

规范固定傅里叶加速

Ahmed Sheta,* Yidi Zhao and Norman H. Christ

Department of Physics, Columbia University, New York, NY 10027, USA

E-mail: as5452@columbia.edu, yz3210@columbia.edu, nhc@phys.columbia.edu

对于渐近自由的理论,消除临界慢化 (CSD)的一个有前景的策略是使用朴素傅里叶加速。 这需要在作用量中引入规范固定以分离渐近解耦的傅里叶模式。在这篇文章中,我们介绍 了我们的方法和从一个带有规范固定的傅里叶加速混合蒙特卡洛算法得到的结果,该算 法将规范链软性固定到朗道规范。我们将自相关时间与纯混合蒙特卡洛算法进行了比较。 我们在弱耦合的小体积晶格上进行工作。我们展示了使用周期性边界条件的初步结果和 遇到的问题,然后展示了使用固定的、平衡的边界链接的结果以避免 Z₃和其他拓扑障碍, 并期待将类似的加速应用于大体积的物理相关的晶格中的许多小单元。

第 38 届格点场理论国际研讨会,LATTICE2021 2021 年 7 月 26 日至 30 日通过 Zoom/麻省理工学院 Gather 平台召开

*Speaker

© Copyright owned by the author(s) under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License (CC BY-NC-ND 4.0).

[†]This research was supported by the Exascale Computing Project (17-SC-20-SC), a collaborative effort of the US DOE' s Office of Science and National Nuclear Security Administration.

1. 介绍

随着晶格 QCD 计算在接近连续极限 $(a \rightarrow 0)$ 时使用更小的晶格间距,影响模拟的频率范围扩大,以包含更多的高能模式 (包括 $\omega \propto 1/a$)。这些模式需要较小的动力学步长才能准确地积分其强大的力。然而,由于混合蒙特卡洛 (HMC)算法以相同的速度演化所有模式,物理上更相关的低能模式则需要大量的步骤来显著改变其旧的配置。这个问题减缓了 HMC 算法生成新的规范构型的速度,并通常被称为临界慢化 (CSD)。CSD 是进行更精细晶格间距下更高精度数值晶格 QCD 计算的主要障碍之一。

由于 QCD 的渐近自由性,大多数规范自由度在连续极限下以二次形式进入作用量,模 仿了一个自由场理论,在该理论中傅里叶模式渐近解耦并进行简谐运动。因此,在我们之 前的文章中引入了固定规范的傅里叶加速(GFFA)算法,该算法试图利用傅里叶加速来消 除 CSD[1]。与使用所有模式相同质量的 HMC 算法不同,GFFA 使用依赖于模式的质量,使 得低频模式以大于高频模式的速度演化。原则上,这种方法应该消除与傅里叶频率时空尺 度范围相关的减速问题,对于给定的 L⁴ 格子,将模拟加速 L 倍。在本文中,我们简要回顾 了使用的傅里叶加速公式和所需的规范固定方法,然后讨论使用 GFFA 算法生成规范配置 所获得的数值结果。

2. 规范固定与傅里叶加速

应用朴素傅里叶加速的一个障碍是 QCD 作用的规范对称性,它混合了傅里叶模式,使 它们不匹配与该作用对应的标准模式。为了克服这一障碍,我们在作用中引入以下规范固 定项

$$S_{\rm GF}[U] = -\beta M^2 \sum_{x,\mu} \operatorname{Re}\left(tr[U_{\mu}(x)]\right), \qquad (2.1)$$

其中 M 是一个控制规范固定强度的参数。当所有链接都处于朗道规范时, S_{GF} 达到最小值,因此将其添加到作用中的效果是软性地将格点的规范固定为朗道规范,使得在随机演化过程中更接近朗道规范的构型被优先考虑。

为了保持规范不变量观测值的期望, 文献 [1-3] 中表明我们也需要在作用量中添加以 下补偿的 Fadev-Poppov 项

$$S_{\rm FP}[U] = \ln \int dg e^{-S_{\rm GF}[U^g]}, \qquad (2.2)$$

从而使作用量具有如下形式

$$S[U] = S_{\text{Wilson}}[U] + S_{\text{GF}}[U] + S_{\text{FP}}[U].$$

$$(2.3)$$

该作用通过相关的力进入数值模拟,对于 Swilson 和 SGF 而言,这些力是链接的简单函数,易于计算。另一方面,Fadev-Poppov 力则变成了在规范变换上的更为复杂的积分。

$$\frac{\partial S_{\rm FP}[U]}{\partial U_l} = \frac{\int dg \frac{\partial S_{\rm GF}[U^g]}{\partial U_l} e^{-S_{\rm GF}[U^g]}}{\int dg e^{-S_{\rm GF}[U^g]}} = \left\langle \frac{\partial S_{\rm GF}[U^g]}{\partial U_l} \right\rangle_g. \tag{2.4}$$

