

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P2-85-962

Н. В. Махалдани

**ИЗБРАННЫЕ ВОПРОСЫ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ**

1985

В последнее время в вычислительной физике образовалось новое направление: вычислительная квантовая теория поля. ЭВМ в квантовой теории поля /КТП/ применялись и раньше^{/1/} /в основном для аналитических преобразований и дальнейшего вычисления интегралов соответствующих диаграмм Фейнмана/. Новыми методами в вычислительной КТП /ВКТП/ являются методы Монте-Карло и линейной алгебры для вычисления интегралов и обращения матриц с размерами, значительно превосходящими размеры рассматриваемых ранее задач^{/2/}.

В данной работе, являющейся первой из предполагаемого цикла работ, посвященного ВКТП, обсудим вопросы формулировки решаемых в рамках контролируемых приближений и доступных вычислительных ресурсов задач КТП. Опишем основные математические структуры^{/2/} решеточной формулировки КТП^{/3/}. Рассмотрим понятия фракталей и теории поля на фрактальных решетках; рассмотрим метод конечных элементов решения операторных уравнений квантовой теории /поля/ на примерах /ан/гармонического осциллятора, конформной квантовой механики одной частицы, квантовой механики частицы в кулоновском поле.

В последующих работах будут рассмотрены вопросы редукции квантовой хромодинамики /КХД/ при высоких температурах к трехмерной глюодинамике с топологическим членом. В качестве моделей, обладающих рядом свойств, напоминающих КХД, рассмотрим $Z(N)$ -калибровочные теории в двумерном пространстве-времени. При $N = 2, 3$ и ∞ эти модели решены точно. Далее рассмотрим методы Монте-Карло и молекулярной динамики; методы /стохастического/ обращения больших разреженных матриц, рассмотрим применение изложенных методов в вычислении средних по основному состоянию от локальных составных операторов, возникающих в подходе КХД правил сумм^{/4/}, при исследовании фазовой структуры единичных моделей калибровочных теорий поля и структурных функций адронов в глубоконеупругих реакциях; рассмотрим контурную формулировку КТП и струнные единые теории, проблему редукции пространственных измерений на основе фрактальной геометрии. Отметим, что в данном цикле работ мы обращаем основное внимание на описание математических структур ВКТП и применяемых методов вычислений, приложениям посвящены отдельные работы.

Основным принципом ВКТП является следующий: при исследовании сложной нелинейной теории, например КХД на адронных масштабах, необходимо перейти к такой формулировке теории, в которой в рамках контролируемых приближений и доступных вычислительных ресурсов возможно проводить реалистические вычисления.

Иными словами, необходимо сформулировать решаемую модель, аппроксимирующую исходную теорию в пределах требуемой точности. В соответствии с этим принципом в квантовой теории калибровочных /полей сформулирована модель РКТП /решеточная КТП/ ^{3/}.

1. ТЕОРИЯ ПОЛЯ НА РЕШЕТКЕ

В модели РКТП пространственно-временной континуум заменяется набором узлов конечной гиперкубической решетки* в евклидовом пространстве, и тем самым континуальные интегралы ^{5/} КТП сводятся к обыкновенным многократным интегралам. Основные объекты КТП - средние по основному состоянию от функции фундаментальных полей - функции Грина в РКТП записываются так ^{2/}:

$$\langle Q(V, \bar{\Psi}, \Psi) \rangle = \frac{N(Q)}{N(1)} = \frac{1}{N(1)} \int \prod_{\substack{\mu=1,2,\dots,D \\ n=1,2,\dots,z \\ z=L_1 L_2 \dots L_D}} dV_\mu(n) d\bar{\Psi}(n) d\Psi(n) \quad /1/$$

$$\times \exp(-\beta S(V, \bar{\Psi}, \Psi)) Q(V, \bar{\Psi}, \Psi),$$

где L_μ , $\mu = 1, 2, \dots, D$ - линейный размер гиперкубической решетки в μ -м направлении в единицах длины шага решетки a ; D - размерность евклидова пространства, получаемого из пространства Минковского стандартным приемом аналитического продолжения к мнимому времени ^{6/}. Функционал действия, определяющий теорию, удовлетворяет условиям:

- локальности, $S = \sum_n S(n)$, где $S(n)$ зависит от значения полей в окрестности узла n ;

- $S(n)$ инвариантно по отношению к калибровочным преобразованиям и преобразованиям симметрии D -мерного куба;

- S с уменьшением шага решетки переходит в действие непрерывной теории.

Действие состоит из калибровочного и фермионного слагаемых**:

$$S = S_V + g^2 S_\psi, \quad g^2 = \beta^{-1}, \quad /2/$$

где вклад калибровочных полей имеет вид ^{12/}

$$S_V = \sum_{\square} \text{Re tr} (I - \square) = 2 \sum_{\mu < \nu} \text{Re tr} (I - V_{\mu\nu}(n) V_{\nu\mu}(n)^\dagger), \quad /3/$$

* Другие варианты решеток рассмотрим позже.

