alpha\rangle$ называются когерентными состояниями. Можно показать, что они представляют собой гауссовы пакеты, имеющие средние значения координаты $\bar{x} = \alpha_x\sqrt{2}$, импульса $\bar{p} = \alpha_y\sqrt{2}$ (здесь и далее нижними индексами x и y мы обозначаем действительную и мнимую части комплексной величины) и среднеквадратичную ширину $\Delta x^2 = \Delta p^2 = \frac{1}{2}$. Известно, что при помощи этих состояний осуществляется классический предел к состоянию (\bar{x}, \bar{p}) на фазовой плоскости классического осциллятора и что когерентные состояния эволюционируют во времени с сохранением формы (т.е. остаются гауссовыми пакетами с теми же среднеквадратичными отклонениями), при этом \bar{x} и \bar{p} удовлетворяют классическим уравнениям движения [35]. Учитывая к тому же свойство полноты данных состояний:

$$1 = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha|, \tag{9}$$

можно сказать, что множество всех $|\alpha\rangle$ представляет собой фазовое пространство квантового осциллятора, и поэтому не удивительно, что эти состояния и далее будут играть значительную роль.

Рассмотрим набор операторов следующего вида:

$$\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) = \Omega \frac{|\alpha\rangle \langle\beta^*|}{\langle\beta^*|\alpha\rangle} = \Omega \frac{\exp(\alpha \hat{a}^+) |0\rangle \langle 0| \exp(\beta \hat{a})}{\exp(\alpha\beta)}, \tag{10}$$

где $|0\rangle$ — основное состояние гармонического осциллятора, Ω — комплексный вес и где во втором равенстве были использованы соотношения для скалярного произведения двух когерентных состояний и выражение для $|\alpha\rangle$ через операторную экспоненту [27]:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= \exp\left\{\alpha^*\beta - \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2\right\}, \\ |\alpha\rangle &= \exp(\alpha \hat{a}^+ - \alpha^* \hat{a}) |0\rangle = \exp(-|\alpha|^2/2) \exp(\alpha \hat{a}^+) |0\rangle. \end{aligned}$$

Исходя из (10) можно найти след оператора $\hat{\Lambda}$:

$$\text{Tr} \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) = \Omega. \tag{11}$$

Известно [36], что операторы $\hat{\Lambda}$ образуют переполненный базис в пространстве матриц плотности (соответствующих физическим системам), т.е. по ним можно разложить любую физически реализуемую матрицу плотности в виде

$$\hat{\rho} = \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta) \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta), \tag{12}$$

причем это разложение не однозначно [36]. Как увидим ниже, именно функция $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)$ и задает искомое представление в фазовом пространстве $\lambda = (\Omega, \alpha, \beta)$ размерности 6. Используя неоднозначность разложения (12), $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)$ всегда можно сделать положительной. Например, любую заданную матрицу плотности можно разложить со следующей $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)$ -функцией [36]:

$$P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta) = \frac{1}{4\pi^2} \exp\left(-\frac{|\alpha + \beta^*|^2}{4}\right) \left\langle \frac{\alpha + \beta^*}{2} \mid \hat{\rho} \mid \frac{\alpha + \beta^*}{2} \right\rangle \delta^2(\Omega - 1), \quad (13)$$

из которой очевидна положительность данного представления, если принять во внимание свойство положительной определенности матрицы плотности. Соотношение (13) можно проверить путем подстановки (13) в (12), в результате чего получается тождество, которое можно проверить, вычислив квантовую характеристическую функцию [36].

4.1. Средние значения наблюдаемых. Покажем, как вычислять средние значения наблюдаемых в представлении (12). По определению, $\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \hat{O} \hat{\rho}}{\text{Tr} \hat{\rho}}$. Тогда для статсуммы $\text{Tr} \hat{\rho}$ и среднего значения $\langle \hat{O} \rangle$ из (10), (11) и (12) имеем

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho} &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta), \\ \langle \hat{O} \rangle &= \frac{\int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta) O(\Omega, \alpha, \beta)}{\int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)} = \frac{\langle \Omega O(\lambda) \rangle_\lambda}{\langle \Omega \rangle_\lambda}, \end{aligned} \quad (14)$$

где $O(\lambda) = \text{Tr} \hat{O} \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta)$, знак $\langle \cdot \rangle_\lambda$ обозначает уже классическое усреднение по распределению в пространстве λ . Используя свойство эрмитовости $\hat{\rho}$, мы можем в правой части (12) взять полусумму с ее эрмитовым сопряжением и получить следующее соотношение: $\langle \hat{O} \rangle = \frac{\langle \Omega O(\Omega, \alpha, \beta) + \Omega^* O^*(\Omega, \beta, \alpha) \rangle_\lambda}{\langle \Omega + \Omega^* \rangle_\lambda}$.

Поскольку \hat{a}^+ и \hat{a} — естественные динамические переменные осциллятора, наблюдаемое \hat{O} выражаем через них, $\hat{O} = \sum c_{mn} \hat{a}^{+m} \hat{a}^n$, и из (14) можно получить формулу для среднего значения [36]:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum c_{mn} \langle \Omega \beta^m \alpha^n + \Omega^* \alpha^{*m} \beta^{*n} \rangle_\lambda}{\langle \Omega + \Omega^* \rangle_\lambda}. \quad (15)$$

4.2. Уравнения движения во мнимом времени. В каноническом ансамбле $\hat{\rho}$ удовлетворяет уравнению Блоха

$$\partial_\tau \hat{\rho} = -\frac{1}{2} \{ \hat{H}, \hat{\rho} \} = -\hat{H} \hat{\rho}, \quad (16)$$

с начальным условием $\hat{\rho}(\tau = 0) = \hat{1}$, где $\{A, B\}$ — антикоммутатор и τ — обратная температура (мнимое время) — пробегает значения от 0 до $\tau_f = \tilde{T}^{-1}$. Поскольку каноническая матрица плотности коммутирует с гамильтонианом, правую часть уравнения можно выбрать в любой из двух приведенных форм; при этом получатся различные уравнения движения для $P^{(+)}$ -функции.

Можно показать, что операторы \hat{a}^+ и \hat{a} действуют следующим образом на $\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta)$ [36]:

$$\hat{a}^+ \hat{\Lambda} = \{\partial_\alpha + \beta\} \hat{\Lambda}, \quad \hat{a} \hat{\Lambda} = \alpha \hat{\Lambda}, \quad \hat{\Lambda} \hat{a} = \{\partial_\beta + \alpha\} \hat{\Lambda}, \quad \hat{\Lambda} \hat{a}^+ = \beta \hat{\Lambda}. \quad (17)$$

Подставив в (16) разложение (12) и используя соотношения (17), получаем:

$$\begin{aligned} \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) \partial_\tau P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau) &= \\ &= -\frac{1}{2} \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau) \{2\alpha\beta + \alpha\partial_\alpha + \beta\partial_\beta\} \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta). \end{aligned} \quad (18)$$

Предполагая, что $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau)$ достаточно быстро убывает на бесконечности, совершаем в правой части интегрирование по частям и находим, что для удовлетворения интегральному соотношению достаточно, чтобы

$$\partial_\tau P^{(+)} = -\alpha\beta P^{(+)} + \frac{1}{2} \{\partial_\alpha \alpha + \partial_\beta \beta\} P^{(+)}. \quad (19)$$

Полученное уравнение отличается от канонической формы уравнения Фоккера–Планка (без диффузии) членом $-\alpha\beta P^{(+)}$. Это связано с тем фактом, что эволюция во мнимом времени не сохраняет след матрицы плотности, т.е. у нас есть источники плотности вероятности. Чтобы исправить ситуацию, действуем переменную Ω : из соотношения (10) видно, что $\Omega\partial_\Omega\hat{\Lambda} = \hat{\Lambda}$; используя данное свойство, делаем в правой части (18) замену $2\alpha\beta \rightarrow 2\alpha\beta\Omega\partial_\Omega$, что соответствует замене $2\alpha\beta \rightarrow \partial_\Omega\Omega 2\alpha\beta$ в (19), и получаем: $\partial_\tau P^{(+)} = \left\{ \partial_\Omega\Omega\alpha\beta + \frac{1}{2}(\partial_\alpha\alpha + \partial_\beta\beta) \right\} P^{(+)}$. Получилось уравнение эволюции плотности распределения для процесса дрейфа [24]. Из него следует, что

$$\partial_\tau\alpha = -\frac{1}{2}\alpha, \quad \partial_\tau\beta = -\frac{1}{2}\beta, \quad \partial_\tau\Omega = -\Omega\alpha\beta, \tag{20}$$

и решениями (20) являются

$$\alpha(\tau) = \alpha(0)\exp(-\tau/2), \quad \beta(\tau) = \beta(0)\exp(-\tau/2), \quad \Omega(\tau) = \Omega(0)\exp\left\{\alpha(\tau)\beta(\tau)[1 - \exp(\tau)]\right\}.$$

Смысл этих уравнений в том, что в начальный момент времени координаты точки $\alpha(0), \beta(0)$ и ее начальный вес $\Omega(0)$ распределены в шестимерном пространстве (Ω, α, β) по закону $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; 0)$; далее точка движется из каждого возможного начального состояния по траектории $\alpha(\tau), \beta(\tau)$ в четырехмерном пространстве и при этом ее вес равен $\Omega(\tau)$.

Покажем, что при этом мы получаем корректную термодинамику осциллятора. Начальное условие для уравнения (16): $\hat{\rho}(\tau = 0) = 1$ [37]. Имеем $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; 0) = \frac{1}{\pi}\delta^2(\alpha - \beta^*)\delta^2(\Omega - 1)$ для разложения единицы (9). Это следует из того, что $|\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{\Lambda}(1, \alpha, \alpha^*)$, и разложение (9) получается из (12) при подстановке в последнее $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; 0)$. Тогда имеем для плотности распределения при конечном τ : $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau) = \frac{1}{\pi}\epsilon^\tau\delta^2(\alpha - \beta^*)\delta^2(\Omega - \Omega(\tau))$. Для статсуммы согласно (14) получаем :

$$Z(\tau) = \frac{1}{\pi} \int d^2\Omega d^2\alpha d^2\beta \Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau) = \frac{\epsilon^\tau}{\pi} \int d^2\alpha \exp\{-|\alpha|^2(\epsilon^\tau - 1)\} = \frac{\epsilon^{\tau/2}}{2 \sinh(\tau/2)},$$

что совпадает с теоретическим результатом, если учесть, что мы отбросили в гамильтониане $\frac{1}{2}$. Для средней энергии, используя (15), получаем:

$$E = \frac{\langle \hat{a}^+ \hat{a} \rangle}{Z} = \frac{\langle \beta\alpha \rangle_\lambda}{Z} = \frac{\epsilon^\tau}{Z\pi} \int d^2\alpha |\alpha|^2 \exp(-|\alpha|^2(\epsilon^\tau - 1)) = \frac{\epsilon^{-\tau}}{1 - \epsilon^{-\tau}},$$

что соответствует правильному значению, если прибавить опущенную $\frac{1}{2}$ [37].

Попутно мы показали справедливость следующего $P^{(+)}$ -соответствия (в смысле (3))

$$\exp(-\tau\hat{a}^+\hat{a}) \mapsto \frac{\epsilon^\tau}{\pi} \delta(\Omega - 1) \delta^2(\alpha - \beta^*) \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{n(\tau)}\right), \tag{21}$$

где заселенность гармонического осциллятора $n(\tau) = \frac{1}{\epsilon^\tau - 1}$. Данное соотношение пригодится нам ниже.

Из приведенного рассмотрения видна роль соотношений (17) при построении уравнений движения для $P^{(+)}$ -функции: это правила соответствия для операторов при переходе к $P^{(+)}$ -представлению. Действительно, рассмотрим, какому члену в уравнении движения для $P^{(+)}$ -функции соответствует оператор вида $\hat{a}^{+m}\hat{a}^n$, действующий, например, слева на матрицу плотности в уравнении движения: $\hat{a}^{+m}\hat{a}^n\hat{\rho}$. Подставляя сюда разложение (12), получаем:

$$\begin{aligned} \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)\hat{a}^{+m}\hat{a}^n\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)\hat{a}^{+m}\alpha^n\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) = \\ &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)\alpha^n\hat{a}^{+m}\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) = \\ &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta)\alpha^n\{\partial_\alpha + \beta\}^m\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta). \end{aligned}$$

Поскольку, как было описано выше, вслед за этим совершается интегрирование по частям, рассуждая так же, как и при выводе (19), получаем соответствие: $\hat{a}^{+m} \hat{a}^n \hat{\rho} \mapsto \{-\partial_\alpha + \beta\}^m \alpha^n P^{(+)}$. Аналогично получим соответствие, когда оператор $\hat{a}^{+m} \hat{a}^n$ действует справа: $\hat{\rho} \hat{a}^{+m} \hat{a}^n \mapsto \{-\partial_\beta + \alpha\}^n \beta^m P^{(+)}$. В итоге можно выписать соответствие для общего уравнения для матрицы плотности. Если $L(\hat{a}^+, \hat{a})$ и $R(\hat{a}^+, \hat{a})$ — нормально упорядоченные операторы, то уравнению $\partial_\tau \hat{\rho} = L(\hat{a}^+, \hat{a}) \hat{\rho} + \hat{\rho} R(\hat{a}^+, \hat{a})$ соответствует $P^{(+)}$ -уравнение $\partial_\tau P^{(+)} = \{L(-\partial_\alpha + \beta, \alpha) + R(-\partial_\beta + \alpha, \beta)\} P^{(+)}$, при условии достаточно быстрого убывания $P^{(+)}$ -функции на бесконечности.

