

基于半正定优化的共形自举方法在量子力学中的应用

张会鹏, 李卓然, 樊 炜

江苏科技大学理学院, 江苏 镇江

收稿日期: 2024年3月6日; 录用日期: 2024年3月28日; 发布日期: 2024年4月17日

摘 要

半正定优化是一种非常重要的数学方法, 有着广泛的应用。最近两年的研究表明, 半正定优化可以用来求解量子力学中的非谐振子问题。本文对此展开研究, 以一个一般的多项式势函数为例, 表明半正定优化可以求解量子力学中具有一般多项式形式的势函数问题。本文介绍如何将量子力学问题转化为半正定优化问题, 并给出数值结果。

关键词

半正定优化, Numerical Bootstrap, 量子非谐振子

The Application of Conformal Bootstrap Method Based on Semi-Definite Programming in Quantum Mechanics

Huipeng Zhang, Zhuoran Li, Wei Fan

College of Science, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang Jiangsu

Received: Mar. 6th, 2024; accepted: Mar. 28th, 2024; published: Apr. 17th, 2024

Abstract

The semi-definite programming is a very important mathematical method with a wide range of applications. Recent studies in the last two years have shown that the semi-definite programming can be used to solve quantum anharmonic oscillators. In this paper, we study a quantum problem with a general polynomial potential. We describe how to transform a quantum mechanical problem into a semi-definite programming problem and gives numerical results. The results show that this method can be used to solve quantum mechanical problems with a general polynomial potential.

Keywords

Semi-Definite Programming, Numerical Bootstrap, Quantum Anharmonic Oscillator

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

半正定优化是一种非常重要的数学方法，它是凸优化的一个分支，具有重要的理论和实践意义。主要思想是将线性规划和相关可行性集推广到决策变量为对称矩阵的情况，并且不等式被理解为半正定矩阵。半正定优化在应用数学和工程等领域有着重要的应用。最近，该方法被应用到量子场论中的共形 bootstrap (自举)中去[1] [2] [3] [4]，获得了迄今为止精度最高的三维伊辛模型的临界系数[5] [6]。共形 bootstrap 是量子场论中的一种非微扰方法，可以处理一般参数区间的问题，因而摆脱了微扰方法只能处理小参数区间的限制。它的思想非常简洁：只需要使用量子理论的最基本假设来构建系统的自洽条件，求解这些自洽条件便可获得系统的解。虽然原理很简单，但是具体求解这些自洽条件是很困难的，半正定优化的引入给 bootstrap 方法带来突破性的进展。

最新的研究表明，该方法可以进一步用来处理量子力学问题[7] [8] [9]，比如求解量子非谐振子的能谱[10]-[25]。量子非谐振子是原子分子物理、凝聚态物理、量子场论以及数学物理中的重要研究对象，具有广泛的应用。量子非谐振子能级的精确求解一直都是一个重要的问题，在解析方面通常采用各种微扰方法[26] [27]来进行求解，但是对于强耦合的情形，微扰理论无法处理，因此通过数值求解微分方程来获得量子非谐振子的数值解也是一种常用研究方法。

本文将进一步研究半正定方法在量子力学中的应用。我们以一个具有任意耦合参数的多项式势函数为例，将其转化为一个 bootstrap 问题，最终使用半正定方法来求解其能谱。研究结果表明，半正定方法可以处理具有一般多项式形式的势函数问题。

我们使用半正定优化算法研究了量子力学系统的能量本征值问题，即寻找所构造的 bootstrap 矩阵的最小特征值问题。研究中我们使用 mosek 求解器进行求解，通过固定系统的能量将所有的约束线性化，表明可行性问题呈现为一个优化问题。本文的结构安排为：在第 2 部分介绍了 bootstrap 方法的具体实现过程，在第 3 部分使用 bootstrap 方法构造出一般的量子力学模型的 bootstrap 矩阵，将物理问题转化为半正定优化问题，第 4 部分是将一般模型所得到的数值结果进行展示，第 5 部分是总结。

2. 数值 Bootstrap 方法

数值 bootstrap 是一种非微扰方法，模型的收敛能谱完全从自洽性条件中获得，这些自洽性条件只依赖于量子理论的基本特性，不涉及任何微扰因素。本文将沿用文献[15]的记号来简单介绍数值 bootstrap 的算法。

