сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-84-302

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

МОНТЕ-КАРЛОВСКИЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ В СОВРЕМЕННЫХ ЗАДАЧАХ ТЕОРИИ ПОЛЯ НА РЕШЕТКЕ

1984

В данной работе мы рассматриваем методические аспекты численных расчетов по методу Монте-Карло в решеточной теории поля с фермионами и скалярами.

Основу современных представлений теоретической физики высоких энергий составляет теория квантованных полей [1]. Уравнения этой теории формально решаются в виде функциональных интегралов [2-6]. Эти интегралы удобны как для построения теории возмущений, так и для исследования характеристик, лежащих вне рамок теории возмущений, таких, как сила притяжения и температура деконфайнмента тяжелых кварков, массы адронов и др. [7,8].

Наша задача состоит в прямом вычислении этих интегралов. Для этого формулируется теория на евклидовой четырехмерной конечной решетке [9]. Функциональные интегралы при этом превращаются в обыкновенные интегралы с большой кратностью. Для конкретности дальнейшее рассмотрение будем вести на примере квантовой хромодинамики [10].

Первая часть работы посвящена описанию основных структур решеточной теории и проблеме перехода к непрерывному пределу.

Во второй части обсудим монте-карловские методы вычисления многократных интегралов по калибровочным степеням свободы и метод вычисления фермионного пропагатора с помощью монте-карловского метода обращения больших разреженных матриц [11].

В третьей части покажем применение этих методов на примере вычисления фермионных конденсатных матричных элементов [12].

В заключительной части рассмотрим современные специализированные и универсальные ЭВМ, применяемые для решения вычислительных задач данного класса.

1. СТРУКТУРА КВАНТОВОЙ ХРОМОДИНАМИКИ /КХД/ НА РЕШЕТКЕ

Основные объекты квантовой теории поля - средние по основному состоянию от функций фундаментальных полей - функций Грина, в решеточной формулировке КХД записываются так:

$$\langle Q(V,\bar{\Psi},\Psi)\rangle = \frac{N(Q)}{N(1)} = \frac{1}{N(1)} \int \prod_{\substack{\mu=1,2,3,4\\ n=1,2,\dots Z\\ Z=L_1L_2L_3L_4}} dV_\mu(n)\, d\bar{\Psi}(n)\, d\Psi(n) \times \qquad /1/$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{g^2} S(V,\bar{\Psi},\Psi)\right) Q(V,\bar{\Psi},\Psi),$$

где L_μ - линейный размер гиперкубической решетки в μ-ом направлении в единицах длины шага решетки a. Функционал действия S, определяющий теорию, удовлетворяет условиям:

1/ имеет локальный вид, $S = \sum_n s(n)$, где s(n) зависит от значений полей в окрестности узла n;

2/ s(n) полином по полевым переменным является инвариантом по отношению к калибровочным преобразованиям, преобразованиям симметрии четырехмерного куба и отражениям;

3/ S имеем правильный континуальный предел.

Действие состоит из калибровочного и фермионного слагаемых:

$$\frac{1}{g^2} S = \frac{1}{g^2} S_v + S_\psi , \qquad /2/$$

где вклад калибровочных /глюонных/ полей можно представить в общем виде:

$$S_v = -2[C_0 \sum \mathrm{Retr}\,\square + C_1 \sum \mathrm{Retr}\,\square\!\square \; + C_2 \sum \mathrm{Retr} \; + C_3 \sum \mathrm{Retr} \;] =$$

$$= - \sum_n \sum_{\mu=1,2,3,4} \; \sum_{\substack{\nu=\pm1,\pm2,\pm3,\pm4 \\ |\nu|\neq\mu}} \{ \frac{C_0}{2} \mathrm{Retr}(V_{\mu\nu}(n)\, V^+_{\nu\mu}(n)) + \qquad /3/$$

$$+ C_1 \mathrm{Retr}(V_{\mu\mu\nu}(n)\, V^+_{\nu\mu\mu}(n) +$$

$$+ \sum_{\substack{\rho=\pm1,\pm2,\pm3,\pm4 \\ |\rho|\neq\mu,\, |\rho|\neq|\nu|}} [V_{\mu\nu\rho}(n)\,(C_2 V^+_{\nu\rho\mu}(n) + \frac{C_3}{3} V^+_{\rho\nu\mu}(n))]\} ,$$

а вклад фермионов /кварков/ и их взаимодействие с глюонами выглядит так:

$$S_\psi = \sum_{n,m} \bar\Psi(n)(1 - M(V))_{nm} \Psi(m),$$

g - константа связи, n и m задают координаты узлов решетки, калибровочные степени свободы представляются в виде контурных фазовых факторов

$$V_{\mu_1\mu_2\ldots\mu_\ell}(n) = V_{\mu_1}(n) V_{\mu_2}(n+\mu_1) \ldots V_{\mu_\ell}(n+\mu_1+\ldots+\mu_{\ell-1}) ,$$

$$V_{-\mu}(n) = V_\mu(n-\mu)^+, \quad V_\mu(n) = e^{iagA^c_\mu(n)\,T^c + O(a^2)} ,$$

T^c, $C = 1,2,\ldots N_c^2 - 1$ - генераторы "цветной" группы $SU(N_c)$ в фундаментальном представлении*. По переменным $V_\mu(n)$ берется интеграл в /1/ по инвариантной мере Хаара /14/ для группы SU(N)

$$\int dV F(V) = \int d(VU)\, F(V) = \int d(UV)\, F(V) ,$$

U - произвольный элемент рассматриваемой группы. Фермионные степени свободы описываются грассмановыми переменными $\bar\Psi$, Ψ, для которых имеется формула /15/:

$$\int d\bar\Psi\, d\Psi \exp(-\bar\Psi A \Psi + \bar\eta\Psi + \bar\Psi\eta) = \exp(\bar\eta A^{-1}\eta + \mathrm{tr}\ln A) . \qquad /4/$$