** Общий вид действия, содержащий как частные случаи все известные ранее выражения, имеется в работе ^{12/}.

вклад фермионов /и их взаимодействие с калибровочными полями/ выглядит так:

$$S_\psi = \sum_{n,m} \bar{\Psi}(n) (I - M(V))_{nm} \Psi(m), \quad /4/$$

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

$$V_{\mu_1 \mu_2}(n) = V_{\mu_1}(n) V_{\mu_2}(n + \mu_1), \quad /5/$$

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

T^c , $c = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ - генераторы калибровочной группы $G = SU(N)$. По переменным $V_\mu(n)$ берется интеграл по инвариантной мере Хаара ^{7/} для группы $SU(N)$,

$$\int dV F(V) = \int d(VU) F(V) = \int d(UV) F(V), \quad /6/$$

где U - произвольный элемент рассматриваемой группы. Фермионные степени свободы описываются грассмановыми переменными ^{8/} $\bar{\Psi}$ и Ψ , для которых имеется формула

$$\int d\bar{\Psi} d\Psi \exp(-\bar{\Psi} A \Psi + \bar{\eta} \Psi + \bar{\Psi} \eta) = \exp(\bar{\eta} A^{-1} \eta + \text{tr} \ln A). \quad /7/$$

Матрица M имеет вид

$$M_{nm} = K \sum_{\pm \mu=1,2,\dots,D} P_\mu V_\mu(n) \delta_{n+\mu,m}, \quad /8/$$

где проектор $P_\mu = 1 + \gamma_\mu$, $\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$, $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}$, $\delta_{-\mu,\nu} = -\delta_{\mu,\nu}$; $K^{-1} = 2D + 2ma$, $ma = (1 - 2DK) / 2K$, m - масса фермиона.

Случай калибровочной группы $G = U(1)$ и одного типа фермионов соответствует квантовой электродинамике.

При $G = SU(3)$ и N_f типах фермионов ψ_f , m_f , $f = 1, 2, \dots, N_f$ получаем РКХД. Единые теории поля, кроме векторных и спинорных полей, содержат также скалярные поля. Скалярное поле из фундаментального представления калибровочной группы можно ввести добавлением в действие слагаемого

$$S_\Phi = \sum_{n,m} \bar{\Phi}^a(n) (I - \mathbb{M})_{nm}^{ab} \Phi^b(m) + \lambda \sum_n (\bar{\Phi}^a \Phi^a(n))^2, \quad /9/$$

где Φ - комплексное скалярное поле /скалярный кварк в расширенной КХД ^{9/}/;

$$\mathbb{M}_{nm} = \kappa \sum_{\pm \mu} V_\mu(n) \delta_{n+\mu,m},$$

$$\kappa^{-1} = 2D + m^2 a^2, \quad m^2 a^2 = (1 - 2D\kappa) / \kappa,$$

m - масса скалярного поля.

С помощью вспомогательного поля σ нелинейную зависимость от Φ можно свести к квадратной, после чего соотношение /7/ и аналогичная ей формула

$$\int d\bar{\Phi} d\Phi \exp(-\bar{\Phi} A \Phi + \bar{J} \Phi + \Phi J) = \exp(\bar{J} A^{-1} J - \text{tr} \ln A) \quad /10/$$

позволяют взять интеграл по фермионным и скалярным полям

$$\langle Q(V, \bar{\Psi}, \Psi, \bar{\Phi}, \Phi) \rangle = \frac{1}{N(1)} \int \prod dV_\mu(n) d\sigma(n) \quad /11/$$

$$\times \exp\{-\beta S_{\text{eff}}(V, \sigma)\} Q(V, X(V), Y(V, \sigma)),$$

где

$$\beta S_{\text{eff}} = \beta S_V + \beta_1 \sigma^2 - \text{tr} \ln X(V) + \text{tr} \ln Y(V, \sigma),$$

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

$$\mathbb{M}'(V, \sigma)_{nm}^{ab} = i \delta_{nm} \delta^{ab} \kappa \sigma(n) + \mathbb{M}(V)_{nm}^{ab}, \quad \beta_1 = \kappa^2 / 4\lambda.$$

Такое представление /2/ является исходным для вычисления функции Грина с помощью метода Монте-Карло. Заметим, что при $\lambda \ll 1$ поле Φ сильно флуктуирует, и прямое моделирование этого поля затруднительно. В нашем представлении /11/ малым значениям λ соответствуют $\beta_1 \gg 1$, и поле σ слабо флуктуирует в окрестности $\sigma = 0$. Следовательно, хотя нам необходимо вычислить обратную матрицу Y , наш метод может иметь преимущество относительно прямого моделирования поля Φ /10/. При $m^2 = -\mu^2 < 0$ нелинейный член в /9/ удобно представить в виде

$$\lambda (\bar{\Phi} \Phi - R^2)^2, \quad /12/$$

$$\text{где } \kappa^{-1} = 2D + \mu^2 a^2, \quad R^2 = \mu^2 a^2 / \kappa \lambda.$$

К эффективному действию добавляется слагаемое $i\kappa R^2 \sigma$. При больших β_1 /малые λ /

$$\sigma = -i\kappa R^2 / 2\beta_1 = -i 2\mu^2 a^2 / \kappa^2.$$

Скалярное поле из присоединенного представления калибровочной группы $SU(3)$ задается слагаемым

$$S_\Phi = \sum_n \text{tr} \Phi(n)^2 - \kappa \sum_\mu \text{tr} (\Phi(n) V_\mu(n) \Phi(n+\mu) V_\mu(n)^+) + \lambda (\text{tr} \Phi^2)^2, \quad /13/$$

После введения вспомогательного поля $\sigma \sim \text{tr} \Phi^2$ и интегрирования по Φ получаем выражение, содержащее обратную к $I - \kappa \mathbb{M}$ матрицу, где

$$\mathbb{M}_{nm}^{ab} = 2 \text{tr} (T^a V_\mu(n) T^b V_\mu(n)^+) \delta_{n+\mu, m}, \quad /14/$$

$\Phi = \sqrt{2} T^a \Phi^a$, $h(T^a T^a) = \frac{1}{2} \delta^{ab}$. В работе /11/ отмечается, что из-за сильных флуктуаций поля Φ прямым моделированием при малых λ невозможно считать. Наша формулировка позволяет вычислять при малых значениях λ .