Из последнего соотношения сразу можно заключить, что уравнение Фоккера–Планка для $P^{(+)}$ -функции существует лишь при наличии внешних потенциалов и парных взаимодействий (члены вида $\hat{a}^{+2} \hat{a}^2$). В случае n -частичных потенциалов для $n \geq 3$ появляются производные выше второго порядка и уравнению движения нельзя сопоставить стохастический процесс дрейфа с диффузией. Возможно, данная проблема имеет решение в классе случайных процессов со скачками, переходные вероятности которых описываются уравнением Чепмена–Колмогорова, однако, по-видимому, никто не занимался исследованием данного вопроса.

4.3. Уравнения движения в реальном времени: динамика. Здесь не возникает необходимости в переменной Ω , и мы положим $\Omega \equiv 1$. Динамическое уравнение для матрицы плотности (уравнение Неймана) имеет вид [37]

$$\partial_t \hat{\rho} = -i [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (22)$$

где $\hat{H} = \epsilon \hat{a}^+ \hat{a}$. Подставим в (22) (как и ранее в (16)) разложение (12). Учитывая правила соответствия операторов (17) и проведя интегрирования по частям (предполагая достаточно быстрое убывание $P^{(+)}$ на бесконечности), приходим к тому, что для удовлетворения уравнению (22) достаточно, чтобы

$$\partial_t P^{(+)} = i\epsilon \{\partial_\alpha \alpha - \partial_\beta \beta\} P^{(+)}, \quad (23)$$

аналогично тому, как был совершен переход от (16) к (19). Чтобы это уравнение имело вероятностное толкование, необходимо, чтобы $P^{(+)}$ -функция оставалась вещественной положительной в процессе эволюции. Для этого достаточно, чтобы коэффициенты уравнения были вещественными. Вещественности мы добьемся, используя аналитичность $\hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta)$ по α и β [5, 36]. Действительно, аналитичность означает, что мы можем по желанию менять производные ∂_α на ∂_{α_x} либо на $-i\partial_{\alpha_y}$; аналогично и для ∂_β . Тогда можно переписать (23) в виде $\partial_t P^{(+)} = -\epsilon [\partial_{\beta_y} \beta_x - \partial_{\beta_x} \beta_y - \partial_{\alpha_y} \alpha_x + \partial_{\alpha_x} \alpha_y] P^{(+)}$. Это соответствует дрейфу частиц в пространстве $(\alpha_x, \alpha_y, \beta_x, \beta_y)$ согласно

$$\partial_t \alpha_x = \epsilon \alpha_y, \quad \partial_t \alpha_y = -\epsilon \alpha_x, \quad \partial_t \beta_x = -\epsilon \beta_y, \quad \partial_t \beta_y = \epsilon \beta_x, \quad (24)$$

$\{\alpha_x = A \sin(ct + \phi_A), \alpha_y = A \cos(ct + \phi_A), \beta_x = B \cos(ct + \phi_B), \beta_y = B \sin(ct + \phi_B)\}$ — решение (24), т.е. начальное распределение $P^{(+)}$ просто вращается с угловой частотой ϵ в плоскостях α и β относительно начала координат.

Выражая $\hat{x} = \frac{\hat{a}^+ + \hat{a}}{\sqrt{2}}$ и $\hat{p} = i \frac{\hat{a}^+ - \hat{a}}{\sqrt{2}}$ и используя формулу для среднего (15), нетрудно показать, что $\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \epsilon \langle \hat{p} \rangle$, $\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\epsilon \langle \hat{x} \rangle$, т.е. как и должно быть, эволюция средних происходит в соответствии с законами классической динамики. Далее, состоянию вакуума с матрицей плотности $\hat{\rho} = |0\rangle \langle 0| = \hat{\Lambda}(1, 0, 0)$ соответствует $P^{(+)}(\alpha, \beta) = \delta^2(\alpha) \delta^2(\beta)$. Для данного состояния получается правильное значение второго момента координаты, $\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{1}{2}$.

5. Осциллятор Керра: бозе-газ в одномодовом приближении. На следующем этапе рассмотрим систему (7) в $P^{(+)}$ -представлении в одномодовом приближении, оставив лишь одно слагаемое в сумме (7) (ангармонический осциллятор Керра),

$$\hat{H}_1 = -\mu \hat{a}^+ \hat{a} + \kappa \hat{a}^{+2} \hat{a}^2, \quad (25)$$

которое можно также записать в виде $\hat{H}_1 = -\mu \hat{n} + \hat{H}_{\text{int}}$, где $\hat{H}_{\text{int}} = \kappa \hat{a}^{+2} \hat{a}^2$. В такой записи данную систему можно интерпретировать как моду с самодействием \hat{H}_{int} , находящуюся в равновесии с термостатом при температуре T и химическом потенциале μ , с которым система может обмениваться энергией и частицами.

5.1. Уравнения движения во мнимом времени. Устранение неустойчивости. Уравнение Блоха для осциллятора Керра (25) имеет вид

$$\partial_\tau \hat{\rho} = -\hat{H}_1 \hat{\rho}, \tag{26}$$

с начальным условием $\hat{\rho}(\tau = 0) = \hat{1}$. Подставляя в (26) разложение (12) и используя операторные соответствия (17), можно получить

$$\begin{aligned} \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta) \partial_\tau P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau) = \\ = - \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta; \tau) \left\{ (-\mu\alpha\beta + \kappa\alpha^2\beta^2) + (-\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta)\partial_\alpha + \kappa\alpha^2\partial_\alpha^2 \right\} \hat{\Lambda}(\Omega, \alpha, \beta). \end{aligned} \tag{27}$$

Выполняя интегрирование по частям в правой части (предполагая достаточно быстрое убывание на бесконечности), приходим к тому, что для удовлетворения (27) достаточно, чтобы $P^{(+)}$ -функция была решением уравнения

$$\partial_\tau P^{(+)} = \left\{ -(-\mu\alpha\beta + \kappa\alpha^2\beta^2) + \partial_\alpha(-\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta) - \partial_\alpha^2\kappa\alpha^2 \right\} P^{(+)}, \tag{28}$$

аналогично переходу от (16) к (19) и от (22) к (23).

Величину $H(\alpha, \beta) = -\mu\alpha\beta + \kappa\alpha^2\beta^2$, имеющую смысл средней энергии состояния с координатой (α, β) в фазовом пространстве, заменяем на $H(\alpha, \beta)\Omega\partial_\Omega$, чтобы избавиться от источника в уравнении Фоккера-Планка. Тогда, используя аналитичность базиса $\hat{\Lambda}$ и заменяя производные, добиваемся вещественности коэффициентов в данном уравнении. Известно, что при этом уравнение (28) соответствует следующей системе стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) в форме Ито [24]:

$$\begin{aligned} d\alpha &= -(-\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta)d\tau + i\alpha\sqrt{2\kappa}dW, \\ d\beta &= 0, \\ d\Omega &= -\Omega(-\mu\alpha\beta + \kappa\alpha^2\beta^2)d\tau, \end{aligned} \tag{29}$$

где dW — приращение вещественного винеровского процесса, $\langle dW \rangle = 0$, $\langle dW^2 \rangle = d\tau$, причем в форме Ито приращение $dW(\tau)$ в момент времени τ является независимым от $\alpha(\tau)$ и $\beta(\tau)$ [24]. Таким образом, видим, что взаимодействие приводит к диффузии, и состояние в процессе блуждания по фазовому пространству приобретает вес $\Omega = \exp\left(-\int d\tau H(\alpha(\tau), \beta(\tau))\right)$, где $(\alpha(\tau), \beta(\tau))$ — конкретная реализация стохастического процесса.

По сравнению со случаем гармонического осциллятора здесь имеется усложнение: система уравнений (29) является неустойчивой. Чтобы увидеть это, перепишем (29) в терминах величины $\check{n} = \alpha\beta$, среднее значение которой дает заселенность нашей системы. Учитывая, что $d\check{n} = \alpha d\beta + \beta d\alpha$, первые два уравнения системы (29) соберутся в одно, и получим:

$$\begin{aligned} d\check{n} &= -(-\mu\check{n} + 2\kappa\check{n}^2)d\tau + \\ &+ i\check{n}2\sqrt{2\kappa}dW, \\ d\Omega &= -\Omega(-\mu\check{n} + \kappa\check{n}^2)d\tau. \end{aligned} \tag{30}$$

Введя действительную и мнимую части $\check{n} = n' + in''$, можно построить фазовый портрет детерминистической части уравнения (30). Стационарные точки даются решениями уравнения $-\mu\check{n} + 2\kappa\check{n}^2 = 0$, $\check{n}_1 = 0$, $\check{n}_2 = \frac{\mu}{2\kappa}$. Вторая стационарная

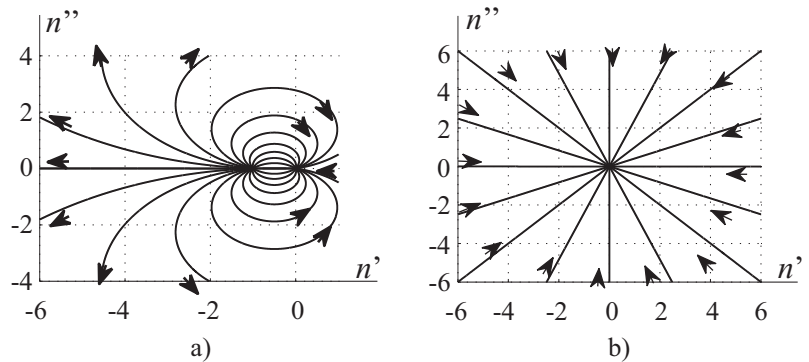


Рис. 1. Случай $\mu = -1, \kappa = 1/2$:

а) в фазовом портрете детерминистической части уравнения (30) имеются отталкивающий центр $(\mu/k, 0)$ и притягивающий центр $(0, 0)$, б) в фазовом портрете детерминистической части уравнения (31), исправленного с помощью радиальной калибровки, имеется один притягивающий центр $(0, 0)$

точка даются решениями уравнения $-\mu\check{n} + 2\kappa\check{n}^2 = 0$, $\check{n}_1 = 0$, $\check{n}_2 = \frac{\mu}{2\kappa}$. Вторая стационарная

точка уходит на бесконечность при выключении взаимодействия, $\kappa \rightarrow 0$. Как показано на рис. 1а, точка \check{n}_1 является центром притяжения и проблем не вызывает; точка \check{n}_2 является отталкивающим центром, и при этом в отрицательном направлении вдоль вещественной оси n' наблюдается убегание на бесконечность за конечное время. Действительно, взяв при $\tau = 0$ значение $\check{n} = \check{n}_2(1 + \delta)$, где $\delta > 0$ малое число, и решив детерминистическую часть уравнения (29), получим $\check{n} = n'(\tau) = \frac{-\mu}{2\kappa} \frac{1 + \delta}{\delta \exp(-\mu\tau) - 1 - \delta}$. Видно, что при приближении к моменту времени $\tau^* = -\log\left(\frac{1 + \delta}{\delta}\right) \frac{1}{\mu}$, $\tau \rightarrow \tau^*$, величина $n'(\tau^*) \rightarrow \infty$.

Данное неустойчивое поведение связано с тем, что в соотношении (27) нельзя пренебрегать граничными членами, возникающими при интегрировании по частям. Однако ситуация исправляется при помощи неоднозначности разложения (12). Данная неоднозначность разложения [5] позволяет добавить в уравнение (27) в выражение в фигурных скобках член $\mathcal{L} = \left[\mathcal{G}^2 \Omega \partial_\Omega + i \sqrt{\frac{\kappa}{2}} \mathcal{G} (\alpha \partial_\alpha + \beta \partial_\beta) \right] (\Omega \partial_\Omega - 1)$, где $\mathcal{G} = \mathcal{G}(\alpha, \beta, \tau)$ — произвольная функция, называемая дрейфовой стохастической калибровочной функцией (drift stochastic gauge function) [5]. Тогда можно показать, что СДУ (29) примут вид

$$\begin{aligned} d\alpha &= -(\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta + i\alpha\mathcal{G}\sqrt{2\kappa})d\tau + i\alpha\sqrt{2\kappa}dW, \\ d\beta &= -0, \\ d\Omega &= -\Omega\{(-\mu\alpha\beta + \kappa\alpha^2\beta^2)d\tau + \mathcal{G}dW\}. \end{aligned}$$

Для устранения отталкивающего центра \check{n}_2 выберем калибровочную функцию в виде (так называемая радиальная калибровка [5]): $\mathcal{G} = i\sqrt{2\kappa}(\alpha\beta - |\alpha\beta|)$. Тогда исправленные уравнения (29) примут вид

$$\begin{aligned} d\alpha &= -(-\mu\alpha + 2\kappa\alpha|\alpha\beta|)d\tau + i\alpha\sqrt{2\kappa}dW, \\ d\beta &= 0, \\ d\Omega &= -\Omega\{(-\mu\alpha\beta + \kappa\alpha^2\beta^2)d\tau + i\sqrt{2\kappa}(\alpha\beta - |\alpha\beta|)dW\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Можно показать, что теперь на фазовом портрете детерминистической части отталкивающие центры отсутствуют (рис. 1б).