我们随机估计这个期望作为内蒙特卡罗计算,在规范变换下权重因子为 e^{-SGF[U⁸],使得}

$$\frac{\partial S_{\rm FP}[U]}{\partial U_l} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial S_{\rm GF}[U^{g_i}]}{\partial U_l}.$$
(2.5)

同样,在轨迹过程中动作的变化,用于在接受-拒绝步骤中计算 ΔH,是

$$S_{\rm FP}[U'] - S_{\rm FP}[U] = \ln \frac{\int dg e^{-S_{\rm GF}[U^g]} \cdot e^{S_{\rm GF}[U^g] - S_{\rm GF}[U'^g]}}{\int dg e^{-S_{\rm GF}[U^g]}}$$

$$\approx \ln \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} e^{S_{\rm GF}[U^{g_i}] - S_{\rm GF}[U'^{g_i}]}.$$
(2.6)

在这种情况下,规范变换的期望值涉及找到一个指数函数的平均值,这个平均值主要由样本空间中的一小部分决定,在这部分中,指数函数的取值远大于典型值。在我们的数值实验中,准确估计 *S*_{FP}[*U*'] - *S*_{FP}[*U*] 需要大量的样本,并且计算上不切实际,因此我们放弃了接受-拒绝步骤并允许存在有限步长误差。

最后,给定分子动力学哈密顿量的动能项

$$H_{p} = \sum_{k} tr \left[P_{\mu}(-k) D^{\mu\nu}(k) P_{\nu}(k) \right], \qquad (2.7)$$

通过选择质量项 *D*_{μν} 为作用量中规范场二次项的逆来实现傅里叶加速。对于我们在方程 (2.3) 中的规范固定作用量,连续极限下的 *D*_{μν} 已经在参考文献 [4] 中计算到了一阶。

$$D_{\mu\nu}(k) = \frac{1}{k^2} P_{\mu\nu}^T(k) + \frac{1}{M^2} P_{\mu\nu}^L(k),$$

$$P_{\mu\nu}^T(k) = \delta_{\mu\nu} - \frac{k_{\mu}k_{\nu}}{k^2},$$

$$P_{\mu\nu}^L(k) = \frac{k_{\mu}k_{\nu}}{k^2}.$$
(2.8)

傅里叶加速的数值实现已在参考文献 [1] 中进行了分析。我们特别注意到引入了参数 ϵ ,这为循环模式赋予了一个有限非零的质量。

3. 周期边界条件下的数值结果

由于规范固定,矢量势的傅里叶模式预计在连续极限下将以已知频率进行简谐振动。 使用常规 HMC 动能项(带有 $D_{\mu\nu}(k) = \delta_{\mu\nu}$),横向模式的频率如下所示与 k 相关:

$$\omega_k = \sqrt{\frac{\beta}{6}}k,\tag{3.1}$$

而使用傅里叶加速动能项消除了频率对 k 的依赖性, 使得

$$\omega_k = \sqrt{\frac{\beta}{6}}.\tag{3.2}$$

在图 3.1 中,我们考察了傅里叶模式随蒙特卡罗时间的数值演化情况,使用了方程 (2.3) 的规范固定作用。图表显示了频率由方程 (3.1) 和 (3.2) 描述的傅里叶模式的简谐运动;特别是,如果我们采用傅里叶加速动力学项,则振荡频率对模式时空尺度的依赖性消失。



图 3.1: 三个不同傅里叶模 ($A = \ln U$) 的实部随蒙特卡洛时间的变化,使用固定规范作用。图 (a) 使用了 HMC 动能项 ($D_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$),而图 (b) 使用了傅里叶加速动能项,其中 $D_{\mu\nu}$ 由方程 (2.8) 给出。这些结果来自于一个在 $\beta = 100$ 处的 4⁴ 晶格。

为了确定生成独立规范配置的加速比,我们将 GFFA 模拟和 HMC 模拟中 plaquette 和 Wilson 流动能量(流动时间 $\tau = 4$)的综合自相关 τ_{int} 次数进行比较。我们在弱耦合 $\beta = 10$ 的小体积周期性边界条件下工作。结果显示在表 3.1 和 3.2 中,表明与 HMC 相比, GFFA 实现了 \approx 5× 倍的加速。

β	τ_{traj}	steps	trajs	plaq	plaq τ_{int}	E(4) τ_{int}	Accpt
10	0.6	24	10030	0.783295(37)	4.51(82)	20.9(5.4)	75%
10	1.0	50	10030	0.783289(26)	3.41(30)	19.0(4.4)	77.6%
10	4.0	200	8533	0.783363(27)	10.73(61)	13.0(1.4)	78%

