

# РАЗДЕЛ I. МАТЕМАТИКА

---

УДК 530.145:530.12; 537.8:530.145; 517.958:530.145

DOI: 10.18384/2310-7251-2016-2-08-17

## ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

*Бугримов А.Л., Зверев Н.В.*

*Московский государственный областной университет  
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, Российская Федерация*

**Аннотация.** Выполнено сравнение вычислительных методов в квантовой теории поля и обычных численных методов в задачах системного анализа, управления и обработки информации. В ходе сравнения найдены совпадающие и частично совпадающие положения и методы вычислений в этих областях наук, выявлен ряд особенностей вычислительных методов, характерных только для квантовой теории поля. При этом отмечено, что данные особенности методов отражают основные принципы квантовой теории поля и физики элементарных частиц.

**Ключевые слова:** квантовая теория поля, решётка пространства-времени, численные методы

## FEATURES OF THE COMPUTATIONAL TECHNIQUES IN THE QUANTUM FIELD THEORY

*A. Bugrimov, N. Zverev*

*Moscow State Region University, ul. Radio 10a, 105005 Moscow, Russia*

**Abstract.** The computational techniques in the quantum field theory are compared with the ordinary numerical methods in the system analysis, information management and processing. In the course of comparison, coinciding and partially coinciding computational principles and techniques in these sciences have been found. In addition, a number of features of the computational methods related only to the quantum field theory are observed. These features are noted to reflect the basic principles of the quantum field theory and the physics of elementary particles.

**Keywords:** quantum field theory, space-time lattice, numerical simulations.

### 1. Введение

Компьютерное моделирование в последнее время произвело революцию в науке, став по существу мощным направлением между экспериментальными и теоретическими частями разных отраслей науки. Весьма важное значение имеют компьютерные вычисления и в теоретической физике, в частности, в квантовой теории поля. Ряд важнейших задач данной области науки, таких, как невыезд кварков из адронов или эффекты с участием нейтрино при сверхбольших энергиях, на данный момент не могут быть решены строго аналитически. И для решения подобных задач приходится применять методы компьютерных вычислений [1; 2; 3].

Однако в ходе использования компьютерных методов в квантовой теории поля, описанных в литературе [2; 3], выявляется множество особенностей, существенно отличающих данные методы от известных численных методов [4] решения задач системного анализа, управления и обработки информации. В то же время есть и ряд сходств моделирования в квантовой теории поля и обычных численных методов.

Вопрос об особенностях и приёмах вычислительных методов в квантовой теории поля с целью их использования в области системного анализа, управления и обработки информации является достаточно важным и своевременным. Данная работа посвящена описанию особенностей положений

и методов компьютерных вычислений в квантовой теории поля в сравнении с обычными численными методами системного анализа.

## 2. Совпадающие положения и методы

Отметим вначале совпадающие положения и методы вычислений в квантовой теории поля и в системном анализе.

Во-первых, в квантовой теории поля непрерывные координаты пространства и времени заменяют дискретными величинами – точками решётки или сетки:

$$x = (an_1, an_2, an_3, an_4), \quad n_\mu = -N_\mu/2+1, \dots, N_\mu/2-1, N_\mu/2.$$

Здесь  $a$  – шаг решётки или сетки,  $\mu = 1, 2, 3, 4$  – направление пространства-времени, а  $N_\mu$  – число точек решётки или сетки вдоль  $\mu$ -го направления. В обычных численных методах выполняется аналогичная замена непрерывного пространства или времени на дискретные величины.

Во-вторых, как в квантовой теории поля, так и в системном анализе непрерывные функции координат заменяют дискретными функциями точек решётки или сетки. Такими функциями в квантовой теории поля являются волновые функции (поля) частиц  $\varphi_x, \psi_x$  и переносчиков взаимодействий  $A_{x,\mu}$ .