5.2. Начальные условия для $P^{(+)}$ -уравнений во мнимом времени. Итак, мы привели вывод стохастических дифференциальных уравнений (31) для большого канонического ансамбля. Теперь надо снабдить их начальными условиями. Как было сказано, начальным условием для уравнения Блоха (26) является $\hat{\rho}(\tau = 0) = \hat{1}$. Согласно разложению единицы (9), данному начальному условию соответствует начальное распределение в $P^{(+)}$ -представлении $P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta, 0) = \frac{1}{\pi} \delta(\Omega - 1) \delta^2(\alpha - \beta^*)$. Однако если нас интересует приложение данных уравнений к компьютерному моделированию, то ясно, что такое начальное распределение не годится: оно имеет бесконечную дисперсию по переменным α, β , и выборка начальных конфигураций из него в ходе процедуры Монте-Карло будет происходить крайне неэффективно. В [22] было предложено следующее решение данной проблемы. Матрица плотности $\hat{\rho} = \exp[-(\hat{H}_{\text{int}} - \mu\hat{n})\tau]$ как функция обратной температуры τ при постоянном химическом потенциале μ удовлетворяет уравнению Блоха (26). Однако если мы допустим, что μ гладко зависит от τ , $\hat{\rho} = \exp[-(\hat{H}_{\text{int}} - \mu(\tau)\hat{n})\tau]$, то можно показать, что $\hat{\rho}$ будет удовлетворять уравнению

$$\partial_\tau \hat{\rho} = -\left[\partial_\tau (\hat{H}_{\text{int}} - \mu(\tau)\hat{n})\tau\right] \hat{\rho} = -\{\hat{H}_{\text{int}} - \mu_e(\tau)\hat{n}\} \hat{\rho}, \quad (32)$$

где

$$\mu_e(\tau) = \frac{\partial[\tau\mu(\tau)]}{\partial\tau}. \quad (33)$$

Идея состоит в том, что если целью является расчет термодинамических характеристик системы лишь при температуре \tilde{T} , то, вообще говоря, при спуске по τ мы можем менять химический потенциал произвольным образом и выбрать другое, не сингулярное начальное состояние. Единственное условие — чтобы $\mu(\tilde{T}^{-1}) = \mu$.

Тогда выберем $\mu(\tau)$ так, чтобы $\lim_{\tau \rightarrow 0} [\tau\mu(\tau)] = -\lambda$. При этом начальным условием для (32) будет

$$\hat{\rho}(\tau = 0) = \exp[-\lambda\hat{n}], \quad (34)$$

которое соответствует начальной заселенности осциллятора

$$n_0 = \frac{1}{\exp(\lambda) - 1}, \tag{35}$$

и согласно (21) начальная $P^{(+)}$ -функция, соответствующая (34),

$$P^{(+)}(\Omega, \alpha, \beta, 0) = \frac{1}{\pi} \delta(\Omega - 1) \delta^2(\alpha - \beta^*) \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{n_0}\right),$$

уже обладает конечной дисперсией $\sqrt{2n_0}$ и вполне пригодна для методов Монте-Карло. Система СДУ, соответствующая (32), получается из (31) заменой μ на μ_e ,

$$\begin{aligned} d\alpha &= -(-\mu_e \alpha + 2\kappa \alpha |\alpha\beta|)d\tau + i\alpha\sqrt{2\kappa}dW, \\ d\beta &= 0, \\ d\Omega &= -\Omega \left\{ (-\mu_e \alpha \beta + \kappa \alpha^2 \beta^2)d\tau + i\sqrt{2\kappa}(\alpha\beta - |\alpha\beta|)dW \right\}. \end{aligned} \tag{36}$$

При этом согласно (33) между μ и μ_e имеется соотношение $\mu(\tau) = \frac{1}{\tau} \left[-\lambda + \int_0^\tau \mu_e(\tau) d\tau \right]$. Можно положить μ_e равным постоянной величине [22], и тогда

$$\mu_e = \mu(\tilde{T}^{-1}) + \lambda\tilde{T}. \tag{37}$$

5.3. Схема численного моделирования и результаты. Алгоритм численного расчета термодинамических характеристик методом $P^{(+)}$ -представления выглядит следующим образом. Выбирается значение начальной заселенности n_0 (чтобы уменьшить дисперсию результатов вычислений, она должна приблизительно соответствовать заселенности состояния при конечной температуре \tilde{T}). Генерируется начальное условие

$$\alpha(0) = \xi_x + i\xi_y, \quad \beta(0) = \alpha(0)^*, \tag{38}$$

где ξ_x и ξ_y — независимые псевдослучайные величины, распределенные согласно нормальному закону $N(0, \sqrt{2n_0})$.

Далее для данного начального условия решается СДУ. Отметим, что СДУ в форме Ито (36), в которой на каждом шаге по времени $d\tau$ значения коэффициентов перед $d\tau$ и dW_j берутся в начале отрезка времени $[\tau, \tau + d\tau]$, соответствует схеме Эйлера для обычных дифференциальных уравнений и обладает теми же недостатками [38–40]. Поэтому для численного решения использовалась неявная схема, где коэффициенты уравнения вычисляются в момент времени $\tau + d\tau/2$. При этом в то время как для обыкновенных дифференциальных уравнений и схема Эйлера, и неявная схема приводят в пределе $d\tau \rightarrow 0$ к одному дифференциальному уравнению, для СДУ ситуация другая. В силу нерегулярности стохастических траекторий предельные формы СДУ различаются [24]. Неявной схеме соответствует СДУ в форме Стратоновича [24, 38, 40]:

$$\begin{aligned} d\alpha &= -[\mu_e \alpha + 2\kappa \alpha |\alpha\beta| + \kappa \alpha]d\tau + i\alpha\sqrt{2\kappa}dW, \quad \beta(\tau) = \beta(0) = \text{const}, \\ d \log \Omega &= (\mu_e \beta \alpha + \kappa |\alpha\beta| (|\alpha\beta| - 2\alpha\beta))d\tau + i\sqrt{2\kappa}(\beta\alpha - |\beta\alpha|)dW. \end{aligned} \tag{39}$$

Тогда неявная схема выглядит следующим образом [39, 40]:

$$\begin{aligned} \alpha(\tau + \Delta\tau) - \alpha(\tau) &= A\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right)\Delta\tau + B\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right)\Delta W_j, \\ \log \Omega(\tau + \Delta\tau) - \log \Omega(\tau) &= C\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right)\Delta\tau + D\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right)\Delta W_j, \end{aligned}$$

где A, B, C, D — соответствующие коэффициенты в СДУ (39); приращения винеровского процесса ΔW моделировались нормально распределенными псевдослучайными числами с дисперсией $\Delta\tau$. Данная система уравнений решалась методом итераций (4–5 итераций оказалось достаточно для сходимости).

Повторяя данную процедуру для разных реализаций начального условия (38) \mathcal{S} раз, получаем статистическую выборку реализаций $(\Omega(\tau_f), \alpha(\tau_f), \beta(\tau_f))$ в момент времени $\tau_f = \tilde{T}^{-1}$. Среднее значение наблюдаемого $\langle \hat{O} \rangle$ находилось путем усреднения по данной выборке согласно формуле (15). Так, на рис. 2 представлен результат вычисления заселенности $\langle \hat{a}^+ \hat{a} \rangle$ осциллятора Керра при $\tilde{T}^{-1} = 16$, $\kappa = 0.5$, $n_0 = 3.5$ при различных значениях химического потенциала μ . Усреднение проводилось по $\mathcal{S} = 2 \times 10^5$ реализациям траекторий. Шаг по времени $\Delta\tau = 1.25 \times 10^{-4}$. Для определения статистической ошибки среднего $\langle \hat{O} \rangle$ в силу конечности выборки она разбивалась на $N_{\text{bins}} = 5$ подмножеств, по каждому из них вычислялось свое среднее $\langle \hat{O} \rangle_j$, $j = 1, \dots, 5$, и тогда стандартное отклонение оценивалось как

$$D[O] = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{N_{\text{bins}}} (\langle O \rangle_j - \langle O \rangle)^2}{N_{\text{bins}} (N_{\text{bins}} - 1)}}.$$

Вычисление для 30 различных значений химического потенциала заняло 8 часов на Intel Pentium M 780. Такая длительность вычислений связана с тем, что мы взяли слишком маленький шаг по времени.

Точная зависимость на рис. 2 получена следующим образом. Перепиывая гамильтониан (25) в виде $\hat{H}_1 = (-\mu - \kappa) \hat{n} + \kappa \hat{n}^2$, видим, что его собственными функциями являются собственные функции гармонического осциллятора $|n\rangle$, а собственные значения суть $E_n = (-\mu - \kappa)n + \kappa n^2$. Отсюда получаем выражения для статсуммы $Z = \sum_n \exp(-\tau E_n)$ и средней заселенности $\langle \hat{n} \rangle = Z^{-1} \sum_n n \exp(-\tau E_n)$, график которой и приведен на рис. 2. Видно, что результат $P^{(+)}$ -вычисления совпадает с точной зависимостью в пределах статистической погрешности.

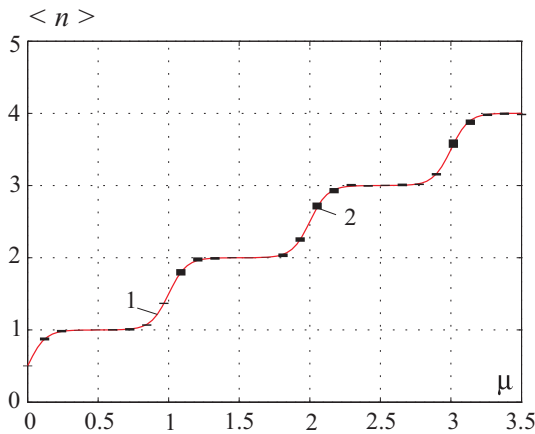


Рис. 2. Зависимость заселенности осциллятора Керра $\langle \hat{n} \rangle$ от химического потенциала μ при обратной температуре $\tilde{T}^{-1} = 16$. Линия 1 — тонкая красная линия — точное аналитическое решение. Символом 2 обозначены жирные черные вертикальные интервалы — результат вычисления методом $P^{(+)}$ -представления, причем высота интервала соответствует трем стандартным отклонениям в обе стороны от среднего значения

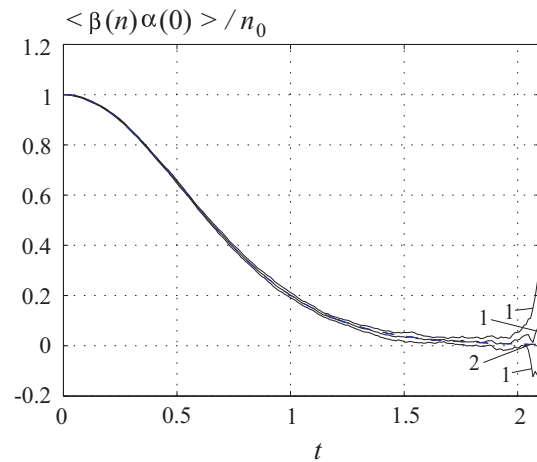


Рис. 3. Временная зависимость корреляционной функции $\langle \hat{a}^+(t) \hat{a}(0) \rangle / n_0$ осциллятора Керра при начальной заселенности $n_0 = 3.5$, постоянной взаимодействия $\kappa = 0.5$, и $\mu = -1$. Линия 1 — три сплошных черных линии — результат вычисления методом $P^{(+)}$ -представления с границами в три стандартных отклонения в обе стороны. Линия 2 — синяя штрихованная линия — теоретический результат, полученный путем моделирования в усеченном базисе собственных состояний оператора числа частиц $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$

5.4. Уравнения движения в реальном времени. Динамика. Уравнение Неймана для осциллятора Керра (25) имеет вид

$$\partial_t \hat{\rho} = -i[\hat{H}_1, \hat{\rho}]. \quad (40)$$

Рассуждая по аналогии с тем, как рассматривались предыдущие примеры, получаем следующие уравнения

движения в $+P$ -представлении в форме Ито:

$$\begin{aligned} d\alpha &= -i[-\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta]dt + \alpha\sqrt{-2\kappa i} dW_1, \\ d\beta &= i[-\mu\beta + 2\kappa\beta^2\alpha]dt + \beta\sqrt{2\kappa i} dW_2, \end{aligned}$$

и в форме Стратоновича [5]:

$$\begin{aligned} d\alpha &= -i[-\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta - \kappa\alpha]dt + \alpha\sqrt{-2\kappa i} dW_1, \\ d\beta &= i[-\mu\beta + 2\kappa\alpha^2\beta - \kappa\beta]dt + \beta\sqrt{2\kappa i} dW_2. \end{aligned} \tag{41}$$