2. КONTИНУАЛЬНЫЙ ПРЕДЕЛ

В теории поля, в отличие от физики конденсированного состояния, решетка имеет вспомогательный характер. Проводимые расчеты только тогда соответствуют непрерывной теории, когда характерный размерный параметр решаемой задачи ξ /например, $\xi = 1/\lambda$, где m - масса частицы/ и размер решетки, находятся в соотношении

$$a \ll \xi \ll La. \quad /15/$$

Для простоты рассмотрим однозарядную безмассовую асимптотически свободную теорию - КХД в пренебрежении массами кварков. Вследствие ренормируемости теории все размерные величины, безразмерные соответствующей степени a , являются функциями константы связи g . Например, для масс m_i имеем

$$a m_i = f_i(g^2). \quad /16/$$

Наблюдаемые значения не должны зависеть от шага решетки,

$$a \frac{d}{da} m_i = 0. \quad /17/$$

Из /16/ и /17/ следует, что

$$f_i = \Psi(g) \frac{\partial}{\partial g} f_i \quad \text{или} \quad f_i(g) = C_i \exp \left\{ \int \frac{g}{\Psi(g)} dg \right\}, \quad /18/$$

где $\Psi(g) = a \frac{d}{da} g(a)$ - функция ренормгруппы /5/.

Следовательно, все размерные величины выражаются через универсальную размерную константу

$$\Lambda = \frac{1}{a} \exp \left\{ \int \frac{g}{\Psi(g)} dg \right\}, \quad /19/$$

$$m_i = C_i \Lambda.$$

С точностью двухпетлевых вкладов по теории возмущений

$$(a \Lambda)^2 = \exp(-\beta/b_0) (\beta/b_0)^{b_1} \Lambda_0^2, \quad /20/$$

где $b_0 = \frac{11}{(4\pi)^2}$, $b_1 = \frac{102}{(4\pi)^4}$ - коэффициенты Ψ -функции, $\Psi(g) = b_0 g^3 + b_1 g^5$. Континуальный предел считается достигнутым, если численный расчет дает результат, совместимый с поведением /20/ /асимптотический скейлинг/ или согласуется с /19/, где $\Psi(g)$ определяется не по теории возмущений, например по $1/N$ -разложению /18/ или с помощью монтекарловских расчетов /19/. В глюодинамике для величины Λ принято значение порядка $10^{-2} \sqrt{\sigma}$, где $\sqrt{\sigma} = 420$ МэВ.

Свойства моделей теории поля и статистической физики сильно зависят от размерности пространства. Например, в двумерной электродинамике - в модели Швингера /14/ электроны находятся в фазе конфайнмента, в четырехмерной электродинамике имеется фаза деконфайнмента. В одномерной модели Изинга имеется фазовый переход второго рода при $\beta = \infty$, в двумерной модели точка фазового перехода находится в $\beta = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2}-1)$. Обычно рассматривают целочисленные значения размерности пространства, хотя в принципе метод ϵ -регуляризации /15/ позволяет рассматривать и нецелочисленные значения размерности $d = 4 - 2\epsilon$. В теории поля обычно проводят вычисления по теории возмущений и после процедуры ренормировок полагают $\epsilon = 0$, а в статистической физике $\epsilon = 1/2$. В последнее время развитие теории нелинейных динамических систем в фазе стохастичности /16/ привело к необходимости рассматривать математические объекты с нецелочисленной размерностью - фракталы /17/. Размерность фракталов определяется по Хаусдорфу: множество M , составляющее фракталы, покрывается сферами размерности d/d может принимать любые положительные значения; вместо сфер можно рассматривать произвольную конечную фигуру/ и радиусами $\leq a$. Существует значение $d = d_H$, для которого объем покрытия при $a \rightarrow 0$ стремится к ∞ , если $d < d_H$ и к 0, если $d > d_H$. Значение d_H называется хаусдорфовой размерностью M . d_H вычисляется по формуле

$$d_H(M) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{N(a)}{\ln 1/a}, \quad /21/$$

где $N(a)$ - число сфер с радиусом a , покрывающих множество M . Примером фрактала является канторово множество, которое строится следующим образом: отрезок единичной длины делится на три одинаковых отрезка и средний отрезок удаляется. Потом полученные отрезки опять делятся на три и т.д.:

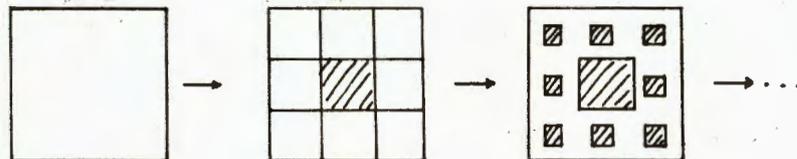


Для канторова множества (K_3)

$$d_H(K_3) = \frac{\ln 2}{\ln 3} = \frac{\ln 2^2}{\ln 3^2} = \dots = \frac{\ln 2^n}{\ln 3^n} = \frac{\ln 2}{\ln 3} \approx 0,63 < 1. \quad /22/$$

Следовательно, хотя K_3 состоит из изолированных точек и топологическая размерность /18/ d_T такого множества равна нулю, хаусдорфова размерность отлична от нуля. Вообще для фракталов $d_H > d_T$, тогда как для обычных гладких фигур $d_H = d_T =$ целое число. Мера K_3, S равна нулю, $S = \lim_{n \rightarrow \infty} (2/3)^n = 0$, мощность - континууму.

