10　ゲージ固定

Bridge++ では、Los Alamos 法によるゲージ固定を実装している。過緩和法 (over-relaxation) による加速を行なっている。

10.1　ゲージ固定アルゴリズム

基本原理は Landau ゲージと Coulomb ゲージで同じなので、以下 Landau ゲージとして説明する。連続理論における Landau ゲージ固定条件は、

$$\partial_\mu A_\mu(x) = 0 \tag{123}$$

と表される。格子上ではこの条件は、

$$F[U] = \sum_{x,\mu} \mathrm{ReTr} U_\mu(x) \tag{124}$$

という量を、ゲージ変換

$$U_\mu(x) \to U'_\mu(x) = G(x) U_\mu(x) G^\dagger(x+\hat{\mu}) \tag{125}$$

によって、反復的に最大化することによって達成される。変換行列 $G(x)$ の選び方によって、いくつかのアルゴリズムが存在する。

(1) **Steapest descent 法**　この方法では、

$$G(x) = \exp\left(-i\alpha \sum_\mu \partial_\mu A_\mu(x)\right) \tag{126}$$

と選ぶ。ここで、

$$\partial_\mu A_\mu(x) = A_\mu(x) - A_\mu(x-\hat{\mu}), \qquad A_\mu(x) = \frac{1}{2i}\left[U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x)\right]_{\text{tranceless}}. \tag{127}$$

α はある実数パラメター (0.1 程度がよく使われる)。これより、

$$G(x) = \exp\left(\frac{1}{2}\alpha\Delta(x)\right), \qquad \Delta(x) = \sum_\mu \left[U_\mu(x-\hat{\mu}) - U_\mu(x)\right]_{AT} \tag{128}$$

とも表される。$[\ldots]_{AT}$ は反 Hermite, トレースレス化を表す。これを一次まで展開すると、$G(x) \simeq 1 + \frac{\alpha}{2}\Delta(x)$ であるので、実際の計算では $\delta(x)$ からこの量を計算し、SU(3) に射影する。この reunitalization は HMC の場合と同様に行えばよい。

得られた $G(x)$ によってゲージ変換を行い、サイトについてスイープする。これを何度も繰り返し $\partial_\mu A_\mu$ が十分ゼロに収束すればゲージ固定が完了する。even サイトと odd サイトの $G(x)$ を交互に求めてゲージ変換を行うのが効率的である。

FFT による加速法もあるが、省略する。

(2) **Mino 法**　Steapest descent 法では固定していた α の値を、計算した $\Delta(x)$ について F の値が最大になるように決める。

$$\frac{\partial}{\partial\alpha(x)}F[G]=\frac{\partial}{\partial\alpha(x)}\sum_{x,\mu}\mathrm{ReTr}\left[e^{\alpha(x)\Delta(x)}U_\mu(x)e^{-\alpha(x+\hat{\mu})\Delta(x+\hat{\mu})}\right]=0 \tag{129}$$

より ($\alpha/2$ と α と置き直した)、

$$\mathrm{Re}\sum_\mu \mathrm{Tr}\left[e^{\alpha(x)\Delta(x)}\Delta(x)U_\mu(x)-U_\mu(x-\hat{\mu})\Delta(x)e^{-\alpha(x)\Delta(x)}\right]=0. \tag{130}$$

Δ の一次までで $\alpha(x)$ を求めると、

$$\alpha(x)=\frac{\mathrm{Re}\sum_\mu \mathrm{Tr}[\Delta(x)(U_\mu(x-\hat{\mu})-U_\mu(x))]}{\mathrm{Re}\sum_\mu \mathrm{Tr}[\Delta(x)(U_\mu(x-\hat{\mu})+U_\mu(x))]} \tag{131}$$

と決まる。再ユニタリー化については Steapest descent 法と同じ。

過緩和法 (Overrelaxation).　Mino 法で求めた $\alpha(x)$ について、過緩和法を適用するには、$1<\omega2$ のある実数 ω を導入して、

$$G(x)=e^{\omega\alpha(x)\Delta(x)}\simeq 1+\omega\alpha(x)\Delta(x) \tag{132}$$

とし、その後再ユニタリー化を行えば良い。

(3) **Los Alamos 法**　まず、

$$w(x)=\sum_\mu[U_\mu(x)+U_\mu^\dagger(x-\hat{\mu})] \tag{133}$$

を導入する。これによって、

$$F[G]=\sum_{x,\mu}\mathrm{ReTr}U_\mu(x)=\frac{1}{2}\mathrm{ReTr}[U_\mu(x)+U_\mu^\dagger(x)]=\frac{1}{2}\mathrm{ReTr}w(x) \tag{134}$$