В данном случае неустойчивости отсутствуют [22]. Тем не менее, отсылая читателя за подробностями в [22, 41], отметим, что решения системы СДУ (41) весьма чувствительны к шумам dW_1, dW_2 . Чтобы минимизировать возникающий статистический разброс, совершается следующее ортогональное преобразование винеровских инкрементов dW_j :

$$\begin{aligned} d\eta_1 &= \sqrt{-i\kappa} (dW_1\sqrt{A+1} - i dW_2\sqrt{A-1}), \\ d\eta_2 &= \sqrt{i\kappa} (dW_2\sqrt{A+1} + i dW_1\sqrt{A-1}), \end{aligned}$$

где оптимальное значение величины $A \approx 3n_0\kappa$, n_0 — заселенность осциллятора Керра в момент $t = 0$ [41]. Это позволяет производить моделирование с приемлемым статистическим разбросом вплоть до момента времени $t_0 \sim 3(n_0^{1/2}\kappa)^{-1}$. При этом СДУ (41) принимают вид:

$$\begin{aligned} d\alpha &= -i[-\mu\alpha + 2\kappa\alpha^2\beta - \kappa\alpha]dt + \alpha d\eta_1, \\ d\beta &= i[-\mu\beta + 2\kappa\alpha^2\beta - \kappa\beta]dt + \beta d\eta_2. \end{aligned}$$

Как и в случае динамики гармонического осциллятора (раздел 4.3), необходимости в переменной Ω нет. На рис. 3 приведен результат расчета корреляционной функции $\langle \hat{a}^+(t) \hat{a}(0) \rangle = \langle \beta(t) \alpha(0) + \overline{\alpha(t) \beta(0)} \rangle$ осциллятора Керра при начальном условии $\alpha(0) = \beta(0) = \sqrt{n_0}$, что соответствует начальному когерентному состоянию с заселенностью n_0 . В данном случае бралось значение $A = 5.25$. Усреднение производилось по 10^5 траекториям, с шагом по времени 2.5×10^{-5} . Моделирование системы СДУ (41) проводилось согласно схеме, описанной в разделе 5.3. Также на рис. 3 представлено сравнение с теоретической зависимостью, полученной моделированием уравнения (40) в усеченном базисе собственных состояний оператора числа частиц $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$. Видно полное согласие в пределах статистической погрешности.

6. Стохастические уравнения для одномерного однородного бозе-газа.

6.1. Уравнения во мнимом времени: большой ансамбль [22]. Теперь мы готовы рассмотреть бозе-газ с дельта-взаимодействием. Как известно, состояние квантовой системы в большом ансамбле при заданной температуре и химическом потенциале задается матрицей плотности [42]

$$\hat{\rho} = \exp[-(\hat{H} - \mu\hat{N})\tau] = \exp(-\hat{K}\tau), \tag{42}$$

где для одномерного однородного бозе-газа с гамильтонианом (5)

$$\hat{K} = \int dx \hat{\psi}^+(x) [-\partial_x^2 - \mu + \gamma \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x)] \hat{\psi}(x), \tag{43}$$

причем \hat{K} удовлетворяет уравнению

$$\partial_\tau \hat{\rho} = -\hat{K} \hat{\rho}, \tag{44}$$

где τ пробегает значения от 0 до \tilde{T}^{-1} . Величина \hat{K} иногда называется большим каноническим гамильтонианом [42], и мы будем следовать данному соглашению.

Как и в случае осциллятора Керра, в такой форме уравнение (44) не пригодно для моделирования. Дело в том, что начальное состояние при $\tilde{T}^{-1} \rightarrow 0$ соответствует бесконечно большим заселенностям орбиталей: $n_j(\tilde{T}^{-1})|_{1/\tilde{T} \rightarrow 0} = \frac{1}{\exp[(\epsilon_j - \mu)/\tilde{T}] - 1}|_{1/\tilde{T} \rightarrow 0} \rightarrow \infty$. Поскольку это соответствует бесконечно большому среднему $\langle \alpha_j \beta_j \rangle_\lambda$, то ясно, что это некорректный объект с точки зрения моделирования.

Как и в одномоновом приближении, данная проблема решается путем обобщения (42) на химические потенциалы, гладко зависящие от обратной температуры [22]. В этом случае аналогом уравнения Блоха для $\hat{\rho}$ будет $\partial_\tau \hat{\rho} = -\frac{\partial \hat{K}}{\partial \tau} \hat{\rho}$, при условии $[\partial_\tau \hat{K}, \hat{K}] = 0$, которое выполнено для \hat{K} (43). Тогда уравнение для $\hat{\rho}$ можно переписать в виде

$$\partial_\tau \hat{\rho} = [\mu_e(\tau) \hat{N} - \hat{H}] \hat{\rho}, \quad (45)$$

где μ_e дается соотношением (33). В качестве начального условия для $\hat{\rho}$ выберем

$$\hat{\rho}(0) = \exp[-\lambda \hat{N}], \quad (46)$$

где $\lambda = -\lim_{\tau \rightarrow 0} [\tau \mu(\tau)]$; начальная заселенность каждой моды согласно (35) уже конечна. Итак, при моделировании исходят из уравнения (45) с начальным условием (46). При этом, как и ранее, можно положить $\mu_e = \text{const}$, и для $\mu(\tau)$ и μ_e остается в силе соотношение (37). Далее, как было описано в начале раздела 5, производим дискретизацию интеграла в (43). Дискретный (решеточный) большой канонический гамильтониан имеет вид $\hat{k} = \sum_j \left[-\hat{a}_j^\dagger (T_{ji} + \mu_e) \hat{a}_i + \frac{\gamma}{\Delta x} \hat{a}_j^{\dagger 2} \hat{a}_j^2 \right]$, где T_{ji} — дискретный аналог второй производной. Фактически данный большой канонический гамильтониан соответствует системе осцилляторов Керра (с гамильтонианом (25)), рассмотренных выше, связанных оператором кинетической энергии T_{ji} . Это позволяет нам выписать соответствующую исправленную систему СДУ в форме Ито

$$\begin{aligned} d\alpha_j &= \left[\mu_e \alpha_j + T_{ji} \alpha_i - \frac{\gamma}{\Delta x} \alpha_j |\alpha_j \beta_j| \right] d\tau + i \alpha_j \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta x}} dW_j, \\ d\Omega &= \Omega \left[\left(\mu_e \beta_j \alpha_j + \beta_j T_{ji} \alpha_i - \frac{\gamma}{\Delta x} \alpha_j^2 \beta_j^2 \right) d\tau + i \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta x}} (\beta_j \alpha_j - |\beta_j \alpha_j|) dW_j \right], \end{aligned} \quad (47)$$

где dW_j — приращения винеровского процесса, $\langle dW_j \rangle = 0$, $\langle dW_i dW_j \rangle = d\tau \delta_{ij}$. Здесь, как и в случае осциллятора Керра, для устранения неустойчивости в каждое уравнение для α_j была добавлена своя калибровочная функция $\mathcal{G}_j = i \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta x}} (\alpha_j \beta_j - |\alpha_j \beta_j|)$.

Найдем $P^{(+)}$ -представление для начального условия (46). Поскольку операторы, относящиеся к разным узлам решетки, коммутируют между собой, операторная экспонента распадается на произведение экспонент от операторов на соответствующих узлах,

$$\hat{\rho}(0) = \prod_j \exp(-\lambda \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j). \quad (48)$$

Пусть N_{grid} — число узлов сетки. Используя соотношение (21), сопоставляем (48) начальное распределение для $\alpha_j(0)$, $\beta_j(0)$ в $P^{(+)}$ -представлении:

$$P(\Omega, \alpha, \beta; 0) = \left(\frac{e^\lambda}{\pi} \right)^{N_{\text{grid}}} \delta(\Omega - 1) \prod_{j=1}^{N_{\text{grid}}} \delta^2(\alpha_j - \beta_j^*) \exp\left(-\frac{|\alpha_j|^2}{n_0}\right). \quad (49)$$

Из формулы для средних значений наблюдаемых (15) видно, что постоянные коэффициенты в $P^{(+)}$ -представлении сокращаются, так что можем считать, что для каждой моды величины $(\alpha_j)_x$ и $(\alpha_j)_y$ распределены независимо по гауссову распределению с дисперсией $n_0/2$. Таким образом, процесс моделирования сводится к генерации достаточно большого набора (мы использовали 10^5 – 10^6 конфигураций) начальных условий $(\Omega = 1, \alpha_j(0), \beta_j(0))$ согласно распределению (49), далее для каждого начального условия решается система СДУ (47). Получается набор конфигураций $(\Omega(\tau), \alpha_j(\tau), \beta_j(\tau))|_{\tau=1/\tilde{T}}$, по которому в соответствии с (15) находятся средние значения наблюдаемых при температуре \tilde{T} и химическом потенциале μ .

6.2. Процедура существенной выборки [22]. К сожалению, при достаточно низких температурах (большие τ) только что описанная процедура моделирования неэффективна. Дело в том, что для устранения неустойчивости в уравнении, на основании неоднозначности представления (12) в стохастические

уравнения были добавлены калибровочные функции. В результате уравнение для Ω перестало быть детерминированным, в нем появились стохастические добавки $i \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta x}} (\beta_j \alpha_j - |\beta_j \alpha_j|) dW_j$. Поэтому при увеличении времени моделирования (как показало тестирование, при охлаждении до температуры квантового вырождения T_d) среднеквадратичный разброс $\langle \Omega^2 \rangle - \langle \Omega \rangle^2$ становится значительным. Поскольку Ω входит в формулу для среднего (14) как вес конфигурации и своим средним $\langle \Omega \rangle$ как знаменатель, то статистическая погрешность вычисления средних значений наблюдаемых становится при этом существенной. Поясним на примере идеального бозе-газа. Ему соответствует система ОДУ

$$\begin{cases} d\alpha_j = [\mu_e \alpha_j + T_{ji} \alpha_i] d\tau, \\ d\Omega = \Omega (\mu_e \beta_j \alpha_j + \beta_j T_{ji} \alpha_i) d\tau, \end{cases}$$

или в импульсном представлении

$$\begin{cases} d\tilde{\alpha}_j = [\mu_e \tilde{\alpha}_j - k_j^2 \tilde{\alpha}_j] d\tau, \\ d\Omega = \Omega (\mu_e \tilde{\beta}_j \tilde{\alpha}_j - k_j^2 \tilde{\beta}_j \tilde{\alpha}_j) d\tau. \end{cases}$$

Данная система имеет точное решение

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_j(\tau) &= \exp[\tau(\mu_e - k_j^2)] \tilde{\alpha}_j(0), \\ \Omega(\tau) &= \exp\left[\int_0^\tau d\tau' \exp(\tau'(\mu_e - k_j^2)) (\mu_e - k_j^2) \tilde{\beta}_j(0) \tilde{\alpha}_j(0)\right] \Omega(0) = \\ &= \exp\left[\left\{\exp(\tau(\mu_e - k_j^2)) - 1\right\} \tilde{\beta}_j(0) \tilde{\alpha}_j(0)\right] \Omega(0). \end{aligned}$$

В силу начального условия (49), при достаточно большой обратной температуре τ вес Ω будет вести себя как случайная величина $\Omega(\tau) \propto \exp(-\xi)$, где ξ является случайной величиной с дисперсией $\sigma^2 = \frac{1}{2} N_{\text{grid}} n_0^2 = \frac{N^2}{2N_{\text{grid}}}$ (где N — полное число частиц) и распределенной по закону, близкому к гауссову. Можно показать [22], что в этом случае для получения только одной значащей цифры нужно усреднить не менее чем по $S_{\text{min}} = 100 [\exp(\sigma^2) - 1]$ траекториям. Для $\sigma^2 = 10$ получаем $S_{\text{min}} \approx 2 \times 10^6$. Итак, для достижения необходимой статистической точности надо, чтобы $\text{var}[\text{Re}(\log \Omega)] \ll 10$. Видно, что это условие может быть легко нарушено при достаточно большом числе частиц идеального бозе-газа.

Как показано в [22], данную проблему можно решить, опять-таки прибегнув к неоднозначности $P^{(+)}$ -представления. Действительно, из приведенного выше видно, что уравнения (47) таковы, что для начального условия (49) они дают для конечного состояния $\hat{\rho}(\tilde{T}^{-1})$ представление $P(\Omega, \alpha, \beta; \tilde{T}^{-1})$ со значительной дисперсией по Ω . Однако, как следует из (13), для состояния $\hat{\rho}(\tilde{T}^{-1})$ также существует представление $P_T(\alpha, \beta) \delta^2(\Omega - 1)$ с нулевой дисперсией по Ω . Тогда, если бы мы нашли начальное условие $P_0^{(I)}(\Omega, \alpha, \beta)$ для (47), приводящее при $\tau = \tilde{T}^{-1}$ к распределению $P_T(\alpha, \beta) \delta^2(\Omega - 1)$, проблема большой дисперсии веса была бы решена. Строго говоря, начального условия $P_0^{(I)}(\Omega, \alpha, \beta)$ не существует, поскольку в силу стохастичности уравнений для Ω конечное состояние должно иметь отличный от нуля разброс по Ω . Более того, на практике мы не знаем конечной функции $P_T(\alpha, \beta)$ — наша задача как раз найти ее. Тем не менее и $P_T(\alpha, \beta)$, и $P_0^{(I)}(\Omega, \alpha, \beta)$ можно оценить приближенно, что, как показало тестирование, дает значительный эффект в режиме вырождения.