В качестве другого примера фрактального множества рассмотрим обобщение /19/ "ковра Серпинского". Это множество строится таким образом: единичный d -мерный гиперкуб делится на L^d одинаковых гиперкубов; из середины полученной решетки удаляется ℓ^d гиперкубов; потом оставшиеся гиперкубы делятся на L^d меньших и т.д. В случае $d = 2$, $L = 3$, $\ell = 1$ получаем обычный "ковер Серпинского":



$$d_H = \frac{\ln 8}{\ln 3} = \frac{\ln 8^2}{\ln 3^2} = \dots = \frac{\ln 8}{\ln 3} \approx 1,89 < 2.$$

В общем случае /19/*

$$d_H(\text{OKC } d, L, \ell) = \frac{\ln(L^d - \ell^d)}{\ln L} = d + \frac{\ln(1 - (\ell/L)^d)}{\ln L} \leq d, \quad 0 \leq \ell \leq L-2. \quad /23/$$

Величина /23/ может принимать все значения от 0 до d .

Фракталы позволяют рассматривать модели теории поля и статистической физики в пространствах с нецелочисленной размерностью вне рамок теории возмущений. Это, с одной стороны, позволяет следить за изменением свойств моделей, непрерывно меняя размерность пространства, с другой стороны, фрактальная геометрия может оказаться удобным языком для описания механизма редукции пространственных измерений /в КХД от четырех измерений

* Случай $d = 1$, $L = 3$, $\ell = 1$ соответствует k_3 .

на малых расстояниях к двум измерениям на адронных расстояниях; в струнных теориях от двадцатишестимерия и десятимерия соответственно для бозонной и суперструн к четырехмерному пространству/. Отметим, что в приведенных примерах точки фрактального множества не расположены однородно в объемлющем пространстве. Наложение периодических граничных условий улучшит однородность. Для дальнейшего улучшения однородности можно применить теорию равномерного распределения /20/.

Отметим, что для важного класса фракталов, для самоподобных фракталов, примерами которых являются K_3 и ковер Серпинского, d_H , вычисленная при конечных размерах покрывающего элемента, дает предельное значение d_H . Вообще говоря, величина d_H зависит от радиуса покрывающего элемента /"разрешающей способности прибора"/

$$a \frac{d(d_H(a))}{da} = \Psi(d_H). \quad /24/$$

для самоподобных фракталов " Ψ - функция размерности" = 0. Это свойство обуславливает выделенную роль самоподобных фракталов для ВКТП, т.к. они при конечных значениях a точно дают важнейшую характеристику - размерность фрактала.

Отметим также, что для некоторых фракталов удобно вводить два определения метрической размерности, внутреннюю размерность и внешнюю размерность. Для конкретности рассмотрим фрактальную "кривую" в d -мерном евклидовом пространстве. Такую кривую можно задать, например с помощью сходящихся рядов Фурье для координат кривой

$$X_i(t) = \sum_{n \geq 0} C_i(k_n) \cos(k_n t + \delta_{ni}), \quad /25/$$

$$C_i(k_n) \sim 1/k_n^a, \quad k_n \sim n \rightarrow \infty, \quad 0 \leq a \leq 1.$$

Внешняя метрическая размерность фрактала совпадает с хаусдорфовой размерностью d_H /21/ и определяется параметром a , для кривой /25/

$$d_{ext} = d_H = d - (d-1)a. \quad /26/$$

Для гладкой кривой $a = 1$, $d_H = 1$.

Внутреннюю метрическую размерность определяют /21/, не отходя от фрактала в объемлющее евклидово пространство /иными словами, не проектируя фракталы на внешнее пространство/, значение внутренней размерности для фрактала /25/ дается соотношением /21/

$$d_{int} = 1/a \geq 2 - a. \quad /27/$$

Для гладкой кривой $a = 1$, $d = d_{int} = d_{ext} = 1$.

Отметим, что не все представляющие интерес фракталы задаются конструкцией /25/-/27/. Например, для самоподобного фрактала - кривой Коха, которая строится согласно



$$d_{ext} = d_{int} = \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1,26 > 1.$$

По формулам /26/ и /27/ при $d = 2$, $d_{int} \geq d_{ext}$ равенство имеет место только для гладких кривых, $a = 1$. Следовательно, в соотношениях /25/-/27/ не содержится кривая Коха*. Отметим интересное свойство формул /26/, /27/. Чем выше значение внутренней размерности, тем ближе значение внешней размерности к размерности объемлющего евклидова пространства. Конструкция /25/-/27/ обобщается на случай фракталов, заданных с помощью нескольких параметров t , т.е. для "поверхностей", "объемов" и т.д.

Для поверхностей

$$d_{ext} = d - (d-2)a, \quad d_{int} = 2/a. \quad /28/$$

Для гладких поверхностей $a = 1$ и $d_{ext} = d_{int} = 2$.

В качестве примера фрактальных поверхностей рассмотрим конфигурации квантовой релятивистской струны в $d = 26$ -мерном евклидовом пространстве. Возможные конфигурации струны в конформной калибровке задаются координатами /22/

$$X_\mu(\tau, \sigma) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_\mu(n) \cos(n\sigma) e^{-in\tau}, \quad \mu = 1, 2, \dots, 26. \quad /29/$$

Предположим, что на малых /планковских/ расстояниях струна находится в фазе, в которой мера состояний сконцентрирована на фракталах, размерность которых определяется по $d_{int} = 2/a = 26$, на больших расстояниях /например, на адронных/ размерность фракталов определяется по $d_{ext} = 4 - 2a \approx 3,85$. Этому значению пространства соответствует значение параметра ϵ -регуляризации, $\epsilon = a = 0,08$.

3. РЕШЕНИЕ ОПЕРАТОРНЫХ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Известно /23/, что при дискретной аппроксимации дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных элементов /МКЭ/ имеет преимущество перед методом конечных разностей /МКР/.