И, в-третьих, в квантовой теории поля и в обычных численных методах интегрирование заменяется суммированием:

$$\int f_x d^4x \longrightarrow a^4 \sum_x f_x.$$

Чтобы результаты численных расчётов достаточно хорошо описывали соответствующие непрерывные теории, числа точек решётки или сетки вдоль каждого направления  $N_\mu$  стараются взять достаточно большими, а шаг решётки  $a$  – как можно меньше.

## 3. Частично совпадающие положения и методы

Теперь выясним, какие положения и методы вычислений в квантовой теории поля и в области системного анализа частично совпадают.

Во-первых, при решении задач, как в квантовой теории поля, так и в системном анализе, непрерывные производные заменяют конечными разностями. Но в квантовой теории поля используют ковариантные производные, обобщающие стандартные частные производные и включающие

волновые функции переносчиков взаимодействий [1]. Эти ковариантные производные в непрерывном пространстве-времени заменяют соответствующими разностными производными следующим образом [2; 3]:

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_\mu} + iA_{x,\mu} \right) \psi_x \longrightarrow \frac{1}{a} (U_{x,\mu} \psi_{x+a\mu} - \psi_x),$$

где унитарное поле

$$U_{x,\mu} = \exp(iaA_{x,\mu}).$$

А в численных методах системного анализа ковариантные производные отсутствуют, то есть рассматривают обычные частные производные (когда  $A_{x,\mu} = 0$ ).

Во-вторых, при математическом моделировании в квантовой теории поля часто решают системы линейных алгебраических уравнений конечного порядка:

$$\mathbf{M}\xi = \eta,$$

с использованием больших разреженных матриц частиц  $\mathbf{M}$ . При этом обычно используют хорошо известный метод сопряжённых градиентов [3; 4; 5]:

$$\begin{aligned} \lim_n \mathbf{x}_n &= \xi: & \mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{g}_n, \\ \mathbf{g}_{n+1} &= \mathbf{r}_{n+1} + \beta_n \mathbf{g}_n, & \mathbf{r}_n &= \mathbf{M}^+ (\eta - \mathbf{M}\mathbf{x}_n), \\ \alpha_n &= \|\mathbf{r}_n\|^2 / \|\mathbf{M}\mathbf{g}_n\|^2, & \beta_n &= \|\mathbf{r}_{n+1}\|^2 / \|\mathbf{r}_n\|^2. \end{aligned}$$

В системном анализе также решают данным методом большие системы линейных уравнений. Но в отличие от системного анализа, в теории поля количество элементов матриц частиц определяется числом точек решётки пространства-времени и является достаточно большим. Поэтому для увеличения производительности метода сопряжённых градиентов данные матрицы частиц раскладывают на две подматрицы  $\mathbf{M}_{eo}$  и  $\mathbf{M}_{oe}$  по чётным (e) и нечётным (o) точкам решётки [5].

В-третьих, для вычислений в квантовой теории поля средних значений функций полей переносчиков взаимодействий  $O[U_{x,\mu}]$  используют статистический метод Монте-Карло [2,3]. В этом методе среднее значение функции представляет собой среднее арифметическое значение данной функции  $\langle O \rangle$  при большом количестве случайных полей переносчиков взаимодействий  $U_{x,\mu}^{(\alpha)}$

$$\langle O \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^n O[U_{x,\mu}^{(\alpha)}].$$

Поля  $U_{x,\mu}^{(\alpha)}$  генерируют с определённым весом  $p[U_{x,\mu}^{(\alpha)}]$ . И в итоге вычисляют континуальный (функциональный) интеграл для  $\langle O \rangle$  по полям  $U_{x,\mu}$ :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int O[U_{x,\mu}] p[U_{x,\mu}] \prod_{x,\mu} dU_{x,\mu},$$

где  $Z$  – нормировочный множитель.

В системном анализе также используют метод Монте-Карло для вычислений средних значений функций большого количества координат [4]. Однако методы генерирования случайных полей переносчиков взаимодействия с определённым весом в квантовой теории поля существенно сложнее методов генерирования случайных координат в системном анализе.

