

Все это радикальным образом меняет привычную схему построения молекулярно-статистической теории конденсированного состояния. Поэтому во многих случаях удобнее, да и более последовательно, работать с многочастичными потенциалами (5), вводя их в явном виде, чем с эффективными парными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Базаров, И.П. Статистическая физика жидких кристаллов/ И.П. Базаров, Э.В. Геворкян. - М., изд. Моск. ун-та, 1992. - 496 с.
2. Базаров, И.П. Статистическая теория твердых и жидких кристаллов/ И.П. Базаров, Э.В. Геворкян. - М., изд. Моск. ун-та, 1983. - 496 с.

MANY-PARTICLE INTERACTIONS IN CONDENSED STATE PHYSICS

E.V. Gevorkyan

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. It is shown that many-particle interactions should be taken into account to describe physical properties and phase transitions in condensed systems. The model of effective pair interactions is suitable only for qualitative estimation of real systems properties. The concept of effective pair interactions and ways to calculate them are discussed.

Keywords: condensed state, many-particle interactions, liquids, crystals, liquid crystals, phase transitions.

УДК:530.1:539.12

ДВУХШАГОВЫЙ МУЛЬТИБОЗОННЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ДИСКРЕТНОЙ $U(1)$ МОДЕЛИ ФЕРМИОНОВ

Н.В. Зверев

*Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Рассмотрен статистический двухшаговый мультибозонный алгоритм вычислений применительно к $U(1)$ модели фермионов на четырёхмерной решётке пространства-времени. Показано, что использование второго шага принятия-отвержения полей приводит к увеличению производительности алгоритма.

Ключевые слова: $U(1)$ модели, фермионы, алгоритмы, метод Монте-Карло, решётка пространства-времени.

1. Введение

Важной задачей математического моделирования в квантовой теории поля является создание и реализация эффективных алгоритмов для исследования моделей фермионных частиц (фермионов). Для такого исследования Вильсоном [1] предложен мощный математический подход – метод решётки. В этом подходе непрерывное пространство-время аппроксимируют дискретной совокупностью точек – узлов решётки, а полевые и корреляционные функции модели зависят от координат этих узлов.

Практический интерес представляет четырёхмерная решёточная модель фермионов, построенная на группе $U(1)$ калибровочных преобразований поля переносчика взаимодействия [1,2]. При исследовании модели частиц прежде всего необходимо найти её многочисленные корреляционные функции (функции Грина), которые затем используют для расчётов физических характеристик частиц.

Исследования моделей частиц на решётке прямыми численными методами являются нереальными из-за гигантского времени вычислений. Поэтому для численных расчётов данных моделей используют статистические алгоритмы. Однако изучение фермионов такими алгоритмами испытывает определённую трудность из-за существования принципа Паули для данных частиц. В настоящее время хорошо известен статистический метод гибридного Монте-Карло [3,4] для вычислений с учётом виртуальных фермионных петель. Но данный метод пригоден лишь в случае чётного числа типов (поколений) фермионов.

Алгоритмом, альтернативным методу гибридного Монте-Карло, является двухшаговый мультибозонный алгоритм [5,6,7]. Этот статистический алгоритм также учитывает фермионные петли, но уже пригоден для случая произвольного числа поколений фермионов. В то же время данный алгоритм имеет много сложных процедур и подпрограмм.

В данной работе приведены результаты исследований двухшагового мультибозонного алгоритма применительно к $U(1)$ модели фермионов на четырёхмерной решётке [8]. Показывается также, что наличие второго шага мультибозонного алгоритма приводит к увеличению производительности данного алгоритма.