* На этот факт обратил мое внимание В.А.Загребнов.

Решения уравнений в частных производных можно представить в виде континуальных интегралов. РКТП является конечноразностной аппроксимацией континуальных интегралов КТП. Представляет интерес рассмотреть аппроксимацию континуальных интегралов МКЭ.

МКЭ для решения операторных уравнений движения квантовой механики одной частицы рассмотрен в работе^{/24/}. Здесь мы приведем обобщение на случай произвольного /конечного/ числа частиц. Потом рассмотрим примеры: набор гармонических осцилляторов; ангармонический осциллятор; конформную квантовую механику одной частицы и частицу в кулоновском потенциале. В операторной формулировке квантовая система из N частиц в D-мерном пространстве с координатами $X_{n\alpha}$ и импульсами $P_{n\alpha}$, $n = 1, 2, \dots, N$ и $\alpha = 1, 2, \dots, D$ задается гамильтонианом

$$H = \sum_{n,\alpha} \frac{P_{n\alpha}^2}{2m_n} + V(\{X_{n\alpha}\}) \quad /30/$$

и перестановочными соотношениями

$$[X_{n\alpha}, P_{m\beta}] = i\delta_{nm}\delta_{\alpha\beta} \quad /31/$$

/в единицах $\hbar = 1/$.

Операторные уравнения движения для произвольной величины $f(P, X)$ имеют вид

$$i \frac{d}{dt} f = [H, f(P, X)]. \quad /32/$$

В частности, для $f = X$ и P получим уравнения

$$\dot{X}_{n\alpha} = \frac{P_{n\alpha}}{m_n}, \quad \dot{P}_{n\alpha} = -\frac{\partial}{\partial X_{n\alpha}} V(\{X\}). \quad /33/$$

Требуется найти решение уравнений /33/ при $t = T$ по заданным значениям X_0 и P_0 в начальный момент времени $t = 0$. При этом X_0 и P_0 должны удовлетворять условию /31/.

Применение МКЭ состоит из следующих этапов. Сначала область, на которой решается дифференциальное уравнение, делят на конечные элементы, которыми могут быть D-мерные симплексы /в случае $D = 2$ - треугольники/ или другие конечные фигуры^{/23/}. Потом на конечных элементах искомое решение аппроксимируется конечным полиномом с неизвестными коэффициентами. Эти коэффициенты определяются из условия непрерывности /и гладкости/ на границах конечных элементов и соблюдения уравнений движения в некоторой точке /точках/ конечных элементов.

Дискретизацию уравнений /33/ проведем с помощью линейных конечных элементов. Разделим отрезок $(0, T)$ на отрезки одинаковой длины h , $hL = T$. Для конкретности рассмотрим первый конечный элемент

$$X_{n\alpha}(t) = X_{n\alpha}^{(0)}(1 - t/h) + X_{n\alpha}^{(1)}t/h, \quad /34/$$

$$P_{n\alpha}(t) = P_{n\alpha}^{(0)}(1 - t/h) + P_{n\alpha}^{(1)}t/h, \quad 0 \leq t \leq h.$$

Подставив /34/ в /33/, при $t = h/2$ получим дискретные уравнения движения

$$\frac{X_{n\alpha}^{(1)} - X_{n\alpha}^{(0)}}{h} = \frac{P_{n\alpha}^{(1)} + P_{n\alpha}^{(0)}}{2m_n}, \quad /35/$$

$$\frac{P_{n\alpha}^{(1)} - P_{n\alpha}^{(0)}}{h} = -\frac{\partial}{\partial X_{n\alpha}} V\left(\left\{\frac{X_{k\beta}^{(1)} + X_{k\beta}^{(0)}}{2}\right\}\right).$$

Из первого уравнения следует

$$P_{n\alpha}^{(1)} = -P_{n\alpha}^{(0)} + \frac{2m_n}{h}(X_{n\alpha}^{(1)} - X_{n\alpha}^{(0)}). \quad /36/$$

Подставим $P_{n\alpha}^{(1)}$ во второе уравнение и вычтем из обеих частей слагаемое

$$\frac{2m_n}{h^2}(X_{n\alpha}^{(1)} + X_{n\alpha}^{(0)}),$$

получим

$$-\frac{2}{h}P_{n\alpha}^{(0)} - \frac{4m_n}{h^2}X_{n\alpha}^{(0)} = -\frac{2m_n}{h^2}(X_{n\alpha}^{(1)} + X_{n\alpha}^{(0)}) - \frac{\partial}{\partial X_{n\alpha}} V\left(\left\{\frac{X_{k\beta}^{(1)} + X_{k\beta}^{(0)}}{2}\right\}\right) \quad /37/$$

$$= -\frac{2m_n}{h}G_{n\alpha}^{-1}(\{X_{k\beta}^{(1)} + X_{k\beta}^{(0)}\}), \quad /38/$$

где

$$G_{n\alpha}^{-1}(\{X\}) = \frac{1}{h}X_{n\alpha} + \frac{h}{2m_n} \frac{\partial}{\partial X_{n\alpha}} V\left(\left\{\frac{X_{k\beta}}{2}\right\}\right).$$

Уравнения /38/ в общем случае представляют собой сложную систему из $N \times D$ нелинейных уравнений относительно $N \times D$ неизвестных $X_{n\alpha}$.