В-четвёртых, в теории поля для получения новых полей переносчиков взаимодействий с весом, учитывающим определитель матрицы фермионных частиц  $\det M$ , в методе Монте-Карло используют процедуру «молекулярной динамики» [3; 5]:

$$U_{x,\mu}^{(k+1)} = U_{x,\mu}^{(k)} \exp(i\Delta\tau P_{x,\mu}^{(k)}), \quad P_{x,\mu}^{(k+1)} = P_{x,\mu}^{(k)} + \Delta\tau F_{x,\mu}[U_{y,\nu}^{(k)}].$$

Эта процедура является методом третьего порядка решения дифференциальных уравнений «движения» поля  $U_{x,\mu}$  с сопряжённым «импульсом»  $P_{x,\mu}$ .

В системном анализе подобным методом решают дифференциальные уравнения [4]. Однако порядок аппроксимации производных там гораздо более высокий. А в квантовой теории поля малость порядка аппроксимации производных обусловлена большим количеством значений полей в каждой дискретной точке пространства-времени и для каждого направления. Тем самым уменьшается точность получения нового поля  $U_{x,\mu}'$  по предыдущему полю  $U_{x,\mu}$ . Но эта малая точность затем компенсируется процедурой принятия или отвержения полученного поля.

В-пятых, для существенного ускорения вычислений при достаточно высокой точности часто используют аппроксимирующие многочлены. В теории поля аппроксимируют определитель матрицы фермионных частиц  $\det M$ , входящий в вес полей переносчиков взаимодействий, согласно формуле:

$$\det^2 \mathbf{M} \cong \det^{-1} P_n(\mathbf{M}^+ \mathbf{M}),$$

где  $P_n(x)$  – многочлен  $n$ -й степени, аппроксимирующий функцию  $x^{-1}$  на некотором положительном отрезке, содержащем средние минимальное и максимальное значения матрицы  $\mathbf{M}^+ \mathbf{M}$  [5]. Затем обратный определитель  $\det^{-1} P_n(\mathbf{M}^+ \mathbf{M})$  вычисляют методом Монте-Карло. А в системном анализе многочленами аппроксимируют функции, которые необходимо либо интерполировать или экстраполировать, либо проинтегрировать [4].

#### 4. Положения и методы вычислений в квантовой теории поля

И наконец, выявим те положения и методы вычислений, которые характерны только для квантовой теории поля.

Во-первых, волновые функции (поля) переносчиков взаимодействий  $A_{x,\mu}$  и частиц  $\psi_x$  или  $\varphi_x$  предполагаются зависимыми не только от точек решётки пространства-времени  $x$ , но и от направлений пространства  $\mu$  и индексов  $r$  ориентации спинов частиц и античастиц и/или цветовых степеней свободы [2; 3]. Это обусловлено принципом существования различных дискретных характеристик частиц в квантовой теории поля. Поскольку для расчётов физических величин необходимо хранить значения всех полей в каждой точке дискретного пространства-времени, для каждого направления пространства-времени и для каждой ориентации спинов и/или цветовых степеней свободы, вычисления в квантовой теории поля являются достаточно затратными по компьютерной памяти. Из-за этого расчёты выполняют для достаточно небольших чисел точек решётки по каждому направлению: обычно  $N_\mu = 6 - 24$  для каждого направления пространства-времени.

Во-вторых, при вычислении средних значений величин выполняется интегрирование по унитарным полям переносчиков взаимодействий, имеющим вид

$$U_{x,\mu} = \exp(iaA_{x,\mu}).$$

От этих полей зависят значения действия  $S$  переносчиков взаимодействия и определитель матрицы фермионных частиц  $\det \mathbf{M}$ , входящие в вес  $p[U_{x,\mu}]$  интеграла для средних значений. Действие и определитель должны быть инвариантными при следующих калибровочных преобразованиях волновых функций частиц и переносчиков взаимодействий [1–3]:

$$U_{x,\mu} \rightarrow g_x U_{x,\mu} g_{x+a\mu}^{-1}, \quad \psi_x \rightarrow g_x \psi_x, \quad \varphi_x \rightarrow g_x \varphi_x,$$

где  $|g_x| = 1$ . Такая инвариантность обусловлена принципом наличия законов сохранения различных зарядов в квантовой теории поля. Этим объясняется необходимость введения ковариантных производных и использования унитарных матричных волновых функций  $U_{x,\mu}$  переносчиков взаимодействий в численных расчётах в квантовой теории поля.

