

10. ELŐADÁS

DINAMIKUS

KVARKOK

SZIMULÁCIÓJA

ÁTSÚLYOZÁS

$$Z = \int DU \det M[U] e^{-S_G[U]} \stackrel{NF=2}{=} \int DU \det D_u \det D_d e^{-S_G[U]}$$

1

$$\langle O[U, \bar{\psi}, \psi] \rangle_{G,F} = \frac{1}{Z} \int DU D\bar{\psi} D\psi O[U, \bar{\psi}, \psi] e^{-S_G[U] - S_F[\bar{\psi}, \psi, U]} = \frac{1}{Z} \int DU \tilde{O}[U] \det M[U] e^{-S_G[U]}$$

$$\text{p.p. } \langle O_\pi(x) \bar{O}_\pi(y) \rangle = \frac{1}{Z} \int DU D\bar{\psi} D\psi \bar{u} \gamma_5 d(x) \bar{d} \gamma_5 u(y) e^{-S_G - S_F} = \frac{1}{Z} \int DU e^{-S_G} \underbrace{\det M}_{(-\text{tr}[\gamma_5 D_u^{-1}(x,y) \gamma_5 D_u^{-1}(y,x)])}$$

$$\det M = \det D_u \det D_d$$

$$\langle O[U, \bar{\psi}, \psi] \rangle_{G,F} = \langle \tilde{O}[U] \rangle_{\det M[U] e^{-S_G[U]}}$$

$$\langle \tilde{O}[U] \rangle_{\det M e^{-S_G}} = \frac{\langle \tilde{O}[U] \det M \rangle_{e^{-S_G}}}{\langle \det M \rangle_{e^{-S_G}}}$$

QCD
várható
érték

= 2 Yang-Mills
várható
érték
hányadosa

általában $Z_1 = \int DU w_1[U]$

$Z_2 = \int DU w_2[U]$

$\Rightarrow \langle O[U] \rangle_{w_1} = \frac{\langle \frac{w_1}{w_2} O[U] \rangle_2}{\langle \frac{w_1}{w_2} \rangle_2}$

ÁTSÚLYOZÁS

EGYÁLTALÁN NEM MŰKÖDIK: OVERLAP PROBLÉMA:

dinamikus kvarkokkal és nélkülük. nagyon nehéz a fontos konfigurációk, csak az statisztikával működne

FERMION DETERMINÁNS MINT BOLTZMANN-SÚLY ($M=0$)

2

$$w[u] = \frac{1}{Z} e^{-S_G[u]} \det M[u]$$

γ_5 hermiticitás $\Rightarrow [\det M]^* = \det M^\dagger = \det \gamma_5 M \gamma_5 = \det \gamma_5 \gamma_5 M = \det M$
 $\Rightarrow (\det M) \in \mathbb{R}$ valós

pozitív-e? * $M_u = m_d \Rightarrow D_u = D_d \Rightarrow \det D_u \det D_d = (\det D_u)^2 \geq 0$
 (overlap) * GW reláció vagy $U(1)$ ^(staggered) kontinuum hirtelen szimmetria

$\Rightarrow$ sajáértékek komplex konjugált párokban $\Rightarrow \det D_u \geq 0$ csak $m=0$ -ra lehet egyenlő

Wilson?

egy konfigurációkon lehet negatív a determináns,
 ha 1 flavort akarunk (pl. $2+1$) akkor $\uparrow$ strange

$\det M_S$ helyett $|\det M_S|$ -t lehet szimulálni (± 1)

$$\Rightarrow \langle O \rangle_{(\det M_u)^2 (\det M_S) e^{-S_G}} = \frac{\langle O \frac{\det M_S}{|\det M_S|} \rangle_{(\det M_u)^2 |\det M_S| e^{-S_G}}}{\langle \frac{\det M_S}{|\det M_S|} \rangle_{(\det M_u)^2 |\det M_S| e^{-S_G}}}$$

Itt overlap probléma nincs.