Для простоты мы рассмотрим один вид кварковых полей, $\Psi = \Psi^c_s$, где $c = 1,\ldots, N_c$ - индекс калибровочной группы, $s = 1,\ldots,2^{D/2}$ спиновый индекс, D - размерность евклидова пространства. В дальнейшем индексы спина и цвета явно не указываем. Матрица M имеет следующий общий вид:

$$M_{nm} = k \sum_{\pm\mu=1,2,3,4} [B P_\mu V_\mu(n) \delta_{n+\mu,m} + B' P'_\mu V_{\mu\mu}(n) \delta_{n+2\mu,m}] , \qquad /5/$$

где P_μ и P'_μ-операторы, определяющие спиновую структуру теории; параметры B, B′, C_0, C_1, C_2, C_3 следует выбирать таким образом, чтобы в континуальном пределе $(a \to 0)$ решеточное действие давало непрерывное действие с высокой точностью аппроксимации; параметр k называется параметром перескока. В континуальном пределе он явно выражается через массу кварка. Для заданного типа действия свободными параметрами являются k, g и a. В настоящее время в монте-карловских вычислениях используются разные действия /2/, /3/, /5/, данные для которых представлены в табл. 1.1 и 1.2.

Группа симметрии регулярной гиперкубической решетки, рассмотрением которой мы ограничиваемся в данной работе, представляет собой конечную подгруппу непрерывной группы трансляций, вращений и отражений четырехмерного евклидова пространства. Более широкой конечной подгруппой симметрии обладает симплектическая решетка /21/, отсюда относительно быстрое восстановление непрерывной симметрии в скейлинговой области /определение скейлинговой области смотрите в следующей части/. Рассматриваются также теории на нерегулярных решетках /22,23/. При этом сначала случайно генерируются узлы решетки согласно некоторому распределению, потом наводится калибровочная структура на заданной конфигурации решетки. Такие решетки обеспечивают сохранение непрерывной симметрии евклидова пространства и в секторе сильной связи.

---

*Дальнейшее обобщение действия /3/ достигается включением других неприводимых представлений. Например, т.н. смешанное действие /13/ содержит вклад из присоединенного представления.

Таблица 1.1

Калибровочные действия /3/

Действия	C_0	C_1	C_2	C_3
Вильсона[9]	1	0	0	0
улучшенное по Симанчику[16]	$5/3 + O(g^2)$	$-1/12 + O(g^2)$	$O(g^2)$	$O(g^2)$
улучшенное по ренормгруппе Вильсона[17]	4.376	−0,252	0	−0,17

Таблица 1.2

Фермионные действия /5/

Действия	B	B′	$P_{\pm\mu}$	$P'_{\pm\mu}$	r	θ	ma
Вильсона[9]	1	0	$r \pm \gamma_\mu$	–	1	–	$\frac{1-2rDk}{2k}$
Остервелдера и Сейлера[18]	1	0	$re^{i\theta\gamma_5} \pm \gamma_\mu$	–	1	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1-2rDke^{i\theta\gamma_5}}{2k}$
улучшенное вильсоновское[19]	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{6}$	$r \pm \gamma_\mu$	$2r \pm \gamma_\mu$			$\frac{1-2rDk}{2k}$
Когута и Саскинда[20]	1	0	$\pm\frac{1}{2}\eta_\mu$	–			$\frac{1}{2k}$

Здесь m – масса кварка, $\eta_\mu(n) = (-1)^{n_1+n_2+\ldots+n_{\mu-1}}$, γ_μ – евклидовы матрицы Дирака, $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}$, $\delta_{\mu\mu} = 1$, $\delta_{\mu\neq\nu} = 0$.

Действие Вильсона $(r \neq 0)$ неинвариантно по отношению к преобразованию $\bar{\Psi} \to \bar{\Psi} e^{i\gamma_5\theta}$, $\Psi \to e^{i\gamma_5\theta}\Psi$ – в отличие от КХД /при $m = 0$/ здесь явно нарушена киральная инвариантность. Для исследования спонтанного нарушения этой симметрии важно рассматривать кирально-симметричные /например, при $r = 0$/ действия. При этом, однако, действие /5/ описывает шестнадцать одинаковых фермионных полей вместо желаемого одного поля – имеет место фермионное

вырождение /ФВ/. С помощью преобразования[24] $\Psi = A\Psi$, $\bar{\Psi} = \bar{\chi}A^+$, где $A(n) = \gamma_1^{n_1}\gamma_2^{n_2}\gamma_3^{n_3}\gamma_4^{n_4}$, действие /2/ при $r = 0$ сводится к действию для четырех одинаковых полей χ, описываемых действием Когута-Саскинда. Ограничившись рассмотрением только одного поля χ, получаем лишь четырехкратное ФВ. Далее, введя соответствующим образом массовый член, эти четыре фермиона можно интерпретировать[25] как u-, d-, s- и c-кварки. При $r \neq 0$ ФВ отсутствует, дополнительные фермионы имеют массы $\sim 1/a$ и в непрерывном пределе отщепляются.