数值 bootstrap 方法的核心可以总结为 3 个步骤：1) 选择算子并由约束条件获得递推公式，2) 对算子施加正定约束从而获得 bootstrap 矩阵，3) 选择搜索空间，并使用半正定优化寻找满足条件的解集。在这一部分的描述中，我们采用普朗克常数设为 $\hbar = 1$ 的常用约定，并使用量子力学的狄拉克态矢描述，该描述将量子力学问题转化为了数学中的希尔伯特空间问题，可参见教材[28]。

2.1. 递归方程

我们在本文中处理量子系统的能量本征值问题，可以将其转化为检验对称矩阵是否为正，如果所构造的矩阵是厄米矩阵，则其正定的条件等价于矩阵的最小特征值为正，我们通过考虑矩阵最小特征值作为原始变量的函数来检验正定性，因此定义了一个优化问题。

对于一个给定的哈密顿量的量子力学系统：

$$H = \frac{P^2}{2} + V(x) \quad (1)$$

在能量本征态中，哈密顿量 H 和任意算子 α 都满足以下两个恒等式，在下文的描述中省略了 $|\psi\rangle$ ，假设接下来所处理的是具有能量 E 的任意能量本征态：

$$\langle H\alpha \rangle = \langle \alpha H \rangle = E\langle \alpha \rangle \quad (2)$$

$$\langle [H, \alpha] \rangle \equiv \langle \psi | [H, \alpha] | \psi \rangle = 0 \quad (3)$$

其中使用了简略记号 $\langle \cdot \rangle = \langle \psi | \cdot | \psi \rangle$ ，将算符 $\alpha = x^n$ 和哈密顿量带入以上两式，得到：

$$(n-1)\langle x^{n-2} \rangle + 2i\langle x^{n-1} p \rangle = 0 \quad (4)$$

$$\langle x^n p^2 \rangle + 2\langle x^n V(x) \rangle - 2E\langle x^n \rangle = 0 \quad (5)$$

将算符 $\alpha = x^n p$ 和哈密顿量带入(2)式，不断运用对易关系 $[x, p] = i$ 我们得到如下方程：

$$-n(n-1)\langle x^{n-2} p \rangle - 2in\langle x^{n-1} p^2 \rangle + 2i\langle x^n V'(x) \rangle = 0 \quad (6)$$

令(4)(5)两式中的 $n = n-1$ ，得到关于 $\langle x^{n-2} p \rangle$ ， $\langle x^{n-1} p^2 \rangle$ 的表达式，并带入方程(6)，消去方程中的动量算符，得到关于 x 的幂的期望值和能量 E 之间的递归关系：

$$n(n-1)(n-2)x^{n-3} - 8n\langle x^{n-1} V(x) \rangle + 8nE\langle x^{n-1} \rangle - 4\langle x^n V'(x) \rangle = 0 \quad (7)$$

由以上递归方程出发，代入对应的量子力学势函数，我们便可以构造相应的递归方程。

2.2. Bootstrap 矩阵

取 k 个算子 x^n ($n=0,1,\dots,k-1$)，我们定义如下单算符：

$$\tilde{O} = \sum_{n=0}^{k-1} C_n x^n \quad (8)$$

其中 C_n 为一系列常数，在实际计算中，可以取为 1。任意算子 \tilde{O} 和能量本征态 $|\varphi\rangle$ 都满足 positivity 约束条件：

$$0 \leq \langle \tilde{O}^\dagger \tilde{O} \rangle = \sum_{mn} C_m^* \langle x^{m+n} \rangle C_n \quad (9)$$