В-третьих, для правильного описания элементарных частиц методом решётки иногда необходимо в действие частиц  $S$  вводить дополнительные слагаемые, зависящие как от полей физических частиц [2; 3], так и от полей вспомогательных нефизических частиц [1; 6]. Введение таких слагаемых вызвано существованием в квантовой теории поля расходимостей корреляционных функций виртуальных частиц как при больших, так и при малых переданных импульсах. Слагаемые, зависящие от этих полей в непрерывном пределе шага решётки пространства-времени  $a \rightarrow 0$  исчезают, если в этом пределе массы нефизических частиц  $M$  удовлетворяют условиям:

$$M \rightarrow \infty, \quad aM \rightarrow 0.$$

Наконец, в-четвёртых, при вычислениях средних значений величин  $\langle O \rangle$  методом Монте-Карло для генерации полей переносчиков взаимодействий  $U_{x,\mu}$  с заданным весом  $p[U_{x,\mu}]$  осуществляется многократное использование следующих процедур, алгоритмов и методов. Это алгоритм «тепловой бани» и процедура стохастического вектора для генерации полей  $U_{x,\mu}$ , входящих в генерируемый вес  $p[U_{x,\mu}]$  (см. [5]):

$$\Phi'_{x,r} = -V_{x,r} / B_{x,r} + \xi_{x,r},$$

$$U'_{x,\mu} = (F_{x,\mu} / |F_{x,\mu}|)^{-1} \exp(i\eta_{x,\mu}).$$

И кроме того, применяется метод «точечных источников» для вычисления элементов обращённой фермионной матрицы:

$$\chi = \mathbf{M}^{-1}\eta.$$

В этих формулах индексы  $r$  обозначают номера вспомогательных полей  $\Phi_{x,r}$  для интегрального представления обратного определителя матричного многочлена  $\det^{-1}P_n(\mathbf{M}^+\mathbf{M})$ , аппроксимирующего определитель матрицы фермионов  $\det^2\mathbf{M}$ .  $\xi_{x,r}$  – числа, генерируемые случайным образом с весом  $\exp(-B_{x,r} |\xi_{x,r}|^2)$ .  $\eta_{x,\mu}$  – числа, лежащие на отрезке  $[-\pi, \pi]$  и генерируемые случайным образом с весом

$\exp(|F_{x,\mu}| \cos \eta_{x,\mu})$ .  $B_{x,r}$ ,  $F_{x,\mu}$  и  $V_{x,r}$  – величины, зависящие от предыдущих значений полей  $U_{x,\mu}$  и  $\Phi_{x,r}$ . А ненулевой элемент вектора  $\eta$  равен 1 только для определённой точки пространства-времени  $x_0$  и для определённого индекса  $r_0$  ориентации спинов частиц и античастиц и/или цветовых степеней свободы. При этом рассматривают все индексы  $r_0$ . Тем самым получаемые векторы  $\chi$  дают ряд элементов обращённой матрицы фермионов, которых достаточно для вычислений средних значений физических величин фермионных частиц [3; 5]. Необходимость таких сложных процедур, алгоритмов и методов вычислений обусловлена применением континуального интегрирования для вычисления различных функций и величин элементарных частиц, а также неизбежностью использования детерминанта матрицы фермионных частиц в этом интеграле для согласования с принципом Паули. Это отражает важнейшие принципы и особенности квантовой теории поля и физики элементарных частиц.

### Заключение

В данной работе приведён анализ и сравнение вычислительных методов в квантовой теории поля теоретической физики и численных методов системного анализа, управления и обработки информации.