При рассмотрении теории с конечной температурой[26] и/или/ плотностью барионов[27] структура действий /2/, /3/, /5/ изменяется мало. Температура равна $T = (aL_4)^{-1}$, для бозонных /фермионных/ полей в температурном направлении налагаются /анти/ периодические граничные условия; для введения химпотенциала h проектор $P_{\pm 4}$ заменяется на $\tilde{P}_{\pm 4} = P_{\pm 4}\, e^{\pm h}$.

Модели, объединяющие электромагнитное и слабое взаимодействия[28], кроме калибровочных и фермионных полей, содержат также скалярные поля. Для задания таких теорий на решетке приходится рассматривать нелокальные фермионные действия[29], так как описание нейтрино /в виде безмассового фермиона с определенной спиральностью/ с помощью локального действия запрещается теоремой, доказанной в[30].

В качестве другого примера теории, содержащей скалярные поля, отметим расширенную КХД[31], включающую наравне с фермионными кварками также скалярный кварк, являющийся цветовым триплетом с зарядом 2/3. Такие скалярные поля на решетке задаются добавлением в действие /2/ аналогичного спинорным полям слагаемого S_Φ:

$$S_\Phi = \lambda \sum_n (\bar{\Phi}^a(n)\Phi^a(n))^2 + \sum_{n,m} \bar{\Phi}^a(n)\,(I - \mathfrak{M})^{ab}_{nm}\,\Phi^b(m), \qquad /6/$$

где Φ – комплексное скалярное поле, преобразуемое по фундаментальному представлению цветной группы, $\mathfrak{M}_{nm} = \kappa \sum_{\pm\mu} V_\mu(n)\,\delta_{n+\mu,m}$; κ в континуальном пределе выражается через массу скалярного кварка: $\kappa = (2D + m^2a^2)^{-1}$, $\kappa \lesseqgtr 1/8$ соответствует $m^2 \gtreqless 0$.

С помощью функционального интегрирования по вспомогательному скалярному полю σ нелинейную зависимость от Φ в /6/ можно представить в виде квадратичной зависимости, после чего, воспользуясь аналогичным /4/ соотношением

$$\int d\bar{\Phi}\, d\Phi \exp(-\bar{\Phi}A\Phi + \bar{J}\Phi + \bar{\Phi}J) = \exp(\bar{J}A^{-1}J - \mathrm{tr}\ln A), \qquad /7/$$

можно взять интеграл в /1/ по фермионным и скалярным полям:

$$\langle Q(V, \Psi, \Phi)\rangle = \frac{1}{N(1)} \int \prod dV_\mu(n)\, d\sigma(n) \times$$
$$\times \exp\{-\frac{1}{g^2} S_{eff}[V, \sigma]\}\, Q(V, X(V), Y(V, \sigma)), \qquad /8/$$

где

$$\frac{1}{g^2} S_{eff} = \frac{1}{g^2} S_v + \frac{1}{\gamma^2}\sigma^2 - \mathrm{tr}\ln X^{-1}(V) + \mathrm{tr}\ln Y^{-1}(V,\sigma),$$

$$X^{-1}(V) = 1 - M(V), \quad Y^{-1}(V,\sigma) = 1 - \mathfrak{M}'(V,\sigma),$$

$$\mathfrak{M}'(V,\sigma)^{ab}_{nm} = i\delta_{nm}\delta^{ab}\kappa\sigma(n) + \mathfrak{M}(V)^{ab}_{nm} \quad ; \quad \gamma^2 = \frac{4\lambda}{\kappa^2}.$$

Представление типа /8/ является исходным для вычисления функции Грина с помощью метода Монте-Карло.

2. ПРОБЛЕМА КОНТИНУАЛЬНОГО ПРЕДЕЛА

Расчеты в теории, сформулированной на конечной решетке, только тогда относятся к непрерывной теории, когда характерные размерные параметры ξ - корреляционные длины /$\xi = 1/m$, m - например, масса легкого глюбола/ и размер решетки - находятся в соотношении

$$a \ll \xi \ll La. \qquad /9/$$

Вследствие ренормируемости теории все размерные величины, обезразмеренные соответствующей степенью a, являются функциями только безразмерной константы связи g /массами кварков пренебрегаем/. Для величин размерности масс m_i имеем

$$am_i = f_i(g). \qquad /10/$$

Наблюдаемые значения не должны зависеть от шага решетки:

$$a\frac{d}{da} m_i = 0. \qquad /11/$$

Из /10/ и /11/ следует, что $f_i = \beta(g)\frac{\partial}{\partial g} f_i$ или $f_i(g) = c_i e^{\int^g \frac{dg}{\beta(g)}}$, где $\beta(g) \equiv a\frac{d}{da} g(a)$, β - функция ренормгруппы [32]. Следовательно, все размерные величины выражаются через универсальную масштабную константу Λ:

$$\Lambda \equiv \frac{1}{a} e^{\int^g \frac{dg}{\beta(g)}}, \quad m_i = c_i\Lambda. \qquad /12/$$

С точностью двухпетлевых вкладов по теории возмущений имеем скейлинговую зависимость для $a = a(g)$:

$$a\Lambda = e^{-\frac{1}{2b_0 g^2}} (b_0 g^2)^{-\frac{b_1}{2b_0^2}} (1 + O(g^2)), \qquad /13/$$

где коэффициенты β-функции b_0 и b_1 не зависят от схемы вычитания и в глюодинамике имеют вид $b_0 = \frac{11}{3}\frac{N_c}{16\pi^2}$, $b_1 = \frac{34}{3}(\frac{N_c}{16\pi^2})^2$.