由以上不等式，矩阵可表示为以下形式，此矩阵称为汉克尔矩阵。

$$M_{mn} = \langle x^{m+n} \rangle \quad (10)$$

Positivity 约束条件限制 bootstrap 矩阵必须为半正定矩阵，这对算子的期望值有很强的约束作用，bootstrap 矩阵表示为如下形式：

$$M_x = \begin{pmatrix} \tilde{O}_0^\dagger \tilde{O}_0 & \tilde{O}_0^\dagger \tilde{O}_1 & \cdots & \tilde{O}_0^\dagger \tilde{O}_k \\ \tilde{O}_1^\dagger \tilde{O}_0 & \tilde{O}_1^\dagger \tilde{O}_1 & \cdots & \tilde{O}_1^\dagger \tilde{O}_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{O}_k^\dagger \tilde{O}_0 & \tilde{O}_k^\dagger \tilde{O}_1 & \cdots & \tilde{O}_k^\dagger \tilde{O}_k \end{pmatrix} \quad (11)$$

其中算符 \tilde{O}_i 是算子 \tilde{O} 的组成元素(子算符)。在 bootstrap 矩阵中, 随着 k 值(也称为矩阵的深度)的增大, 约束会变得越强, 哈密顿量的能谱就会进一步的收敛。

同样也可以定义如下双算符:

$$O := \sum_{m=0}^{K_x} \sum_{n=0}^{K_p} c_{mn} x^m p^n \quad (12)$$

然后根据(9)~(11)的步骤构造相应的 bootstrap 矩阵。

2.3. 搜索空间

最后一步是设定搜索空间, 确定搜索参数和优化目标后, 半正定优化将排除不满足约束(9)的参数值。当深度 k 足够大时, 剩余的参数空间将是一个极小的邻域, 可视为一个数据点, 该点就是量子系统的离散本征值。对于二次多项式模型搜索空间只有 E 一个变量, 在四次多项式中最小化搜索空间为 $\{E, x^2\}$, 对于本文的模型, 最小化的搜索空间为 $\{E, x^2, x^4, x^6, x^8\}$, 其中 E 为非线性变量, 其余为线性变量。可见随着多项式次数的增加, 搜索空间中矩序列 $\langle x^m \rangle$ 的次数会相应增加。

3. 模型

本文选取了一个以一般多项式为势函数的量子力学模型:

$$H = \frac{p^2}{2} + gx^2 + x^4 + x^6 + x^8 + x^{10} \quad (13)$$

这里耦合参数 g 代表着“质量”项。在谐振子极限下 $g \rightarrow \infty$, 系统的基态能量接近简谐振子的值 $\sqrt{g/2}$ 。在 $g \rightarrow 0^+$ 系统表现出强的非谐性。应用上文中提到的 bootstrap 算法, 可得该模型在单算符情况下的 bootstrap 矩阵($g = 1$):

$$M_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x^2 & 0 & x^4 & 0 & \dots \\ 0 & x^2 & 0 & x^4 & 0 & x^6 & \dots \\ x^2 & 0 & x^4 & 0 & x^6 & 0 & \dots \\ 0 & x^4 & 0 & x^6 & 0 & x^8 & \dots \\ x^4 & 0 & x^6 & 0 & x^8 & 0 & \dots \\ 0 & x^6 & 0 & x^8 & 0 & \frac{E}{6} - \frac{x^2}{3} - \frac{x^4}{2} - \frac{2x^6}{3} - \frac{5x^8}{6} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (14)$$

同理, 其双算符情况下的 bootstrap 矩阵如下($g = 1$):

$$M_{xp} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{5E}{3} - \frac{4x^2}{3} - x^4 - \frac{2x^6}{3} - \frac{x^8}{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (15)$$

4. 结果分析

图 1 是利用 bootstrap 半正定优化算法处理的模型(13)的能级收敛数据。取(13)式中的 $g = 1$, 构造(14)式所示单算符 bootstrap 矩阵, 通过调整矩阵的深度 k , 对模型进行半正定优化, 得到图 1 所示的图像。当深度 $k = 8$ 时, 基态与激发态已经分离, 但分辨率较低。当深度增加到 $k = 9$ 时, 基态的范围进一步缩