Ezt az átlagyozást el szokás hanyagolni, mert ha $\frac{\det M_S}{|\det M_S|}$ -ben ott van $\frac{1}{|\det M_S|}$ kell.

érdekes olvasmány:
 ZW03.1335g

kontinuumban

$$\bar{\Psi} D_u \Psi = \bar{\Psi} D_u^{m=0} \Psi + \underbrace{\mu \Psi^\dagger \Psi}_{\text{megmaradó töltéssűrűség}} = D_u^{m=0} + \bar{\Psi} (\mu \gamma_0) \Psi$$

NEM γ_5 -HERMITKUS A DIRAC-OP.

$\Rightarrow$ DETERMINÁNS NEM VALÓS
KOMPLEX HATÁS PROBLÉMA

VALÓS SPEC. ESETEK

izospin kémiai potenciál

$$\epsilon \in \mathbb{R} \rightarrow \mu_u = -\mu_d \\ m_u = m_d$$

$$\Rightarrow \det D_u(\mu) \det D_u(-\mu) = \det D_u(\mu) [\det D_u(\mu)]^* = |\det D_u(\mu)|^2 \geq 0$$

$\leadsto$ izospin kémiai potenciál, pár kondenzáció vizsgálható

tiszta imaginárius kémiai potenciál

$$\mu = i\mu_I \quad \det D_u(i\mu_I) = \det D_u(i\mu_I)^* \in \mathbb{R}$$

$$-\mu^* = i\mu_I \quad \text{ha van hár. szimm. / GW} \Rightarrow \text{pozitív } \square$$

$\leadsto$ egy módszer végső μ -re: szimuláljunk $\mu^2 \leq 0$ -ban ($\text{im} \mu$) $\Rightarrow$ extrapol. $\mu^2 > 0$ -ra

$$\gamma_5 \mu \gamma_0 \gamma_5 = -\mu \gamma_0$$

$$(\mu \gamma_0)^\dagger = \mu^* \gamma_0$$

$$(-\mu^* \gamma_0)^\dagger = -\mu \gamma_0$$

$$\boxed{\gamma_5 D_u(\mu) \gamma_5 = D_u(-\mu^*)^\dagger}$$



kontinuumban vezethet le,
de rájön is igaz

$$\boxed{\det D_u(\mu) = [\det D_u(-\mu^*)]^*}$$

PSEUDOFERMIONOK

4

Emlékeztető: bozonikus Gauss-integrál $\phi = \phi_R + i\phi_I$

$$\int_{\mathbb{R}^{2N}} \prod_{i=1}^N d\phi_{R,i} d\phi_{I,i} \exp \left[-\sum_{i,j=1}^N \phi_i^\dagger A_{ij} \phi_j + \sum_{i=1}^N \phi_i^\dagger \chi_i + \sum_{i=1}^N \chi_i^\dagger \phi_i \right] = \frac{\pi^N e^{\sum_{i,j=1}^N \chi_i^\dagger A_{ij}^{-1} \chi_j}}{|\det A|}$$

A sajátértékeire $\text{Re } \lambda > 0$

kétféle felhasználás

① $A \equiv (DD^\dagger)^{-1} \Rightarrow \det[DD^\dagger] = \pi^{-N} \int D\phi e^{-\phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi}$

fermion determináns bozonikus polynomiális integrálként
a szimulációs algoritmusokhoz

② $A \equiv (DD^\dagger)$ mérhető mennyiségek sztochasztikus közelítése, két példa

②a) pl. $\overset{\text{propagator}}{D^{-1}_{nm}} = (D^\dagger D)^{-1}_{nk} D^\dagger_{km} = \frac{\int D\phi e^{-\phi^\dagger (D^\dagger D) \phi} \phi_n \phi_m^*}{\int D\phi e^{-\phi^\dagger (D^\dagger D) \phi}} D^\dagger_{nm}$

②b) $\frac{\det DD^\dagger_{m=m_2}}{\det DD^\dagger_{m=m_1}} = \frac{\int D\phi e^{-\phi^\dagger (D_2^{-1} D_1 D_1^\dagger (D_2^\dagger)^{-1}) \phi}}{\int D\phi e^{-\phi^\dagger \phi}}$

átváltás tömegben (0805.2369)

bozonikus Gauss-integrál
momentuma (bozonikus propagátor)

ERT NEHEZ DINAMIKUS FERMIONOKAT SZIMULÁLNI?

