

黎曼流形混合蒙特卡罗方法在晶格量子色动力学中的应用

Tuan Nguyen,^{a,*} Peter Boyle,^b Norman Christ,^a Yong-Chull Jang^c and Chulwoo Jung^c

^a*Department of Physics, Columbia University,
New York, NY 10027, USA*

^b*School of Physics and Astronomy, University of Edinburgh,
Edinburgh EH9 3JZ, United Kingdom*

^c*Physics Department, Brookhaven National Laboratory,
Upton, NY 11973, USA*

E-mail: thn2112@columbia.edu, paboyle@ph.ed.ac.uk, nhc@phys.columbia.edu,
ypj@bnl.gov, chulwoo@bnl.gov

临界减速现象构成了对利用 exascale 计算机可能实现的更小格点间距进行格点 QCD 计算的关键障碍。受傅里叶加速概念的启发,我们研究了一种 Riemannian 流形 HMC (RMHMC) 算法版本,在该版本中,HMC 算法中的规范质量项被 SU(3) 规范共变拉普拉斯算子的有理函数所取代。我们开发了一系列基于 SU(3) 规范共变拉普拉斯算子的切比雪夫滤波器工具,这些工具提供了规范力和费米子力的功率谱,并确定了由此产生的 RMHMC 演化中长距离和短距离 QCD 可观测量的频谱依赖性。这些工具可用于优化 RMHMC 质量项并逐模态地监控结果加速。

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 在线举行

*Speaker

1. 介绍

克服临界减速是现代格点计算的重要目标。临界减速问题源于在接近连续极限时，通常的马尔可夫链规范演化算法必须容纳越来越大的距离或能量尺度范围。这个问题因首选的混合蒙特卡罗 (HMC) 算法本质上不可重正化而变得更加严重 [1]。对于自由场，我们期望在物理格点大小固定但格点间距减少时 a ，非局部可观测量会在积分过一个物理轨迹长度后失去相关性 [2]。由于高频模式的存在，轨迹步长必须与格点间距成比例变化 a ，这意味着朴素的自相关时间按 a^{-1} 比例缩放。然而，Lüscher 和 Schaefer 提供证据表明这些可观测量的真实自相关时间按 a^{-2} [3] 缩放，并建议这种类似朗之万的行为源自 HMC 算法的不可重正化性。

傅里叶加速的目标是通过一个坐标依赖的质量项修改分子动力学哈密顿量中的动能项，使得低模态以更高的 MD 速度移动。在某些系统中，可以选择一个坐标依赖的质量项，使得所有模式以相同的速度移动并消除临界减速。例如，考虑格点纯 $U(1)$ 格理论的连续极限。通过 $U_\mu(x) = \exp(iA_\mu(x)/\sqrt{2\beta})$ 将规范链替换为规范场，并将 MD 质量项更改为 $M = (1 - \kappa) - \kappa\partial^2$ ，MD 哈密顿量变为

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}P_\mu[(1 - \kappa) - \kappa\partial^2]^{-1}P_\mu + \frac{1}{2}A_\mu(\partial_\mu\partial_\nu - \delta_{\mu\nu}\partial^2)A_\nu + O(1/\beta). \quad (1)$$

由于规范场是阿贝尔的，因此在规范链上的 MD 更新与规范变换交换，所以我们自由地将系统固定到洛伦兹规范。因此，规范模式只是简单平面波，其演化为 $d^2\tilde{A}_\mu(k)/d\tau^2 = -\omega^2(k)\tilde{A}_\mu(k)$ ，具有特征频率

$$\omega^2(k) = \frac{k^2}{1 - \kappa + \kappa k^2}. \quad (2)$$

在极限 $\kappa \rightarrow 1$ 下，所有模式以相同的速度移动，修改后的 HMC 完全加速。[4] 这一相同的选择质量项也可能在扰动极限下加速 ϕ^4 理论，因为系统的本征模式仍然近似于平面波，这意味着可以通过调节质量项的模式依赖性来实现近似的傅里叶加速。[5]