小, 随着 k 值的增加, 基态能量会变为离散的数据点。在实际计算中, 我们采用的是双算符的 bootstrap 矩阵构造, 这样的计算效率更高。

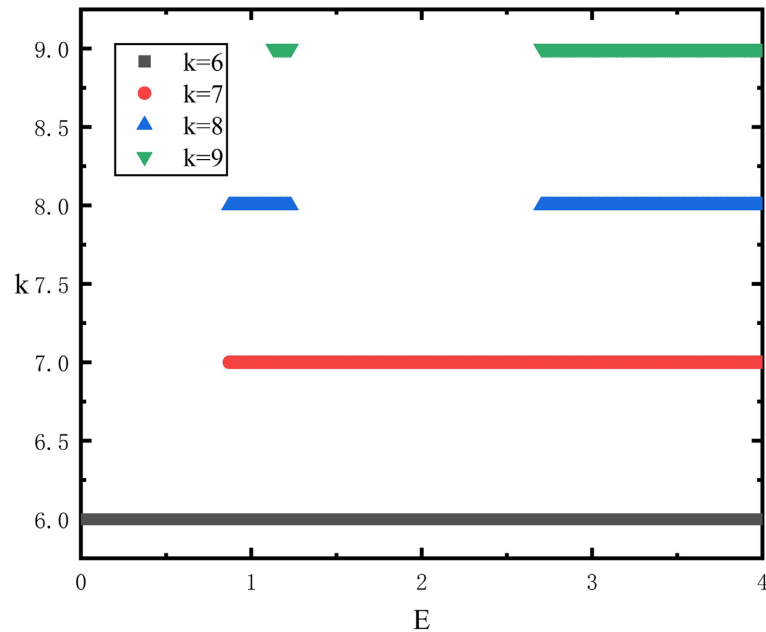


Figure 1. Semi-definite optimization data with different depth k in the case of single operator with $g = 1$

图 1. 在 $g = 1$ 时单算符情况下, 不同深度 k 的半正定优化数据

Table 1. Semi-definite optimization data for the single operator matrix of model (16) with $g = 1$

表 1. 在 $g = 1$ 时模型(16)的单算符矩阵的半正定优化数据

$g = 1$	$n = 1$	$n = 2$
$k = 6$	$0 \leq E$	
$k = 7$	$0.870871 \leq E$	
$k = 8$	$0.870871 \leq E \leq 1.23123$	$2.7027 \leq E$
$k = 9$	$1.13113 \leq E \leq 1.23123$	$2.7027 \leq E$
数值常微分方程	1.14707	4.10552

表 1 给出了图 1 中数据的范围, 并与数值常微分方程所求的结果进行了比较, 发现两者具有很好的 consistency, 说明半正定优化算法可以求解量子力学中具有一般多项式形式的势函数问题, 因此物理问题也就转化为了数学问题。表中总结了 $k = 6, 7, 8, 9$ 时的数据收敛范围, 可以看出随着 bootstrap 矩阵深度 k 的增加, 数据在不断收敛, k 值继续变大, 数据范围就会变小, 甚至趋于点状。

我们对模型(13)在一般参数区间下的能谱进行了数值 bootstrap 计算, 所得的结果展示在图 2 中。图 2 是利用半正定优化算法处理双算符构造的 bootstrap 矩阵, 相对单算符构造的 bootstrap 矩阵双算符矩阵具有更强的约束作用。图 2 中展示了由 bootstrap 获得的基态能量随着耦合参数 g 的变化, 其中的实线为简谐振子的基态能量。可以看出, 在 g 值很小的时候, 非简谐项的作用很强, 模型(13)的基态能量远远地偏离简谐振子的情况。而随着 g 值的增加, 简谐项的作用变强, 最终模型(13)的基态能量接近简谐振子的值。