5

Tfh. "linkenként" változtatjuk a konfigurációt, mint tiszta mértékkel méletben

Minden lépésben újra kell számolni a fermionikus hatást az accept/reject-hoz

$$S_F = \phi^+ (\not{D} + \not{D})^{-1} \phi = (\phi, X) \quad \text{ahol} \quad \underbrace{(\not{D} + \not{D}) X = \phi}_{\text{solver}}$$

TUL DRÁGA

pl. konjugált
gradiens

$\Rightarrow$ GLOBALIS JAVASLATOK
KELLENEK

egyszerre sok linket kell változtatni, de úgy
hogy $\Delta S_g + \Delta S_f$ ne legyen túl nagy, mert akkor
semmit nem fogadunk el egy a Metropolis accept/reject

$$\pi^2 = \sum_{x \in A} \sum_{i \in \text{index } x} \pi_i(x)^+ \pi_i(x)$$

$$\langle O \rangle_{\Phi} = \frac{\int D\Phi e^{-S[\Phi]} O[\Phi]}{\int D\Phi e^{-S[\Phi]}}$$

vmilyen mezőre
(mest nem
pszendofermionok, csak
vmi mező)

$$\Rightarrow \text{Hamilton} \quad H[\Phi, \pi] = \frac{1}{2} \pi^2 + S[\Phi]$$

$$\downarrow \frac{\int D\Phi D\pi e^{-\frac{1}{2} \pi^2 - S[\Phi]} O[\Phi]}{\int D\Phi D\pi e^{-\frac{1}{2} \pi^2 - S[\Phi]}}$$

$$= \langle O \rangle_{\Phi, \pi}$$

$\Rightarrow$ Hamilton-egyenletek

MD idő
szerinti derivált
("kitalált idő")

$$\dot{\pi} = - \frac{\partial H}{\partial \Phi} = - \frac{\partial S}{\partial \Phi}$$

$$\dot{\Phi} = \frac{\partial H}{\partial \pi} = \pi$$

ha egzaktul tudnánk integrálni

$$H[\Phi(t=0), \pi(t=0)] = H[\Phi(t=t_{\text{final}}), \pi(t=t_{\text{final}})]$$

mikrokanonikus sokaságnak felel meg

ha impulzusokat véletlenül hozzáadunk Gauss-el., majd egzaktul integráljuk

a Hamilton-egyenleteket $\Rightarrow$ szimuláljuk a $\langle \dots \rangle_{\pi, \Phi}$ sokaságot

$\Rightarrow$ tudnánk várható értékeket számolni a $\langle \dots \rangle_{\Phi}$ szerint

De a numerikus hiba a Hamilton-egyenlet integrálásában elkerülhetetlen.

Lépcsőhöz: $\epsilon \rightsquigarrow$ kéne még egy $\epsilon \rightarrow 0$ extrapoláció is
mert véges ϵ -nél nem a jó (nem egzakt) az egyszerű szimulációs algoritmus

Hybrid Monte Carlo

* Tfh. az integrátor amit a molekula din. használnak
① térfogatterelő / triviális a Jacobian $D\bar{\Phi} D\bar{\pi} = \text{inv.}$