2. $U(1)$ модель фермионов на решётке

Данная модель построена на группе $U(1)$ фазовых вращений комплексных чисел, обеспечивающей инвариантность фундаментальной физической величины – действия модели. Действие $S[U, \psi, \bar{\psi}]$ векторной $U(1)$ модели фермионов на четырёхмерной решётке пространства-времени является суммой действия $S_G[U]$ поля переносчика взаимодействия и действия $S_F[U, \psi, \bar{\psi}]$ фермионных частиц [1,9,10]:

$$S[U, \psi, \bar{\psi}] = S_G[U] + S_F[U, \psi, \bar{\psi}].$$

Здесь

$$S_G[U] = \beta \sum_{\substack{x, \mu, \nu \\ \mu < \nu}} \text{Re}(1 - U_{x, \mu} U_{x+\mu, \nu} U_{x+\nu, \mu}^* U_{x, \nu}^*), \quad (1)$$

$$S_F[U, \psi, \bar{\psi}] = \sum_{f=1}^{N_f} \sum_{x, y} \bar{\psi}_x^f \mathbf{M}[U]_{xy} \psi_y^f;$$

$U_{x,\mu} = \exp(iA_{x,\mu})$ – поле переносчика взаимодействия на решётке с вещественным потенциалом $A_{x,\mu} \in (-\pi, \pi]$; $\beta = 1/e^2$ – обратный квадрат заряда; ψ_x^f и $\overline{\psi}_x^f$ – волновые функции фермионов (фермионные поля); $\mathbf{M}[U]_{xy}$ – фермионная матрица:

$$\mathbf{M}[U]_{xy} = \delta_{xy} - \kappa \sum_{\mu} \left\{ (1 - \gamma_{\mu}) U_{x,\mu} \delta_{x+\mu,y} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{y,\mu}^* \delta_{y+\mu,x} \right\}; \quad (2)$$

$\kappa = 1/(8 + 2am)$ – хоппинг-параметр как функция фермионной массы m ; a – шаг решётки, выбранный равным $a = 1$; γ_{μ} – эрмитовы матрицы Дирака размером 4×4 ; $*$ – операция комплексного сопряжения; N_f – число поколений фермионов; x, y – узлы четырёхмерной конечной решётки с координатами $n_{\mu} = 0, 1, \dots, N_{\mu} - 1$; $\mu, \nu = 1, 2, 3, 4$ – направления решётки. Полное число узлов V , называемое объёмом решётки, равно

$$V = N_1 N_2 N_3 N_4.$$

Фермионные поля являются антикоммутирующими величинами при перемножении, поскольку это обеспечивает выполнение принципа Паули. Здесь используется система единиц $\hbar = c = 1$.

Для расчётов физических характеристик частиц используют корреляционные функции модели частиц (функции Грина). Каждую корреляционную функцию $\langle O \rangle$ вычисляют методом континуального (функционального) интегрирования величины $O[U]$ по полям $U, \psi, \overline{\psi}$ с множителем (весом) $\exp(-S[U, \psi, \overline{\psi}])$. В результате интегрирования по фермионным полям $\psi, \overline{\psi}$ в силу их антикоммутативности при перемножении возникает определитель $\det^{N_f} \mathbf{M}[U]$, и формула для корреляционной функции приобретает вид

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int O[U] \exp(-S_G[U]) \det^{N_f} \mathbf{M}[U] [dU], \quad (3)$$

где Z – нормировочная постоянная.

Фермионные частицы $U(1)$ модели на четырехмерной решётке имеют различные свойства в разных областях значений обратного квадрата заряда β и хоппинг-параметра κ [2,9,10]. Такие области называют фазами, из которых практический интерес представляют Кулоновская фаза и фаза конфайнмента [2]. Для правильного описания свойств частиц параметры β и κ следует выбирать вблизи линий раздела фаз [9,10].

