

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
«Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
профессионального образования “Московский Физико-Технический институт”
(Национальный Исследовательский Университет)»

Физтех-школа Ландау, физики и исследований
Факультет общей и прикладной физики

Кафедра теоретической астрофизики и квантовой теории поля

Исследование различных граничных условий в решеточной глюодинамике

(Выпускная квалификационная работа на степень бакалавра)

Направление подготовки: 03.03.01 Прикладные математика и физика

Выполнил:
студент 625 группы
Сычев Дмитрий Александрович

Научный руководитель:
к.ф.-м.н., Котов А.Ю.

Москва, 2020

В данной работе проводится исследование согласованности наблюдаемых в решеточных калибровочных теориях с периодическими граничными условиями, а также недавно предложенными граничными условиями, облегчающими переход между различными топологическими секторами. Сравнения проводились путем моделирования методами Монте-Карло для теорий с калибровочными группами $SU(2)$ и $SU(3)$. Были произведены измерения средних значений петель Вильсона, отношений Кройца, межкваркового потенциала, а также массы скалярного глюбола. Для измеренных величин в пределах погрешностей измерений не было обнаружено зависимости от граничных условий. В частности, из независимости от граничных условий межкваркового потенциала следует, что физический шаг решетки тоже не зависит от граничных условий. На основании этого, а также данных о физическом шаге решетки на основании параметра Зоммера была произведена экстраполяция массы скалярного глюбола на непрерывный предел, при этом результат в пределах погрешности совпал со значением массы, полученной с применением моделирования на анизотропных решетках. Таким образом, полученные данные позволяют полагать, что применение нового варианта граничных условий поможет улучшить точность измерений наблюдаемых в решеточных теориях, при этом можно ожидать согласования результатов с результатами, полученными с применением традиционных периодических граничных условий.

Содержание

1	Введение	4
2	Постановка задачи	6
2.1	Используемая модель	6
2.1.1	Дискретизация	6
2.1.2	Граничные условия	7
2.2	Использованные алгоритмы	7
2.2.1	Метод Монте-Карло	7
2.2.2	Алгоритм Метрополиса	7
2.2.3	Многоуровневый алгоритм	8
3	Результаты моделирования	9
3.1	Оптимизация параметров	9
3.2	Петли Вильсона	10
3.3	Отношения Кройца	10
3.4	Межкварковый потенциал	14
3.5	Масса скалярного глюбола	14
3.6	Непрерывный предел для массы скалярного глюбола	17
3.7	Методы оценки погрешностей	18
4	Заключение	20

1 Введение

В настоящее время квантовая хромодинамика (КХД) является основной теорией, описывающей сильные взаимодействия. В это же время точные теоретические расчеты зачастую бывают затруднены неприменимостью пертурбативных техник из-за отсутствия малой константы связи. В этих случаях зачастую численный ответ помогает получить компьютерное моделирование. В настоящее время широко используются алгоритмы Монте-Карло, изначально возникшие в статистической физике, ввиду схожести постановки некоторых задач статистической физики и задач квантовой теории поля в формализме функционального интеграла в евклидовом времени.

Из-за бесконечности пространства полевых конфигураций, их прямое моделирование затруднительно, поэтому применяется дискретизация пространства-времени решеткой конечных размеров. При этом пространство полевых конфигураций на решетке становится конечномерным (тем не менее большой размерности) и поэтому методы Монте-Карло становятся актуальными.

Для получения результатов, близких к реальному эксперименту, требуется брать непрерывный предел решеточных теорий, уменьшая шаг решетки с сохранением достаточного для моделируемой задачи физического объема. Так как физическое пространство-время четырехмерно, то количество узлов требуемой решетки растет как минимум, как четвертая степень обратного шага решетки. Поэтому, ввиду большой вычислительной сложности, желательным является использование производительных вычислительных систем и специально оптимизированных алгоритмов.

В частности, так как физическое пространство не имеет края, а для моделирования используется решетка конечных размеров, то встает вопрос о выборе граничных условий. Традиционно используются периодические граничные условия (ГУ) [2, 4]. Они просты в реализации и являются естественным выбором, так как на получающемся многообразии (четырёхмерном торе) все точки эквивалентны, а возникающие поправки из-за конечности объема нетрудно отследить, рассмотрев несколько решеток разного объема. В это же время на торе в непрерывной теории могут возникать конфигурации с разной топологической структурой, вследствие чего возникает проблема "топологического замерзания" на решетках больших размеров. А именно, пространство конфигураций полей непрерывной теории, как и теории с периодическими ГУ, разбивается на счетное число классов (топологических секторов), соответствующих целым значениям топологического заряда, определяемого как интеграл по пространственно-временному многообразию \mathcal{M} от плотности топологического заряда:

$$Q = \int_{\mathcal{M}} d^4x q(x) \quad (1)$$

(В КХД $q(x) = \frac{1}{32\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{tr} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}$.) При этом в ходе Монте-Карло моделирования переходы

между разными топологическими секторами подавлены, в результате чего автокорреляционное время, связанное с топологическим зарядом, быстро возрастает с ростом размера решетки, что негативно сказывается на погрешностях измерений.

Также для некоторых задач используются открытые ГУ [8]. При выборе этих граничных условий теория рассматривается на четырехмерном кубе с границей. При этом точки вблизи границы отличны от точек вблизи центра гиперкуба. Поэтому для измерения величин непрерывной теории неограниченного объема необходимо это измерять на достаточном отдалении от границы куба в результате чего эффективный объем моделируемой системы заметно уменьшается. В это же время из-за конечности объема и открытой границы не возникает нежелательный на больших решетках эффект квантования топологического заряда.

В работе [3] был предложен еще один вариант граничных условий (более подробное описание этих ГУ приведено в разделе 2.1.2). При этом возникает неориентируемое однородное многообразие. Привлекательность этого метода связана с тем, что возникает ускорение работы алгоритма за счет уменьшения автокорреляций, так как с этими ГУ на получающемся неориентируемом многообразии топологический заряд может принимать любые вещественные значения, что облегчает переходы между конфигурациями с разными значениями топологического заряда; при этом из-за однородности (эквивалентности всех точек) не возникает сокращения объема, подходящего для измерений, как в случае с открытыми ГУ. Однако, так как это все же другая постановка задачи, то необходимо убедиться, что этот метод воспроизводит результаты, полученные с использованием других ГУ. В исходной работе [3] было проверено согласование для нескольких наблюдаемых в теории с фермионами. В данной же работе будет проведено сравнение для некоторых наблюдаемых в чистой глюодинамике, то есть теории без фермионов.

В частности, были произведены измерения для петель Вильсона, отношения Кройца, связанного с натяжением межкварковой струны в фазе конфайнмента, межкваркового потенциала, а также массы скалярного глюбола с использованием многоуровневого алгоритма [1]. Для последней также было проведена экстраполяция на непрерывный предел (с использованием данных о параметре Зоммера [6]) и проверена согласованность с результатами, полученными с использованием анизотропных решеток [7].