表 3.1: HMC 在具有周期性边界条件的 8⁴ 格点上运行,于 $\beta = 10$ 处。自相关时间以分子动力学时间 为单位报告。

β	τ_{traj}	steps	trajs	plaq	plaq τ_{int}	E(4) τ_{int}	M	MC
10	0.6	24	1911	0.783347(45)	1.26(25)	3.6(1.0)	3.0	200
10	1.0	30	5176	0.783207(16)	0.653(31)	18.6(8.3)	3.0	40
10	0.6	24	3915	0.783404(28)	1.059(81)	5.4(1.3)	5.0	200

表 3.2: GFFA 在具有周期性边界条件的 8⁴ 格点上运行,位于 β = 10 处。自相关时间以分子动力学时间单位报告。

在周期性边界条件下,另一个感兴趣的可观测量是沿着固定方向的平均 Polyakov 环路的相位,即 Polyakov 相位。Wilson 作用量享受着 Polyakov 相位的 Z₃ 对称性,其中所有沿 μ 方向的 Polyakov 环路 P 的变换 $P \rightarrow e^{\frac{2\pi}{3}i}P$ 保持作用量不变。虽然 S_{GF} 明确偏好单位的三个立方根之一,但如果我们在固定规范的作用中适当地包含了补偿的 Fadev-Poppov 项,则应保留 Z₃ 对称性。



图 3.2: 平均 Polyakov 圈在 $\mu = 2$ 方向上的相位演化,使用了包含 40 个内部蒙特卡洛样本的规范固定作用(图 a)、包含 1000 个内部蒙特卡洛样本的规范固定作用(图 b)以及纯 Wilson 作用(图 c)。由于对 Fadev-Poppov 力的估计不准确,图 (a)中的演化停滞在 0 相位,并无法跃迁到单位性的其他两个立方根。

图 3.2 考察了 Polyakov 相在一个方向上的演化。HMC 模拟显示偶尔在三个单位立方根 之间穿隧,正确地尊重理论背后的 Z₃ 对称性。另一方面,规范固定的模拟需要大量的蒙特 卡罗样本来估计 Fadev-Poppov 力,以准确补偿 S_{GF} 的对称性破坏,并且恰当地进行穿隧。 这在我们的实验运行中带来了计算困难,并使我们在表 3.1 和表 3.2 之间看到的自相关减少 的解释变得不确定。我们通过切换到具有固定边界条件的晶格来克服这一障碍,这是我们 预计最终将要工作的设置,将在下一节进行解释。改变这样的设置有完全消除 Z₃ 对称性的 优势,并且这是合理的,因为这些 Polyakov 相只有在高温模拟中才是非平凡的,但在我们 希望加速的限制区域中它们会消失。因此我们可以使用较少数量的内蒙特卡罗样本,但我 们仍必须通过要求与 HMC 估计相比可观测量的准确估算以及在增加蒙特卡罗样本的数量 时确保更精确的收敛来检查正确性。

4. 固定边界条件和数值结果

我们的算法最终目标是加速在大型晶格上进行的物理相关的计算。然而,傅里叶加速 需要晶格中的所有链接都足够接近单位元。即使在弱耦合极限下,为了使傅里叶加速的动 力学项与系统的振荡模式匹配,仍然需要一个微扰规范(如公式 (2.1)的朗道规范)。如果 晶格足够大以包含非微扰 QCD 效应 ($L \ge 1/\Lambda_{QCD}$),在整个晶格上找到一个微扰规范可能 是无法实现的。



图 4.1: 加速物理大晶格计算的策略。将晶格划分为较小的单元(红色链),使用方程 (4.1) 中的规范 固定、傅里叶加速哈密顿量独立演化,而连接这些单元的边界链(蓝色链)保持固定。

因此,为了加速大晶格上的模拟,我们将晶格划分为许多足够小的可以进行微扰计算的单元,如图 4.1 所示。然后,我们根据棋盘方案独立地演进每个单元,使用方程 (2.3)中的规范固定作用和方程 (2.8)中的傅里叶加速动能项。如果我们从整个晶格相对于威尔逊作用达到平衡开始,则对于每个单元,我们通过采样一个根据权重因子 $e^{-S_{GF}[U \in C]}$ 分布的规范变换 g(x)来软固定到朗道规范,其中 $U \in C$ 是该单元中的链接(图 4.1 中的红色链接)。将 g(x)应用于单元中的位点,固定了单元到微扰兰道规范的链接,并将其非微扰效应挤压进其外部边界链接(图 4.1 中的蓝色链接)。然后,在保持边界链接不变的情况下,我们根据规范固定、傅里叶加速哈密顿量

$$H = \sum_{k} tr \left[P_{\mu}(-k) D^{\mu\nu}(k) P_{\nu}(k) \right] + S_{\text{Wilson}}[U \in C] + S_{\text{GF}}[U \in C] + S_{\text{FP}}[U \in C], \quad (4.1)$$