3. Двухшаговый мультибозонный алгоритм

Двухшаговый мультибозонный алгоритм является статистическим методом приближённых и относительно быстрых вычислений корреляционных функций моделей на решётке при произвольном значении числа поколений фермионов N_f . В данный алгоритм введены вспомогательные поля – мультибозоны, а также мультибозонное дей-

ствии и аппроксимирующие многочлены. При этом формула (3) преобразуется к виду: [7]

$$\langle O \rangle = \frac{\langle O[U] \det^{-1} P_4(\mathbf{M}^+[U] \mathbf{M}[U]) \text{sign det}^{N_f} \mathbf{M}[U] \rangle_{12}}{\langle \det^{-1} P_4(\mathbf{M}^+[U] \mathbf{M}[U]) \text{sign det}^{N_f} \mathbf{M}[U] \rangle_{12}}, \quad (4)$$

где

$$\langle A \rangle_{12} = \frac{1}{Z_{12}} \int A[U] \frac{e^{-S_G[U] - S_B[\Phi, U]}}{\det P_2(\mathbf{M}^+[U] \mathbf{M}[U])} [dU d\Phi]. \quad (5)$$

Здесь $S_G[U]$ – действие поля U переносчика взаимодействия по (1); $\mathbf{M}[U]$ – фермионная матрица, определённая по (2); $^+$ – операция эрмитова сопряжения матрицы; Z_{12} – нормировочная постоянная; $S_B[\Phi, U]$ – мультибозонное действие:

$$S_B[\Phi, U] = \sum_{j=1}^{n_1} \Phi_j^+ (\mathbf{M}[U] - \rho_j)^+ (\mathbf{M}[U] - \rho_j) \Phi_j;$$

Φ_j – вспомогательные поля мультибозоны с $4V$ комплексными составляющими; ρ_j – комплексные корни многочлена $P_1(x^2)$; $P_1(x)$, $P_2(x)$ и $P_4(x)$ – положительные многочлены степеней n_1 , n_2 и n_4 , используемые для грубой, промежуточной и точной аппроксимаций функции $x^{-N_f/2}$ на отрезке $x \in [\varepsilon, \lambda]$:

$$\begin{aligned} P_1(x) &\approx x^{-N_f/2}, & P_1(x)P_2(x) &\approx x^{-N_f/2}, \\ P_1(x)P_2(x)P_4(x) &\cong x^{-N_f/2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Интервал $[\varepsilon, \lambda]$ содержит средние минимальное $\langle \lambda_{\min} \rangle$ и максимальное $\langle \lambda_{\max} \rangle$ собственные значения матрицы $\mathbf{M}^+[U] \mathbf{M}[U]$, вычисленные по формуле (3).

Поля U и Φ необходимо генерировать случайным образом с весом $\frac{e^{-S_G[U] - S_B[\Phi, U]}}{\det P_2(\mathbf{M}^+[U] \mathbf{M}[U])}$. Тогда формула (5) переходит в следующее соотношение, по которому выполняются численные расчёты:

$$\langle A \rangle_{12} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N A[U^{(\alpha)}]. \quad (7)$$

Здесь $U^{(\alpha)}$ – конфигурация поля U с номером α , N – число таких конфигураций.

Каждую конфигурацию с номером α полей U и Φ с весом распределения в формуле (5) получают путём выполнения двух шагов [5,6,7].

В первом шаге каждую новую $(\alpha + 1)$ -ю конфигурацию поля Φ и промежуточную конфигурацию U' получают из предыдущих α -х конфигураций U и Φ путём выполнения чередующихся процедур «тепловой бани» (НВ) и верхней релаксации (ОР) [5]:

$$\text{NB } \begin{cases} \Phi'_{j,x,r} = -V_{j,x,r} / A_{j,x,r} + \xi_{j,x,r}, \\ U'_{x,\mu} = (F_{x,\mu} / |F_{x,\mu}|)^{-1} \exp(i\eta_{x,\mu}); \end{cases}$$

$$\text{OR } \begin{cases} \Phi'_{j,x,r} = -\Phi_{j,x,r} - 2V_{j,x,r} / A_{j,x,r}, \\ U'_{x,\mu} = U^*_{x,\mu} (F_{x,\mu} / |F_{x,\mu}|)^{-2}. \end{cases}$$