当试图加速格点 QCD 的 HMC 时，情况会更复杂，因为该理论是非阿贝尔且非微扰的。我们可以将坐标依赖的质量项参数化为 $SU(3)$ 规范协变拉普拉斯算子的一个函数，以保持 MD 哈密顿量的规范不变性。然而，为了使用协变拉普拉斯算子的本征模式来调整质量项进行傅里叶加速，我们必须证明理论的本征模式与协变拉普拉斯本征模式有足够的重叠。正如我们将要展示的，在投影到拉普拉斯特征向量的子空间中，其特征值位于一个狭窄区间 $[\lambda - \Delta\lambda/2, \lambda + \Delta\lambda/2]$ 内时，由规范作用产生的 HMC 力大小几乎与 λ 呈线性关系。此外，我们还将证明非阿贝尔纯规范理论傅里叶加速的一种扩展——黎曼流形 HMC (RMHMC) 算法能够比朴素的 HMC 更快地移动某些长距离可观测量，表明该理论在某种程度上实现了傅里叶加速。

2. HMC 规范力功率谱

为了证明协变拉普拉斯算子的本征模式可以用于加速 HMC 算法，我们计算了规范化协变拉普拉斯算子 $-\nabla_G^2/(4d)$ 的每个模式上的朴素 HMC 规范力的谱依赖性，其中 ∇_G^2 在伴随表示中定义为

$$\nabla_G^2\phi(x) = \sum_{\mu}^d [U_\mu(x)\phi(x+\mu)U_\mu^\dagger(x) + U_\mu(x-\mu)^\dagger\phi(x-\mu)U_\mu^\dagger(x-\mu) - 2\phi(x)]. \quad (3)$$

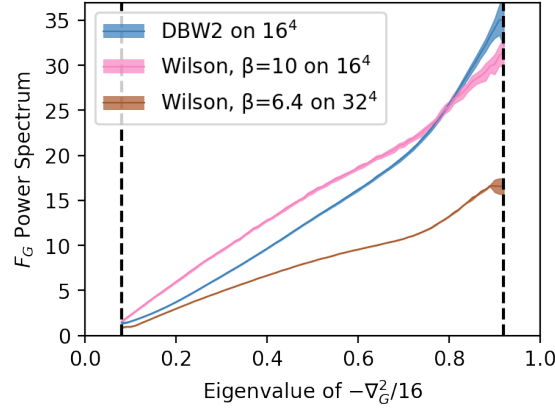


图 1: 规范力的各种格点作用下的每模功率谱相对于归一化的协变拉普拉斯算子的每个本征模式对应的本征值进行了绘制。各作用的逆格点间距分别为 DBW2 作用的 $a^{-1} = 2$ GeV, Wilson $\beta = 10$ 作用的 $a^{-1} = 270$ GeV, 以及 Wilson $\beta = 6.4$ 作用的 $a^{-1} = 3.6$ GeV。由于这些本征值对应的确切协变拉普拉斯模式太少, 无法准确测量功率谱, 因此我们对归一化的协变拉普拉斯算子非常低和非常高本征值的部分进行了截断。

我们注意到协变拉普拉斯算子明确依赖于规范链接, 这可能会引起一些微妙的复杂问题, 这些问题将在我们介绍黎曼流形 HMC 算法时予以解决。

我们定义了一个带通滤波器 $\mathcal{B}(\lambda) \approx P_{\lambda, \Delta\lambda}[-\nabla_G^2/16]$, 它通过切比雪夫多项式的和近似于将 $-\nabla_G^2/16$ 的特征值窄范围投影的算子: $\mathcal{B}(\lambda) = \sum c_i T_i[-\nabla_G^2/16]$ 。使用此带通滤波器, 我们将规范力 $F_G = -\partial S[U]/\partial U_\mu(x)$ (其中 $\partial/\partial U_\mu$ 表示关于群参数的常规导数, 导致链路矩阵 U_μ 左乘以群生成元) 投影到接近 λ 的特征值窄区间上, 从而提取出对应于那些特征值的协变拉普拉斯特征模的贡献。我们计算每个模式的规范力的功率谱作为

$$\langle F_G | \mathcal{B}(\lambda) | F_G \rangle / \text{Tr}[\mathcal{B}(\lambda)]. \quad (4)$$