进行单元演化,其中 $S_{Wilson}[U \in C]$ 包括所有边中任意一条是单元中的链接的面元,而 $D_{\mu\nu}$ 是方程 (2.8)中的傅里叶加速动能项,其傅里叶模式为该单元的。为了确保所有的自由度都得到更新,我们偶尔移动红色单元以将固定的蓝色边界链接包含在其演化的链接中。

我们将 plaquette 的自相关函数和指数自相关时间 τ_{exp} 在图 4.2 和表 4.1,4.2,4.3 以及 4.4 中的 HMC 运行与 GFFA 运行进行了比较。指数自相关时间是通过将自相关函数拟合到 $f(t) = e^{-t/\tau_{exp}}$ 得到的。在这些实验中,我们在一个具有固定边界条件的晶格上运行模拟,这些边界条件相对于威尔逊作用量达到了平衡,相当于图 4.1 中的一个单元。

表 4.3 和表 4.4 表明, GFFA 相对于 HMC 算法有 ≈ 2× 倍的加速因子。另外,如果我们 比较在 HMC 和 GFFA 运行中,将晶格大小从 6⁴ 增加到 10⁴ 对自相关性的影响,我们观察 到 HMC 达到了更大的自相关性,而尺度独立的 GFFA 保持了相同的效率,这与速度提升成 正比于 *L* 的情况一致。这预示着当在更大晶格上工作时,GFFA 将有增强的加速因子—— 目前正在进行此类仿真的研究。

5. 结论

在这篇文章中,我们回顾了参考文献 [1] 中提出的规范固定和傅里叶加速的基本公式, 并展示了具有周期边界条件的晶格模拟的数值结果。Z₃ 对称性通过需要大量的内部蒙特卡



图 4.2: 在具有固定边界的 10⁴ 格点上的 plaquette 的自相关函数。图表显示了 GFFA 情况下的自相关 性降低。

β	$ au_{traj}$	steps	trajs	plaq	plaq τ_{exp}	Accpt
10	0.5	48	9431	0.783318(56)	0.810(45)	97.2%
10	1.0	96	8481	0.783313(11)	1.540(87)	96.6%

表 4.1: HMC 在具有固定平衡边界条件的 6⁴ 格点上运行,边界的值为 $\beta = 10$ 。自相关时间以分子动力学时间单位报告。

β	τ_{traj}	steps	trajs	plaq	plaq τ_{exp}	Μ	MC
10	0.7	48	2142	0.783111(14)	0.581(47)	3.0	200

表 4.2: GFFA 运行用于一个具有固定平衡边界条件的 6^4 格子在 $\beta = 10$ 处。自相关时间以分子动力 学时间单位报告。

β	τ_{traj}	steps	trajs	plaq	plaq τ_{exp}	Accpt
10	0.5	48	2011	0.783395(13)	0.97(14)	93.3%
10	1.0	96	1807	0.783415(14)	1.97(30)	91.5%

表 4.3: HMC 在具有固定平衡边界条件的 10^4 格点上运行,边界的值为 $\beta = 10$ 。自相关时间以分子 动力学时间为单位报告。

β	τ_{traj}	steps	trajs	plaq	plaq τ_{exp}	Μ	MC
10	0.7	60	1296	0.783101(10)	0.569(58)	3.0	200

表 4.4: GFFA 在具有固定平衡边界条件的 10⁴ 格点上运行,边界的条件设定在 $\beta = 10$ 。自相关时间 以分子动力学时间为单位报告。

罗样本来准确模拟,给计算带来了巨大的障碍,所以我们切换到一个具有固定边界条件的 晶格,以期待将 GFFA 应用于物理上较大的晶格。还展示了在具有固定的、平衡的边界条 件的晶格上的数值结果,表明了在小块可观察值中加速了一个 $\approx 2 \times$ 倍数。分析适当的探测 更长时间空间尺度模式的可观测性可能揭示出相对于 HMC 算法增强了的加速效果。还需 要运行仍然处于微扰范围(例如 32⁴ 在 $\beta = 10$ 处)的较大晶格上的模拟,并检查与增加的 时间空间尺度范围相对应的更强加速效果。

参考文献

- Y. Zhao, Numerical Implementation of Gauge-Fixed Fourier Acceleration, PoS LATTICE2018 (2019) 026 [hep-lat/1812.05790].
- [2] D. Zwanziger, Quantization of gauge fields, classical gauge invariance and gluon confinement, Nuclear Physics B 345 (1990) 461.
- [3] C. Parrinello and G. Jona-Lasinio, A modified Faddeev-Popov formula and the Gribov ambiguity, Physics Letters B 251 (1990) 175.
- [4] S. P. Fachin, Quantization of Yang-Mills theory without Gribov copies: Perturbative renormalization, Phys. Rev. D 47 (1993) 3487.