12/III-84

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-83-869

1309/84

Н.В.Махалдиани, М.Мюллер-Пройскер*,
С.Ю.Шмаков

ПРИМЕНЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ В СОВРЕМЕННЫХ ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

* Университет им.Гумбольта, Берлин, ГДР

1983

В данной работе мы обсуждаем некоторые методические аспекты численных расчетов по методу Монте-Карло в решеточной теории поля с фермионами /1/. В частности, описываем метод стохастического обращения большой матрицы, задающей динамику фермионных степеней свободы.

Основу современных представлений теоретической физики высоких энергий составляет теория квантованных полей /2/. Уравнения движения этой теории решаются в виде функциональных интегралов/3/, которые удобны как для построения теории возмущений, так и для исследования характеристик, лежащих вне рамок теории возмущений, таких как масса частиц.

Наша задача состоит в прямом вычислении этих интегралов, для чего формулируется теория на конечной четырехмерной решетке /4/, функциональные интегралы превращаются в обыкновенные интегралы с большой кратностью. Для конкретности дальнейшее рассмотрение будем вести на примере квантовой хромодинамики/5/ - теории сильных взаимодействий адронов. Наблюдаемое значение некоторой величины Q имеет вид

$$\langle Q(U,\bar{\Psi},\Psi)\rangle = \frac{N(Q)}{N(1)} = \frac{1}{N(1)} \int \prod_{\substack{n=1\div L^4\\ \mu=1,2,3,4}} dU_\mu(n)\, d\bar{\Psi}(n)\, d\Psi(n) \times$$
$$\times \exp(-1/g^2 S_u - S_\Psi)\, Q(U,\bar{\Psi},\Psi), \qquad /1/$$

где L - линейный размер гиперкубической решетки в единицах длины отдельного ребра a; функционал действия, определяющий теорию, имеет вид

$$S_u = \sum_{n,\mu,\nu} \mathrm{Re\,tr}\,(I - U_{\mu\nu}(n)), \qquad S_\Psi = \sum_{n,m} \bar{\Psi}(n)\,(I - kM)_{nm}\,\Psi(m),$$

где $M_{nm} = (r+\gamma_\mu)U_\mu(n)\,\delta_{n+\mu,m} + (r-\gamma_\mu)\,U^+_\mu(m)\,\delta_{n,m+\mu}$, n, m задают координаты узлов решетки; γ_μ, $\mu = 1,2,3,4$ - 4x4 матрицы Дирака. На каждой ячейке решетки задано выражение $U_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n)\,U_\nu(n+\mu)\,(U_\nu(n)\,U_\mu(n+\nu))^+$, а на каждом ребре $U_\mu(n) = e^{iag A_\mu(n) + O(a^2)}$ - калибровочная степень свободы / $SU(3)$ -матрица/, по которой берется интеграл по инвариантной мере Хаара/6/; фермионные степени свободы здесь указаны для одного типа фермионных полей - описываются грассмановыми переменными $\bar{\Psi}$, Ψ/7/; g, k и r - безразмерные параметры теории. Типичная кратность интеграла /1/ при решетке с числом узлов 8^4 для калибровочных и фермионных степеней свободы составляет соответственно 131000 и 33000. В отсутствие фермионов генерируется каждое значение $U_\mu(n)$ по методу Монте-Карло с распределением $\rho(U_\mu) = \exp\{1/g^2 \, \mathrm{tr} U_\mu f[U_\nu]_{\nu \neq \mu}\}$, где f зависит только от соседних $U_\mu(n)$ ребер. Завершив перебор всех /при последовательном переборе/ или почти всех /при стохастическом переборе/ ребер, получаем одну итерацию - одну конфигурацию калибровочного поля. По этой конфигурации, которая накапливается в машинной памяти, вычисляем Q. После T итерации имеем результат $\langle Q \rangle \simeq \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} Q_t$.

На ЭВМ ЕС-1060 для решетки с объемом 8^4 одна итерация с помощью метода теплового резервуара [8] требует примерно 8 мин. Вычисление наблюдаемых величин занимает обычно не меньше времени. В самых простых задачах для получения разумного, с точки зрения статистических ошибок, результата требовалось 50÷150 итераций [9].

Для качественных исследований часто достаточно рассмотреть вместо SU(3) простейшую неабелеву группу SU(2). Далее непрерывные группы можно аппроксимировать конечными подгруппами или конечными подмножествами, что дает возможность ускорить счет с помощью использования таблицы умножения элементов. Группа SU(2), например, в области физических применений хорошо аппроксимируется подгруппой икосаэдра [10]. Для группы SU(3) максимальную конечную подгруппу G(1080) необходимо расширить до регулярного подмножества с числом элементов 38 880 [11].

