12/III-84

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-83-886

И.Л.Боголюбский, А.А.Боголюбская

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПРОПАГАТОРА КВАРКОВ В РЕШЕТОЧНОЙ КВАНТОВОЙ ХРОМОДИНАМИКЕ

1983

Решеточный подход оказался весьма плодотворным для моделирования с помощью ЭВМ мира адронов на основе квантовой хромодинамики[I-II]. Эти исследования выполняются на 4-мерной решетке и требуют большой вычислительной работы. Поэтому "решеточная технология" должна строиться на базе максимально эффективных методов, оптимизированных алгоритмов и программ для ЭВМ. Для примера укажем, что надежная численная оценка функциональных интегралов, выполняемая при решеточном моделировании калибровочных теорий, была бы вряд ли возможна без использования метода Монте-Карло с "выборкой по важности" (см., например, обзор[I2]). Ключевым вопросом при вычислении на решетке спектра масс адронов является нахождение пропагаторов кварков при заданном распределении на ребрах решетки калибровочного поля, определяемого матрицами неабелевой группы $SU^c(3)$. Трудности возникают при нахождении пропагаторов легких кварков (u,d), и связаны они с тем, что при уменьшении массы кварка m в спектре собственных значений "фермионной матрицы" (элементы обратной фермионной матрицы есть пропагаторы фермионов-кварков между узлами решетки) появляются значения, сколь угодно близкие к нулю.

При решеточной аппроксимации действия квантовой хромодинамики $S_{QCD} = S_G + S_F$ (G – глюоны, F – фермионы в поле глюонов) основные трудности связаны с членом S_F. В работах[I-II] для S_F было использовано как представление Вильсона, так и Когута-Сасскинда (см., например,[I2] и цитированную там литературу); недавно Джекобсом предложена новая интересная аппроксимация S_F [I3]. В данной работе используется формулировка Вильсона. В ней дискретному аналогу калибровочно-инвариантного оператора Дирака ($D(U) + m$) соответствует фермионная матрица

$$F_{x\alpha A,y\beta B}=\delta_{xy}\delta_{\alpha\beta}\delta_{AB}-kH_{x\alpha A,y\beta B}, \tag{I}$$

$$H_{x\alpha A,y\beta B}=(1+\gamma^{\mu})_{\alpha\beta}(U_{x\mu})_{AB}\delta_{x,y-\hat{\mu}}+(1-\gamma^{\mu})_{\alpha\beta}(U^{+}_{x-\hat{\mu},\mu})_{AB}\delta_{x,y+\hat{\mu}} .$$

Здесь дискретные индексы x,y выделяют узлы на решетке в четырехмерном ($D=4$) евклидовом пространстве, α, β – индексы матриц Дирака $\gamma^{\mu}(\alpha,\beta,\mu=1,2,3,4)$, A, B – цветовые индексы матриц $U_{x\mu}$, принадлежащих калибровочной группе $SU^c(3)$. Обозначение $U_{x\mu}$

показывает, что матрица задана на ребре с началом в узле x, ориентированном в положительном направлении оси с номером μ, $\hat{\mu}$ – единичный вектор по оси μ; ребру, проходимому из точки x в отрицательном направлении, соответствует эрмитово-сопряженная матрица $U^{+}_{x-\hat{\mu},\mu}$. Параметр $k=(8+2ma)^{-1}$ (его называют "хоппинг-параметром"), ma – безразмерная масса кварка, a – длина ребра решетки. Выбрана следующая нумерация узлов и ребер решетки: пусть узел задан четырехвектором $x=(x_1, x_2, x_3, x_4)$, $x_\mu=1,2,\ldots,N_\mu$, где N_μ – число узлов решетки по направлению с номером μ $(\mu=1,2,3,4)$. Тогда номер узла

$$n(x)=1+(x_1-1)+(x_2-1)N_1+(x_3-1)N_1N_2+(x_4-1)N_1N_2N_3 , \qquad (2)$$

а номер ребра $L_{x\mu}$, выходящего из этого узла в положительном направлении оси μ,

$$L_{x\mu}=n(x)+(\mu-1)n_{max} , \qquad (3)$$
$$n_{max} = N_1N_2N_3N_4 .$$

Матрица F имеет порядок $P=12N_1N_2N_3N_4$, где N_μ –число узлов решетки по оси μ. В большинстве работ /I,2,4–8,II/ для обращения этой матрицы был использован метод Гаусса-Зейделя (ГЗ), достаточно эффективный при $k \lesssim 0{,}I$. Однако по мере роста параметра k, соответствующего уменьшению m, метод ГЗ требует сначала все большего числа итераций, а потом и вовсе перестает сходиться в наиболее интересной для физики адронов области параметра k, определяемой массами легких кварков m_u, m_d.