を最大にすることによってゲージ固定条件が満たされる。サイトを even-odd に分割する。even サイトにゲージ変換を施す際には odd サイトでの変換行列は 1 と取ることにすると、

$$U_\mu(x)\to G(x)U_\mu(x)\cdot 1,\qquad U_\mu^\dagger(x-\hat{\mu})\to 1\cdot U_\mu^\dagger(x-\hat{\mu})G(x) \tag{135}$$

であるから、

$$w(x)\to G(x)w(x). \tag{136}$$

ここで $G(x)$ を $\mathrm{ReTr}G(x)w(x)\geq\mathrm{ReTr}w(x)$ となるように取れば、ゲージ固定を実現できる。

　$G(x)$ として、SU(2) 部分群の変換、

$$G_3(x)=\left(\begin{array}{c|c} g(x) & 0 \\ \hline 0 & 1\end{array}\right),\qquad g(x)\in\mathrm{SU}(2). \tag{137}$$

を考える。

$$g(x) = \begin{pmatrix} a+id & ib+c \\ ib-c & a-id \end{pmatrix}, \qquad a^2+b^2+c^2+d^2 = 1 \tag{138}$$

とおけば、

$$\begin{aligned} \mathrm{ReTr}[G_3(x)w(x)] &= a\,\mathrm{Re}(w_{11}+w_{22}) + d\,\mathrm{Im}(-w_{11}+w_{22}) \\ &\quad + b\,\mathrm{Im}(-w_{21}-w_{12}) + c\,\mathrm{Re}(w_{21}-w_{12}). \end{aligned} \tag{139}$$

拘束条件 $a^2+b^2+c^2+d^2-1=0$ を考慮して

$$K[G] = \mathrm{ReTr}[G_3(x)w(x) - w(x)] - \lambda(a^2+b^2+c^2+d^2-1) \tag{140}$$

についての極値条件を解くと、

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2\lambda}\mathrm{Re}(w_{11}+w_{22}), \qquad b = \frac{1}{2\lambda}\mathrm{Im}(-w_{21}-w_{12}), \\ c &= \frac{1}{2\lambda}\mathrm{Re}(w_{21}-w_{12}), \qquad d = \frac{1}{2\lambda}\mathrm{Im}(-w_{11}+w_{22}), \end{aligned} \tag{141}$$

$$a^2+b^2+c^2+d^2 = \frac{1}{4\lambda^2}\left\{[\mathrm{Re}(w_{11}+w_{22})]^2 + \cdots\right\} \equiv \frac{\alpha^2}{\lambda^2} = 1 \tag{142}$$

このとき $\lambda = \pm\alpha$ であるが、

$$\frac{\partial^2}{\partial a^2} = -2\lambda, \qquad \text{etc.} \tag{143}$$

より、$\lambda = \alpha > 0$ であれば極大の条件となる。α の値は、$g(x) \in$SU(2), 即ち $\det g(x) = 1$ の条件から決まる。これらから、

$$g(x) = \frac{1}{N_3}\begin{pmatrix} w_{11}^* + w_{22} & -w_{11} + w_{21}^* \\ w_{12}^* - w_{21} & w_{11} + w_{22}^* \end{pmatrix}, \quad N_3 = \sqrt{|w_{11}^* + w_{22}|^2 + |w_{12}^* - w_{21}|^2} \tag{144}$$

同様に SU(2) 部分群の選び方によって $G_1(x)$, $G_2(x)$ を定義し、反復的に変換を行うことによって $K[G]$ を最大化することができる。

実際の計算の際には、あるサイト x で、
(1) $w(x)$ を計算
(2) G_1, G_2, G_3 のいずれかを計算
(3) $w(x) \to w'(x) = G_i w(x)$
(4) $G_L(x) = G_i \cdot G_(x)$ (ゲージ変換行列: 最初は $G_L = 1$ としておく)
(5) $w'(x)$ を $w(x)$ と置き直して、(2) に戻る
これを何度か繰り返した後、$G_L(x)$ によってゲージ変換を行う。
以上の手順を、even と odd を交替しながら行う。

Overrelaxation. Los Alamos 法では、$\mathrm{ReTr}G(x)w(x)$ が与えられた $w(x)$ で最大になるように G を決めるので、G が 1 とあまり違わないという命題が成り立つかどうかはわからないが、反復を適当な回数繰り返した後では $G(x) \simeq 1$ であると考えられる。これを考慮して、数十から数百反復繰り返した後で、過緩和法を採用する方法を考える。

$$G(x) = 1 + G^{(1)} \tag{145}$$

とし、過緩和パラメターを ω として

$$G_\omega(x) = 1 + \omega G^{(1)} = \omega G(x) + (1-\omega)\cdot 1 \tag{146}$$

とする。これは一般には SU(3) に入らないので、再ユニタリー化を行う。

実例を見せること。

10.2 Gribov コピーの回避

Gribov コピー問題が起こることがある。この場合、局所的最小値を脱出するためにランダムゲージ変換を行う。