Состояние системы при $\tau = \tilde{T}^{-1}$ аппроксимируется в виде некоррелированных одночастичных орбиталей с определенным импульсом, с заселенностями $n(k)$, вычисленными из точного решения Янга и Янга [9] (см. ниже):

$$P_T^{(\text{est})}(\alpha, \beta) = \text{const} \times \prod_{j=1}^M \delta^2(\alpha_j - \beta_j^*) \exp\left(-\frac{|\alpha_j|^2}{n(k_j)}\right). \quad (50)$$

Пренебрегая в уравнениях (47) шумом и нелинейным членом, описывающим взаимодействие, решим обратную задачу для уравнений относительно α_j , найдя начальное условие $P_0^{(I)}(\alpha, \beta)$ для (50):

$$P_0^{(I)} = \text{const} \times \prod_{j=1}^M \delta^2(\alpha_j - \beta_j^*) \exp\left(-\frac{|\alpha_j|^2}{n^{(0)}(k_j)}\right), \quad \text{где} \quad (51)$$

$$n^{(0)}(k_j) = n(k_j) \exp(-\lambda - \mu(\beta_j) \beta_j - k_j^2 \beta_j). \quad (52)$$

Здесь мы использовали тот факт, что траектории переменных α_j полностью определяют эволюцию Ω , но не наоборот. Поэтому мы решали обратную задачу только для α_j . Итак, поскольку мы полагаем, что $P_0^{(I)}$ приводит к распределению, обладающему малой дисперсией по Ω , и приближенно описывающим зависимость точного распределения по (α_j, β_j) , мы используем его, преобразовывая начальное условие (49). Действительно, записывая уравнение для Ω в (47) как $\partial_\tau \Omega = -H(\alpha(\tau), \beta(\tau))$, имеем в произвольный момент τ :

$$\hat{\rho}(\tau) = \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \exp\left(-\int_0^\tau H(\alpha(\tau), \beta(\tau)) d\tau + \log \Omega_0\right) P(\alpha, \beta; \tau) \hat{\Lambda}(\alpha, \beta).$$

Значит, мы можем заменить $P_0(\alpha, \beta)$ на $P_0^{(I)}(\alpha, \beta)$, заменив Ω_0 на $\Omega'_0(\alpha, \beta) = \Omega_0 \times P_0(\alpha, \beta) / P_0^{(I)}(\alpha, \beta)$:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(\tau) &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \exp\left(-\int_0^\tau H(\alpha(\tau), \beta(\tau)) d\tau + \log \Omega_0\right) \frac{P_0(\alpha, \beta)}{P_0^{(I)}(\alpha, \beta)} P^{(I)}(\alpha, \beta; \tau) \hat{\Lambda}(\alpha, \beta) = \\ &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \exp\left(-\int_0^\tau H(\alpha(\tau), \beta(\tau)) d\tau + \log\left(\Omega_0 \frac{P_0(\alpha, \beta)}{P_0^{(I)}(\alpha, \beta)}\right)\right) P^{(I)}(\alpha, \beta; \tau) \hat{\Lambda}(\alpha, \beta) = \\ &= \int d^2\alpha d^2\beta d^2\Omega \exp\left(-\int_0^\tau H(\alpha(\tau), \beta(\tau)) d\tau + \log\left(\Omega'_0(\alpha, \beta)\right)\right) P^{(I)}(\alpha, \beta; \tau) \hat{\Lambda}(\alpha, \beta). \end{aligned}$$

Итак, новые начальные условия для уравнений (47) есть (51)–(52) и

$$\Omega(\alpha, \beta; 0) = \Omega'_0(\alpha, \beta) = \exp\left\{\sum_j |\alpha_j|^2 \left(\frac{1}{n^{(0)}(k_j)} - \frac{1}{n_0}\right)\right\},$$

что и составляет суть метода существенной выборки: оптимизация выборки начальных условий под распределение в момент времени τ_f .

6.3. Численная схема решения стохастических дифференциальных уравнений. Для решения уравнений (47) применялась неявная схема. Поэтому данная система СДУ переводилась в форму Стратоновича [24]:

$$\begin{aligned} d\alpha_j &= \left[\mu_e \alpha_j + T_{ji} \alpha_i - \frac{\gamma}{\Delta x} \alpha_j |\alpha_j \beta_j| + \frac{1}{2} \frac{\gamma}{\Delta x} \alpha_j\right] d\tau + i \alpha_j \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta x}} dW_j, \\ d\Omega &= \Omega \left[\left(\mu_e \beta_j \alpha_j + \beta_j T_{ji} \alpha_i + \frac{1}{2} \frac{\gamma}{\Delta x} |\alpha_j \beta_j| (|\alpha_j \beta_j| - 2\alpha_j \beta_j)\right) d\tau + i \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta x}} (\beta_j \alpha_j - |\beta_j \alpha_j|) dW_j \right], \end{aligned} \quad (53)$$

и далее решалась согласно алгоритму, описанному для осциллятора Керра (см. раздел 5.3).

Единственный нюанс связан с оператором кинетической энергии. Поскольку оператор кинетической энергии T_{ji} диагонален в импульсном представлении, введем сетку в импульсном пространстве $[-k_{\max}, k_{\max} - \Delta k]$, $k_j = \Delta k \times [-N_{\text{grid}}/2 + j]$, $\Delta k = \frac{\pi}{x_{\max}}$, $j = 0, \dots, N_{\text{grid}} - 1$. В данном случае координатное и импульсное представления связаны парой дискретных преобразований Фурье

$$\begin{aligned} \tilde{f}(k_l) &= S^{-1} \Delta x \sum_{j=1}^{N_{\text{grid}}} \exp\left[-\frac{2\pi i}{N_{\text{grid}}} (l-1)(j-1)\right] S f(x_j), \\ f(x_j) &= S^{-1} \frac{1}{2x_{\max}} \sum_{l=1}^{N_{\text{grid}}} \exp\left[\frac{2\pi i}{N_{\text{grid}}} (j-1)(l-1)\right] S \tilde{f}(k_l), \end{aligned} \quad (54)$$

где S является оператором перестановки местами двух равных половинок вектора длиной N_{grid} , а $S f(x_j) = (f(x_{N_{\text{grid}}/2+1}), \dots, f(x_{N_{\text{grid}}}), f(x_1), \dots, f(x_{N_{\text{grid}}/2}))$. Тогда в импульсном представлении оператор T_{ji} действует как $-k_j^2 \times \delta_{ji}$, и его действие вычислялось по формуле $T_{ji} \alpha_i = F^{-1}\{-k_i^2 F[\alpha_p]\}_j$.

6.4. Вычисление средних значений наблюдаемых. Наблюдаемые, которые вычислялись в данной работе, — это удельная энергия E/N и первые три корреляционные функции. Они определяются следующим образом [23].

Удельная энергия: $E(\beta)/N = \left\{ \sum_j \langle \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \rangle \right\}^{-1} \sum_{j,i} \left[-\langle \hat{a}_j^+ T_{ji} \hat{a}_i \rangle + \frac{\gamma}{\Delta x} \langle \hat{a}_j^{+2} \hat{a}_j^2 \rangle \right]$ — энергия системы, приходящаяся на одну частицу при данной температуре T . Действие оператора T_{ji} вычислялось при помощи дискретного преобразования Фурье (54).

Корреляционная функция первого порядка:

$$g^{(1)}(x_j) = \frac{1}{N_{\text{grid}}} \sum_i \frac{\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_{i+j} \rangle}{\sqrt{\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_{i+j} \rangle}}. \quad (55)$$

Данная корреляционная функция зависит от фазы волновой функции. Ее модуль $|g^{(1)}|$ определяет степень пространственной когерентности первого порядка, а фаза дает относительную фазу волновой функции на расстояниях x_j . Для трансляционно-инвариантной системы (55) есть одночастичная матрица плотности, нормированная на единичную концентрацию частиц. Поведение $g^{(1)}(x)$ при $x \rightarrow \infty$ может быть использовано как критерий наличия бозе-конденсата: $g^{(1)}(x) \rightarrow g_0^{(1)} \neq 0$ означает наличие макроскопической когерентности, т.е. бозе-конденсации [19, 43]. В настоящей работе изучается одномерный случай, когда конденсация может быть лишь в потенциальной яме. Поэтому, поскольку в исследуемой системе нет внешнего потенциала и выбран достаточно большой размер периодической ячейки x_{max} для устранения краевых эффектов, должно быть $g_0^{(1)}(x_{\text{max}}) \approx 0$.

Корреляционная функция второго порядка: $g^{(2)}(x_j) = \frac{1}{N_{\text{grid}}} \sum_i \frac{\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_i \hat{a}_{i+j} \rangle}{\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_{i+j} \rangle}$ определяет плотность вероятности найти две частицы на расстоянии x_j друг от друга, т.е. аналог трехмерной радиальной функции распределения. При $x \gg 1$ состояния частиц становятся нескоррелированными, числитель факторизуется, и $g^{(2)}(x) \rightarrow 1$ при $x \rightarrow \infty$. Значение $g^{(2)}(0)$ определяет величину флуктуаций концентрации.

Корреляционная функция третьего порядка: $g^{(3)}(x_j) = \frac{1}{N_{\text{grid}}} \sum_i \frac{\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_{i-j}^+ \hat{a}_i \hat{a}_{i+j} \hat{a}_{i-j} \rangle}{\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_{i+j} \rangle \langle \hat{a}_{i-j}^+ \hat{a}_{i-j} \rangle}$ определяет плотность вероятности найти три частицы в положении с координатами $(x - x_j, x, x + x_j)$. Аналогично предыдущей корреляционной функции, $g^{(3)}(x) \rightarrow 1$ при $x \rightarrow \infty$. Однако в силу конечности периодической ячейки, при $x_j \gtrsim x_{\text{max}}/2$ две из трех частиц начнут сближаться, а одна из частиц, будучи в стороне, окажется нескоррелированной с ними. Поэтому при $x_j \propto x_{\text{max}}$ будет наблюдаться краевой эффект: $g^{(3)}(x_j) \approx g^{(2)}(x_{\text{max}} - 2|x_j|)$.

В силу однородности системы для улучшения статистики во всех формулах стоит суммирование по всем N_{grid} узлам решетки. Таким образом, в процессе моделирования достаточно накапливать средние $\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_{i+j} \rangle$, $\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_i \hat{a}_{i+j} \rangle$ и $\langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_{i+j}^+ \hat{a}_{i-j}^+ \hat{a}_i \hat{a}_{i+j} \hat{a}_{i-j} \rangle$, которые выражаются через средние по Ω , α , β согласно (15).

6.5. Результаты моделирования бозе-газа при конечной температуре. Нами было проведено моделирование бозе-газа с гамильтонианом (5) в двух режимах согласно классификации [44], при различных значениях параметров, описанных в разделе 3.

6.5.1. Точное решение Янга и Янга. В работе [9] было найдено точное решение задачи об однородном одномерном бозе-газе с дельта-отталкиванием в большом каноническом ансамбле. Фактически данное решение дает численный алгоритм для вычисления плотности состояний $\rho(k)$ и спектральной плотности $\epsilon(k)$. Для гамильтониана (5) алгоритм сводится к решению методом итераций пары интегральных уравнений

$$\begin{aligned} \epsilon(k) &= -\mu + k^2 - \frac{\gamma}{2\pi\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\ln[1 + \exp(-\epsilon(q)\tau)]}{(\gamma/2)^2 + (k-q)^2}, \\ 2\pi\rho(k) \{1 + \exp(\epsilon(k)\tau)\} &= 1 + \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho(q)}{(\gamma/2)^2 + (k-q)^2}. \end{aligned} \quad (56)$$

В результате можно вычислить плотность числа частиц

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(k) dk, \quad (57)$$

которая в выбранных нами единицах равна единице и используется в качестве условия для настройки химического потенциала $\mu = \mu(\gamma, \tilde{T})$ при заданных γ и \tilde{T} . Удельная энергия вычисляется как

$$E/N = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(k) k^2 dk. \quad (58)$$

Удельная свободная энергия вычисляется из соотношения

$$f = F/N = \mu - (2\pi\rho\tau)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln[1 + \exp(-\epsilon(k)\tau)] dk. \quad (59)$$

Можно также вычислить и давление. Пожалуй, это все величины, которые возможно найти из решения Янга и Янга. Корреляционные функции оно вычислять не позволяет. Только сравнительно недавно в работе [44] был предложен способ численного расчета второй корреляционной функции в нуле, используя (59):

$$g^{(2)}(0) = \frac{2m}{\hbar^2\rho^2} \left(\frac{\partial f}{\partial \gamma} \right)_{\rho, \tau}. \quad (60)$$

Для вычисления производной в данном выражении нами использовалась компактная разностная схема четвертого порядка $\partial_\gamma f(x) \approx \frac{f(x + \Delta\gamma/2) - f(x - \Delta\gamma/2)}{\Delta\gamma}$.

Плотность $\rho(k)$ использовалась в методе существенной выборки из раздела 6.2 в качестве заселенности мод состояния при $\tau = 1/\tilde{T}$, $n(k_j) = 2\pi\rho(k_j)$. Удельная энергия (58) и локальная корреляционная функция (60) использовались для тестирования наших результатов.