Здесь r – индексы элементов матриц Дирака γ_μ , величины $V_{j,x,r}$ не зависят от $\Phi_{j,x,r}$, $A_{j,x,r}$ не зависят от Φ и U , $F_{x,\mu}$ не зависят от $U_{x,\mu}$, комплексные случайные числа $\xi_{j,x,r}$ распределены с весом $\exp(-A_{j,x,r} |\xi_{j,x,r}|^2)$, а вещественные случайные числа $\eta_{x,\mu} \in (-\pi, \pi]$ распределены с весом $\exp(|F_{x,\mu}| \cos \eta_{x,\mu})$.

Далее выполняют второй шаг алгоритма – шаг принятия-отвержения полей U [6,7]. В этом шаге поле U' принимают за поле U новой, $(\alpha+1)$ -й конфигурации с вероятностью $w_{acc}[U', U]$:

$$w_{acc}[U', U] = \min\left(1, \left\langle \exp(-\xi^+ P_2(\mathbf{M}^+[U']\mathbf{M}[U])\xi + \eta^+\eta) \right\rangle_\eta\right).$$

Здесь обозначено:

$$\langle B \rangle_\eta = \frac{1}{Z_\eta} \int B[\eta] \exp(-\eta^+\eta) [d\eta]; \quad (8)$$

Z_η – нормировочная постоянная; η – вектор с $4V$ комплексными составляющими; $\xi = P_3(\mathbf{M}^+[U']\mathbf{M}[U])\eta$; $P_3(x)$ – положительный многочлен степени n_3 , аппроксимирующий с высокой точностью функцию $P_2^{-1/2}(x)$ на отрезке $x \in [\varepsilon, \lambda]$:

$$P_3(x) \cong P_2^{-1/2}(x).$$

При вычислениях величин $\langle O \rangle$ по (4) и (7) значения $\det^{-1} P_4(\mathbf{M}^+\mathbf{M})$ находят по формуле [7]

$$\det^{-1} P_4(\mathbf{M}^+\mathbf{M}) = \left\langle \exp(-\eta^+ P_4(\mathbf{M}^+\mathbf{M})\eta + \eta^+\eta) \right\rangle_\eta,$$

где используется соотношение (8).

Коэффициенты аппроксимирующих многочленов $P_k(x)$ с заданными степенями n_k , где $k = 1, 2, 3, 4$, вычисляют интегральным методом наименьших квадратов [11]. А при расчётах матриц $P_k(\mathbf{M}^+\mathbf{M})$ используют разложение $P_k(x)$ по ортогональным многочленам [11].

4. Параметры и производительность мультибозонного алгоритма

Для исследования векторной $U(1)$ модели фермионов двухшаговым мультибозонным алгоритмом необходимо обоснованно выбрать значения исходных параметров данного алгоритма. В противном случае время вычислений существенно увеличится, а результаты расчётов могут быть неправильными [7]. Ниже приведём соотношения для значений исходных параметров и для производительности данного алгоритма при числе поколений фермионов $N_f = 2$.

Для расчётов двухшаговым мультибозонным алгоритмом должны быть заданы следующие его исходные параметры: границы ε и λ интервала аппроксимаций функции $x^{-N_f/2}$ по (6) и степени n_1, n_2, n_3 и n_4 аппроксимирующих многочленов.

Установлены соотношения для исходных параметров двухшагового мультибозонного алгоритма, необходимые для быстрых и точных вычислений этим методом [8]:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 0.5\langle\lambda_{\min}\rangle, & \lambda &= (1.2 \text{—} 1.4)\langle\lambda_{\max}\rangle, \\ n_1 &\sim \zeta^{1/4} \ln V, & n_2 &\sim \zeta^{1/2} \ln V, \\ n_3 &\geq n_2, & n_4 &\geq n_2, \end{aligned} \quad (9)$$

где ζ – число обусловленности матрицы $\mathbf{M}^+[U]\mathbf{M}[U]$:

$$\zeta = \frac{\langle\lambda_{\max}\rangle}{\langle\lambda_{\min}\rangle}.$$

Здесь $\langle\lambda_{\min}\rangle$ и $\langle\lambda_{\max}\rangle$ – минимальное и максимальное собственные значения матрицы $\mathbf{M}^+[U]\mathbf{M}[U]$, усреднённые по формуле (3).