Континуальный предел считается достигнутым, если численный расчет дает результат,совместимый со скейлинговым поведением/13/. Проверка этого условия необходима в каждом частном случае. Соотношение /9/ определяет скейлинговую область для значений константы связи. Расчеты на больших решетках, например, для натяжения струны [33], показали отклонение от двухпетлевой зависимости /13/. Поэтому важно учитывать трехпетлевую, зависящую от схемы вычитания поправку [34,35] и/или определить β-функцию с учетом непертурбативных эффектов [36-38].

Значение Λ можно определить, вычислив некоторую наблюдаемую величину и сравнив полученное значение с известным из эксперимента. Вычисление [39-41] коэффициента силы притяжения между тяжелыми кварком и антикварком - "натяжения струны" σ – дало значение Λ = /0,007$\pm$0,001/$\sqrt{\sigma}$, $\sqrt{\sigma} \simeq$ 420 МэВ. Расчеты на больших решетках /с размером 16^4/ [33] указывают на большее значение для отношения $\Lambda/\sqrt{\sigma}$. В области $1/g^2 \in$ /0,9÷1,0/, в которой обычно наблюдается скейлинг, из формулы /13/ получаем $a \in$ /0,8÷1,7/ ГэВ$^{-1}$. Следовательно, для исследования флуктуации с характерным размером 1Ф требуется решетка с размером $4^4 \div 8^4$ и более. Типичная кратность интеграла /8/ для решетки с числом узлов 8^4 равна 300000.

3. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО /МК/ В РЕШЕТОЧНОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

В настоящее время существует ряд подходов к задаче вычисления континуальных интегралов теории поля: метод квадратурных формул [42-45], метод молекулярной динамики [46-48], стохастическое квантование [49-50]. Метод Монте-Карло для этого круга задач впервые был применен в работе [51] к проблеме полярона [52-53]. Применение метода МК основано на формальной аналогии вакуумных средних /1/, /8/ со средними по каноническому статистическому ансамблю для классической системы с конечным числом степеней свободы. Статистический вес каждой решеточной полевой конфигурации $\{V_\mu(n), \sigma(n)\}$ задается распределением $\rho[V,\sigma] \doteq \exp(-\frac{1}{g^2} S_{eff}[V,\sigma])$. Роль температуры формально играет g^2.

Процедура МК генерирует полевые конфигурации $\{V,\sigma\}_t$, $t = 1,2,\ldots N_t$ с вероятностью $W[V,\sigma] = \rho[V,\sigma]/\int \Pi dV_\mu(n) d\sigma(n) \times \rho[V,\sigma]$. Для оценки величины /8/ имеем

$$\langle Q\rangle_{N_t} \equiv \frac{1}{N_t}\sum_{t=1}^{N_t} Q|_{\{V,\sigma\}=\{V,\sigma\}_t} \xrightarrow[N_t\to\infty]{} \langle Q\rangle. \qquad /14/$$

Ошибка в соотношении /14/ $\Delta(\langle Q\rangle)_{N_t}$ обычно оценивается формулой
$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{N_t - 1}}\sqrt{\langle Q^2\rangle - \langle Q\rangle^2}\,.$$

В случае отсутствия фермионных и скалярных полей калибровочные конфигурации $\{V_\mu(n)\}$ генерируются соответственно действию $S_{eff} = S_v$ /3/. При этом переменные $V_\mu(n)$ выбираются из распределения

$$\rho(V_\mu) = \exp\left(-\frac{1}{g^2}\,\mathrm{tr}\, V_\mu\, f(V_\nu)_{\nu\neq\mu}\right), \qquad /15/$$

где функция f зависит только от соседних к $V_\mu(n)$ значений V_ν. Если новое значение переменной V'_μ генерируется независимо от старого значения V_μ, то процедура называется алгоритмом теплового резервуара. Генерация одного состояния калибровочного поля $\{V_\mu(n)\}$ в случае действия Вильсона для группы SU(3) и решетки с объемом 8^4 с помощью алгоритма теплового резервуара[40] на ЭВМ ЕС-1060 требует примерно 8 мин. Вычисление наблюдаемых величин Q для заданной конфигурации занимает не меньше времени. Если запоминать $V_\mu(n)$ в виде 3x3 комплексной матрицы /машинное слово 4 байта/, необходима память $18\times4\times8^4\times4 \simeq 1{,}2$ Мбайт. Требуемую память можно сократить до 800 кбайт, если задавать $V_\mu(n)$ с помощью двух комплексных трехмерных векторов. Дальнейшее сокращение памяти /требуется минимум 8 действительных чисел на переменную V_μ/ нецелесообразно вследствие значительного увеличения числа арифметических операций. Для сравнения отметим, что генерация одной калибровочной конфигурации для решетки 8^4 на ЭВМ IBM 3081 занимает 1/4 мин[54]. Для получения разумного с точки зрения статистических ошибок результата, в зависимости от вычисляемой величины, кроме начальных итераций, необходимых для перехода из произвольного начального состояния в равновесное, требуется от ста /например, для топологической восприимчивости вакуума[55]/ до десятков тысяч /для массы глюбола[56]/ калибровочных конфигураций для каждого значения g^2 из скейлинговой области.