② reverzibilis $T_{\text{HD}}(\bar{\pi}', \bar{\Phi}' \leftarrow \bar{\pi}, \bar{\Phi}) = T_{\text{HD}}(\bar{\pi}, \bar{\Phi} \leftarrow \bar{\pi}', \bar{\Phi}')$
Ekkor a kör. algoritmus egzakt (megfordítjuk az impulzus irányát és visszafelé megyünk)

① generálunk impulzusokat $\propto e^{-\pi^2/2}$ elbontással

② Molekula Din. ① és ②-t kielégítő diff. egyenlet integrálással
 $(\bar{\pi}, \bar{\Phi}) \mapsto (\bar{\pi}', \bar{\Phi}')$

③ Metropolis accept/reject

$$T_A = \min(1, e^{-\Delta H})$$

$$\Delta H = H[\bar{\pi}', \bar{\Phi}'] - H[\bar{\pi}, \bar{\Phi}]$$

részletes egyenlőség

$$T[\Phi' \leftarrow \Phi] = \int D\pi D\pi' T_A(\pi'\Phi' \leftarrow \pi\Phi) T_{HD}(\pi'\Phi' \leftarrow \pi\Phi) e^{-\pi^2/2}$$

$$T_A(\pi'\Phi' \leftarrow \pi\Phi) = \min\left(1, \underbrace{\frac{e^{-\pi'^2/2 - S[\Phi']}}{e^{-\pi^2/2 - S[\Phi]}}}_{e^{-\Delta H}}\right) = e^{-\pi'^2/2 - S[\Phi'] + \pi^2/2 + S[\Phi]} \min(e^{\Delta H}, 1)$$

$$= e^{-\pi'^2/2 - S[\Phi']} e^{\pi^2/2 + S[\Phi]} T_A(\pi\Phi \leftarrow \pi'\Phi') = e^{-\pi'^2/2 - S[\Phi'] + \pi^2/2 + S[\Phi]} T_A(-\pi\Phi \leftarrow -\pi'\Phi')$$

$$T[\Phi' \leftarrow \Phi] = \int D\pi D\pi' T_A(-\pi\Phi \leftarrow -\pi'\Phi') T_{HD}(-\pi\Phi \leftarrow -\pi'\Phi') e^{-S[\Phi'] + S[\Phi] - \pi'^2/2}$$

② reverzibilitás

$$= \int D\pi D\pi' T_A(\pi\Phi \leftarrow \pi'\Phi') T_{HD}(\pi\Phi \leftarrow \pi'\Phi') e^{-\pi'^2/2} e^{-S[\Phi'] + S[\Phi]}$$

$\pi \rightarrow -\pi$
 $\pi' \rightarrow -\pi'$
 változtatás



$$\boxed{e^{-S[\Phi]} T(\Phi' \leftarrow \Phi) = e^{-S[\Phi']} T(\Phi \leftarrow \Phi')}$$

□

Megjegyzések

19

-) ergodicitás $\leftarrow$ π véletlen húzása
-) ha egzaktul integrálható a Hamilton-eg. $\Rightarrow \Delta H = 0$
 $\Rightarrow$ mindig elfogadható a konfiguráció, az accept/reject lépés a numerikus integrációs hibát korrigálja
-) egy tipikus Metropolis - algoritmushoz képest egyelőre magas (>90%)
elfogadási ráta $\square$ elfogadhatóság

LEAPFROG ALGORITHMUS

10

Egyrű, ① és ②-t kielégítő algoritmus.

$$\Phi(0) \rightarrow \Phi(\varepsilon)$$

$$\pi(0) \rightarrow \pi\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \rightarrow \pi(\varepsilon)$$

$$\Phi(0)$$

$$\downarrow$$

$$\Phi(\varepsilon) = \Phi(0) + \pi\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)\varepsilon$$

$$\downarrow$$

...

$$\pi(0)$$

$$\downarrow$$

$$\pi\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) = \pi(0) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi(0)} \frac{\varepsilon}{2}$$

$$\downarrow$$

$$\pi(\varepsilon) = \pi\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)} \frac{\varepsilon}{2}$$

$$\downarrow$$

...