Производительностью алгоритма вычислений конкретной корреляционной функции $\langle O \rangle$ модели на решётке называем величину \mathbf{P} , равную [8]:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\langle\mathbf{N}_{\text{op}}\rangle\langle\tau_{\text{int}}\rangle}, \quad (10)$$

где $\langle\mathbf{N}_{\text{op}}\rangle$ – среднее число компьютерных операций для перехода от конфигурации полей $U^{(\alpha)}$ к последующей $U^{(\alpha+1)}$; $\langle\tau_{\text{int}}\rangle$ – интегральное время автокорреляций, равное среднему расстоянию между ближайшими статистически независимыми выборочными значениями $O[U^{(\alpha)}]$ этой корреляционной функции [10].

Время вычисления корреляционной функции $\langle O \rangle$ определяется формулой

$$t = t_c \langle\mathbf{N}_{\text{op}}\rangle N = \frac{t_c N_i}{\mathbf{P}},$$

где N – число конфигураций полей $U^{(\alpha)}$; N_i – число статистически независимых значений величин $O[U^{(\alpha)}]$:

$$N_i = \frac{N}{\langle\tau_{\text{int}}\rangle};$$

t_c – время выполнения одной компьютерной операции. Поэтому лучшим алгоритмом, т.е. алгоритмом с меньшим временем вычислений t , является алгоритм с большей производительностью \mathbf{P} при одинаковых параметрах модели N_f, V, β, κ , числе N_i и точности вычислений.

Получены следующие оценки для среднего числа компьютерных операций и для интегрального времени автокорреляций в случае двухшагового мультибозонного алгоритма (TSMB) при числах обусловленности $\zeta \gg 1$ [8]:

$$\langle\mathbf{N}_{\text{op}}^{\text{TSMB}}\rangle \sim V n_2, \quad \langle\tau_{\text{int}}^{\text{TSMB}}\rangle \sim n_1 \zeta^{1/4}. \quad (11)$$

При использовании мультибозонного алгоритма без второго шага принятия-отвержения полей (МВ) для достижения одинаковой точности с алгоритмом TSMB согласно [5] необходимо взять первый аппроксимирующий многочлен $P_1(x)$ степени n_1^{MB} порядка

$$n_1^{\text{MB}} \sim \zeta^{1/2} \ln V. \quad (12)$$

Кроме того, имеют место оценки для среднего числа компьютерных операций и интегрального времени автокорреляций в случае алгоритма МВ при $\zeta \gg 1$ [5]:

$$\langle N_{\text{оп}}^{\text{MB}} \rangle \sim V n_1^{\text{MB}}, \quad \langle \tau_{\text{int}}^{\text{MB}} \rangle \sim n_1^{\text{MB}} \zeta^{1/2}. \quad (13)$$

Из (10) с учётом (9) и (11) – (13) получим оценку для отношения производительностей алгоритмов TSMB и МВ при числах обусловленности $\zeta \gg 1$:

$$P_{\text{TSMB}} / P_{\text{МВ}} \sim \zeta^{1/2}.$$

Из этой оценки видно, что использование второго шага принятия-отвержения полей приводит к увеличению производительности мультибозонного алгоритма при больших числах обусловленности ζ , которые имеют место для параметров β и κ U(1) модели на четырёхмерной решётке в фазе конфайнмента [6,7].