Для качественных исследований часто достаточно вместо группы SU(3) рассматривать простейшую неабелеву группу SU(2). Дальнейшее ускорение счета может быть достигнуто путем аппроксимации исходной группы конечной подгруппой или конечным подмножеством. Группа SU(2), например, хорошо аппроксимируется подгруппой икосаэдра[57]. Для группы SU(3) максимальную конечную подгруппу G(1080) необходимо расширить до регулярного подмножества с числом элементов 38880[58]. Группу SU(N) можно также аппроксимировать случайно выбираемой подгруппой SU(2)[59]. В общем случае, когда эффективное действие S_{eff} имеет достаточно сложный /нелокальный, в случае присутствия кварковых полей/ вид и алгоритм теплового резервуара трудно реализовать, применяется метод Метрополиса[60], согласно которому новые пробные значения полей

(V'_μ, σ') выбираются из окрестности старых значений (V_μ, σ). Старые значения заменяются новыми, если $\rho > \epsilon$, где

$$\rho = \exp(-\Delta S_{eff})\,,$$

$$\Delta S_{eff} = \frac{1}{g^2} S_{eff}[V', \sigma'] - \frac{1}{g^2} S_{eff}[V, \sigma] = \frac{1}{g^2}(S_{v'} - S_v) + \frac{1}{\gamma^2}(\sigma'^2 - \sigma^2) -$$
$$- \mathrm{tr}\ln(I - X(V)(M(V') - M(V))) + \mathrm{tr}\ln(I - Y(V,\sigma)(\mathfrak{M}'(V',\sigma') - \mathfrak{M}'(V,\sigma)))\,,$$

а ϵ – равномерно распределенное случайное число из интервала /0,1/. Матрицы $M(V') - M(V)$ и $\mathfrak{M}'(V',\sigma') - \mathfrak{M}'(V,\sigma)$ имеют лишь несколько ненулевых элементов. Поэтому из матриц X и Y с характерными размерами 50000x50000 и 13000x13000 требуется вычислить только несколько элементов. Для этого обычно применяют методы Гаусса-Зайделя[61], сопряженных градиентов[62] или псевдофермионов[63]. Рассмотрим метод[11], основанный на суммировании ряда Неймана обратной матрицы* по методу Монте-Карло:

$$X = \sum_{n\geq 0} M^n. \qquad /16/$$

Каждому слагаемому в /16/ $(M^n)_{sf} = \sum_{i,j,\dots,\ell} M_{si}M_{ij}\dots M_{\ell f}$ соответствует траектория длиной n, соединяющая две точки s и f. Эти траектории можно описать вектором длиной $n = n_0 + 2J$, $n_0 = |f - s|$, $c_n = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$, где $\mu_i = \pm1, \pm2, \pm3, \pm4$ указывает направление i-го шага траектории. Число шагов в μ-м направлении N_μ ограничено условием $\sum_{\mu=1}^{4} N_\mu = J$. Для заданного $\{N_\mu\}$ имеем

$$\frac{n!}{(N_1!)^2(N_2!)^2(N_3!)^2(N_4+n_0)!\,N_4!} \qquad /17/$$

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

$$I = \sum_{N_1+N_2+N_3+N_4} 1 = \frac{1}{6}(J+1)(J+2)(J+3) \qquad /18/^{**}$$

---

*Если необходимо вычислить несколько элементов большой обратной матрицы, стохастический метод обращения выгоднее итерационных методов[64].

**В D-мерном случае $I = \sum_{N_1+\dots+N_D} 1 = \dfrac{(J+D-1)!}{J!(D-1)!}$.

наборов $\{N_\mu\}$ при заданном J. Формулу /16/ перепишем в виде

$$X_{sf} = \sum_J \frac{W(J)}{Z} \sum_{N_1 N_2 N_3 N_4}^{N_1+N_2+N_3+N_4=J} \sum_{\substack{(2J+n_0)! \\ \text{перестановок}}} \frac{\frac{Z}{W(J)}(M^{2J+n_0})_{sf}}{(N_1!)^2(N_2!)^2(N_3!)^2(N_4+n_0)!N_4!} \quad /19/$$

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

Распределение $W(J)$ выбираем так, чтобы минимизировать дисперсию монте-карловской оценки. Для этого можно использовать, например, информацию о поведении коэффициентов в разложении вычисляемой величины по степеням k /см. ур./21//. На этом пути возможна разработка "самоулучшающихся" алгоритмов. Оценка суммы имеет вид

$$X_{sf} \simeq \frac{1}{N_t} \sum_{t=1}^{N_t} \frac{\frac{Z}{W(J)}(M^{2J+n_0})_{sf}}{(N_1(t)!)^2 (N_2(t)!)^2 (N_3(t)!)^2 (N_4(t)+n_0)!\, N_4(t)!} . \quad /20/$$

При этом траектории выбираются по длине с распределением $W(J)\,I(2J+n_0)!/Z$, а по $N_1 \dots N_4$ и последовательности шагов μ_i однородно.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФЕРМИОННЫХ КОНДЕНСАТНЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Применение данного метода проиллюстрируем на примере вычисления в приближении $\mathrm{tr}\ln x^{-1} \simeq 0$ матричных элементов для важных в подходе полуфеноменологических КХД правил сумм[65] конденсатов[12]

$$\langle\bar\Psi\Psi\rangle,\ \langle(\bar\Psi\gamma_\mu\Psi)^2\rangle,\ \langle(\bar\Psi\gamma_\mu\gamma_5\Psi)^2\rangle,\ \langle(\bar\Psi\gamma_\mu t^a\Psi)^2\rangle,\ \langle(\bar\Psi\gamma_\mu\gamma_5 t^a\Psi)^2\rangle .$$

Эти конденсаты через матрицу $X^{ab}_{\alpha\beta} = X^{ab}_0\delta_{\alpha\beta} + iX^{ab}_j\sigma^j_{\alpha\beta}$ выражаются так:

$$M \equiv \langle\bar\Psi\Psi\rangle = 2\langle X^{aa}\rangle \simeq 8 + \sum_{J=2}^{J_{max}} B_J K^{2J} ,$$

$$M_1 \equiv \langle(\bar\Psi\gamma_\mu\Psi)^2\rangle = 4\langle(\mathrm{tr}X_0\gamma_\mu)^2\rangle - 2\langle\mathrm{tr}(X_0\gamma_\mu)^2\rangle + 2\langle\mathrm{tr}(X_j\gamma_\mu)^2\rangle ,$$

$$M_2 \equiv \langle(\bar\Psi\gamma_\mu\gamma_5\Psi)^2\rangle = 4\langle(\mathrm{tr}X_0\gamma_\mu\gamma_5)^2\rangle - 2\langle\mathrm{tr}(X_0\gamma_\mu\gamma_5)^2\rangle + 2\langle\mathrm{tr}(X_j\gamma_\mu\gamma_5)^2\rangle,$$

$$M_3 \equiv \langle(\bar\Psi\gamma_\mu t^a\Psi)^2\rangle = -4\langle(\mathrm{tr}X_j\gamma_\mu)^2\rangle - 6\langle\mathrm{tr}(X_0\gamma_\mu)^2\rangle - 2\langle\mathrm{tr}(X_j\gamma_\mu)^2\rangle ,$$

$$M_4 \equiv \langle(\bar\Psi\gamma_\mu\gamma_5 t^a\Psi)^2\rangle = -4\langle(\mathrm{tr}(X_j\gamma_\mu\gamma_5)^2\rangle - 6\langle\mathrm{tr}(X_0\gamma_\mu\gamma_5)^2\rangle - 2\langle\mathrm{tr}(X_j\gamma_\mu\gamma_5)^2\rangle . \quad /21/$$

Вычисления проведены в случае калибровочной группы $SU(2)$, аппроксимируемой подгруппой икосаэдра и одного сорта фермионов на решетке с объемом 6^4. Результаты вычисления в зависимости от $k(g)$ соответствующей реалистической массы π-мезона[66] приведены в табл.2. Мы пока ограничились траекториями длиной не больше 12 ($J_{max} = 6$). Элементы матрицы X_{nn} вычислялись на каждой 30-й калибровочной конфигурации, выбираемой из 240 последовательных конфигураций в 36 узлах решетки. Для каждого узла генерировалось по 100 траекторий. В таблице указаны только статистические ошибки. Счет для каждого значения $k(g)$ занимал примерно 1 ч на ЕС-1060. Преимущество стохастического метода обращения матрицы по сравнению с другими методами обращения[61-63] в том, что он почти не требует дополнительной машинной памяти.

5. О СОВРЕМЕННЫХ СРЕДСТВАХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ

Следует отметить, что большинство современных задач КХД на решетке, например определение адронных масс, требует значительного увеличения размеров решетки. Такие задачи невозможно решать без помощи улучшенных алгоритмов и более мощных вычислительных машин[67,68]. Рассмотрим некоторые специализированные и универсальные ЭВМ, используемые в монте-карловских расчетах.

В Колумбийском университете строится[69] специализированная на монте-карловские расчеты ЭВМ с быстродействием 4 миллиарда 22-битных операций с плавающей запятой в секунду. Она состоит из 256 процессоров с памятью 160 кбайт каждый. Имеются также другие аналогичные машины[70-71]. В Нью-Йоркском университете строится "ультракомпьютер", который по проекту должен иметь 4000 процессоров и столько же модулей памяти. По мнению К.Вильсона проект "ультракомпьютер" является наилучшим с точки зрения перспектив параллельных вычислений в научных исследованиях.

В настоящее время для монте-карловских вычислений в решеточной теории поля используются[72] такие суперкомпьютеры, как Cray-1S, CYBER-205, пиковая производительность которой 800 Мфлоп/с, средняя - 400 Мфлоп/с; ЭВМ ICL-DAP, состоящая из 64x64 процессоров с памятью 4К каждый[73].

Из ЭВМ серии ЕС отметим ЕС-1035[74], ЕС-1045[75] и ЕС-1055[76], имеющих матричные модули и позволяющих за счет параллельной обработки значительно увеличить скорость вычислений операций векторной и матричной алгебры.

Таблица 2

$4/g^2$	2,I	2,2	2,3	2,45	2,65
$K(g^2)$	0,I83	0,I75	0,I62	0,I6I	0,I40
$\langle \Psi \bar{\Psi} \rangle$	6,69±0,I5	6,82±0,09	7,I4±0,04	7,39±0,02	7,55I±0,008
M_1	-I6,5±0,4	-20,6±0,I	-24,89±0,08	-27,22±0,02	-28,45±0,02
M_2	I9,9±0,3	2I,4±0,I	25,23±0,05	27,26±0,02	28,46±0,02
M_3	60,8±0,7	-28,4±0,4	-68,22±0,2	-80,79±0,06	-85,08±0,05
M_4	I83,5±I,I	II2,3±0,6	25,23±0,05	83,38±0,07	85,68±0,05
B_2	-(4,I9±0,07).I0^2	-(4,37±0,07)I0^2	-(4,63±0,07)I0^2	-(4.82±0,07)I0^2	-(5,I8±0,07)I0^2
B_3	-(I,09±0,03)I0^4	-(I,24±0,03)I0^4	-(I,40±0,03)I0^4	-(I,56±0,04)I0^4	-(I,75±0,04)I0^4
B_4	-(2,3±0,2)I0^5	-(2,6±0,2)I0^5	-(3,6±0,2)I0^5	-(3,7±0,2)I0^5	-(4,9±0,2)I0^5
B_5	-(3±I)I0^6	-(6±I)I0^6	-(7±I)I0^6	-(8±I)I0^6	-(I3±I)I0^6
B_6	-(6±90)I0^6	-(2±9)I0^7	-(I0±9)I0^7	-(I4±9)I0^7	-(I5±I0)I0^7

Представленные в данной работе методы позволяют "точно" /при соответствующих мощностях вычислительной техники/ исследовать задачи квантовой теории поля. Эти методы возникли на основе аналогичных методов статистической физики /77/ и впоследствии окажут существенное влияние не только на другие области физики, но и на вычислительную культуру в целом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. "Наука", М., 1976.
2. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир", М., 1968.
3. Попов В.Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. Атомиздат, М., 1976.
4. Гельфанд И.М., Яглом А.М. УФН, 1956, 11, с.77.
5. Березин Ф.А. УФН, 1980, 132, с.497.
6. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. "Мир", М., 1978, т.2.
7. Макеенко Ю.М. Решеточные калибровочные теории и их изучение методом Монте-Карло. Элементарные частицы. 10 школа ИТЭФ. Энергоиздат, М., 1983, вып.3, с.3.
8. Selected Papers in Lattice Gauge Theories and Monte Carlo Simulations. (Ed. by C.Rebbi). World Scientific, 1983.
9. Wilson K.G. Phys.Rev.D, 1974, 10, p.2445; Wilson K.G. Quarks and Strings on a Lattice - "New Phenomena in Subnuclear Physics". (Ed. by A.Zichichi). Plenum Press, New York, 1977.
10. Marciano W.J., Pagels H. Phys.Rep.C, 1978, 36, p.137.
11. Kuti J. Phys.Rev.Lett., 1982, 49, p. 183; De Grand T.A. et al. Colorado Univ. Preprint Colo-HEP 39, 1982; Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М., Шмаков С.Ю. ОИЯИ, Р2-83-869, Дубна, 1983.
12. Shifman M.A., Vainshtein A.I., Zakharov V.I. Nucl.Phys.B, 1979, 147, p.385.
13. Khokhlachev S.B., Makeenko Yu.M. Phys.Lett.B, 1981, 101, p.403; Creutz M. Phys.Rev.Lett., 1981, 46, p.1441.
14. Барут А., Рончка Р. Теория представления групп и ее приложения. "Мир", М., 1980.
15. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. "Наука", М., 1965.
16. Weisz P. Nucl.Phys.B, 1983, 212, p.1; Cursi G., Menotti P., Paffuti G. Phys.Lett.B, 1983, p. 205.
17. Wilson K.G. In: Recent Developments in Gauge Theories. (Ed. by G.t'Hooft et al.). Plenum Press, New York, 1980, p.243.

18. Osterwalder K., Seiler E. Ann.Phys., 1978, 110, p.440.
19. Wetzel W. HD-THEP 83-24, Heidelberg, 1983; Eguchi T., Kawamoto N. Nucl.Phys.B, 1984, 237, p. 609.
20. Kogut J.B. Rev.Mod.Phys., 1983, 55, p.775.
21. Drouffe J.M., Moriarty K.J.M. Nucl.Phys.B, 1983, 220, p.253.
22. Christ N.H., Fridberg R., Lee T.D. Nucl.Phys.B, 1982, 210, p.310;337.
23. Itzykson C. Fields on a Random Lattice. Saclay Preprint Dph. G/SPT/83, 148.
24. Kawamoto N., Smit J. Nucl.Phys.B, 1981, 192, p.100.
25. Mitra P. Phys.Lett.B, 1983, 123, p.77.
26. Mclerran L., Svetitsky B. Phys.Rev.D, 1981, 24, p.450; Ильгенфриц Э.-М., Крифганц И. ЯФ, 1983,38,с.737; Гердт В.П., Митрюшкин В.К. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, с.400.
27. Hasenfratz P., Karsch F. Phys.Lett.B, 1983, 125, p.308; Kogut J. et al. Nucl.Phys.B, 1983, 225, p.93.
28. Abers E.S., Lee B.W. Phys.Rp.C, 1973, 9, p.1.
29. Drell S.D., Weinstein M., Yankielowicz S. Phys.Rev.D., 1976, 14, p.1627.
30. Nilsen H.B., Ninomiya M. Nucl.Phys.B, 1981, 193, p.173.
31. Игнатьев А.Ю. и др. Цветные скаляры и новые адроны - "Кварки 82". ИЯИ АН СССР, М., 1983.
32. Gell-Mann M., Low F.E. Phys.Rev., 1954, 95, p. 1300; Владимиров А.А., Ширков Д.В. УФН, 1979, 129, с.407.
33. Fukugita M., Kaneko T., Ukawa A. Tokyo Preprint KEK-TH 63, 1983; Gutbrod F. et al. Phys.Lett.B, 1983, 128, p. 415; Parisi G., Petronzio R., Rapuano F. Phys. Lett.B, 1983, 128, p. 418; Barkai D., Creutz M., Moriarty K.J.M. Phys.Rev.D., 1984, 29, p. 1207
34. Lang C.B. et al. Phys.Rev.D, 1982, 26, p.2028; Sharatchandra H., Weisz P. DESY Preprint. DESY 81-083, 1981.
35. Ellis R.K., Martinelli G. Frascati Preprint LNF-83/84(P), 1983.
36. Ильгенфриц Э.М., Казаков Д.И., Мюллер-Пройскер М. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, с.350.
37. Makeenko Yu.M., Polikarpov M.I. Nucl.Phys.B, 1982, 205, p.386.
38. Gutbrod F., Montvay I. DESY Preprint. DESY 83-112, 1983.
39. Creutz M. Phys.Rev.Lett., 1980, 45, p.313.
40. Pietarinen E. Nucl.Phys.B, 1981, 190, p.349.
41. Ilgenfritz E. M., Müller-Preussker M. Z.Phys.C, 1983, 16, p.339.
42. Cameron R.H. A "Simpson's Rule" for the Numerical Evaluation of Winer's Integrals in Function Space. Duke Math. Journ., 1951, 18, p.111-130.
43. Владимиров В.С. О приближенном вычислении винеровских интегралов. УМН, 1960, 4/94/, с.129-135.