①

$$\text{Jacobi: } \det \frac{\partial(\pi_1, \Phi_1)}{\partial(\pi_0, \Phi_0)} = \det \left[\frac{\partial(\pi_1, \Phi_1)}{\partial(\pi_{12}, \Phi_1)} \frac{\partial(\pi_{12}, \Phi_1)}{\partial(\pi_{12}, \Phi_0)} \frac{\partial(\pi_{12}, \Phi_0)}{\partial(\pi_0, \Phi_0)} \right]$$

$$= \det \begin{bmatrix} 1 & \dots \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \det \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \dots & 1 \end{bmatrix} \det \begin{bmatrix} 1 & \dots \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = 1$$

②

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \pi_0 \varepsilon - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_0} \varepsilon^2$$

$$\pi_1 = \pi_0 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_0} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_1} \right) \varepsilon$$

$$\Phi_0, \pi_0 \rightarrow \Phi_1, \pi_1$$

Φ_1, π_1 , step. w. $-\varepsilon$:

$$\begin{aligned} \Phi_2 - \pi_1 \varepsilon - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_1} \varepsilon^2 &= \Phi_1 - \pi_0 \varepsilon \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_0} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_1} \right) \varepsilon^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_1} \varepsilon^2 \\ &= \Phi_1 - \pi_0 \varepsilon + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_0} \varepsilon^2 = \Phi_0 \quad \checkmark \\ \pi_2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_1} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} \bigg|_{\Phi_0} \right) \varepsilon &= \pi_0 \quad \checkmark \end{aligned}$$

□

$$S[U] = S_G[U] - \phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi$$

$$U_M = \exp\left(i \sum_{i=1}^8 w_M^{(i)} T_i\right) = \exp(i Q_M)$$

$\nwarrow$ hermitikus, $\text{Tr}=0$
 $\in su(3)$
 $\nwarrow$ $\in SU(3)$

Gell-Mann

$$T_i = \frac{\lambda_i}{2}$$

$$w_M^{(i)} \rightarrow P_M^{(i)} \quad \text{konjugált impulzusok}$$

Az algoritmust a $P_M(x) = \sum_{i=1}^8 P_M^{(i)}(x) T_i \in su(3)$ $U_M(x) \in SU(3)$ és az impulzusok $P_M^{(i)}(x) \in su(3)$ segítségével írjuk fel.
 derívták a csoportokhoz egy érintőtereken, azaz az algebraiban laknak

$$\nabla^{(i)} f(u) \equiv \left. \frac{\partial f(e^{i w T_i} u)}{\partial w} \right|_{w=0}$$

derívt az $i.$ generator irányába

$$\nabla^{(i)}(AUB) = i A T_i U B$$

$$\nabla^{(i)}(A U U B) = i A T_i U U B + i A U T_i U B$$

stb. $\Rightarrow$ MD erő: $F[U] = \sum_{i=1}^8 T_i \nabla^{(i)} (S_G[U] + \phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi)$ $\in su(3)$

1. lépés HMC (leapfrog MD) algoritmus QCD-re

12

① pseudofermionok $\Phi = D\chi$ ahol $P[\chi] \propto e^{-\chi^\dagger \chi}$

② impulzusok π_0 (8 véletl. szám minden $x, M-re$) Gauss elv. szerint

③ első lépés

$$\pi_{1/2} = \pi_0 - \frac{\epsilon}{2} F[U, \phi]|_{u_0}$$

④ köztes lépések

$$u_k = \exp(i\epsilon \pi_{k-1/2}) u_{k-1}$$

$$\pi_{k+1/2} = \pi_{k-1/2} - \epsilon F[U, \phi]|_{u_k}$$

⑤ utolsó lépés

$$u_n = \exp(i\epsilon \pi_{n-1/2}) u_{n-1}$$

$$\pi_n = \pi_{n-1/2} - \frac{\epsilon}{2} F[U, \phi]|_{u_n}$$

molekula
dinamika

⑥ accept/reject $r \in [0, 1)$ egyenletes

accept if $r < \exp\left[\text{tr}[\pi^2] - \text{tr}[\pi'^2] + S_G[U] - S_G[U'] + \Phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} - (\Phi'^\dagger D'^\dagger)^{-1}\right]$

Megj.: a $(D'D'^\dagger)^{-1} \Phi$ -hez az accept/reject lépésben újra lehet hasznosítani az ⑤ lépésben használt MD erő megfelelő tagját

Megj.: exponencializálás hatékonyság. le van írva Morningstar, Pearson 2004

Smeared

megjegyzés

13

APE, HYP : volt benne egy vetítés $SU(3)$ -ra
nem igazán jó HMC-vel

stout, hex : új link analitikus fr.-e a régiók

→ lehet deriváltakat szimulálni láncszabály
segítségével eredeti link
szerint

$$\Rightarrow \int_G [U_{\text{eredeti}}] + \int_F [U_{\text{smeared}}]$$

szimulálható HMC-vel



Mi irányzék még?

Wilson

$N_f = 2 + 1$
 $\uparrow$
 OK

$D_u + D_d$ -ként
 van kezelve

$|\det D_S|$ hogyan?

staggered

alapból 4 flavour, $N_f = 2 + 1$ -hez

$(\det M_{ud})^{1/2}$
 $(\det M_S)^{1/4}$
 hogyan?

$\leadsto$ RHMC

ötlet: $\int D\phi e^{-\phi^\dagger R(DD^\dagger)\phi} \approx \# \underbrace{\sqrt{\det(DD^\dagger)}}_{|\det D|}$

ha $R(x) \approx \frac{1}{\sqrt{x}}$

$\uparrow$ racionális törtfr. közelítés

hasonlóan közelíthető az. $x^{-1/4}$ r. törtfr. -d, vagy $x^{-1/8}$ -ra

APPROXIMÁCIÓ - ELMÉLET GYORSTAL PALÓ

15

POLINOMIÁLÚ APPROXIMÁCIÓ

$$f(x): [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\|p-f\|_n = \left(\int_0^1 dx |p(x)-f(x)|^n \right)^{1/n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \|p-f\|_\infty = \max_{0 \leq x \leq 1} |p(x)-f(x)|$$

minimax norma

pontenkénti hibát garantálja

Weierstraß approx. tétele:

$\forall$ folytonos $f(x)$ tetszőlegesen pontosan közelíthető polinomokkal (valahányad fokúval, a tétel rem mondja meg)

Chebisev tétele:

P_d = fix d fokszámú polinom

$$\Delta = \min_{P_d} \|P_d - f\|_\infty = \min_{P_d} \max_{0 \leq x \leq 1} |p(x) - f(x)|$$

$\exists!$ $P_d(x)$ polinom ami minimalizálja Δ -t

az karakterizálja, hogy pontosan $d+2$ -szer veszi fel a max. értéket a $p(x)-f(x)$

minimax tulajdonság

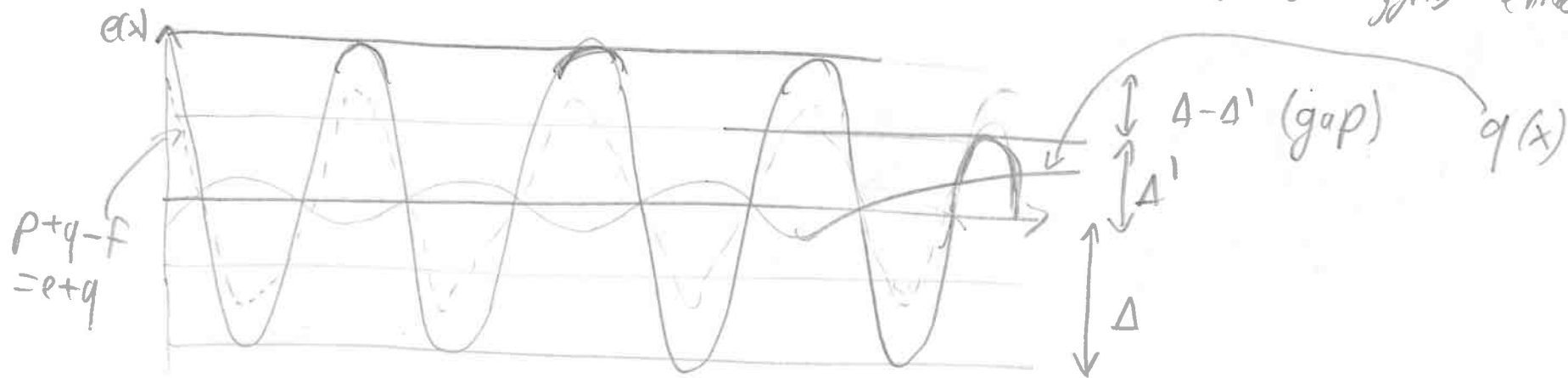
Diszkrétis végtelen

① szűkebb feltétel

$$|e(x)| = |p(x) - f(x)|$$

indirekt. Tfh. P optimális d . fokú polinom és $\forall$ helyen $d+2$ helyen

vegyi fel. max értéket $\Rightarrow \exists \Delta'$ max $d+1$ max. értéke nagyobb ennél



e folytonos $\Rightarrow \exists$ zérushely 2 max. között, legyenek ezek x_i ($i=1, \dots, d$) pontokban

$\Rightarrow$ legyen $q(x) = k \prod_{i=1}^d (x - x_i)$ d . fokú polinom

ha k -t elég kicsinnyé választjuk, és jól választjuk az előjelet
 $\Rightarrow$ ellentétes előjelű mint $e(x)$ mindenhol és $|q(x)| < \text{gap} = \Delta - \Delta'$ mindenhol
 $\Rightarrow p+q$ jobb közelítés mint p . ellentmondás $\rightarrow$

② előreírás Tfh. p teljesíti a minimax feltételt és p' jobb közelítés

$$\|p' - f\|_{\infty} \leq \|p - f\|_{\infty} \Rightarrow |p'(x_i) - f(x_i)| \leq |p(x_i) - f(x_i)| \text{ az } x_i \text{ maximumokban}$$

$\Rightarrow p' - p = (p' - f) - (p - f) = e' - e$ előjele eltér $e(x)$ -vel mindenhol
 $\Rightarrow p' - p = 0$, mivel egy d . fokú polinom $d+1$ zérushelytel. $\Rightarrow d+1$ zérushely van

optimális racionális közelítés, Remez-algoritmus

Általánosítás: $[n/d]$ fokú racionális tört fr. optimális (L_∞) normával,
 $\Leftrightarrow |e(x)| = \left| f(x) - \frac{P_n(x)}{Q_d(x)} \right|$ $n+d+2$ helyen
veszi fel maximumot az intervallumon

- * Tipikusan a $[d/d]$ vagy $[d\pm 1/d]$ adja a legjobb közelítést.
- * A konvergencia a fokszám növelésével több fr.-re exp. gyors ha racionális, mint ha polinom közelítést használunk

Remez-algoritmus: a Csobisev-tételt bizonyítást implementálja, mint iteratív algoritmust

- keressük meg a hibaf. jelenlegi lokális extrémumait $\rightarrow x_i$ kontrol pontok
- $\begin{matrix} P(x_i) & / & Q(x_i) \\ \uparrow & & \uparrow \\ n \text{ fokú} & & d \text{ fokú} \end{matrix} + (-1)^i E = f(x_i)$
 $\Rightarrow$ megoldjuk $\underbrace{E}_1$ és $\underbrace{P_i Q}_{n+d+1}$ együtthatói
 $\Rightarrow$ egy racionális fr. ami az x_i pontokban alternál E amplitúddal
- keressük meg az új hibaf. lokális maximumait és iterálunk