Аналитические и численные исследования [8] показали, что двухшаговый мультибозонный алгоритм и метод гибридного Монте-Карло при одинаковых параметрах U(1) модели на четырёхмерной решётке с числом поколений фермионов $N_f = 2$, а также при выборе исходных параметров алгоритмов для быстрых и точных расчётов типа (9), дают одинаковые результаты расчётов корреляционных функций и имеют примерно одинаковые производительности.

5. Заключение

В данной работе рассмотрен двухшаговый мультибозонный алгоритм для U(1) модели фермионов на четырёхмерной решетке пространства-времени. Данный алгоритм является статистическим методом получения полей переносчиков взаимодействия с весом, включающим детерминант фермионной матрицы при произвольном числе поколений фермионов. Такие поля необходимы для вычислений корреляционных функций модели. Двухшаговый мультибозонный алгоритм является сложным алгоритмом, включающим в себя многие процедуры и функции.

Приведены соотношения для параметров двухшагового мультибозонного алгоритма применительно к рассматриваемой U(1) модели. Это соотношения для границ интервала аппроксимации и для степеней четырёх аппроксимирующих многочленов. Данные соотношения необходимы для обеспечения достаточно точных и быстрых вычислений данным алгоритмом. Кроме того, проанализированы производительности двухшагового мультибозонного алгоритма и мультибозонного алгоритма только с первым шагом без второго шага принятия-отвержения полей. Показано, что при больших числах обусловленности двухшаговый мультибозонный алгоритм имеет более высокую

производительность по сравнению с мультибозонным алгоритмом только с первым шагом.

Двухшаговый мультибозонный алгоритм с параметрами по установленным зависимостям целесообразно использовать при исследованиях математических моделей фермионов методом решётки.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Wilson, K.G.* Confinement of quarks // *Phys. Rev. D.* 1974. V. 10. P. 2445–2459.
2. *DeGrand, T., Toussaint, D.* Topological excitations and Monte Carlo simulation of Abelian gauge theory // *Phys. Rev. D.* 1980. V. 22. P. 2478–2489.
3. *Duane, S., Kennedy, A., Pendleton, B., Roweth, D.* Hybrid Monte Carlo // *Phys. Lett. B.* 1987. V. 195. P. 216–222.
4. *Gottlieb, S., Liu, W., Toussaint, D., Renken, R., Sugar, R.* Hybrid molecular dynamics algorithms for the numerical simulation of quantum chromodynamics // *Phys. Rev. D.* 1987. V. 35. P. 2531–2542.
5. *Lüscher, M.* A new approach to the problem of dynamical quarks in numerical simulations of lattice QCD // *Nucl. Phys. B.* 1994. V. 418. P. 637–648.
6. *Borici, A., de Forcrand, Ph.* Systematic errors of Lüscher's fermion method and its extensions // *Nucl. Phys. B.* 1995. V. 454. P. 645–662.
7. *Montvay, I.* An algorithm for gluinos on the lattice // *Nucl. Phys. B.* 1996. V. 466. P. 259–284.
8. *Zverev, N.V.* Two Algorithms and Lattice U(1) Model // *Phys. Scripta.* 2005. V. 72. P. 366–372.
9. *Кройц, М.* Кварки, глюоны и решётки. Пер. с англ. М. Мир. 1987. 192 с.
10. *Montvay, I., Münster, G.* Quantum Fields on a Lattice. Cambridge University Press. 1994. 500 pp.
11. *Montvay, I.* Quadratically optimized polynomials for fermion simulations // *Comput. Phys. Commun.* 1998. V. 109. P. 144–160.

TWO-STEP MULTIBOSON ALGORITHM FOR A DISCRETE U(1) MODEL OF FERMIONS

N. Zverev

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. The statistical two-step multiboson algorithm as applied to a U(1) model of fermions on the four-dimensional space-time lattice is considered. It is shown that introduction of the second field accept-reject step leads to increase of performance of the algorithm.

Keywords: U(1) models, fermions, algorithms, Monte Carlo method, space-time lattice.