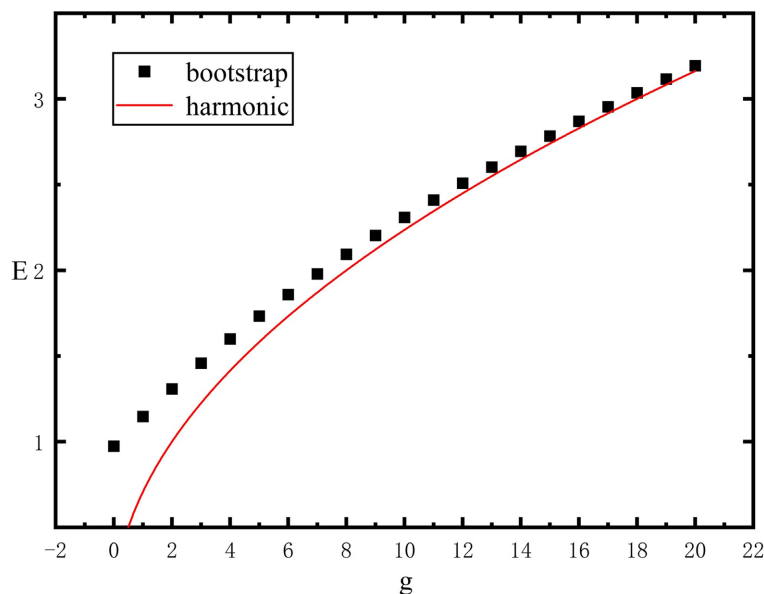


Figure 2. Semi-definite optimization results of the general coupling parameter g in the case of double operator matrix
图 2. 双算符矩阵情况下, 一般耦合参数 g 对应的半正定优化结果

由图 2 中优化结果可以看出, 半正定优化算法具有非常吸引人的数值性质, 最终的 bootstrap 结果几乎收敛到一个数据点。Bootstrap 方法最终依赖于半正定优化算法, 最终的计算由计算机完成, 只需要手动改变 bootstrap 矩阵的深度, 使用半正定优化算法处理量子力学系统的能量本征值, 相比于微分方程的数值积分方法或其他近似方法来获得数据方便很多。

5. 结论

本文考虑了一个具有任意耦合参数的多项式势函数的量子力学问题, 给出了将其转化为数值 bootstrap 问题的方法, 最后应用半正定方法求解了其能谱。本文的结果表明, 半正定方法可以方便地求解这种类型的问题, 对于具有一般多项式形式的势函数问题同样适用。数值 bootstrap 方法在内核上是一个非微扰问题, 只是需要用半正定优化方法来数值实现这个非微扰问题, 这在根本层面上区别于传统的微分方程的数值积分方法。

半正定优化所得到的结果是令人兴奋的, 只需要手动地调整 bootstrap 矩阵的深度, 就可以搜索到系统的能谱, 其他的过程都由计算机完成, 并且搜索非常高效, 因此半正定优化算法可以方便地应用到众多领域。在本文的搜索中主要对系统的能量和矩中进行了搜索。如果在递归中存在许多未知的矩, 则在高维空间中进行自举方程和约束解的搜索时, 就会变得非常低效, 因此这是需要改进的。

基金项目

国家自然科学基金项目(批准号: 12105121)。

参考文献

- [1] Poland, D., Simmons-Duffin, D. and Vichi, A. (2012) Carving out the Space of 4D CFTs. *Journal of High Energy Physics*, **2012**, Article No. 110. [https://doi.org/10.1007/JHEP05\(2012\)110](https://doi.org/10.1007/JHEP05(2012)110)
- [2] Kos, F., Poland, D. and Simmons-Duffin, D. (2014) Bootstrapping the $O(N)$ Vector Models. *Journal of High Energy Physics*, **2014**, Article No. 91. [https://doi.org/10.1007/JHEP06\(2014\)091](https://doi.org/10.1007/JHEP06(2014)091)