Egy példa: (ami kellene fog RHMC-hez) $[0.003, 1]$ intervallumon kb. 0.1%-ra pontos 18

$$\frac{1}{\sqrt{x}} \approx 0.3904603901 \frac{(x+2.3475661045)(x+0.1048344600)(x+0.0073063814)}{(x+0.4105999719)(x+0.0286165446)(x+0.0012779193)}$$

$$\approx 0.3904603901 + \frac{0.0511093775}{x+0.0012779193} + \frac{0.1408286237}{x+0.0286165446} + \frac{0.5964845033}{x+0.4105999719}$$

- * minden tag pozitív
- * minden pólus valós

numerikusan nagyon stabil

- * a racionális közelítési eh-t $\leadsto$ jó hír az RHMC-rek egyszerűen kell kiszámolni, még a futás előtt

RHMC-kon ezt ~~MTM~~ ^{MTM}-re használjuk, egy tag egy solver a pólus helyével megadott shift-el

SOK PSEUDOFERMION

19

$$\det M \propto \int D\phi e^{-\phi^\dagger M^{-1} \phi}$$

- egy konfigurációt vessünk pseudofermionokból, c) ezzel közelítjük a $\det M$ -t
- OK: Markov-lánc fixpont elérése OK
- DE: extra zajt vezetünk be $\rightarrow$ nő a max. fermionok száma
 $\rightarrow$ csökkenteni kell a lépéshőzt a MD-ban

$$\det M = \left[(\det M)^{1/n} \right]^n = \int \prod_{j=1}^n D\phi_j e^{-\phi_j^\dagger M^{-1/n} \phi_j} \leftarrow \text{JOBB}$$

Eredeti ötlet: Hlasenbusch (2003)

$$\det M_m = \det M_{m'} \det (M_{m'}^{-1} M_m)$$

$\uparrow$ nehezebb segédtegy

RHMC konkrét példa: staggered N_f flavour $\Rightarrow (\det M)^{N_f/4} = (\det(M+M))^{N_f/8}$

(20)

① pseudofermionok $\Phi = [(M+M)^{N_f/8}]^{1/2n}$ $P(\chi) \propto e^{-\chi^\dagger \chi}$

$$\Rightarrow P(\Phi) \propto \int D\chi e^{-\chi^\dagger \chi} \delta(\Phi - (M+M)^{\frac{N_f}{8} \frac{1}{2n}} \chi) \propto \exp\left[-\chi^\dagger (M+M)^{-\frac{N_f}{8} \frac{1}{n}} \chi\right]$$

② impulzusok $P[\pi] \propto \exp[-\text{Tr} \pi^2]$

③ molekula dinamika az alábbi erővel

$$F[U] = \sum_{i=1}^8 T_i \nabla_i \left[S_G[U] + \sum_{k=1}^n \phi_k^\dagger (M+M)^{-\frac{N_f}{8} \frac{1}{n}} \phi_k \right]$$

④ accept/reject $r \in [0,1)$
 accept if $r < \exp \left(\text{tr} \pi^2 - \text{tr} \pi'^2 + S_G[U] - S_G[U'] + \sum_{k=1}^n \phi_k^\dagger (M+M)^{-\frac{N_f}{8} \frac{1}{n}} \phi_k - \sum_{k=1}^n \phi_k^\dagger (M'+M')^{-\frac{N_f}{8} \frac{1}{n}} \phi_k \right)$

ahol $M \equiv M[U]$ és $M' \equiv M[U']$

Megjegyzés: a molekula dinamikához lehet kevésbé precíz rac. közelítést használni, de a pseudofermionokhoz és az accept/reject lépéshez nagyon pontos kell