На практике система (56) решалась следующим образом. Задавался отрезок $[-x_{\max}, x_{\max} - \Delta x]$ и сетка с числом узлов N_{grid} , $x_j = \Delta x \times [-N_{\text{grid}}/2 + j]$, $\Delta x = \frac{2x_{\max}}{N_{\text{grid}}}$, $j = 0, \dots, N_{\text{grid}} - 1$. Ей соответствует сетка в импульсном пространстве $k_j = \Delta k \times [-N_{\text{grid}}/2 + j]$, $\Delta k = \frac{2\pi}{\Delta x N_{\text{grid}}}$. Интегралы заменялись простейшей квадратурной формулой прямоугольников. Фигурирующая в (56) свертка вычислялась при помощи дискретного преобразования Фурье. Получающаяся система решалась методом итераций, сначала первое уравнение, затем при найденном $\epsilon(k)$ второе уравнение. Причем если, например, $\epsilon^{(j)}(k)$ и $\rho^{(j)}(k)$ — решения для итерации номер j , то в качестве условия завершения использовалось $\int dk |\epsilon^{(j)}(k) - \epsilon^{(j-1)}(k)| < \frac{\sigma}{\tau}$, $\int dk |\rho^{(j)}(k) - \rho^{(j-1)}(k)| < \sigma$, где бралось $\sigma = 10^{-8}$. Кроме того, поскольку в приведенных единицах плотность $\rho = 1$, то производилась настройка химического потенциала методом деления пополам. Здесь в качестве условия завершения использовалось $\left| \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(k) dk - 1 \right| < \sigma$,

$|\mu^< - \mu^>| < \sigma$, где $\mu^<$ и $\mu^>$ — два значения химического потенциала, согласно методу делению пополам. На решение требовалось до 400 итераций и занимало не более нескольких десятков секунд. Мы не утверждаем, что использовали оптимальное значение σ . Считалось, что сходимость по параметрам N_{grid} , x_{\max} и $\Delta\gamma$ достигнута, если вычисляемые величины f , E/N , μ , и $g^{(2)}$ не меняются в пределах заданной погрешности при увеличении по отдельности N_{grid} и x_{\max} в 2, ..., 16 раз и увеличении $\Delta\gamma$ в 10 и 100 раз.

В данной работе мы используем решение Янга и Янга для вычисления заселенностей импульсных орбиталей $n(k)$ в методе существенной выборки (раздел 6.2), и с целью быстрой подстройки химического потенциала для удовлетворения условию $\rho(\tilde{T}) = 1$. Кроме того, в целях тестирования сравнивались значения ρ , E/N и $g^{(2)}(0)$, вычисленные из соотношений (56)–(60), со значениями, полученными методом $P^{(+)}$ -представления. Результаты сравнения представлены в табл. 1. Прочерки (–) в ячейках таблицы означают, что данные величины использовались как входные в данном методе либо не вычислялись.

6.5.2. Первая корреляционная функция для идеального бозе-газа. Известно, что для идеального бозе-газа существует аналитическое выражение для первой корреляционной функции [42]:

Таблица 1

Сравнение значений интенсивных переменных, вычисленных при помощи соотношений (56)–(60) и при помощи метода $P^{(+)}$ -представления; бозе-газ в некогерентном классическом режиме, $\tilde{T} = 4\pi 1000$, $\gamma = 5$

Наименование величины	Значение согласно Y&Y	Значение согласно методу $P^{(+)}$
F/N	$(-5.6099133 \pm 0.0000001) \times 10^4$	–
μ	$(-4.36621121 \pm 0.00000003) \times 10^4$	–
E/N	$(6.2232353 \pm 0.00000001) \times 10^3$	$(6.29 \pm 0.11) \times 10^3$
$g^{(2)}(0)$	1.8897 ± 0.0001	1.888 ± 0.018
$\rho(\tilde{T})$	1	1.0001 ± 0.0042

$$\langle \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x') \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp[ik(x-x')] \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_{id}\right)/T\right] - 1},$$

$$g^{(1)}(x-x') = \frac{\langle \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x') \rangle}{\langle \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) \rangle}, \tag{61}$$

в приведенных единицах $g^{(1)}(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp[ik(x-x')] \frac{1}{\exp\left[(k^2 - \mu_{id})/\tilde{T}\right] - 1}.$

В данной работе мы используем выражение (61) для тестирования первой корреляционной функции, вычисленной методом $P^{(+)}$ -представления. При этом температура \tilde{T} берется равной температуре взаимодействующего бозе-газа, а значение химического потенциала μ_{id} подстраивается таким образом, чтобы $g^{(1)}(0) = 1$. При этом, как следует из результатов, приведенных ниже, всегда получается полное согласие в пределах статистического разброса с результатами $P^{(+)}$ -представления. Данный факт связан с тем, что найденное значение μ_{id} аппроксимирует значение собственной энергии, $\mu_{id} \approx \mu + \sum (0, 0)$, где μ — химический потенциал бозе-газа со взаимодействием, $\sum (k, \omega_n)$ — собственная энергия в зависимости от импульса k и мадубаровской частоты $\omega_n = 2\pi n \tilde{T}$ [15, 42].

6.5.3. Некогерентный классический режим, $\tilde{T} \gtrsim \max\{1, \gamma^2\}$. В данном режиме тепловая длина волны де Бройля меньше всех остальных характерных масштабов и определяет поведение частиц на малых расстояниях. На рис. 4а–4с приведены первые три корреляционные функции. Первая корреляционная функция $g^{(1)}(x)$ сравнивалась с корреляционной функцией для идеального газа $g_{id}^{(1)}(x)$ при той же обратной приведенной температуре τ_f и плотности ρ (рис. 4а). В используемых нами единицах $\rho = 1$. При этом поскольку при фиксированной плотности химический потенциал является функцией от температуры $\mu = \mu(\tau)$, использовалась процедура подстройки химического потенциала идеального газа под заданное значение плотности ρ . Вторая корреляционная функция сравнивалась с аналитическим выражением, выведенным в работе [45] в первом порядке теории возмущений по параметру γ

$$g^{(2)}(x) = 1 + e^{-n^2 x^2 / (2\tau)} - \gamma \sqrt{2\pi\tau} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{n^2 x^2}{2\tau}}\right). \tag{62}$$

Также на рис. 4б значение $g^{(2)}(0)$ сравнивалось с вычислением согласно (60). Оно меньше значения $g_{id}^{(2)}(0) = 2$ для идеального газа вследствие наличия отталкивания. При этом для решения интегральных уравнений (56) использовалась сетка по координате x (Фурье-сопряженная координате k) с числом узлов $N_{\text{grid}} = 1024$ и диапазоном $[-7.8 \times 10^{-2}, 7.8 \times 10^{-2}]$. Для вычисления производной в (60) использовалось значение $\Delta\gamma = 10^{-2}$. На рис. 4с приведен график третьей корреляционной функции. Для нее не существует теоретических выражений. Локальный максимум в окрестности $x/\lambda_T = 2.5$ есть влияние границы

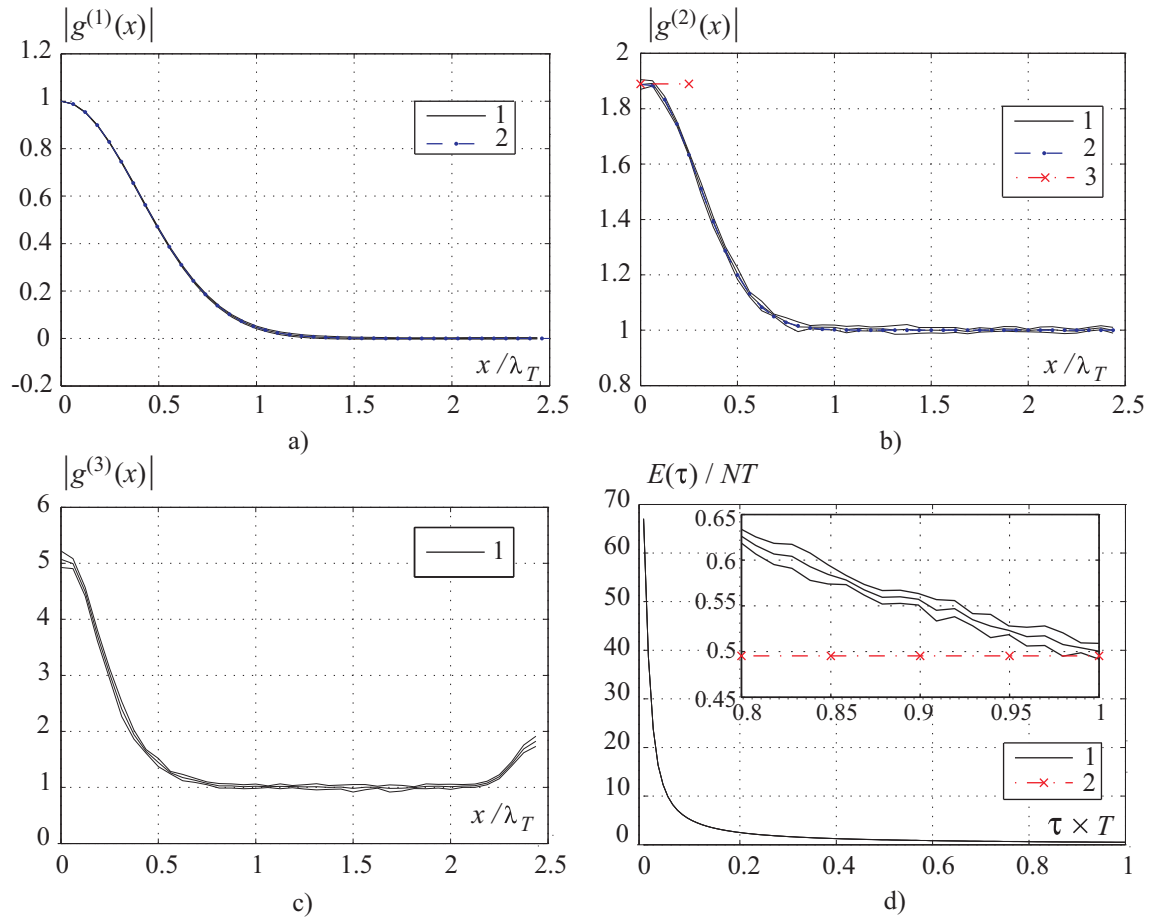


Рис. 4. Сравнение результатов вычислений методом $P^{(+)}$ -представления с другими численно-аналитическими оценками для бозе-газа в некогерентном классическом режиме при $T = 4\pi 1000$, $\gamma = 5$. Первая корреляционная функция (а): линия 1 — метод $P^{(+)}$, линия 2 — синяя штрихованная линия — первая корреляционная функция для идеального бозе-газа при тех же T и $\rho = 1$. Вторая корреляционная функция (б): линия 1 — метод $P^{(+)}$, линия 2 — синяя штрихованная линия — асимптотическое приближение (62), линия 3 — красная штрихованная линия — значение $g^{(2)}(0)$ в нуле согласно (60). Третья корреляционная функция (с): линия 1 — метод $P^{(+)}$. Удельная энергия бозе-газа в зависимости от мнимого времени $\tau \times \tilde{T}$ (d): линия 1 — метод $P^{(+)}$, линия 2 — значение $E(\tilde{T})/(N\tilde{T}) = 0.4952$ из решения Y&Y (58). Видно, что при $\tau = \tilde{T}$ результаты согласуются в пределах статистического разброса. На всех рисунках три сплошные черные линии (не всегда различимы на графиках) — результат вычисления методом $P^{(+)}$ -представления с границами в три стандартных отклонения в обе стороны

периодической ячейки, как описано в 6.4. Подобные пики будут и во всех рассматриваемых далее режимах. На рис. 4d представлен график удельной энергии E/N бозе-газа в зависимости от мнимого времени τ , по которому происходит моделирование системы СДУ (53).

Вычисления методом $P^{(+)}$ производились с шагом по мнимому времени τ , $\Delta\tau = 1,25 \times 10^{-4}$. Использовалась сетка с числом узлов $N_{\text{grid}} = 80$, размер периодической ячейки $x_{\text{max}} = 2.5$. Вычисление среднего $\langle O \rangle$ проводилось по ансамблю из $S = 10^5$ траекторий. Статистическая ошибка среднего значения наблюдаемого $\langle O \rangle$ вычислялась в соответствии с описанием в разделе 5.3. На компьютере с процессором Intel Core 2 Quad CPU Q9450 для выполнения расчетов потребовалось 12 часов (использовалось одно ядро).