2 Постановка задачи

2.1 Используемая модель

Статсумма и среднее значение наблюдаемой в формализме функционального интеграла (в системе единиц $\hbar = c = 1$) в евклидовом времени:

$$Z = \int \mathcal{D}[\Phi] e^{-S_E[\Phi]} \quad (2)$$

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[\Phi] O[\Phi] e^{-S_E[\Phi]} \quad (3)$$

2.1.1 Дискретизация

Для решеточной калибровочной теории с калибровочной группой $SU(N)$ применяемая изотропная дискретизация впервые была предложена Вильсоном (изложение согласно [2]). В этой формулировке используется кубическая решетка, а полевыми переменными являются элементы калибровочной группы на каждом ребре решетки. Действие записывается через сумму действительных частей от произведений полевых матриц вдоль всех граней решетки (единичных квадратов).

$$S = \sum_{\square} S_{\square} \quad (4)$$

$$S_{\square} = \beta \left[1 - \frac{1}{N} \text{ReTr}(U_{ij}U_{jk}U_{kl}U_{li}) \right] \quad (5)$$

где $\beta = 2N/g_0^2$ - параметр теории, связанный с константой связи g_0 , индексы i, j, k, l последовательно нумеруют вершины грани, а $U_{ij} \in SU(N)$ - элемент калибровочной группы на ориентированном ребре (i, j) . Причем по определению принимается $U_{ij} = U_{ji}^{\dagger}$.

Физической калибровочной группой является $SU(3)$, однако при моделировании также иногда используется $SU(2)$, так как операции с ее элементами производятся на компьютере быстрее. При этом в функциональном интеграле интегрирование по калибровочной группе для каждой переменной на ребре производится по мере Хаара.

Калибровочно инвариантными наблюдаемыми на решетке являются, например, дискретизованный вариант петли Вильсона:

$$W(C) = \text{ReTr} \left(\prod_C U \right) \quad (6)$$

где C - контур, проходящий по ребрам решетки, а произведение полевых переменных U берется в порядке обхода контура.

2.1.2 Граничные условия

Также будем обозначать полевые переменные $U_i(x, y, z, t)$, где (x, y, z, t) - целочисленные координаты одного из концов ребра, а i обозначает направление от этого конца ребра ко второму концу. Также обозначим L и T - размер решетки (целочисленный) во временном и пространственном направлениях.

В работе используется два варианта граничных условий:

1) Периодические (Periodic-типа), например, использованные в [2], при которых для оси x :

$$U_i(x, y, z, t) = U_i(x + L, y, z, t) \quad (7)$$

а также аналогичные условия вдоль других осей.

2) Граничные условия, предложенные в работе [3], будем называть их "перекрученными" (или граничными условиями Мобіуса-типа, так как склейка граней гиперкуба похожа на склейку полосы для построения ленты Мебиуса). Во временном направлении:

$$U_x(x, y, z, t + T) = U_x^\dagger(L - x - 1, y, z, t) \quad (8)$$

$$U_i(x, y, z, t + T) = U_i(L - x, y, z, t) \quad (9)$$

в формуле (9) индекс i принимает значения из $\{y, z, t\}$. В пространственных направлениях накладываются обычные периодические граничные условия (7).

2.2 Используемые алгоритмы

2.2.1 Метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло состоит в генерации случайной последовательности полевых конфигураций на решетке, при котором их распределение соответствует весу $\exp(-S_E)$ из меры функционального интегрирования. Таким образом, если Φ_1, \dots, Φ_M - последовательность полевых конфигураций, а $O(\Phi)$ наблюдаемая вычисленная по конфигурации Φ , то среднее значение можно оценить как

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[\Phi] O[\Phi] e^{-S_E[\Phi]} = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M O[\Phi_n] \quad (10)$$

2.2.2 Алгоритм Метрополиса

В данной работе для перехода к следующей конфигурации используется алгоритм Метрополиса. Он состоит в том, что на каждом шаге выбирается случайное ребро решетки, пусть

U - матрица на этом ребре, также выбирается случайная матрица R в окрестности единичной матрицы (важно, чтобы R и R^\dagger выбирались с одинаковой вероятностью). Далее матрица U заменяется на UR с вероятностью $\min\{1, \exp(-\Delta S_E)\}$, где ΔS_E - изменение действия в результате замены U на UR . Далее процесс повторяется: выбирается случайное ребро и т.д.

Данный набор вероятностей переходов удовлетворяет условию детального баланса, а также условию эргодичности, за счет чего происходит сходимость к желаемому распределению.

Точнее, использовалась multihit-модификация алгоритма Метрополиса, в которой на каждом шаге делается несколько (фиксированное число) попыток обновления матрицы U на ребре путем домножения справа на каждый раз новую случайную R . При этом сходимость к распределению не нарушается, но появляется возможность использовать промежуточные вычисленные величины, необходимые для вычисления ΔS_E на предыдущей попытке обновления того ребра, несколько раз. За счет этого появляется дополнительный параметр (количество попыток обновления для каждого ребра) для оптимизации времени автокорреляций в цепи конфигураций (в терминах машинного времени).

2.2.3 Многоуровневый алгоритм

Идея многоуровневого алгоритма (multilevel algorithm), использованного в работе [1], похожа на идею multihit-а и состоит в том, что выбор ребра для обновления в шаге алгоритма Метрополиса осуществляется равномерно на всей решетке, а в многоуровневом алгоритме он осуществляется равномерно в подобласти решетки (при этом эта подобласть последовательно равномерно обходит всю решетку). Эта процедура не меняет распределение вероятностей в цепи, зато помогает в некоторых случаях уменьшить требуемую для набора статистику для получения значений наблюдаемой с фиксированной точностью. Например, эта модификация алгоритма использована для нахождения массы скалярного глобола.

3 Результаты моделирования

Вычисления проводились с использованием вычислительного кластера "ИТЭФ НИЦ "Курчатовский институт".

3.1 Оптимизация параметров

Так как моделирование проводится на компьютере, который производит детерминированные вычисления, то получение полностью случайных величин практически невозможно. Поэтому используются генераторы псевдослучайных чисел, которые могут произвести детерминированную последовательность чисел, близкую по спектральным характеристикам, ожидаемых от последовательности действительно случайных чисел. Ввиду этого встает вопрос о выборе подходящего генератора псевдослучайных чисел.

Мною были протестированы алгоритмы `ranlux24`, `ranlux48`, `mt19937`, `mt19937_64`, `minstd_rand` и `minstd_rand0` из стандартной библиотеки языка C++. При этом `minstd_rand` и `minstd_rand0` позиционируются как более быстрые, но относительно некачественные генераторы. Были произведены измерения для отношения Кройца (Creutz ratio) для теории с периодическими ГУ и калибровочной группой $SU(2)$. При этом результаты для всех генераторов кроме `minstd_rand` и `minstd_rand0` совпали в пределах ошибок измерений, а также с теоретическими ожиданиями, поэтому в работе далее использовался алгоритм `ranlux24` как быстрейший из тех, у которых результаты согласуются.