В выражении /1/ интеграл по грассмановым переменным берется точно:

$$\langle Q \rangle = \int dU \det(X^{-1}(U)) \, e^{-\frac{1}{g^2} S_u} Q(U, X(U)), \qquad /2/$$

где $X^{-1}(U) \equiv 1 - kM(U)$.

При генерации калибровочной конфигурации новое пробное значение переменной U'_μ можно получить путем умножения старого значения U_μ на случайно выбранный элемент подгруппы /подмножества/ из окрестности единичного элемента. По методу Метрополиса старое значение заменяется новым, если $\frac{\rho(U')}{\rho(U)} = \det(1 - X(U)k(M(U') - M(U))) \times$ $\times \exp(-1/g^2 (S(U') - S(U))) > \epsilon$, где ϵ - равномерно распределенное случайное число из интервала /0,1/. Матрица $M(U') - M(U)$ имеет только несколько ненулевых элементов. Поэтому из матрицы X с характерным размером 50000x50000 требуется вычислить всего несколько элементов. Для этого обычно применяют методы Гаусса-Зайделя [12], псевдофермионов [13] или сопряженных градиентов [14], что для реалистических расчетов требует большой оперативной памяти. Нами, независимо от авторов [15], был предложен метод, основанный на суммировании ряда Неймана обратной матрицы* по методу Монте-Карло:

*Если необходимо вычислить несколько элементов большой обратной матрицы, стохастический метод обращения выгоднее итерационных методов.

$$X = \sum_{n \geq 0} (kM)^n, \qquad /3/$$

где каждому слагаемому в /3/: $(M^n)_{sf} = \sum_{i,j,\ldots \ell} M_{si} M_{ij} \ldots M_{\ell f}$,

соответствует траектория длиной n, соединяющая две точки s и f решетки. Эти траектории можно описать вектором с длиной $n = n_0 + 2J$, $n_0 = |f - s|$, $c_n = (\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n)$, где $\mu = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$ указывает направление i-го шага траектории. Число шагов N_μ в μ-м направлении ограничено условием $\sum_{\mu=1}^{4} N_\mu = J$. Для заданного набора N_μ имеем

$$\frac{n!}{(N_1!)^2 (N_2!)^2 (N_3!)^2 (N_4 + n_0)! N_4!}$$

различных траекторий /для конкретности точки f и s расположены вдоль четвертой оси/. Имеется

$$\sum_{N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = J} 1 = \frac{1}{6} (J+1)(J+2)(J+3)$$

способов генерации траектории с заданным J. Сумма /3/ переписывается в виде

$$X_{sf} = \sum_J \frac{W(J)}{Z} \sum_{\substack{N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = J \\ N_1 N_2 N_3 N_4}} \; \sum_{\substack{(2J + n_0)! \\ \text{перестан.}}} \frac{\frac{Z}{W(J)} [(kM)^{2J + n_0}]_{sf}}{(N_1!)^2 (N_2!)^2 (N_3!)^2 (N_4 + n_0)! N_4!}, \qquad /4/$$

где $Z = \sum_J W(J) \frac{1}{6} (J+1)(J+2)(J+3) \cdot (2J + n_0)!$.

Распределение W(J) следует выбирать так, чтобы минимизировать дисперсию оценки по методу Монте-Карло. Для этого можно использовать информацию о поведении коэффициентов в разложении интересующей нас величины по степеням k /см. /5//. На этом пути возможна разработка "самоулучшающихся" алгоритмов.

Оценка суммы /4/ имеет вид

$$X_{sf} \simeq \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \frac{Z/W(J) \, [(kM)^{2J + n_0}]_{sf}}{(N_1(t)!)^2 (N_2(t)!)^2 (N_3(t)!)^2 (N_4(t) + n_0)! \, N_4(t)!},$$

где траектории сгенерированы по длине с распределением W(J)/Z, а по $N_1, \ldots, N_4$ и последовательности шагов μ_i - однородно. Применение метода проиллюстрируем на примере вычисления величины

$$\langle \bar{\Psi}(0) \Psi(0) \rangle = \int\limits_{(\det X^{-1}) \equiv 1} dU \, e^{-\frac{1}{g^2} S_u} \mathrm{tr} X(U) = \sum_{J=2}^{J_{max}} B_J k^{2J} + 8, \qquad /5/$$