44. Янович Л.А. Приближенное вычисление континуальных интегралов. "Наука и техника", Минск, 1976.
45. Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Сидорова О.В. ОИЯИ, Р11-83-867, Дубна, 1983.
46. de Alfaro V., Fubini S., Furlan G. Phys.Lett.B, 1981, 105, p.462.
47. Callaway D.J.E., Rahman A. Phys.Rev.D, 1983, 28, p.1506.
48. Creutz M. Phys.Rev.Lett., 1983, 50, p.1441.
49. Migdal A.A. et al. ITEP Preprint, ITEP-186, M., 1983.
50. Parisi G., Wu Yong-shi. Sci.Sin., 1981, 24, p.483.
51. Гельфанд И.М., Фролов А.С., Ченцов Н.Н. Известия ВУЗов, сер.:Математика, 1958, 5/6/, с.32.
52. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н./мл./. Аспекты теории полярона. ОИЯИ, Р17-81-65, Дубна, 1981.
53. Фейнман Р. Статистическая механика. "Мир", М., 1975.
54. Montvay I. DESY Preprint, DESY 83-001, 1983.
55. Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, с.440.
56. Teper M. The Glueball Spectrum in (Lattice) QCD - a Status Report. Lapp-TH-91, 1983.
57. Bhanot G., Rebbi C. Nucl.Phys.B, 1981, 180, p.469.
58. Lisboa P., Michael C. Phys.Lett.B, 1982, 113, p.303.
59. Cabibbo N., Marinari E. Phys.Lett.B, 1982, 119, p.387.
60. Metropolis N. et al. J.Chem.Phys., 1953, 21, p.1087.
61. Weingarten D. Phys.Lett.B, 1982, 109, p.57.
62. Боголюбский И.Л., Боголюбская А.А. ОИЯИ, Р2-83-886, Дубна, 1983; Barbour I.M. et al. Phys.Lett.B, 1983, 127, p.475.
63. Hamber H.W. et al. Nucl.Phys.B, 1983, 225, p.475.
64. Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло. "Наука", М., 1973.
65. Вайнштейн А.И. и др. ЭЧАЯ, 1982, т.13, вып.3, с.542.
66. Fukugita M. et al. KEK-TH 58, Tokyo, 1982.
67. Pearson R.B. NSF-ITP-82-149, Santa Barbara, 1982.
68. Прангишвили И.В., Виленкин С.Я., Медведев И.Л. Параллельные вычислительные системы с общим управлением. Энергоиздат, М., 1983.
69. Christ N., Terrano A.E. Columbia Univ.Preprint, CU-TP-261, 1983.
70. Otto S. et al. Caltech Preprint CALT 68-985, 1983.
71. Hoshino T., Shirakawa T., Kawai T. PACS, A Parallel Microprocessor Array for Scientific Calculations. In: ACM Trans.Computer Systems, 1983, 1.
72. Kogut J.B. "Quark Matter'83". Conference Summary of Theory. Illinois Univ.Preprint, ILL-TH-83-45, 1983.
73. Bowler K.C. Edinburgh Preprint No.83/250, 1983.
74. Никлов Г.П. и др. Матричный процессор ЕС-2335 для вычислительной системы ЕС-1035. В кн.: Вычислительная техника социалистических стран. "Финансы и Статистика", М., 1981, вып.10.

75. Семенджян М.А., Налбандян Ж.С. Матричный процессор ЕС-2345. "Финансы и Статистика", М., 1984.
76. Пржиялковский В.В., Ломов Ю.С. Технические и программные средства ЕС ЭВМ. "Статистика", М., 1980.
77. В сб.: Методы Монте-Карло в статистической физике. /Под ред. К.Биндера/. "Мир", М., 1982.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 мая 1984 года.

Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М., Шмаков С.Ю. P2-84-302

Монте-карловские методы вычислений в современных задачах теории поля на решетке

Дается обзор методов вычислений в рамках квантовой теории поля на решетке, основанных на монте-карловском моделировании конфигураций калибровочного поля и стохастическом обращении больших разреженных матриц. Применение методов иллюстрируется на примере вычисления фермионных конденсатных матричных элементов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Makhaldiani N.V., Müller-Preussker M., Shmakov S.Yu. P2-84-302

Monte Carlo Calculation Methods in Modern Problems of Lattice Field Theory

The methods of calculations in the framework of the lattice quantum field theory with Monte Carlo procedure of sumulation of the gauge field configurations and stochastic inversion of large sparse matrix is revised. The application of the methods is illustrated in the calculation of the fermion condensate matrix elements.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984