Для наблюдаемой M время автокорреляций определяются через автокорреляционную функцию (t, t' - машинное время, $M(t)$ - значение наблюдаемой, измеренное на конфигурации, созданной в момент времени t):

$$\chi_M(t) = \int dt' [M(t') - \langle M \rangle][M(t' + t) - \langle M \rangle] \quad (11)$$

Ожидается, что

$$\chi_M(t) \sim e^{-t/\tau_M} \quad (12)$$

где τ_M - автокорреляционное время для наблюдаемой M .

Такие параметры, как количество обновлений для `multihit`-а, размер окрестности единицы для матрицы R в алгоритме Метрополиса, количество обновлений в подобласти перед переходом к следующей подобласти в многоуровневом алгоритме настраивались из принципа минимизации автокорреляционного времени. То есть были произведены короткие наборы статистики с применением различных комбинаций параметров, оценены времена автокорреляций, и для дальнейшего использования выбраны параметры, их минимизирующие.

3.2 Петли Вильсона

Были произведены измерения средних значений для петель Вильсона прямоугольной формы. Для группы $SU(2)$ была использована решетка размером 16^4 , для группы $SU(3)$ - решетка размером 12^4 . Измерения проводились для каждой из $3 \times 4 = 12$ возможных ориентаций путем усреднения значений для всевозможных положений петли этой ориентации на решетке.

Стоит отметить, что для модели с периодическими граничными условиями все направления эквивалентны и по результатам измерений не было обнаружено в пределах погрешностей различий между средними значениями петель Вильсона одинакового размера, но различной ориентации.

Для "перекрученных" граничных условий же выделены направления X и T, тогда как Y и Z эквивалентны. При этом, действительно, на решетке меньшего размера 6^4 (при этом ошибки дискретизации больше, чем на решетках больших размеров, что облегчает обнаружение анизотропии), например, для петли размером 1×1 было обнаружена зависимость среднего значения от ориентации петли. В это же время эффект анизотропии даже на решетке 6^4 был небольшим (так как ошибки дискретизации уменьшаются с ростом размера решетки, то анизотропия с ростом размера решетки тоже должна уменьшаться), больше чем на порядок уступающим зависимости среднего значения петли от её размера, поэтому для дальнейшего использования для расчета производных наблюдаемых использовались усредненные также и по ориентациям значения петель соответствующих размеров.

3.3 Отношения Кройца

Отношение Кройца (Creutz ratio), определенное согласно [2], вычисляется по формуле

$$\chi(I, J) = -\ln \left(\frac{W(I, J)W(I-1, J-1)}{W(I-1, J)W(I, J-1)} \right) \quad (13)$$

где $W(I, J)$ - среднее значение прямоугольной петли Вильсона размерами $I \times J$. И в случае, если для вильсоновских петель выполняется закон площадей, то для больших петель $\chi \approx a^2 K$, где a - шаг решетки, K - натяжение струны (в физических единицах) в фазе конфайнмента.

На иллюстрациях ниже приведены графики (Рисунки 1-6) зависимости измеренных значений χ от параметра теории β для обоих вариантов граничных условий. Также для сравнения приведены графики ведущего вклада в пертурбативное разложение в режиме сильной связи. Так, для теории с калибровочной группой $SU(2)$: $a^2 K = \ln(4/\beta)$ при $\beta \rightarrow 0$, а для теории с калибровочной группой $SU(3)$: $a^2 K = \ln(18/\beta)$ при $\beta \rightarrow 0$. Видно, что результаты отлично согласуются между теориями с различными граничными условиями, а также с теоретическими предсказаниями в режиме сильной связи.

Рис. 1: Creutz ratio (2, 2); $16 \times 16 \times 16 \times 16$; SU(2)

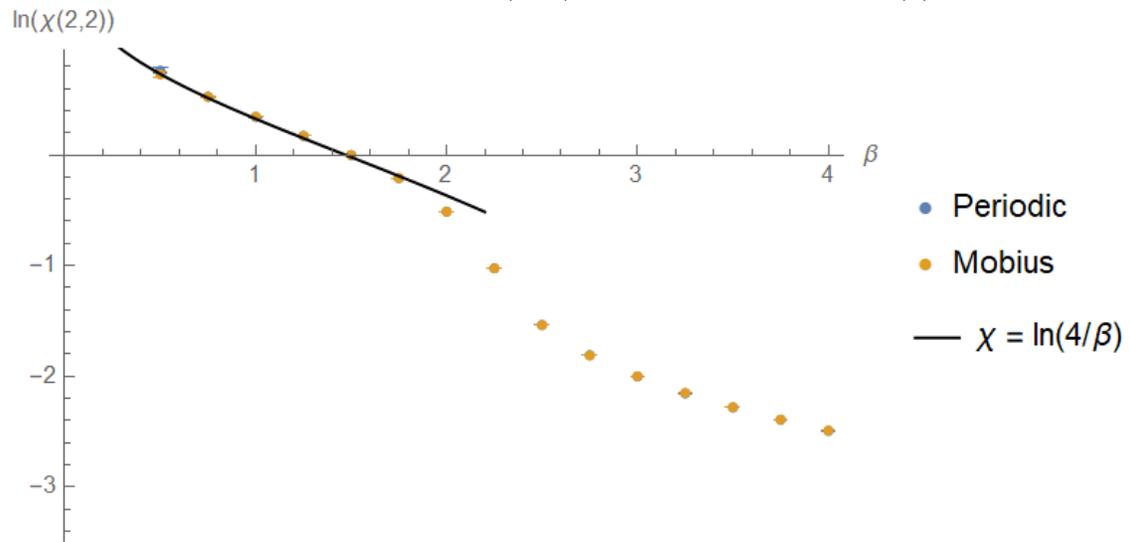


Рис. 2: Creutz ratio (2, 3); $16 \times 16 \times 16 \times 16$; SU(2)

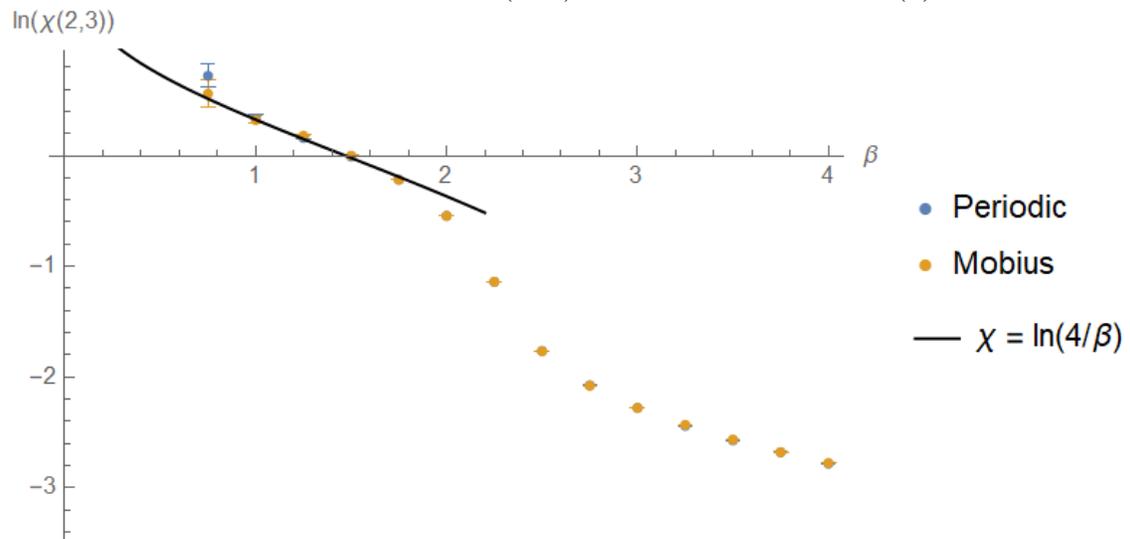


Рис. 3: Creutz ratio (3, 3); $16 \times 16 \times 16 \times 16$; SU(2)

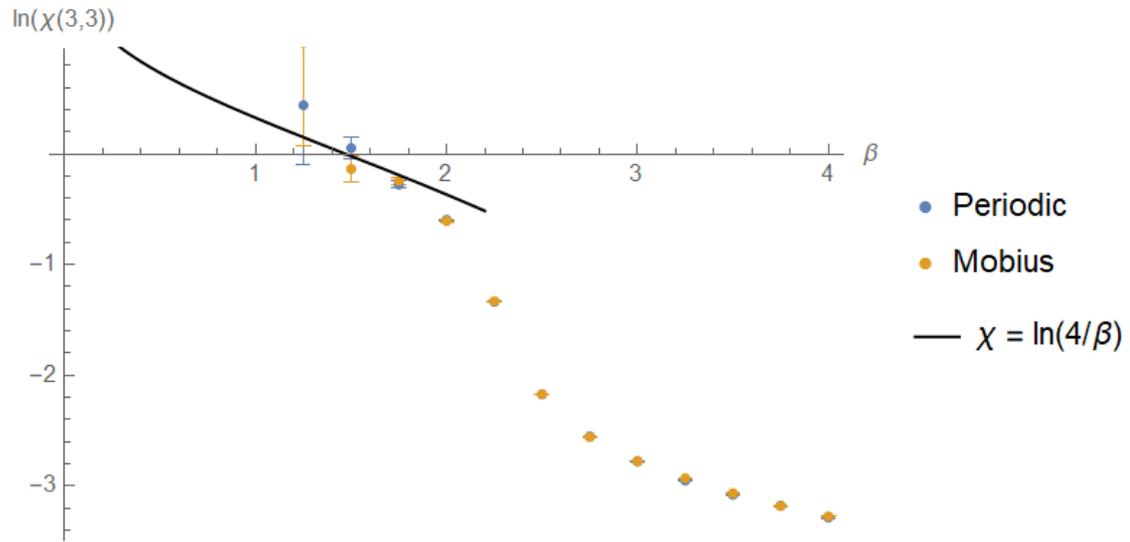


Рис. 4: Creutz ratio (2, 2); $12 \times 12 \times 12 \times 12$; SU(3)

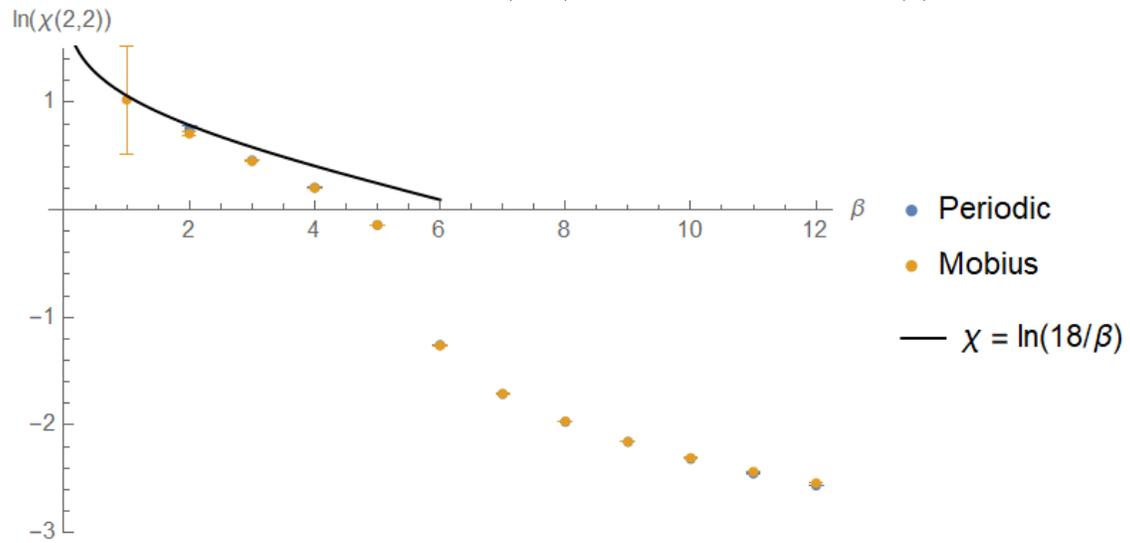


Рис. 5: Creutz ratio (2, 3); $12 \times 12 \times 12 \times 12$; SU(3)

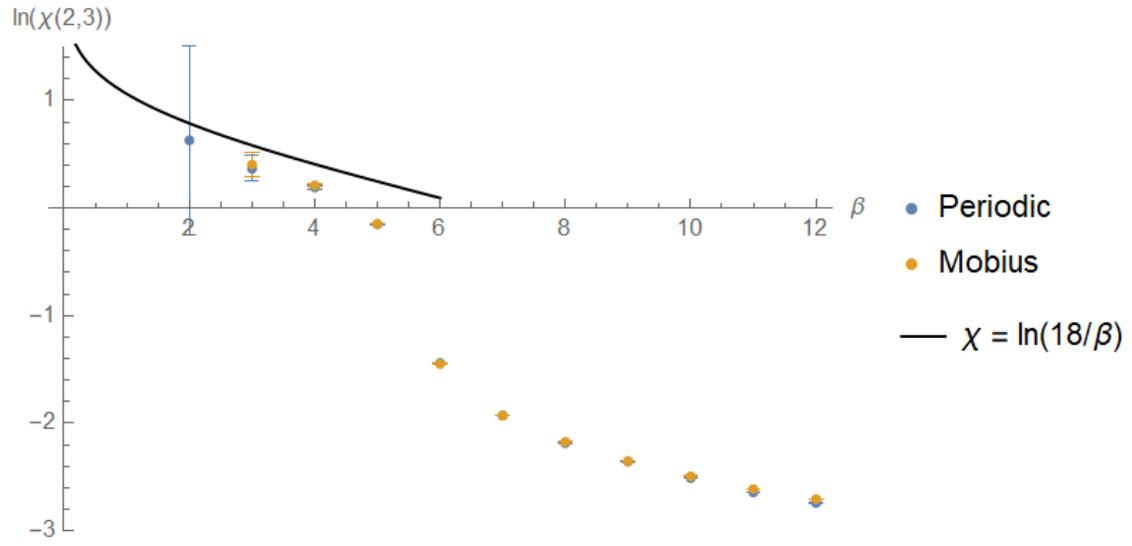
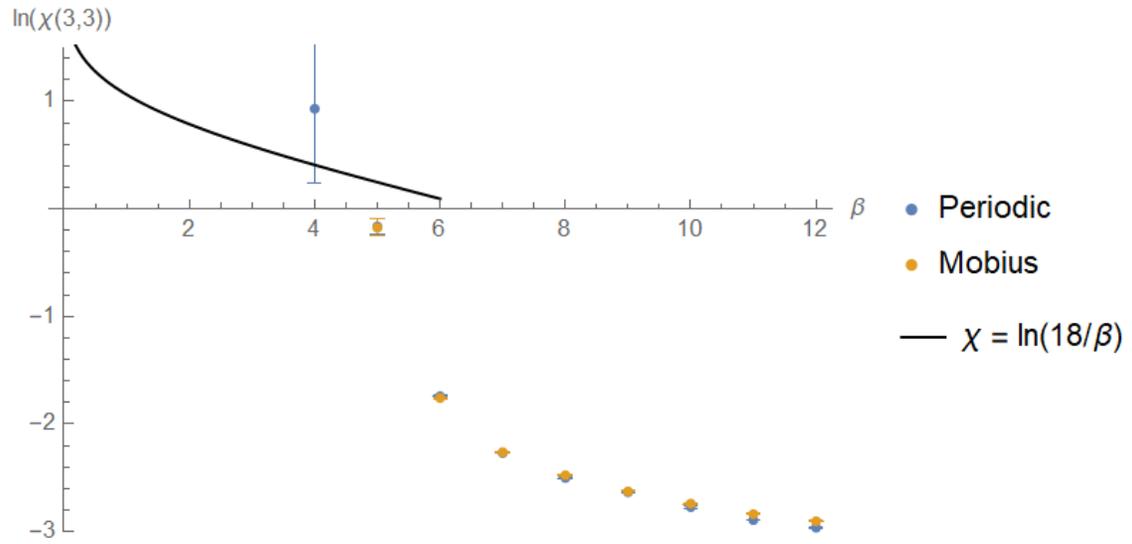


Рис. 6: Creutz ratio (3, 3); $12 \times 12 \times 12 \times 12$; SU(3)



3.4 Межкварковый потенциал

Согласно [4], межкварковый потенциал $V(R)$ для статических кварков может быть выражен через петли Вильсона по формуле

$$V(R) = \lim_{T \rightarrow \infty} -\frac{1}{T} \ln(W(R, T)) \quad (14)$$

При этом ожидается, что он хорошо описывается формулой (сумма кулоновского и линейного потенциалов):

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + Kr \quad (15)$$

Данные были обработаны для $\beta = 6$ для теории с калибровочной группой $SU(3)$ и для $\beta = 3.5$ для теории с калибровочной группой $SU(2)$. При этом оказалось, что зависимость $\ln(W(R, T))$ от T при $T \geq R$ почти не отличается от линейной, так что ее угловой коэффициент, который задает значение $\lim_{T \rightarrow \infty} -\frac{1}{T} \ln(W(R, T))$, с хорошей точностью оценивается даже по первой паре точек.

Таким способом были получены графики, изображенные на Рисунках 7 и 8.

Видно, что в пределах ошибок данные для различных исследованных граничных условий совпадают.

Стоит также отметить, что через межкварковый потенциал можно установить значение шага решетки в физических единицах [4]. Так, если $F(r) = dV(r)/dr$ - сила взаимодействия, то расстояние r_0 (параметр Зоммера) такое что

$$F(r_0)r_0^2 = 1.65 \quad (16)$$

соответствует экспериментально измеренному значению $r_0 \approx 0.5$ фм. Поэтому, так как значения межкваркового потенциала совпадают, то и физический масштаб решетки не зависит от граничных условий при фиксированном β .

3.5 Масса скалярного глюбола

В работе [1] был использован многоуровневый алгоритм для нахождения массы скалярного глюбола в глюодинамике без фермионов с периодическими граничными условиями. Используя аналогичный подход, в данной работе было проведено измерение массы скалярного глюбола для теории с калибровочной группой $SU(3)$ и обоими вариантами граничных условий. Глюбол является менее тривиальной наблюдаемой и его масса может быть выражена через скорость убывания коррелятора петель Вильсона. Это будет являться неплохим тестом теории с перекрученными граничными условиями, так как многообразие этой теории имеет иную топологическую структуру.

Рис. 7: Межкварковый потенциал; $\beta = 3.5$; $16 \times 16 \times 16 \times 16$; $SU(2)$

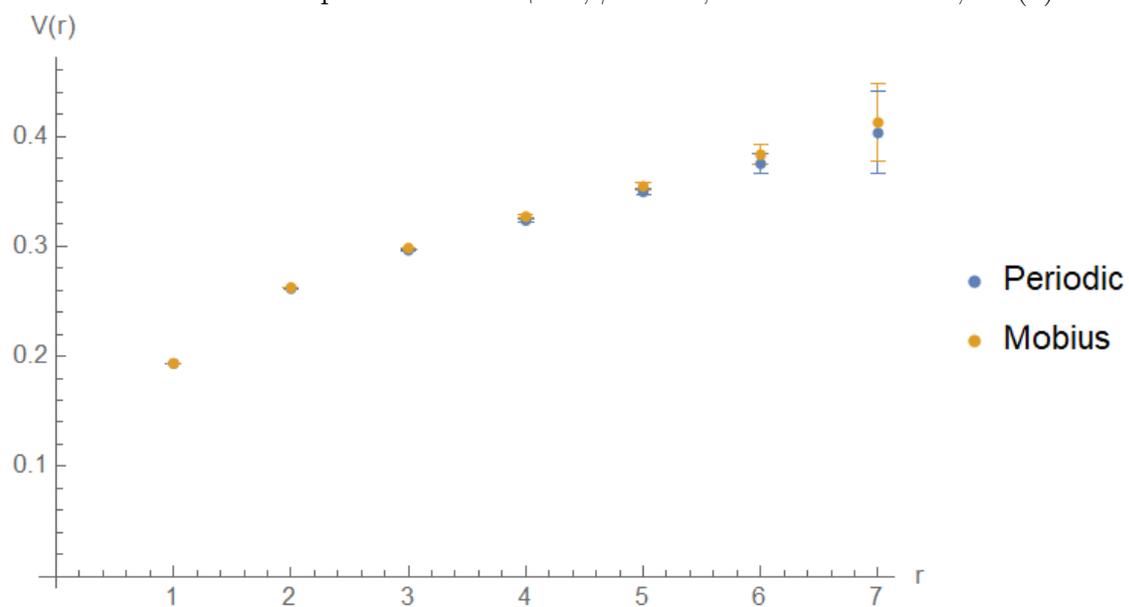
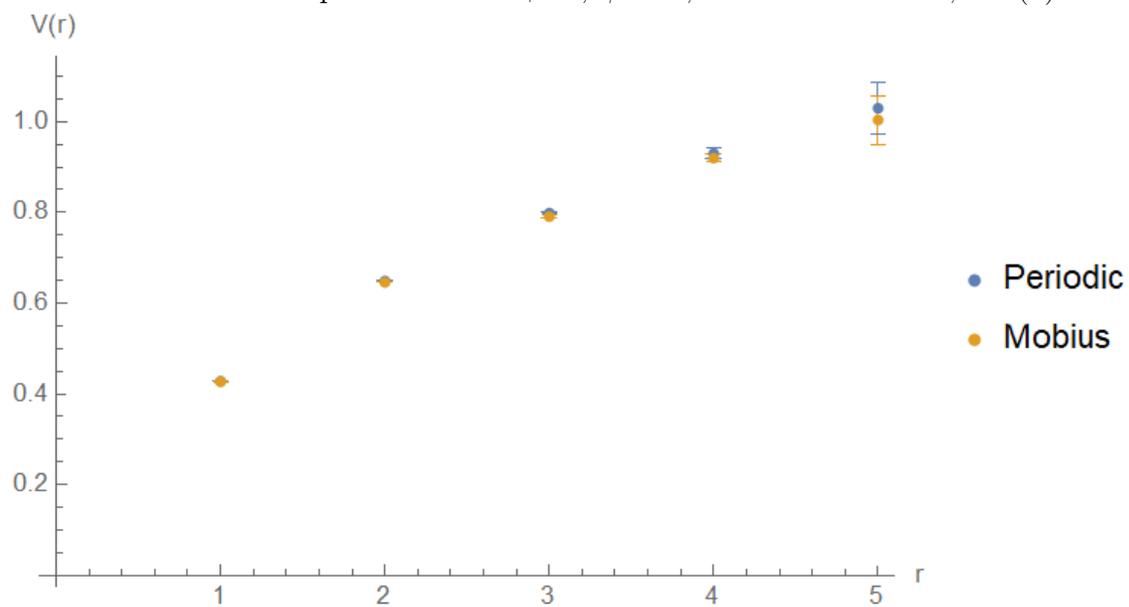


Рис. 8: Межкварковый потенциал; $\beta = 6$; $12 \times 12 \times 12 \times 12$; $SU(3)$



Более точно, если

$$C(\Delta t) = \langle (A(t) - \langle A \rangle)(A(t + \Delta t) - \langle A \rangle) \rangle \quad (17)$$

где $A(t)$ - плотность действия на "временном срезе" (трехмерной подрешетке с фиксированной координатой времени), а $\langle A \rangle$ - его вакуумное среднее. То

$$C(t) \approx C_0 (e^{-m(t-T/2)} + e^{m(t-T/2)}) \quad (18)$$

(при $t \gg 1$ и $(T - t) \gg 1$), где m - масса скалярного глобола, как возбуждения над вакуумом минимальной энергии. Эта формула выполнена с точностью до экспоненциально спадающего вклада по Δt от состояний с большей энергией.

Стоит отметить, что многообразия теорий с обоими вариантами ГУ однородны, то есть все точки на них эквивалентны. Поэтому и все временные срезы эквивалентны, а также эквивалентны между собой и все точки временного среза. Поэтому с обоими вариантами ГУ коррелятор $C(t)$ может зависеть только от $\min \{t, T - t\}$. Также так как и при "перекрученных" ГУ в пространственных направлениях наложены периодические граничные условия, то топологически временной срез и при перекрученных, и при периодических граничных условиях представляет собой трехмерную сферу. При этом коррелятор $C(\Delta t)$ между временными срезами, расположенными на расстоянии Δt , при $\Delta t \ll T$ "чувствует" только расстояние между слоями Δt , но не общую длину решетки T во временном направлении. Различие же периодическими и "перекрученными" ГУ проявляется только в способе "склейки" границ решетки во временном направлении. Поэтому можно ожидать, что по крайней мере при $\Delta t \ll T$ скорость убывания коррелятора, зависящая от массы скалярного глобола, не будет зависеть от ГУ. Тем не менее, для целей тестирования применимости "перекрученных" ГУ, формулы (17, 18) применялись во всем диапазоне Δt . При этом в пределах ошибок измерения не было обнаружено отклонений от них.

Для определения массы скалярного глобола решетка делилась на две половины и эти половины (за исключением разделяющих их слоев) независимо друг от друга обновлялись несколько раз (применение идей многоуровневого алгоритма) после чего конфигурация обновлялась глобально и т.д. По полученным конфигурациям вычислялось значение коррелятора, по скорости убывания которого оценивалась масса глобола. Например, при $\beta = 5.95$ на решетке размером $8^3 \times 20$ (20 - длина во временном направлении) были получены следующие значения для коррелятора (Рисунок 9):

Видно, что данные согласуются в пределах ошибок и выходят на прямую в логарифмических координатах. Из наклона этой прямой можно оценить массу глобола. Результаты измерений сведены в Таблице 1.

Таким образом, полученные результаты согласуются между собой и с результатами работы [1]. При этом, так как в работе [1] использовались периодические граничные условия, а ранее мы выяснили, что шаг решетки в физических единицах не зависит от граничных

Рис. 9: Пример временного коррелятора для скалярного оператора
 $\beta = 5.95$

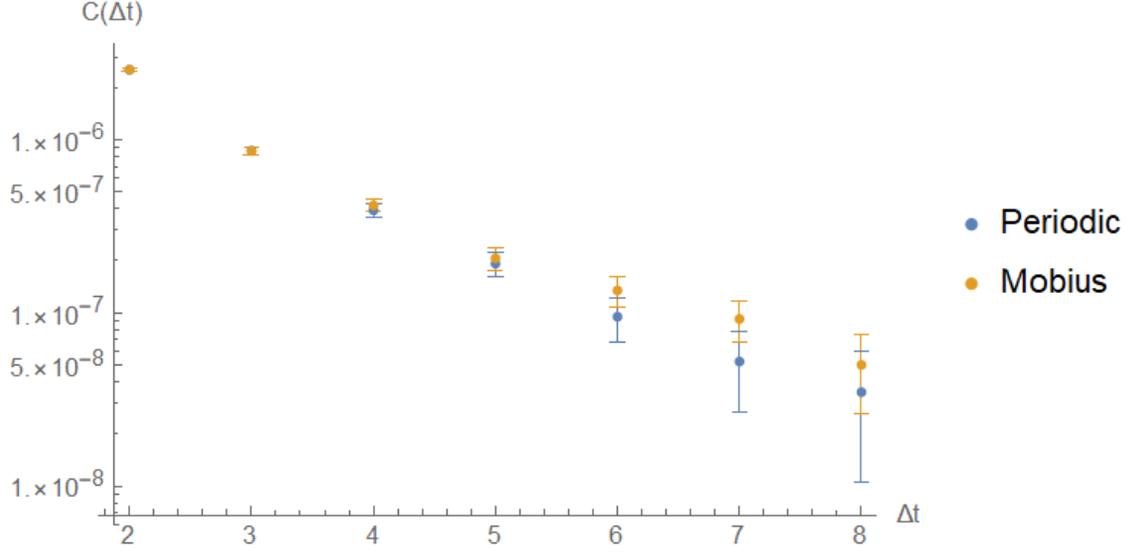


Таблица 1: Масса скалярного глюбола в решеточных единицах

Решетка	β	ma (Periodic)	ma (Mobius)	ma (Согласно [1])
$8^3 \times 20$	5.7	0.98 ± 0.02	1.00 ± 0.03	0.952 ± 0.011
$6^3 \times 16$	5.8	0.90 ± 0.11	0.83 ± 0.10	0.906 ± 0.008
$8^3 \times 20$	5.95	0.77 ± 0.03	0.74 ± 0.04	0.7510 ± 0.0015

условий, то и значение массы скалярного глюбола в физических единицах тоже не зависит от граничных условий в пределах ошибок измерений.

3.6 Непрерывный предел для массы скалярного глюбола

Так как для экспериментального поиска частиц необходимо значение массы в физических, а не решеточных единицах, то проведем экстраполяцию измеренных значений массы на непрерывный предел. В работе [7] с использованием анизотропных решеток (при использовании анизотропной решетки шаг решетки во временном направлении и в пространственном имеют разную длину в физических единицах) было получено значение для массы скалярного глюбола (обезразмеренное параметром Зоммера) $mr_0 = 4.21 \pm 0.15$. Так как в разделе 3.4 не было обнаружено зависимости межкваркового потенциала от граничных условий, то и параметр Зоммера, выражающийся через межкварковый потенциал (16), не должен зависеть от граничных условий. Поэтому используем значения параметра Зоммера, приведенные в работе [6], так как они измерены с более высокой точностью.

В связи с тем, что решеточная аппроксимация (4, 5) является аппроксимацией второго порядка [2], то есть аппроксимирует непрерывное действие $S_{\text{непр}} = \frac{1}{2} \int \text{Tr}(F_{\mu\nu}F_{\mu\nu})$ с точностью до поправок порядка $O(a^2)$, где a - шаг решетки в физических единицах, то можно ожидать,

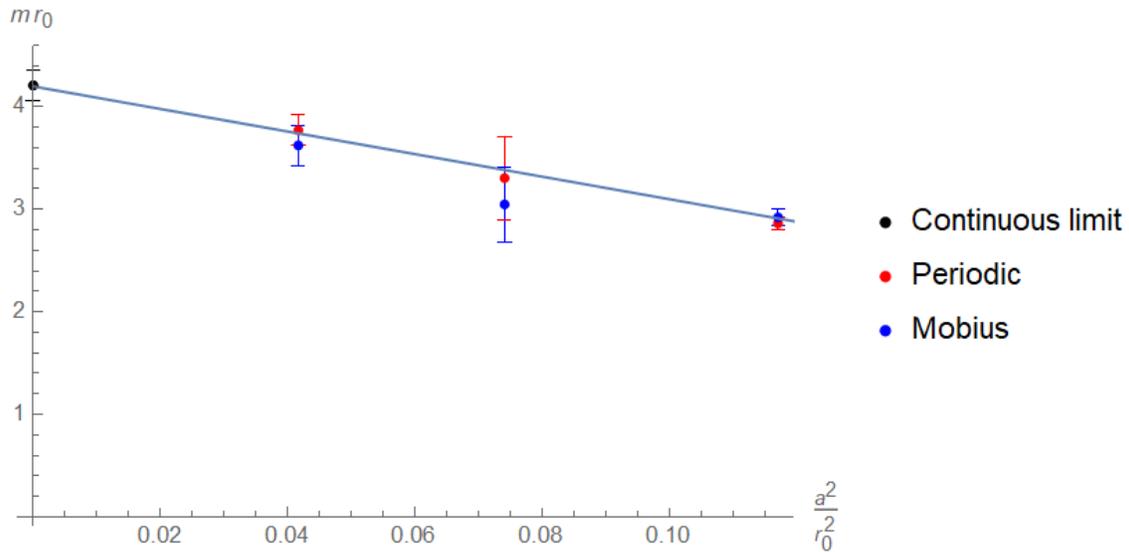
что и поправки к массам тоже будут второго порядка. Поэтому для экстраполяции на непрерывный предел использовалась функция $mr_0(a) = mr_0(0) + \alpha (a/r_0)^2$, а график строился в координатах mr_0 от $(a/r_0)^2$.

Результаты отображены в Таблице 2 и на Рисунке 10 (черным цветом отмечен результат работы [7], прямая проведена для наглядности).

Таблица 2: Масса скалярного глобола в физических единицах

β	r_0/a	mr_0 (Periodic)	mr_0 (Mobius)
5.7	2.922(9)	2.86 ± 0.06	2.92 ± 0.09
5.8	3.673(5)	3.3 ± 0.4	3.0 ± 0.4
5.95	4.898(12)	3.77 ± 0.15	3.6 ± 0.2

Рис. 10: Экстраполяция на непрерывный предел



Видно, что полученные результаты для двух видов граничных условий согласуются друг с другом в пределах погрешностей, а также с предшествующими результатами [7].

3.7 Методы оценки погрешностей

Так как метод Монте-Карло является вероятностным, то результаты, полученные с его помощью имеют помимо систематических ошибок дискретизации также и статистические ошибки. Для оценки последних в этой работе использовался метод jack-knife с дополнительным бинированием. Изложение согласно [5].

Данный подход состоит в том, что массив набранных данных разбивается на N_{bins} последовательных частей равного размера (бинов). Пусть c - значение интересующей нас величины, вычисленное на полном массиве данных, c_i - значение, вычисленное на массиве данных без

учета данных i -го бина. Тогда ошибку измеренного значения c можно оценить как

$$\Delta c = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{bins}} (c_i - c)^2} \quad (19)$$

Такой подход позволяет оценить ошибку даже для наблюдаемых, для которых трудно оценить автокорреляционное время. На протяжении всей работы использовалось $N_{bins} = 10$.

Также обсудим фитирование временного коррелятора для получения массы скалярного глюбола. Для оценки массы скалярного глюбола использовался многоуровневый алгоритм: на каждом шаге алгоритма решетка разбивалась на два полупространства, которые несколько раз обновлялись независимо друг от друга (за исключением двух разделяющих их слоев), далее усреднялись значения для скалярной наблюдаемой (плотности действия на "временном срезе") и измерялись ее корреляции между слоями из разных полупространств, для перехода к следующему шагу вся конфигурация обновлялась целиком. Обозначим $E_i^{[m]}(t)$ - значение скалярной наблюдаемой при i -м измерении слоя с координатой t на m -м шаге алгоритма, N - количество обновлений полупространств внутри каждого шага многоуровневого алгоритма, M - количество шагов многоуровневого алгоритма, $T(\tau)$ - количество всевозможных положений слоев t, t' из разных полупространств, таких что $|t - t'| = \tau$.

В качестве несмещенной оценки для среднего значения наблюдаемой можно использовать

$$\langle E \rangle' = \frac{1}{NMT} \sum_{mit} E_i^{[m]}(t) \quad (20)$$

В качестве оценки коррелятора можно использовать следующие формулы, используя какое-то значение $\langle E \rangle$:

$$C_I(\tau) = \frac{1}{N^2MT} \sum_{mijt} E_i^{[m]}(t) E_j^{[m]}(t) - \langle E \rangle^2 \quad (21)$$

$$C_{II}(\tau) = \frac{1}{N^2MT} \sum_{mijt} (E_i^{[m]}(t) - \langle E \rangle)(E_j^{[m]}(t) - \langle E \rangle) = C_I(\tau) + 2\langle E \rangle \{ \langle E \rangle - \langle E \rangle' \} \quad (22)$$

Видно, что если в качестве $\langle E \rangle$ использовать $\langle E \rangle'$, то два способа совпадут. Если было бы известно истинное значение матожидания $\langle E \rangle$, то следовало бы использовать (22) для сокращения ошибок, так как $E_i^{[m]}(t)$ и $E_j^{[m]}(t)$ по построению алгоритма независимы.

В реальных же вычислениях использовалась оценка $\langle E \rangle'$. Поэтому возникал случайный, неконтролируемый сдвиг $2\langle E \rangle \{ \langle E \rangle - \langle E \rangle' \}$ относительно более точной оценки. Поэтому для получения значения массы ma глюбола в решеточных единицах использовалось фитирование измеренной экспериментально функции $C(\tau)$ формулой $(A \operatorname{ch}(-ma(\tau - T/2)) + B)$, где T - размер решетки во временном направлении, с параметрами фита $\{A, ma, B\}$. Параметр B был как раз добавлен для компенсации неизвестного случайного сдвига.

4 Заключение

Таким образом, для измеренных величин в глюодинамике без фермионов не было обнаружено зависимости от выбора между традиционными периодическими, либо предложенными в [3] "перекрученными" граничными условиями. Это показывает, что новый вариант граничных условий, предложенный для борьбы с проблемой "топологического замерзания", несмотря на другую топологическую структуру многообразия, воспроизводит результаты, полученные с использованием периодических граничных условий. Это показывает, что новый вариант граничных условий может быть использован для уточнения современных результатов решеточных вычислений, так как он позволяет воспроизводить результаты, полученные с периодическими граничными условиями, но в то же время имеет лучшую производительность на решетках больших размеров, если присутствует заметная зависимость измеряемых величин от топологического сектора.

Для дальнейших исследований представляет интерес измерение и сравнение массы псевдоскалярного глюбола, так как на получающемся при применении "перекрученных" граничных условий многообразии топологический заряд полевых конфигураций не квантуется, а принимает непрерывный спектр значений, а масса псевдоскалярного глюбола может быть выражена через скорость убывания коррелятора топологического заряда. Можно продолжать работу и по исследованию согласования результатов моделирования и других наблюдаемых, либо проводить моделирование на анизотропной решетке (грубой в пространственных направлениях и имеющую меньший шаг во временном направлении). При этом для исследования наблюдаемых, требующих большего набора статистики, стоит использовать также более производительные алгоритмы получения конфигураций в методе Монте-Карло (имеющих меньшее автокорреляционное время). В данной работе использовался алгоритм Метрополиса как достаточный для измерения исследованных наблюдаемых с достаточной точностью, но в то же время и относительно простой в реализации. Например, интерес представляет алгоритм "тепловой ванны" из [4] (pseudo-heat-bath algorithm). Например, по-видимому, для получения массы псевдоскалярного глюбола требуется использование более эффективных алгоритмов, так как при попытке измерить коррелятор $C(\Delta t)$ псевдоскалярной наблюдаемой (дискретизованного варианта плотности топологического заряда) используемым в данной работе алгоритмом не было обнаружено сигнала, отличного от нуля. Скорее всего это связано с тем, что псевдоскалярный глюбол имеет большую массу, вследствие чего коррелятор затухает быстрее и для обнаружения сигнала требуется существенно большая статистика, чем для аналогичного случая для скалярной наблюдаемой.

Список литературы

- [1] Sourav Mondal, Pushan Majumdar, Nilmani Mathur, “Light Glueball masses using the Multilevel Algorithm”, [arXiv:1411.3503 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/1411.3503)
- [2] Кройц М. Кварки, глюоны и решетки : пер. с англ. / М. Кройц. - Москва: Мир, 1987.
- [3] Simon Mages, Balint C. Toth, Szabolcs Borsanyi, Zoltan Fodor, Sandor D. Katz, Kalman K. Szabo, “Lattice QCD on Non-Orientable Manifolds”, [arXiv:1512.06804 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/1512.06804)
- [4] C. Gattringer, C.B.Lang, “Quantum Chromodynamics on the Lattice”, Springer Science & Business Media, 2009
- [5] Newman M.E.J., Barkema G.T., “Monte Carlo in Statistical Physics”, Oxford University Press, 2001
- [6] M. Guagnelli, R. Sommer, H. Wittig, “Precision computation of a low-energy reference scale in quenched lattice QCD”, [arXiv:hep-lat/9806005](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9806005)
- [7] Colin J. Morningstar, Mike Peardon, “The glueball spectrum from an anisotropic lattice study”, [arXiv:hep-lat/9901004](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9901004)
- [8] Abhishek Chowdhury, A. Harindranath, Jyotirmoy Maiti, “Open Boundary Condition, Wilson Flow and the Scalar Glueball Mass”, [arXiv:1402.7138 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/1402.7138)