6.5.4. Фермионизованный невырожденный газ, $1 \ll \tilde{T} \ll \gamma^2$. В данном режиме газ не является вырожденным, но при этом одномерная длина рассеяния a_{1D} гораздо меньше тепловой длины волны де Бройля λ_T , так что наблюдается режим высокотемпературной фермионизации. На рис. 5a–5d приведены первые три корреляционные функции и зависимость удельной энергии системы в процессе спуска по τ . Первая корреляционная функция, как и выше, прекрасно согласуется с корреляционной функцией для идеального бозе-газа. Значение $g^{(2)}(0)$ полностью согласуется с вычислением по формуле (60). Вторая корреляционная функция изменила свой характер по сравнению с предыдущими режимами. Теперь $g^{(2)}(0)$

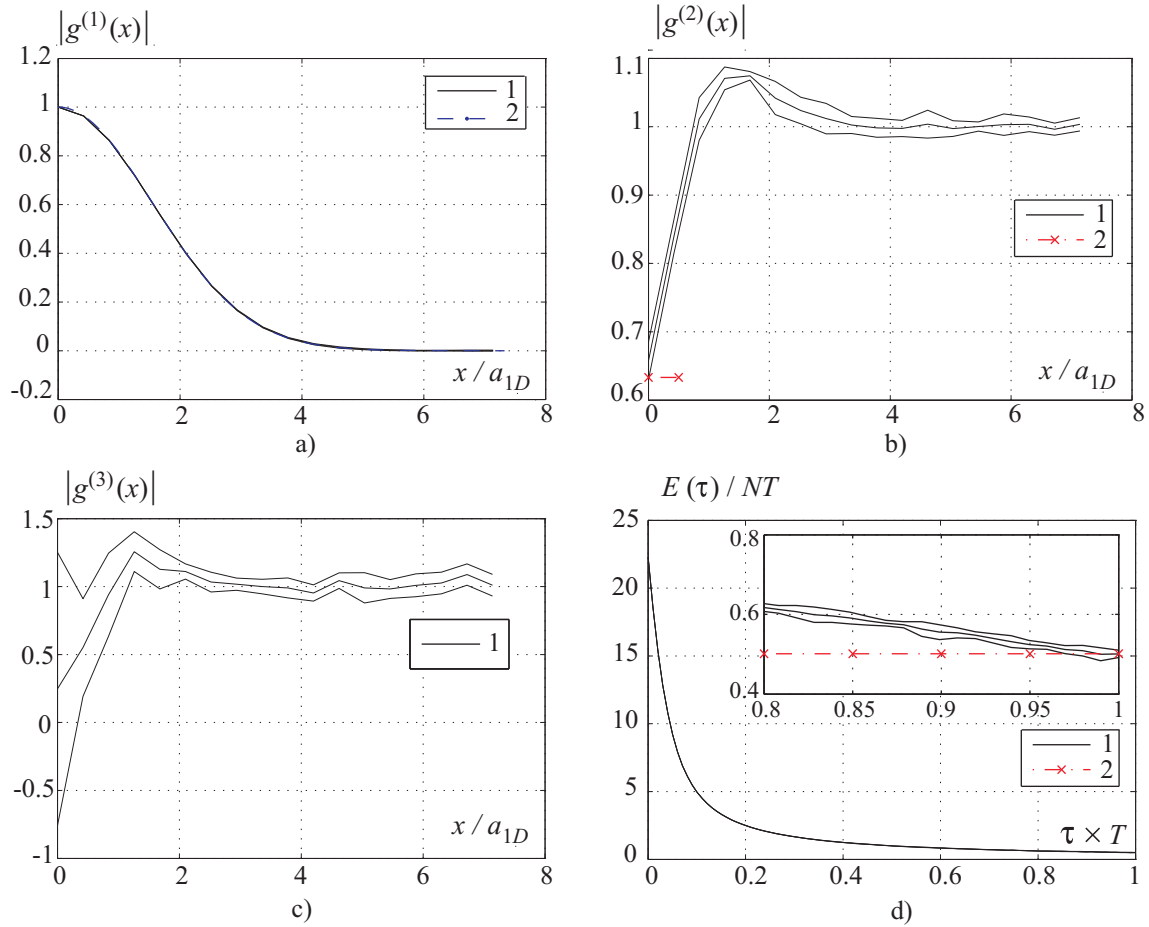


Рис. 5. Сравнение результатов вычислений методом $P^{(+)}$ -представления с другими численно-аналитическими оценками для бозе-газа в некогерентном классическом режиме при $\tilde{T} = 4\pi 6000$, $\gamma = 300$. Первая корреляционная функция (а): линия 1 — метод $P^{(+)}$, линия 2 — синяя штрихованная линия — первая корреляционная функция для идеального бозе-газа при тех же T и $\rho = 1$. Вторая корреляционная функция (б): линия 1 — метод $P^{(+)}$, линия 2 — красная штрихованная линия — значение $g^{(2)}(0)$ в нуле согласно (60). Третья корреляционная функция (с): линия 1 — метод $P^{(+)}$. Удельная энергия бозе-газа в зависимости от мнимого времени $\tau \times \tilde{T}$ (d): линия 1 — метод $P^{(+)}$, линия 2 — значение $E(\tilde{T})/(N\tilde{T}) = 0.5013$ из решения Y&Y (58). Видно, что при $\tau = \tilde{T}$ результаты согласуются в пределах статистического разброса. На всех рисунках три сплошные черные линии (не всегда различимы на графиках) — результат вычисления методом $P^{(+)}$ -представления с границами в три стандартных отклонения в обе стороны

является минимумом, максимум располагается на некотором расстоянии, что объясняется сильным расталкиванием частиц и возникающей тенденцией группироваться на определенном расстоянии друг от друга.

Для решения интегральных уравнений (56) использовалась сетка по координате x с числом узлов $N_{\text{grid}} = 288$ и диапазоном $[-0.049, 0.049]$. Для вычисления производной в (60) в компактной разностной схеме полагалось $\Delta\gamma = 10^{-1}$. В табл. 2 приведено сравнение вычисленных значений интенсивных величин. Прочерки (–) в ячейках таблицы означают, что данные величины использовались как входные в данном методе либо не вычислялись. Вычисления методом $P^{(+)}$ -представления производились с шагом по мнимому времени τ , $\Delta\tau = 1,25 \times 10^{-4}$. Использовалась сетка с числом узлов 36, размер периодической ячейки $x_{\text{max}} = 7.56$. Вычисление среднего $\langle O \rangle$ проводилось по ансамблю из $S = 10^5$ траекторий. На компьютере с процессором Intel Core 2 Quad CPU Q9450 для выполнения расчетов потребовалось два дня (использовалось одно ядро).

6.6. Уравнения движения в реальном времени: динамика и тестовые расчеты [23]. Эволюция квантовой системы в действительном времени дается уравнением Неймана [37] $i\hbar\partial_t\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$, где

Таблица 2

Сравнение значений интенсивных переменных, вычисленных при помощи соотношений (56)–(60) и при помощи метода $P^{(+)}$ -представления; бозе-газ в фермионизованном невырожденном режиме, $\tilde{T} = 4\pi 6000$, $\gamma = 300$

Наименование величины	Значение согласно Y&Y	Значение согласно методу $P^{(+)}$
F/N	$(-4.033611 \pm 0.000001) \times 10^5$	–
μ	$(-3.279619 \pm 0.000002) \times 10^5$	–
E/N	$(3.77947083 \pm 0.00000001) \times 10^4$	$(3.78 \pm 0.69) \times 10^4$
$g^{(2)}(0)$	0.6333 ± 0.0001	0.658 ± 0.028
$\rho(\tilde{T})$	1	1.0031 ± 0.0027

\hat{H} дается (4). Как и ранее, подставляя сюда разложение (12), используя операторные соответствия (17) и интегрируя по частям, предполагая достаточно быстрое убывание на бесконечности $P^{(+)}$ -функции, получим стохастические уравнения Ито:

$$\begin{aligned} d\alpha_j &= \left[-\frac{\hbar}{2mi} T_{jl} \alpha_l + \frac{g}{i\hbar\Delta x} \alpha_j^2 \beta_j \right] dt + \alpha_j \sqrt{\frac{g}{\Delta x i\hbar}} dW_j, \\ d\beta_j &= \left[\frac{\hbar}{2mi} T_{jl} \beta_l - \frac{g}{i\hbar\Delta x} \beta_j^2 \alpha_j \right] dt + \beta_j \sqrt{-\frac{g}{\Delta x i\hbar}} d\tilde{W}_j, \end{aligned}$$

где приращения винеровского процесса dW_j и $d\tilde{W}_j$ за время dt являются гауссовыми случайными величинами, $\langle dW_j dW_l \rangle = \delta_{jl} dt$, $\langle d\tilde{W}_j d\tilde{W}_l \rangle = \delta_{jl} dt$, $\langle dW_j d\tilde{W}_l \rangle = 0$. Выражая длину в единицах корреляционного радиуса $\xi = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2m\rho g}}$ и время в единицах времени корреляции $t_\xi = \frac{\hbar}{2\rho g}$, обезразмериваем уравнения:

$$\begin{aligned} d\alpha_j &= \left[-\frac{1}{2i} T_{jl} \alpha_l + \frac{1}{2i\rho\Delta x} \alpha_j^2 \beta_j \right] dt + \alpha_j \sqrt{\frac{1}{2i\rho\Delta x}} dW_j, \\ d\beta_j &= \left[\frac{1}{2i} T_{jl} \beta_l - \frac{1}{2i\rho\Delta x} \beta_j^2 \alpha_j \right] dt + \beta_j \sqrt{-\frac{1}{2i\rho\Delta x}} d\tilde{W}_j. \end{aligned}$$

Как было описано выше (в разделе 5.4), данные уравнения неустойчивы, вследствие того, что с определенного момента времени t^* $P^{(+)}$ -функция начинает убывать на бесконечности по степенному закону, и мы не можем пренебречь граничным членом при интегрировании по частям. Однако вплоть до момента времени t^* интегрирование по частям приемлемо, и моделирование дает корректные результаты [46]. Поэтому мы для целей данной работы не стали применять калибровочные функции для устранения неустойчивости [22, 47], но ограничились коротковременными вычислениями. В процессе моделирования момент времени t^* определялся как момент времени, в который траектории совершают резкие выбросы в фазовом пространстве (spikes).

Записывая данные уравнения в форме Стратоновича,

$$\begin{aligned} d\alpha_j &= \left[-\frac{1}{2i} T_{jl} \alpha_l + \frac{1}{2i\rho\Delta x} \alpha_j^2 \beta_j - \frac{1}{4i\rho\Delta x} \alpha_j \right] dt + \alpha_j \sqrt{\frac{1}{2i\rho\Delta x}} dW_j, \\ d\beta_j &= \left[\frac{1}{2i} T_{jl} \beta_l - \frac{1}{2i\rho\Delta x} \beta_j^2 \alpha_j + \frac{1}{4i\rho\Delta x} \beta_j \right] dt + \beta_j \sqrt{-\frac{1}{2i\rho\Delta x}} d\tilde{W}_j, \end{aligned} \quad (63)$$

мы можем применить неявную схему интегрирования, описанную в разделе 6.3. Нами были повторены результаты работы [23] для динамики первых трех корреляционных функций однородного бозе-газа. Начальное состояние газа задавалось как когерентная волновая функция

$$\Psi(x; t=0) = [\exp(N)]^{-1/2} \exp \left[\sqrt{\rho} \sum_{j=1}^{N_{\text{grid}}} \hat{a}_j^+ \right] |\text{vac}\rangle$$

с концентрацией частиц $\rho = 1/\xi$. Дискретизованные уравнения (63) задавались на решетке из 50 узлов, равноотстоящих на $\Delta x = \xi/2$. При этом полное число частиц $N = \rho N_{\text{grid}} \Delta x = 25$. На рис. 6а–6с показана эволюция во времени первых трех корреляционных функций, определенных согласно соотношениям раздела 6.4.

Первая корреляционная функция на рис. 6а показывает спад во времени, что объясняется влиянием взаимодействия: оно приводит к квантовым флуктуациям, нарушающим когерентность волновой функции. Из графика второй корреляционной функции на рис. 6б видно, что частицы начинают разбегаться, им не выгодно находиться в одной точке пространства; одновременно возникают и разбегаются в стороны корреляционные волны. На графике третьей корреляционной функции рис. 6с также отражена тенденция отталкивания троек частиц друг от друга; намечается некоторое коллективное движение в виде волн. Кроме того, согласно сказанному в разделе 6.4, вблизи границы интервала виден еще один минимум, повторяющий форму второй корреляционной функции.

7. Заключение. В данной работе мы постарались максимально полно (не превышая нормативный объем статьи) изложить метод стохастического $P^{(+)}$ -представления для моделирования динамических свойств квантовых систем многих частиц со взаимодействием, иллюстрируя каждый этап изложения вычислением для конкретной системы. Вычислительные возможности данного метода были протестированы путем расчета пространственных корреляционных функций для модели одномерного бозе-газа с отталкивающим парным дельта-потенциалом.

В случае термодинамического равновесия оказалось, что необходимо использовать метод существенной выборки из распределения, соответствующего искомому состоянию, путем использования аппроксимации последнего в виде некоррелированных импульсных орбиталей, заселенных согласно решению Янга и Янга [9]. При увеличении параметра взаимодействия с наступлением режима фермионизации наблюдалось увеличение статистического разброса результатов вычисления корреляционных функций. Это можно объяснить тем, что в режиме фермионизации состояние бозе-газа сильно отличается от когерентного, и поэтому разложение (12) имеет большую дисперсию.

Для случая динамической эволюции из начального когерентного состояния мы проиллюстрировали данный метод в варианте без исправления неустойчивости. В таком варианте метод, по сути, является коротковременным, позволившим произвести моделирование без существенного статистического разброса вплоть до времени порядка t_ξ — приблизительного времени прихода в равновесие корреляций бозе-конденсата на длинах порядка корреляционной длины ξ .

За рамками данной работы осталось вычисление динамических корреляционных функций при конечной температуре и рассмотрение возможности вычисления многовременных корреляционных функций.