Для построения универсально-сходящегося итерационного процесса мы выполнили первую трансформацию Гаусса /I4/ (т.е. вместо уравнения $FX=e$ рассмотрели уравнение $F^+FX=F^+e$, где F^+ – эрмитово-сопряженная матрица, e –единичный вектор, соответствующий номеру столбца X) и применили к преобразованной системе метод ГЗ. К сожалению, сходимость такого процесса оказалась очень медленной; причина состоит в том, что число обусловленности матрицы F^+F оказывается, как правило, очень большим: его можно оценить как квадрат такого же числа для матрицы F.

Далее мы обратились к методу сопряженных градиентов (МСГ) (см. /I4/), который обеспечивает получение решения для положительно определенной матрицы за P шагов. Для обращения фермионной матрицы независимо двумя группами /I5,I6/ был применен МСГ после первой трансформации Гаусса (в этих работах рассматривались фермионы Когута-Сасскинда). Было отмечено повышение эффективности при переходе от метода ГЗ к МСГ. Однако для физически интересных расчетов число необ-

ходимых итераций есть $N\sim 100\div 200$. Мы использовали другой вариант МСГ, оказавшийся, как показывают предварительные расчеты, более эффективным, чем использованный в /I5,I6/.

Чтобы найти элементы обратной матрицы $F^{-1}_{x_o y}$ с фиксированным индексом x_o и "бегущим" индексом $y=y_1,y_2,\ldots,y_{n_{max}}$ (а именно это требуется для вычисления масс адронов) при заданных индексах α, β, A, B, удобно вычислять элементы $C^{-1}_{yx_o}=F^{-1}_{x_o y}=X_{x_o y}$ матрицы C, определенной равенством

$$C_{x\alpha A,y\beta B} = F_{y\alpha A,x\beta B} ,$$

т.е. матрицы, получаемой из F транспонированием только по индексам x,y узлов решетки. Аналогично введем матрицу N такую, что

$$N_{y\alpha A,x\beta B} = H_{x\alpha A,y\beta B} .$$

Тогда нужно решить уравнение $CX=e$, где $X=\left\{X_{y\alpha A.x_o\beta B}\right\}$, $e=\delta_{yx_o}\delta_{\alpha\beta}\delta_{AB}$.

Предварительно преобразуем уравнение к виду

$$(E+kN)CX = (E+kN)e \qquad (4)$$

и применим к (4) МСГ после второй трансформации Гаусса. После некоторых преобразований получим расчетные формулы итерационного процесса:

$$\begin{aligned}
&R_o=e-CX_o ,\\
&P_o=C^+(E+kN^+)CR_o,\\
&R_{i+1}=R_i- a_iCP_i ,\\
&P_{i+1}=C^+(E+kN^+)CR_{i+1} + b_iP_i ,\\
&a_i= \left|(E+kN)R_i\right|^2 \left|P_i\right|^{-2} ,\\
&b_i= \left|(E+kN)R_{i+1}\right|^2 \left|(E+kN)R_i\right|^{-2} ,\\
&X_{i+1}=X_i+a_iP_i ,\\
&i=0,1,2,\ldots .
\end{aligned} \qquad (5)$$

Здесь X_o – начальное приближение, мы выбирали $X_o=e$.

Используя соотношения (5), мы выполнили пробные расчеты на решетке 3^4 с периодическими граничными условиями для всех полей. В случае "свободных" фермионов (все $U_{x\mu}=1$) процесс сходился к решению при всех значениях параметра $K \leq 0{,}3$ с относительной погрешностью $\delta < 10^{-12}$ за 5–6 итераций, причем с указанной точностью ответы совпадают с теоретически вычисленными значениями для "свободного" пропагатора кварков. Такая же сходимость к решению наблюдалась и при нескольких произвольно выбранных значениях k, таких, что $0{,}3 < k < 1$. Одна итерация этого варианта МСГ требует примерно в 4 раза большего количества операций по сравнению с методом ГЗ, но несмотря на это наш вариант МСГ оказывается в несколько раз эффективнее метода ГЗ, даже в самых простых случаях (например при $k=0,\mathrm{I}$), за счет значительно меньшего числа необходимых для сходимости итераций. Наши расчеты показали, что в случае "свободных" кварков число необходимых итераций МСГ не увеличивается даже при $k \to k_{cr} = (2D)^{-1} = 0{,}125$ и далее при переходе в закритическую ($k > k_{cr}$) область (где итерации метода ГЗ расходятся).

Во второй серии расчетов на ребрах с номерами $L=1,2,\ldots,L_{max}$ ($L_{max}=4\ N_1N_2N_3N_4\ = 4\cdot 3^4$) были заданы $SU(3)$ - матрицы вида $U(L)=\mathbb{1}\cdot\exp(2\pi iL/L_{max})$. Расчеты проводились при $k\in[0.1, 0.17]$.

В третьей серии на ребрах решетки с помощью метода "теплового резервуара", реализованного с использованием $[SU(2)]_\ell$ ($\ell=1,2,3$) подгрупп /I7/, генерировались случайные наборы $\{U(L),\ L=1,2,\ldots L_{max}\}$ - "конфигурации" калибровочных полей (вероятность появления конфигурации пропорциональна $\exp(-S_G)$).

Ни в одном из расчетов второй и третьей серии не потребовалось больше 29 итераций для нахождения пропагатора с относительной погрешностью $\delta < 10^{-3}$. В большинстве случаев было достаточно I2 итераций.

Таким образом, основными достоинствами разработанного нами метода обращения матрицы (I) являются высокая эффективность и безусловная сходимость. Особо отметим, что метод естественным образом векторизуется. Это делает реальными расчеты, например, масс основных состояний мезонов и барионов на достаточно больших решетках при наличии компьютеров с большой оперативной памятью и возможностью организации большого числа "параллельных ветвей" вычислений. При этом безусловная сходимость метода позволяет проводить расчеты кваркового пропагатора на решетке сразу в физической области значений масс легких кварков, избегая экстраполяции, неизбежной при расчетах методом ГЗ, и появляющихся при ее использовании дополнительных неопределенностей. Кроме того, при расчетах сразу в области масс легких (u,d) кварков можно рассчитывать на адекватное моделирование киральных свойств КХД на решетке. В связи с этим важным является вопрос о выборе такой решеточной аппроксимации фермионной части действия КХД, которая не приводит к "удвоению фермионов" и сохраняет киральную инвариантность лагранжиана непрерывной КХД. Формулировка, предложенная в /I3/, по-видимому, удовлетворяет этим требованиям.

Авторы благодарны членам-корреспондентам АН СССР М.Г.Мещерякову и Н.Н.Говоруну, профессорам Е.П.Жидкову и В.Г.Маханькову за интерес к работе и поддержку. Авторы признательны П.Г.Акишину, Н.В.Махалдиани, М.Мюллер-Пройскеру, С.Ю.Шмакову за интересные обсуждения и полезную информацию.

Литература

1. Hamber H.,Parisi G. Phys. Rev. Lett.,1981, 47,p.1792; Phys. Rev., 1983, D 27 , p.208.
2. Weingarten D. Phys. Lett., 1982, B109, 57; Nucl. Phys., 1983, B215, p.1.
3. Hasenfratz A.,Hasenfratz P., Kunst Z., Lang C.B. Phys. Lett., 1982, B110, 289; ibid, 1982,B117, p.81.
4. Fucito F., Martinelli G.,Omero C., Parisi G., Petronzio R., Rapuano F. Nucl. Phys., 1982 , B210, p.407.
5. Gupta R., Patel A. Preprint CALT-68-966, Pasadena, 1982; Phys. Lett., 1983, B124, p.94.
6. Bernard C., Draper T., Olynyk K. Preprints UCLA/82/TEP/10, UCLA/82/TEP/20, Los Angeles, 1982; Phys. Rev., 1983, D27, p.227.
7. Lipps H., Martinelli G., Petronzio R., Rapuano F. CERN, Preprint TH-3548, Geneva, 1983.
8. Fukigita M., Kaneko T., Ukawa A. Preprint KEK-TH-58, 1983, Preprint INS-Rep.-472, Tokyo, 1983.
9. Hazenfratz P., Montvay I. Preprint DESY 83-072,Hamburg, 1983.
10. Gilchrist J.P., Schneider H., Schierholz G., Teper M. Preprint DESY 83-094, Hamburg, 1983.
11. Bowler K.C., Pawley G.S., Wallace D.J., Marinazi E.,Rapuano F. Edinburgh Preprint No. 82/236, Edinburgh, 1982.
12. Creutz M.,Jacobs L., Rebbi C. Phys. Reports,1983,95,No 4, p.201.
13. Jacobs L. Preprint NSF-ITP-82-106, Santa Barbara , 1982.
14. **Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, Москва-Ленинград, I963.**
15. Barbour I.M., Gilchrist J.P., Schneider H., Schierholz G.,Teper M. Preprint DESY 83-012, LAPP-TH-74, Hamburg, 1983.
16. Kogut J. et al. Preprint ILL-(TH)-83-10, Urbana, 1983.
17. Cabibbo N.,Marinari E. Physics Letters, 1982, B119, p.387.

Рукопись поступила в издательский отдел 23 декабря I983 года.

Боголюбский И.Л., Боголюбская А.А. P2-83-886
Эффективный метод вычисления пропагатора кварков в решеточной квантовой хромодинамике

Разработан эффективный метод обращения фермионной матрицы /нахождения пропагатора кварков в заданном на решетке глюонном поле/. Метод является безусловно сходящимся, требует малого числа итераций и легко векторизуется. Используются фермионы Вильсона.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Bogolubsky I.L., Bogolubskaya A.A. P2-83-886
Effective Method of Quark Propagator Calculation in the Lattice Quantum Chromodynamics

An effective method of inverse fermion matrix calculation /i.e. calculation of quark propagator in the gluon field defined on the lattice/ is elaborated. The method suggested is unconditionally convergent, requires rather small number of iterations and is easily vectorized. Wilson's fermions are used.

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