В случае гармонического потенциала задача решается точно,

$$V(\{X\}) = \sum_{n,\alpha} \frac{\omega_n^2}{2} X_{n\alpha}^2.$$

$$G_{n\alpha}^{-1}\{X\} = \frac{1}{h} X_{n\alpha} + \frac{h}{2m_n} \frac{\omega_n^2}{2} X_{n\alpha} = \frac{1}{h} \left(1 + \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}\right) X_{n\alpha} = Y_{n\alpha}, \quad /39/$$

$$G_{n\alpha}\{X\} = \frac{h}{1 + \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}} X_{n\alpha}.$$

Следовательно,

$$X_{n\alpha}^{(1)} = \frac{1 - \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}}{1 + \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}} X_{n\alpha}^{(0)} + \frac{\frac{h}{m_n}}{1 + \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}} P_{n\alpha}^{(0)}. \quad /40/$$

$$P_{n\alpha}^{(1)} = \frac{-h \omega_n^2}{1 + \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}} + \frac{1 - \frac{h \omega_n^2}{4m_n}}{1 + \frac{h^2 \omega_n^2}{4m_n}} P_{n\alpha}^{(0)}.$$

Итерируя линейную систему /40/, получим решение дискретных уравнений /35/ для гармонического потенциала /39/. Для простоты явные выкладки проведем для одной степени свободы, выберем единицы $\omega = m = 1$. Тогда получим

$$\Phi^{(1)} = A \Phi^{(0)}, \quad /41/$$

где

$$\Phi = \begin{pmatrix} X \\ P \end{pmatrix}, \quad A = \cos \phi + i \sigma_2 \sin \phi = e^{i\phi \sigma_2},$$

$$\operatorname{tg} \phi = \frac{h}{1 - \frac{h^2}{4}}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Итерируя /41/, имеем $\Phi^{(L)} = e^{iL\phi \sigma_2} \Phi^{(0)}$. При малых h $\phi \approx h$, $L\phi \approx T$. Следовательно, в решение дискретного уравнения при малых h входят единичные частоты ($\omega = 1$), как и должно было быть.

В общем случае решение уравнений /38/ будем искать в виде ряда по h . Формальное решение системы /35/ имеет вид

$$X_{n\alpha}^{(1)} = -X_{n\alpha}^{(0)} + G_{n\alpha} \left(1 - \frac{P_{k\beta}^{(0)}}{m_k} + \frac{2}{h} X_{k\beta}^{(0)}\right), \quad /42/$$

$$P_{n\alpha}^{(1)} = -P_{n\alpha}^{(0)} + \frac{2m_n}{h} (X_{n\alpha}^{(1)} - X_{n\alpha}^{(0)}).$$

Покажем, что решение /35/ соблюдает перестановочные соотношения /31/ на концах конечных элементов. Для этого скомутируем первое уравнение системы /35/ с $P_{k\beta}^{(1)} + P_{k\beta}^{(0)}$, а второе уравнение с $X_{n\alpha}^{(1)} + X_{n\alpha}^{(0)}$, получим

$$[P_{k\beta}^{(1)} + P_{k\beta}^{(0)}, X_{n\alpha}^{(1)} - X_{n\alpha}^{(0)}] = 0,$$

/43/

$$[P_{k\beta}^{(1)} - P_{k\beta}^{(0)}, X_{n\alpha}^{(1)} + X_{n\alpha}^{(0)}] = 0.$$

Сложив уравнения /43/, получим

$$[X_{n\alpha}^{(1)}, P_{k\beta}^{(1)}] = [X_{n\alpha}^{(0)}, P_{k\beta}^{(0)}] = i \delta_{nk} \delta_{\alpha\beta}.$$

Для произвольного t , $0 \leq t \leq h$, имеем

$$[X_{n\alpha}(t), P_{k\beta}(t)] = i \delta_{nk} \delta_{\alpha\beta} (1 - 2t/h)(1 - t/h),$$

следовательно,

$$1/2 \leq [i P_{n\alpha}(t), X_{n\alpha}(t)] \leq 1. \quad /44/$$

В качестве следующего примера рассмотрим задачу с одной степенью свободы и с ангармоническим потенциалом, $m=1$,

$$V(X) = \lambda X^4. \quad /45/$$

Для потенциала /45/ из формулы /38/

$$G^{-1}(X) = \frac{X}{h} + \frac{h\lambda}{4} X^3 = Y, \quad X = G(Y). \quad /46/$$

Уравнение /46/ удобно переписать в виде

$$\frac{\lambda}{4} Z^3 + Z - h^2 Y = 0, \quad /47/$$

где $Z = hX$.

Решение /47/ представимо в виде степенного ряда по h^2 , для X получаем

$$X = hY - h^2 \frac{\lambda}{4} (hY)^3 + O(h^9), \quad /48/$$

$$G(X) = hX - h^2 \frac{\lambda}{4} (hX)^3.$$

С точностью h^2 решение записывается в виде

$$X_1 = X_0 + hP_0 - 2\lambda h^2 X_0^3 - 3\lambda h^3 X_0 P_0 X_0.$$

$$P_1 = -P_0 + \frac{2}{h} (X_1 - X_0). \quad /49/$$

Заметим, что последнее слагаемое в первом уравнении /49/ обеспечивает точность h^2 во втором уравнении.