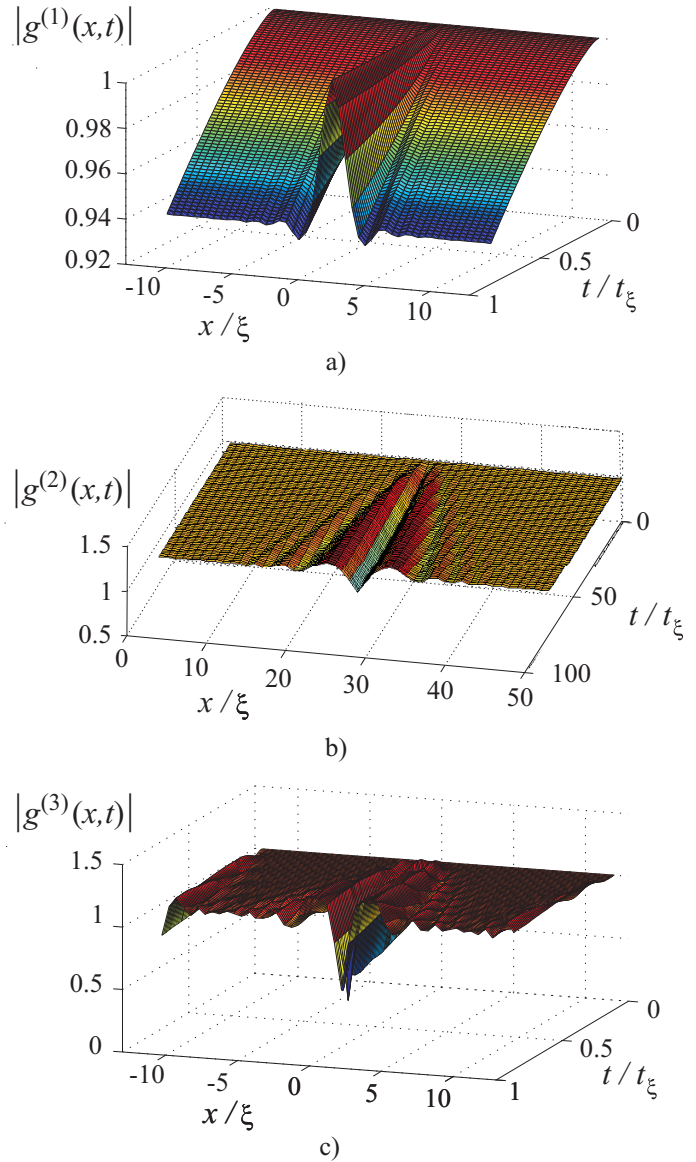


Рис. 6. Эволюция корреляционных функций бозе-газа из начального когерентного состояния: а) первая корреляционная функция, б) вторая корреляционная функция, с) третья корреляционная функция

Также было бы интересно смоделировать данным методом переход газа со взаимодействием в состояние бозе-конденсации и исследовать динамику во времени соответствующего параметра порядка. Кроме того, необходимо исследование возможностей данного метода при моделировании системы в двух- и трехмерном пространстве.

Полученные результаты уже представляют определенный физический интерес, однако главное значение работы состоит в демонстрации новых возможностей и путей моделирования динамики квантовых систем методами Монте-Карло. Действительно, как следует из серии работ [49–55], возникает следующая возможность: пусть состояние системы аппроксимируется некоторым анзаце и имеется некоторая система самосогласованных уравнений для эволюции параметров этого анзаца во времени, которая учитывает ключевые особенности рассматриваемой физической системы (например, такую систему уравнений можно получить из вариационного принципа). Тогда возможно построить стохастическое расширение данной самосогласованной теории, так что она становится точной. Другой вопрос состоит в том, что, как следует из произведенного в данной работе тестирования, необходимо дополнительное исследование на предмет численной устойчивости и поведения статистического разброса в вычислениях методом Монте-Карло.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bruus H., Flensberg K. Many-body quantum theory in condensed matter physics. Oxford: Oxford University Press, 2004.
2. Garcke J., Griebel M. On the computation of the eigenproblems of hydrogen and helium in strong magnetic and electric fields with the sparse grid combination technique // J. Comp. Phys. 2000. **165**. 694–716.
3. Fantoni S., Krotscheck E., Fabrocini A. Introduction to modern methods of quantum many-body theory and their applications. Singapore: World Scientific Publishing Company, 2002.
4. Nightingale M.P., Umrigar C.J. Quantum Monte Carlo methods in physics and chemistry. Berlin: Springer, 1999.
5. Deuar P., Drummond P.D. Gauge P representations for quantum-dynamical problems: removal of boundary terms // Phys. Rev. A. 2002. **66**. 033812.
6. Drummond P.D., Deuar P., Corney J.F., Kheruntsyan K.V. Stochastic gauge: a new technique for quantum simulations // Proc. of the 16th International Conference on Laser Spectroscopy. Singapore: World Scientific, 2004. 161–170.
7. Dowling M.R., Davis M.J., Drummond P.D., Corney J.F. Monte Carlo techniques for real-time quantum dynamics // J. Comp. Phys. 2007. **220**. 549–567.
8. Drummond P.D., Deuar P., Kheruntsyan K.V. Canonical Bose gas simulations with stochastic gauges // Phys. Rev. Lett. 2004. **92**. 040405.
9. Yang C.N., Yang C.P. Thermodynamics of a one-dimensional system of bosons with repulsive delta-function interaction // J. Math. Phys. 1969. **10**. 1115–1122.
10. Görlitz A., Vogels J.M., Leanhardt A.E., Raman C., Gustavson T.L., Abo-Shaeer J.R., Chikkatur A.P., Gupta S., Inouye S., Rosenband T., Ketterle W. Realization of Bose–Einstein condensates in lower dimension // Phys. Rev. Lett. 2001. **87**. 130402.
11. Schreck F., Khaykovich L., Corwin K.L., Ferrari G., Bourdel T., Cubizolles J., Salomon C. Quasipure Bose–Einstein condensate immersed in a Fermi sea // Phys. Rev. Lett. 2001. **87**. 080403.
12. Greiner M., Bloch I., Mandel O., Hänsch T.W., Esslinger T. Exploring phase coherence in a 2D-lattice of Bose–Einstein condensates // Phys. Rev. Lett. 2001. **87**. 160405.
13. Bloch I., Dalibard J., Zwerger W. Many-body physics with ultracold gases // Rev. Mod. Phys. 2008. **80**. 885–964.
14. Olshanii M. Atomic scattering in the presence of an external confinement and a base of impenetrable bosons // Phys. Rev. Lett. 1998. **81**. 938–941.
15. Anderson Jens O. Theory of the weakly interacting Bose gas // Rev. Mod. Phys. 2004. **76**. 599–639.
16. Krauth W., Caffarel M., Bouchaud J.-Ph. Gutzwiller wave function for a model of strongly interacting bosons // Phys. Rev. B. 1992. **45**. 3137–3140.
17. DuBois J.L., Glyde H.R. Natural orbitals and Bose–Einstein condensates in traps: a diffusion Monte Carlo analysis // Phys. Rev. A. 2003. **68**. 033602.
18. Gruter P., Ceperley D. Critical temperature of Bose–Einstein condensation of hard-sphere gases // Phys. Rev. Lett. 1997. **79**. 3549–3552.
19. Penrose O., Onsager L. Bose–Einstein condensation and liquid helium // Phys. Rev. 1956. **104**. 576–584.
20. Dorneich A., Troyer M. Accessing the dynamics of large many-particle systems using stochastic series expansion // Phys. Rev. E. 2001. **64**. 066701.
21. Прокофьев Н.В., Свистунов Б.В., Тулицын И.С. Точный процесс квантового Монте-Карло для статистики дискретных систем // Письма в ЖЭТФ. 1996. **64**. вып. 12. 853–858.
22. Deuar P. First-principles quantum simulations of many-mode open interacting Bose gases using stochastic gauge methods // PhD thesis, University of Queensland. 2005 (eprint arXiv: cond-mat/0507023v1).

23. *Deuar P., Drummond P.D.* First-principles quantum dynamics in interacting Bose gases: I. The positive P -representation // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2006. **39**. 1163–1181.
24. *Гардинер К.В.* Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986.
25. *Wigner E.* On the quantum correction for thermodynamic equilibrium // *Phys. Rev.* 1932. **40**. 749–759.
26. *Glauber R.J.* The quantum theory of optical coherence // *Rhys. Rev.* 1963. **130**. 2529–2539.
27. *Glauber R.J.* Coherent and incoherent states of the radiation field // *Phys. Rev.* 1963. **131**. 2766–2788.
28. *Glauber R.J.* Ordered expansions in boson amplitude operators // *Phys. Rev.* 1969. **177**. 1857–1881.
29. *Agarwal G.S., Wolf E.* Calculus for functions of noncommuting operators and general phase-space methods in quantum mechanics. I. Mapping theorems and ordering of functions of noncommuting operators // *Phys. Rev. D* 1970. **2**. 2161–2186.
30. *Agarwal G.S., Wolf E.* Calculus for functions of noncommuting operators and general phase-space methods in quantum mechanics. II. Quantum mechanics in phase space // *Phys. Rev. D* 1970. **2**. 2187–2205.
31. *Agarwal G.S., Wolf E.* Calculus for functions of noncommuting operators and general phase-space methods in quantum mechanics. III. A generalized Wick theorem and multitime mapping // *Phys. Rev. D* 1970. **2**. 2206–2225.
32. *Troyer M., Wiese U.-J.* Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. Lett.* 2005. **94**. 170201.
33. *Takahashi M., Imada M.* Monte Carlo calculation of quantum systems // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1984. **53**, N 3. 963–974.
34. *Ландау Л.Д., Луфшуйц Е.М.* Теоретическая физика. Т. III. М.: Физматлит, 2002.
35. *Мессиа А.* Квантовая механика. Т. I. М.: Наука, 1979.
36. *Drummond P.D., Gardiner C.W.* Generalised P -representations in quantum optics // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1980. **13**. 2353–2368.
37. *Фейнман Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1978.
38. *Drummond P.D., Mortimer I.K.* Computer simulations of multiplicative stochastic differential equations // *J. Comp. Phys.* 1991. **93**. 144–170.
39. *Werner M.J., Drummond P.D.* Robust algorithms for solving stochastic partial differential equations // *J. Comp. Phys.* 1997. **132**. 312–326.
40. *Kannan D., Lakshmikantham V.* Handbook of stochastic analysis and applications. Boca Raton: CRC Press, 2002.
41. *Plimak L.I., Olsen M.K., Collet M.J.* Optimization of the positive P -representation for the anharmonic oscillator // *Phys. Rev. A* 2001. **64**. 025801.
42. *Fetter A.L., Walecka J.D.* Quantum theory of many-particle systems. New York: McGraw-Hill, 1971.
43. *Yang C.N.* Concept of off-diagonal long-range order and the quantum phases of liquid He and of superconductors // *Rev. Mod. Phys.* 1962. **34**. 694–704.
44. *Kheruntsyan K.V., Gangardt D.M., Drummond P.D., Shlyapnikov G.V.* Pair correlations in a finite-temperature 1D Bose gas // *Phys. Rev. Lett.* 2003. **91**. 040403.
45. *Sykes A.G., Gangardt D.M., Davis M.J., Viering K., Raizen M.G., Kheruntsyan K.V.* Spatial nonlocal pair correlations in a repulsive 1D Bose gas // *Phys. Rev. Lett.* 2008. **100**. 160406.
46. *Gülchrist A., Gardiner C.W., Drummond P.D.* Positive P -representation: application and validity // *Phys. Rev. A* 1997. **55**. 3014.
47. *Deuar P., Drummond P.D.* First-principles quantum dynamics in interacting Bose gases II: stochastic gauges // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2006. **39**. 2723.
48. *Plimak L.I., Fleishhauer M., Olsen M.K., Collett M.J.* Quantum-field-theoretical approach to phase-space techniques: generalizing the positive P -representation // *Phys. Rev. A* 2003. **67**. 013812.
49. *Carusotto I., Castin Y., Dalibard J.* N -boson time-dependent problem: a reformulation with stochastic wave functions // *Phys. Rev. A* 2001. **63**. 023606.
50. *Plimak L.I., Collett M.J., Olsen M.K.* Langevin equations for interacting fermions and Cooper-like pairing in trapped one-dimensional fermions // *Phys. Rev. A* 2001. **64**. 063409.
51. *Juillet O., Chomaz Ph.* Exact stochastic mean-field approach to the fermionic many-body problem // *Phys. Rev. Lett.* 2002. **88**. 142503.
52. *Carusotto I., Castin Y.* An exact reformulation of the Bose–Hubbard model in terms of a stochastic Gutzwiller ansatz // *New J. Phys.* 2003. **5**. 91.1–91.13.
53. *Tessieri L., Wilkie J., Çetinbaş M.* Exact norm-conserving stochastic time-dependent Hartree–Fock // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2005. **38**. 948–956.
54. *Lacroix D.* Exact and approximate many-body dynamics with stochastic one-body density matrix evolution // *Phys. Rev. C* 2005. **71**. 064322.
55. *Montina A., Castin Y.* Exact BCS stochastic schemes for a time-dependent many-body fermionic system // *Phys. Rev. A* 2006. **73**. 013618.