На основе анализа установлено, что совпадающими положениями и методами в теории поля и в системном анализе являются замена непрерывных координат и непрерывных функций дискретными значениями, а также замена интегрирования суммированием. А частично совпадающими являются замена непрерывных производных конечными разностями, решение систем линейных алгебраических уравнений, аппроксимация интеграла дискретной суммой методом Монте-Карло, процедура «молекулярной динамики» для вычисления новых величин и использование аппроксимирующих многочленов.

Показано, что положениями и методами, характерными только для квантовой теории поля, являются зависимость волновых функций (полей) физических частиц от узлов решётки пространства-времени, направлений пространства, ориентации спинов частиц и античастиц и/или цветовых степеней свободы; инвариантность действия и детерминанта фермионной матрицы относительно калибровочных преобразований волновых функций частиц и переносчиков взаимодействий; введение в действия частиц определённых дополнительных слагаемых; а также использование алгоритмов



«тепловой бани», стохастического вектора и «точечных источников» при вычислениях средних значений физических величин. Отмечено, что все эти положения и методы отражают основные принципы и особенности квантовой теории поля и физики элементарных частиц.

В результате выполненного исследования продемонстрирована целесообразность использования указанных вычислительных методов квантовой теории поля в численных методах системного анализа, управления и обработки информации.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М.: Наука, 1988. 272 с.
2. Кройц М. Кварки, глюоны и решётки. М.: Мир, 1987. 192 с.
3. Montvay I., Muenster G. Quantum Fields on a Lattice. Cambridge University Press, 1994. 500 p.
4. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы: Учеб. пособие. М.: Наука, 1987. 600 с.
5. Зверев Н.В. Векторная  $U(1)$  модель фермионов на решётке и алгоритмы её исследования. М.: Прометей, 2003. 112 с.
6. Зверев Н.В. Регуляризованные  $U(1)$  модели фермионов на решётке. М.: Прометей, 2004. 126 с.

### REFERENCES

1. Slavnov A.A., Faddeev L.D. Vvedenie v kvantovuyu teoriyu kalibrovocnykh polei [Introduction to quantum theory of gauge fields]. M., Nauka, 1988. 272 p.
2. Creutz M. Quarks, gluons and lattices. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1987. 192 p.
3. Montvay I., Muenster G. Quantum Fields on a Lattice. Cambridge: University Press, 1983. 169 p.
4. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. Chislennyye metody: Ucheb. posobie [Numerical methods: textbook]. M., Nauka, 1987. 600 p.
5. Zverev N.V. Vektornaya  $U(1)$  model' fermionov na reshetke i algoritmy ee issledovaniya [Vector  $U(1)$  model of fermions on the lattice and algorithms of its investigation]. M., Prometei, 2003. 112 p.
6. Zverev N.V. Regularizovannyye  $U(1)$  modeli fermionov na reshetke [Regularized  $U(1)$  model of fermions on the lattice]. M., Prometei, 2004. 126 p.

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Бугримов Анатолий Львович* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой вычислительной математики и методики преподавания информатики, Московский государственный областной университет;

e-mail: al.bugrimov@mgou.ru

*Зверев Николай Витальевич* – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;

e-mail: zverev\_nv@mail.ru

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Bugrimov Anatolii L'vovich* – doctor of technical sciences, professor, head of the Chair of the Department of Computational Mathematics and Methodology of Teaching Informatics at the Moscow State Regional University;

e-mail: al.bugrimov@mgou.ru

*Zverev Nikolai Vital'evich* – candidate of physical and mathematical sciences, associate professor of the Department of Theoretical Physics at the Moscow State Regional University;

e-mail: zverev\_nv@mail.ru

---

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКАЯ ССЫЛКА

*Бугримов А.Л., Зверев Н.В.* Особенности вычислительных методов в квантовой теории поля // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2016. № 2. С. 08–17.

DOI: 10.18384/2310-7251-2016-2-08-17.

### BIBLIOGRAPHIC REFERENCE

*A. Bugrimov, N. Zverev* Features of the computational techniques in the quantum field theory // Bulletin of Moscow State Regional University. Series: Physics and Mathematics. 2016. no. 2. pp. 08–17.

DOI: 10.18384/2310-7251-2016-2-08-17.