В качестве другого примера рассмотрим конформную квантовую механику

$$V(x) = \frac{\lambda}{X^2}. \quad /50/$$

Заметим, что этот пример является частным случаем семейства конформных теорий скалярного поля с нелинейностью

$$\lambda \phi^{\frac{2d}{d-2}}. \quad /51/$$

Случаю /50/ соответствует $d = 1$. Введение фрактальной решетки по времени позволяет рассматривать системы с $0 < d < 1$. Для потенциала /50/

$$G^{-1}(x) = \frac{X}{h} - \frac{8\lambda h}{X^3} = Y \quad /52/$$

имеем уравнение четвертой степени.

$$X^4 - hYX^3 - 8\lambda h^2 = 0. \quad /53/$$

Решение /53/ с точностью h^2 имеет вид

$$X = hY + \frac{8\lambda}{hY^3} = hY + h^2 \frac{8\lambda}{(hY)^3}, \quad /54/$$

откуда

$$G(X) = hX + h^2 \frac{8\lambda}{(hX)^3}. \quad /55/$$

Решение дискретных уравнений /35/ с точностью h^2 выглядит так:

$$X_1 = X_0 + hP_0 + h^2 \frac{\lambda}{(X_0 + \frac{h}{2}P_0)^3}, \quad /56/$$

$$P_1 = P_0 + h \frac{2\lambda}{(X_0 + \frac{h}{2}P_0)^3}.$$

В качестве системы с несколькими степенями свободы рассмотрим частицу в кулоновском потенциале,

$$V(x) = -\frac{Ze^2}{X}.$$

$$X^2 = X_1^2 + X_2^2 + X_3^2, \quad /57/$$

$$G_a^{-1}(X) = \frac{Xa}{h} + \frac{h}{2m} 4Ze^2 \frac{Xa}{X^3} = Ya.$$

Имеем

$$X(1 + \frac{ah^2}{X^3}) = hY, \quad X^3 - hYX^2 + h^2a = 0, \quad /58/$$

где $a = 2Ze^2/m$. С точностью h^2 решение /58/ имеет вид

$$X = hY - h^2a / (hY)^2.$$

Следовательно,

$$X_a = hY_a(1 - h^2a(hY)^{-3}),$$

$$G_a(X) = hX_a(1 - ah^2(hX)^{-3}).$$

Решение операторных уравнений /35/ имеет вид

$$X_a^{(1)} = X_a^{(0)} + h \frac{P_a^{(0)}}{m} - h^2 \frac{Ze^2}{2m} \frac{X_a^{(0)} + \frac{h}{2} \frac{P_a^{(0)}}{m}}{(X_a^{(0)} + \frac{h}{2} \frac{P_a^{(0)}}{m})^3}, \quad /59/$$

$$P_a^{(1)} = P_a^{(0)} - hZe^2 \frac{X_a^{(0)} + \frac{h}{2} \frac{P_a^{(0)}}{m}}{(X_a^{(0)} + \frac{h}{2} \frac{P_a^{(0)}}{m})^3}.$$

Для континуальных интегралов дискретизации по МКЗ соответствует действие

$$S = \sum_{i=0}^L \left\{ \frac{m}{2h} (X^{(i+1)} - X^{(i)})^2 - \int_0^h dt V(X^{(i+1)}t/h + X^{(i)}(1-t/h)) \right\}. \quad /60/$$

Теперь для иллюстрации применения полученных операторных решений рассмотрим задачу определения спектра энергии на примере ангармонического осциллятора^{25/}. После определения временной зависимости матричных элементов соответствующие частоты дают значение спектра. Решение операторных уравнений ангармонического осциллятора имеет вид

$$X_1 = X_0 + P_0 h - 2\lambda X_0^3 h^2,$$

$$P_1 = P_0 - 4\lambda X_0^3 h - 6\lambda X_0 P_0 X_0 h^2. \quad /61/$$

Выберем начальные условия в виде

$$X_0 = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}(a^+ + a),$$

$$P_0 = \frac{i}{\gamma\sqrt{2}}(a^+ - a), \quad [a^+, a] = 1.$$

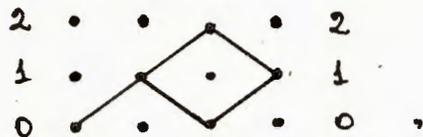
/62/

Параметр γ характеризует ширину фоковского состояния

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle.$$

/63/

Рассмотрим матричные элементы решений /61/ по одночастичному и основному состояниям. Отметим, что для определения того, какие матричные элементы являются нетривиальными и какие промежуточные состояния дают вклад, полезно ввести диаграммы. Например, для матричного элемента $\langle 0 | X_0^3 | 1 \rangle$ имеем диаграмму



двум независимым графам которой соответствуют два слагаемых

$$\langle 0 | X_0^3 | 1 \rangle = \langle 0 | X_0 | 1 \rangle (\langle 1 | X_0 | 0 \rangle \langle 0 | X_0 | 1 \rangle + \langle 1 | X_0 | 2 \rangle \langle 2 | X_0 | 1 \rangle).$$

Несложные вычисления дают

$$\frac{\langle 0 | X_1 | 1 \rangle}{\langle 0 | X_0 | 1 \rangle} = 1 - i \frac{h}{\gamma^2} - 3\lambda\gamma^2 h^2,$$

/64/

$$\frac{\langle 0 | P_1 | 1 \rangle}{\langle 0 | P_0 | 1 \rangle} = 1 - i6\lambda\gamma^4 h - 3\lambda\gamma^2 h^2.$$

Теперь определим параметр γ из условия, чтобы в матричные элементы /64/ давала вклад только одна частота,

$$\frac{\langle 0 | X_1 | 1 \rangle}{\langle 0 | X_0 | 1 \rangle} = e^{-i\omega h} = 1 - i\omega h - \frac{1}{2}\omega^2 h^2.$$

/65/

Сравнение выражений /64/, /65/ даст $\omega = \gamma^{-2}$, $\omega^2 = 6\lambda\gamma^2$, откуда

$$\omega = (6\lambda)^{1/3}, \quad \gamma = (6\lambda)^{-1/6} = 1,817\lambda^{1/3}.$$

/66/

Из матричного элемента

$$\frac{\langle 0 | P_1 | 1 \rangle}{\langle 0 | P_0 | 1 \rangle} = e^{-i\omega h} = 1 - i\omega h - \frac{1}{2}\omega^2 h^2$$

следует $\omega = 6\lambda\gamma^4$, $\omega^2 = 6\lambda\gamma^2$, и получаем предыдущие значения ω и γ . Полученное значение для ω лишь на 5% превышает точное значение $\omega = 1,728\lambda^{1/3}$. Что касается других примеров конформной механики /50/ и частицы в кулоновском поле /57/, в соответствующих решениях /56/ и /59/ сначала надо убрать операторные выражения из знаменателя путем умножения на соответствующий множитель. Далее рассмотрение аналогично предыдущему.