图 1 绘制了各种格点作用下的规范力功率谱。功率谱是协变拉普拉斯算子的一个本征模式在积分一个小的时间步长后移动速度的相对度量。例如, 对于纯 $U(1)$ 规范理论, 功率谱是波数平方的线性函数。从图 1 可以看出, 对所有作用而言, 功率谱相对于 $-\nabla_G^2/16$ 的本征值惊人地接近线性关系, 这证实了规范作用的本征模式近似为协变拉普拉斯算子的本征模式。

3. RMHMC 算法

黎曼流形 HMC (RMHMC) 是一类傅里叶加速的 HMC 算法, 在这种算法中, 我们添加了一个依赖于协变拉普拉斯算子的坐标相关质量项。完整的哈密顿量由以下给出:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ P_\mu^\dagger(x) \left[\mathcal{M}(-\nabla_G^2/16) \right]^{-1} P_\mu(x) \right\} + S[U_\mu(x)] + \log |\mathcal{M}| \quad (5)$$

为了抵消由于质量项对规范链路的依赖而引起的额外力 $F_M = -\text{Tr} \{ P^\dagger [\partial \mathcal{M}^{-1} / \partial U_\mu(x)] P \}$, 需要加入 $\log |\mathcal{M}|$ 项。哈密顿量中的这一附加项将通过添加辅助场和辅助共轲动量来实现。进一步的复杂性在于哈密顿量的不可分离性, 这要求使用隐式蛙跳积分方案。[6]

在杜恩等人中，他们考虑了一个简单的质量项，该质量项与规范不变拉普拉斯算子呈线性关系。[4] 我们对这个简单质量项的初步研究表明，几乎没有任何自相关性的减少。因此，我们考虑协变拉普拉斯算子的有理函数的一般和来参数化我们的质量项：

$$\mathcal{M} = \left[c + \sum_{i=1}^N \frac{a_{0,i} + a_{1,i}(-\nabla_G^2/16)}{b_{0,i} + b_{1,i}(-\nabla_G^2/16) + (-\nabla_G^2/16)^2} \right]^{-2}. \quad (6)$$

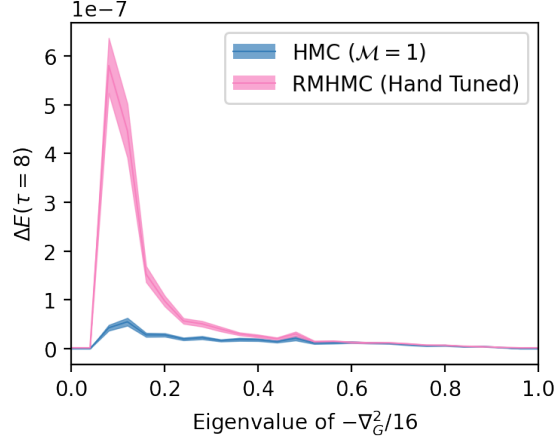


图 2: 威尔逊流能量（流动时间为 8）在单个 HMC leapfrog 积分步骤后发生变化，该步长为 10^{-4} MD 时间单位，并将注入的共轭动量投影到特定协变拉普拉斯特征模式上。所有算法在注入低模态后都表现出最大的威尔逊流能量变化。所有计算均使用带有 $a^{-1} = 2$ GeV 的 DBW2 作用于 16^4 晶格上进行。

对于我们当前的研究，我们没有进行完整的自相关性研究来对比朴素 HMC 和 RMHMC。相反，我们探讨了 RMHMC 是否能够使长距离可观测量移动得比朴素 HMC 更远，从而使我们能更快地探究理论是否确实被傅里叶加速。我们选择了研究两种算法之间 Wilson 流能量的变化，因为 Wilson 流可观测量对流动时间平方根级的长度尺度敏感。[7]

作为初步测试拉普拉斯特征模式与小特征值和大流动时间下由威尔逊流能量测量的长距离物理之间相关性的实验，我们考察了威尔逊流能量对特定协变拉普拉斯模式扰动的敏感性。我们将朴素 HMC 算法与一种 RMHMC 算法进行了比较，该算法中的质量项经过手动调整以近似模拟规范力项的谱依赖性，同时保持易于求逆。对于威尔逊作用量，我们考虑了一个额外的 RMHMC 质量项，该质量项被拟合为许多有理函数之和，以匹配规范力的谱依赖性，理论上应能提供最佳加速。

对于每个算法，我们生成随机共轭动量，就像是用热浴初始化一个 HMC 轨迹一样，但随后使用之前提到的带通滤波器将这些动量投影到协变拉普拉斯特征值的一个狭窄范围内。由于 HMC 热浴依赖于质量项来生成随机共轭动量，RMHMC 算法将生成与低协变拉普拉斯本征模式相对应较大的动量。然后我们将这些经过滤的动量注入一个短的 HMC 轨迹，并测量威尔逊流能量的变化。如图 2 所示，在注入对应于低模态的动量后，单次短 HMC 积分步长中，RMHMC 算法相比朴素 HMC 将威尔逊流能量推得更远，这表明具有小特征值的协变拉普拉斯本征模式与长距离尺度高度相关。

最后，我们将单个轨迹中的 Wilson 流能量变化作为该轨迹中 MD 积分步数的函数进行绘制，以查看 RMHMC 算法是否确实比朴素 HMC 更快地改变规范配置的长距离结构。对

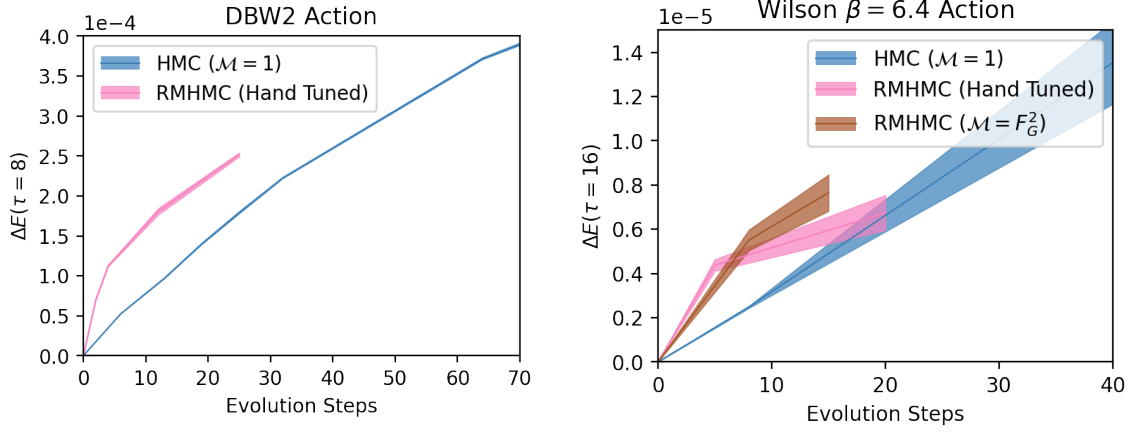


图 3: 威尔逊流能量的变化来自于初始配置在单个 HMC 或 RMHMC 轨迹之后的能量与该轨迹中 MD 积分步骤数量的对比。左侧图像是使用 DBW2 作用量在 $a^{-1} = 2 \text{ GeV}$ 上的 16^4 格子上运行的结果，而右侧图像则是在一个 32^4 格子上使用威尔逊作用量和 $\beta = 6.4$ 以及 $a^{-1} = 3.6 \text{ GeV}$ 运行的结果。由于在较大格子 $\beta = 6.4$ 上工作，我们将右侧图的流动时间加倍至 16。

于我们的每种算法，我们都调整了 MD 轨迹步长大小，使得所有算法给出相似的接受/拒绝概率。我们的结果如图 3 所示，分别针对两种作用：一种是带有 $a^{-1} = 2 \text{ GeV}$ 的 DBW2 作用，在一个 16^4 格子上；另一种是带有 $\beta = 6.4$ 和 $a^{-1} = 3.6 \text{ GeV}$ 的 Wilson 作用，在一个 32^4 格子上。对于这两种作用，我们看到 RMHMC 算法在最初的几个 MD 演化步骤中能够将 Wilson 流能量移动得比朴素 HMC 快大约两倍，在减慢到与朴素 HMC 大致相同的改变速率之前。因此，我们得出结论：对于所考虑的作用，我们可以加速理论的低模态，并且 RMHMC 能够在类似的计算成本下更快速地移动长距离可观测量，即在固定的接受率下具有相似数量的积分步骤。