- [3] Kos, F., Poland, D. and Simmons-Duffin, D. (2014) Bootstrapping Mixed Correlators in the 3D Ising Model. *Journal of High Energy Physics*, **2014**, Article No. 109. [https://doi.org/10.1007/JHEP11\(2014\)109](https://doi.org/10.1007/JHEP11(2014)109)
- [4] Simmons-Duffin, D. (2015) A Semidefinite Program Solver for the Conformal Bootstrap. *Journal of High Energy Physics*, **2015**, Article No. 174. [https://doi.org/10.1007/JHEP06\(2015\)174](https://doi.org/10.1007/JHEP06(2015)174)
- [5] Poland, D., Rychkov, S. and Vichi, A. (2019) The Conformal Bootstrap: Theory, Numerical Techniques, and Applications. *Reviews of Modern Physics*, **91**, Article ID: 015002. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.91.015002>
- [6] Poland, D. and Simmons-Duffin, D. (2022) Snowmass White Paper: The Numerical Conformal Bootstrap.
- [7] Anderson, P.D. and Kruczenski, M. (2017) Loop Equations and Bootstrap Methods in the Lattice. *Nuclear Physics B*, **921**, 702-726. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2017.06.009>
- [8] Lin, H.W. (2020) Bootstraps to Strings: Solving Random Matrix Models with Positivity. *Journal of High Energy Physics*, **2020**, Article No. 90. [https://doi.org/10.1007/JHEP06\(2020\)090](https://doi.org/10.1007/JHEP06(2020)090)
- [9] Han, X., Hartnoll, S.A. and Kruthoff, J. (2020) Bootstrapping Matrix Quantum Mechanics. *Physical Review Letters*, **125**, Article ID: 041601. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.041601>
- [10] Berenstein, D. and Hulsey, G. (2022) Bootstrapping More QM Systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **55**, Article ID: 275304. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac7118>
- [11] Bhattacharya, J., Das, D., Das, S.K., Jha, A.K. and Kundu, M. (2021) Numerical Bootstrap in Quantum Mechanics. *Physics Letters B*, **823**, Article ID: 136785. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2021.136785>
- [12] Aikawa, Y., Morita, T. and Yoshimura, K. (2022) Application of Bootstrap to a θ Term. *Physical Review D*, **105**, Article ID: 085017. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.105.085017>
- [13] Li, W. (2022) Null Bootstrap for Non-Hermitian Hamiltonians. *Physical Review D*, **106**, Article ID: 125021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.106.125021>
- [14] Hu, X. (2022) Different Bootstrap Matrices in Many QM Systems.
- [15] Aikawa, Y., Morita, T. and Yoshimura, K. (2022) Bootstrap Method in Harmonic Oscillator. *Physics Letters B*, **833**, Article ID: 137305. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.137305>
- [16] Tchoumakov, S. and Florens, S. (2022) Bootstrapping Bloch Bands. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **55**, Article ID: 015203. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac3c82>
- [17] Bai, D. (2022) Bootstrapping the Deuteron.
- [18] Khan, S., Agarwal, Y., Tripathy, D. and Jain, S. (2022) Bootstrapping PT Symmetric Quantum Mechanics. *Physics Letters B*, **834**, Article ID: 137445. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.137445>
- [19] Berenstein, D. and Hulsey, G. (2022) Anomalous Bootstrap on the Half-Line. *Physical Review D*, **106**, Article ID: 045029. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.106.045029>
- [20] Morita, T. (2023) Universal Bounds on Quantum Mechanics through Energy Conservation and the Bootstrap Method. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, **2023**, 023A01. <https://doi.org/10.1093/ptep/ptad001>
- [21] Blacker, M.J., Bhattacharyya, A. and Banerjee, A. (2022) Bootstrapping the Kronig-Penney Model. *Physical Review D*, **106**, Article ID: 116008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.106.116008>
- [22] Nakayama, Y. (2022) Bootstrapping Microcanonical Ensemble in Classical System. *Modern Physics Letters A*, **37**, Article ID: 2250054. <https://doi.org/10.1142/S0217732322500547>
- [23] Berenstein, D. and Hulsey, G. (2023) Semidefinite Programming Algorithm for the Quantum Mechanical Bootstrap. *Physical Review E*, **107**, L053301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.L053301>
- [24] Guo, Y. and Li, W. (2023) Solving Anharmonic Oscillator with Null States: Hamiltonian Bootstrap and Dyson-Schwinger Equations. *Physical Review D*, **108**, 125002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.108.125002>
- [25] Berenstein, D. and Hulsey, G. (2024) One-Dimensional Reflection in the Quantum Mechanical Bootstrap. *Physical Review D*, **109**, Article ID: 025013. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.109.025013>
- [26] Bender, C.M. and Wu, T.T. (1969) Anharmonic Oscillator. *Physical Review*, **184**, 1231-1260. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.184.1231>
- [27] Bender, C.M. and Wu, T.T. (1971) Large-Order Behavior of Perturbation Theory. *Physical Review Letters*, **27**, 461-465. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.27.461>
- [28] 曾谨言. 量子力学卷 I [M]. 第 5 版. 北京: 科学出版社, 2013: 277-285.