Мне приятно поблагодарить В.А.Загребнова за обсуждение вопросов фрактальной геометрии и указание на работу /19/, О.К.Пашаева за обсуждение вопроса компактификации в струнных моделях и С.Ю.Шмакова за многочисленные обсуждения и сотрудничество.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гердт В.П., Тарасов О.В., Ширков Д.В. УФН, 1980, т.130, вып.1, с.113.
2. Махалдиани Н.В., Мюллер-Пройскер М., Шмаков С.Ю. ОИЯИ, P2-84-302, Дубна, 1984.
3. Wilson K.G. Phys.Rev., 1974, D10, p.2445.
4. Вайнштейн А.И. и др. ЭЧАЯ, 1982, т.13, № 3, с.543.
5. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. "Наука", М., 1984.
6. Евклидова квантовая теория поля. Сб. статей под ред. Р.А.Минлоса. "Мир", М., 1978.
7. Барут А., Рончка Р. Теория представления групп и ее приложения. "Мир", М., 1980.
8. Березин Ф.А. Введение в алгебру и анализ с антикоммутирующими переменными. Изд-во МГУ, М., 1983.
9. Матвеев В.А., Тавхелидзе А.Н., Шапошников М.Е. ТМФ, 1984, т.59, № 3, с.323.
10. Gerdt V.P. et al. Nucl.Phys.B, 1986, 256, p.145.
11. Gupta S., Heller Urs M. Phys.Lett., 1984, 138B, p.171.
12. Makeenko Yu.M., Polikarpov M.I. Nucl.Phys.B, 1982, 205, p.386.
13. Bowler K.C. et al. Phys.Lett., 1985, 163B, p.367.
14. Schwinger J. Phys.Rev., 1962, 128, p.2425.
15. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ϵ -разложение. "Мир", М., 1975.
16. Странные аттракторы. Сб.статей под ред. Я.Г.Синая и Л.П.Шильникова. "Мир", М., 1981.

17. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature. Freeman, San Francisco, 1982.
18. Бакельман И.Я., Вернер А.Л., Кантор Б.Е. Введение в дифференциальную геометрию "в целом". "Наука", М., 1973.
19. Bhanot G. Univ. of California Preprint. NSF-ITP-85-31.
20. Соболев И.М. Токи, равномерно заполняющие многомерный куб. "Знание", М., 1985.
21. Зельдович Я.Б., Соколов Д.Д. УФН, 1985, т.146, № 3, с.493.
22. Schwarz J.H. Phys.Rep., 1982, 89, p.224.
23. Галлагер Р. Метод конечных элементов. "Мир", М., 1984.
24. Bender C.M., Sharp D.H. Phys.Rev.Lett., 1983, 50, p.1535.
25. Bender C.M. et al. Phys.Rev.D, 1985, 32, p.1476.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

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

Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 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.
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.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.

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

Рукопись поступила в издательский отдел
29 декабря 1985 года.

Принимается подписка на препринты и сообщения Объединенного института ядерных исследований.

Установлена следующая стоимость подписки на 12 месяцев на издания ОИЯИ, включая пересылку, по отдельным тематическим категориям:

ИНДЕКС	ТЕМАТИКА	Цена подписки на год
1.	Экспериментальная физика высоких энергий	10 р. 80 коп.
2.	Теоретическая физика высоких энергий	17 р. 80 коп.
3.	Экспериментальная нейтронная физика	4 р. 80 коп.
4.	Теоретическая физика низких энергий	8 р. 80 коп.
5.	Математика	4 р. 80 коп.
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия	4 р. 80 коп.
7.	Физика тяжелых ионов	2 р. 85 коп.
8.	Криогеника	2 р. 85 коп.
9.	Ускорители	7 р. 80 коп.
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных	7 р. 80 коп.
11.	Вычислительная математика и техника	6 р. 80 коп.
12.	Химия	1 р. 70 коп.
13.	Техника физического эксперимента	8 р. 80 коп.
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами	1 р. 70 коп.
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях	1 р. 50 коп.
16.	Дозиметрия и физика защиты	1 р. 90 коп.
17.	Теория конденсированного состояния	6 р. 80 коп.
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники	2 р. 35 коп.
19.	Биофизика	1 р. 20 коп.

Подписка может быть оформлена с любого месяца текущего года.

По всем вопросам оформления подписки следует обращаться в издательский отдел ОИЯИ по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79.

Махалдиани Н.В.

P2-85-962

Избранные вопросы вычислительной квантовой теории поля

Рассмотрены основные математические структуры решеточной теории поля, фрактальные решетки, проблема континуального предела, метод конечных элементов решения операторных уравнений квантовой теории.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод автора

Makhaldiani N.V.

P2-85-962

Selected Topics in Computational Quantum Field Theory

The main mathematical structures of the quantum field theory on the lattice; fractal lattices; the problem of the continual limit and the method of finite element for a solution of the operator equations of the quantum theory are considered.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1985