4. 结论与下一步行动计划

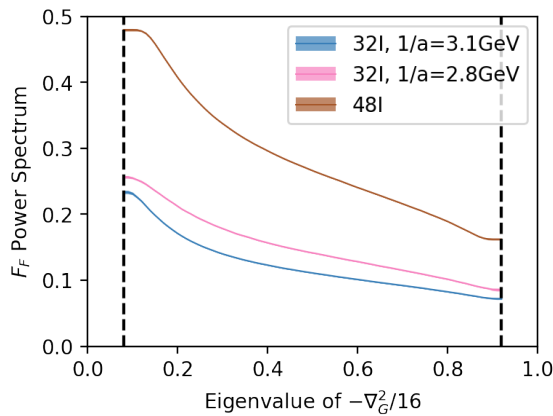


图 4: 费米子力的每模功率谱对于不同晶格大小和耦合常数的各种 Iwasaki 作用。轴与图中的相同 1

在这项工作中，我们提出了 RMHMC 算法类，通过修改 MD 哈密顿量中的质量项来加

速傅里叶变换的 HMC 算法，从而使理论中的低模态能够更快地移动。通过对威尔逊流动能量（一种对规范构型长距离结构敏感的可观测值）进行测量，我们表明 RMHMC 算法能够在较少的演化步骤中移动这些低模态，比直接使用 HMC 要少。最终，我们感兴趣的是将带有费米子的 RMHMC 用于计算。通过应用相同的技术来测量每种模式下费米子力的功率谱，在图 4 中我们展示了费米子力的频谱依赖性比规范力更温和，并且它已经使得低模态移动的距离大于高模态。这并不令人惊讶，因为费米子行列式是一个高度非局部的操作符。我们期望 RMHMC 可以应用于分层积分方案，在这种方案中我们将费米子力和规范力分离到不同的积分层次上，在这里我们只需要使用带有较低的、仅限规范层次的隐式积分方案。

在未来的研究中，我们感兴趣的是对某些长距离可观测量的自相关时间进行全面研究，以显示自相关时间的确切减少。此外，我们希望调整并运行带费米子的 RMHMC 算法。朝这个方向迈出的第一步可能是调查来自各个 Hasenbusch 比率的费米子力的谱依赖性。

致谢

我们感谢 RBC 和 UKQCD 合作组的同事们，特别是 Joseph Karpie 和 Robert Mawhinney，为我们提供了有益的讨论和想法。本研究得到了超大规模计算项目（17-SC-20-SC）的支持，该项目是美国能源部科学办公室和国家核安全管理局的合作努力成果。我们感谢阿贡领导力计算设施提供的计算资源，该设施是受合同 DE-AC02-06CH11357 支持的 DOE 科学用户设施，并且感谢橡树岭国家实验室的橡树岭领导力计算设施的支持，后者受到美国能源部科学办公室的合同 No. DE-AC05-00OR22725 的支持。此外，NHC 还得到了美国能源部拨款#DE-SC0011941 的支持。

参考文献

- [1] M. Lüscher and S. Schaefer, *Non-renormalizability of the HMC algorithm*, *Journal of High Energy Physics* **2011** (2011) 104.
- [2] A.D. Kennedy and B. Pendleton, *Cost of the generalized hybrid Monte Carlo algorithm for free field theory*, *Nucl. Phys. B* **607** (2001) 456 [hep-lat/0008020].
- [3] M. Lüscher and S. Schaefer, *Lattice qcd without topology barriers*, *Journal of High Energy Physics* **2011** (2011) .
- [4] S. Duane, R. Kenway, B.J. Pendleton and D. Roweth, *Acceleration of gauge field dynamics*, *Physics Letters B* **176** (1986) 143.
- [5] N.H. Christ and E.W. Wickenden, *Fourier acceleration, the hmc algorithm and renormalizability*, 2018.
- [6] M. Girolami and B. Calderhead, *Riemann manifold langevin and hamiltonian monte carlo methods*, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* **73** (2011) 123 [<https://rss.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1467-9868.2010.00765.x>].
- [7] M. Lüscher, *Properties and uses of the wilson flow in lattice qcd*, *Journal of High Energy Physics* **2010** (2010) 71.