Таблица

$4/g^2$	2,I	2,2	2,3	2,45	2,65
K	0,I83	0,I75	0,I62	0,I5I	0,I40
$\langle\bar{\psi}\psi\rangle$	6,69±0,I5	6,82±0,09	7,II±0,04	7,39±0,02	7,55I±0,008
B_2	$-(4,I9\pm0,07)I0^2$	$-(4,37\pm0,07)I0^2$	$-(4,63\pm0,07)I0^2$	$-(4,82\pm0,07)I0^2$	$-(5,I8\pm0,07)I0^2$
B_3	$-(I,09\pm0,03)I0^4$	$-(I,24\pm0,03)I0^4$	$-(I,40\pm0,03)I0^4$	$-(I,56\pm0,04)I0^4$	$-(I,75\pm0,04)I0^4$
B_4	$-(2,3\pm0,2)I0^5$	$-(2,6\pm0,2)I0^5$	$-(3,6\pm0,2)I0^5$	$-(3,7\pm0,2)I0^5$	$-(4,9\pm0,2)I0^5$
B_5	$-(3\pm I)I0^6$	$-(6\pm I)I0^6$	$-(7\pm I)I0^6$	$-(8\pm I)I0^6$	$-(I3\pm I)I0^6$
B_6	$-(6\pm90)I0^6$	$-(2\pm9)I0^7$	$-(II\pm9)I0^7$	$-(I4\pm9)I0^7$	$-(I5\pm I0)I0^7$

в случае калибровочной группы SU(2), аппроксимируемой икосаэдральной подгруппой. Результаты, полученные на решетке размером 6^4, указаны для некоторых значений (g, k) в таблице. Мы ограничились траекториями максимальной длины 12 ($J_{max} = 6$). $trX(U)$ вычисляли для заданной калибровочной конфигурации на 36 узлах решетки, генерируя каждый раз 100 траекторий. Мы усредняли $trX(U)$ для каждого (g, k) по каждой 30-й калибровочной конфигурации, выбираемой из 240 итераций, полученных по методу Метрополиса. В таблице указаны только статистические ошибки. Счет для каждого значения (g, k) занимал примерно 1 ч на ЕС-1060. Результат хорошо согласуется с известными результатами для величины /5/ /см., например, /16/ /. Преимущество стохастического обращения матрицы X^{-1} состоит в том, что оно почти не требует дополнительной машинной памяти, а недостаток - в том, что ряд /3/ плохо сходится для малых значений r.

Следует отметить, что большинство современных задач квантовой хромодинамики на решетке, например определение адронных масс, требует значительного увеличения размера решетки. Такие задачи невозможно решать без помощи улучшенных алгоритмов, более мощных вычислительных машин или сетей специализированных процессоров /17/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Макеенко Ю.М. Препринты ИТЭФ, 124, 125, 126, М., 1982.
2. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. "Наука", М., 1976.
3. Попов В.Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. Атомиздат, М., 1976.
4. Wilson K.G. Phys.Rev., 1974, D10, p.2445.
5. Marciano W.J., Pagels H. Phys.Rep., 1978, 36C, p.137.
6. Барут А., Рончка Р. Теория представлений групп и ее приложения. "Мир", М., 1980.
7. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. "Наука", М.,1965.
8. Pietarinen E. Nucl.Phys., 1981, B190, p.349.
9. Ilgenfritz E.-M., Müller-Preussker M. Z.Phys.C - Particles and Fields, 1983, 16, p.339; Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, с.440.
10. Bhanot G., Rebbi C. Nucl.Phys., 1981, B180, p.469.
11. Lisboa P., Michael C. Phys.Lett., 1982, 113B, p.303.
12. Weingarten D. Phys.Lett., 1982, 109B, p.57.
13. Fucito F. et al. Nucl.Phys., 1981, B180, p.360.
14. Barbour I.M. et al. Phys.Lett., 1983, 127B, p.433.

15. De Grand T.A.et al. Colorado Univ.Preprint Colo-HEP 39, 1982.
16. Lang C.B., Nicolai H. Nucl.Phys., 1982, B200, p.135.
17. Pearson R.B. Preprint NSF-ITP-82-149, Santa Barbara, 1982.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 декабря 1983 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Д1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д2,4-83-179	Труды ХУ Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Дубна, 1982.	4 р. 80 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М., Шмаков С.Ю. Р2-83-869

Применение стохастических методов вычисления в современных задачах квантовой теории поля

Излагается метод вычисления в рамках квантовой теории поля, основанный на способе генерации конфигурации калибровочного поля по методу Монте-Карло и стохастическом обращении большой разреженной матрицы. Применение метода проиллюстрировано на примере вычисления фермионного конденсатного матричного элемента.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Makhaldiani N.V., Müller-Preussker M., Shmakov S.Yu. P2-83-869

Application of Stochastic Calculation Methods in Modern Problems of Quantum Field Theory

The method of calculations in the framework of the lattice quantum field theory with the Monte Carlo procedure of generation of the gauge field configurations and stochastic inversion of large sparse matrix is considered. The application of the method is illustrated in the calculation of the fermion condensate matrix element.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой